様式 C-19

科学研究費補助金研究成果報告書

平成 22 年 11 月 9 日現在

研究種目：基盤研究（B）
研究期間：2007～2009
課題番号：19340022
研究課題名（和文） 無限多倍長数値計算環境における高精度数値計算法の確立とその逆問題解析への適用
研究課題名（英文） Foundation of high accuracy computational methods on the multiple-precision computer environment and its applications to analysis of inverse problems
研究代表者 磯 祐介（ISO YUUSUKE）
京都大学・情報学研究科・教授
研究者番号：70203065

研究成果の概要（和文）：多倍長数値計算環境は、先端的な科学・技術を支える新たな研究手法の一つと考えられているが、本課題研究ではこの計算環境の一層の進化とその上での高精度数値計算手法、さらには逆問題・非適切問題解析への適用についての研究を総合的に行い成果を得た。これにより、多倍長数値計算環境の計算力学への適用については、世界をリードする水準の成果が得られた。

研究成果の概要（英文）：The multiple-precision computer environment has been considered as a new research tool which can bear progress of sciences and technologies in top. In this project, we have been succeeded in not only development of multiple-precision arithmetic but its applications to hard problems in inverse and ill-posed analysis. We have established so excellent results that we lead research trends in computational mechanics.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合　計
2007 年度	5,000,000	1,500,000	6,500,000
2008 年度	4,700,000	1,410,000	6,110,000
2009 年度	4,200,000	1,260,000	5,460,000
年度			
年度			
総　計	13,900,000	4,170,000	18,070,000

研究分野：数物系科学
科研費の分科・細目：数学一般(含確立論・統計数学)
キーワード：応用数学・数値解析・多倍長数値計算・応用解析学・逆問題解析・
非適切問題解析・高精度シミュレーション・逆 Laplace 変換

１．研究開始当初の背景

いわゆる電子計算機(digital computer)では無限の情報量が扱えないために、微分や積分などの極限演算で記述される函数方程式については、この問題を有限の情報量の問題あるいはその系列で記述し直す必要がある。例えば微分方程式や積分方程式は極限として成立するものであり、その数値計算に際してはこれらを有限演算・有限次元空間の問題として記述する必要があり、多くの場合は何らかの近似が行なわれる。このときに用いられる代表的な方法にはが差分法などの離散化

法であり、またこの離散化によって打ち切り誤差が生じる。さらに計算機は無限自由度を持つ実数を直接は扱えないため、実数もまた有限桁の浮動小数点数で近似しなくてはならないが、これによって生じる誤差が丸め誤差である。コンピュータを利用した数値計算では、この打ち切り誤差と丸め誤差の両方を伴うことの注意することが重要である。これまでの典型的な（即ち古典的な）数理物理で扱われていたような適切(well-posed)な問題では、これらの誤差の影響は重要ではあるがその問題解決法が図られることは様々な研究によって指摘されているが、逆問題のように非適切(ill-posed)であっていわゆる解の安定性が保証されない場合では、その数値計算過程においてはこれらの誤差が計算ステップ数について指数函数的に増大して数値計算を破綻に導くことが殆んどである。実際、このような事例は逆問題の数値計算を行なえばすぐに体験できることである。この「誤差が指数函数的に増大する」のは問題の非適切性という数学的性質即ち問題の本質であり、これまでは逆問題・非適切問題の数値計算の常識は Tikhonov 正則化法等を利用して安定化させることのみが唯一の方法と信じられていた。ただこの正則化法は誤差の増大度を押えて比較的安定に数値計算を実行することのみが最優先にされているため、正則化によって得られた数値解の精度は極めて悪く、「計算精度---数値計算結果と問題の解との比較」の観点では、これまでの適切な問題の数値計算・数値解析では考えられないような精度の悪さであり、精度も重視して数値解析・数値計算に従事する心ある研究者にとっては耐え難い状況にある。さらに注意しておくべきことは、仮に正則化を用いても、最終的な計算精度を正則化法の収束理論から要求すれば現実の数値計算の安定性は損なわれるという点である。そこで最終的な精度を優先する立場から、代表者と何人かの分担者は「正則化を考えない」という常識からすれば暴挙としかいいようのない挑戦的な戦略を敢えて立て、逆問題・非適切問題の数値解析に取り組んできた。この暴挙とも思える方針を多倍長数値計算環境という視点で実現しようとすることが本課題研究の背景である。

学問的に詳述するには、解の存在をあるクラスで仮定して、「直接的再構成」という立場に立って議論は進められていた。非適切問題および数値的に不安定な問題に対しては、IEEE754 に定められた倍精度演算の計算精度の制約などに起因する丸め誤差の緩和のため、上述の通り、数値計算の際には離散版 Tikhonov の正則化法や他の安定化手法の利用が不可欠と考えられていたが、これでは正則化項の影響のために最終的な計算精度の向上には限界がある。これに対して先行的に行なった多倍長計算に基く高精度数値計算では、正則化法を用いない直接的な数値計算に成功したものであり、従来は不可能と思われていた逆問題の数値解の再構成における高精度数値計算の可能性を代表者と一部の分担者は事前の共同研究で示していた。また代表者らによる先行研究において、多倍長計算が非適切問題の数値計算に有効であることは別の数値計算例からも指摘されていた。しかし、従来の多倍長計算環境、特に 20 世紀に提案されたものでは、数論や暗号理論などの問題への利用を念頭において設計されたためか、計算力学などの大規模なメモリーと数値計算の高速性の要求される科学・技術数値計算への適用においては無力であり、全く新たなソフトウエアが必要であった。このような事情を最大限に考慮し、大規模数値計算および科学・技術計算で利用されるプログラミング環境に対応した高速多倍長計算環境の設計が藤原宏志に先行研究として行なわれていた。

２．研究の目的

多倍長数値計算の活用による逆問題の実用的な数値計算を目指し、多倍長数値計算向の離散化手法の開発、既存研究・技術との融合による高精度化の新たな試み、さらに高速多倍長数値計算環境の一層の進化を視野に入れ、高精度数値計算法の確立を統合的に図ることが目的である。新たな数学的成果を次々に応用してこの技術を向上させることは重要であり、応用逆問題については数学解析と数値解析も並行して行ない、Tikhonov 正則化法・多倍長数値計算を融合した実用面にも重点をおいた研究展開を視野に入れた。

３．研究の方法

（１）多倍長計算向の函数方程式の高精度離散化手法の確立、（２）観測誤差の事後制御を伴う Tikhonov 正則化法の離散化の実用的数値計算、（３）高速多倍長数値計算環境 exflib の整備と活用、の３つのグループに研究組織を分け、夫々が自律分散的に研究を進めた。研究期間中には代表者の主宰する“数値解析・応用解析セミナー”等により、相互の研究発表と情報交換・研究交流を行った。

なお、課題研究の推進過程で「研究分担者」と「連携研究者」の定義が変わり、研究組織の見直しを行わなければならなかったことは遺憾ではあるが、最終的な研究成果につい

ては当初予定通りのものが得られている。

４．研究成果
本課題研究においては、逆問題で代表される非適切問題の数値解析に対する新たな手法を提案し、それを支える多倍長数値計算環境を深化させた。さらにこれらの数値解析・数値計算の基礎となる逆問題の数学解析において多くの知見を得た。

多倍長数数値計算面では、分担者・藤原宏志の成果は顕著である。藤原は、(1)高速多倍長計算環境の整備、(2)非適切問題における多倍長計算の有効性の検証の２点を中心として本課題研究を推進した。その結果、(1)に関してはクラスタ型計算機に対応する多倍長計算環境および並列計算ライブラリの構築がなされたほか、(2)については「音響逆散乱問題における仮想ポテンシャルの数値的再構成」および「Laplace 実逆変換の高精度数値計算法の確立」について顕著な成果を挙げている。さらに付随する業績として、代表者および分担者の今井仁司、西田詩とも共同して楕円型を含む偏微分方程式の Cauchy 問題の数値解の直接的再構成、および第一種積分方程式の数値解の直接的再構成に成功し、解析函数の枠組での非適切問題の数値計算には多倍長計算による高精度数値計算が極めて有効であることを指摘して非適切問題の数値解析に新たな知見を与えた。

高速多倍長計算環境の設計と実装は藤原によって本課題研究以前から行なわれていたが、今回の課題研究の成果としては、現時点では国内外で最も普及するクラスタ計算機で用いられるプロセサのアーキテクチャ(AMD64, Intel64)および一般的なパーソナル・コンピュータで用いられるプロセサのアーキテクチャ(IA32) に対応する高速多倍長計算の実装に成功した。この計算環境は C++ 言語および FORTRAN90 用ライブラリとしてインターネット上で公開されており(http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~fujiwara/exflib)、本課題研究の成果の公開の観点からも既に十分な配慮がなされている。

この新たな計算環境は、分散メモリ並列計算環境で用いられる MPI (Message Passing Interface)および共有メモリ並列計算環境でもちいられる OpenMP にも対応しており、2008 年 6 月に稼働した我が国の代表的なスーパーコンピュータ・アーキテクチャである T2K においても並列計算が可能となっている。偏微分方程式や積分方程式の離散化は、最終的には殆んどの場合は連立一次方程式に帰着されることから、MPI を用いた多倍長精度 LU 分解および QR 分解による高精度固有値分解ルーチンの実装も行ない、研究成果の実用面での還元にも配慮している。 LU 分解においては、スーパーリニアを達成する高い並列化効率の実現にも成功している。

次に Laplace 実逆変換の数値計算法の確立について述べておく。Laplace 逆変換は幅広い分野で現れ、力学・工学・地球物理学・数理経済学等ではその数値解法が必要とされている。しかしその計算が極めて不安定性なため、従来まで決定的な手法の確立には至っていなかった。そこで本課題研究では、齋藤三郎氏によって提案された再生核空間上での正則化法の理論を多倍長数値計算による固有値分解によって実現され、Laplace 変換作用素をコンパクト作用素とする枠組の構築、並びに重み函数の導入による適用範囲の拡大を提案した。これらの提案は澤野嘉宏氏らを中心とする実解析の研究者によって数学的に正当化され、新たな実逆変換作用スキームとして確立されるに至った。ここでは、多倍長計算によって正則化パラメータが極めて小さく設定することが可能となり、また数値積分における打ち切り誤差も極めて小さくすることに成功している。これらにより、不連続性を含む原像に対しても高精度な数値的逆変換を実現が可能となった。さらにこれらの結果は、解析性の枠組でない場合にも、正則化法によって不連続性をもつ解を滑らなか解で近似し、それを多倍長計算環境で扱うことで高精度な数値解を構成し得ることを示唆するものであり、今後一層の研究の進展が期待される。また本手法により、材料力学や数理経済学で現れる Laplace 逆変換の問題に対し、商用数式処理ソフトウエアにより原像を求めることが不可能だった場合に対しても、数値的に原像を求めることに成功した。

また分担者・今井仁司は、本課題研究を「無限精度」という切口で研究展開している。コンピュータを利用した数値計算における誤差は、第１項でも記述した通り、離散化で生じる打ち切り誤差と計算機で実行するときに生じる丸め誤差である。従って本課題研究で目指す高精度数値計算をに到達するには、この両方の誤差を任意に小さくできる「理屈」が必要である。一般に言われる「極めて小さな誤差」の「極めて小さい」というのは情緒的表現であり、曖昧である。このため、今井は「任意に小さく」という数学解析論理の計算機実現を図り、以下のような着想の下で成果に至った。本質的なアイデアは、任意精度次数近似を実現する離散化法と任意多倍長の多倍長演算を同時に用いることである。ただし、一般に微分方程式の離散化で良く用いられる差分法は簡便であるが、原理はともかくとして実用上は任意次数近似には向いていないと考えられ、スペクトル法、特に非線型問題にも容易に適用できるスペクトル選点法の適用を考えた。この手法と多倍

著数値計算環境を組み合わせたアプローチが今井の提唱する「無限精度数値計算」である。この計算精度は著しく、例えば1次元のPoisson 方程式の境界値問題を比較的最近の計算機環境で多倍長演算ライブラリとして藤原の exflib を用いて計算すると、スペクトル選点数 N = 3100 のときに 11,000 桁での計算がパソコンレベルで実行され、スペクトル次数を変化させると次数 N に対して指数函数的に誤差が減少していることが観察される。これによって今井の提案の正当性が数値実験によって検証されるものと考えている。

他の事例では、熱伝導方程式の Cauchy 問題において、解の存在しないケースに対して、解の非存在を示唆する数値計算結果が得られた。これは未だ未解決部分も多いが、計算機支援数学の一つでもあり、本課題研究の延長として、無限多倍長数値計算を利用した厳密な数学解析の在り方の議論をとして、将来の別の機会に行なわれるべきものと考える。

次に分担者・大西和榮は非適切問題の典型例として知られる「ラプラス方程式の初期値問題（コーシー問題)」を取り上げ、その数値解法における正則化法としてのランク低減法を多倍長計算法の環境下で再考察した。ここでは正確な初期データが入手可能であり、かつ領域近傍に特異点がないならば、２つの手法、(1)超高精度離散化法の適用と(2)任意多倍長計算機能の利用の組み合わせ、により数値的に解けることが明らかにした。さらに現実の実験データを想定し、領域の近傍に特異点は存在しないが正確な初期データが入手できない場合の差分法による数値的な調和接続を考察した。この場合、数学としては厳密解が存在しない可能性もあるが、離散化によって得られる連立一次方程式にランク低減法を適用することから、誤差が混入した場合にも対処できることを示した。

分担者・西田詩は Poisson 方程式の初期値問題を解析函数の範囲で考察し、差分法による近似解が真の解に一様に収束することを証明した。この研究は、非適切問題である Poisson 方程式の初期値問題に差分法を適用して無限精度で計算することが可能であれば、真の解に収束する近似解列を構成できることを示しており、無限多倍長数値計算を用いることによって真の解を求めようとする試みに理論的に厳密な根拠を与えるものである。また、一階線形偏微分方程式の初期値問題に関して、解析函数の範囲で考察し差分法による近似解が真の解に収束することを証明した。この研究は冒頭に述べた代表者の先行研究の一般化であるが、代表者はさらに Banach スケールを用いる議論により西田詩の結果を発展させ、非適切問題を多倍長数値計算環境で行なうことの正当性を数学的に示すに至っている。

分担者・西村直志は非破壊評価に現れる逆問題や、光学の問題における形状設計問題への応用を目的として、高速高精度解法である高速多重極法を行ない、弾性体の方程式への適用とMaxwell方程式への適用を行ない成果を挙げている。特に光学における波動問題では、フォトニック結晶やメタマテリアルへの応用を考慮して周期問題の解法について研究を行い、特筆すべき顕著な成果を挙げている。西村の行なった数値計算領域を実現する実験技術が開発されれば、負の屈折率を持つ材料が作られることになり、いわゆる「透明人間」を実現することが可能となる。また逆問題の数値計算においては、解法の高速性が重要であることから前処理法の研究(特にCalderon の式を用いた前処理法)の研究を行ない、Maxwell 方程式の形状決定問題に関する研究を行い成果を挙げた。ただしこの研究は現在進行中であり、匿秘性の観点から論文発表は未だ行なっていない。

一方、逆問題解析の理論面の研究では、分担者・山本昌宏により、部分境界または部分領域における解の有限回の観測によって時間依存問題の空間変数に依存する係数を決定するという逆問題について、Carleman 評価によるアプローチを深化させた。具体的には弾性体の方程式の空間変数に依存する密度とラメ係数決定逆問題に対して、一意性ならびに条件付き安定性を証明した。また、双曲型方程式に対して Carleman 評価が成立するための係数の条件を物理的に自然な条件で記述した。

また分担者・西田孝明は計算機支援証明の観点から高精度計算に取り組んでいる。「流体の熱対流問題の解析と計算機援用解析」をテーマに、水平な帯状領域にある流体を下から一様に熱するときの流体の運動の物理パラメーターに依存した解析を行なった。これによって、以下の３点の成果を得た：(1) 上下の境界条件が stress-free の場合の空間２次元のロール型の分岐解と２次分岐解の存在証明を Rayleigh 数が臨界点からはなれたところでの計算機援用証明法としてまとめた。更に、空間３次元の六角形型と混合型の解の存在証明を計算機援用によって行えた。（２）物理的により自然な境界条件、上面が stress free で、下面が固定の境界条件の場合に、ロール型、六角形型、混合型などのパターン形成とその分岐曲線の延長、これらの１次分岐点からの分岐曲線とは離れたところにある解曲線の存在などの分岐構造の解明が、 Rayleigh 数が小さくない場合にも計算機援用解析として完了した。（３）上面が自由表面であり表面張力が温度に依存する Benard-Marangoni 熱対流の定常分岐、 Hopf 分岐がおこっているという定理の

証明が完了した。
　さらに、研究協力者の坂上貴之は、非粘性非圧縮流体の速度の不連続面として定義される渦層を二次元空間で考え，その不連続面の発展方程式（Birkhoff-Rott 方程式）の滑らかな初期値に対する解が有限時間で爆発することを多倍長数値計算によって試みた。従来の数値的研究では有限時間爆発は確からしいものの、何階微分が爆発するかについては議論があったが、無限精度多倍長数値計算によりそれが二階微分であるということを非常に確実な形で指摘することができた.
同様に研究協力者の岡本久は、非圧縮粘性流体の運動方程式であるナヴィエーストークス方程式の特殊解を研究した。特に、渦度に依存する線形流を含む場合を考察し、解が爆発する場合があることを発見した。コルモゴロフ流の解の定性的研究では韓国の中央大学の Sun-Chul Kim 教授との共同研究で、レイゾルズ数が大きいときに unimodal な解が安定に存在することを発見した。東海林まゆみ（日本女子大学教授）と自由表面の数値実験を行ったが、その際に多倍長数値計算環境を利用し成果を得ている。

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 143 件）
特に代表的な業績：
[1] Romanov, V. G.; Yamamoto, M., Recovering a Lame kernel in a viscoelastic equation by a single boundary measurement. Appl. Anal. 89 (2010), no. 3, pp.377-390. 査読有
[2] H. Fujiwara, T. Matsuura, S. Saitoh, and Y. Sawano：Numerical real inversion of the Laplace transform by using a high-accuracy numerical method, *FURTHER PROGRESS IN ANALYSIS – Proceedings of the 6th International ISAAC Congress* (2009) pp.574-583. 査読有
[3] Y. Otani and N. Nishimura, An FMM for orthotropic periodic boundary value problems for Maxwell's equations, Waves in Random and Complex Media, vol.19, pp.80--104, 2009. 査読有
[4] M. Kim, M. T. Nakao, Y. Watanabe and T. Nishida,″ A numerical verification method of bifurcating solutions for 3-dimensional Rayleigh-B{¥' e}nard problems ″,Numerische Mathematik, Vol. 111, pp.389-406, 2009. 査読有
[5] Sakamoto, Kenichi; Yamamoto, Masahiro, Inverse heat source problem from time distributing overdetermination. Appl. Anal. 88 (2009), no. 5, 735--748. 査読有
[6] Y. Sawano, H. Fujiwara and S. Saitoh：Real inversion formulas of the Laplace transform on weighted function spaces, *Complex Anal. Oper. Theory* Vol.2(3) (2008)pp.511-521. 査読有
[7] H. Fujiwara, T. Matsuura, S. Saitoh and Y. Sawano：Real inversion of the Laplace transform in numerical singular value decomposition, *J. Anal. Appl.* Vol.6(1)(2008) pp.55-68. 査読有
[8] K. Onishi, K. Shirota and T. Shigeta; Numerical solution to the Cauchy problem of the Laplace equation with noisy data.Theoretical and Applied Mechanics Japan, Vol.57, pp.481-486(2008). 査読有
[9]Kotoba NIDHIDA, Finite Difference Approximations to the Poisson Equation in a Class of Analytic Functions, Journal of Hyperbolic Differential Equations, Vol. 5, No. 1 (2008) ,85--98. 査読有
[10]Kotoba NISHIDA, Hiroshi FUJIWARA and Yuusuke ISO, Finite Difference Approximation of Ill-Posed Cauchy Problems, Theoretical and Applied Mechanics Japan, Vol. 57 (2008), 405--410. 査読有
[11] H. Fujiwara, H. Imai, T. Takeuchi, and Y. Iso：Numerical treatment of analytic continuation on multiple-precision arithmetic, *Hokkaido Math. J.*, Vol.36(4) (2007)pp.837-847. 査読有
[12] H. Fujiwara and Y. Iso：Application of multiple-precision arithmetic to direct numerical computation of inverse acoustic scattering, *J. Physics Conference Series*,Vol.73 (2007) Article No.012007. 査読有

〔学会発表〕（計 51 件）

〔図書〕（計 3 件）

６．研究組織
(1)研究代表者
　磯　祐介（ISO　YUUSUKE）
　京都大学・情報学研究科・教授
　研究者番号：70203065

(2)研究分担者
　西村　直志（NISHIMURA　NAOSHI）
　京都大学・情報学研究科・教授
　研究者番号：90127118

山本　裕（YAMAMOTO　YUTAKA）
京都大学・情報学研究科・教授
研究者番号：70115963
杉本　直三（SUGIMOTO　NAOZOU）
京都大学・医学研究科・教授
研究者番号：20196752
藤原　宏志（FUJIWARA　HIROSHI）
京都大学・情報学研究科・助教
研究者番号：00362583
東森　信就（HIGASHIMORI　NOBUYUKI）
京都大学・情報学研究科・研究員
研究者番号：10397573
今井　仁司（IMAI　HITOSHI）
徳島大学・ソシオテクノサイエンス研究部・教授
研究者番号：80203298
西田　孝明（NISHIDA TAKAAKI）
早稲田大学・理工学術院・教授
研究者番号：70026110
（H19→H20:連携研究者）
大西　和榮（OONISHI　KAZUEI）
茨城大学・理学部・教授
研究者番号：20078554
（H19→H20:連携研究者）
山本　昌宏（YAMAMOTO　MASAHIRO）
東京大学・数理科学研究科・教授
研究者番号：50182647
（H19→H20:連携研究者）
西田　詩（NISHIDA　KOTOBA）
鹿児島大学・理学部・助教
研究者番号：10274838
（H19→H20:連携研究者）

(3)連携研究者
なし

(4)研究協力者
松田　哲也（MATSUDA　TETSUYA）
京都大学・情報学研究科・教授
研究者番号：00209561
岡本　久（OKAMOTO HISASHI）
京都大学・数理解析研究所・教授
研究者番号：40143359
坂上　貴之（SAKAJYO　TAKASHI）
北海道大学・理学研究院・教授
研究者番号：10303603
中村　玄（NAKAMURA　GEN）
北海道大学・理学研究院・教授
研究者番号：50118535
田沼　一実（TANUMA　KAZUMI）
群馬大学・工学研究科・准教授
研究者番号：60217156
代田　健二（SHIROTA　KENJI）
愛知県立大学・情報科学部・准教授
研究者番号：90302322
中尾　充宏（NAKAO MITSUHIRO）
九州大学・数理学研究院・教授
研究者番号：10136418
友枝　謙二（TOMOEDA KENJI）
大阪工業大学・工学部・教授
研究者番号：60033916