

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 13 日現在

機関番号：14301

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2011～2013

課題番号：23740075

研究課題名(和文) 正則化法による逆問題の高精度近似理論と次世代計算環境による数値的実現

研究課題名(英文) High-accurate Numerical Methods for Inverse Problems on Next-generation Computing Environments

研究代表者

藤原 宏志 (Fujiwara, Hiroshi)

京都大学・情報学研究科・助教

研究者番号：00362583

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,900,000円、(間接経費) 870,000円

研究成果の概要(和文)：数値的に不安定な問題に対する多倍長計算の有効性を示し、正則化法および再生核理論に基づく高精度離散化と合わせて非適切問題の高精度数値計算を実現した。また広く知られている安定性条件のもとでも丸め誤差が指数的に増大する例を構成して数値実験と理論解析の双方で示し、丸め誤差の影響と偏微分方程式の数値解析における安定性理論とが密接にかかわるものの本質的に異なる概念であることを明確にし、数値計算の信頼性について新たな知見を得た。

研究成果の概要(英文)：We have realized a high-accurate numerical computations for numerically unstable problems which arise in inverse or ill-posed problems. Our method consists of multiple-precision arithmetic, regularization scheme, and high-accurate discretization rules based on the theory of reproducing kernels. We also make examples where numerical solutions diverge under stable schemes due to accumulation of rounding errors. This means that theoretical stability of numerical schemes does not equivalent to the reliability of numerical solutions.

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 正則化法 数値的不安定性 非適切問題 高精度シュミレーション

1. 研究開始当初の背景

工学・建築の非破壊検査や、医学における非侵襲検査は、数学的には逆問題として定式化される。これらは社会の安全性と密接に関連し、特に解の再構成は重要な課題であるが、厳密解を構成することは一般に難しく、数値計算で近似的に解を求めることになる。しかしこれら逆問題は、Hadamard の意味で非適切 (ill-posed) であり、特に解がデータに連続的に依存せず、不安定であることが数値計算を困難なものとしている。すなわち数値計算においては各種の近似がおこなわれるが、これら近似で混入する誤差が不安定性により増大し、計算結果に大きな影響を与える。通常の数値解析理論は、適切 (well-posed)、特に安定な枠組みを対象に安定性や収束性をもつスキームが論じられているため、これらの手法を逆問題の計算に適用することはできない。そこで多くの場合、Tikhonov の正則化などの安定化手法で近似した後、適当な離散化をおこなって数値計算がおこなわれてきた。しかし、正則化法における近似誤差を小さくしようとすると元の問題の不安定性をも近似することになり、数値的に不安定な問題の高精度数値計算は不可能と考えられている。

2. 研究の目的

(1) 本研究は、非適切問題の離散化で現れる数値的に不安定な問題を対象とし、計算過程に現れる計算誤差を小さくすることによって高精度計算の可能性を示すことを目的とする。計算誤差としては、計算資源の有限性に起因する丸め誤差と、離散化に伴う離散化誤差、正則化法の近似誤差へを扱う。

(2) 科学技術計算で混入する丸め誤差は、計算機上での実数演算の近似に起因するものであり、この近似精度を向上させる多倍精度計算が数値的に不安定な問題に対する有効な解決手段であることを示す。現在の一般的な科学技術計算は 1985 年に策定された IEEE754 にしたがう演算をもちいておこなわれており、特に 10 進で 16 桁程度の精度をもつ倍精度浮動小数点演算がもちいられる。前述のとおり、従来の安定な枠組みでの数値解析では、これら丸め誤差は十分に小さく計算全体に影響を与えないと思われ、議論の中心に現れることはなかった。しかし非適切問題においては丸め誤差の影響も甚大である。これに対して、多倍長計算によって計算結果に丸め誤差の影響が現れないように十分な桁数を確保して数値計算をおこなうことが可能であることを示し、多倍長計算の有効性を確認する。

(3) 非適切問題に限らず科学技術数値計算においては、微分作用素や積分作用素を離散化した有限次元の問題を扱っており、数学的な意味でその逆作用素は連続である。また、

離散化パラメータや正則化パラメータ、計算精度 (用いる浮動小数点演算の型) をひとつとめて計算を行う限り、演算回数は有限であることから数値計算結果に含まれる誤差は有界であり、以上の意味で「安定」である。一方、数値解析で論じられる安定性や収束性理論は、それら各種パラメータが動くときの数値解の挙動を論じるものであって一回限りの計算に対する評価、特に定量的な信頼性を保障するものではない。この理論数値解析と実際に得られる数値解の信頼性との間の相違を念頭におき、計算結果の信頼性を考察する。

3. 研究の方法

(1) 丸め誤差に対処するため、計算精度を任意に設定して数値計算が可能な多倍長計算をもちいる。一般に多倍長計算はソフトウェアで実現され、計算コスト (メモリと時間) が莫大にかかるとされているが、報告者が先行研究で構築した計算環境 `exflib` により現実的な計算がおこなえることが示されており、まずはこれを利用する。問題によっては利用する演算やデータ型が限られ、それらに適した高速化が有効である場合もある。このような問題に対しては、例えば画像処理用のプロセッサである GPU (Graphics Processing Unit) を利用することで計算全体の高速化を図る。

(2) 離散化誤差については高精度離散化手法の適用が効果的である。スペクトル法が高精手法として利用されることが多いが、問題によっては問題固有の基底関数を構成して利用することが効果的である。そこで問題を限定するものの、再生核理論を利用し、グリーン関数に相当する再生核を構成して高精度離散化を実現する。

(3) 正則化における近似誤差を小さくするため、正則化パラメータを十分に小さく設定する。この際、元の問題の不安定性をも近似することになり、数値計算において数値的に不安定な問題が現れるが、これについては前項の多倍長計算および高精度離散化によって対処する。

(4) 数値計算で実際に得られる数値解の定量評価のため、多倍長精度での区間演算をもちいる。数値計算における丸め誤差は計算精度、演算の順序や用いるライブラリなど、ユーザが指定可能なパラメータのみならず、計算機アーキテクチャや並列計算における負荷分散などの実行時の状態に依存するため、事前に数学解析的に評価を与えることは事実上不可能である。そこで、演算ごとに丸め誤差を包含する区間を算出する区間演算を利用することが現実的である。不安定な問題にも適用するため、これを多倍長精度で実現する。

4. 研究成果

(1) 数値的不安定性を定量的に ULP (Unit in the Last Place) 単位で示す指標を提案し、その有用性を具体例で検証した。この指標は、数値的に不安定であるほど丸め誤差の増大が大きくなることに着目し、多倍長計算において計算精度が可変であるという特徴をもちいて事後誤差解析として算出するものである。具体的には、数値スキームの厳密解と数値解の差の絶対値を、スキームの厳密解およびもちいた計算精度の計算機イプシロンに相当する値で割った値である。ただし、数値スキームの厳密解を具体的に求めることは困難であるので、多倍長計算をもちいて計算精度を変更した計算を複数おこない、それらの計算結果に丸め誤差がないことを確認して利用することが有用である。これを複素逆 Laplace 変換の数値計算手法として知られる Hosono の方法と Sheen の方法に適用し、それぞれの数値計算における不安定性を調べた。その結果、いずれも数学的には Bromwich の方法に対する数値計算アルゴリズムでありながら、Sheen の方法においては逆変換像を求める計算点の値が増大するごとに不安定性が増大することが示されたのに対し、Hosono の方法においては不安定性は計算点の値に依存せず、ほぼ一定であるという結果を得た。

(2) GPU による多倍長精度演算により、CPU よりも高速な逆 Laplace 変換を実現した。これは報告者の指導した大学院生との共同研究の成果である。Laplace 逆変換は数値的に不安定な問題として代表的なものである。複素逆 Laplace 変換公式である Bromwich の方法の計算手法のひとつである Hosono の方法が GPU でのベクトル計算に適することに着目し、また、数値計算に現れる数の範囲が限られるため、浮動小数点演算よりもアルゴリズムが簡素な固定小数点多倍長精度演算のみで計算の主要部を実装することができ、条件分岐を得意としない GPU の特性を考慮した高速化を実現した。このアイデアは Hosono の方法による Laplace 逆変換のみならず、総和を繰り返すような計算、例えば多次元の積分に帰着される問題でも適用可能で、それらの問題で専用プロセッサによる固定小数点方式の高速多倍長計算の有効性を示唆するものである。

(3) 再生核の理論に基づき、観測点を任意に設定する離散化手法を構築し、多倍長計算により実現した。これは齊藤三郎氏(群馬大学名誉教授、Aveiro 大学)らとの共同研究である。また実際に常微分方程式の 2 点境界値問題と一階双曲型偏微分方程式に適用し、多倍長計算と組み合わせることで高精度な解の構成に成功した。本手法は変数係数の微分方程式の数値計算にも適用可能であり、例えば係数の符号によって方程式の型が領域内部で変わる非適切問題にも適用可能である。

(4) 現在広く利用されている IEEE754 浮動小

数点演算で得られる数値解における誤差の影響と、偏微分方程式の差分法の安定性理論との相違を指摘した。具体的には、安定性条件が成立するもとでも数値解に含まれる丸め誤差が指数的に増大する例を構成し、実際の数値計算においてもその解析どおりに誤差が増大することを示した。これにより順問題・逆問題を問わず、科学技術数値計算における安定性の理解に新たな知見を得た。これは磯祐介氏(京都大学教授)との共同研究である。数値解析において、安定性理論は誤差が増大しないことを保証するものとされており、安定性を有するスキームで計算する限りは丸め誤差が混入してもその増大は小さく問題にならないとされていた。例えば一階双曲型方程式の上流差分についての Courant-Friedrichs-Lewy 条件、熱方程式の陽的スキームの Neumann 条件があり、いずれも、時間方向と空間方向の格子幅について制約を課したスキームによる数値計算では丸め誤差が増大しないと思われていた。報告者はこれらの条件のもとで、多倍長精度の区間演算をもちいて丸め誤差の挙動を調べたところ、理論的安定性を有するスキームであるにもかかわらず区間幅が指数的に増大するという結果を得た。この結果から報告者は、丸め誤差の混入はスキームの安定性の視点からではなく、個々の(四則)演算のレベルで論じるべきであるとの結論に達し、理論的な安定性解析と数値解における誤差の挙動は密接に関連するものの、根本的に異なる概念であることが明らかになった。さらに上述の一階双曲型方程式の上流差分スキームが Courant-Friedrichs-Lewy 条件を満たす場合、および熱方程式の陽的差分スキームが Neumann 条件を満たす場合において、丸め誤差が指数的に増大する例を構成し、理論的な丸め誤差解析と実際の計算例によって安定性理論と実際の丸め誤差の挙動が異なることを示した。実際に丸め誤差の増大を見るには、単精度演算の場合で 10 の 8 乗程度の計算(時間方向の反復)回数を要すが、今後の計算機システムの高性能化にともなう数値計算の大規模化、特に先端科学技術にかかわる数値計算では十分に現れ得ると考えられ、本成果はそのような場合に丸め誤差の影響や計算結果の信頼性をどのように考えるかについて議論すべきであることを示唆するものである。

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 9 件)

安部公輔, 東森信就, 久保雅義, 磯祐介, 藤原宏志, 磯祐介, Courant-Friedrichs-Lewy 条件についての注意, 日本応用数理学会論文誌, 査読有, Vol.24, 2014, 15 - 26.
L. P. Castro, H. Fujiwara, M. M.

Rodrigues, S. Saitoh and V. K. Tuan, Aveiro Discretization Method in Mathematics: A New Discretization Principle, Mathematics Without Boundaries; Surveys in Pure Mathematics (Eds. P. M. Pardalos, T. M. Rassias), 査読有, Springer (掲載決定)

L. P. Castro, H. Fujiwara, T. Qian, and S. Saitoh, How to catch smoothing properties and analyticity of functions by computers?

Mathematics Without Boundaries; Surveys in Pure Mathematics (Eds. P. M. Pardalos, T. M. Rassias), 査読有, Springer (掲載決定)

L. P. Castro, H. Fujiwara, M. M. Rodrigues, and S. Saitoh, A new discretization method by means of reproducing kernels, Interactions between real and complex analysis (Eds. Le Hung Son and Wolfgang Tutschke), 査読有, Sci. and Tech. Publication House, 2012, 185 - 223.

藤原宏志, 3次元輻射輸送方程式の境界値問題の数値計算とその応用, 計算数理工学論文集, 査読有, Vol.12, 2012, 43 - 48.

L. P. Castro, H. Fujiwara, S. Saitoh, Y. Sawano, A. Yamada, and M. Yamada, Fundamental Error Estimate Inequalities for the Tikhonov Regularization Using Reproducing Kernels, International Series of Numerical Mathematics, (Inequalities and Applications 2010), 査読有, Vol. 161, 2012, 87 - 101.

眞鍋秀悟, 藤原宏志, GPU上の多倍長数値計算環境による複素逆 Laplace 変換の高速化, 計算数理工学論文集, 査読有, Vol.11, 2011, 31 - 34.

藤原宏志, 非適切問題の数値計算における丸め誤差の評価について, 第61回理論応用力学講演会講演論文集, 2012 (電子版のため項番号なし).

藤原宏志, 多倍長計算による高精度計算の実現に向けて, 査読無, 応用数理, Vol.21, 2011, 247 - 258.

[学会発表](計 8 件)

藤原宏志, 数値解析学と多倍長計算による高精度・高信頼な数値計算の実現, 日本学会会議 第3回計算力学シンポジウム, 2013年12月3日, 日本学会会議講堂.

安倍公輔, 東森信就, 久保雅義, 藤原宏志, 磯祐介, Courant-Friedrichs-Lewy条件についての一つの注意, 日本数学会 2013年度秋季総合分科会, 2013年9月27日, 愛媛大学.

渡部善隆, 藤原宏志, 中尾充宏, exflib

による平行 Poiseuille 流れの不安定性解析の高精度化, 日本応用数理学会 2013年度年会, 2013年9月9日, アクロス福岡.

Y. Iso and H. Fujiwara, A remark on the Courant-Friedrichs-Lewy condition in finite difference approach to PDE's, EASIAM-CIAM 2013, 2013年6月19日, the Newton Hotel, Bandung.

藤原宏志, 数値計算の信頼性 数値解析学と多倍長計算の視点から, 第14回情報学シンポジウム 数値シミュレーションと情報学, 2013年2月19日, 京都大学 百周年時計台記念館.

渡部善隆, 藤原宏志, exflib における多倍長区間演算 Fortran インターフェースとその応用, 日本応用数理学会 2012年研究部会連合発表会, 2012年3月8日, 九州大学.

H. Fujiwara, Direct treatment of numerical instability of inverse Laplace transforms using multiple-precision arithmetic, Laplace Transform Methods and Thier Applications, 2011年11月4日, National Institute for Mathematical Science, Daejeon, Korea.

H. Fujiwara, Remarks on Numerical Instability of Complex Inverse Laplace Transforms Using Multiple-Precision Arithmetic, The 7th EASIAM Conference 2011, 2011年6月29日, 早稲田大学北九州キャンパス.

[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]
構築した多倍長計算ソフトウェアを
<http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~fuji>

[wara/exflib](#) で公開しており，ダウンロードして利用することができる．
また区間演算による精度保証計算の一例として，数値的に不安定な問題として知られる Hilbert 行列の条件数を調べたものを <http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~fujiiwara/exflib/hilbert40.html> に示している．

6．研究組織

(1)研究代表者

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

(2)研究分担者

()

研究者番号：

(3)連携研究者

()

研究者番号：