

境界整合の手法に基づく回折トモグラフィの再構成法に関する研究

石田, 健一
九州大学システム情報情報工学

<https://doi.org/10.11501/3123029>

出版情報 : Kyushu University, 1996, 博士 (工学), 課程博士
バージョン : published
権利関係 :



境界整合の手法に基づく回折トモグラフィの
再構成法に関する研究

石 田 徳 一

①

境界整合の手法に基づく回折トモグラフィの
再構成法に関する研究

1996年12月

石田 健一

目次

1 序論	1
1.1 研究の背景	1
1.2 回折トモグラフィの再構成法の研究状況	2
1.3 本論文の構成	10
2 軸対称多層円柱の再構成アルゴリズム	12
2.1 軸対称多層円柱による散乱	12
2.2 平均二乗誤差	18
2.3 散乱波の観測	18
2.4 屈折率分布再構成アルゴリズム	21
2.5 まとめ	23
3 軸対称多層円柱の再構成例	25
3.1 均質円柱(単層円柱)モデル	25
3.2 多層円柱の再構成	34
3.3 4層円柱に対する適用範囲	36
3.3.1 内側の屈折率が高い円柱の再構成—損失のないとき—	36
3.3.2 内側の屈折率が高い円柱の再構成—損失のあるとき—	46
3.3.3 外側の屈折率が高い円柱の再構成—損失のないとき—	54
3.3.4 外側の屈折率が高い円柱の再構成—損失のあるとき—	58
3.4 分割数の固定	62
3.5 3層円柱	64
3.6 生体への応用	66

3.7	まとめ	70
4	非軸対称 2 層円柱の再構成	72
4.1	順問題	72
4.2	再構成アルゴリズム	76
4.3	数値結果	78
4.4	まとめ	82
5	結論	83
	謝辞	88
A	散乱問題を記述する積分方程式	89
B	ボルン近似による再構成例	92
C	8 層円柱に対する適用範囲	94
	参考文献	97

第 1 章 序論

1.1 研究の背景

コンピュータトモグラフィ(Computer(iz)ed Tomography, CT)とは、物体を透過した駆動源の観測に基づき、計算機上で、物体内部の物理定数分布の鮮明な像を再構成するものをいう。

その数学的基礎は、1917年 J. Radon が物体の内部構造を、その物体の投影像を多くの方向から求め、その投影を基に内部構造を再構成するという問題を解いたことにある。その後、Cormack らにより、この問題は、医学に応用する観点から、理論的かつ実験的に研究された。そして、1972年 Hounsfields によって EMI スキャナと呼ばれる X 線 CT 装置が開発され、大躍進を遂げた。現在では、X 線 CT 装置は広く普及し、医療診断等において使われている。また、核医学の分野においても、患者に放射性同位元素を注入し、その密度を推定する Emission CT(ECT) も開発されている。また、磁気共鳴法 (Magnetic resonance imaging, MRI) を用いれば、体内の水素原子密度を再構成できる。

X 線は直進性が非常に強いため、投影から内部構造を再構成する手法が問題なく適用でき、X 線 CT 装置は X 線減衰係数の非常に鮮明な像を与える。この成功に伴って、マイクロ波、光、超音波などを用いた CT が考えられてきた [1, 2]。異なる駆動源を用いることで、異なる物理定数の情報を得ることができる。すなわち、誘電率・導電率、屈折率、音響インピーダンスなどの分布を再構成できると考えられる。

マイクロ波や超音波等の波動性の強い駆動源を用いる場合、波動の持つ反射、散乱、回折、屈折などの性質を考慮しなければならない。X 線 CT の再構成法をそのまま適用して、超音波 CT の実験を行った例も報告されているが、波動の影響を受け、再構成像は劣化している [3]。

そのため、波動性を考慮した再構成法の研究が必要となっている。この CT は、回折ト

モグラフィ(Diffraction Tomography, DT) と呼ばれている。回折トモグラフィの再構成法の問題は、非線形逆散乱問題の一つである。

回折トモグラフィは、次の点で、実用化が期待されている。超音波を用いた CT は、例えば、次のような特徴がある。

1. X 線より安全であり、胎児の診断などに向く。
2. X 線に対して不透明なものでも、透過する場合がある。例えば、金属などの非破壊検査に応用できる。
3. X 線では写りにくい軟らかい組織に囲まれた器官の診断に敵する。
4. X 線では散乱が大きいもの、例えば濁った水中内の船体を検査など、に適する。

また、マイクロ波を用いた CT は、次のような特徴がある。

1. 高出力の場合を除き、安全である。
2. 通信分野においてさまざまなデバイスが開発されており、簡便な装置が達成できる。
3. 伝搬性がよく、地下探査や気象観測などに応用できる。
4. 偏波を利用できる。

筆者は、実用化のための第一歩として、一つの回折トモグラフィの再構成法を提案し、計算機シミュレーションを通じて、その特徴を明らかにしてきた [4-13]。本論文は、それらの研究結果をまとめたものである。

1.2 回折トモグラフィの再構成法の研究状況

本節では、これまでに提案されている回折トモグラフィの再構成法を紹介する。その目的は、観測した散乱波から物体の物理定数分布を表す物体関数を再構成することである。回折トモグラフィの再構成法は、一般に非線形な積分方程式で定式化される(付録 A)。

ボルン近似またはリトフ近似を用いる手法

回折トモグラフィの再構成法の研究の初期段階では，ボルン (Born) 近似若しくはリトフ (Rytov) 近似などの線形化近似を用いた解析が行われた [14].

ボルン近似は，散乱が非常に弱いとする近似である．この近似により非線形な積分方程式が線形化される．更に，入射波を平面波とし，散乱波は物体の大きさに比べて遠方で観測されることを考慮すると，散乱波の遠方散乱パターンは，物体関数のフーリエ変換で結び付けられる．

この手法では，散乱波の観測を前方から後方にかけて行ったとしても，得られる物体関数の空間周波数成分は入射波の波数の 2 倍までに制限される (Fourier diffraction projection theorem)．その結果，標本化定理の意味での分解能は，入射波の $1/4$ 波長となる．また，透過型の観測モデルを考えた場合は，観測は前方のみで行われ，得られる空間周波数成分は，入射波の波数の $\sqrt{2}$ 倍までに制限される．

ボルン近似が適用できるのは，物体による位相の変化が小さいときである．文献 [15] では，均質円柱を例に取り，その有効な範囲を，自由空間 (外部媒質) 中の波長で規格化した半径と比屈折率差との積が 0.175 までとしている．しかし，[16] や付録 B によると， 0.05 程度でもいい結果が得られているとはいえない．

一方，リトフ近似においては，内部波の位相項を考慮するが，その空間的微分を零と近似する．リトフ近似においても，ボルン近似と同じ形の方程式に線形化される．リトフ近似は，ボルン近似よりも大きい物体に適用できる．その大きさが 2000 波長でもいい再構成像が得られるが，屈折率差については 0.02 程度までとされる [15].

このように，これらの 2 つの手法は不均質性が非常に弱い物体にのみ有効である．従って，回折トモグラフィの広範な応用を考えると，不均質性が強い物体へも適用できる再構成法の研究が必要となった．

直接解法

ボルン近似, リトフ近似のように方程式を線形化近似せずに, 積分方程式を離散化することで, 非線形のまま行列方程式として直接解く方法が提案された.

Caorsi らは, 不均質性の強い物体に対する再構成法として等価電流分布推定に基づく手法を提案した (2次元 [17], 3次元 [18]). この手法は, 次の3段階に分けられる.

1. まず, 観測散乱波から等価電流分布を推定する.
2. 求めた等価電流分布に基づいて順問題を解き, 再構成領域の全波を求める.
3. 最後に, 全波と等価電流分布から物体関数が求められる.

この手法で問題となるのが, 段階1を実行する方法である. 段階1では, 方程式は第一種の積分方程式であり, 離散化することで連立一次方程式に変換されるが, 密な離散化を行うと, 各行(列)の独立性が低くなり逆行列が正確に求められなくなる. これは悪条件 (ill-posed) と呼ばれる. そのため, その連立一次方程式の解法には疑似逆変換 (pseudoinverse) が利用される. ここで, 疑似逆変換とは, 方程式の残差を最小にするとともに, 解のノルムが最小のものを解とするもので, 解は一意に決定できる [19-21]. しかし, 疑似逆変換は解の空間的な LPF (Low Pass Filter) 効果を引き起こし, 解の解像度は低下される. 数値例では, 物体に一方向から平面波を入射したモデルを考えている. 再構成値は 10% 程度の誤差を伴うが, ボルン近似よりも高い屈折率に対しても適用できる. 一辺 $1/3$ 波長で比誘電率 3.5 程度 (屈折率 1.87) の推定に成功している. しかし, ここで, 行われた数値例は, 再構成領域内に存在するの不均質物体の位置およびその屈折率の推定にとどまっており, 内部構造の再構成までは至っていない. また, 全波が小さい領域においては誤差が大きくなる.

Lee らは, この等価電流分布推定に基づく手法を角スペクトル領域上で行うことにより, 安定した解が求まることを示している [22]. すなわち, 半径一定の観測領域上で散乱波およびグリーン関数をフーリエ級数で表現する. この表現は角スペクトル (Angular spectral)

と呼ばれる。このように、角スペクトル表現することによって、高次スペクトルを打ち切ることができ、雑音の影響を低減できると考えられる。数値例では、0.4 波長×0.4 波長で最大比誘電率 3 (屈折率 1.73) のモデルを取り上げ、空間領域上で解く従来の手法に比べ、角スペクトル法は安定した解が求まることを示している。

W. Wang らは、相関のない入射波を用い、十分な情報を得ることによって、悪条件 (ill-posed) を回避する手法を提案している [23]。この手法では、入射波を並べた行列以外の逆行列は解かなくてよいため、独立な入射波の基では、悪条件は回避される。そのため、上の例で用いた疑似逆変換は用いる必要がなく、その LPF 効果による像の劣化もない。しかしながら、未知数 (×偏波) の数だけ独立な入射波を用意しなければならない。入射波の独立性は、入射波の入射角、ビーム幅、偏波、焦点距離、放射位置などを変えることにより達成できると筆者は主張している。数値例によると、例えば、1.5 波長×1.5 波長で中心の比誘電率、導電率が 15, 0.15(屈折率 $4.03 + i1.12$) の層状角柱について、最大相対誤差 0.37% という精度を達成している。適用範囲については十分に検討されていない。

なお、この手法は Chiu により、二軸 (biaxial) 異方性物体の再構成に用いられ、観測散乱波に含まれる雑音の影響が調べられている [24]。

逐次線形化反復法

Chew らは、ボルン反復法または distorted ボルン反復法を用いて再構成を行っている [25, 26]。これらの手法では、各反復段階で非線形方程式が線形化され、線形最適化問題を解くことで解が更新される。

ボルン反復法の手順は次のとおりである。

1. 物体関数の初期値を与え、この物体関数に対する順問題を解いて、内部波を求める。
2. 観測散乱波と段階 1 の内部波を基に計算される散乱波との残差が最小になるように線形最適化を行い、物体関数を更新する。

3. 更新された物体関数を新しい物体関数として、段階 1 へ行く。

また、distorted ボルン反復法の手順は次のとおりである。

1. ボルン近似に基づいて線形化した逆問題を解き、物体関数を推定する。ここでは、自由空間中のグリーン関数を用いる。
2. 段階 1 で推定された物体関数による順問題を (モーメント法を用いて) 解き、物体内部の全波および観測点での散乱波を求める。また、段階 1 で推定された物体関数による点波源応答を計算する。これは、新しいグリーン関数となる。
3. 観測散乱波から段階 2 の散乱波を引いたものを新しい観測散乱波とし、全波を段階 2 の全波で近似し、新しいグリーン関数を用いる。これから生成される新しい逆問題を解き、その解を前段階の物体関数の訂正項とする。

この反復法で、逆問題を解く際、解を安定化するために Tikhonov の正則化が用いられている。なお、distorted ボルン反復法は、2 次収束する (残差は修正項の 2 乗に比例し、残差は反復回数に対して 2 乗に減少する) ので、1 次収束する (残差が修正項に比例) ボルン反復法に比べて、収束は速い。一方、雑音のある状況においては、ボルン反復法の方が誤差が小さいという特徴がある。

Joachimowicz らは、Newton-Kantrovich 法に基づく空間領域の反復法を提案している [27]。すなわち、ある推定値において方程式を線形近似し、その微係数を考慮して、近似解を求める。彼らは、散乱波および物体関数の微小残差を結びつける連立一次方程式を導出した。この解法には、Tikhonov の正則化が用いられる。Tikhonov の正則化を用いる際には、正則化の度合を決めるパラメータを解の安定性と解像度との兼ね合いから経験的に決定されなければならない。また、物体関数が更新されるごとに順問題を解かなければならず、計算量が大きくなる。彼らは、人体への適用を想定したモデルを用いて、数値計算を行っている。人体モデルのように、非常に屈折率が高い場合、外部媒質の屈折率を高くすることで、精度のよい推定ができることが報告されている [28]。

これに対して、Harada らは修正 Newton-Kantrovich 法に基づいた周波数領域での反復法を提案した [16, 29-31]. そこでは、各反復段階での必要な勾配ベクトルを初期値で固定し、それに対応する物体関数の初期値を 0 (外部均質と同じ) とすることにより、上で述べた distorted ボルン反復法に良く似た新しい反復法を導出している. この手法では、観測の方法から、得られる物体関数の空間周波数成分が入射波の波数の 2 倍以下に帯域制限されるため、標本化定理により、分解能は入射波の $1/4$ 波長といえる. これはボルン近似を用いる手法に等しい. このため、高周波成分はこの再構成に寄与せず、正則化を行わなくても安定した解が求まる [32]. 数値例では、ボルン近似が有効でない高い屈折率の物体に対して有効であることが示されており、その範囲は自由空間中 (外部媒質) の波長で規格化した半径と比屈折率差との積が 0.1 までとされる.

最適化問題として解く方法

方程式を線形化せずに非線形のまま最適化問題として解く手法が提案されている. すなわち、物体の屈折率分布を仮定して計算される散乱波と観測散乱波との誤差に関する汎関数を定義して、その最小点を求める非線形最適化問題を解き、屈折率を推定する. 用いる汎関数と最適化法の違いにより、いろいろな手法が報告されている. 逐次線形化反復法では、非線形性が強い場合、解が発散する場合があるが、この手法は、降下法による最適化法を用いたとき、解が真であるとは限らないが、理論的には収束が保証される. 通常、最適化を行う際、順問題を繰り返し解かなければならないことは、逐次線形化反復法と同じである.

Harada らは、汎関数として、(多方向入射に対して) 測定した散乱波と推定した内部屈折率による散乱波の遠方散乱パタンの残差の二乗和を導入した. 彼らは、共役勾配法を用いた最適化を行っている [31, 33]. その際必要な汎関数の勾配は、Fréchet 微分によって解析的に導出している. この手法では、各反復段階で順問題を計算し、その際に計算される正確な勾配を用いて最適化が行われる. 共役勾配法は、降下法の一つであり、収束が保証さ

れる他に、収束が速い、少ない記憶容量で実行できるという特徴をもっている。数値例では、半径 1.2 波長、最大屈折率差 0.5 の 2 層円柱の再構成に対し、精度のよい結果が得られている。また、この手法を三次元問題にも拡張している [34]。

Ra らは、汎関数として、(多方向入射に対して) 測定した散乱波と推定した内部屈折率による散乱波の遠方散乱パタンの残差の二乗和を導入した。しかし、彼らは、角スペクトル空間でこれを行っている [35]。角スペクトル空間で行うことで、角スペクトルの低周波成分のみを用いることができ、雑音の影響を受けにくい。この汎関数を修正ニュートン法で最適化している。また、彼らは円柱をモデルとして、円柱の半径が大きくなると、汎関数に多くの極小点が発生することを述べている。

この二つの例では、最適化を行う際に、順問題を繰り返し解かなくてはならない。

そこで、Kleinman らは、物体関数と内部波を同時に最適化する手法を提案した [36]。汎関数の第 1 項は観測領域における散乱波の残差に関する項であり、第 2 項は物体内部の波動方程式の残差に関する項となっている。更に、逐次過緩和法 (successive over-relaxation method) を用いて、内部散乱波と物体関数の更新を同時に行った。この反復法では、内部波の更新は方程式の残差方向、物体関数の更新は汎関数の物体関数に関する勾配方向を基準として行い、各反復段階で順問題を解くことを避けている。その後、二つの更新方向をともに共役勾配方向にとった修正版も考えられ [37]、その手法では、正方領域に正弦状に分布する無損失の屈折率分布を推定したところ、波長で規格化したサイズと比誘電率差の積が 3 まで有効である。

Barkeshli らは、勾配方向への探索に基づいた反復法を提案した [38]。彼らの用いた汎関数はほぼ Kleinman らのものと同じであるが、Levenberg-Marquardt の正則化に関連した項を付加しており、散乱を記述する演算子の安定性を改善している。ここでは、汎関数の勾配を求めることで、汎関数の最小化には最急降下法もしくは共役勾配法を用いている。この手法は Kleinman らの手法の修正版 [37] にほぼ等しい。

以上の方法は、最適化を行う際、降下法と呼ばれる範疇の最適化法を用いている。従っ

て、初期値の選び方により求まる解が異なることがあり、局所的最適解に陥った場合の復帰はできない。

Caorsi らは、Bayes の定理と Gibbs Random field に基づいて統計学的な観点から、誘電率推定の逆問題をアプローチした [39, 40]。そこでは、通常用いられている小領域に分割してパルス関数で展開する物体の表現法に加えて、各小領域の境界上でエッジの有無を表現する手段を組み込んでいる。最終的に導出された汎関数は、観測領域における散乱波の残差に関する項、物体内部の波動方程式の残差に関する項および物体の強度分布やエッジの分布に関する制約項の 3 項から成っている。この関数を最小化することにより、物体関数、エッジ、内部界を同時に最適化する。この結果、物体内部の不連続面を LPF 効果から分離して検出することができる。この最適化には、Simulated Annealing 法 (SA) が使われている。SA は、材料理論の分野で発達し、その後、さまざまな分野に応用された。この方法では、探索点をランダムに変えることにより最適化を行い、ある確率で汎関数を増加させる方向にも修正を行う。そのため、降下法で局所的最適解に落ち込むといった問題を克服できる。数値例では、直径 $1/4$ 波長の無損失円柱に対し、屈折率 3 の円柱の再構成を行っている。この場合、再構成値は 20% の誤差を含んでいる。この他、生体モデルも行っている。この手法の問題点としては、非常に時間がかかることと、解がアルゴリズムの制御に依存するといったことが挙げられる。

また、Ra らは、上で述べた角スペクトル空間で定義された汎関数に対して、修正ニュートン法 (Levenberg-Marquardt 法 (LM)) と Simulated Annealing 法 (SA) を必要に応じて使いわけると最適化を行った [41]。SA は、局所的最適解から復帰する機能があるが最適化の効率が悪い。一方、LM は、修正ニュートン法の一つであり、降下方向に対しては、効率がよいが、局所的最適解に陥るといった問題がある。ここでの手法は、この 2 つを必要に応じて使いわけることにより、SA に対し $1/10$ の時間を達成している。

1.3 本論文の構成

最適化に基づく手法は、解が局所的最適解に落ち込む可能性があるので、その手法の適用範囲を調べることは重要である。しかし、これまでの論文の例では、通常モーメント法で順問題を解いている。モーメント法は、物体の分割に伴って、離散化誤差が生じる。順問題を解く場合には分割数が小さくても離散化誤差はさほど大きくなる。しかし、逆問題を解く場合には、通常、順問題を何回も繰り返して解かなくてはならず、本質的に不安定であることから、分割数を大きくして十分精度良く順問題を解かなければ精度の良い再構成像は得難い。このように、従来手法を用いて、最適化に基づく逆問題解法の適用範囲を調べることは、計算時間や精度の問題から困難であった。

本論文においても、最適化法に基づいた再構成アルゴリズムを提案する。これは、各反復過程で順問題を解く方法である。しかしながら、物体の形状を軸対称層状または非軸対称2層に限定して、波動関数を直接境界で整合することにより順問題を解く。軸対称層状物体に対しては、モーメント法のような離散化誤差を伴わず、形状を限定したために順問題を容易に解くことができる。本論文は、この手法を用いてさまざまな物体を再構成することで、最適化に基づく回折トモグラフィの再構成法の特徴を明らかにしようとするものであり、以下の構成になっている。

第1章は、序論であり、研究の背景、回折トモグラフィの再構成法の研究状況、本論文の構成について述べた。

第2章では、境界整合の手法に基づいた軸対称多層円柱の屈折率分布の再構成法について述べる。まず、この円柱に対して、各層の屈折率が与えられたとき、各層での波動場を波動関数で展開して、各層の境界で接続することにより、散乱波を算定する方法を述べる。これにより、軸対称多層円柱に対しては、厳密な散乱波が算定できる。次に、逆問題を解くために、仮定した屈折率分布による算定散乱波と観測散乱波の平均二乗誤差を定義する。また、観測散乱波も波動関数で表現することで、平均二乗誤差を簡潔な表現に変形する。こ

の平均二乗誤差の最小点を準ニュートン法を利用して求めることで，円柱の屈折率分布を推定するアルゴリズムについて述べる．

第3章は，軸対称多層円柱の再構成例であり，第2章で述べたアルゴリズムに従い，軸対称屈折率分布の再構成を行う．まず，簡単な例として単層誘電体円柱を取り上げ，平均二乗誤差を最小化し屈折率を最適化する様子を可視化する．更に，系統的に屈折率分布およびサイズを変えた4層誘電体円柱に対する再構成シミュレーションから，手法の適用範囲について検討する．また，医療分野への応用を考え，生体モデルに近い屈折率をもつ円柱の再構成も行う．

第4章では，非軸対称2層円柱の再構成について述べる．第2章，第3章で述べた軸対称2層円柱の再構成を，安浦の方法を用いて軸対称2層円柱へ拡張する．また，簡単な数値例を示す．

第5章は，結論であり，本研究で得られた結果を要約し，また，今後の課題について述べる．

なお，本論文では，時間因子は $\exp(-i\omega t)$ とし，記述から省略している．

第2章 軸対称多層円柱の再構成アルゴリズム

第2章では、境界整合の手法に基づいた軸対称多層円柱の屈折率分布の再構成法について述べる。まず、この円柱に対して、各層の屈折率が与えられたとき、各層の境界で接続することにより、厳密に散乱波を算定する方法を述べる。次に、逆問題を解くために、仮定した屈折率分布による算定散乱波と観測散乱波の平均二乗誤差を定義する。また、観測散乱波も波動関数で表現することで、平均二乗誤差を簡潔な表現に変形する。最後に、この平均二乗誤差の最小点を準ニュートン法を利用して求めることで、円柱の屈折率分布を再構成するアルゴリズムについて述べる。

2.1 軸対称多層円柱による散乱

まず、軸対称層状円柱による電磁波の散乱問題を考える。円柱は図 2.1 に示すように N 層から構成されるものとする。屈折率が不連続に変化している境界を外側からそれぞれ C_1, \dots, C_N とし、その半径をそれぞれ r_1, \dots, r_N とする。円柱自体の半径は r_1 となる。各

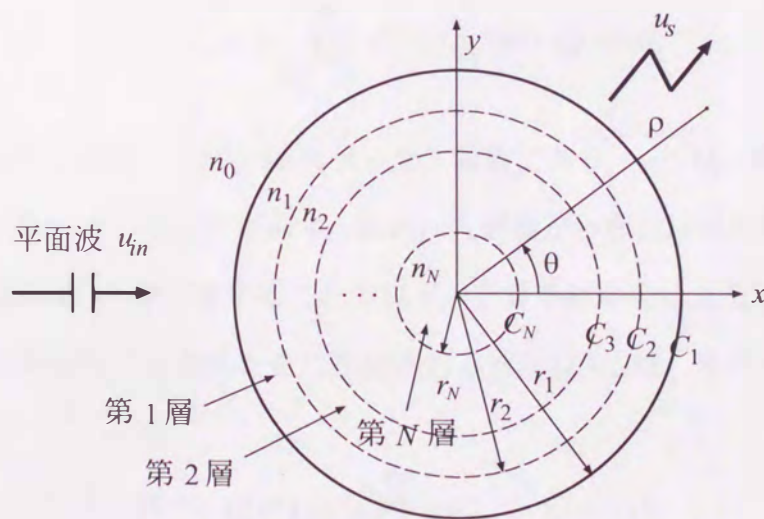


図 2.1: 軸対称層状円柱による散乱

層の複素屈折率は、外側の層からそれぞれ n_1, \dots, n_N とし、円柱の外部は自由空間であり、その複素屈折率は n_0 とする。但し、誘電率のみが変化するものとし、透磁率は散乱体円柱内外にわたり真空中の透磁率 μ_0 に等しいとする。つまり、各層の複素屈折率 n は、各層の誘電率 ϵ 、導電率 σ および真空中の誘電率 ϵ_0 を用いて

$$n = \left[\frac{\epsilon}{\epsilon_0} + i \frac{\sigma}{\omega \epsilon_0} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.1)$$

で定義される。また、 n/n_0 を比屈折率、 $(n/n_0) - 1$ を比屈折率差と呼ぶ。

本論では、 z 方向 (図 2.1 で紙面に垂直方向) に一様な円柱を考え、更に、扱う電磁波は z 軸に垂直に伝搬するものとする。その際、(i) その電界が z 軸に平行に偏波されている場合 (E 波入射)、(ii) その磁界が z 軸に平行に偏波されている場合 (H 波入射) の 2 つの偏波を取り扱う。これらの問題では、それぞれ E_z または H_z のみを考えればよいことから、これらの界を u で記述することにする。

入射波 u_i は、 x 軸正方向に進む平面波とし、次のように波動関数の和で表される。実際は有限項和で近似される (平面波の円筒波による展開、ヤコビ・アンガー展開)。

$$u_i(\rho, \theta) = \exp(in_0 k \rho \cos \theta) \quad (2.2)$$

$$\simeq \sum_{m=-M}^M i^m J_m(n_0 k \rho) \exp(im\theta) \quad (2.3)$$

ここで、 k は真空中の波数、 J_m は m 次ベッセル関数であり、‘ \simeq ’ は、和を $\pm M$ での打ち切ったため近似になっていることを示す。なお、入射波が平面波以外の場合も、同様に展開できれば、展開係数 i^m を変更することで以下の計算手続が同じように使える。

円柱各層の屈折率が与えられたときに算定される散乱波 u_s は、次のヘルムホルツ方程式を満たす。

$$\left(\nabla^2 + n_0^2 k^2 \right) u_s(\rho, \theta) = 0, \quad (\rho > r_1) \quad (2.4)$$

散乱波は、2次元の外向放射条件

$$\lim_{\rho \rightarrow \infty} \sqrt{\rho} \left(\frac{\partial u_s}{\partial \rho} - in_0 k \rho \right) = 0 \quad (2.5)$$

を満足することから、次のように表される。

$$u_s(\rho, \theta) \simeq \sum_{m=-M}^M i^m a_m H_m^{(1)}(n_0 k \rho) \exp(im\theta) \quad (2.6)$$

ここで、 a_m は決定すべき展開係数、 $H_m^{(1)}$ は m 次第一種ハンケル関数である。

第 l 層における全波 Ψ_l は、次のヘルムホルツ方程式を満たす。

$$(\nabla^2 + n_l^2 k^2) \Psi_l(\rho, \theta) = 0 \quad (2.7)$$

その解は、波動関数を用いて次のように表現できる。

$$\begin{aligned} \Psi_l(\rho, \theta) &\simeq \Phi_l(\rho, \theta) \\ &= \sum_{m=-M}^M i^m \{ a_{lm} H_m^{(1)}(n_l k \rho) + b_{lm} J_m(n_l k \rho) \} \exp(im\theta), \quad l = 0, \dots, N \end{aligned} \quad (2.8)$$

ここで、 a_{lm}, b_{lm} は展開係数である。なお、 $l=0$ は円柱の外部を意味し、 $\Psi_0 = u_i + u_s$ とすると、式(2.3)、(2.6)、および(2.8)を比較することによって

$$a_{0m} = a_m, \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm M \quad (2.9)$$

$$b_{0m} = 1, \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm M \quad (2.10)$$

であることがわかる。また、第 N 層には原点が存在し、原点での波動場は有界であることから、原点で発散する $H_m^{(1)}$ は除外される。すなわち、

$$a_{Nm} = 0, \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm M \quad (2.11)$$

になる必要が生じる。

E 波入射

各境界 C_l における境界条件は、E 波入射の場合、マクスウェルの方程式から、次のようになる。

$$\Psi_{l-1}(\rho, \theta) = \Psi_l(\rho, \theta), \quad (\rho = r_l, l = 1, \dots, N) \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial \Psi_{l-1}(\rho, \theta)}{\partial \rho} = \frac{\partial \Psi_l(\rho, \theta)}{\partial \rho}, \quad (\rho = r_l, l = 1, \dots, N) \quad (2.13)$$

式 (2.8) を式 (2.12), (2.13) に代入し,

$$X_{lm} = a_{lm}/b_{lm}, \quad l = 1, \dots, N, \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm M \quad (2.14)$$

とおくと、 $\exp(im\theta)$ の直交性より、両辺が項別に比較できて、全ての m に対して独立に、

$$\begin{aligned} b_{ml-1} \{ J_m(n_{l-1}kr_l) + X_{l-1m} H_m^{(1)}(n_{l-1}kr_l) \} \\ = b_{ml} \{ J_m(n_lkr_l) + X_{ml} H_m^{(1)}(n_lkr_l) \} \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\begin{aligned} n_{l-1} b_{ml-1} \{ J'_m(n_{l-1}kr_l) + X_{l-1m} H_m^{(1)'}(n_{l-1}kr_l) \} \\ = n_l b_{ml} \{ J'_m(n_lkr_l) + X_{ml} H_m^{(1)'}(n_lkr_l) \} \end{aligned} \quad (2.16)$$

を得る。但し、 J'_m , $H_m^{(1)'}$ は、それぞれの引数による導関数を示す。式 (2.15), (2.16), および (2.11) より、次の漸化式が得られる。

$$X_{Nm} = 0 \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} X_{l-1m} = & - \left[n_{l-1} J'_m(n_{l-1}kr_l) \{ J_m(n_lkr_l) + X_{lm} H_m^{(1)}(n_lkr_l) \} \right. \\ & \left. - n_l J_m(n_{l-1}kr_l) \{ J'_m(n_lkr_l) + X_{lm} H_m^{(1)'}(n_lkr_l) \} \right] \\ & / \left[n_{l-1} H_m^{(1)'}(n_{l-1}kr_l) \{ J_m(n_lkr_l) + X_{lm} H_m^{(1)}(n_lkr_l) \} \right. \\ & \left. - n_l H_m^{(1)}(n_{l-1}kr_l) \{ J'_m(n_lkr_l) + X_{lm} H_m^{(1)'}(n_lkr_l) \} \right], \end{aligned}$$

$$l = N, \dots, 1 \quad (2.18)$$

式(2.18)に含まれる J'_m , $H_m^{(1)'}$ は, 次の公式 [42, p159]

$$Z'_m(z) = \frac{1}{z} Z_m(z) - Z_{m+1}(z), \quad Z_m = J_m, H_m^{(1)} \quad (2.19)$$

を用いて整理することにより, 次のように微分形を含まない形に書き直すことができる.

$$X_{Nm} = 0 \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned} X_{l-1m} = & - \left[n_l J_m(n_{l-1}kr_l) \left\{ J_{m+1}(n_lkr_l) + X_{lm} H_{m+1}^{(1)}(n_lkr_l) \right\} \right. \\ & \left. - n_{l-1} J_{m+1}(n_{l-1}kr_l) \left\{ J_m(n_lkr_l) + X_{lm} H_m^{(1)}(n_lkr_l) \right\} \right] \\ & / \left[n_l H_m^{(1)}(n_{l-1}kr_l) \left\{ J_{m+1}(n_lkr_l) + X_{lm} H_{m+1}^{(1)}(n_lkr_l) \right\} \right. \\ & \left. - n_{l-1} H_{m+1}^{(1)}(n_{l-1}kr_l) \left\{ J_m(n_lkr_l) + X_{lm} H_m^{(1)}(n_lkr_l) \right\} \right], \\ & l = N, \dots, 1 \quad (2.21) \end{aligned}$$

漸化式(2.21)を用い, 式(2.14), (2.10)を考慮すると, 式(2.6)における展開係数は,

$$a_m = X_{0m}, \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm M \quad (2.22)$$

と決定できる.

H 波入射

H 波入射の場合には, 各境界 C_l における境界条件は次のようになる.

$$\Psi_{l-1}(\rho, \theta) = \Psi_l(\rho, \theta), \quad (\rho = r_l, l = 1, \dots, N) \quad (2.23)$$

$$\frac{1}{n_{l-1}^2} \frac{\partial \Psi_{l-1}(\rho, \theta)}{\partial \rho} = \frac{1}{n_l^2} \frac{\partial \Psi_l(\rho, \theta)}{\partial \rho}, \quad (\rho = r_l, l = 1, \dots, N) \quad (2.24)$$

E波入射と同様に $X_{lm} = a_{lm}/b_{lm}$ とおくと、全ての m に対して独立に

$$\begin{aligned} b_{l-1m} \{X_{l-1m} H_m^{(1)}(n_{l-1}kr_l) + J_m(n_{l-1}kr_l)\} \\ = b_{lm} \{X_{lm} H_m^{(1)}(n_lkr_l) + J_m(n_lkr_l)\} \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{n_{l-1}} b_{l-1m} \{X_{l-1m} H_m^{(1)'}(n_{l-1}kr_l) + J_m'(n_{l-1}kr_l)\} \\ = \frac{1}{n_l} b_{lm} \{X_{lm} H_m^{(1)'}(n_lkr_l) + J_m'(n_lkr_l)\} \end{aligned} \quad (2.26)$$

を得る。これらの式より、次の漸化式が得られる。

$$X_{Nm} = 0, \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} X_{l-1m} = & - \left[n_l J_m'(n_{l-1}kr_l) \{J_m(n_lkr_l) + X_{lm} H_m^{(1)}(n_lkr_l)\} \right. \\ & \left. - n_{l-1} J_m(n_{l-1}kr_l) \{J_m'(n_lkr_l) + X_{lm} H_m^{(1)'}(n_lkr_l)\} \right] \\ & / \left[n_l H_m^{(1)'}(n_{l-1}kr_l) \{J_m(n_lkr_l) + X_{lm} H_m^{(1)}(n_lkr_l)\} \right. \\ & \left. - n_{l-1} H_m^{(1)}(n_{l-1}kr_l) \{J_m'(n_lkr_l) + X_{lm} H_m^{(1)'}(n_lkr_l)\} \right], \\ & l = N, \dots, 1 \end{aligned} \quad (2.28)$$

式(2.28)においては、式(2.21)のようには導関数 $J_m', H_m^{(1)'}$ を消去できない。従って、式(2.6)の展開係数 a_m は、漸化式(2.28)を用いて

$$a_m = X_{0m} \quad (2.29)$$

のように求める。

このようにして、軸対称な屈折率分布をもつ円柱による散乱波は、屈折率分布から直接求められる。ここでは、散乱波は屈折率から計算できるということを示すため、屈折率ベクトル $\mathbf{n} = (n_1, \dots, n_N)$ を定義して $u_s(\mathbf{n})$ のように記す。

2.2 平均二乗誤差

本節では、既知の入射波を物体に照射したときの観測散乱波から、物体内部の未知の屈折率分布を再構成する逆散乱問題を考える。観測された散乱波は、振幅および位相がともに既知であると仮定する。

ここでは、観測散乱波 \bar{u}_s と算定散乱波 u_s に関する平均二乗誤差 Ω を次式で定義する。

$$\Omega(\mathbf{n}) = \frac{\int_C |\bar{u}_s(\rho, \theta) - u_s(\rho, \theta; \mathbf{n})|^2 ds}{\int_C |u_i(\rho, \theta)|^2 ds} + \frac{\int_C |\partial_n \bar{u}_s(\rho, \theta) - \partial_n u_s(\rho, \theta; \mathbf{n})|^2 ds}{\int_C |\partial_n u_i(\rho, \theta)|^2 ds} \quad (2.30)$$

但し、積分路 C は円柱を取り囲む閉曲面である。 ∂_n は積分路 C 上での外向法線微分をとることを表す。

E 波入射の場合、式 (2.30) 第 1 項は C 上で電界の接線成分を接続するという意味をもち、第 2 項は磁界の接線成分を接続するという意味をもつ。また、H 波問題の場合は、その逆で、第 1 項は磁界の接線成分を、第 2 項は電界の接線成分をそれぞれ接続するという意味をもつ。別の観点からみると、第 1 項により波動場が接続されるが、第 2 項があることにより滑らかに接続しようとしていると見ることもできる。

式 (2.30) から明らかなように、散乱波の平均二乗誤差 Ω は常に非負であり、観測散乱波 \bar{u}_s と与えられた屈折率分布による算定散乱波 u_s が一致するとき、最小値 0 をとる。これより、この平均二乗誤差 Ω の最小点を求めることにより、物体内部の未知の屈折率分布を再構成する手法が考えられる。

2.3 散乱波の観測

本節では、屈折率分布の再構成に用いる散乱波の観測について考える。

ここでは、観測された散乱波 \bar{u}_s は、式 (2.6) と同様に展開することにする。

$$\bar{u}_s(\rho, \theta) \simeq \sum_{m=-M}^M i^m \bar{a}_m H_m^{(1)}(n_0 k \rho) \exp(im\theta) \quad (2.31)$$

近傍界の観測

図 2.2 のように、散乱波を円柱を取り囲む半径 R の閉曲面上で観測するものとする、観測できる量は θ の関数であり、式 (2.31) より

$$\bar{u}_s(R, \theta) = \sum_{m=-M}^M i^m \bar{a}_m H_m^{(1)}(n_0 k R) \exp(im\theta) \quad (2.32)$$

となる。両辺に $\exp(-im'\theta)$ を乗じて、 $-\pi$ から π の区間で θ について積分すると、次式を得る。

$$\int_{-\pi}^{\pi} \bar{u}_s(R, \theta) \exp(-im'\theta) d\theta = 2\pi i^{m'} \bar{a}_{m'} H_{m'}^{(1)}(n_0 k R) \quad (2.33)$$

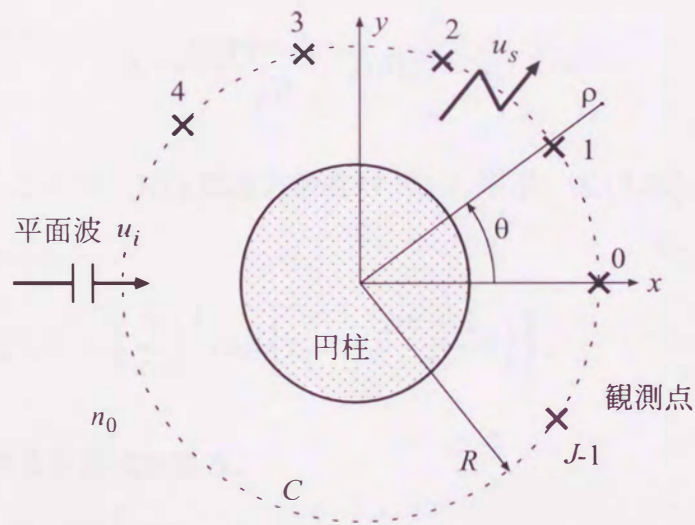


図 2.2: 散乱波の観測

つまり,

$$\bar{a}_m = \frac{\int_{-\pi}^{\pi} \bar{u}_s(R, \theta) \exp(-im\theta) d\theta}{2\pi i^m H_m^{(1)}(n_0 k R)}, \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm M \quad (2.34)$$

より, 式 (2.31) の展開係数 \bar{a}_m は, 観測散乱波から求められる.

離散的な観測点

更に, 実際的な観点から, 半径 R の観測面上に等間隔に J 個の観測点を配置し, その点のみの観測データを用いることにする. このとき, 式 (2.34) を離散化することにより次式を得る. 但し, 標本化定理より, $J \geq 2M + 1$ とする必要がある.

$$\bar{a}_m = \frac{\sum_{j=0}^{J-1} \bar{u}_s(R, 2\pi j/J) \exp(-i2\pi m j/J)}{J i^m H_m^{(1)}(n_0 k R)}, \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm M \quad (2.35)$$

遠方界の観測

一般に遠方界は,

$$u_s \sim \frac{\exp(in_0 k \rho)}{\sqrt{\rho}} f(\theta), \quad \rho \rightarrow \infty \quad (2.36)$$

の形で表現できる. ここで, $f(\theta)$ は遠方散乱パターンと呼ぶ. 式 (2.36) およびハンケル関数の漸近近似式 [42, p154]

$$H_m^{(1)}(z) \sim \left(\frac{2}{\pi z}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{i\left(z - \frac{2m+1}{4}\pi\right)\right\}, \quad |z| \rightarrow \infty \quad (2.37)$$

を式 (2.34) に代入すると次式を得る.

$$\bar{a}_m = \left(\frac{in_0 k}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\pi}^{\pi} f(\theta) \exp(-im\theta) d\theta, \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm M \quad (2.38)$$

これから, 遠方散乱パターン $f(\theta)$ が観測されれば, 式 (2.31) における展開係数 \bar{a}_m は決定される.

このように、展開係数 \bar{a}_m は、観測した散乱波から、式 (2.34), (2.35), (2.38) のいずれかを用いて決定できる。類似した表現は、文献 [35] においても用いられている。

式 (2.30) に式 (2.6), (2.31) を代入し、 C を観測面と同じ面すなわち半径 R の面にとると、 Ω は次のように簡略化できる。

$$\Omega(\mathbf{n}) = \sum_{m=-M}^M \left\{ |H_m^{(1)}(n_0 k R)|^2 + 2 |H_m^{(1)'}(n_0 k R)|^2 \right\} \cdot |\bar{a}_m - a_m(\mathbf{n})|^2 \quad (2.39)$$

この表現は積分を含んでおらず、計算機上での計算に便利である。

2.4 屈折率分布再構成アルゴリズム

前節までに、平均二乗誤差 $\Omega(\mathbf{n})$ を定義し、その最小点を求める非線形最適化問題を解くことにより、軸対称多層円柱の屈折率を再構成する手法について述べた。

非線形最適化問題を解くための最も典型的なアルゴリズムに降下法がある。降下法では、関数の値が減少する方向 (降下方向) を見つけ、その方向上で関数の最小点を求める手続き (直線探索) を繰り返すことで、関数の最小点を求める。一般的に降下法は局所的最適解に大域的に収束することが知られている。降下方向の決め方により、さまざまな種類の降下法が提案されており [43, 44]、基本的な方法を以下に述べる。

最も古くから知られている方法として最急降下法がある。この方法は降下方向として、関数の勾配方向の反対方向を選ぶ。この手法は、アルゴリズムが単純であるが、収束が遅くなることが多い。

最急降下法は関数の 1 回微分を用いるが、2 回微分まで考慮に入れて降下方向を決定する手法にニュートン法がある。これは、関数が最小点の近傍で二次関数であると仮定し、その 2 次関数の最小点の方向へ直線探索をする方法である。しかしながら、反復毎にヘッセ行列 (2 回微分の項) およびその逆行列を計算しなければならないこと、ヘッセ行列が正定値でないときに、探索方向が降下方向にならないことなどの欠点がある。

そこで、ヘッセ行列の逆行列を適当な行列で近似し、反復過程で解の更新と共にこの行列を更新し、最適点においてヘッセ行列の逆行列に収束させる方法が提案されている。この方法は、準ニュートン法と呼ばれている。ヘッセ行列の更新には、DFP 公式や BFGS 公式が用いられる。現在、制約なし最適化のアルゴリズムの中で最も高度に発展した方法である。更に、数値的に安定化させるために、Cholesky 分解を用いたものも提案され、これは改訂準ニュートン法と呼ばれる。

一方、2次関数の最小化に基づく手法として他に共役勾配法がある。共役勾配法では互い共役な(直交を一般化したもの)方向に降下方向を取り、2次関数であれば、理論的には、変数の個数回の反復で収束する。一般的な関数の場合にも適用できるよう、Fletcher-Reeves 公式を始めとする共役方向を求めるさまざまな公式が提案されている。記憶容量が少なくよく、大次元問題には有効とされている。

本論では、再構成する物体として、比較的簡単な形状を考えていることから、その物体を低次元で表現できており、通常の準ニュートン法を利用して最適化を行った。準ニュートン法は大域的な収束が保証されているが、収束した解は必ずしも真値とは限らない。その解は初期値の選び方に大きく左右される。ここでは、物体に関する事前情報は、物体の表面の位置のみとし、屈折率は全く未知であるとする。ここで、初期値の与え方として、円柱の分割数を変えながら最適化を行う手法 [45] を採り入れる。すなわち、まず、円柱を1層(均質)と仮定して最適化問題を解き、屈折率を推定する。次に、その推定値を初期値とし、円柱を2層と仮定して、最適化問題を解き、屈折率を推定する。これを、必要な層数まで続ける。この手法により、より安定して最適化できると期待される。

以下、そのアルゴリズムを示す。

ステップ 1 円柱を均質と仮定し ($N = 1$)、屈折率ベクトル \mathbf{n} の初期値を与える。この屈折率を用い、散乱波(の展開係数)を式 (2.22) または (2.29) により計算する。

ステップ 2 誤差 Ω が減少するように、ベクトル \mathbf{n} を更新する。この屈折率の更新には、準ニュートン法を利用している。この手順は、(i) 勾配ベクトルを計算する。

ここでは、差分法を用いる。(ii) 降下方向を設定する。(iii) 直線探索を1回行う。(iv) ヘシアン行列の更新をする。である。

ステップ 3 誤差 Ω の絶対値が、収束判定値 ε_1 より小であれば終了する。また大であればステップ 4 に進む。

ステップ 4 Ω の最小化が収束したと思われる場合、ステップ 5 に進む。そうでない場合、ステップ 2 に進み、直線探索を繰り返す。次章で示す数値例において、この収束判定には (i) 1 回の反復 (更新) での誤差 Ω の変化 $\Delta\Omega$ が収束判定値 ε_2 より小であるとき、(ii) Ω の 1 回微分 $\nabla\Omega$ が収束判定値 ε_2 より小であるとき、のいずれかを用いており、それぞれの例で明記している。

ステップ 5 円柱の分割数 N を増やし、ステップ 2 に戻る。ここでは、前の分割数での再構成結果を次の分割数での初期値として有効に利用するために、分割数を $1 \rightarrow 2 \rightarrow 4 \rightarrow 8 \dots$ と必要な分割数まで増やす。なお、必要な分割数については、数値例により、第 3.5 節で考察する。

2.5 まとめ

本章では、境界整合の手法に基づいた軸対称多層円柱の屈折率の再構成法を導出した。まず、E 偏波または H 偏波された平面波が入射されたときの散乱波の算定法について述べた。次に、逆問題を解くために、仮定した屈折率から算定される散乱波と観測散乱波との平均二乗誤差を定義した。これより、散乱波の平均二乗誤差の最小点を求める最適化問題を解くことによって、屈折率分布を再構成する手法が考えられる。また、観測散乱波を波動関数展開することにより、上で定義した平均二乗誤差を積分を含まない簡潔な表現にすることができた。最後に、平均二乗誤差の最小点を、円柱の層を次第に増加させながら、準ニュートン法を利用して求めるアルゴリズムを示した。

ここで述べた再構成アルゴリズムは、最適化法に基づくものであるが、以下の特徴があ

る. (i) 物体の形状を軸対称多層円柱に限定したため, 波動関数を直接境界で整合することにより順問題を厳密に解くことができる. そのため, 通常用いられているモーメント法のように, 離散化誤差を伴わず, 逆問題の解法の特徴を調べるのに適している. (ii) 最適化法に基づく手法は一般に順問題を繰り返し解かなければならず多く時間を必要とするが, 本手法では, 物体を簡単な形状に限定したために, 順問題を短時間で解くことができる. 従って, さまざまなモデルを再構成することで, アルゴリズムの特徴を調べるのが容易である.