

SMW公式による最大エントロピー像再構成アルゴリズムと 衛星「ようこう」搭載硬X線望遠鏡への応用

Maximum Entropy Algorithm of Image Reconstruction by SMW Formula and Its Application to Satellite Yohkoh Hard X-ray Telescope Imaging

岩間尚文¹⁾ 細田陽介²⁾ 北橋勝弘³⁾ 佐藤淳⁴⁾ 小杉健郎⁵⁾

Naofumi Iwama¹⁾, Yohsuke Hosoda²⁾, Katsuhiko Kitahashi³⁾, Jun Sato⁴⁾, Takeo Kosugi⁵⁾

Summary

A new algorithm of maximum entropy that is effective whenever the number of data is much smaller than that of unknowns is proposed using the Sherman-Morrison-Woodbury (SMW) formula of matrix in the scheme of Newton iteration for Lagrangian function minimization. The algorithm has been applied to the image reconstruction of solar flares with the hard X-ray telescope aboard the Satellite Yohkoh for solar observation. Result was good in computational efficiency and reliability with the change of the regularization parameter value in a wide range. For optimizing the parameter value, the generalized cross validation (GCV) that is extended to the nonlinear regularization proved useful, suggesting a weaker regularization in comparison with the criterion of χ^2 .

キーワード : 最大エントロピー法, 像再構成, ニュートン反復, SMW公式, 最小GCV規準, 衛星「ようこう」硬X線望遠鏡

Keywords : Maximum Entropy Method, Image Reconstruction, Newton Iteration, SMW Formula, Minimum GCV Criterion, Satellite Yohkoh HXT

1. はじめに

最大エントロピー法は一つの有力な逆問題解法である。信号・画像のスペクトル解析において大きな成功を収めた線形予測ないし自己回帰モデルに関わる最大エントロピー法に対して、もう一つの柱として、第1種Fredholm型積分方程式の直接的な離散化によるモデルfreeな最大エントロピー法がある¹⁾。前者がモデルに含まれる特徴量を未知数とするのに対して、後者は、未知関数の時間・位置変数を離散化し、未知関数の標本値を素直に未知数とするので計算量は大きい、モデルに関わる解の歪みが少なく、精度が要求される物

理計測に適している。この直接離散化方式は、Newman²⁾によるスペクトル解析の研究、Ables³⁾が提案しWerneckeら⁴⁾が最初の成功を得た電波望遠鏡の画像合成から始まり、計算機トモグラフィ(CT)を含む種々の逆問題のために、数学的基礎から応用まで豊富な研究がなされてきた。

直接離散化方式の最大エントロピー法は、数理的には、ペナルティ関数を用いた悪条件最小2乗解の正則化であり、対数関数を含むラグランジュ関数の最小化に帰着する。そもそも非線形最適化計算法と言え、ニュートン法が収束性の良い、2次収束の古典的方法として筆頭に挙げられる⁵⁾。幸いにも、最大エントロ

1) 情報学科

2) 福井大学工学部情報メディア工学科

3) 富山県立大学工学部電子情報工学科(現在(株)日立製作所)

4) 名古屋大学太陽地球環境研究所

5) 宇宙航空研究開発機構宇宙科学研究本部

ピー法のラグランジュ関数については、ニュートン反復のための線形方程式のヤコビアン行列が画素値の逆数を対角要素に持つため、天体画像のような暗くて広い背景を持つ画像に対して線形方程式は良条件になる。ラグランジュ関数のこの性質から、ニュートン法こそ求解のためのアルゴリズム研究の正攻法と言える。しかるに、画像の逆問題においては、ニュートン反復のための線形方程式は大規模になる。Skillingら^{6,7)}がニュートン法を避けて、簡便な計算を多数回繰り返す最急降下法において収束性の改善を行ったのに対して、Cornwellら⁸⁾はニュートン法を採用して線形方程式の係数行列を対角近似する解法を提案し、Myrheimら⁹⁾は対角近似の改善を図った。以上が、電波望遠鏡の像合成や光学望遠鏡画像の鮮明化に著しい効果をもたらした最大エントロピー法研究の理解の要点である。

本論文は、ニュートン法の路線において、科学計測においてしばしば見られるデータ少数の逆問題を取り上げる。ニュートン反復のための線形方程式がたとえ大規模であっても、データ数が少なければ、実は、線形方程式を小規模（データ数規模）の線形方程式に変換して解くことができる。文献^{8,9)}のような近似は何ら必要なく、ニュートン法の2次収束性は損なわれない。小規模方程式への変換のために、Sherman-Morrison-Woodbury (SMW) の行列公式を用いる。本論文はこの新しい解法を導出するとともに、正則化パラメータ（ラグランジュ未定乗数の逆数）の最適化のために最小GCV規準を近似的に導入し、同じくSMW公式を用いるGCVの高速計算法を導出する。そして、得られた最大エントロピー・アルゴリズムを、少数データ問題の典型例である太陽観測衛星「ようこう」搭載の硬X線望遠鏡 (HXT) の像再構成¹⁰⁻¹³⁾に適用する。本研究は、核融合研究における疎データCT撮像などのためになされたHollandら¹⁴⁾、von der Lindenら^{15,16)}の少数データの最大エントロピー法研究と同じ方向性を持つアルゴリズム研究である。

次の2.1および2.2において、最大エントロピー法の一般的な定式化およびニュートン反復による解法の性質を、画像に則して述べる。その上で、2.3において、SMW公式による少数データ問題の解法の骨子を解説する。そして、2.4において、ニュートン反復中に負値を防ぐ変数変換を入れた解法の詳細を記し、2.5において、最小GCV規準とその計算法を記す。

そして、第3節において、HXTの撮像原理を必要限りで解説したあと、観測データの解析および数値シミュレーションの結果を3.2に記す。3.2.1で変数変換によるニュートン反復の改善を確認したあと、HXT像再構成に標準的に使われてきたGull-Daniell法¹⁷⁾と比

較した新解法の特性を3.2.2に記し、3.2.3では再構成像および再構成像に関わる統計量の挙動を調べた結果を特徴的な実例を示しつつ述べる。そして、3.2.4において数値シミュレーションによって、近似GCVの振る舞いを調べ、測定値の分散を既知とする選択基準 χ^2 と比較した結果を述べる。終節の4に結論をまとめる。

2. 最大エントロピー像再構成アルゴリズム

2.1 第1種Fredholm型逆問題とペナルティ関数による解の正則化

像強度を位置ベクトル $\mathbf{r}$ の関数として表した画像 $f(\mathbf{r})$ について、次のような第1種Fredholm型積分方程式を考える。

$$\int_D h(\mathbf{r}', \mathbf{r}) f(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = g(\mathbf{r}') \quad (1)$$

ここで、 $h(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ は既知の関数、 D は積分領域、 $\mathbf{r}'$ は何らかの変数で位置ベクトルとは限らない。未知画像 $f(\mathbf{r})$ の積分変換 $g(\mathbf{r}')$ を幾つかの $\mathbf{r}'$ について観測したとき、それら観測値に基づいて画像 $f(\mathbf{r})$ を推定したい。撮像問題をこのように表現できるとき、一般には画像復元 (image recovery)、画像の鮮明化は像再生 (image restoration) とそれぞれ呼ばれるが、本論文では以後、計算機トモグラフィ (CT) の像合成にならって像再構成 (image reconstruction) と呼ぶことにする。

いま、 $g(\mathbf{r}')$ が $\mathbf{r}' = \mathbf{r}'_m$ ($m=1, 2, \dots, M$) において観測されたとき、これら M 個の観測値 $g(\mathbf{r}'_m)$ について(1)式を書けば、各観測値と未知画像 $f(\mathbf{r})$ との関係を表す M 個の式

$$\int_D h(\mathbf{r}'_m, \mathbf{r}) f(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = g(\mathbf{r}'_m) \quad (m=1, 2, \dots, M) \quad (2)$$

が得られる。さて、デジタル画像処理においては、画像を画素に分割して扱う。画素数を N として、式(1)における左辺の積分を和で近似すると、

$$\sum_{n=1}^N h(\mathbf{r}'_m, \mathbf{r}_n) f(\mathbf{r}_n) \Delta \mathbf{r}_n = g(\mathbf{r}'_m) \quad (m=1, 2, \dots, M) \quad (3)$$

が得られる。式(3)は画素値 $f(\mathbf{r}_n)$ ($n=1, 2, \dots, N$) を未知数とする線形方程式であり、次のように書ける。

$$H\mathbf{f} = \mathbf{g} \quad (4)$$

ここで、 H は $h_{mn} = h(\mathbf{r}'_m, \mathbf{r}_n) \Delta \mathbf{r}_n$ を (m, n) 要素とする $M \times N$ 係数行列、 $\mathbf{f}$ は $f_n = f(\mathbf{r}_n)$ を第 n 成分とする N 次元縦ベクトル (画像ベクトル)、 $\mathbf{g}$ は $g_m = g(\mathbf{r}'_m)$ を第 m 成分とする M 次元縦ベクトル (データベクトル) である。第1種Fredholm型の逆問題は、離散的な数値処理において一般にこのような線形方程式に帰着する。

観測値 $\mathbf{g}$ に含まれる測定誤差や係数行列 H の評価誤差を考慮して、最小2乗法

$$\min_{\mathbf{f}} \|\mathbf{H}\mathbf{f} - \mathbf{g}\|^2$$

を採用する。重みの平方根を対角要素とする対角行列 W を用いた重み付き最小2乗法

$$\min_{\mathbf{f}} \|W(\mathbf{H}\mathbf{f} - \mathbf{g})\|^2$$

を用いるときは、 WH と $H\mathbf{g}$ を改めてそれぞれ H と $\mathbf{g}$ と記せば、あとは同じである。ベクトルのノルム $\|\mathbf{H}\mathbf{f} - \mathbf{g}\|^2$ を $\mathbf{f}$ の各成分で偏微分して0と置くと、正規方程式

$$(H^T H)\mathbf{f} = H^T \mathbf{g} \quad (5)$$

が得られる。 H^T は H の転置である。よって、逆行列 $(H^T H)^{-1}$ が存在すれば解 $\mathbf{f} = (H^T H)^{-1} H^T \mathbf{g}$ が得られるが、 $M < N$ のときこの逆行列は存在しない。 $M \geq N$ のときも $(H^T H)$ は多くの場合に悪条件で、 $\mathbf{g}$ に含まれる観測誤差や H の評価誤差が大きく増幅されて解 $\mathbf{f}$ に現れる。解の正則化 (regularization) が必要である。

そこで、解 $\mathbf{f}$ の画像としての粗さを表現するペナルティ関数 $P(\mathbf{f})$ を用いて、残差の2乗平均がある値 ε^2 に等しいという制約

$$\frac{1}{M} \|\mathbf{H}\mathbf{f} - \mathbf{g}\|^2 = \varepsilon^2 \quad (6)$$

のもとに、 $P(\mathbf{f})$ を最小にする $\mathbf{f}$ を解として採用する。この最小化問題は、次のラグランジュ関数 $L_\gamma(\mathbf{f})$ の最小化に帰着する。

$$L_\gamma(\mathbf{f}) = \gamma P(\mathbf{f}) + \frac{1}{M} \|\mathbf{H}\mathbf{f} - \mathbf{g}\|^2 \quad (7)$$

ここで $\gamma (> 0)$ は未定乗数であるが、 $P(\mathbf{f})$ の方に付けて、正則化パラメータと呼ばれる (ラグランジュ未定乗数の逆数)。正の重み γ の値が大きく第1項が右辺の主要部となると、第2項 ε^2 の大きい、強く正則化された解が得られる。 $\mathbf{g}$ や H に関わる誤差の画像への現われが抑えられると同時に、画像の鋭い構造が失われる傾向が強まる。 γ 値が小さいときは逆になる。

もしも、 ε^2 値を既知とすれば、 $L_\gamma(\mathbf{f})$ を最小化する $\mathbf{f}_\gamma$ に対して

$$\frac{1}{M} \|\mathbf{H}\mathbf{f}_\gamma - \mathbf{g}\|^2 = \varepsilon^2 \quad (8)$$

となる γ 値を探す。上式の左辺は、再構成像 $\mathbf{f}_\gamma$ の $\mathbf{g}$ における残差の2乗平均である。

2.2 最大エントロピー法とニュートン反復

Tikhonov-Phillips 正則化法は $P(\mathbf{f}) = \|\mathbf{f}\|^2$ または $P(\mathbf{f}) = \|C\mathbf{f}\|^2$ (C は微分演算子) とし、それぞれ H または HC^{-1} の特異値分解で生成される基底系による級数展開で解が表される線形解法に帰着する¹⁸⁻²⁰⁾。これ

に対して、最大エントロピー法は、ペナルティ関数 $P(\mathbf{f})$ として次の量を使う非線形な正則化法である。

$$P(\mathbf{f}) = \sum_{n=1}^N f_n \ln f_n \quad (9)$$

ここで、画素値 f_n を画像の全強度 (f_n の総和) で割ったものを確率と見なし、上式の2つの f_n を置き換えると、符号が逆のエントロピー (負エントロピー) であるとみなす。また、信号理論のエントロピーにおけるパワースペクトルを画像に置き換えて、

$$P(\mathbf{f}) = - \sum_{n=1}^N \ln f_n \quad (9')$$

を用いることもある。これらエントロピーは光子統計風に画面に量子を配置すると考えたときの場合の数である²¹⁻²⁴⁾。数理解析的には、 $x \ln x$ にしろ $-\ln x$ にしろ x^2 と同様に凸関数であり、 $P(\mathbf{f})$ は f_n がすべての n に対して一定値 (一様画像) のとき最小になるという性質がある。更に、モデル画像 $\boldsymbol{\mu}$ を導入して、

$$P(\mathbf{f}) = I_{KL}(\mathbf{f}, \boldsymbol{\mu}) \triangleq \sum_{n=1}^N f_n \ln \frac{f_n}{e\mu_n} \quad (10)$$

とすると、最小クロスエントロピー法^{24, 16, 25)} と呼ばれる。 μ_n は $\boldsymbol{\mu}$ の第 n 成分である。これは画像 $\mathbf{f}$ と $\boldsymbol{\mu}$ の間の Kullback-Leibler 情報量の意味の距離であり、任意の $\mathbf{f}$ に対して $I_{KL}(\mathbf{f}, \boldsymbol{\mu}) \geq 0$ 、 $\mathbf{f} = \boldsymbol{\mu}$ のときのみ等号が成立する。式(9)の負エントロピーは、画像 $\mathbf{f}$ の一様画像 $\mu_n = e^{-1}$ ($n=1, 2, \dots, N$) からの Kullback-Leibler 距離であるとも言える。いずれの $P(\mathbf{f})$ にしろ、Tikhonov-Phillips 正則化における微分演算子 C のように画像の粗さを直接的に評価する訳ではない。正則化 (分解能を落とさない画像の平滑化) の効果を高める狙いをもって、微分画像 $C\mathbf{f}$ についてエントロピーを定義する試みもある^{26, 16)}。

さて、式(9)~(10)のペナルティ関数を式(7)に用いると、対数関数のために画像の正值が保証されると同時に、 $L_\gamma(\mathbf{f})$ の最小化のために非線形最適化計算が必要になる。Wernecke⁴⁾に始まる最急降下的アプローチは、勾配 $-\nabla L_\gamma(\mathbf{f})$ の方向に解を更新するが、暗い背景 (画素値 f_n が0近傍の正值) が大きな部分を占める画像に向けて解の更新 $\mathbf{f}^{(i+1)} = \mathbf{f}^{(i)} + \Delta \mathbf{f}$ が進むとき、修正量 $\Delta \mathbf{f}$ は増大する。エントロピー項のために、 $\partial L_\gamma(\mathbf{f}) / \partial f_n$ が $\ln f_n$ (あるいは f_n^{-1}) を含むからである。

一方、ニュートン法は良い性質を持つ。いま、式(9)の $P(\mathbf{f})$ を用いて、 $L_\gamma(\mathbf{f})$ を f_n ($n=1, 2, \dots, N$) で偏微分して0と置くと、 $\mathbf{f}$ に関する K 元連立非線形方程式

$$F(\mathbf{f}) \triangleq \frac{\partial L_\gamma(\mathbf{f})}{\partial \mathbf{f}} = \frac{1}{2} M \gamma \begin{bmatrix} 1 + \ln f_1 \\ \vdots \\ 1 + \ln f_N \end{bmatrix} + H^T H \mathbf{f} - H^T \mathbf{g} = \mathbf{0} \quad (11)$$

が得られる。ここで、 $\mathbf{0}$ は零ベクトルである。この方程式を解くためにニュートン法を採用するとき、次の反復手順が得られる。すなわち、第 i 回目の解の更新

$$\mathbf{f}^{(i+1)} = \mathbf{f}^{(i)} + \Delta \mathbf{f} \quad (12)$$

を、画像再構成では大規模な次の線形方程式の解 $\Delta \mathbf{f}$ をもって行う。

$$J(\mathbf{f}^{(i)}) \Delta \mathbf{f} = -\mathbf{F}(\mathbf{f}^{(i)}) \quad (13)$$

ここで $J(\mathbf{f}^{(i)})$ はヤコビアン行列であり、 $\partial F_m(\mathbf{f}^{(i)})/\partial f_n^{(i)}$ を (m, n) 要素とする N 次正方行列である。 $F_n(\mathbf{f}^{(i)})$, $f_n^{(i)}$ はそれぞれ N 次元ベクトル $\mathbf{F}(\mathbf{f}^{(i)})$, $\mathbf{f}^{(i)}$ の第 n 成分を表わす。式(11)より、 $J(\mathbf{f}^{(i)})$ は次式となる。

$$J(\mathbf{f}^{(i)}) = D + H^T H, D = \frac{1}{2} M \gamma \begin{bmatrix} 1/f_1^{(i)} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1/f_N^{(i)} \end{bmatrix} \quad (14)$$

上式において、暗い背景が大きな部分を占める画像に向かって解の更新が進むとき、対角行列 D の対角要素 $(M\gamma/2)(1/f_n^{(i)})$ (>0) の多くが増加する。ヤコビアン行列 $J(\mathbf{f}^{(i)})$ の対角要素にこの大きな正値が加わるから、式(13)はそれだけ良条件になり、最急降下法とは対照的に修正量 $\Delta \mathbf{f}$ は早く減少するものと期待できる。式(11)を解くためのヤコビアン行列 $J(\mathbf{f}^{(i)})$ は $L_\gamma(\mathbf{f})$ のヘッシアン行列であり、対角要素がもたらすこの良い性質は、 $L_\gamma(\mathbf{f})$ におけるエントロピー項を2回微分した結果である。式(9')の $P(\mathbf{f})$ については、ニュートン法のこの良さはない。詳細な数値研究がなされている^{27,28)}。

Skillingら^{6,7)}が逆行列計算が不用な最急降下のアプローチの中で探索方向を3つにした有力な解法を考案したのに対して、Cornwellら⁸⁾はニュートン法を有望と見て、式(13)から $\Delta \mathbf{f}$ を得るための大規模な逆行列 $J(\mathbf{f}^{(i)})^{-1}$ の計算を避ける簡便な方法として、式(14)の $H^T H$ の非対角要素をすべて0と置いた。対角近似された $J(\mathbf{f}^{(i)})$ の逆行列は単に対角要素の逆数を取るだけでよいから、収束性を犠牲にして計算が可能になる。更に、Myrheimら⁹⁾はこの簡単な対角近似で求まる $\Delta \mathbf{f}$ に補正を加えて収束性を改善した。また、 $\mathbf{f}$ に特別な変数変換を施して式(13)の解を共役勾配法（反復解法）で求める試みも行った。しかし、たとえ画像の規模が大きくてもデータが少数ならば、式(13)は解ける。

2.3 SMW公式によるニュートン反復の実現・高速化

式(13)を解くための逆行列 $(D + H^T H)^{-1}$ は、SMW公式（付録A参照）を用いて、次のように変形できる。

$$\begin{aligned} (D + H^T H)^{-1} &= [(I_N + H^T H D^{-1}) D]^{-1} \\ &= D^{-1} (I_N + H^T H D^{-1})^{-1} \\ &= D^{-1} [I_N - H^T (I_M + H D^{-1} H^T)^{-1} H D^{-1}] \end{aligned} \quad (15)$$

但し、 I_K は K 次単位行列を表す。上式において、左辺の $D + H^T H$ が N 次正方行列であるのに対して、右辺の $I_M + H D^{-1} H^T$ は M 次正方行列である。よって、 $M \ll N$ ならば、逆行列を求めるべき行列の規模が大幅に縮小される。対角行列 D の逆行列計算は前述のように問題がない。これは一つの発見である²⁹⁾。

更に、 $I_M + H D^{-1} H^T$ は正定値対称であるから（付録B参照）、次のようにすると逆行列計算は不要になる。式(13)、(14)に式(15)を用いると、

$$\Delta \mathbf{f} = -D^{-1} [\mathbf{F}(\mathbf{f}^{(i)}) - H^T \mathbf{z}] \quad (16)$$

$$\mathbf{z} = (I_M + H D^{-1} H^T)^{-1} H D^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{f}^{(i)}) \quad (16')$$

が得られる。式(16')の $\mathbf{z}$ を得るには、 M 元線形方程式

$$(I_M + H D^{-1} H^T) \mathbf{z} = H D^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{f}^{(i)}) \quad (17)$$

を解けばよい。左辺の係数行列は正定値対称であるから、変形コレスキー法を適用できる。得られた $\mathbf{z}$ を式(16)の右辺に用いれば、修正量 $\Delta \mathbf{f}$ が求まる。小さい正値 ε_c に対して $\|\Delta \mathbf{f}\|^2 \leq \varepsilon_c \|\mathbf{f}^{(i)}\|^2$ となったとき、収束とみなして反復を打ち切る。以上が本論文で提案する解法の骨子である。

反復1回において、方程式(13)を解いて $\Delta \mathbf{f}$ を求めるための乗除算の回数は、 $M \ll N$ のときSMW公式を用いることによって $O(N^3)$ から $O(M^2 N)$ に減少する。実際、 $\mathbf{F}(\mathbf{f}^{(i)})$, D および D^{-1} が計算された後の乗除算回数は次の通りである。

[I] 式(13)を直接に解く場合：係数行列 $J(\mathbf{f}^{(i)})$ も正定値対称（付録B参照）であるから変形コレスキー法を用いれば、乗除算回数は $\frac{1}{6} N^3 + O(N^2)$ である^{30,31)}。

[II] SMW公式を用いる場合：

1. $H D^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{f}^{(i)})$ の計算 $N + MN$
2. $I_M + H D^{-1} H^T$ の計算 $\frac{1}{2} M(M+1)N + MN$ (行列の対称性を利用)
3. $\mathbf{z}$ のための式(17)の求解 $\frac{1}{6} M^3 + O(M^2)$
4. 式(16)による $\Delta \mathbf{f}$ の計算 $MN + K$

よって、[II]における乗除算回数は $\frac{1}{2} (M^2 + 7M + 4)N + O(M^3)$ となる。なお、 $\mathbf{F}(\mathbf{f}^{(i)})$ 計算の乗除算回数は $N(1 + 2M)$ である。

2.4 負値防止を含む高速アルゴリズム

さて、最大エントロピー法においては、対数関数のために、解の画素値は本質的には正値が保証されるが、求解のための実際の反復においては $\Delta \mathbf{f}$ 次第で $\mathbf{f}^{(i+1)}$ の成分は負値を取り得る。このことを端的に示すために、初期解 $\mathbf{f}^{(0)}$ として高さ1の一樣画像を採用してみよう。 $f_n^{(0)} = 1$ ($n = 1, 2, \dots, N$) を式(13)の左右両辺に代入し、 $\Delta \mathbf{f}$ を求めて $\mathbf{f}^{(0)}$ に加えると、次式の $\mathbf{f}^{(1)}$ が得られる。

$$\mathbf{f}^{(1)} = \left[\frac{1}{2} M \gamma I_N + H^T H \right]^{-1} H^T \mathbf{g} \quad (18)$$

これは正則パラメータを $\frac{1}{2}\gamma$ とする Tikhonov 解である。すなわち、高さ 1 の初期画像が求める画像の高さからいかに離れていようと、次の反復解は Tikhonov 解になる。Tikhonov 解 $\mathbf{f}^{(1)}$ は線形解であるからその成分はときに大きな負値さえ取り得る²⁰⁾。

反復中に解に負値が生じるとき、次の反復解を求めるための $\mathbf{F}(\mathbf{f}^{(i+1)})$ の計算において、対数計算の前に対策が必要になる。発生した負値を小さな正值 ($\ll 1$) に置き換えてもよいが、ニュートン法の探索方向を無秩序に変えるから、一般に収束性が損ねられる。収束が得られないこともあり得る。そこで次の変数変換を導入する。

$$f_n = \exp x_n \quad (n=1, 2, \dots, N) \quad (19)$$

また、一般性のために式(10)のペナルティ関数を用いることにし、モデル画像を

$$\mu_n = \exp \xi_n \quad (n=1, 2, \dots, N) \quad (20)$$

と置くと、式(7)のラグランジュ関数は次式となる。

$$L_\gamma(\mathbf{x}) = \gamma \sum_{n=1}^N (x_n - \xi_n - 1) \exp x_n + \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \left[\sum_{n=1}^N h_{mn} \exp x_n - g_m \right]^2$$

そこで、 $\partial A(\mathbf{x}) / \partial \mathbf{x} = \mathbf{0}$ を求めて整理すると、次式を得る。

$$E(\mathbf{x}) \Phi(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad (21)$$

但し、 $E(\mathbf{x})$ は N 次対角行列

$$E(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \exp x_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \exp x_N \end{bmatrix} \quad (21')$$

であり、 $\Phi(\mathbf{x})$ は式(11)の $\mathbf{F}(\mathbf{f})$ に相当する次のベクトルである。

$$\Phi(\mathbf{x}) \triangleq \frac{1}{2} M \gamma \begin{bmatrix} -\xi_1 + x_1 \\ \vdots \\ -\xi_N + x_N \end{bmatrix} + H^T H \begin{bmatrix} \exp x_1 \\ \vdots \\ \exp x_N \end{bmatrix} - H^T \mathbf{g} \quad (21'')$$

$\exp x_n > 0$ であるから式(21)より式(11)に相当する非線形方程式

$$\phi(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \quad (22)$$

を得る。

この方程式にニュートン法を適用すると、第 i 回目の解の修正は次式による。

$$\mathbf{x}^{(i+1)} = \mathbf{x}^{(i)} + \Delta \mathbf{x} \quad (23)$$

但し $\Delta \mathbf{x}$ は N 元線形方程式

$$\Theta(\mathbf{x}^{(i)}) \Delta \mathbf{x} = -\Theta(\mathbf{x}^{(i)}) \quad (24)$$

の解であり、ヤコビアン行列 $\Theta(\mathbf{x}^{(i)})$ は

$$\begin{aligned} \Theta(\mathbf{x}^{(i)}) &= \frac{1}{2} M \gamma I_N + (H^T H) E(\mathbf{x}^{(i)}) \\ &= [D_x + H^T H] E(\mathbf{x}^{(i)}) \end{aligned} \quad (24')$$

$$D_x = \frac{1}{2} M \gamma E(\mathbf{x}^{(i)}) \quad (24'')$$

である。よって、式(24')の $\Theta(\mathbf{x}^{(i)})$ を式(24)に用いて、 $\mathbf{y} \triangleq E(\mathbf{x}^{(i)}) \Delta \mathbf{x}$ を未知数とみなすと、

$$\mathbf{y} = -(D_x + H^T H)^{-1} \Phi(\mathbf{x}^{(i)}) \quad (25)$$

となる。この $\mathbf{y}$ を SMW 公式を使って求めればよい。前と同様にして、式(25)は

$$\mathbf{y} = -D_x^{-1} [\Phi(\mathbf{x}^{(i)}) - H^T \boldsymbol{\zeta}] \quad (26)$$

$$\boldsymbol{\zeta} = (I_M + H D_x^{-1} H^T)^{-1} H D_x^{-1} \Phi(\mathbf{x}^{(i)}) \quad (26')$$

と変形されるから、行列 $I_M + H D_x^{-1} H^T$ の正定値対称性に注目して、次の小規模な M 元線形方程式を変形コレスキー法で解けばよい。

$$(I_M + H D_x^{-1} H^T) \boldsymbol{\zeta} = H D_x^{-1} \Phi(\mathbf{x}^{(i)}) \quad (27)$$

こうして得られた $\mathbf{y}$ の各成分すなわち $(\exp x_n^{(i)}) \Delta x_n$ に $1/\exp x_n^{(i)}$ を掛ければ Δx_n が求まる ($n=1, 2, \dots, N$)。 $\xi_n = -1$ ($n=1, 2, \dots, N$) と置けば、式(9)のペナルティ関数による最大エントロピー手順に帰着する。

手順をまとめれば、次の通りである。

(step 1) 正則化パラメータ γ 、初期値 $\mathbf{x}^{(0)}$ を設定する。

例えば、 $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0}$ (高さ 1 の一様画像)。

(step 2) $\mathbf{x}^{(i)}$ を式(21'')に用いて、 $\Phi(\mathbf{x}^{(i)})$ を計算する。

(step 3) 式(27)の左辺の係数行列と右辺のベクトルを計算した上で、方程式(27)を変形コレスキー法で解いて、 $\boldsymbol{\zeta}$ を求める。

(step 4) 式(26)により $\mathbf{y}$ を求めて、 $\Delta \mathbf{x}$ に変換する。

(step 5) 小さな正值 ε_c に対して、

$$\|\Delta \mathbf{x}\|^2 \leq \varepsilon_c \|\mathbf{x}^{(i)}\|^2 \text{ ならば終了。}$$

$$\|\Delta \mathbf{x}\|^2 > \varepsilon_c \|\mathbf{x}^{(i)}\|^2 \text{ ならば (step 6) へ。}$$

(step 6) 解を $\mathbf{x}^{(i+1)} = \mathbf{x}^{(i)} + \Delta \mathbf{x}$ と修正し、(step 2)に戻る。

負値対策を取ったこの手順において、反復 1 回当たりの乗除算の回数は、前節の後半で検討した結果と事実上変わらない。方程式(22)のための [I] 直接解法にしる、[II] SMW 公式による解法にしる、前節と同じ乗除算回数で $\mathbf{y}$ を得たあと、 $\mathbf{y}$ を $\Delta \mathbf{x}$ に変換する N 回の乗算が最後に加わるに過ぎない。

画像の規模が大きくてヤコビアン行列の逆計算が不可能な場合も、データ数が小さければ、データ数規模の逆計算でニュートン反復を正直に実行できることが示された。

2.5 GCVの拡張と高速計算

さて、2.3および2.4において、正則化パラメータ γ は定数として固定されている。また、 ε^2 値をどこにも使っていない。導かれたのは、定数 γ における $L_\gamma(f)$ の f に関する最小化のアルゴリズムである。

もしも ε^2 値が既知であれば、式(8)が成立する γ 値を探したとき、求める最大エントロピー解 f_γ が得られる⁶⁻⁹⁾。式(8)をMorozovの相変原理(Discrepancy Principle)とも言う^{32,33)}。しかし、 ε^2 値をどのように選ぶかが問題である。観測器において入る雑音($Hf=g$ における g の変動分)の2乗平均値を調査して ε^2 値とすればよいかと言うと、必ずしもそうではない。von der Lindenら^{15,16)}は、核融合研究におけるプラズマCT撮像においてもっと小さな ε^2 値設定(より弱い正則化)が必要であるとして、ベイズ統計学の見地から補正法を研究した。2方向にしかカメラがない情報不足の撮像システムにおいては、 Hf_γ をデータ g にもっと接近させる方が画像の意味ある構造が f_γ に現れる。このことをデータ数 M が実効的に少ない(自由度が少ない)と解釈して、観測器雑音の2乗平均値を ε^2 値とするときの条件式(8)(条件 $\chi^2=M$)を修正した。そもそも数理的には、 ε^2 (従って γ)は与えられた逆問題に必要な正則化のパラメータである。Tikhonov-Phillips正則化を見れば、観測器雑音のスペクトルと特異値系列(H の性質)との競争関係において正則化(低域フィルタ関数)が調整されるが、得られた最適解 f_γ に対する残差の2乗平均値が観測器雑音の2乗平均値に等しいという関係がいつも成立するかどうかの問題である。

本論文では、 ε^2 値(すなわち γ 値)は未知として、情報量規準でそれを決定するアプローチを採用する。さて、Tikhonov-Phillipsの線形正則化における γ 値の有力な最適化法として、最小GCV規準がある。いま、データベクトル g の1成分 g_m を除いて得られる画像を $f_\gamma^{(m)}$ とし、 $Hf_\gamma^{(m)}$ の第 m 成分を g_m に対する予測値 $\hat{g}_m^{(m)}$ とみなす。この作業を全成分($m=1, 2, \dots, M$)について行ったとき、予測誤差の2乗平均

$$PRESS(\gamma) = \frac{1}{M} \sum_{n=1}^M (\hat{g}_m^{(m)} - g_m)^2 \quad (28)$$

をPRESS (Prediction Sum of Squares) またはCross Validation (交差検証) と呼ぶ³⁴⁾。この値が小さくなる γ 値ほど良いと考える。時系列解析における赤池の最終予測誤差FPE (Final Prediction Error)^{35,36)}の拡張である。式(28)は、 H および g から直接に計算できる簡潔な形に書き直されるが、 g から Hf_γ を生成する $A_\gamma g = Hf_\gamma$ なる行列 A_γ (influence行列) が対角に近い

とき、 $PRESS(\gamma)$ は γ 依存性を失って破綻する。そこで、Wahbaら³⁷⁻³⁹⁾は式(28)の右边を A_γ の対角要素に関わる重み付き平均に修正して、計算も容易な次式のGCV (Generalized Cross-Validation, 一般交差検証)を提案した。

$$GCV(\gamma) = \frac{\frac{1}{M} \|(A_\gamma - I_M)g\|^2}{(1 - \frac{1}{M} \text{Tr} A_\gamma)^2} \quad (29)$$

ここで、 $A_\gamma = H(M\gamma I_N + H^T H)^{-1} H^T$ または $H(M\gamma C^T C + H^T H)^{-1} H^T$ であり、分母の $\text{Tr} A_\gamma$ はTikhonov-Phillips解における低域フィルタ関数を使って簡単に求まる。また、分子の量は残差の2乗平均

$$\varepsilon_1^2(\gamma) \triangleq \frac{1}{M} \|Hf_\gamma - g\|^2 \quad (30)$$

に他ならない。正則化パラメータ γ とともに式(29)の分子 $\varepsilon_1^2(\gamma)$ は単調減少するが、 Hf_γ の g への近接が行き過ぎになる頃に分母の減少が勝り始め、 $GCV(\gamma)$ は増加に転ずる。その結果として $GCV(\gamma)$ が最小値を取る γ 値を最適値として採用する。この最小GCV規準は、多くの応用において有効性が実証された(例えば文献[20])。

Wahbaら³⁹⁾が、Tikhonov-Phillips型ペナルティ関数を用いて、逆問題 $Hf=g$ における f の級数モデルを非線形モデルに置き換えるためにGCVの拡張を追求したのに対して、Amatoら⁴⁰⁾は最大エントロピー法のためにGCVの拡張を試み、1次元の熱伝導問題に用いた。彼らの提案は、式(29)における A_γ を次式のように近似することである。

$$A_\gamma \simeq H(D_f + H^T H)^{-1} H^T \quad (31)$$

$$D_f = \frac{1}{2} M \gamma \begin{bmatrix} 1/f_{\gamma,1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1/f_{\gamma,N} \end{bmatrix} \quad (31')$$

但し、対角行列 D_f の要素 $f_{\gamma,i}$ は f_γ の第 i 成分である。再構成像 f_γ は、2.3と2.4のどちらのアルゴリズムを用いて得たものでもよい。式(31)、(31')の導出を付録Cに示した。式(29)の下に記したTikhonov正則化における $A_\gamma = H(M\gamma I_N + H^T H)^{-1} H^T$ と比べると、対角行列 $M\gamma I_N$ が画素値の逆数を要素に持つ対角行列 D_f に修正されている。式(31)の A_γ は、最大エントロピー法という非線形正則化における線形近似としてのinfluence行列である。

さて、 A_γ のこの近似表現において再びSMW公式が生きる。実際、式(31)の右边は、画像問題においては大規模になる N 次対称行列の逆行列 $(D_f + H^T H)^{-1}$ を含むから、式(A.4)を用いると、 A_γ は次式となる。

$$A_\gamma \simeq Q - Q(I_M + Q)^{-1} Q, \quad Q = H D_f^{-1} H^T \quad (32)$$

ここで、 Q は M 次対称行列である($M \ll N$)。そこで、 Q の固有値分解

$$Q = UAU^T \tag{33}$$

を導入する。但し、 U は直交行列、 A は第 m 固有値 λ_m を (m, m) 要素とする対角行列である。この分解を式(32)に用いると、次式が得られる (付録D)。

$$\text{Tr}A_\gamma \simeq \sum_{m=1}^M \frac{\lambda_m}{1 + \lambda_m} \tag{34}$$

また、式(29)の分子は、式(31)の近似とこの固有値分解を用いれば、次式のように書ける (付録D)。

$$\varepsilon_2^2(\gamma) \triangleq \frac{1}{M} \left\| (A_\gamma - I_M) \mathbf{g} \right\|^2 \simeq \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \left(\frac{\mathbf{u}_m^T \mathbf{g}}{1 + \lambda_m} \right)^2 \tag{35}$$

ここで、 $\mathbf{u}_m$ は U の第 m 列ベクトルである。内積 $\mathbf{u}_m^T \mathbf{g}$ はデータ $\mathbf{g}$ を $\{\mathbf{u}_m\}$ で正規直交展開したときの第 m 成分である。

以上の考察から、最大エントロピー法におけるGCVとして、次の2つの近似表現が得られる。

$$\begin{aligned} \text{GCV}_1(\gamma) &= \frac{\frac{1}{M} \left\| H\mathbf{f}_\gamma - \mathbf{g} \right\|^2}{\left[\frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \frac{1}{1 + \lambda_m} \right]^2}, \\ \text{GCV}_2(\gamma) &= \frac{\frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \left[\frac{\mathbf{u}_m^T \mathbf{g}}{1 + \lambda_m} \right]^2}{\left[\frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \frac{1}{1 + \lambda_m} \right]^2} \end{aligned} \tag{36}$$

Amato ら⁴⁰⁾は述べていないが、近似 A_γ を用いた式(35)の $\varepsilon_2^2(\gamma)$ は式(30)の $\varepsilon_1^2(\gamma)$ (残差の2乗平均) と一般には一致しない。

また、Tikhonov-Phillipsの線形正則化においては、式(29)の下に記したように行列 A_γ は解 $\mathbf{f}_\gamma$ と無関係であり、また、式(29)の分子も像再構成を行うことなくデータ $\mathbf{g}$ から直接に求まる。そのため、GCVの γ 依存性を先に調べ、GCV最小の γ 値に対してのみ再構成像 $\mathbf{f}_\gamma$ を求める効率的な処理が可能である²⁰⁾。しかし、最大エントロピー法のために拡張された式(36)のGCVを計算するには、再構成像 $\mathbf{f}_\gamma$ を各 γ 値について常に求めなければならない。

以下、データ少数の条件 $M \ll N$ が成立する太陽観測衛星「ようこう」搭載HXTの観測データについて、再構成像とGCVの挙動を実験的に調べる。

3. 硬X線望遠鏡の画像合成への応用

3.1 硬X線望遠鏡の撮像原理と定式化

人工衛星「ようこう」搭載の硬X線望遠鏡 (HXT) は64種類の2重格子コリメータで構成される^{10, 11)}。2重格

子コリメータは、平行・等間隔に金属線を張った格子1対を一定の距離だけ離して対向させたもので、太陽から入射する硬X線平行ビームがコリメータを透過したあとの全強度を光子の計数によって測定する。太陽表面の硬X線放射強度分布を $B(x, y)$ とすると、硬X線の透過率が放射位置 (x, y) に依存することから、第 m コリメータ透過後の全強度値 $b(k_m, \theta_m)$ と画像 $B(x, y)$ との関係は次のように表される。

$$A_c \iint M(k_m r) B(x, y) dx dy = b(k_m, \theta_m) \tag{37}$$

但し、 $r = x \cos \theta_m + y \sin \theta_m$ である($m = 1, 2, \dots, 64$)。ここで、 k_m, θ_m はそれぞれ第 m コリメータの格子の周期と方向に関わる幾何学的なパラメータであり、 $M(k_m r)$ は第 m コリメータにおける透過関数である。同じ (k, θ) に対して m が奇数か偶数かによって、 $M(k_m r)$ には対向する格子相互の位置関係にかかわる余弦関数型 $M_c(k_m r)$ と正弦関数型 $M_s(k_m r)$ があるが、上式では便宜的に両者を合わせて $M(k_m r)$ と記し、 $m = 1 \sim 64$ と通し番号を付けた。 A_c は実効的な受光面積、 $\iint dx dy$ は視野にわたる積分である。155.61 arc sec四方の正方視野にわたる $M(k_m r)$ の位置依存性(modulation pattern)を、幾つかのコリメータについて図1に示した。Satoら¹³⁾によって較正されたものである。

図1において、各挿入図は64×64画素で表示され、正方領域の中央が原点 $(x, y) = (0, 0)$ である。左右の欄がそれぞれ最低レベルが0以上に底上げされた余弦・正弦関数的なパターンをなし、番号 m の増加とともに波数的パラメータ k_m が増大し、 θ_m に依存してパターンの方向が変わる。これら各パターンと太陽画像 $B(x, y)$ との内積(正確にはその A_c 倍)が観測量 $b(k_m, \theta_m)$ である。0からの底上げと余弦・正弦関数からの歪みに目をつぶれば、 $b(k_m, \theta_m)$ は $B(x, y)$ のフーリエ変換の実数部・虚数部的な量になる。電波望遠鏡におけるU-V coverageにならって、 (k, θ) 平面における64個のコリメータの配置を図2に示した。図中の各点において余弦・正弦2つの型のコリメータがある($m = 17 \sim 64$ の合計48個)。加えて、原点を要にファンビーム状に描かれた矢印は、低波数域における情報不足を補うためのコリメータ群であり、すべて $k=1$ で、一つの矢印がその θ 方向においてmodulation patternを相対的に変化させた各4つのコリメータ($m = 1 \sim 16$ の合計16個)を表わす。そのうち2つのmodulation patternが図1の最下部の左右に示されている。

与えられた数値問題は、これら64個の観測値 $b(k_m, \theta_m)$ から未知画像 $B(x, y)$ を決定することである。 $A_c M(k_m r)$ は既知とする。画像 $B(x, y)$ の正方な (x, y) 領域を64×64の正方画素に等分割し、式(37)の積分を

和に近似すれば、 $M=64$, $N=4096$ なる非常に横長な式(4)の線形方程式 $H\mathbf{f}=\mathbf{g}$ になる。 H は $h_{mn}=A_c M_{c,s}(k_m r_n) \Delta S$ を (m,n) 要素とする $M \times N$ 行列である($r_n = x_n \cos \theta_m + y_n \sin \theta_m$, ΔS : 画素の面積)。データベクトル $\mathbf{g}$ の第 m 成分 $g_m = b(k_m, \theta_m)$ は、係数行列 H の第 m 行ベクトル $\mathbf{h}_m$ と画素値 $B(x_n, y_n)$ を第 n 成分とする画像ベクトル $\mathbf{f}$ との内積 $\mathbf{h}_m \mathbf{f}$ である。

図1の modulation pattern は、 $\mathbf{h}_m$ の成分 h_{mn}

($n=1, 2, \dots, N$)を辞書的に並べて3次元表示したものである。直感的な理解として、画像ベクトル $\mathbf{f}$ を同様に表示したとき、同じ画素同志の値の積和が”画像の内積” $\mathbf{h}_m \mathbf{f}$ である。なお、 64×64 の画素分割は、図2の U-V coverageの広がりからフーリエ光学的に期待される空間分解能を考慮して選ばれた。

3.2 太陽フレアの最大エントロピー像再構成

HXTにおける64個の検出器の出力については、図1のような硬X線透過率の違いによって、SN比が異なる。特に $m=1 \sim 16$ についてはSN比が低い。そこで、2重格子の熱変動に関わるシステマ的な誤差と光子雑音とを考慮した分散値 $\sigma_m^2 (m=1, 2, \dots, M)$ が観測毎に評価されている。その情報を用いて、 $1/\sigma_m$ を (m, m) 要素とする対角行列 W を用いた重み付き最小2乗法を採用し、2.1で述べた W に関わる H と $\mathbf{g}$ の変換を施した。式(20)のモデル μ は $\xi_n = -1 (n=1, 2, \dots, N)$ とし、2.4の(step 1)～(step 6)の反復手順を適用した。収束判定においては、倍精度計算における桁数(15桁)を考慮して $\varepsilon_c = 10^{-13}$ とした。

3.2.1 負値防止のための変数変換の有効性

式(19)の変数変換による負値防止は、再構成像 $\mathbf{f}_i$ の計算において効果的であった。高さ1の様な初期画像 $\mathbf{f}^{(0)}$ から出発して、ニュートン反復とともに解 $\mathbf{f}^{(i)}$ が変化の様子が図3、図4に示されている。後述する1992年2月7日の観測データについて、 $\gamma = 3.05 \times 10^{-3}$ としたときの様子である。画像は3次元表示され、太陽表面で磁場を伴って噴出するフレアの高温部に当たる一対の硬X線放射源の存在が現れている。HXT画像の一つの典型的な例である。反復中に現れる負の画素値をその都度小さい正值(10^{-6})に置き換えた場合(負値置換)が図3、変数変換によった場合が図4である。

図3において、反復1回($i=1$)で得られた $\mathbf{f}^{(1)}$ はTikhonov解であり、再構成像は正負にわたって振動的で、ピークが低く明瞭でない。反復2回目以後は、発生した負値を 10^{-6} に置き換えたあとの $\mathbf{f}^{(i)}$ が表示されている。 $i=2, 3$ において、太陽フレアの2つのピークが早くも形成されて、ピーク値は徐々に上昇する。ペナルティ関数が対数関数を含む負エントロピーであることが、Tikhonov解から単に負値を消すだけではなく、明瞭なピーク形成の非線形効果(高分解能)をもたらすことは興味深い⁴¹⁾。しかし、ピーク周辺の背景において、反復過程で発生した負値に関わる曲面の折れ曲がりが見える。そして、打ち切り条件 $\varepsilon_c = 10^{-13}$ を満たすために反復17回($i=17$)を要した。

一方、変数変換によって得られた図4を見ると、 $i=1$

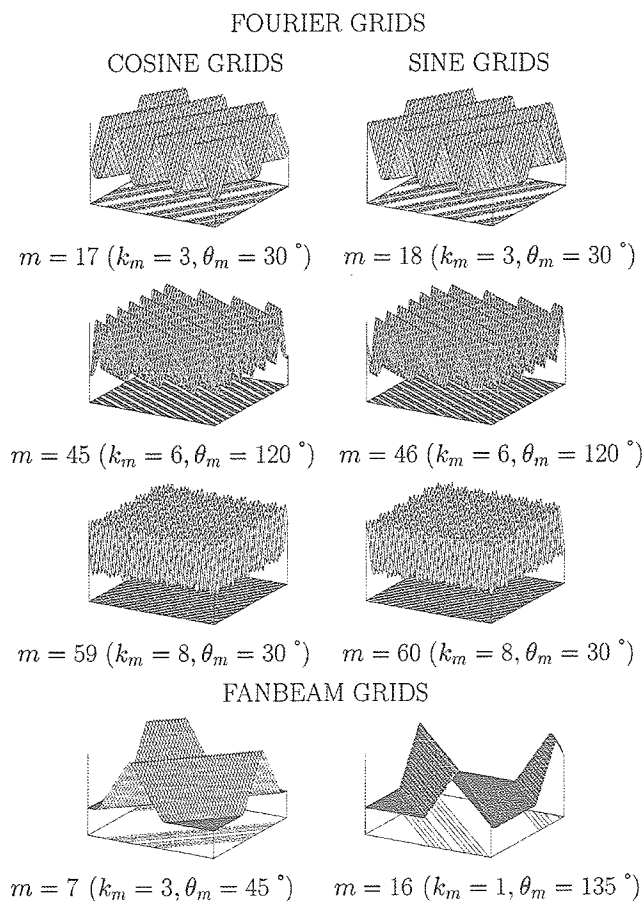


Fig. 1 Modulation patterns of HXT: $M(k_m r)$'s as functions of position (x, y) .

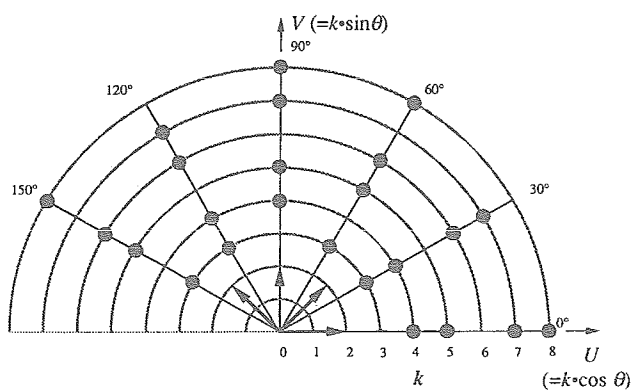


Fig. 2 Layout of the observation points in (k, θ) plane: $U = k \cos \theta$, $V = k \sin \theta$.

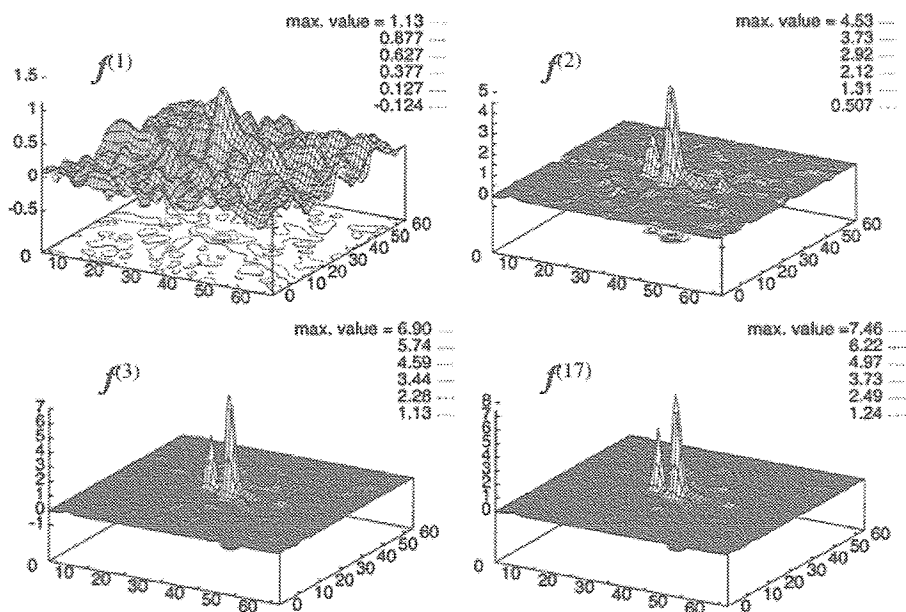


Fig. 3 Change of $f^{(i)}$ by the Newton iteration with negative-value replacement: $i=1, 2, 3, 17$ for $\gamma=3.05 \times 10^{-3}$ (3-dimensional display of $f^{(i)}$ in arbitrary unit with 64×64 pixels).

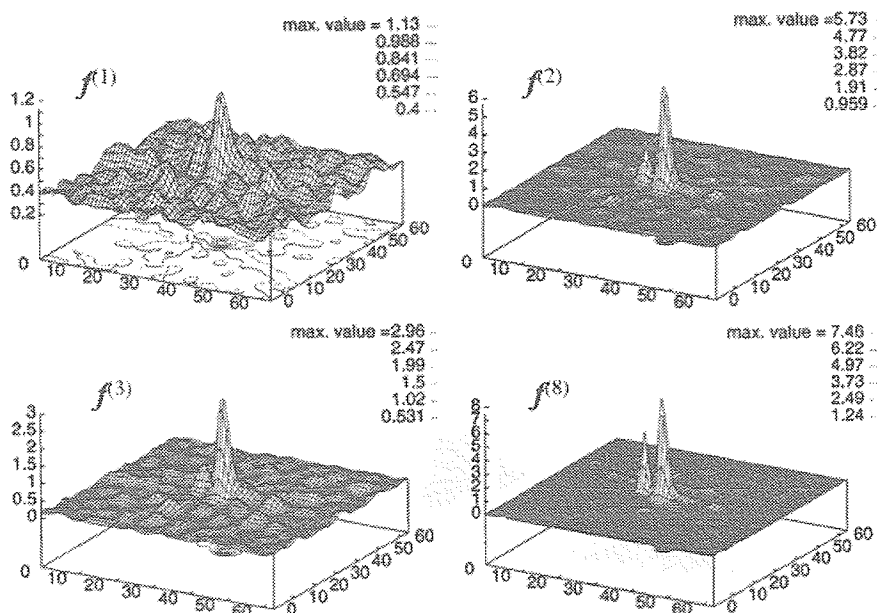


Fig. 4 Change of $f^{(i)}$ by the Newton iteration with variable-change: $i=1, 2, 3, 8$ for $\gamma=3.05 \times 10^{-3}$ (3-dimensional display of $f^{(i)}$ in arbitrary unit with 64×64 pixels).

において、画像の振動はやや減るが、ピークは低いままである。Tikhonovの線形正則化において単に負値防止の変数変換だけでは、最大エントロピー法的なピーク形成（高分解能）が得られないと見ることもできる。そして、 $i=2, 3$ において、ピークの高さを見ると図3と比べて解の改善が遅いように見えるが、実際はわずか反復8回で打ち切り条件 $\varepsilon_c=10^{-13}$ を満たした。すなわち、負値置換と比べて計算時間は約1/2に短縮した。

ニュートン反復で解くべき方程式は、式(13)にしる式(23)にしる、 D, D_x のお陰で正則化パラメータ γ が大きいほど良条件である。負値置換の2倍ほど高速という変数変換の優れた収束性は、数値解析的にむづかしくなる小さい γ 値においても変わらなかった。例えば、 $\gamma=1.0 \times 10^{-4}$ のとき、負値置換は収束までに反復26回を要したのに対して、変数変換は反復13回で収束した。更に、数値的な精度を知る観点から、収束時におい

て式(11), (22)の等式 $F(f)=0, \Phi(x)=0$, がどこまで満たされているかを知るために, 負値置換における $F(f^{(i)})$, 変数変換における $\Phi(x^{(i)})$ を評価した。その結果, 負値置換では例えば $\gamma=3.05\times 10^{-3}$ のとき $\|F(f^{(17)})\|=4.21\times 10^{-6}$ と良いが, $\gamma=1.0\times 10^{-4}$ のときは $\|F(f^{(26)})\|=1.93$ と大幅な悪化が見られた。 γ 値が小さいとき, ピークの鋭い精細な構造が再構成像に現れ(図5の挿入図を参照), 反復計算の中で生じた比較的大きな負値を正值に置換する作業が継続する形の収束が起こっている可能性がある。一方, 変数変換においては, 同じ $\gamma=3.05\times 10^{-3}, 1.0\times 10^{-4}$ のときそれぞれ $\|\Phi(x^{(8)})\|=4.61\times 10^{-4}, \|\Phi(x^{(13)})\|=1.49\times 10^{-8}$ と小さく, γ 値に依らずに良好であった。負値置換に対する変数変換のこの安定した数値的な良さは, 条件 $M>N$ のフーリエ分光においても認められた²⁵⁾。

式(19)の変数変換による変数 x_n の変域の拡大によって起こり得る数値的な障害は, 本研究の範囲で認められなかった。但し, σ_m で規格化されたデータ値に対して, 再構成像の画素値は $0<f_n<40$ であった。

3.2.2 Gull-Daniell反復との比較

国立天文台において, HXT像再構成のために標準的に使用されてきたGull-Daniell反復(付録E)と比較すると, 正則化パラメータ γ の小さい領域において, ニュートン反復の良さは顕著であった。

Gull-Daniell反復法においては, 式(E.1)から分かるように, γ 値が小さいほど反復時に大きな解の修正が

なされる。従って, γ 値が小さいほど, 収束を得るために緩和係数 α を小さく選ばなければならない。HXT像再構成においては, 例えば図5を得た観測データについて, γ 値の大きな範囲 $\gamma\geq 8.0\times 10^{-3}$ において, $\alpha=0.01$ および甘い打ち切り条件 $\varepsilon_c=0.9\times 10^{-5}$ に対して収束までの反復回数は約600回とほぼ一定であった。しかし, $\gamma=3.05\times 10^{-3}, 1.0\times 10^{-3}$ と γ 値が減少するとともに, 収束が得られる限界の α 値が $\alpha=0.007, 0.002$ と減少し, 反復回数はそれぞれ991回, 3852回と急増した。打ち切り条件をニュートン反復と同じ $\varepsilon_c=10^{-3}$ と厳しくすると, 例えば $\gamma=3.05\times 10^{-3}$ のとき反復回数は上記の約3倍に増加した。

小さい γ 値におけるGull-Daniell反復のこのような困難とは対照的に, 変数変換によるニュートン反復は実用的に必要な γ 値の全範囲において, 安定した良い収束性を示した。例えば $\gamma\geq 1.0\times 10^{-3}$ においては収束のための反復回数は8~9回, $10^{-4}\sim 10^{-5}$ の小さな γ 値についても10数回であった。但し, 反復1回当たりの計算時間は, 方程式を解くだけにGull-Daniell反復1回の80倍弱と長かった。結果的に, 収束に要する計算時間は大きい γ 値に対してGull-Daniell反復とほぼ同等であり, GCV最小の γ 値付近からニュートン反復が有利になり始め, γ 値の一層の減少に対して急激に有利になった。しかし, 得られる再構成像については, ニュートン反復とGull-Daniell反復との間に, 物理計測として重要な相違はなかった。具体的に数値を記せば, 例えばGCV最小の $\gamma=3.05\times 10^{-3}$ に対して, 再構

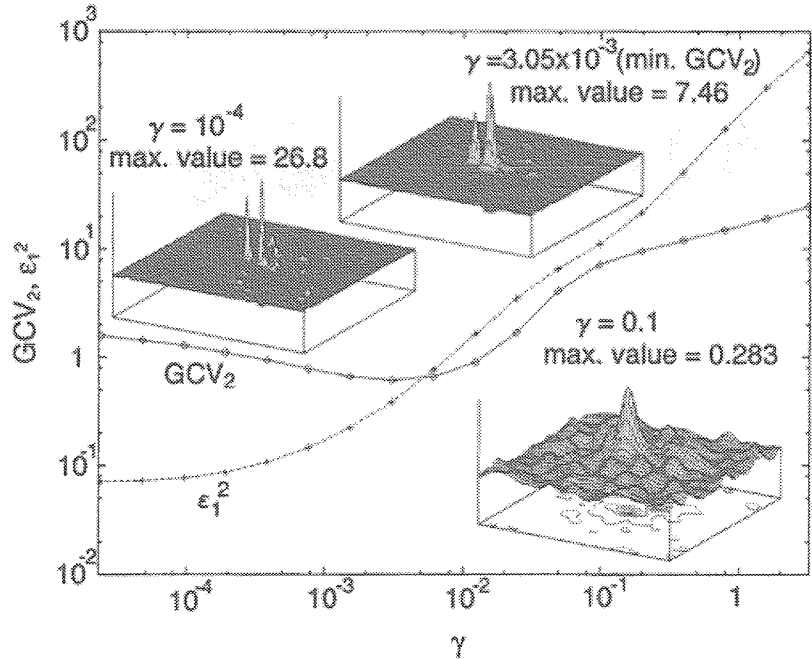


Fig. 5 Change of the reconstructed image f_r , GCV_2 and the mean square ε_1^2 with the regularization parameter γ (cut-in illustrations: 3-dim. display of f_r in arbitrary unit with 64×64 pixels). HXT data: hda920207.1127, Ch. M2, 11:54:21-11:54:27

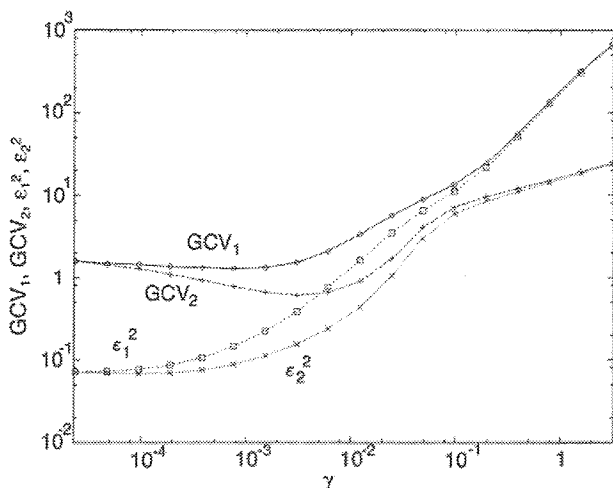


Fig. 6 γ -dependences of GCV and the mean square in two definitions: nonlinear effects of the entropy function. GCV_2 is minimized for $\gamma = 7.63 \times 10^{-4}$. HXT data: hda920207.1127, Ch. M2, 11:54:21-11:54:27

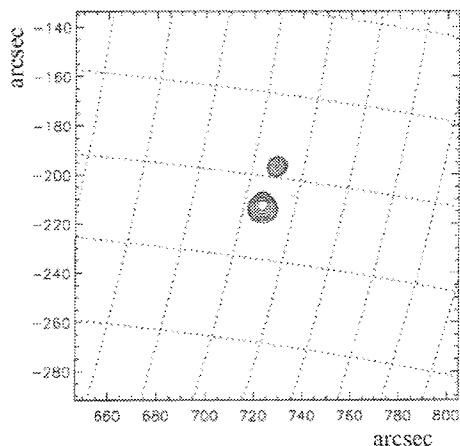


Fig. 7 Solar flare image f_γ reconstructed for $\gamma = 3.05 \times 10^{-3}$ (min. GCV_2); contours are drawn for 70.7-12.5, 8.8, 6.25, 4.4 % ($1/\sqrt{2}$) step. Dotted lines show latitudes and longitudes every 2° on solar surface. HXT data: hda920207.1127, Ch. M2, 11:54:21-11:54:27

成の最大ピーク値および量 $\rho \triangleq \frac{\|f_{\gamma, \text{Newton}} - f_{\gamma, \text{GD}}\|}{\|f_{\gamma, \text{Newton}}\|}$ を比較すると、収束判定をともに $\epsilon_c = 10^{-13}$ と厳しくすれば、最大ピーク値 7.46 は事実上一致し、 $\rho = 9.0 \times 10^{-5}$ であった。そして、Gull-Daniell 反復の判定を $\epsilon_c = 9.0 \times 10^{-5}$ に甘くすると最大ピーク値は 7.80 とやや高くなり、 $\rho = 3.4 \times 10^{-2}$ に増加した。この程度の相違に過ぎなかった。

以上のように、 γ 値の広い範囲におけるニュートン反復の安定した収束特性と、高い数値的な信頼性が明らかになった。この良い特性に依拠して、 γ の広い変

域で再構成像を調査して、 γ の最適値を探索する以下の研究を行った。

3.2.3 再構成像と近似GCVの挙動

1992年2月7日の観測データ(hda920207.1127)について、得られた像再構成特性が図5～7に示されている。正則化パラメータ γ の値に対して、再構成像 f_γ 、式(35)による $GCV_2(\gamma)$ 、および、式(29)による残差の2乗平均値 $\epsilon_2^2(\gamma)$ が変化した様子である。 γ 値の減少とともに $\epsilon_1^2(\gamma)$ が単調に減少し、 f_γ は平滑化の強い画像から弱い画像に変化し、 $GCV_2(\gamma)$ は $\gamma = 3.05 \times 10^{-3}$ において最小値を取っている。図5の挿入図に示した GCV_2 最小の画像が図4の $f^{(8)}$ である。

これら $GCV_2(\gamma)$ 、 $\epsilon_1^2(\gamma)$ と比較されるべき $GCV_1(\gamma)$ および $\epsilon_2^2(\gamma)$ の γ 依存性が、図6に示されている。 γ の小さい領域ではTikhonov-Phillips正則化におけるように、 $\epsilon_2^2(\gamma)$ は残差の2乗平均値 $\epsilon_1^2(\gamma)$ とはほぼ一致するが、 γ の増加とともに、 $\epsilon_2^2(\gamma)$ は $\epsilon_1^2(\gamma)$ から離れる。式(7)のラグランジュ関数におけるエントロピー項に起因する非線形効果と考えられる。また、図5において、 γ の増加とともに再構成像 f_γ の平滑化が強まり、 f_γ は0に向かうから、このとき、式(31)において D_γ の対角要素が正値で増大し、 A_γ は零行列に向かうから $\text{Tr } A_\gamma$ は0に近づき、 $GCV_1(\gamma)$ 、 $GCV_2(\gamma)$ はそれぞれ $\epsilon_1^2(\gamma)$ 、 $\epsilon_2^2(\gamma)$ に漸近する。計算が正しくなされたことがこれで分かる。 $\epsilon_1^2(\gamma)$ の単調性とともに、計算のチェックポイントである。

また、 $\gamma \rightarrow 0$ のとき、Tikhonov-Phillips正則化においては $M < N$ であれば $\epsilon_1^2(\gamma) \rightarrow 0$ すなわち Hf_γ は g に漸近するが、最大エントロピー法においては画素値を正とする非線形性のためか、 $\gamma \leq 10^{-5}$ に減少しても一定の正値を保つ²⁵⁾。

この γ 依存性において、 $GCV_2(\gamma)$ は $\gamma = 3.05 \times 10^{-3}$ で最小値を取るのに対して、 $GCV_1(\gamma)$ はもっと小さい $\gamma = 7.63 \times 10^{-4}$ で最小値を取った。他方、分散値 σ_m^2 ($m = 1, 2, \dots, M$) を用いた重み付き最小2乗法においては条件式(8)すなわち $\epsilon_1^2(\gamma) = 1$ が成立するのは、図5または図6から $\gamma \approx 8.0 \times 10^{-3}$ と大きい。最小 $GCV_1(\gamma)$ 規準は平滑化の弱すぎる再構成像を、規準 $\epsilon_1^2(\gamma) = 1$ は平滑化の強すぎる再構成像を与えるように見える。図7に、 $GCV_2(\gamma)$ 最小の再構成像を等高線表示した。このとき、残差は重み付き最小2乗法によって全観測値にわたってほぼ一様雑音的で性質は良さそうであった。

以上の一対の狭い硬X線源からなる画像に対して、画像的に特徴あるもう一つの典型例として、1992年11月2日に観測された広がった硬X線フレア像について、解析結果を図8～10に示す。図8のように、 γ が大きな

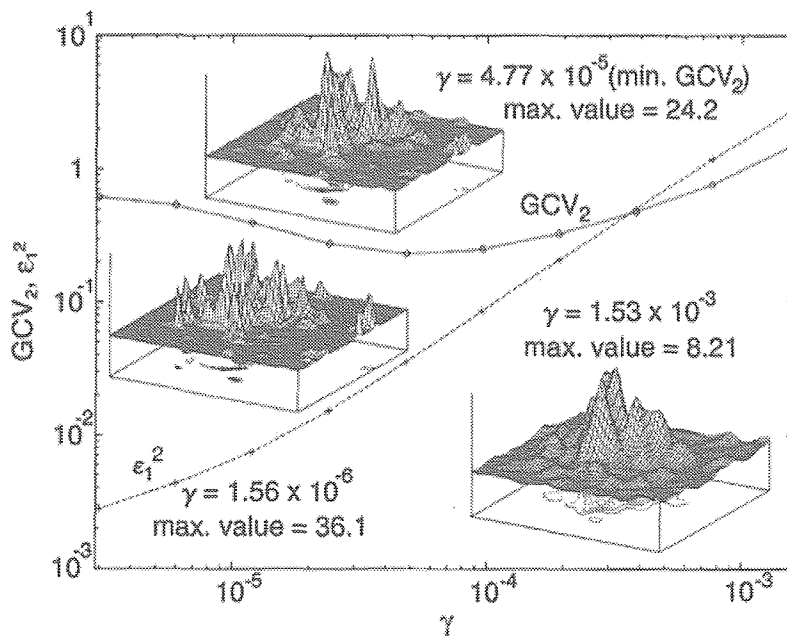


Fig. 8 Change of f_γ , GCV_2 and $\epsilon_1^2(\gamma)$ with the regularization parameter γ on another HXT data: hda921102.0434, Ch. L, 5:29:7.6-5:32:49.6. Cut-in illustrations show the 3-dim. profiles of f_γ in arbitrary unit with 64×64 pixels.

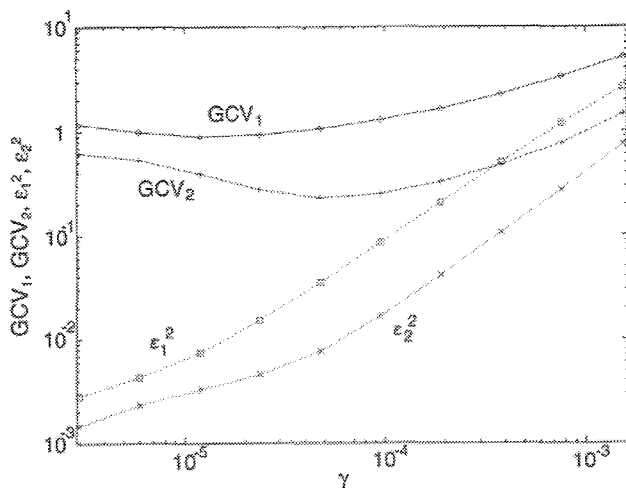


Fig. 9 γ -dependences of GCV and the mean square in two definitions on HXT data: hda921102.0434, Ch. L, 5:29:7.6-5:32:49.6. GCV_2 is minimized for $\gamma = 1.19 \times 10^{-5}$.

値から減少するとともに残差の2乗平均値 $\epsilon_1^2(\gamma)$ が単調減少し、再構成像の平滑度が下がる中で、 $GCV_2(\gamma)$ は $\gamma = 4.77 \times 10^{-5}$ で最小値を取った。他方、 $GCV_1(\gamma)$ は図9に見られる ϵ_2^2 の γ 依存性に伴ってより小さな $\gamma = 1.19 \times 10^{-5}$ において最小値を取り、平滑化の弱い傾向の再構成像を指示した。また、規準 $\epsilon_1^2(\gamma) = 1$ は $\gamma \approx 6.5 \times 10^{-4}$ で成立しており、このデータ例についても平滑化が大幅に強い再構成像を指示している。これら統計量および再構成像の γ 依存性は、前掲の1992年2

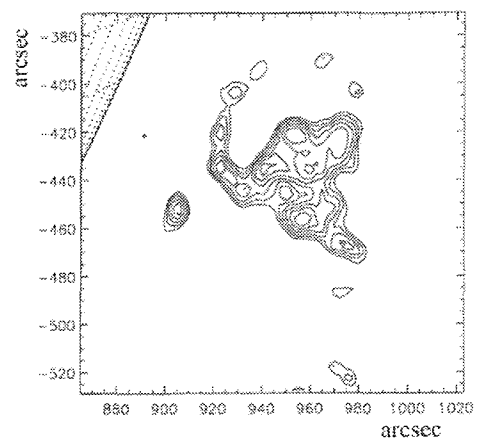


Fig. 10 Solar flare image f_γ reconstructed for $\gamma = 4.77 \times 10^{-5}$ (min. GCV_2) from HXT data: hda 921102.0434, Ch. L, 5:29:7.6-5:32:49.6; contours and latitude-longitude lines are the same with those of Fig. 4.

月7日の観測データの場合と基本的な傾向として同じであり、その他の観測データにも共通に見られる。また、規準 $\epsilon_1^2(\gamma) = 1$ が強すぎる平滑化を与えるのは、核融合研究の疎データCT撮像^{15,16)}と同じである。 $GCV_2(\gamma)$ 最小の再構成像が図8の挿入図に3次元表示、図10に等高線表示されている。

3.2.4 数値シミュレーション

再構成像および最小GCV規準の特性を調べる数値シ

ミュレーションを行った。既知の原画像 f_0 から計算される $g_0 \triangleq Hf_0$ に対して、 g_0 の各成分を期待値とするポアソン乱数を加えてデータベクトル g を生成した。像再構成には、ポアソン分布の分散 σ_m^2 ($m=1, 2, \dots, 64$)から決まる重みの行列 W を用いた。再構成像 f_r の良さを求めるために、 f_0 および g_0 に関わる誤差の大きさ

$$\delta_f^2 = \frac{1}{N} \|f_r - f_0\|^2, \delta_g^2 = \frac{1}{M} \|Hf_r - g_0\|^2 \quad (38)$$

を評価した。

図11～13は1対の狭いガウス型ピークからなる原画像

$$f_0(r) = 10.0 \exp(-\|r - r_1\|^2/\sigma^2) + 7.5 \exp(-\|r - r_2\|^2/\sigma^2) \\ r_1 = (9.85, 10.15), r_2 = (10.83, 7.35), \sigma = 0.05$$

に関する結果である。一つの乱数系列で生成されたデータ g について、再構成像および各種評価量の γ 依存性が図11, 12に示されている。 GCV_1 最小の γ 値は大幅に小さく明らかに正則化の弱過ぎる再構成像を与え、 GCV_2 最小と $\varepsilon_1^2(\gamma) = 1$ は類似の再構成像を与える。小さい γ 値における ε_1^2 と ε_2^2 の接近、大きい γ 値における GCV_1 と ε_1^2 ならびに GCV_2 と ε_2^2 の接近がやはり見られる。

注目すべきは、原画像が既知のこのシミュレーションにおいて、 GCV_1 最小の γ 値が δ_g^2 最小の γ 値に、 GCV_2 最小の γ 値が δ_f^2 最小の γ 値に、それぞれ近いことである。この傾向は、乱数の初期値を変えて統計調査した結果である図13に明瞭に表れている。表1に示すように、統計的に GCV_2 最小の γ 値は $\varepsilon_1^2(\gamma) = 1$ の γ 値とほぼ同じで、 δ_f^2 最小の γ 値よりやや大きい。

2.5で述べたように、最小GCV規準は、データ g に関する予測誤差の統計量PRESSから導かれた。疎データCT撮像に関する寺崎ら²⁰⁾のシミュレーションにおいて、Tikhonov-Phillips正則化における式(23)の $GCV(\gamma)$ の最小点は、原画像 f_0 よりも真のデータ g_0 に対する最良近似を指示する傾向があった。最大エントロピー像再構成における上記の $GCV_1(\gamma)$ の特性はこれに似ている。式(35)における分子の $\varepsilon_2^2(\gamma)$ への置き換えは、結果的に、原画像 f_0 への最良近似を指示する方向に最小GCV規準を補正したことになる。

以上のようなシミュレーション結果の特徴は、1992年11月2日観測データに似た広がった原画像に関するシミュレーションにおいても、同様に見られた。広がった原画像については、 GCV_2 最小の γ 値がやはり δ_f^2 最小の γ 値に近いのに対して、 $\varepsilon_1^2(\gamma) = 1$ の γ 値は大幅に大きかった。観測データ処理におけると同様に、最小 GCV_2 規準による γ 値と比べて、条件 $\varepsilon_1^2(\gamma) = 1$ は狭い画像に対して比較的近い γ 値を、広がった画像に対し

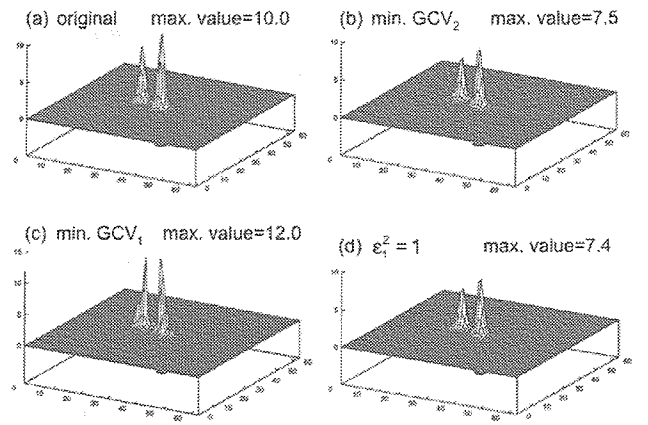


Fig. 11 Result of simulation: (a) original image f_0 , reconstructed images for (b) $\gamma = 1.38 \times 10^{-3}$ (min. GCV_1), (c) $\gamma = 1.7 \times 10^{-2}$ (min. GCV_2), and (d) $\gamma = 1.13 \times 10^{-2}$ ($\varepsilon_1^3(\gamma) = 1$), which are 3-dim. displayed with 64×64 pixels.

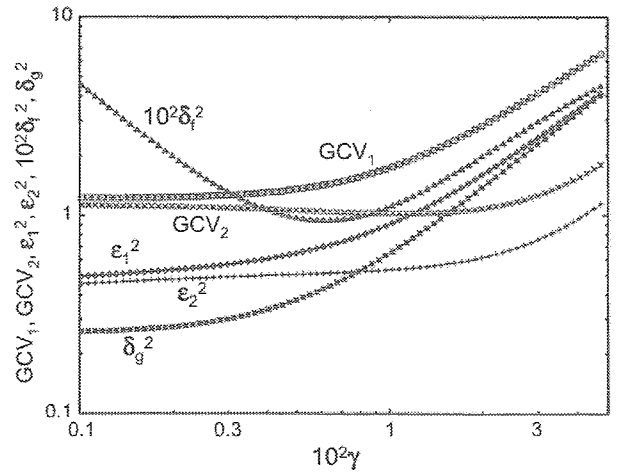


Fig. 12 Result of simulation: γ -dependences of GCV_1 , GCV_2 , ε_1^2 , ε_2^2 and the measures of estimation error δ_g^2 and δ_f^2 ; min. δ_g^2 for $\gamma = 8.69 \times 10^{-4}$, min. δ_f^2 for $\gamma = 6.10 \times 10^{-3}$.

て離れた γ 値を指示した。

一方、von der Lindenら^{15,16)}による条件 $\varepsilon_1^2(\gamma) = 1$ (条件 $\chi^2 = M$)の補正を本論文の定式化に照らして

$$\varepsilon_1^2(\gamma) + \frac{1}{M} (2 + \gamma \sum_{n=1}^N f_n \ln f_n) \simeq 1 \quad (39)$$

とすると、左辺の $\varepsilon_1^2(\gamma)$ がかさ上げされる結果として、この式を満たす γ 値は $\varepsilon_1^2(\gamma) = 1$ の γ 値よりも減少する。上式のエントロピー項のために、この γ 値減少効果は広がった画像に対して大きい。図5, 図8の観測データに対して、上で得られた規準 $\varepsilon_1^2(\gamma) = 1$ の γ 値 8.0×10^{-3} , 6.5×10^{-4} は、式(39)によってそれぞれ 2.0×10^{-3} , 1.0×10^{-4} に補正され、最小 GCV_2 規準の γ 値

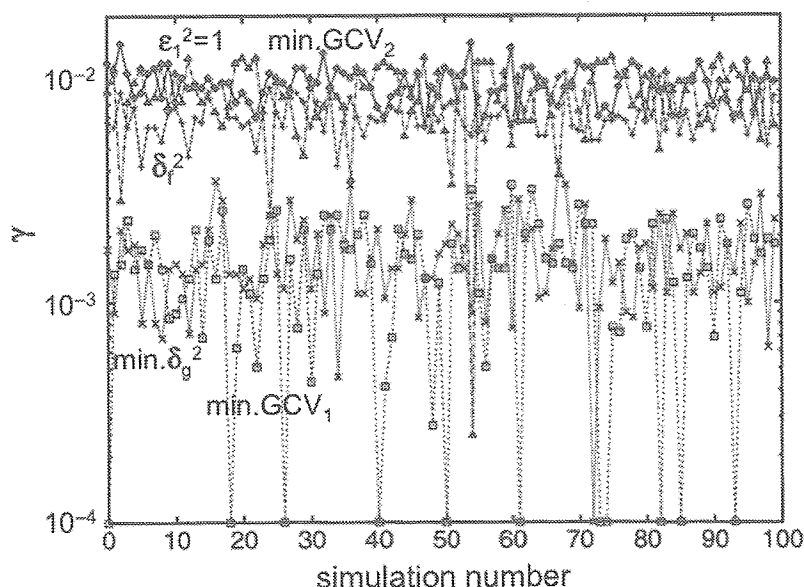


Fig. 13 Statistical change of the γ values that are selected by criterions of min. GCV_1 ($\square$), min. GCV_2 ($\diamond$), $\varepsilon_1^2(\gamma)=1$ ($\triangle$), min. δ_g^2 ($\times$) and min. δ_f^2 ($+$); the initial value of random number was changed 100 times. Marks at the bottom ($\gamma=10^{-4}$) indicates that GCV_1 and δ_g^2 failed in taking minimum, monotonically decreasing with γ in the range of $\gamma \geq 10^{-4}$.

に近づく。図11～13のシミュレーションにおいては、式(39)による γ 値は 2.0×10^{-3} であった。

Table 1 Averages and variances of the γ values that were selected with three criterions in the simulation of Fig. 13.

criterion	average of γ	variance of γ
min. δ_f^2	7.2×10^{-3}	2.1×10^{-6}
min. GCV_2	9.8×10^{-3}	3.6×10^{-6}
$\varepsilon_1^2(\gamma)=1$	9.0×10^{-3}	7.2×10^{-6}

4. まとめ

最大エントロピー法について、観測データ数 M が画素数 N よりずっと小さい条件を生かす効率的なニュートン反復アルゴリズムを考案し、太陽観測衛星「ようこう」搭載の硬X線望遠鏡 (HXT) の像再構成に適用して、アルゴリズムの有効性を確かめた。

新しいアルゴリズムの要点は、次の通りである。

[I] 逆問題の一般解法たる最大エントロピー法の定式化において、ラグランジュ関数 $L_\gamma(f)$ の最小化すなわち非線形方程式 $\partial L_\gamma(f)/\partial f=0$ の解法として、ニュートン法を採用する。そして、[II] 解更新のための大規模な N 元線形方程式にSMW公式を適用して、小規模な M 元線形方程式に変換し、係数行列の正定値性を利

用して変形コレスキー法で解く。[III] この解法によって、たとえ大規模画像でもデータ数が小さい限り、大規模画像を求めるためのニュートン法を何の近似もなく本来の姿において実行できる。[IV] 正則化パラメータの最適化のためにGCVを近似的に導入するとき、大規模な逆行列を含むinfluence行列にSMW公式を用いると、データ数規模の計算に変換できる。

そして、HXTの観測データ処理および数値シミュレーションによって、次のような知見を得た。

(a) ニュートン反復における負値を防ぐための、指数関数による変数変換は有効であった。小さい正值への置換と比べて、収束の速さと解の精度が改善された。

(b) Gull-Daniell反復と比べて、正則化パラメータが小さいときも確実に収束が得られ、像再構成が可能な正則化パラメータの領域が大幅に広がった。Gull-Daniell反復の収束が得られる正則化パラメータの範囲では、再構成像は実用的にGull-Daniell法と同等であった。

(c) ニュートン反復のこの良い特性によって、正則化パラメータの広い変域で最大エントロピー再構成像を調べ、最適点を探すことが可能になった。

(d) エントロピー関数の非線形性によって、分子に残差の2乗平均を用いる $GCV_1(\gamma)$ と分母・分子ともに式(31)の近似を用いる $GCV_2(\gamma)$ の間に差が発生する。 $GCV_1(\gamma)$ の最小化は原画像 f_0 の積分変換 Hf_0 への最適近似を示すのに対して、 $GCV_2(\gamma)$ の最小化は原画像 f_0

への最適近似を指示する傾向が実験的に明らかになった。

(e) 疎データCTにおける同様に χ^2 条件は過大な正則化パラメータを指示したのに対して、 $GCV_2(\gamma)$ を用いる最小GCV規準はより小さい正則化パラメータを最適とする。 χ^2 条件との差は広がった画像に対して大きかった。 $GCV_2(\gamma)$ は、データの分散値が未知なとき、正則化パラメータの選択のために参照すべき統計量たり得る。

有用な一つの最大エントロピー・アルゴリズムが得られた。

謝辞 本研究のために数理解析の観点から助言を賜った南山大学教授杉浦洋教授，ならびに，シミュレーションにおいて貴重な貢献を頂いた富山県立大学正和武志氏（現在(株)メイテック）に対して，厚く謝意を表します。

参考文献

- 1) N. Wu: "The Maximum Entropy Method," Springer-Verlag, Berlin, 1997.
- 2) W.I. Newman: "Extension to the Maximum Entropy Method," *IEEE Trans. on Information Theory*, **IT-23** (1977) 89-93.
- 3) J.G. Ables: "Notes on Maximum Entropy Spectral Analysis", *Astron. Astrophys. Suppl.*, **15** (1974) 383-393.
- 4) S.J. Wernecke and L.R. d'Addario: "Maximum Entropy Image Reconstruction," *IEEE Trans. on Computers*, **C-26** (1977) 351-364.
- 5) 杉浦洋: "数値計算の基礎と応用—数値解析学への入門," サイエンス社, 東京, 1997.
- 6) S.F. Burch, S.F. Gull, and J. Skilling: "Image Reconstruction by a Powerful Maximum Entropy Method," *Computer Vision, Graphics, and Image Processing*, **23** (1983) 113-128.
- 7) J. Skilling and R.K. Bryan: "Maximum Entropy Image Reconstruction: General Algorithm," *Mon. Not. R. Astr. Soc.*, **211** (1984) 111-124.
- 8) J. Cornwell and K.F. Evans: "A Simple Maximum Entropy Deconvolution Algorithm," *Astron. Astrophys.* **143** (1985) 77-83.
- 9) J. Myrheim and H. Rue: "New Algorithms for Maximum Entropy Image Restoration," *CVGIP: Graphical Models and Image Processing*, **54** (1992) 223-238.
- 10) T. Kosugi, K. Makishima, T. Murakami, T.

- Sakao, T. Dotani, M. Inda, K. Kai, S. Masuda, H. Nakajima, Y. Ogawara, M. Sawa, and K. Shibasaki: "The Hard X-ray Telescope (HXT) for the Solar-A Mission," *Solar Physics*, **136** (1991) 17-36.
- 11) T. Sakao: "Characteristics of Solar Flare Hard X-ray Sources as Revealed with the Hard X-ray Telescope aboard the Yohkoh Satellite," *Ph.D. Thesis, Univ. of Tokyo*, March 1994.
- 12) S. Masuda: "Hard X-ray Sources and the Primary Energy Release Site in Solar Flares," *Ph.D. Thesis, Univ. of Tokyo*, March 1994.
- 13) J. Sato and T. Kosugi: "Improvement of Yohkoh Hard X-ray Imaging," *Publ. Astron. Soc. Japan*, **51** (1999) 127-150 and Plates 1-5.
- 14) A. Holland and G.A. Navratil: "Tomography Analysis of the Evolution of Plasma Cross Sections," *Rev. Sci. Instrum.*, **57** (1986) 1557-1566.
- 15) W. von der Linden: "Maximum-Entropy Data Analysis," *Appl. Phys.*, **A60** (1995) 155-165.
- 16) K. Ertl, W. von der Linden, V. Dose, and A. Weller: "Maximum Entropy Based Reconstruction of Soft X Ray Emissivity Profiles in W7-AS," *Nuclear Fusion*, **36** (1996) 1477-1488.
- 17) S.F. Gull and G.J. Daniell: "Image Reconstruction from Incomplete and Noisy Data," *Nature*, **272** (1978) 686-690.
- 18) A.N. Tikhonov: "Solution of Incorrectly Formulated Problems and the Regularization Method," *Soviet Math.*, **4** (1963) 1035-1038.
- 19) D.L. Phillips: "A Technique for the Numerical Solution of Certain Integral Equations of the First Kind," *J. Assoc. Comput. Mach.*, **9** (1962) 84-97.
- 20) 寺崎奈緒美, 岩間尚文, 細田陽介: "Tikhonov-P hillips正則化とGCVによる疎データCT像再構成—プラズマ画像への応用—," 電子情報通信学会論文誌 D-II, **J81-D-II** (1998) 93-100.
- 21) R. Kikuchi and B.H. Sofer: "Maximum Entropy Image Restoration. I. The Entropy Expression," *J. Opt. Soc. Am.*, **67** (1977) 1656-1665.
- 22) B.R. Frieden: "Statistical Models for the Image Restoration Problem," *Computer Graphics and Image Processing*, **12** (1980) 40-59.
- 23) E.T. Jaynes: "Prior Probabilities," *IEEE Trans. on Systems Science and Cybernetics*, **SSC-4** (1968) 227-241.
- 24) D.R. Farrier: "Jaynes' Principle and Maximum

- Entropy Spectral Estimation," *IEEE Trans. on Acoustics, Speech, and Signal Processing*, ASSP-31 (1984) 1176-1183.
- 25) A. Isayama, N. Iwama, T. Showa, Y. Hosoda, N. Isei, S. Ishida, and M. Sato: "Maximum Entropy Estimation of Electron Cyclotron Emission Spectra from Incomplete Interferograms in ELMy H-mode Tokamak Experiment," *Jpn. J. Appl. Phys.*, **42** (2003) 5787-5796.
- 26) G. Landl and R.S. Anderssen: "Non-negative Differentially Constrained Entropy-like Regularization," *Inverse Problem*, **12** (1996) 35-53.
- 27) D.L. Donoho, I.M. Johnstone, J.C. Hoch, and A.S. Stern: "Maximum Entropy and the Nearly Black Object," *J. R. Statist. Soc. B*, **54** (1992) 41-81.
- 28) H. W. Engl and G. Landl: "Convergence Rates for Maximum Entropy Regularization," *SIAM J. Numer. Anal.*, **30** (1993) 1509-1536.
- 29) Y. Hosoda, K. Kitahashi, N. Iwama, J. Sato, and T. Kosugi: "A New Algorithm of Maximum Entropy and Its Application to the Satellite Yohkoh Hard X-ray Telescope Imaging," *Proc. of the 24th Int. Conf. on Phenomena in Ionized Gases*, vol. 4, pp. 213-214, (July 17-22, 2001, Nagoya).
- 30) 戸川隼人: "マトリクスの数値計算," オーム社, 東京, 1971, p.59.
- 31) N.J. Higham: "Accuracy and Stability of Numerical Algorithms," SIAM, Philadelphia, 2002, p.197.
- 32) V.A. Morozov: "The Error Principle in the Solution of Operational Equations by the Regularization Methods," *USSR Comput. Math. and Math. Phys.*, **8** (1968) 63-87.
- 33) 細田陽介: "悪条件線形方程式の数値解析的研究," 名古屋大学工学部博士学位論文 (1994年3月).
- 34) D.M. Allen: "Mean Square Error of Prediction as a Criterion for Selecting Variables," *Technometrics*, **13** (1971) 469-475.
- 35) H. Akaike: "Fitting Autoregressive Models for Prediction," *Ann. Inst. Statist. Math.*, **21** (1969) 243-247.
- 36) 尾崎統, 北川源四郎: "時系列解析の方法," 朝倉書店, 東京, 1998, p.84.
- 37) G.H. Golub, M. Heath, and G. Wahba: "Generalized Cross-Validation as a Method for Choosing a Good Ridge Parameter," *Technometrics*, **21** (1979) 215-223.
- 38) P. Craven and G. Wahba: "Smoothing Noisy

Data with Spline Functions," *Numer. Math.*, **31** (1979) 377-403.

- 39) G. Wahba: "Spline Models for Observational Data," SIAM, Philadelphia, 1990.
- 40) U. Amato and W. Hughes: "Maximum Entropy Regularization of Fredholm Integral Equations of the First Kind," *Inverse Problem*, **7** (1991) 793-808.
- 41) 荒井直樹: "衛星「ようこう」硬X線望遠鏡像再構成における線形ならびに非線形正則化法の特性," 富山県立大学工学部修士学位論文, Mar. 1998.

付録A SMW公式

大きさ $M \times N$ の3つの行列 A , B , X において, A , B を既知とし, 次の関係式を満たす X を考える。

$$(I_N + A^T B)^{-1} = I_N + A^T X \quad (\text{A.1})$$

この関係から

$$(I_N + A^T B)(I_N + A^T X) = I_N + A^T(B + X + BA^T X) = I_N \quad (\text{A.2})$$

となるので, 右側の等式から $B + X + BA^T X$ は零行列でなければならない。よって, 求める X は

$$X = -(I_M + BA^T)^{-1} B \quad (\text{A.3})$$

となる。この X を(A.1)式に用いれば, SMW公式

$$(I_N + A^T B)^{-1} = I_N - A^T(I_M + BA^T)^{-1} B \quad (\text{A.4})$$

が得られる。但し, (A.4)式においては, $I_M + BA^T$ が正則であることを想定している。以上の導出から分かる通り, 公式(A.4)においては M と N の大小関係は任意である。

付録B 対称行列 $I_M + HD^{-1}H^T$ の正定値性

$\mathbf{0}$ でない任意の M 次元縦ベクトル $\mathbf{x}$ 対して, 次の量を考える。

$$\mathbf{x}^T [I_M + HD^{-1}H^T] \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{x} + \mathbf{x}^T HD^{-1}H^T \mathbf{x} \quad (\text{B.1})$$

右辺第1項は $\sum_{m=1}^M x_m^2 > 0$ である。また, 右辺第2項における D^{-1} の対角要素は(14)式から, 反復解において画素値の正値が保証される限り, すべて正値である。よって, 右辺第2項は次のように変形される。

$$\mathbf{x}^T HD^{-1}H^T \mathbf{x} = \mathbf{x}^T HD^{-1/2} D^{-1/2} H^T \mathbf{x} = \|D^{1/2} H^T \mathbf{x}\|^2 \quad (\text{B.2})$$

H がフルランクであれば, $H^T \mathbf{x} = \mathbf{0}$ となるのは $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ のときのみである。よって $\|D^{1/2} H^T \mathbf{x}\|^2 > 0$ となり, 対称行列 $HD^{-1}H^T$, 従って $I_M + HD^{-1}H^T$ は正定値である。なお, 正定値対称行列は正則である。物理計測のための実際の数値計算において, H は常にフルランクとみなしてよい。

同様にして、 $\mathbf{x}^T(D+H^TH)\mathbf{x}=\|D^{1/2}\mathbf{x}\|^2+\|H\mathbf{x}\|^2$ と書き直せることから行列 $D+H^TH$ も正定値対称である。

以上の証明において、行列 D を D_x に置き換えても問題は無い。

付録C 最大エントロピー法における A_γ の近似

Tikhonov-Phillipsの線形正則化では、解 $\mathbf{f}_\gamma$ は $\mathbf{g}$ に左から線形演算子を施した形になるから、 $H\mathbf{f}_\gamma$ も同様になり、 $H\mathbf{f}_\gamma=A_\gamma\mathbf{g}$ のように $\mathbf{g}$ に依存しない A_γ をくくり出せる。その結果として、式(30)の $\varepsilon_1^2(\gamma)$ が式(29)の分子と一致する。しかし、最大エントロピー法では、解 $\mathbf{f}_\gamma$ は $\mathbf{g}$ の非線形関数である。そこで、 $[A_\gamma]_{ij}$ は $[H\mathbf{f}_\gamma]_i$ の g_j に対する感度であると解釈して、 $H\mathbf{f}_\gamma$ を変数 $\mathbf{g}$ に関してマクローリン展開し、1階微分の項まで取って $A_\gamma\mathbf{g}$ と置く。この操作によって、 M 次正方行列 A_γ の (i, j) 要素は

$$[A_\gamma]_{ij} \simeq \partial[H\mathbf{f}_\gamma]_i / \partial g_j \quad (\text{C.1})$$

と近似される。

上式における $\mathbf{f}_\gamma$ は、例えば2.4の解法であれば、非線形方程式(22)を満たす。式(21')の $\Phi(\mathbf{x})$ と式(19)の変数変換に注意して、式(22)の両辺を $g_j(j=1, 2, \dots, M)$ で偏微分すると、直ちに次の関係が得られる

$$H^T = [D_f + H^TH]^{-1}G \quad (\text{C.2})$$

但し、 G は $\partial f_{\gamma,i} / \partial g_j$ を (i, j) 要素とする $N \times M$ 行列である。式(C.1)の右辺は行列 HG の (i, j) 要素であるから、式(C.2)を変形して得られる HG がすなわち A_γ である。

$$A_\gamma \simeq HG = H(D_f + H^TH)^{-1}H^T \quad (\text{C.3})$$

が得られた。

付録D 固有値分解による近似GCVの表現

式(33)の固有値分解を式(32)に用い、

$$(I_M + UAU^T)^{-1} = [U(I_M + A)U^T]^{-1} \\ = U(I_M + A)^{-1}U^T$$

と書き直せることに注意すると、次式を得る。

$$A_\gamma \simeq U[A - A(I_M + A)^{-1}A]U^T \quad (\text{D.1})$$

ここで、正規直交行列の性質 $UU^T = U^TU = I_M$ を用いた。式(D.1)において、 U と U^T に挟まれた行列 $A_A \triangleq A - A(I_M + A)^{-1}A$ は対角であるから、式(D.1)すなわち

$$A_\gamma \simeq UA_AU^T \quad (\text{D.1'})$$

は行列 A_γ の固有値分解に他ならない。このとき、 $\text{Tr } A_\gamma$ は固有値(A_A の対角要素)の和であるから、次式となる。

$$\text{Tr } A_\gamma \simeq \sum_{m=1}^M \left(\lambda_m - \frac{\lambda_m^2}{1 + \lambda_m} \right) \quad (\text{D.2})$$

すなわち、式(34)が得られる。

他方、式(35)の左辺の量 $\varepsilon_2^2(\gamma)$ は式(D.1')を用いると、次のように変形できる。

$$\frac{1}{M} \|(A_\gamma - I_M)\mathbf{g}\|^2 \simeq \frac{1}{M} \|(UA_AU^T - I_M)\mathbf{g}\|^2 \\ = \frac{1}{M} \|URU^T\mathbf{g}\|^2 = \frac{1}{M} \|RU^T\mathbf{g}\|^2 \quad (\text{D.3})$$

ここで、 $R \triangleq A_A - I_M$ は $-1/(1 + \lambda_m)$ を (m, m) 要素とする対角行列である。また、最後の式の変形にパルスヴァル等式に相当する $\|U\mathbf{p}\|^2 = \|\mathbf{p}\|^2$ を用いた（但し $\mathbf{p} = RU^T\mathbf{g}$ ）。 $U^T\mathbf{g}$ はデータ $\mathbf{g}$ の基底系 U における展開係数ベクトル（ $\mathbf{u}_m^T\mathbf{g}$ を第 m 成分とする縦ベクトル）であるから、式(35)の右辺の表現が得られた。

なお、行列 Q の固有値分解において、 U を求めることなく、 $GCV(\gamma)$ に必要な固有値 λ_m および $\mathbf{u}_m^T\mathbf{g}$ ($m=1, 2, \dots, M$)のみを計算すれば、乗除算回数はそれぞれ $O(M^3)$ および $O(M^2)$ であり、 $M \ll N$ のときGCVの計算量は再構成像を求めるニュートン反復の計算量と比べて小さい。

付録E Gull-Daniellアルゴリズム

解くべき非線形方程式(11)において、解 $\mathbf{f}$ をひとまず形式的に次のように書く。

$$f_n = \exp \left\{ -1 - \frac{2}{M\gamma} \sum_{m=1}^M h_{mn} \left(g_m - \sum_{n=1}^N h_{mn} f_n \right) \right\} \\ (n=1, 2, \dots, N) \quad (\text{E.1})$$

上式の右辺には解 $\mathbf{f}$ が含まれている。右辺の $\mathbf{f}$ に初期値 $\mathbf{f}^{(0)}$ を代入して得られる左辺の $\mathbf{f}$ を $\mathbf{f}^{(1)}$ として、右辺に代入し直す。この操作を反復する¹⁷⁾。 $\mathbf{f}^{(0)}$ は例えば高さ1の一樣画像とする。解の更新において収束を得やすくするために、緩和係数 α を用いて

$$f_n^{(i+1)} = (1 - \alpha)f_n^{(i)} + \\ \alpha \exp \left\{ -1 + \frac{2}{M\gamma} \sum_{m=1}^M h_{mn} \left(g_m - \sum_{n=1}^N h_{mn} f_n^{(i)} \right) \right\} \\ (n=1, 2, \dots, N) \quad (\text{E.2})$$

とし、 $0 \leq \alpha \leq 1$ に選ぶ¹¹⁾。電波望遠鏡においては、係数行列 H は多数の行が抜けた離散フーリエ変換(DFT)行列であり、 $\sum_{n=1}^N h_{mn} f_n^{(i)}$ は $H\mathbf{f}^{(i)}$ の第 m 成分であるから、この計算に高速フーリエ変換(FFT)が使える。順計算 $H\mathbf{f}^{(i)}$ を反復して、残差を見ては解を修正する方式の逆問題解法である。収束性の保証はないが、線形方程式を解くあるいは逆行列を求めるという意味の逆計算が含まれない。