

平成18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18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および日本応用数理学会の研究部会連合発表会を開催し、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。

今村俊幸：昨年度に引き続き、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。本年度は米国で開催されたスーパーコンピューティングの国際会議のGordon Bell Awardを獲るべく地球シミュレータ上での性能改善を実施した。

さらに疎行列ソルバーと対峙する密行列ソルバーの開発も実施した。開発したソルバーは現時点では世界最速と考えている。成果も評価されGordon Bell AwardのFinalistに2年連続で選出された。残念ながら賞には漏れたが、連続ノミネートは国内でも数少ない。

緒方秀教：2次元周期的3次元弾性問題に対する基本解法の拡張。1次元周期的2次元ポテンシャル問題に対する境界要素法の拡張。非斉次変形Helmholtz方程式に対する代用電荷法。1次元周期的2次元Stokes流問題に対する基本解法の拡張。

加古孝：音声生成問題における周波数応答関数の複素固有値の変分公式を利用した設計問題に対して韓国語の母音への適用例も含めて具体的な計算手法の開発を行い、妥当なフォルマントを持つ周波数応答関数を与えるアルゴリズムを構成し計算プログラムを作成した。

片桐孝洋：(1)高性能数値計算ライブラリ開発用言語：自動チューニング機能付き数値計算ライブラリ開発用言語ABCLibScriptの高度化、およびそのコードの公開 (2)ソフトウェア自動チューニング方式開発：固有値計算における2分法の高並列方式である多分法における、性能パラメタ自動チューニング手法の開発

小山大介：長年の研究成果を学位論文（波動問題に対するDirichlet-to-Neumann有限要素法）としてまとめた。外部Helmholtz問題に対する修正DtN(Dirichlet-to-Neumann)境界条件を用いた有限要素法の誤差評価と、無限領域における水面波動問題に対するDtN境界条件の打ち切りに関する誤差評価を導出した。

中村健一：反応拡散現象における界面運動に環境の非一様性が与える影響を解析することを目的として、ある反応拡散方程式の特異極限下で導かれる界面方程式を周期的な空間構造をもつシリンダー領域で考察した。時間周期的な波形・速度を持つ進行波解を全域解から構成するとともに、境界の形状が非常に細かい周期構造を持つ場合の平均伝播速度の評価を行った。

仲谷栄伸：スピン偏極電流による磁化操作シミュレーションおよび磁気記録シミュレーションに関する計算モデル作成と、これらを用いたシミュレーションを行った。特に前者では、京都大学小野教授との共同研究による磁化操作機構の解明や、NEDOプロジェクトを通し企業と連携しながらメモリ作成技術についての研究を行った。

村松正和：多項式最適化問題を対称錐を用いて拡張する問題を考え、その上で半正定値計画問題を用いて大域的最適解を求める枠組みを考案した。また、等式条件が多い多項式最適化問題に対し、数値計算を安定化/効率化するしかけを考え、数値実験を行なった。また、錐線形計画に対するピボット演算に関する研究も続けている。

山本野人：常微分方程式の精度保証付き計算法に関する新しい技法をいくつか開発し、これを実装・検証した。また、連想記憶に関する神経回路モデルとして新しい考え方に基づくものを提案し、計算機上でのシミュレーションを行った。以上の内容について国内・海外のいくつかの研究集会で講演を行った。

3. 平成18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）

1) 研究ステーションの主催で「計算科学セミナー」を年6回開催した：

第1回 2006年5月19日 緒方秀教（電気通信大学情報工学科）周期的ポテンシャル問題に対する積分方程式法：第2回 7月14日 奈良高明（東京大学大学院情報理工学系研究科）脳磁図逆問題に対する直接解法：第3回 9月1日 鈴木厚（九州大学大学院数理学研究院）部分構造反復法によるストークス問題ソルバー：第4回 10月27日 熊之光（湖南科技大学）Super convergence of Triangular Quadratic Finite Element Method with Interpolated Coefficients for Nonlinear Elliptic Problem：第5回 12月13日 吹春寛（(株)先端力学シミュレーション研究所）マルチグリッド法の適用による弾塑性有限要素法の効率化とプレス加工用CAEの実用化：第6回 2007年1月19日 新誠一（電気通信大学電気通信学部教授）先導的ITスペシャリスト養成プログラム

2) 第2回「計算科学研究ステーション」研究集会を開催した：2007年3月1日2日（電通大）：

プログラム：緒方秀教（電気通信大学情報工学科）周期的ポテンシャル問題に対する複素変数境界要素法：今村俊幸（電気通信大学情報工学科）粒子法を用いた数値シミュレーションと並列計算の応用：小山大介（電気通信大学情報工学科）無限領域における水面波動問題に対するDtN有限要素法：東田憲太郎・加古孝（電気通信大学情報工学専攻・情報工学科）複素固有値の変分公式に基づく声道設計アルゴリズムの実装：小森喬・山本野人（電気通信大学情報工学専攻・情報工学科）常微分方程式の精度保証法に関する新しい計算技法について：伊藤祥司（筑波大学大学院システム情報工学研究科）反復法に対する体系的な性能評価システムの開発について：渡部善隆（九州大学情報基盤センター）疎行列に対する線形方程式の直接解法を用いた固有値・特異値計算：須田礼仁（東京大学情報理工学系研究科）低階数近似のすすめ～センサーネットワークの自律的同期問題への応用：宮寄武・李英太・星伸太郎（電気通信大学 知能機械工学科・大学院知能機械工学専攻）準地衡風乱流渦モデルとその統計性：名古屋靖一郎（(株)アーク情報システム 先端技術センター数理解析部）河川流シミュレーションに対する σ 座標系の差分法：藤間昌一（茨城大学理学部）有限要素関数のランダム三角形上の数値積分：

水谷明（学習院大学理学部）4階非線形2点境界値問題に対する解の精度保証：佐々成正（日本原子力研究開発機構）原子気体BEC系における非線形波動ダイナミクス：中村健一（電気通信大学 情報工学科）非一様場における2種競争系の進行波の伝播速度

3) 日本応用数学会研究部会連合発表会「科学技術計算と数値解析」OSへ参加：3月3日

4. 外部資金の獲得状況

加古：科研費基盤研究(C) 平成18年度-20年度：170+70+90=330万円；今村：奨学寄付金：日立製作所中央研究所 48万円；片桐：科研費特定領域研究（情報爆発）平成19年度-20年度

村松：科研費基盤研究(C) 平成19年度 100万円；仲谷：委任経理金：情報ストレージ研究推進機構 310万円、受託研究：日立製作所中央研究所 100万円、受託研究：NEDO 700万円；緒方：科研費基盤研究(C) 平成18年度 100万円；山本：科研費基盤研究(C) 平成19年度 110万円

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）

今村：部分空間選択のアルゴリズムには様々な手法、対象行列、精度、対象計算機の組み合わせから最適なものを選ぶ必要があり、自動チューニングと呼ばれる最適化の一手法の適応を今後実施していきたい。加古：平成19年度9月に開催される国際会議で研究成果の招待講演で発表を予定。また、電通大で国際研究集会(WS)を9月下旬に開催予定。小山：無限領域における水面波動問題に対するDtN有限要素法の事前誤差評価の導出し、論文として公表することを目指す。DtN境界条件を用いたHelmholtzソルバーのソフトウェア開発を、企業との共同研究により、行うこと目指す。仲谷：18年度に引続き、スピン偏極電流による磁化操作機構の解明およびこれを用いたメモリ作成に関する研究と、シミュレーションを用いた磁気記録装置に関する研究を行う。緒方：ICIAM2007にて、周期的ポテンシャル

問題の境界要素法に関する研究発表(2) 外部資金として、CREST (研究領域「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」) などの研究助成に応募予定
山本：常微分方程式の精度保証法の研究を進め、これと偏微分方程式の精度保証法技術とを併せて、発展方程式の精度保証法につなげていく計画を持っている。

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

1) 受賞

小山：2006年度日本応用数学会論文賞、今村：平成18年度情報処理学会山下記念賞受賞

2) 招待講演

1. 今村俊幸：地球シミュレータによる並列計算-大規模固有値計算を中心に - 日本応用数学会平成18年度年会, 2006/09
2. 片桐孝洋、京都大学学術情報メディアセンター主催、第1回ANS研究会、「対称三重対角行列用固有値ソルバのためのLAPACK4.0 MRRRルーチンの実装について—多固有値多分法の開発とそのパラメタ自動チューニング—」 (招待講演) 2006. 9. 13
3. 片桐孝洋、「Multi-section with Multiple Eigenvalues Method for Symmetric Tridiagonal Eigenproblem and Its Performance on LAPACK 4.0 MRRR Routine」, Workshop on collaboration of Numerical Method and Large-Scale Scientific Computation、東京大学COE主催 (招待講演)
4. 2006.10.25、Y. Nakatani, Micromagnetic simulation model for spin current induced domain wall motion, The 1st RIEC International Workshop on Spintronics, Research institute of Electrical Communication, Feb. 2006. 他4件

3) 代表的な研究発表論文

1. Hidenori Ogata and Kaname Amano: A fundamental solution method for three-dimensional viscous flow problems with obstacles in a periodic array, J. Comput. Applied Math., Vol.193, No.1 (2006) 302-318.
2. Hidenori Ogata: A fundamental solution method for three-dimensional Stokes flow problems with obstacles in a planar periodic array, J. Comput. Applied Math., Vol.189, No.1-2 (2006) 622-634.
3. Hidenori Ogata: Fundamental solution method for three-dimensional elasticity problems with two-dimensional periodicity, ICNAAM2005 International Conference on Numerical Analysis and Applied Mathematics 2006 (eds. T.E. Simos, G. Psihoyios and Gh. Tsitouras), 267-270 (2006).
4. 山田進, 今村俊幸, 町田昌彦: 量子大規模固有値問題における共役勾配法の収束性: 適応的シフト前処理の収束性の評価, 日本計算工学会論文集, 論文番号20060027
5. 今村俊幸, 山田進, 町田昌彦: 地球シミュレータ上での18テラフロップス級及び1590億次元行列の厳密対角化計算: トラップされた強相関フェルミ原子ガスの基底状態探索, 数理解析研究所講究録「計算科学の基盤技術とその発展」1505, pp.145-156.
6. Susumu Yamada, Toshiyuki Imamura, Takuma Kano, Masahiko Machida: High-Performance Computing for Exact Numerical Approaches to Quantum Many-Body Problems on the Earth Simulator, in Proceedings of SC'06, ACM&IEEE, 2006/11.
7. 東田憲太郎, 加古孝: 複素固有値に対する変分公式と母音の数値シミュレーション, 日本応用数学会論文誌, Vol.16, No.3 (2006) pp.237-253.
8. Kako, T. and Touda, K.: Numerical method for voice generation problem based on finite element method, Journal of Computational Acoustics, Vol.14, No.1, (2006) pp.45-56.
9. Kako, T. and Touda, K.: Domain decomposition method for radiation and scattering problems with its applications, Domain decomposition methods: theory and applications, GAKUTO Internat. Ser. Math. Sci. Appl., Vol.25, 2006, pp.182-214,
10. Li, Deng, Douglas, C. C., Kako, Takashi, Masabumi, Suzuki and Ichiro,

- Hagiwara: A novel perturbation expansion method for coupled system of acoustics and structures.
 Comput. Math. Appl., Vol.51 No.11 (2006) pp.1689-1704.
11. F. Magoules and T. Kako Edited : "Domain decomposition methods: theory and applications", GAKUTO International Series. Mathematical Sciences and Applications, Vol.25. Gakkotosho Co., Ltd., Tokyo, 2006, 総ページ数 271ページ.
 12. 田中輝雄, 片桐孝洋, 弓場敏嗣: 電子情報通信学会論文誌, 分冊 : A : ソフトウェア自動チューニングにおける標本点追加型性能パラメタ推定法 (採録決定).
 13. Takahiro Katagiri, Christof Voemel, and James Demmel: Selected Paper of Workshop On State-of-the-art In Scientific And Parallel Computing (PARA'06), Springer LNCS: Automatic Performance Tuning for the Multi-section with Multiple Eigenvalues Method for the Symmetric Eigenproblem (採録決定).
 14. Teruo Tanaka, Takahiro Katagiri, and Toshitsugu Yuba: Selected Paper of Workshop On State-of-the-art In Scientific And Parallel Computing (PARA'06) : d-Spline Based Incremental Parameter Estimation in Automatic Performance Tuning (採録決定).
 15. Takahiro Katagiri, Christof Voemel, and James Demmel, Workshop On State-of-the-art In Scientific And Parallel Computing (PARA'06), Proceedings of PARA'06, CP4, pp.60, 4 pages, Umea, Sweden, June 18-21, 2006: Automatic Performance Tuning for the Multi-section with Multiple Eigenvalues Method for the Symmetric Eigenproblem.
 16. Teruo Tanaka, Takahiro Katagiri, and Toshitsugu Yuba: Workshop On State-of-the-art In Scientific And Parallel Computing (PARA'06), Proceedings of PARA'06, CP4, pp.60, 4 pages, Umea, Sweden, June 18-21, 2006: d-Spline Based Incremental Parameter Estimation in Automatic Performance Tuning.
 17. D. Koyama: Error estimates of the DtN finite element method for the exterior Helmholtz problem. J. Comput. Appl. Math. vol. 200, no. 1, (2007) pp. 21--31.
 18. J. Shibata, Y. Nakatani, G. Tatara, H. Khono, and Y. Otani: Current-induced magnetic vortex motion by spin-transfer torque, Phys. Rev. B 73, 020403(R) (2006).
 19. G. Tatara, T. Takayama, H. Kohno, J. Shibata, Y. Nakatani, and H. Fukuyama: Threshold Current of Domain Wall Motion under Extrinsic Pining, beta-Term and Non-Adiabaticity, J. Phy. Soc. Jpn., vol. 75, No. 6, June, 064708 (2006).
 20. Y. Uesaka, H. Endo, Y. Nakatani, N. Hayashi, and H. Fukushima: Switching Time of Single Magnetic Particle and Maximum Recording Frequency of Perpendicular Magnetic Recording, IEEE Trans, Magn. Vol.42 (No7) pp. 1892-1895 (2006).
 21. S. Kasai, Y. Nakatani, K. Kobayashi, H. Kohno, and T. Ono: Current-Driven Resonant Excitation of Magnetic Vortices, Phys. Rev. Lett. 97, 107204 (2006).
 22. H. Endo, Y. Uesaka, Y. Nakatani, N. Hayashi, and H. Fukushima: Formation of Magnetic Cluster in Perpendicular Thin Films, IEEE Trans, Magn. Vol.42, pp.2969-2971 (2006).
 23. Naoyuki Ishimura, Ken-Ichi Nakamura and Masaaki Nakamura: Bifurcations of steady states for the Eguchi-Oki-Matsumura model of phase separation, Applicable Analysis, Vol. 85, Nos. 6-7 (2006), pp.831--843.
 24. Hiroshi Matano, Ken-Ichi Nakamura and Bendong Lou: Periodic traveling waves in a two-dimensional cylinder with saw-toothed boundary and their homogenization limit, Networks and Heterogeneous Media, Vol. 1, No. 4 (2006), pp.537--568.
 25. H. Waki, S. Kim, M. Kojima and M. Muramatsu: Sums of squares and semidefinite programming relaxations for polynomial optimization problems with structured sparsity, SIAM Journal on Optimization 17(2006)218--242.

26. M. Muramatsu: Towards a pivoting procedure for a class of second-order cone programming problems having multiple cone constraints, *Pacific Journal of Optimization* 3(2007)87--98.
27. M. Kojima and M. Muramatsu: An extension of sums of squares relaxations to polynomial optimization problems over symmetric cones, *Mathematical Programming* 110(2007)315--336.
28. M. Kojima and M. Muramatsu: A note on sparse SOS and SDP relaxations for polynomial optimization problems over symmetric cones, *Computational Optimization and Applications*, to appear.
29. N. Yamamoto, K. Genma: On error estimation of finite element approximations to the elliptic equations in nonconvex domains', *J. Comput. Applied Math.*, 199 (2007) 286- 296.