

機関番号：14301

研究種目：若手研究 (B)

研究期間：2008~2010

課題番号：20740057

研究課題名 (和文) 高精度正則化法と次世代数値計算環境による逆問題の数値解析理論の構築

研究課題名 (英文) Numerical Analysis of Inverse Problems using High-Accurate Regularization and Next-Generation Computing Environments

研究代表者

藤原 宏志 (FUJIWARA HIROSHI)

京都大学・大学院情報学研究科・助教

研究者番号：00362583

研究成果の概要 (和文)：本研究では多倍長数値計算環境の設計と実装をおこない、従来にはなかった高い精度での数値シミュレーションを実現し、数値的不安定性を有する問題に対する数値計算の実現可能性を示した。得られた数値計算環境はインターネット上で公開しており、C++ 言語および FORTRAN90 用のインターフェースを有し、並列計算に対応している。また、高精度数値計算の視点から、数値計算の根幹である浮動小数点演算および数値的安定性について、問題提起をおこなった。

研究成果の概要 (英文)：We have developed a multiple-precision arithmetic environment, and realized a high-accurate numerical computation for numerically unstable problems using the environment. The developed software is distributed via Internet. It is designed for scientific numerical computation. We also give some remarks on floating-point arithmetic and numerical stability.

交付決定額

(金額単位：円)

| | 直接経費 | 間接経費 | 合計 |
|--------|-----------|---------|-----------|
| 2008年度 | 700,000 | 210,000 | 910,000 |
| 2009年度 | 1,200,000 | 360,000 | 1,560,000 |
| 2010年度 | 1,100,000 | 330,000 | 1,430,000 |
| 年度 | | | |
| 年度 | | | |
| 総計 | 3,000,000 | 900,000 | 3,900,000 |

研究分野：数物系科学

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：多倍長計算, 高精度数値計算, 数値的不安定性, 非適切問題, 正則化法, Laplace 逆変換

1. 研究開始当初の背景

(1)

一般的な科学技術数値計算における実数の表現と演算は、1985年に策定された IEEE754 に従っておこなわれる。今日では 10 進 16 桁の精度で近似して扱う倍精度演算が標準的にもちいられる。厳密値と近似された値との誤差を丸め誤差という。

(2)

偏微分方程式などの数値計算をおこなう際にこれら計算誤差が問題となるが、従来の問題の多くは Hadamard の意味で適切であり、特に誤差の影響は無視してよいとされ、丸め誤差が数値解析の議論の対象となることは殆どなかった。

(3)

一方、安全な社会生活、健康な生活のため、各種の非破壊検査やトモグラフィに代表される逆問題の解析の重要性が高まっている。それらの実現には数値的な処理が不可欠であるが、これらの問題は Hadamard の意味で適切ではなく、特に計算で混入する誤差が急激に増大して数値計算が破綻することが知られており、信頼性が高く、かつ高精度な数値的処理の手法の提案が望まれている。

2. 研究の目的

(1)

上述の研究の背景にあって、本研究の目的は、丸め誤差など計算で混入する誤差を抑える高精度数値計算を実現すること、およびそれを計算力学などの問題に適用し得る数値計算環境を実現することのふたつである。

(2)

計算機の進歩によって大規模数値計算が普及したが、逆問題の数値計算においては上述のとおり丸め誤差の急激な増大も対処すべき課題のひとつであり、従来の IEEE754 で策定された演算を利用しての大規模計算だけでは解決を図ることは困難である。そこで本研究では、計算機にハードウェアで実装されている演算そのものを見直すため、10進で数百桁から数千桁の精度で実数を表現し、演算を実現し得る多倍長計算をもちいることとした。しかし多倍長計算はソフトウェアで実現されるため、大規模計算への適用においては計算時間、メモリ量の問題が生じる。そこでこれらを解決するため、大規模計算を実現しうる科学技術数値計算に適した多倍長計算環境の実現を目的とした。

(3)

さらに、得られた多倍長計算環境を数値的不安定性を有する具体的な問題に用い、その有効性を示すことも本研究の目的とした。

3. 研究の方法

(1)

まずは、研究代表者が先行研究で得ている多倍長計算環境の並列計算への対応をおこなった。特に偏微分方程式や積分方程式の数値計算においては、離散化によって連立一次方程式の扱いに帰着されることが多い。さらに非適切問題の高精度離散化では、密行列が現れることが多いことに着目し、本研究においては多倍長計算による並列 LU 分解を実現する。

(2)

次に、代表的な非適切問題である Laplace 逆変換に対して、斎藤三郎が提案した再生核 Hilbert 空間上での Tikhonov 正則化法による実 Laplace 逆変換に対し、その高精度計算に取り組む。斎藤の枠組みでは扱い得る関数に制限があるため、より広い関数のクラスで適用可能な再生核空間の設定をおこなう。

(3)

Laplace 逆変換に対しては Bromwich 積分によって厳密解が与えられ、その数値的取り扱い手法が多く提案されている。その中から、細野敏夫の方法および Sheen Dongwoo (申東雨)の方法に多倍長計算を適用し、それらの特徴、特に数値的不安定性の視点からこれらの手法を特徴づけることを試みる。

4. 研究成果

(1)

研究代表者が先行研究で設計と実装をおこなった多倍長計算ライブラリ `exlib` をもちいて、MPI (Message Passing Interface) をもちいたプロセスレベル並列での LU 分解の計算ライブラリを構築した。これは PC クラスタなど分散メモリ並列計算環境で動作する。典型的な非適切問題をテスト問題として本ライブラリの並列化効率を測定したところ、1.00 を越えるスーパーリニアな並列化効率を実現した。n プロセスでの計算時間は理想的には 1 プロセスでの計算時間の $1/n$ になるため、並列化効率は 1 となるが、倍精度での並列計算では、演算時間に加えて通信時間も必要となるため並列化効率が 1 を越えることはない。しかし多倍長計算では、演算時間に比して通信時間は小さく、また、メモリアクセスを効率化することにより、本実装はスーパーリニアを達成し得たと考えられる。

(2)①

Laplace 逆変換は、Laplace 変換像から原像を求める問題であり、典型的な非適切問題として知られており、多くの先行研究がある。特に原像の実数軸上の値のみから変換像を求める問題は実逆変換とよばれる。これに対して斎藤三郎(群馬大学)は再生核 Hilbert 空間上で Tikhonov 正則化法を適用し、第二種積分方程式に帰着することを提案した。これに対して本研究では、重みつき再生核 Hilbert 空間を導入し、Laplace 変換作用素 $L[f](t)$ に対して $L[f'](t)$ を考えることで、こ

の作用素が重みつき再生核空間上でコンパクト作用素となることを示した。これは澤野嘉宏(京都大学)との共同研究である。これによって斎藤の枠組みでは扱えなかったクラスの数値に対して実逆変換が実現される。

(2)②

この枠組みのもとで Tikhonov 正則化法および特異値分解による実逆変換の数値スキームに対して二重指数型積分公式により離散化をおこない、多倍長計算によって数値計算をおこなうことで高精度な実逆変換を実現した。そこでは多倍長計算によって丸め誤差を小さくするだけでなく、離散化誤差および正則化パラメータを充分小さくすることが可能となり、これら近似誤差を小さくしての高精度数値計算が実現された。

(3)①

Laplace 逆変換については Bromwich 積分による逆変換スキームが知られている。これは複素積分で書かれており、その数値的実現は多く提案されている。これに対して本研究では、細野敏夫による手法および Dongwoo Sheen による手法に多倍長計算を適用し、丸め誤差を小さくすることによる高精度な逆変換を実現した。

(3)②

さらに、細野の方法と Sheen の方法の不安定性を検証するため、それぞれの計算で混入する丸め誤差の定量評価をおこなった。これにより、細野の方法では原像の値を求める点に関わらず丸め誤差の増大は一定であり、Sheen の方法で原像の値を求める点が大きくなるに従って不安定になることが示された。

(3)③

この定量評価においては、丸め誤差のない計算を実現する必要があるが、本研究においては 10 進 200 桁と 300 桁など、十分に大きな複数の精度での計算結果を比較することで丸め誤差のない値であると考えた。丸め誤差を含まない計算値を厳密に求めるには、区間演算の利用が考えられる。これは今後の課題のひとつであり、特に組込み関数や複素数の演算まで含めた区間演算は、非適切問題のみならず精度保証計算などの分野でも必要となる重要な技術であると考えられる。

(4)①

素粒子物理学の分野では、摂動計算において

ループ積分が現れる。これは Feynman ダイアグラムから導出され、特異積分の正則化の極限とみなすことができる。従来は倍精度や 4 倍精度をもちい、 ϵ 補外などで極限操作をおこなって 10 進 2 桁から 3 桁程度の値が求められていたが、この特異積分が数値的不安定性をもつことから、高精度な値を求めることは不可能とされていた。これに対して本研究では、`exflib` により ϵ を充分小さくとり、並列計算を適用することによって赤外発散・1 ループ・ボックス型の積分に対し、その実部と虚部を 10 進 40 桁程度の精度で求めることに成功した。さらにこの例において、その虚部の値が、解析接続の手法に依らないことを数値的に示した。

(4)②

今後、2 ループの摂動積分に対しても `exflib` による高精度数値計算の適用を考えているが、積分の多重度が増大するため、計算時間が急激に増大する。これを積分の独立性を活用する並列多倍長計算により解決を図ることが課題となる。

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 11 件)

①藤原宏志, 複素逆 Laplace 変換の数値計算における注意, 計算数理工学論文集 (査読有) Vol.10 (2010) 7--10.

②藤原宏志, 科学技術計算のための高速多倍長計算環境の構築, 計測自動制御学会 (SICE) 計測と制御 5 (査読無) Vol.49 (2010) 285--290.

③H.Fujiwara, Numerical Real Inversion of the Laplace Transform by Reproducing Kernel and Multiple-Precision Arithmetic, PROGRESS IN ANALYSIS AND ITS APPLICATIONS (査読有) (2010) 289--295.

④藤原宏志, 数値的に不安定な線型問題のための多倍長精度・並列直接解法ライブラリの開発, 計算数理工学論文集 (査読有) Vol.8 (2008) 49--52.

[学会発表] (計 32 件)

① FUJIWARA, Hiroshi, "High-Accurate Computation of One-Loop Integrals by Several Hundred Digits Multiple-Precision

Arithmetic" (Invited Talk),
3rd Computational Particle Physics
Workshop, Sep 24, 2010, KEK
(High-Energy Accelerator Research
Organization), Tsukuba.

②藤原宏志,「高精度科学技術計算のための多
倍長計算環境の設計・実装と応用」(日本数学
会応用数学分科会・特別講演), 日本数学会
2010年度秋季総合分科, 2010年9月23日,
名古屋大学.

③藤原宏志,「PC・クラスタ向きの多倍長計
算環境の開発と科学技術計算への応用」, 第
15回日本計算工学会, 2010年5月28日,
九州大学

④FUJIWARA, Hiroshi, "Numerical Real
Inversion of the Laplace Transform by
Reproducing Kernel and
Multiple-Precision Arithmetic"
(Distinguished session talk), 7th ISAAC
Congress, Jul 15, 2009, Imperial College
London, London.

⑤FUJIWARA, Hiroshi,
"Multiple-Precision Arithmetic and its
Application to Numerically Unstable
Problems with Regularization
Methods"(Invited Talk), The International
Conference on Inverse Problems and its
Applications, Oct 11, 2008, Fudan
University, Shanghai.

[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計1件)

名称:「逆ラプラス変換プログラム, 逆ラプ
ラス変換のためのテーブル作成プログラム,
逆ラプラス変換の数値解算プログラム, お
よび逆ラプラス変換装置

発明者: 藤原宏志, 齋藤三郎, 松浦勉

種類: 特許

国際公開番号: WO 2009/022694

公開日: 2009年2月19日

国際出願番号: PCT/JP2008/064453

PCT出願日: 2008年8月12日

国内優先権主張出願番号: 特願
2008-203384

出願日: 2008年8月6日

○取得状況 (計0件)

[その他]

ホームページ

<http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~fujiwara/exflib>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

藤原 宏志 (FUJIWARA HIROSHI)

京都大学・大学院情報学研究科・助教

研究者番号: 00362583