

論文の要旨

題目 静的光散乱法による粒子径分布測定の問題に関する研究

(A Study of the Linear Inverse Problem of Particle Size Distribution Measurement Using Static Light Scattering Method)

氏名 菅澤 央昌

本論文では、静的光散乱による粒子径測定の高精度化、高分解能化を目的とし、この目的について、数学的側面から議論した。まず、静的光散乱法（レーザー回折/散乱法とも呼ばれる）による粒子径測定について、その概要を示す。この上で、本論文では同法の弱点であるピーク検出力、分解能の向上を目的とすることを述べた。2章では、静的光散乱による粒子径測定を線形逆問題として捉え、この問題の特性を論じた。特に行列の特異値分解を用いて、解の不安定性が発生する数学的構造を、特異値の分布から明らかにした。さらに、ノイズなどによって情報の欠落が発生した場合、どのような現象が発生するかを、特異ベクトルの形状から推察した。3章では、直接法、反復法といった線形逆問題の解法を紹介した。特にEM法についてその手法や特性を論じ、さらにEM法の派生手法を組み合わせた新しい解法を導入した。最後に、これらの解法に対して計算機実験（シミュレーション）を用いて評価し、各解法によって得られた残差の分布を比較することにより、新しい解法の優位性を示した。そして、この新しい解法により、従来の静的光散乱法では測定が困難であった、多峰性分布のサンプルについても、測定する能力が十分に得られることを示した。各章のより詳細な説明を以下に記載する。

1章では、背景となる粒子径測定の問題と関連研究を紹介し、本稿で解決すべき問題を明らかにした。特に主たるテーマとなる静的光散乱法の理論と、それを用いた粒子径分布測定について、その概要を述べた。同法の欠点としては、高濃度のサンプルや吸光特性を有するサンプルでは測定できないこと、画像解析法などと比較するとピーク検出力や分解能に劣ることなどが挙げられる。本論文ではこの欠点の克服を目的とし、その能力を評価する対象として、画像解析法で標準化が見込まれる狭小分布のサンプルを混合した多峰性分布を有するサンプル、すなわちピケットフェンスサンプルを用いることを述べた。

2章では、静的光散乱法による粒子径測定を線形逆問題として捉え、それらの特性を議論した。静的光散乱の線形逆問題は、悪条件問題として知られているが、その詳細な意味を応答関数行列の特異値分解により議論した。悪条件問題とは、1. 解の存在 2. 解の一意性 3. 解の安定性のうち、1つ以上が欠落している問題を指す。静的光散乱法の問題は、特に3.の解の安定性を欠くという点を、応答関数行列の特異値の分布から示した。また、電気的なノイズや迷光といった測定上の問題によって、入力情報が欠落すると、所謂ゴーストピークなどと呼ばれる不適切な分布が発生したり、ある粒子径領域の分布が算出されなかったりする場合がある。この現象を、特異ベクトルの形状から説明した。

3章では、実際に問題を解くための議論を展開した。まず、線形逆問題を解くためのさまざまな解法を述べた。中でも、EM法と呼ばれる手法について、その特徴と背景を詳しく論じ、さらに、EM法を基にした新しい解法を提案した。続いて、これらの紹介した解法のうち、2章で議論した問題の特性から、有用と思われるいくつかの解法の安定性および精度を、計算機実験を用いて評価した。この実験では、1章で紹介した多峰性分布、および単峰・双峰の対数正規分布を仮定し、どれだけ理想の分布に近い分布を算出できたかで、各解法のパフォーマンスを測った。この結果より、新たに提案した解法の優位性と、今後の課題を結論として述べた。

4章では、1・2・3章で得られた知見を総括し、本論文で判明したことを述べた。併せて、今後の研究の余地が残されている領域についても触れた。