様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９、Ｚ－１９　（共通）

KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２８ 年　 ６ 月 １６ 日現在

機関番号：２３９０１
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2011～2015
課題番号：２３５４０１５２

研究課題名（和文）超高精度数値解法を用いた波動場逆問題に対する数値的再構成法の研究

研究課題名（英文）A study of a high accurate numerical method for the inverse problem in the wave equation

研究代表者
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

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,800,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では，波動方程式の順問題に対する超高精度数値解法と密度型位相最適化問題に対する高精度数値的再構成法を開発した．波動方程式の順問題に対しては，空間方向を任意多点差分法，時間方向をGauss-Lobatto選点によるスペクトル選点法により離散化することで直接的解法を導出し，数値実験により高精度性と問題点を明らかにした．また，システム誤差を考慮しなくてよい非適切問題である位相最適化問題に対して，任意多点差分法とH1勾配法による高精度数値的再構成法を導出し，数値実験によりその有効性を明らかにした．

研究成果の概要（英文）：In this research, we considered about the numerical method to get a high accurate approximated solutions to the initial-boundary value problem in scalar wave equation. We apply the lattice-free finite difference method and the spectral collocation method with the Gauss-Lobatto points to the discretization in space and time direction, respectively. We show the effectiveness of our method by some numerical experiments.
Moreover, we consider a high accurate method for SIMP type topology optimization problem. We adopt the H1 gradient method to solve our problem. In order to get high accurate solution of the partial differential equation in our algorithm, we use the lattice-free finite difference method. By the numerical experiments, we check the effectiveness, stability, and convergency of our algorithm.

研究分野：数値解析

キーワード：非適切問題　高精度解法　波動場　数値的再構成手法　多倍長計算　密度型位相最適化問題　任意多点差分法　H1勾配法

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．

研究代表者は，波動場における逆問題，特に実用問題である鉄とコンクリートで構成された合成梁の欠陥同定問題に対する数値解法について研究し，一定の成果を挙げてきた．その研究において実測データを用いた数値実験を実施したが，実用上満足のいく結果を得ることが出来なかった．不十分な結果を得た大きな要因は，元の 3 次元物理現象を一定の仮定下で空間 1 次元問題へと帰着させたことによるモデル化誤差であることが，先行実験研究から示唆されている．本問題点に対する改良方法の一つとしては，問題を 3 次元のまま取り扱うことも考えられるが，一方，空間 1 次元へ問題を帰着させることは計算量の大幅減少につながり，実用上の利点は非常に大きい．すなわち，数理モデルの修正を行わずにモデル化誤差へ対処可能な手法の開発を行うことは，実用上非常に有用である．しかし現在までの逆問題研究において，データの測定誤差に関しての研究は多く存在するものの，モデル化誤差に対する対処法を考察しているものは少ない．またその対処法についても，モデル化誤差の上限を仮定して導出されていることが多いが，実用問題に対するモデル化誤差を正確に見積もることは一般的に不可能であるため，研究開始前の提案方法は実用上有用ではなかった．

そこで研究代表者は，モデル化誤差を考慮した逆問題に対する数値的再構成法の開発を新たな研究対象とし，考察した手法の効果を検証するため数値実験を試みた．しかし，その実験用プログラムでは有限要素法を用いており，離散化誤差の同定解に対する影響は，例え分割サイズを十分小さくしたとしても問題の非適切性により無視できない．そのため，モデル化誤差に対処するための手法研究において効果を数値的に検証するのは，非常に難しい状況にあった．

一方，測定誤差・モデル化誤差が無い場合における逆問題については，多倍長計算環境下における超高精度数値解法を用いることにより高精度な解の再構成が可能なことが，京都大学大学院情報学研究科磯祐介教授・藤原宏志助教（現在，准教授）のグループ，徳島大学工学部今井仁司教授（現在，同志社大学）のグループにより示されていた．しかし実用上，データの測定誤差およびモデル化誤差が無いという状況は考えられず，これらの手法は主に理論研究へのみ適用されていた．さらに波動場においては，超高精度数値解法の研究自体が少なく，特に時間依存の空間 2･3 次元に対する研究はほとんど行われていなかった．

２．研究の目的

本研究の目的の一つは，多倍長計算環境下における波動場順問題用の超高精度数値解法を開発することである．また開発した超高精度数値解法を用いて，データ測定誤差・離散化誤差・丸め誤差に対処可能な波動場逆問題に対する数値的再構成法を導出することも研究目的である．さらに実用問題へ開発手法を適用することにより，モデル化誤差が同定解へ及ぼす影響を正確に把握するという，モデル化誤差に対処した数値的再構成法開発の基礎研究も行う．これらの目的を達することで，理論・工学逆問題研究者に対して，有用な数値的再構成法と基礎研究結果を与えることを目指している．

３．研究の方法

本研究では， 2 次元スカラー波動場における順問題に対する超高精度数値解法と，観測誤差のみ発生しない位相最適化問題に対する高精度数値解法のための並列高精度数値計算プログラムを開発し，購入した並列計算可能な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) 2 次元スカラー波動場における順問題に対する高精度数値計算プログラム開発と数値実験

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，連立一次方程式を導出した．導出された連立一次方程式を高精度かつ高速に計算するため，多倍長計算ライブラリ exflib，並列ライブラリ MPI を用いた対角スケーリング付き BiCGSTAB法プログラムをC++言語により開発し，数値実験により有効性を検証した．

(2) 位相最適化問題に対する高精度数値的再構成手法プログラムの開発と数値実験実施

Poisson 方程式を支配方程式とする位相最適化問題に対して，任意多点差分法と多倍長計算ライブラリ exflib を用いた高精度数値的再構成手法プログラムを C++により開発した．開発プログラムを用いた数値実験を，並列計算可能なワークステーション等で実施し，開発手法の有効性を実証した．

４．研究成果

本研究では，「スカラー波動方程式の初期値境界値問題に対する直接高精度数値解法

の開発」と，データ測定誤差・離散化誤差・丸め誤差に対処可能な波動場逆問題に対する数値的再構成法導出の基礎研究となる「位相最適化問題に対する高精度数値的再構成手法の開発」を実施した．詳しくは，以下のとおりである：

(1) スカラー波動方程式の順問題に対する高精度数値解法の開発

スカラー波動方程式の順問題に対する超高精度数値計算アルゴリズムの開発と計算機への実装を実施した．

時間方向近似にはチェビシェフ多項式と Gauss-Lobatto 選点によるスペクトル選点法を，空間方向近似には求積点配置の自由度が高い任意多点差分法を採用することで，任意形状の空間領域におけるスカラー波動方程式の順問題に対する高精度解法の実現を試みた．開発数値解法において必要になる連立一次方程式の近似計算プログラムとしては，多倍長計算環境 exflib の利用を想定した外積形式ガウス消去アルゴリズムによる並列ソルバを開発し，それを用いて計算機への開発手法実装を実施した．さらに購入ワークステーションを用いて数値実験を行うことにより，一定数の選点・求積点数を用いて行った実験においては開発手法の高精度性を示唆する結果を得ることはできた．しかし，超高精度性を確認するためには，より多い選点・求積点，そして振動数の大きい例題に対する数値実験結果が必要となり，多倍長環境を利用したことによる使用メモリ量の関係から，係数行列の疎性を考慮した連立一次方程式の数値解法開発の必要性が明らかとなった．そこで本研究では，行列の疎構造を維持する対角スケーリングとフィルイン無し不完全 LU 分解を採用した．それらの前処理について多倍長計算環境下における数値実験を実施し，どちらの手法についても，反復回抑制に対して前処理より計算桁数を大きく取る方が効果的であることを明らかにした（図 1）．

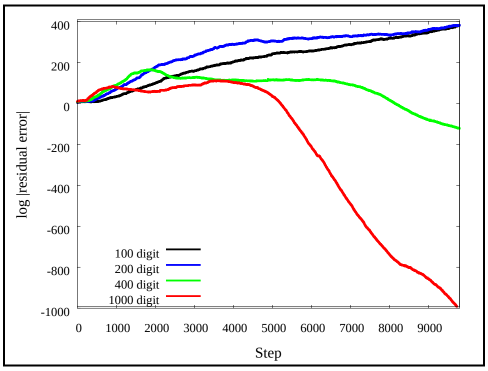

図 1 残差グラフ（対角スケーリング）

また，内部内積演算を荻田・大石らにより提案された高精度演算法に置き換えた高精度演算 BiCGSTAB 法を考案し，数値実験によりその効果を検証した．その結果，高精度演算を用いた場合においても，収束性に改善は見られなかった．以上の結果より，計算桁数を大きく取ることが，収束性にとって最も効果的であることが明らかとなった．しかし，計算桁数を大きく取ることは計算時間の増大を意味するため，今後は疎行列用直接解法の検討が必要であることを確認した．

(2) 位相最適化問題に対する高精度数値的再構成手法の開発

高精度数値解法を用いたデータ測定誤差・離散化誤差・丸め誤差に対処可能な波動場逆問題に対する数値的再構成法導出の基礎研究として，位相最適化問題に対する高精度数値的再構成手法の開発を実施した．

位相最適化問題とは，構造物において何らかの意味で最適 (エネルギー最小化等) な穴の配置や大きさを求める問題をいい，構造物におけるトラス構造の最適化問題，機械工学における部品最適設計など様々な分野で現れ，近年盛んに研究されている．一般の位相最適化問題は，特性関数により構造物の穴を表現した関数を係数とする偏微分方程式の係数同定逆問題としてモデル化される．しかし，このモデルに対する数値計算では，一般に数値不安定性現象が発生することが知られている．そこで，[0,1] を値域とし，対象領域の空間次元に対応したユークリッド空間を定義域とする適当に滑らかな関数 (シグモイド関数) を用いて定義したものを係数関数とする偏微分方程式を導入し，その係数関数を同定する密度型位相最適化問題が提案され，実用問題へと適用されている．ここでの係数関数は，シグモイド関数とその値を制御する設計変数の合成関数で構成されることが多い．しかし，密度型位相最適化問題もまた非適切問題であることが知られている．そのため，離散化・丸め誤差の影響により，最急降下法など非線形計画法を適用すると数値不安定現象が発生する．その問題に対処した様々な方法が提案されているが，名古屋大学大学院情報科学研究科畔上秀幸教授は数値的に安定かつ理論的にも一定の裏付けを持った H1 勾配法を開発した．

一方，密度型位相最適化問題においてデータは，設計者が材料を固定する等の条件を誤差が無い関数の形で与えるものである．つまり密度型位相最適化問題において対処すべき誤差は，離散化誤差

と丸め誤差のみである．したがって，高精度数値解法と多倍長計算を組み合わせる方法を用いることは，密度型位相最適化問題に対しても有効であると考えられる．また密度型位相最適化問題に対する各種勾配法の数値安定性は，ロバストな解法を倍精度環境で用いた場合において数値実験によりある程度明らかにされているものの，理論的には問題の複雑さ故に明らかにされていなかった．さらに H1 勾配法が，各種誤差の影響を抑え安定な数値解を得ているだけなのか，計算桁数・方法によらない非適切問題に対する正則化解法なのか明らかになっていない．

本研究では，Poisson 方程式による密度型位相最適化問題に対する高精度最適設計手法を開発し，それを用いて各種勾配法の数値安定性と収束性を明らかにし，さらに密度型位相最適化問題の高精度解を得ることを目的とした．高精度最適設計手法の基礎方法として勾配法を採用し，境界値問題の高精度解法としては任意多点差分法，また計算環境として多倍長計算ライブラリ exflib を用いることで，高精度手法の開発した．

密度型位相最適化問題に対する実験結果から，最急降下法は同じ反復ステップにおいては H1 勾配法よりコスト関数値を小さくする点で良好な結果が得られたものの，実験をしたすべての結果でステップサイズの更新に失敗し，計算が終了した．しかし，計算桁数と求積点数を増加させる，すなわち丸め誤差と離散化誤差を減少させることで，H1 勾配法においてこの問題は回避可能であることを数値例（図 2）により示した．最急降下法は，離散化・丸め誤差を減少させてもステップサイズの更新に失敗することから，密度型位相最適化問題に対して誤差の影響を受け易い不安定な方法であることが示唆された．また，偏微分方程式の離散化手法として有限要素法を用いた結果（図 3）との比較により，H1 勾配法は計算環境によらず安定な手法であり，さらに高精度最適化手法を用いることで，より安定な手法となることが示唆された．しかし問題に対する手法の安定性を示すには，計算桁数および求積点数を増加させていったときの理論解析が必須であり，今後検討を要する課題である．

一方，高精度解法を用いた提案手法によっても，KKT 条件を満足させることはできない，つまり停留点に到達させることが出来なかった．今後は，各ステップにおける未定乗数の決定手法などを検討し，開発高精度手法を停留点に到達できるよう改良する．また，その改良により H1 勾配法の収束性と安定性について，特に安定性については過大な安定化となっていないかを明らかにしなければならない．さらに，提案手法を線形弾性方程式など実用問題に現れる方程式を用いた密度型位相最適化問題に対して適用することも，今後の課題である．

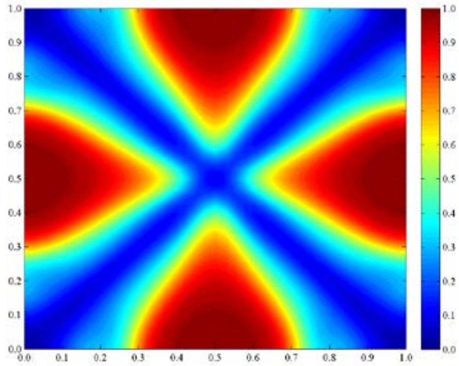

図 2 同定結果（300 桁, 任意多点差分法）

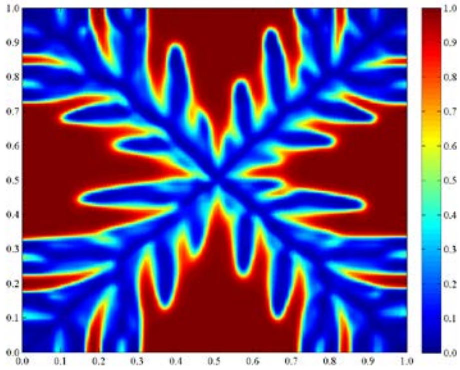

図 3 同定結果（倍精度，有限要素法）

本研究は，多倍長環境と高精度解法を用いることで，システム誤差以外の各種誤差を極力小さくし，それにより非適切問題に対しても高精度な解を得ることを目指したものであり，逆問題・非適切問題の分野ではその独創性に対して一定の評価を得ている．しかし，まだ基礎研究の段階であり，波動場の逆問題，そして実用問題への適用を実現するためには，さらなる研究の推進が必要である．

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 2 件）

① 渡邉祥，代田健二，勾配法と任意多点差分法を用いた高精度位相最適化手法の開発，日本応用数理学会論文誌，査読有, 26 巻, 2016 年, 1－20

② Shuichi Jimbo, Antonino Morassi, Gen Nakamura, Kenji Shirota, A non-destructive method for damage detection in steel-concrete structures based on finite eigendata, Inverse Problems in Science and Engineering, 査読有, Vol. 20, 2012, 233－

〔学会発表〕（計 10 件）

① 代田健二, 合成梁接触部欠陥同定逆問題に対する H1 勾配型解法, 日本応用数理学会 2016 年研究部会連合発表会, 2016 年 3 月 4 日, 神戸学院大学ポートアイランドキャンパス
② 代田健二, 合成梁接触部剛性係数同定逆問題への H1 勾配法の応用, 日本応用数理学会 2015 年度年会, 2015 年 9 月 10 日, 金沢大学角間キャンパス
③ 渡邉祥, 代田健二, 高精度数値解法を用いた密度型位相最適化問題に対する H1 勾配法, 日本応用数理学会 2015 年研究部会連合発表会, 2015 年 3 月 7 日, 明治大学中野キャンパス
④ 渡邉祥, 代田健二, H1 勾配法と任意多点差分法を用いた高精度位相最適化手法の開発, 第 63 回理論応用力学講演会, 2014 年 9 月 27 日, 東京工業大学
⑤ 渡邉祥, 代田健二, 高精度数値解法を用いた位相最適化問題に対する H1 勾配法, 日本応用数理学会 2014 年度年会, 2014 年 9 月 3 日, 政策研究大学院大学
⑥ 渡邉祥, 代田健二, 高精度数値解法を用いた H1 勾配法の有効性の検証, 第 10 回日本応用数理学会研究部会連合発表会, 2014 年 3 月 20 日, 京都大学吉田キャンパス
⑦ 渡邉祥, 代田健二, 最適設計問題への応用を目指した偏微分方程式に対する高精度数値解法の研究, 日本応用数理学会 2013 年度年会, 2013 年 9 月 11 日, アクロス福岡
⑧ 代田健二, スペクトル選点 - 任意多点差分法を用いた波動方程式の順問題に対する高精度数値解法, 第 62 回理論応用力学講演会, 2013 年 3 月 8 日, 東京工業大学大岡山キャンパス
⑨ 代田健二, スペクトル選点 - 任意多点差分法を用いた波動方程式に対する高精度数値解法, 計算力学と逆問題に対する数値解析 2013, 2013 年 2 月 1 日, 福岡大学セミナーハウス
⑩ 代田健二, 多倍長計算環境における波動方程式の順問題に対する高精度数値解法, 第 61 回理論応用力学講演会, 2012 年 3 月 8 日, 東京大学生産技術研究所

６．研究組織

(1)研究代表者

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