様式 C-19

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成２５年６月５日現在

機関番号：１４３０１
研究種目：若手研究(B)
研究期間：2009～2012
課題番号：21740072
研究課題名（和文）　応用科学における逆問題の数学解析と情報理論の適用

研究課題名（英文）　Mathematical Analysis of Inverse Problems for Applied Science and Application of Information Theory

研究代表者
久保　雅義（KUBO MASAYOSHI）
京都大学・大学院情報学研究科・講師
研究者番号：10273616

研究成果の概要（和文）：工学や医学など多くの分野と関連して現れる確率微分方程式で記述される入出力システムにおいて，解に相当する観測データから入力信号を推定するという逆問題を取り上げ，その数理モデルを構築し解析を行った．

研究成果の概要（英文）：Inverse problems for stochastic differential equations, especially Hodgkin-Huxley equations, are examined. We propose a method to estimate properties of neuronal network activity from intracellular recordings provides estimates of ion channel conductance.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合　計
2009 年度	900,000	270,000	1,170,000
2010 年度	800,000	240,000	1,040,000
2011 年度	800,000	240,000	1,040,000
2012 年度	800,000	240,000	1,040,000
総　計	3,300,000	990,000	4,290,000

研究分野：数学解析

科研費の分科・細目：数学・数学一般（含確率論・統計数学）

キーワード：逆問題・情報理論・数学解析・確率微分方程式・推定理論・Hodgkin-Huxley 方程式

１．研究開始当初の背景

自然科学の現象を記述する偏微分方程式は数学のみならず，科学及び工学全般に幅広く応用されており，その数学的研究の根幹である偏微分方程式の解の存在や一意性，与えられたデータに対する連続性等の順問題に対する解析はすでに詳しく考察されている．順問題の数値解の構成についても数値解析及び数値計算等による体系的な研究が数多くなされている．

これに対して工学や医学など多くの分野

と関連して現れる逆問題の解の構成に対する数学的研究は体系的には進んでおらず，様々な問題点が指摘されている．工学や医学などで扱われている逆問題では，実験で得られる観測データについて，測定機器の能力や実験環境による物理的に避けられないノイズの影響の問題が頻繁に取り上げられている．微分方程式の逆問題が数多くのケースで非適切（観測データから目的とする解への写像が通常の位相で不連続）となるために，安定した数値計算を行なうことに対してデータへのノイズの混入が致命的な影響を与える．仮に逆問題の設定を適切なものに変更できたとしても，観測データに混入するノイズの影響を取り除くことは数学的に未解決である．

経験的には，実験での観測回数を増やし逆問題の数値解の平均等を計算することでノイズの影響を除去する方法がある．しかしながら順問題が線型なものであっても，その逆問題は多くの場合に非線型になるため単純に平均をとるような処理では逆問題の解の近似計算とはならない．このような逆問題の解の平均化手法による近似計算の仕方は、問題の特性上ケースバイケースで対処がなされており，決定的な方法論を欠いている面が指摘されている．つまりその殆どで現時点では数学的裏付けをもたないアドホックな手法に留まっている．観測データ等にノイズが混入することを逆問題の数理モデル化の際に直接的に取り込み，その様なモデルでのノイズの影響の数学解析と適切な数値解法の開発を行なうことは，単に数学的重要性があるだけでなく，非破壊検査や断層撮影法等に現れる逆問題を適切に離散化し精度よく数値計算を行うために意義のあることである．

２．研究の目的

工学や医学の応用科学の分野において，非破壊検査や断層撮影法などの数理モデル化によって現れる逆問題では，現在においても様々なアプローチ（理論，実験，コンピューティングによる数値実験）で解析がなされている．本若手研究においては，それらの数理モデルとして偏微分方程式だけでなく，より応用科学の現状（測定誤差やノイズ）に合わせた，確率微分方程式を取り上げ，その数学解析と実験のノイズによる影響を統計的に捉えるために情報理論の適用を行い，数値精度を数学的に保証することで応用科学の分野での汎用性，安全性を高めていくことを目的としている．

本研究課題では，ノイズの影響をブラウン運動によって数学的に表現できる確率微分方程式を導入し，ノイズ影響下での逆問題解析の確立を図ることとした．これまでの微分方程式の逆問題の研究では入出力システムにノイズが入らないという理想的な状況下で問題設定を行い，その下での逆問題の解の一意性等の理論的研究がなされてきた．一方，本研究課題では入力信号や方程式の係数を同定する問題に対して更にシステムにノイズが加わる場合を考察するため確率微分方程式を対象としている．国内外に於いては，入出力システムにノイズが入らないという理想的な状況下での逆問題研究は数学者・工学者により活発になされている．特に数学面での研究については地球物理などと関連して Romanov, Bukhgeim らにより研究がなされている．この一方で観測データへのノイズの混入は，現象の数理モデル化に反映させずに観測機器や実験精度の工学的問題として片付けられていた．しかし，工学・医学の分野におけるトモグラフィーや非破壊検査などの具体的な技術と関連して，ノイズの影響の数学解析は幅広い分野でその重要性を増しており，日本においても物理・工学・医学などの分野では精力的にその数値実験が行なわれている．

数学的研究の面では，逆問題において頻繁に現れるノイズの影響は，積極的に物理的意義をもつ問題として認識されないまま現在に至っている．最近の研究では，確率微分方程式で記述される入出力システムにおいて，解に相当する出力データの観測から入力信号を推定するという逆問題の定式化を行い，予備的な数値計算による解析をしている．この考えに基づく試みは他に例を見ない．従来の微分方程式の逆問題の研究では，解の一意性やデータに対する解の条件付き安定性等の理論が中心となっていた．一方，具体的な解法の研究はその重要性にも関わらず逆問題特有の複雑さ故に体系的に扱われていない．本研究課題の目的では，確率微分方程式の逆問題の解の具体的構成法に対する有効なアプローチを一般的な枠組みから具体的な数値計算まで込めて与えることにあり，これによって確率微分方程式の逆問題の今後の研究として一つの有望な方向性を確立することである．このような逆問題研究の中で具体的な背景をもつものとして，脳内における神経細胞の活動を調べることが挙げられる．大脳皮質の神経細胞の膜電位は，生体内では非常にランダムな活動を行うことが知られている．このランダムな変化は確率微分方程式の数理モデルを用いて表現されている．本研究課題ではこのモデルの出力測定から入力信号を同定する逆問題を動機として，確率微分方程式で記述される入出力システムにおいて解に相当する出力データの観測から入力信号を推定するという逆問題を取り上げ，この逆問題の解析手法の確立を図るものである．従来このような逆問題に対して

は入力を有限個のパラメータで記述することで特定の入力モデルを仮定しているが，実際には適当な入力モデルを事前に仮定できないことも少なくない．これに対して本研究では，入力をある関数空間に属する無限次元パラメータとして取り扱い，入力に対する特定のモデルに依存しない議論を行うことにより，より一般的な枠組みを構築するものである．

３．研究の方法

(1) 本研究計画では，応用科学（特に医学・工学）に現れる逆問題を確率微分方程式でモデ化しその数学解析と数値計算を両面から行なう．特に数値計算においては数値計算サーバーを並列化していくことで効率よく大規模な計算を行った．

応用科学（特に医学・工学）に現れる逆問題では実験環境下のために入力データ等にノイズが混入することは不可避である．しかしながら，これまでの微分方程式の逆問題では入出力システムにノイズが入らないという理想的な状況下で問題設定を行い，その理論的研究がなされてきた．これに対して本研究課題では確率微分方程式を対象とすることで，ノイズ影響下での逆問題に対する数学解析の枠組みを構築することが可能となっている．

このような逆問題研究の中で具体的な背景をもつものとして，脳内における一つの神経細胞の活動を詳細に調べることが上げられる．大脳皮質の神経細胞の膜電位は，生体内では非常にランダムな活動を行うことが知られている．このランダムな変化は確率微分方程式の数理モデルを用いて表現されている．本研究課題ではこのような確率微分方程式で記述される入出力システムにおいて解に相当する出力データの観測から入力信号を推定するという逆問題を取り上げ，この逆問題の解析手法の確立を図るものである．

このような逆問題に対しては入力を有限個のパラメータで記述することで特定の入力モデルを仮定しているが，実際には適当な入力モデルを事前に仮定できないことも少なくない．これに対して本研究では，入力をある関数空間に属する無限次元パラメータとして取り扱い，入力に対する特定のモデルに依存しない議論を行うことにより，より一般的な枠組みを構築する計画である．具体的に得られる成果として，確率微分方程式の逆問題に対して観測回数を増やすことでこの逆問題の解の推定精度がどの程度向上するかが明らかとなる．

(2) 具体的な内容としては，以下のように研究課題を遂行すると同時に確率微分方程式の逆問題に対する大規模な数値実験を並列して行なう．

① 確率微分方程式の逆問題を，無限次元パラメータ推定の問題として定式化する．最近の研究成果により，未知入力をパラメータとすると，適切な仮定の下で確率微分方程式の解はパス空間上に確率分布族を定めることは示されている．

② 無限次元版のパラメトリック推定理論の展開に向けて,Cramer-Rao の不等式と Fisher 情報量の無限次元拡張を示す．

③ 無限次元統計モデルである確率微分方程式の無限次元パラメータ推定問題に適用することを踏まえて具体的な最尤推定量の構成を行なう．

(3)確率微分方程式の逆問題の数値解法を確立する．医学・工学への応用を念頭においた実際の確率微分方程式の逆問題の数値解法のために最尤推定量を数値的に計算するための近似アルゴリズムを構築する．具体的な計画内容としては，以下のような研究課題を遂行する．

① 確率微分方程式の定める統計モデルを構成し，この無限次元統計モデルに対して最尤推定量の存在と一意性，および一致性を示す．さらに，最尤推定量を数値的に計算するための近似アルゴリズムを構築し，近似解が厳密解(最尤推定値）に収束することを確認する．

② 確率微分方程式の無限次元パラメータ推定問題に対する近似アルゴリズムが有限次元指数型分布族に対する最尤推定量と一致していることを示す．有限次元のパラメトリック推定には情報幾何などの体系的研究手法がありそれを無限次元版に拡張するための枠組みを構築する．

４．研究成果

(1) 数学解析と情報理論を用いて偏微分方程式及び確率微分方程式の逆問題の研究を行ってきた．具体的には工学・医学等に現れる偏微分方程式および確率微分方程式を対象として取り扱った．工学・医学などに現れる具体的な逆問題では実験環境下のために入力データや計測データ等にノイズが混入することは不可避である．しかしながら，これまで我々が取り扱ってきた微分方程式の逆問題では入出力システムにノイズが入らないという理想的な状況下で問題設定を行い，その理論的研究を行ってきた．このような問題設定のものでは，初期値に対する安定性評価や逆問題の解の正則性と一意性等について一定の成果が得られている．これに対して今回は研究課題として確率微分方程式を対象とすることで，ノイズ影響下での逆問題に対する数学解析の枠組みを構築することを取り上げた．このような逆問題研究の中で具体的な背景をもつものとして，脳内にお

ける単一の神経細胞の活動を詳細に調べることが挙げられる．大脳皮質の神経細胞の膜電位は，生体内では非常にランダムな活動を行うことが知られている．このランダムな変化は確率微分方程式の数理モデルを用いて表現されている．これ対して，上述の数理モデルである確率微分方程式で記述される入出力システムにおいて解に相当する出力データ(膜電位の変化)の観測から入力信号(シナプスからの外部入力）を推定する問題に数値計算を用いて取り組み，一定の成果を得た．この様な確率微分方程式に対して，数値計算手法を提案し実際にその係数の値を計算機で求められることを確認した．さらにそのとき数値的に求めた係数のデータを用いて，実際に神経細胞が受けていた「シナプスからの外部入力」を高精度に計算する手法を提案し成果を得た．

(2)本研究においては，それらの数理モデルとして確率微分方程式を取り上げ，その数学解析と実験のノイズによる影響を統計的に捉えるために情報理論の適用を行い，数値精度を数学的に保証することで応用科学の分野での汎用性，安全性を高めていくことを目的としている．具体的な逆問題では実験環境下のために入力データや計測データ等にノイズが混入することは不可避である．これに対して今回は確率微分方程式を対象とすることで，ノイズ影響下での逆問題に対する数学解析の枠組みを構築することを取り上げた． Fisher 情報量が確率微分方程式の逆問題の解の推定能力（観測回数が推定精度を向上させること）に本質的に関係することが示されている．このような逆問題研究の中で具体的な背景をとして，大脳内における単一の神経細胞の活動が挙げられる．この神経細胞の膜電位は，生体内では非常にランダムな活動を行うことが知られており，確率微分方程式の数理モデルを用いて表現されている．この数理モデルで記述される入出力システムにおいて解に相当する出力データ（膜電位の変化）の観測から入力信号（シナプスからの外部入力）を推定する問題に数値計算を利用して成果を得た．数学的には確率微分方程式の係数やソース項を求める逆問題に対して，数値計算手法を提案し実際にその値を計算機で求めた．

(3) 本研究課題では主に微分方程式の逆問題等の数学解析と数値解析を取り上げている．自然科学の現象を記述する微分方程式は数学のみならず，科学及び工学全般に幅広く応用されており，数学的な微分方程式の解の存在や一意性，与えられたデータに対する連続性等の順問題に対する解析はすでに詳しく考察されている．これに対して逆問題の解の構成に対する数学的研究では様々な問題点が指摘されている．工学・医学での応用のために解の形状を具体的に目に見える形で得るには数値解析的手法に頼らざるを得ない．更に数値的手法を用いても逆問題の性質上，非適切な場合が多く，安定した高精度の数値計算を行うためには問題がある．この様な背景から数理モデルとしての微分方程式の解の一部の情報からその方程式の係数を決定するという逆問題を解析することは，単に数学的重要性があるだけでなく応用面においても意義がある．本研究では実施計画どおりに応用科学（特に医学・工学）に現れる問題を確率微分方程式でモデル化し，数学解析，情報理論および数値計算を用いて確率的挙動が与える影響について解析を行った．この研究の具体的な背景として，脳内における神経細胞の活動を詳細に調べることが上げられるが，今回は神経細胞の集団としての発火活動から神経細胞の結合を推定するという逆問題についても高精度で決定可能であることを解析した．個々の神経細胞のモデル化は Hodgkin-Huxley 方程式を用いており，神経細胞間の結合によって極めて複雑な活動を発生させた状況下であっても，個々の神経細胞の発火活動のみから，結合の構造を推定する逆問題を精度良く求める解析手法を確立することが可能となった．

５．主な発表論文等
（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計１件）

① 芦田剛，<u>久保雅義</u>，Suprathreshold stochastic resonance induced by ion channel fluctuation, Physica D, 査読有，239 巻，2010，327―334

〔その他〕
ホームページ等

http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~kubo

６．研究組織
(1)研究代表者

久保　雅義（KUBO MASAYOSHI）
京都大学・大学院情報学研究科・講師
研究者番号：10273616