様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科研費
KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　６ 年　６ 月 ２５ 日現在

機関番号：２３９０１
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2018～2023
課題番号：１８Ｋ０３４２０

研究課題名（和文）波動方程式族の係数同定問題に対する安定かつ高精度な数値解法開発のための総合的研究

研究課題名（英文）A comprehensive research to develop a stable and high accurate numerical method for the problems of coefficient identification in linear wave equations

研究代表者
代田　健二（Shirota, Kenji）

愛知県立大学・情報科学部・教授

研究者番号：９０３０２３２２

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,300,000円

研究成果の概要（和文）：波動方程式族の係数同定問題に対する安定な数値解法と逆問題解析への援用を目的とした順問題に対する数値解法を開発した．1次元波動方程式，2次元スカラー波動方程式および弾性波動方程式の係数同定問題に対して，位相最適化手法を応用した解法を導出し，数値実験により有効性と課題を明らかにした．波動方程式の順問題に対しては，空間方向を差分法，時間方向をスペクトル選点法により離散化することでクロネッカー積構造係数行列の連立一次方程式を導出し，さらに数値積分法と同程度のメモリ量で記憶可能な行列方程式を導出した．行列方程式解法としてクロネッカー積安定化GPBiCG法を導出し，数値実験により有効性と高速性を示した．

研究成果の学術的意義や社会的意義
波動方程式族の係数同定問題に対する数値解法の研究は，計算時間や観測データの問題から，国内外とも少なく，また位相最適化と逆問題解析は両方とも非適切問題に対する研究にも関わらず，交流が少ない．その現状において本研究の成果は，波動方程式族の係数同定問題が実用問題で有効可能性，位相最適化手法が逆解析に有効な可能性を示したものであり，その学術的意義は小さくない．また，時間発展型偏微分方程式の順問題に対する数値解法として，GPGPUで容易に高速化可能な手法の提案は，時間発展型線形偏微分方程式の高速計算解法開発の新たな方向性を示したものであり，その学術的意義は大きいと考える．

研究成果の概要（英文）：In this research, we considered about the numerical method for the coefficient identification problem in the wave type partial differential equations. We adopted the adjoint method to find the unknown coefficients. In order to identify the unknown coefficients, we applied the H1 type method proposed for the SIMP type topology optimization to our problem. By the numerical experiments, we showed the effectiveness and future works of our algorithm. Moreover, we studied about the numerical method to solve the initial-boundary value problem in scalar wave equation. We applied the finite difference type method and the spectral collocation method to the discretization in space and time direction, respectively. We introduced the matrix equation which is equivalent to the discretized equation. The stabilized GPBiCG method for the Kronecker type coefficient matrix was proposed to solve numerically the matrix equation. We showed the effectiveness of our method by the numerical experiments.

研究分野：応用数値解析

キーワード：波動方程式　逆問題解析　係数同定問題　位相最適化手法　順問題解析　クロネッカー積構造行列　BiCG系解法

１．研究開始当初の背景

病院では，人体内の異常を検査する方法として，X 線 CT や超音波診断がしばしば用いられている．これらの検査方法の数理モデルは，与えられたデータから支配方程式の係数関数を同定する「逆問題」になることが知られている．この問題は，実用上の設定において Hadamard の意味で非適切になるが，その重要性から理論・実用の両面から活発に研究されている．逆問題の数理モデルにおける支配方程式は，偏微分方程式で与えられることが多い．本研究で対象とするのは，地震波の挙動を表す弾性波動方程式を代表とする波動方程式族の係数同定問題である．超音波を用いた構造物内の欠陥同定，地下物性を明らかにすることを目的としたジオトモグラフィー，振動を人体表面から与え MRI で観測された内部波から体内の粘弾性率を同定する MRE (Magnetic Resonance Elastography) は，代表的な実用例である．これら実用例における設定（領域形状，複合材料など）において具体的な解を数学的に導出するのは困難であるため，数値計算により近似解を求めることが，順問題にしても逆問題にしても一般的である．

逆問題に対する数値解法を考えるとき，問題の非適切性を起因とする「数値不安定性」に対する対処が重要となる．ここでいう数値不安定性とは，観測データや計算過程において生じた誤差がたとえ小であったとしても，解は大きく変化または振動する性質のことである．偏微分方程式の係数同定問題に対する代表的な数値解法として，随伴変数法が存在する．この方法は，観測データの残差ノルムなどで定義された汎関数の最小化問題を，勾配法により解く反復解法である．この際に用いる導汎関数を求めるのに，随伴問題と呼ばれる偏微分方程式の境界値問題を解くことから，この名前が付けられている．一方，随伴変数法には，安定化への積極的な対処がなされていない．そのため，誤差に対して必ずしも安定な近似解が得られないことが，申請者の研究も含めて報告されている．そのため，随伴変数法に何らかの正則化を施す必要があるが，逆問題解析の分野では，有効な手法が提案されてこなかった．

また随伴変数法では，順問題，すなわち偏微分方程式の境界値問題を繰り返し解くことが必要となる．波動方程式族の場合，有限要素法などの方法により空間方向を離散化することで連立 2 階線形常微分方程式を導出し，その方程式をルンゲ・クッタ法に代表される数値積分法で反復的に計算するのが一般的である．数値積分法を用いる場合，近似解精度の要求から無条件安定の方法を採用していたとしても時間方向の刻み幅を小に選択する必要があり，その結果，順問題そして随伴変数法実行に膨大な時間がかかることになる．適応型解法を採用することも考えられるが，一定の計算精度を求めるのであれば，結局同じ問題に突き当たってしまう．すなわち，波動方程式族の係数同定問題に対する数値解法としての随伴変数法は，使用の容易さからは有効であるものの，実用問題へ適用するには数値安定性に向けた対処法開発，そして順問題に対する一定の計算精度かつ実用時間で実行可能な数値解法開発が必要となる．

２．研究の目的

本研究の目的は，波動方程式族の係数同定問題に対して，随伴変数法を基礎とした安定かつ一定の計算精度を持ち，さらに実用時間で実行可能な数値解法の開発である．具体的には，以下の 2 点を研究の目的として，それらを達成することで最終的な研究目的を実現する．

① 密度型位相最適化手法を応用した波動方程式族の係数同定問題に対する安定な数値解法の開発
② 波動方程式族の順問題に対する一定の計算精度を持ち，かつ実用時間で実行可能な直接的数値解法の開発

３．研究の方法

本研究では，波動方程式族の係数同定問題に対する数値解法および順問題に対する直接的数値解法開発のため，GPU による並列数値計算プログラムを開発し，購入した GPGPU 計算ワークステーションで数値実験を実施することにより，研究目的の達成を目指した．具体的には，次のとおりである．

(1) 波動方程式族の係数同定問題に対する安定な数値解法の開発
位相最適化問題に対する方法を応用し開発した合成梁同定問題に対する H2 勾配法について，導入した双一次形式と密度型係数関数定義におけるシグモイド関数に付加したパラメータの選択と同定精度の関係を明らかにする．また，１次元問題の結果を元に，スカラー波動方程式，弾性波動方程式に対して，密度型問題の導出，汎関数の定義と導汎関数導出，アルゴリズム構築の順に実施することで多次元波動方程式族の係数同定問題に対する H1 型解法を導出する．さらに，C++言語および FreeFEM を使用してプログラムを開発し，数値実験により有効性を検証した．

(2) 多次元スカラー波動方程式の順問題に対する直接的数値解法の開発
2 次元スカラー波動方程式の初期値境界値問題に対して，時間方向を Gauss-Lobatto 選点に

よるスペクトル選点法，空間方向を任意多点差分法により近似することで，クロネッカー積構造の係数行列を持つ連立一次方程式を導出した．その連立一次方程式と同値であり，かつ省メモリで保存可能な行列方程式を導出し，その方程式に対する BiCG 系法のアルゴリズムを開発した．多倍長計算環境で数値実験を行うことで，提案手法の有効性を明らかにした．さらに問題を 3 次元，空間方向離散化法を従来の 7 点差分法に変更した上で，MATLAB で実行可能な GPU 並列計算プログラムを用いた数値実験を実施し，その有効性と問題点を明らかにし，さらなる改良を施した．

４．研究成果

本研究では，「波動方程式族の係数同定問題に対する安定な数値解法の開発」および多次元波動方程式の逆解析高速に向けた基礎研究である「多次元スカラー波動方程式の境界値問題に対する直接的数値解法の開発」を実施した．詳しくは，以下のとおりである．

(1) 波動方程式族の係数同定問題に対する数値解法の開発

波動方程式族の係数同定問題に対して，位相最適化手法を応用した数値解法の開発を実施した．

まず，1 次元波動方程式の係数同定問題を数理モデルとするコンクリートと鉄による合成梁の欠陥同定問題に対して開発した H1 型解法について, その方法確立において必要なパラメータ選択について，同定精度との関係を数値実験により明らかにした．本研究で開発した H1 型解法は，随伴解法を基礎とした方法であり，導汎関数から探索方向を定める際に設計変数関数が属する H2 空間のパラメータ付き内積を用いる．そのため，パラメータの選択は同定精度にとって重要であるが, 本研究では, 数値の大きさは本質的に重要ではなく，パラメータ同士の比率が重要であることを示した．この成果により，選択を検討すべきパラメータ数を当初の 3 ではなく 2 へ減らすことに成功，すなわち開発手法を簡易化することができた．

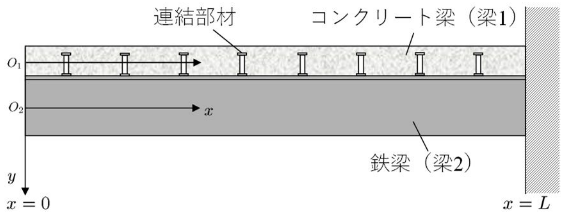


図 1 合成梁（連結部材劣化）

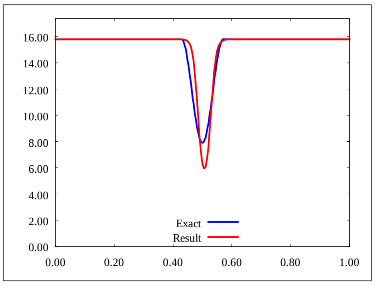


図 2 欠陥同定結果（中心部材 50%劣化）

また，１次元の成果を拡張することで内部観測による 2 次元スカラー波動方程式の係数同定問題に対する H1 および H2 勾配法を開発した．具体的には，2 次元問題に対する密度型問題の導出，汎関数の定義と導汎関数導出し，同定アルゴリズムを構築した．また，数値実験により，その有効性と安定性を示した．さらに提案手法で重要なパラメータ選択について，非線形逆問題に対する Tikhonov 正則化法で用いられた Morozov の相変原理を援用することで，安定な同定解を得ることに成功した．具体的には，Morozov の相変原理を基礎とした評価関数を導入し，その関数の最小化による逐次パラメータ選択法を導出した．最小化パラメータを数値的に求める方法として線形探索法を採用し，数値実験により評価関数を導入した本手法の有効性を確認した．さらにこの研究成果を援用し，内部観測データによる多次元スカラー波動方程式のソース項同定問題に対する H1 勾配法を開発し, 数値実験によりその有効性を示した．

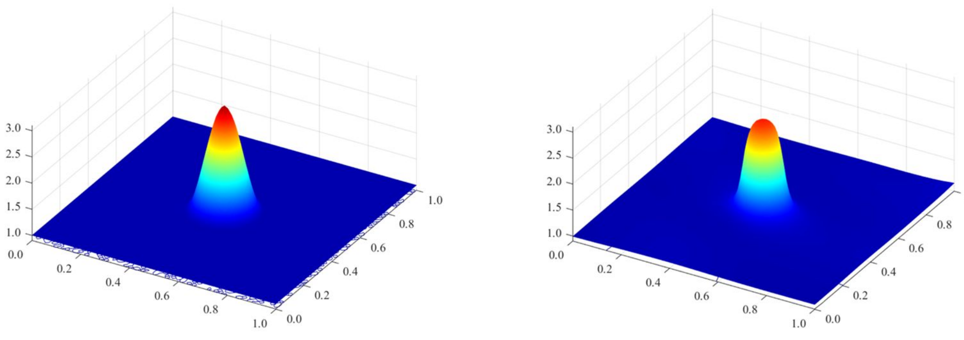


図 3 スカラー波動方程式の係数同定結果（左：真の係数関数，右：同定結果（1%観測誤差））

スカラー波動方程式の成果を拡張することで内部観測データによる 2 次元線形波動方程式のラメ係数同定問題に対する H2 勾配法を開発した．具体的には，2 次元線形弾性波動問

題に対する密度型問題の導出，汎関数の定義と導汎関数導出し，抽象勾配法を基礎とした同定アルゴリズム構築した．また数値実験により，二材料を想定した問題については，一定精度で同定することに成功することを示した．一方，三つ以上の複数材料を想定した問題については，係数関数値や変化範囲の意味で代表的な箇所のみ一定精度で同定でき，他の箇所については不十分な同定結果となり，実用問題への応用に大きな課題を残すことになった．H2 勾配法のパラメータ選択方法を再検討，および問題設定の見直しなどを行うことにより，実用により近い問題に対する同定精度の向上を図っていく．

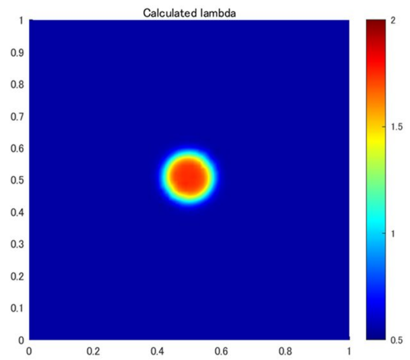


図 4 線形弾性波動方程式の 2 材料係数同定結果（左：同定係数λ（1%観測誤差），右：絶対誤差分布）

多次元粘弾性波動方程式に対する開発手法の応用については，粘弾性係数同定問題に対する数値解法についての共同研究へ参画し，順問題における有限要素解析および逆解析における Tikhonov 正則化を基礎した Levenberg-Marquardt 法の実装を担当することで，今後の研究実施の基盤を確立することができた．

今後は，線形弾性波動方程式での問題を解決し，(2)の成果も利用することで，3 次元線形弾性・粘弾性波動方程式に対する H1 型解法を確立し，さらに異方性材料における弾性波動問題も視野に入れ，本研究を推進・発展させる．

(2) 3 次元スカラー波動方程式の境界値問題に対する直接的解法の開発

本研究では，まず 2 次元スカラー波動方程式の初期値境界値問題に対して，時間方向を Gauss-Lobatto 選点によるスペクトル選点法，空間方向を任意多点差分法により近似することで，クロネッカー積構造の係数行列を持つ連立一次方程式を導出した．その連立一次方程式に対して，ベクトルから行列へ一対一対応させる逆 vec 作用素を適用することで，従来の数値積分法と同程度のメモリ容量で記憶可能かつ元の方程式と同値な行列方程式を導出した．その行列方程式に対して，GPBiCGSafe 法に逆 vec 作用素を適用することで得られるクロネッカー積構造 GPBiCGSafe 法を開発した．また，クロネッカー積 GPBiCG 法との比較実験を多倍長環境計算環境で実施し，クロネッカー積 GPBiCG 法の若干早く収束するものの，少ない計算桁数で収束するという意味での安定性については，開発したクロネッカー積 GPBiCGSafe 法が優れていることを明らかにした．

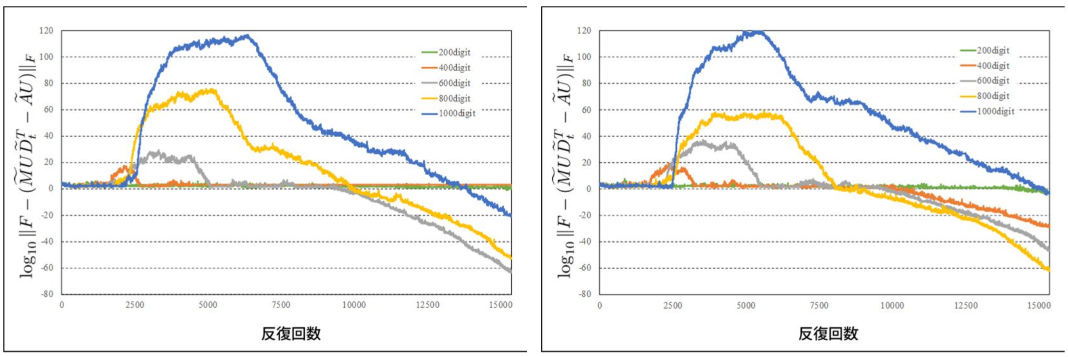
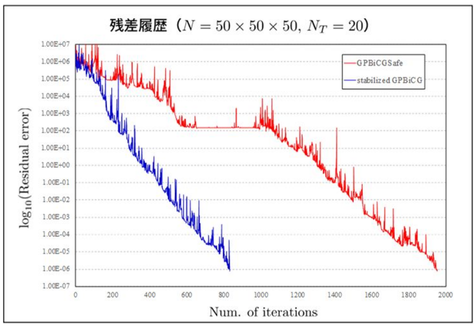


図 5 残差履歴（左：クロネッカー積 GPBiCG 法，右：クロネッカー積 GPBiCGSafe 法）

また実用問題への応用を考慮して，問題を 3 次元に，そして空間離散化法を従来の 7 点差分に変更して得られた行列方程式に対して，開発手法を適用し数値実験を実施したところ一定の結果を得ることができた．一方，有効な前処理法の適用などの必要性も明らかとなった．そこで，離散化により導出されるクロネッカー積構造の係数行列に対して，その基本構造を維持可能な前処理法を導入することでクロネッカー積 GPBiCGSafe 法の収束性の改善，そして高速化のために GPU 並列計算プログラム作成を実施した．その結果，計算時間の短縮には成功したものの，収束性の改善につなげることはできなかった．さらなる収束性向上のため，より効果的な前処理技術の導入を検討したものの，有効な手法を確立するには至らなかった．そこで，開発手法が破綻する原因を改めて検討した結果，それを回避

するためにはバニラ戦略が有効であることが判明したため，その戦略を採用した安定化GPBiCG 法を元にクロネッカー積安定化 GPBiCG 法を開発した．また，CUDA ライブラリを用いた GPU 並列計算プログラムを作成・実行し，数値実験により，破綻現象が発生しないだけではなく，収束性の大幅な改善およびさらなる高速化が実現できることを示した．今後は, 弾性波動方程式族への適用, 空間離散化法を有限要素法へ変更するなどを実施し，(1)の成果と連携させることで今後の研究推進に活用していく．



		GPBiCGSafe			安定化GPBiCG		
N	Nt	反復回数	計算時間[s]	相対誤差	反復回数	計算時間[s]	相対誤差
50x50x50	20	1507	10.65059	8.17×10^{-3}	834	5.0071	8.725×10^{-3}
60x60x60	20	×	–	–	986	9.3409	6.061×10^{-2}
70x70x70	20	×	–	–	1051	15.0726	4.454×10^{-3}
80x80x80	20	×	–	–	1176	24.5234	3.189×10^{-3}

図 6 クロネッカー積安定化 GPBiCG 法とクロネッカー積 GPBiCGSafe 法の比較

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕　計3件（うち査読付論文　3件／うち国際共著　2件／うちオープンアクセス　2件）

１．著者名 Jiang Yu、Nakamura Gen、Shirota Kenji	４．巻 37
２．論文標題 Levenberg-Marquardt method for solving inverse problem of MRE based on the modified stationary Stokes system	５．発行年 2021年
３．雑誌名 Inverse Problems	６．最初と最後の頁 125013～125013
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/1361-6420/ac346b	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

１．著者名 Jiang Yu、Nakamura Gen、Shirota Kenji	４．巻 2092
２．論文標題 Variational approach for recovering viscoelasticity from MRE data	５．発行年 2021年
３．雑誌名 Journal of Physics: Conference Series	６．最初と最後の頁 012001～012001
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/1742-6596/2092/1/012001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

１．著者名 Daisuke Kurashiki, Kenji Shirota	４．巻 10
２．論文標題 H2 gradient method for the coefficient identification problem in a partial differential equation	５．発行年 2018年
３．雑誌名 JSIAM Letters	６．最初と最後の頁 37，40
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.14495/jsiaml.10.37	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 －

〔学会発表〕　計16件（うち招待講演　1件／うち国際学会　1件）

１．発表者名 代田健二，古川峰都
２．発表標題 クロネッカー積安定化GPBiCG法を用いた波動方程式の順問題に対する直接的数値解法
３．学会等名 日本応用数理学会第20回研究部会連合発表会
４．発表年 2024年

１．発表者名 代田健二
２．発表標題 波動方程式の逆問題解析高速化のための順問題に対する直接的高速数値解法の開発
３．学会等名 第28回計算工学会
４．発表年 2023年

１．発表者名 辻村賢祐，代田健二
２．発表標題 スカラー波動方程式のソース項同定問題に対するH1型解法の有効性の検証
３．学会等名 日本応用数理学会第18回研究部会連合発表会
４．発表年 2022年

１．発表者名 代田健二
２．発表標題 線形弾性波動方程式の係数同定問題に対するH2勾配法
３．学会等名 第27回計算工学講演会
４．発表年 2022年

１．発表者名 代田健二
２．発表標題 密度型位相最適化を応用した線形弾性波動方程式のラメ係数同定問題に対する数値解法
３．学会等名 日本応用数理学会2022年度年会
４．発表年 2022年

１．発表者名 代田健二
２．発表標題 逆問題解析へ援用可能な波動方程式の順問題に対する直接的高速数値解法の開発
３．学会等名 日本応用数理学会第19回研究部会連合発表会
４．発表年 2023年

１．発表者名 代田健二
２．発表標題 スカラー波動方程式の係数同定問題に対するH1型解法
３．学会等名 第26回計算工学講演会
４．発表年 2021年

１．発表者名 代田健二
２．発表標題 スカラー波動方程式の係数同定問題に対するH1勾配法におけるパラメータ選択方法の検討
３．学会等名 日本応用数理学会2021年度年会
４．発表年 2021年

１．発表者名 辻村賢祐，代田健二
２．発表標題 内部観測によるスカラー波動方程式のソース項同定問題に対するH1勾配法
３．学会等名 日本応用数理学会2020年度年会
４．発表年 2020年

１．発表者名
オズテゥルク アハメット フルカン，代田健二

２．発表標題
線形弾性波動方程式の係数同定問題に対するH1型解法

３．学会等名
日本応用数理学会2020年度年会

４．発表年
2020年

１．発表者名
代田健二，曽我部知広

２．発表標題
高精度逆問題解析に援用可能な波動方程式の順問題に対する直接的数値解法の開発

３．学会等名
日本応用数理学会2019年度年会

４．発表年
2019年

１．発表者名
辻村賢祐，代田健二

２．発表標題
スカラー波動方程式のソース項同定問題に対するH1勾配法

３．学会等名
日本応用数理学会2020年研究部会連合発表会

４．発表年
2020年

１．発表者名
Kenji Shirota

２．発表標題
H1 gradient method for a coefficient identification problem of the scalar wave equation

３．学会等名
The 9th International Conference ``Inverse Problems: Modeling and Simulation''（招待講演）（国際学会）

４．発表年
2018年

１．発表者名 代田健二
２．発表標題 スカラー波動方程式の係数同定問題に対するH1勾配法
３．学会等名 第23回計算工学講演会
４．発表年 2018年

１．発表者名 倉敷大輔，代田健二
２．発表標題 波動型方程式の係数同定逆問題に対するH1-H2勾配法
３．学会等名 日本応用数理学会2018年度年会
４．発表年 2018年

１．発表者名 代田健二
２．発表標題 スカラー波動方程式の係数同定問題に対するH2勾配法
３．学会等名 日本応用数理学会2018年度年会
４．発表年 2018年

〔図書〕　計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

－

６．研究組織

	氏名 （ローマ字氏名） （研究者番号）	所属研究機関・部局・職 （機関番号）	備考

７．科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕　計0件

８．本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
中国	上海財経大学			