

平成19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19年度の研究の特筆すべき成果

本研究ステーション主催で、国際研究集会 IWAMCS2007 を平成19年9月に4日間にわたり、電気通信大学80周年記念会館を会場に開催した。この研究集会を契機に、今後この分野における国際交流がさらに大きく進展することが期待できる。また、平成20年3月8日開催の日本応用数学会研究部会連合発表会におけるオーガナイズドセッションの開催に協力し、平成20年3月27日には、電気通信大学において研究ステーション主催の第3回研究集会を開催し、研究成果の発表と今後の研究の発展方向を巡って情報交換研究討議を行った。

以下に、研究ステーションメンバーによる特筆すべき研究成果を記載する。

今村俊幸：地球シミュレータをターゲットとした大規模固有値計算における効率的な実装方法に関して、「自動チューニング」の手法と新規アルゴリズム(LOBPCG)の適用の2本だてで研究を実施し、量子多体系の問題と多接合ジョセフソン素子の解析に重要な貢献を行った。

緒方秀教：1次元周期的に配列された無限個の障害物をすぎる2次元Stokes流の問題に対し、Stokes方程式の周期的基本解に基づく基本解法を開発した。さらに、1次元空間周期的なポテンシャル問題、たとえば、1次元周期的に配列された無限個の伝導体をもつ静電場の問題に対し、Laplace方程式の周期的基本解に基づく境界要素法を開発した。

加古孝：音声生成問題における複素共鳴固有値に着目した声道形状設計問題に対する研究で日本応用数学会論文賞を東田憲太郎氏と共に受賞した。スイスのローザンヌ工科大学で開催された J. Rappaz教授の還暦記念国際研究集会で招待講演を行うと共に、日本応用数学会の数理解析研究部会および数値設計研究部会の研究集会において研究成果に基づき招待講演を行い研究の更なる展開を目指す活動を行った。FDTD法による電磁場計算手法の解析を進めた。

小山大介：3次元無限領域における水面波動散乱問題において、散乱体が完全水没している場合に、その問題の数値解を求める一つの方法であるDtN(Dirichlet-to-Neumann)有限要素法の事前誤差評価を導出した。

中村健一：結晶成長に関連した、無限領域における反応拡散方程式の多重フロント解について考察し、フロント間の相互作用が反発的に働くことを漸近解析により明らかにした。

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、対称錐を用いた空間に拡張することに成功した。同じく多項式最適化問題を、半正定値緩和問題を用いて解く場合に、等式制約から生成されるイデアルを用いて半正定値計画問題を縮小させる方法を提案し数値実験によりその有効性を確認した。

山本野人：主として常微分方程式の精度保証法の研究を行った。特に、周期解を持つ方程式に対し、周期が特定されている場合について、発現する特異性を除去するための方法を提案し精度保証法の適用に成功した。また、解と周期を同時に精度保証付きで算定するための方法に対し理論的定式化を行った。

3. 平成19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) 国際研究集会 International Workshop on Applied Mathematics and Computational Science 2007 (IWAMCS2007) を 2007年9月25日～9月28日の4日間、電気通信大学80周年記念会館で研究ステーションとして主催開催した。集会の趣旨は、計算科学を主とする応用数理分野での国際交流を計ろうとするものであり、離散化手法・計算スキーム・安定性解析・計算技法などに関する講演が行われた。招待講演者は Zhong-Zhi Bai (Chinese Academy of Science): Craig Douglas (University of Kentucky): Houde Han (Tsinghua University): Toshiyuki

Imamura (The University of Electro-Communications): Hiroshi Isozaki (University of Tsukuba): Choi-Hong Lai (University of Greenwich): Frederic Magoules (Ecole Centrale Paris): Yoshimasa Nakamura (Kyoto University): Hisashi Okamoto (RIMS, Kyoto University): Marco Picasso (Ecole Polytechnique Federale de Lausanne): Tetsuya Sakurai (University of Tsukuba): Dongwoo Sheen (Seoul National University): Seiichi Shin (The University of Electro-Communications): Shinji Tokuda (Japan Atomic Energy Agency): Takashi Kako (The University of Electro-Communications) である。

2) 研究ステーションの主催の「計算科学セミナー」を年3回開催した: 第7回(2007年5月11日) 村岡浩 ((株)計算力学研究センター) “ACTRAN:FEM/IEM Helmholtzソルバーについて”、第8回(2007年7月4日) Jaques Rappaz (Ecole Polytechnique Federale de Lausanne, Suisse) “Patches of finite elements for singular solutions”、第9回(2008年1月11日) 齊藤宣一 (東京大学大学院数理科学研究科) “Scharfetter-Gummelの差分近似について”

3) 第3回「計算科学研究ステーション」研究集会: 2008年3月27日(電通大) を開催した。講演プログラム: 小山大介: 船のまわりの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について、赤木正慶、今村俊幸: Cell/BEを用いた粒子法の並列処理、渡豊志夫、加古孝: キャピタリー・フローの特異性を考慮した数値計算、栗田圭介、村松正和: 2次元バリア付き施設配置問題と大域的最適化、緒方秀教: 周期的形状壁を過ぎるStokes流に対する基本解法、松田望: 精度保証付き多倍長演算ライブラリの実装と応用、山本野人、小森喬: 周期解の精度保証について

4) 日本応用数学会研究部会連合発表会08「科学技術計算と数値解析」3月8日(首都大学東京)への参加協力。

4. 外部資金の獲得状況

緒方: 科研費基盤研究(C) 平成19年度 100万円; 加古: 科研費基盤研究(C) 平成19年度 70万円; 村松: 科研費基盤研究(C) 平成19年度 130万円; 仲谷: NEDO委任経理金: 情報ストレージ研究推進機構 300万円, TDK 100万円, 新日本製鉄 50万円, 日立製作所中央研究所 100万円, 受託研究: NEDOスピントロニクス不揮発性機能技術プロジェクト 1400万円, 受託研究: 日立グローバルシステムテクノロジー 60万円, 科研費特定領域研究「スピン流の創出と制御」390万円; 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)

研究ステーションとして研究会の定期的開催、研究集会の開催を行うと共に各人は以下のような研究テーマに取り組み、国内外での研究集会で研究発表、研究交流を進めてゆきたい。

今村: ペタスケールコンピュータの出現をひかえ、その未知の領域で効率的に機能する数値計算エンジンの研究並びに開発を本学でも進める必要がある。協力研究相手である日本原子力研究開発機構や自動チューニング研究会とともに精力的に行いたいと考えている。

緒方: 研究成果に関する査読つき論文を投稿準備中。

加古: 釜山および大連で開催予定の国際研究集会で研究成果を招待講演として発表予定である。また、EPF-Lausanne の J. Rappaz教授やM. Picasso講師らとの研究交流を深めると共に、音声生成ソフトの開発、MRI用のアンテナ設計の数値解法の開発に取り組む。

村松: ポスドクとして滞在する脇隼人氏と最適化アルゴリズム開発での共同研究を考えている。

仲谷: 19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。

中村: 科研費基盤研究(C)として不均質環境における生物種の生存競争について研究を行う。

山本: 開発した手法の力学系への応用、発展方程式の精度保証法の研究などを行う。

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: 東田憲太郎、加古孝: 2007年度日本応用数学会論文賞

2) 招待講演

1. T. Imamura, High-Performance Quantum Simulation: A Challenge to Schrodinger

- Equation on 256^4 Grids, International workshop on Applied Mathematics and Computational Sciences (IWAMCS2007), September 25, 2007 (Chofu, Japan).
2. T. Imamura, S. Yamada, T. Kano and M. Machida, High-Performance Quantum Simulation: A Challenge to Schroedinger Equation on 256^4 Grids, ICCSE2007, joint workshop on HPCAsia2007 (Seoul, Korea).
 3. T. Kako, Numerical Method for Shape Design Problem Related to Voice Generation Phenomena, Conference in Honour of Jacques Rappaz on the Occasion of his 60th Birthday, September 7, 2007 (EPF-Lausanne, Suisse).
 4. T. Kako, Finite element method and spectral analysis for wave propagation phenomena, International workshop on Applied Mathematics and Computational Sciences (IWAMCS2007), September 26, 2007 (Chofu, Japan).
 5. M. Muramatsu, R. Miyashiro, and Y. Yano, The maximum number of strings on the Go board, Workshop on Advances in Optimization, April, 2007 (Tokyo, Japan).
 6. M. Muramatsu: Semidefinite programming relaxation for polynomial optimization problems, International Conference on Modeling, Computation and Optimization, January, 2008 (Delhi, India).

3) 代表的な研究発表論文

1. S. Yamada, T. Imamura, T. Kano, Y. Ohashi, H. Matsumoto and M. Machida, Ultra Large-scale Exact-diagonalization for Confined Fermion-Hubbard Model on the Earth Simulator: Exploration of Superfluidity in Confined Strongly Correlated Systems, Journal of the Earth Simulator, 7 (2007).
2. 緒方秀教: 1次元周期的2次元Stokes流に対する基本解法, 京都大学数理解析研究所講究録 1566, (2007) pp.119- 131.
3. T. Kako and Y. Ohi : Numerical method for wave propagation problem by FDTD method with PML, Lecture Notes in Computational Sci. and Engin., 60 (2007) pp.551-558.
4. M. Kojima and M. Muramatsu, An extension of sums of squares relaxations to polynomial optimization problems over symmetric cones, Mathematical Programming, 110 (2007) pp.315-336.
5. 宮代隆平、矢野洋平、村松正和, 囲碁における連数の最大値について, 情報処理学会論文誌, 48 (2007) pp.3463-3469.
6. C. Vo, M. Muramatsu and M. Kojima, Equality based contraction of semidefinite programming relaxations in polynomial optimization, Journal of Operations Research Society of Japan, 51 (2008) pp.111-125.
7. H. Fukushima, Y. Uesaka, Y. Nakatani, and N. Hayashi, Switching times of a single-domain particle in a field inclined off the easy axis, J. Appl. Phys., 101, 013901 (2007).
8. K. Yamada, S. Kasai, Y. Nakatani, K. Kobayashi, H. Kohno, A. Thiaville, and T. Ono, Electrical switching of vortex core in a magnetic disk, Nature Materials, 6, (2007) pp.270-273.
10. A. Yamaguchi, H. Miyajima, T. Ono, Y. Suzuki, S. Yuasa, A. Tulapurkar, and Y. Nakatani, Rectification of radio frequency current in ferromagnetic nanowire, Appl. Phys. Lett., 90, 182507 (2007).
11. A. Thiaville, Y. Nakatani, F. Piechon, J. Miltat, and T. Ono, Transient domain wall displacement under spin-polarized current pulses, Eur. Phys. J. B, (2007) pp.27.
12. Y. Nakatani, J. Shibata, G. Tatara, H. Kohno, A. Thiaville, and J. Miltat, Nucleation and dynamics of magnetic vortices under spin-polarized current, Phys. Rev. B 77, 014439 (2008).
13. 中村健一, 均質化の基本的なアイデアと不均質媒体中のフロント伝播への応用, 数理解析研究所講究録「生物数学の理論とその応用」, to appear.
14. 田中一穂、矢野慎一郎、山本野人, 連続した入力パタンのあいだの順序関係を認識する神

経回路モデル —情報の予測・抽象化に向けて—, 日本応用数理学会論文誌, 18-1 (2008)
pp. 87-105.