

平成 30 年 6 月 5 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2014～2017

課題番号：26400198

研究課題名(和文) 第一種積分方程式の直接解析による逆問題の高精度計算の新展開

研究課題名(英文) New High-Accurate Numerical Methods for Inverse Problems by the Direct Computations of Integral Equations of the First Kind

研究代表者

藤原 宏志 (Fujiwara, Hiroshi)

京都大学・情報学研究科・准教授

研究者番号：00362583

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,500,000円

研究成果の概要(和文)：代表的な逆問題である逆散乱問題を対象として、問題の数値的不安定性ゆえに計算誤差が増大して数値計算が破綻するような問題に対しても、高精度かつ高信頼な数値計算が可能であることを示した。また、この高精度計算を実現するために必要な多倍長計算環境を、科学・技術分野で広く利用される商用ソフトウェアMATLABで利用可能とした。得られた環境では、そこで公式に提供されるVPAに比して高速な計算を実現した。

研究成果の概要(英文)：We showed reliable and high-accurate numerical computations to inverse scattering problem which was known as a typical ill-posed problems in the sense of Hadamard. High-accurate discretization methods play an essential role in our method, and particularly multiple-precision arithmetic is required to reduce rounding errors. We also developed multiple-precision arithmetic environment on MATLAB which was widely used in scientific and engineering computation. The environment is faster than the official multiple-precision arithmetic environment VPA.

研究分野：数値解析学

キーワード：高精度数値計算 数値的不安定性 逆問題 非適切問題 第一種積分方程式 多倍長計算

1. 研究開始当初の背景

逆問題は、非破壊検査や医用断層撮影などに現れ、安全・安心な生活につながる問題である。しかしながら、これらの数値モデルは **Hadamard** の意味で非適切(ill-posed)とよばれる性質をもつ。特に数値計算などで具体的に解を再構成するうえで安定性の欠落が深刻であり、計算で混入する種々の誤差が計算過程で急激に増大して計算結果が意味をなさなくなることが知られている。従来は **Tikhonov** の方法に代表される正則化法を適用してある位相で安定化した問題を解くことが一般的であったが、解の不連続性など、応用上で重要な情報もなまされてしまうため、高精度な再構成は困難とされてきた。関数方程式の数値計算は、その離散化から始まる。代表的な離散化手法に差分法や有限要素法が挙げられ、そこでは微分作用素を差分で近似したり、関数空間を有限次元の関数空間で近似するが、これにより離散化誤差とよばれる誤差が混入する。これら差分法や有限要素法は汎用的であるものの特別に高精度な近似とはいえず、不安定な問題を近似するには不十分であり、問題に応じて適切な離散化が必要となる。一方、これで得られる離散スキームは本質的に実数の演算で記述されるが、電子計算機上ではこれら実数の表現と演算は 1985 年に定められた **IEEE754** にしたがって扱われる。科学・技術計算で標準的にもちいられる **IEEE754** 倍精度では実数は 10 進で約 15 桁の精度の浮動小数点演算で近似され、丸め誤差が混入する。**Hadamard** の意味で適切な問題は、多くの場合、自然な位相で安定であり、丸め誤差は増大したとしても大きな問題とはならず、したがってこの丸め誤差が数値解析の議論の中心的話題となることはほとんどなかった。一方、本研究で対象とする逆問題ではその不安定性のために丸め誤差への対処も不可欠である。これに対しては、浮動小数点数の小数部分の精度を向上させる多倍長計算が有効であり、代表者らの先行研究により 64 ビット計算機アーキテクチャおよびプログラミング言語 **C++**、**FORTRAN** のもとで高速に動作する独自の多倍長計算環境 **exflib** が構築され、分散メモリ並列計算 **MPI** などによる大規模問題の計算を実現してきた。しかしながら近年の計算環境の向上は目覚ましく、得にマルチコア CPU で一般的となってきた共有メモリ並列計算や、グラフ描画機能を統合するようなプログラミング環境への対応が望まれていた。

2. 研究の目的

本研究の目的は、代表的な逆問題である逆散乱問題に対して、理論面および計算環境の改善により高精度かつ信頼性の高い数値解を構成する手法を確立し、数値的に不安定な問題の数値計算に対して数値解析学の視点か

ら新たな知見を得ることである。このために、(1)典型的な非適切問題である、なめらかな核をもつ **Fredholm** 型の第一種積分方程式に対し、正則化法を経ない直接数値計算をおこない、その信頼性の意味を与えること、(2)このような高精度数値計算を一般的な計算環境で実現するためのソフトウェアパッケージを構築すること、のふたつを達成するために研究に取り組んだ。

3. 研究の方法

代表者らは先行研究で、高精度離散化と多倍長計算の併用により、計算に含まれる誤差を可能な限り除去する計算手法を実現し、数値的不安定を有する問題に対しても、正則化法を適用することなく、直接計算によって高精度な計算結果を構成してきた。本研究でもこの方針に従い、(1)理論面、(2)計算機アーキテクチャの両面から研究を推進した。まず(1)について、逆散乱問題に対しては数多くの研究があるが、広く知られているもののひとつである **Colton-Kress** の著書(1998)の定式化にしたがう。そこに現れるなめらかな核を持つ積分作用素は、自然な位相でコンパクト作用素となるため有界な逆作用素を持ちえず、逆散乱問題の非適切性の大半が集約されている。この第一種積分方程式を対象として数値解法の信頼性の検証に取り組んだ。次に(2)について、先行研究において設計・実装した多倍長計算環境 **exflib** を **OpenMP** に対応させる。さらに種々の分野の数値計算で広く利用されるようになった **MathWorks** 社製の統合計算環境 **MATLAB** で **exflib** を利用可能とする。

4. 研究成果

本研究期間内において、以下の結果を得た。

(1)仮想ポテンシャルの信頼性の確認手法の確立。本研究で扱う 2 次元の逆散乱問題は、位置と形状が不明な散乱体の存在する場に平面波を入力し、その遠方での散乱波で観測して散乱体の位置と形状を決定するものである。このアルゴリズムは、まず単位円周上での第一種積分方程式を解いて仮想ポテンシャルを求め、それをもちいて別の積分の等高線として散乱体の境界が得られる。この前半の第一種積分方程式を、**Colton-Kress** の著書に従って境界要素法で離散化し、**exflib** で 10 進数百桁の精度で数値計算をおこなうと、仮想ポテンシャルとして激しく振動する数値解が得られる。この振動は一見すると数値計算の破綻を想起させるが、これをもちいて未知の散乱体を再構成すると、極めて高精度に位置と形状が得られる。境界要素法と多倍長計算による高精度計算のため、この過程では計算誤差を抑制するための正則化法をもちいる必要はなく、第一種積分方程式の解

の構造を直接的かつ数値的な解析が可能となる。そこで仮想ポテンシャルに対応する数値解を円周上で数値積分したところ、分割数の増大とともに一定の値に収束していく様子が見られた。また、散乱体の形状や平面波の入射方向を変化させることで、この積分値も変化したため、この値は問題に固有の値であることもわかった。数学解析の理論の視点からは、超関数の立場では仮想ポテンシャルの単位円周上で積分値が一定の値に収束することは自然であり、数値計算結果と理論の両者が対応していることがわかった。一方、同じ計算を IEEE754 倍精度でおこなうと計算が破綻するため、多倍長計算の有効性も示された。

(2) 単位球面上の高精度数値積分則の構成。本研究は 2 次元の逆散乱問題を対象としたため、第一種積分方程式は単位円周上で積分となり、複合台形則が高精度数値積分をあてることが知られている。一方 3 次元では、積分方程式は単位球面上で設定されることになるため、高精度な仮想ポテンシャルを構成するには単位球面上の高精度数値積分則が必要と考えられる。そこで 3 次元の逆散乱問題の数値計算を視野にいれて、そこで必要と考えられる単位球面上の高精度数値積分則を構成した。単位球面上の積分を標準的な極座標(緯度と経度方向の変数)による二重積分で表し、緯度方向に Gauss-Legendre 則を、経度方向に複合台形則をもちいることで高精度が達成できるが、この手法では極付近に標本点が局在し、情報量に無駄が生じる。これに対し、Sobolev による正多面体群の作用について不変な高精度数値積分則(1962)が標本点の局在もなく積分方程式に適すると考え、数値計算によって標本点と重みを求めた。その結果、70,80,90 次といった高次の球面調和関数までをすべて厳密に積分可能かつ正二十面体回転群で不変な積分則の構成に成功した。特に次数が高い場合、球面調和関数の激しい振動からくる桁落ちを防ぐために exflib による多倍長計算が有効であった。得られた数値積分則では、Gauss-Legendre 則と複合台形則を組み合わせる場合のような標本点の極端な局在は見られず、標本点は球面上に一樣に配置された。また標本点数が同程度ならば、球面上のなめらかな関数に対して、本研究で構成した積分則のほうがより高精度な積分値を与えた。これは 3 次元での逆散乱問題の高精度直接数値計算の可能性を示唆するものである。

(3) 高速多倍長計算環境 exflib の OpenMP 共有メモリ並列計算への対応。Exflib の四則演算は OpenMP にも対応していたが、三角関数や指数・対数関数などの組み込み関数は対応していなかった。この理由は、exflib では組み込み関数の高速化のために予めワーキングメモリをグローバル変数として確保して利用しており、これが OpenMP では共有メモリとして扱われ、複数のスレッドが同じ

メモリ領域に書き込むためである。この問題に対し、複数スレッド実行時のワーキングメモリ領域の利用を再設計し、OpenMP での動作を実現した。特に OpenMP は近年一般的となっているマルチコア CPU 上で C++ 言語や FORTRAN で標準的に実行できるため、本成果は exflib をもちいた並列計算の高速化の普及に寄与すると期待される。

(4) MATLAB 上での exflib による高精度計算の実現。独自に設計と実装をおこなっている exflib は、高速計算のため、演算の中心部で C 言語や FORTRAN では提供されない CPU に固有な命令をもちいる。そのためアセンブリ言語で記述されている部分が多く、そのまま MATLAB のコードに移植することは困難であった。そこでアセンブリ言語で実装されたものも含めて exflib 内のメソッドを MATLAB から利用するための MATLAB Executable (MEX) ファイルを実装するとともに、これらを MATLAB の組み込み型と同様の式の記述で呼び出すためのクラスを設計した。この結果、MATLAB 上でのプログラミングにより多倍長計算 exflib の利用が可能となった。本環境は 64 ビットの Windows, MacOSX, Linux 上の MATLAB で動作している。また MathWorks 社は MATLAB のパッケージ Symbolic Math Toolbox の一部として多倍長計算環境 Variable Precision Arithmetic (VPA) を提供しているが、本環境と VPA とで連立一次方程式の求解に必要な計算時間を比較したところ、10 進 100 桁から 500 桁、未知数が 1000 個以下の範囲で、約 3 倍以上の高速化を実現した。一方で、C++ 言語から exflib を利用する場合と本インターフェースをもちいる場合とでは、後者が 2 倍から 3 倍程度の計算時間を要しており、さらなる改善の必要性がみられた。また実際に MATLAB の経験の豊富な研究者に利用してもらうとともに、国内外の学生を対象とした講習会で利用し、そこでの意見をフィードバックして改良を加え、利用しやすいものとした。本環境は後述の URL において公開しており自由にダウンロードと利用が可能である。

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 10 件)

- ① N. Higashimori, H. Fujiwara, and Y. Iso, Convergence of finite difference schemes applied to the Cauchy problem of quasi-linear partial differential equations of the normal form, *Advances in Difference Equations and Discrete Dynamical Systems*, (Eds. Elaydi, S., Hamaya, Y., Matsunaga, H., Peotzsche, C.), Springer Proceedings in Mathematics

- & Statistics, 2017, 査読有, pp.113-124.
- ② H. Fujiwara and N. Oishi, Direct Numerical Computation of the Stationary Radiative Transport Equation on Modern Parallel Architectures, Proceedings of the 2017 16th International Symposium on Distributed Computing and Applications to Business, Engineering and Science (DCABES 2017), 査読有, pp.29-32.
- ③ N. Higashimori and H. Fujiwara, Semi-discrete finite difference schemes for the nonlinear Cauchy problems of the normal form, Proc. Japan Acad., Vol.93(9) Ser. A, (2017), 査読有, pp.99-104.
- ④ Urume R, Suga M, Maekawa S, Fujiwara H, Development of Local Integral Type Reconstruction Formula for Magnetic Resonance Elastography, Proceedings of the International Forum on Medical Imaging in Asia (2017), 査読有, pp.60-62.
- ⑤ 藤原宏志, 生体内の光伝播の数値計算のための定常輻射輸送方程式の上流差分スキームの数値解析, 計算数理工学会レビュー (2017), 査読なし, pp.21-32.
- ⑥ 藤原宏志, 定常輻射輸送方程式の速度方向区分定数近似の数値解析, 計算数理工学論文集 Vol.16 (2016), 査読有, pp.91-96.
- ⑦ H. Fujiwara and S. Saitoh, The general sampling theory by using reproducing kernels, Contributions in Mathematics and Engineering - In Honor of Constantin Caratheodory, (Eds. Pardalos, Panos M., Rassias, Themistocles M), 査読有, Springer, 2016, 185-204.
- ⑧ 藤原宏志, メモリアクセスを考慮した輻射輸送方程式の並列計算の検討, 計算数理工学論文集 Vol.15 (2015), 査読有, pp.61-66.
- ⑨ 田中大毅, 藤原宏志, 西田孝明, 磯祐介, 線型移流方程式を解く CIP 法の安定性, 日本応用数理学会論文誌 Vol.25(2) (2015) 査読有, pp.91-104.
- ⑩ H. Fujiwara and N. Higashimori, Numerical Real Inversion of the Laplace Transform by Using Multiple-Precision Arithmetic, Lib. Math. (N.S.) Vol.34(2) (2014), 査読有, pp.5-21.
- Applications to Biomedical Problems and Foundations, 2018年2月21日, 東京大学.
- ② 藤原宏志, 連立線型方程式に対する定常反復解法の並列計算に関する一考察, 数値解析学の最前線 —理論・方法・応用— (RIMS 共同研究 (公開型)), 2017年11月10日, 京都大学数理解析研究所.
- ③ H. Fujiwara, Multiple-Precision Arithmetic on MATLAB for reliable computation of numerically unstable problems, 研究集会 Practical inverse problems based on interdisciplinary and industry-academia collaboration, 2017年10月25日, 九州大学マスコアインダストリ研究所.
- ④ 藤原宏志, 計算を科学する、計算で科学する, 平成28年度 京都大学情報学研究科 公開講座「面白くて社会に役立つ数値科学」, 2016年8月11日, 京都大学.
- ⑤ 藤原宏志, 光散乱積分の局所化による生体内の光伝播の数値モデルの高速直接計算法, 第19回ヒト脳機能マッピング学会, 2017年3月9日, 京都大学.
- ⑥ 藤原宏志, 東森信就, 2次元定常輻射輸送方程式の上流有限体積法による数値解析, 日本数学会 2016年度秋季総合分科会 応用数学分科会, 2016年9月18日, 関西大学.
- ⑦ H. Fujiwara and N. Oishi, Direct computation of the radiative transfer equation for near-infrared light propagation in biological tissue, The 11th AIMS Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications, 2016年7月5日, Orlando, Florida, USA.
- ⑧ H. Fujiwara, Numerical Computation of the 2D Radiative Transport Equation by Upwind Finite Volume Method, SIAM: East Asian Section Conference 2016, 2016年6月20日, Macau.
- ⑨ 藤原宏志, MATLAB 上の多倍長計算環境の開発と数値 Laplace 実逆変換への応用, RIMS 研究集会「偏微分方程式の逆問題とその応用の新展開」, 2016年1月28日, 京都大学数理解析研究所.
- ⑩ 藤原宏志, 磯祐介, 球面上の回転対称な高精度積分則と3次元輸送方程式の高速計算への応用, 日本機械学会 第28回計算力学講演会 OS15: 周期構造とシミュレーション技術, 2015年10月11日, 横浜国立大学.
- ⑪ 藤原宏志, 大石直也, On Determination of Optical Properties Using the Radiative Transport Equation, RIMS 研究集会「微分方程式の逆問題とその周辺」, 2015年1月26日, 京都大学数理解析研究所.

[学会発表] (計 14 件)

- ① H. Fujiwara, Numerical challenges to the radiative transport equation for near-infrared light propagation in tissue, Numerical Analysis:

- ⑫ 藤原宏志, 球面上の高精度積分則とある非適切問題への応用, 第 63 回理論応用力学講演会 OS14 逆問題解析とデータ同化の新展開, 2014 年 9 月 28 日, 東京工業大学.
- ⑬ 藤原宏志, 大石直也, ヒト頭部データをもちいる輻射輸送方程式の PC と GPU での高速計算, 第 17 回 日本光脳機能イメージング学会, 2014 年 7 月 26 日, 星陵会館.
- ⑭ H. Fujiwara, An Accurate Quadrature Rule on the Sphere for the Fast Computation of the Radiative Transport Equation, EASIAM 2014, 2014 年 6 月 25 日, Chonburi, Thailand.

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

○出願状況 (計 0 件)

名称 :
発明者 :
権利者 :
種類 :
番号 :
出願年月日 :
国内外の別 :

○取得状況 (計 0 件)

名称 :
発明者 :
権利者 :
種類 :
番号 :
取得年月日 :
国内外の別 :

〔その他〕

本研究で構築した多倍長計算ライブラリは <http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~fujiwara/exflib> で公開している.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

藤原 宏志 (FUJIWARA, Hiroshi)
京都大学・情報学研究科・准教授
研究者番号 : 00362583

(2) 研究分担者

滝口 孝志 (TAKIGUCHI, Takashi)
防衛大学校・総合教育学群・准教授
研究者番号 : 50523023

(3) 連携研究者

()

研究者番号 :

(4) 研究協力者

()