

平成17年度研究ステーション研究成果報告書

1. 研究ステーション名 計算科学研究ステーション

代表者名 加古孝

2. 平成17年度の研究の特筆すべき成果

各人が下記に示すような研究成果を挙げた。また、国際・国内の研究集会において、これらの研究成果を発表するとともに、年度末には研究成果を持ち寄る形で研究ステーション主催の研究集会を開催し、研究交流を行うとともに、今後の研究の発展方向を探った。

加古 孝：音声生成に関して、領域変形に伴う複素固有値変分公式とそれを用いた周波数応答曲線、特にフォルマンツの設計問題で研究成果を挙げることが出来た。また、PML領域を用いる無限領域における波動伝播に対するFDTD法のいくつかの基本的な性質を明らかにし計算コードの開発を進めた。

竹田辰興：残差最小化学習ニューラルネットワークの応用として、GPSによる観測データから電離圏プラズマ密度の3次元分布を解析するために残差最小化学習ニューラルネットワークを用い流方法が少数データ3次元トモグラフィにも有効であることを確認した。高時間分解能（15分）で3次元電離圏プラズマ密度分布トモグラフィに成功した最初の例と考えられる。

小山大介：外部 Helmholtz 問題に対する DtN 有限要素法の事前誤差評価を導出し、そこで生じる線型方程式に対し幾つかの前処理を考えその有効性を数値実験を通して考察した。また、同問題に可制御法に DtN 境界条件を適用した際に生じる波動方程式の初期値・境界値問題の一意可解性を示した。仮想領域法において生じる制約行列の要素計算アルゴリズムを導出した。

福原 誠：ニューラルネットワークや自己組織化マップによるプラズマ崩壊予測の可能性を探るため、予備実験を行った。

山本野人：Bessel 関数の精度保証付き計算法についての結果を論文にまとめた。また関数方程式の解の一意性に対する数値的検証法に関し基礎定理を整理した。さらに、常微分方程式の精度保証法について初期値問題を境界値問題として捉えなおす手法を開発した。これは発展方程式の精度保証法にとって重要な手法になりうると考えている。

緒方秀教：周期的偏微分方程式問題への代用電荷法（基本解法）の拡張に関する一連の研究において、周期的弾性体問題に対する基本解法の拡張を提案した。また、3次元周期的流体（Stokes 流）問題・圧縮性流体に対する代用電荷法の拡張を行った。

今村俊幸：大規模固有値計算における新規分野として、物性計算における共役勾配法の研究を実施した。1000 億次元を越える問題に対して安定性を考慮した前処理の特性を調査した。地球シミュレータクラスの並列計算機において原点シフト付点ヤコビの有効性の発見から始まり、各種前処理において最小固有値探索で原点シフトが有効であることが検証された。これはクリロフ部分空間法における冪乗法的振舞による最小固有値・固有ベクトル成分消失の改善可能性を示唆しており、今後の展開が期待できる。

- 中村健一：興奮系などの化学反応に現れるスパイラルパターンを解析するために、キネマティックモデルと呼ばれる曲線の発展方程式の解析を行った。従来知られていた凸の定常回転スパイラル解だけでなく、凹凸が変化する定常回転スパイラル解の構造を完全に決定し、それをもとにスパイラルの形状と角周波数との関係を数値計算により明らかにした。
- 仲谷栄伸：スピン偏極電流による磁気モーメント反転に関するシミュレーションモデルの作成および検証を行う。作成したモデルは、磁気ドット内の渦構造の運動についての実験結果と良く一致し、モデルの正当性を示すことができた。またこの運動を利用したメモリの提案を行い、特許申請を行った。
- 村松正和：多項式最適化問題に対し、多項式の疎性という概念を導入し、それをを用いて中規模一大規模な多項式最適化問題を解けるようになった
- 片桐孝洋：米国カリフォルニア大学バークレー校の James Demmel 教授らの率いる LAPACK プロジェクトと共同研究を行い、その結果として、固有値計算に関する最先端アルゴリズム MRRR に関する情報を入手し、スーパーコンピュータ上での高速な実装方式の開発を行った。さらに、自動チューニング機能付き数値計算ライブラリ ABCLIB、特に固有値ソルバ ABCLib_DRSSD の公開した。また、ソフトウェア自動チューニング方式開発：ABCLIB における自動チューニング方式の開発した。

3. 平成17年度の研究成果の公表実績（主催した研究会、研究成果の発信状況等）

3.1. 以下のような研究集会を開催した。

★国際学会ミニシンポジウム主催：

山本野人：

The organizer of the minisymposium 'Validated Methods for PDEs' in SciCADE05 (2005 International Conference on Scientific Computation and Differential Equations) May 23-27, 2005, Nagoya, Japan.

★国際研究集会主催：

中村健一：

「Mathematical Analysis of Complex Phenomena in Life Sciences」

2005年10月25日から28日、於：東京大学駒場キャンパス 数理科学研究科棟

★研究ステーション主催研究集会：

=====

「計算科学研究ステーション」研究集会

日時：2006年 3月6日（月）～7日（火）

場所：電気通信大学 西地区 西9号館 3階 AVホール

<http://www.uec.ac.jp/acc/map.html> (アクセスマップ)

<http://www.uec.ac.jp/acc/campusnai.html> (建物配置図)

プログラム

3月6日（月） 10:00-17:10

「計算科学研究ステーション」研究集会 - その1-

-- 科学技術計算と数値解析の現状と課題 --

- 10:00-10:40 緒方秀教 (電気通信大学情報工学科)
2次元周期的3次元弾性問題に対する基本解法
- 10:50-11:30 片桐孝洋 (電気通信大学情報システム学研究科)
LAPACK4.0のMRRRアルゴリズムの並列化---多固有値多分法の提案---
- 11:40-12:20 仲谷栄伸 (電気通信大学情報工学科)
マイクロマグネティックシミュレーション
- 14:00-14:40 西田明美 (日本原子力研究開発機構(JAEA))
原子力プラントのための3次元仮想振動台の構築
- 14:50-15:30 村松正和 (電気通信大学情報工学科)
多項式最適化と半正定値計画
- 15:40-16:20 青山剛史、村上桂一、梁忠模 (JAXA 総合技術研究本部計算科学研究
グループ 非定常流セクション)
航空宇宙分野の音響問題について
- 16:30-17:10 Cho, Kum Won (韓国科学技術情報院(KISTI))
Development of Aerospace Research Integrated System including
Computational Framework

3月7日(火) 10:00-17:20

「計算科学研究ステーション」研究集会 - その2 -

竹田辰興教授退職記念研究集会

-- 核融合計算と計算科学 --

- 10:00-10:30 小山大介 (電気通信大学情報工学科)
外部 Helmholtz 問題に対する修正 DtN 境界条件を用いた有限要素法の誤差評価
- 10:30-11:00 今井仁司 (徳島大学工学部)
プラズマ平衡と無限精度数値シミュレーション
- 11:10-11:40 中村正彰 (日本大学理工学部)
江口・沖・松村方程式系(相分離を記述する方程式系)の解の構造
- 11:40-12:10 今村俊幸 (電気通信大学情報工学科)
地球シミュレータでの世界最大規模固有値計算
- 13:20-13:50 栗原研一(日本原子力研究開発機構核融合研究開発部門)
核融合プラズマ制御のための電磁場解析ソリューションの実践的研究
--プラズマの形を掴み、動きを操り、内部電流分布を探る--
- 13:50-14:20 徳田伸二(日本原子力研究開発機構システム計算科学センター)
磁気流体力学安定性における解析手法の発展と今後の課題
- 14:20-14:50 石澤明宏(核融合科学研究所理論シミュレーションセンター)
磁気流体不安定性と微視的乱流の相互作用のシミュレーション
- 15:00-15:30 古川 勝(東京大学大学院新領域創成科学研究科)
トロイダル回転トカマクにおけるバルーニングモード安定化の物理機構
- 15:30-16:00 廣田 真(東京大学大学院新領域創成科学研究科)
ハミルトニアン形式に基づいたMHD安定性理論の研究
- 16:20-17:20 竹田辰興 (電気通信大学情報工学科)
応用から見たニューラルネットワークの関数近似能力

3.2 以下のような研究成果の発表を行った。

★査読付き論文：

1. Kako, Takashi and Touda, Kentarou : Numerical method for voice generation problem based on finite element method, Journal of Computational Acoustics, Vol. 14, No. 1 (2006) pp. 45-56.
2. 柿原正伸, 小山大介, 藤野清次 : 外部 Helmholtz 問題で生じる線型方程式に対する前処理つき COCG 法の応用. 日本計算工学会論文集 2005 年号 No. 20050022.
3. D. Koyama: Well-posedness of the wave equation with an artificial boundary condition. Advances in Mathematical Sciences and Applications Vol. 15, No. 2, pp. 545--558 (2005).
4. 小山 大介 : 仮想領域法において生ずる制約行列の計算法 -四面体と三角形との交差部分の三角形分割アルゴリズム-. 日本応用数理学会論文誌, Vol. 15, No. 4 pp. 571--587 (2005).
5. D. Koyama: Error estimates of the DtN finite element method for the exterior Helmholtz problem. to appear in Journal of Computational and Applied Mathematics.
6. Wu Jun, Makoto Fukuhara, Tatsuoki Takeda, Parameter estimation of an ecological system by a neural network with residual minimization training, Ecological Modelling 189 (2005) 289 - 304.
7. X.F. Ma, T. Maruyama, G. Ma, T. Takeda, Three-dimensional ionospheric tomography using observation data of GPS ground receivers and ionosonde by neural network, Journal of Geophysical Research 110 (2005) A05208.
8. X.F. Ma, T. Maruyama, G. Ma, T. Takeda, Determination of GPS receiver differential biases by neural network parameter estimation method, Radio Science 40 (2005) RS1002.
9. 竹田辰興、小特集「ニューラルネットワークの応用と今後の課題」 1. 核融合プラズマ研究への応用に関する全般的解説、Journal of plasma and Fusion Research (2006) in Press.
10. 馬笑峰、竹田辰興、小特集「ニューラルネットワークの応用と今後の課題」 残差最小化学習ニューラルネットワークを用いた電離圏トモグラフィ、 Journal of plasma and Fusion Research (2006) in Press.
11. 山本野人・松田望「多倍長演算を利用した Bessel 関数の精度保証付き数値計算」日本応用数理学会論文誌 Vol. 15, No. 3, 2005, 347-359.
12. 渡部 善隆・山本 野人・中尾 充宏「楕円型方程式の解に対する局所一意性付き数値的検証法の効率化」日本応用数理学会論文誌, Vol. 15, No. 4, 2005.
13. N. Yamamoto, K. Genma, 'On error estimation of finite element approximations to the elliptic equations in nonconvex domains', Journal of Computational and Applied Mathematics, to appear.
14. Hidenori Ogata and Kaname Amano: A Fundamental Solution Method for Three-Dimensional Viscous Flow Problems with Obstacles in a Periodic Array, Journal of Computational and Applied Mathematics, to appear.
15. Hidenori Ogata: A Fundamental Solution Method for Three-Dimensional Stokes Flow Problems with Obstacles in a Planar Periodic Array, Journal of

- Computational and Applied Mathematics Vol.189, No.1-2 (2006) 622-634.
16. Hidenori Ogata: A Numerical Integration Formula Based on the Bessel Functions, Publications of the Research Institute for Mathematical Sciences Kyoto University, Vol.41, No.4 (2005), 949-970.
 17. Hidenori Ogata: Charge Simulation Method for Two-Dimensional Compressible Fluid Flow, The Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, Vol.22, No.1 (2005) 1-20.
 18. Jong-Shenq Guo, Ken-Ichi Nakamura, Toshiko Ogiwara and Je-Chiang Tsai: On the steadily rotating spirals, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, Vol. 23, No. 1 (2006), pp.1--19.
 19. H. Fukushima, Y. Uesaka, Y. Nakatani, and N. Hayashi, Magnetization reversal below the stoner-wohlfarth field, J. MMM. vol 290-291, Part1, April 2005, pp. 526-529.
 20. Y. Nakatani, A. Thiaville, and J. Miltat, Head-to head domain walls in soft nano-strips: a refined phase diagram, J. MMM. vol 290-291, Part1, April 2005, pp. 750-753.
 21. H. Endo, Y. Uesaka, Y. Nakatani, N. Hayashi and H. Fukushima, Effect of grains size on cluster size, J. Appl. Phys., vol. 97, May, 2005, pp. 10E312.
 22. A. Thiaville, Y. Nakatani, J. Miltat and Y. Suzuki, Micromagnetic understanding of current-driven domain wall motion in patterned nanowires, Europhys. Lett., 69(6), pp.990-996 (2005).
 23. Hayato Waki, Sunyoung Kim, Masakazu Kojima and Masakazu Muramatsu: Sums of Squares and Semidefinite Programming Relaxations for Polynomial Optimization Problems with Structured Sparsity", accepted by SIAM Journal on Optimization.
 24. 栗田圭介, 村松正和: 2次錐計画のサブクラスに対する単体法的アルゴリズムにおけるピボット選択規則について, 統計数理 Vol. 53, No.2, 349--360 (2005).
 25. Masakazu Muramatsu: A Pivoting Procedure for a Class of Second-Order Cone Programming, Optimization Methods and Software, 21(2006)295--314.
 26. Takahiro Katagiri, Kenji Kise, Hiroki Honda, and Toshitsugu Yuba : ABCLibScript: A Directive to Support Specification of An Auto-tuning Facility for Numerical SoftwareParallel Computing, Vol.32, Issue 1, pp.92-112 (January 2006).
 27. Takahiro Katagiri, Kenji Kise, Hiroki Honda, and Toshitsugu Yuba: ABCLib_DRSSSED: A Parallel Eigensolver with an Auto-tuning Facility Parallel Computing, Vol.32, Issue 3, pp.231-250 (March 2006).
- ★proceedings など :
1. 加古孝、大井祥栄: 非有界領域での数値解法における完全適合層(PML)について, 京都大学数理解析研究所共同研究集会「21世紀における数値解析の新展開」, 数理解析研究所講究録 1441 (2005) pp.187-197.
 2. Hidenori Ogata: Fundamental Solution Method for Periodic Plane Elasticity, ICNAAM2005 International Conference on Numerical Analysis and Applied Mathematics 2005 (eds. T.E. Simos, G. Psihoyios and Gh. Tsitouras), 2005,

428-431.

3. Ken-Ichi Nakamura and Toshiko Ogiwara: Large time behavior of unbounded global solutions to some nonlinear diffusion equations, 数理解析研究所講究録 1464 「変分問題とその周辺」, (2006), pp.164-172.
4. Takahiro Katagiri, Christof Voemel, and James Demmel: Automatic Performance Tuning for the Multi-section with Multiple Eigenvalues Method for the Symmetric Eigenproblem, Workshop On State-of-the-art In Scientific And Parallel Computing (PARA'06), Proceedings of PARA'06, pp. --, Umea, Sweden, June 18-21, 2006(accepted)
5. Takahiro Katagiri, Christof Voemel, James W. Demmel, 第13回「ハイパフォーマンスコンピューティングとアーキテクチャの評価」に関する北海道ワークショップ (HOKKE-2006)、北海道大学 学術交流会館 第一会議室、情報処理学会研究報告 2006-105、pp.25--30、2006年2月27日(月)、Multi-section with Multiple Eigenvalues Method for Computing Eigenvalues in Symmetric Tridiagonal Eigensolvers.
6. Takahiro Katagiri, Kenji Kise, Hiroki Honda, Toshitsugu Yuba, Twelfth SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP04), Sir Francis Hotel, San Francisco, CA, USA, February 24, 2006, Organized Session of "MS39 Adaptive Tools and Frameworks for High Performance Numerical Computations - Part I of III", ABCLibScript: A Directive to Specify Auto-tuning Facility -Its API and The Application Examples for Several Numerical Methods".

4. 外部資金の獲得状況

4.1. 科研費獲得

山本野人：科学研究費補助金・基盤C一般	160万円
緒方秀教：科学研究費補助金・若手B	110万円
中村健一：科学研究費補助金・若手B	110万円
仲谷栄伸：受託研究 日立製作所中央研究所	100万円
仲谷栄伸：奨学寄付金 情報ストレージ研究推進機構	310万円
村松正和：科学研究費補助金・若手B	70万円

4.2. その他の研究助成など

片桐孝洋：財団法人栢森情報科学振興財団、平成17年度一般研究助成、
「汎用的な数値計算処理に適用可能なソフトウェア自動チューニング方式の研究」(研究代表者) 60万円

5. 今後の研究発展 (外部への発信、外部資金獲得計画を含む)

5.1. 個々人の研究発展計画など：

加古：音声生成過程のシミュレーションを渡り音に対して拡張することを試みる。これに関連してPMLを用いたFDTD法の適用を計る。流体现象の有限要素近似におけるスプリアス解の出現について解明を進める。第17回領域分割法国際会議や日中韓セミナーで研究成果を発表する。平成19年の3月にミニ国際研究集会を開催する。

竹田：残差最小化学習ニューラルネットワークの有効性はこれまでに実験的に調べられて確認されているが理論的には不明な展が多いのでこれらを明らかにする。

小山：今までの研究成果を学位論文としてまとめる。また、線型水の波外部問題に対する DtN 有限要素法の事前誤差評価の導出, DtN 境界条件を含む問題に対する仮想領域法の適用とその有効性の考察などを考える。

山本：発展方程式の精度保証のための基本的なツールの開発にあたる。また、常微分初期値問題の精度保証法について整合性の良いものを探る研究も行う。

緒方：これまでの一連の代用電荷法拡張に関する研究の(1) 積分方程式法への拡張(2) 動的問題（波動・拡散現象など）への拡張(3) 高速多重極展開法などの応用による計算の高速化

今村：疎行列固有値ソルバーの開発と応用問題への適用が極めて重要であると認識している。応用分野の研究者とともに実際に我々の開発した手法の効果を調べるべきと考える。

中村：ある化学物質の濃度勾配を感知して移動する生物の個体数密度の時間変化を記述する、chemotaxis-growth モデルの界面ダイナミクスの解析を数値シミュレーションを交えながら行うことを計画している。解の漸近展開を利用して適切な比較関数を構成することで、より長時間の比較による評価が可能になり、平衡解の安定性解析に役立つと期待される。

5.2. 科学研究費補助金獲得：

加古 孝：科学研究費補助金・基盤C一般	170 万円
山本野人：科学研究費補助金・基盤C一般	継続
緒方秀教：科学研究費補助金・基盤C一般	獲得

5.3. 緒方秀教：電気通信大学・平成18年度研究・教育活性化支援システム・新任教員支援 研究に応募予定。

6. 代表的なピアレビュー論文発表、学会プレナリ、招待講演発表、特許出願、受賞等

6.1. 今村：One of the Gordon Bell Finalists.

Yamada, Imamura, Machida; 16.447 TFlops and 159-Billion-dimensional Exact-diagonalization for Trapped Fermion-Hubbard Model on the Earth Simulator, in Proceedings of ACM/IEEE SC|05, Seattle, 2005.

6.2. 招待講演

1. Y. Nakatani, A. Thiaville, and J. Miltat, Effect of edge roughness on domain wall motion in nanostructures, MISM2005, June, 2005, 28TL-D-4.
2. Y. Nakatani, Micromagnetic simulation model of spin current induced domain wall motion, International Workshop on Spins and Quantum Transport, International Frontier Center for Advanced Materials, Oct. 2005.
3. Y. Nakatani, Micromagnetic simulation model for spin current induced domain wall motion, The 1st RIEC International Workshop on Spintronics, Research institute of Electrical Communication, Oct. 2005.

6.3. 特許

仲谷：強磁性ドットのコア回転素子

6.4. 研究成果放映

片桐：片桐孝洋 主演、自動チューニング関連啓蒙TV番組、サイエンスチャンネル、サイエンスフロンティア21シリーズ、「コンピュータを高速化するソフトウェアづくり：世界最速を夢見て」、30分番組、日テレプラス&サイエンス（300チャンネル&278チャンネル）、2006年2月16日（木）、21：00－21：30（再放送）