

平成20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20年度の研究の特筆すべき成果

研究ステーション主催の「計算科学セミナー」を電気通信大学で7回にわたり開催すると共に、平成21年3月3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4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。また、平成20年9月19日開催の日本応用数学会年会(東京大学)でのオーガナイズドセッション「科学技術計算と数値解析」、および平成21年3月8日開催の日本応用数学会研究部会連合発表会(京都大学)におけるオーガナイズドセッション「科学技術計算と数値解析」の開催に協力した。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：来るべきペタスケール計算機時代に備えた大規模固有値計算アルゴリズムの研究を実施した。基本的には、疎行列向けのソルバとしてLOBPCGアルゴリズムについて段階的な収束をブロックレベルでコントロールする手法を提案した。また、密行列の対称行列についてはマルチコア向けのブロック化手法により、従来の定石である三重対角化ではなく帯行列化の系統のアルゴリズムの研究を実施し、東大 T2K スパコンによりペタコンにつながる成果を得た。

緒方秀教：ポテンシャル問題の数値解法として近年開発された複素変数境界要素法(complex variable boundary element method, CVBEM)を周期的ポテンシャル問題に拡張した。CVBEMは複素関数論におけるCauchyの積分公式を境界積分方程式として、それを数値的に解くことにより解を求める解法である。緒方は、Cauchyの積分公式を周期的解析関数の場合書き直して解くことにより、周期的ポテンシャル問題の場合に拡張した。そして、数値実験によりその方法の有効性を確認した。

加古孝：大学院生らとともに音声生成の3次元計算に取り組むとともに、音源のシミュレーションのモデルについて基礎的な研究を行い、渦音の2次元的な計算手法を開発し研究会で発表した。FDTD法による電磁場のシミュレーションに関してもアンテナの数理モデルや給電のモデル化を考察し、結果を研究集会で発表し論文にまとめる作業を現在行っている。音声生成に関しては従来の結果を国際研究集会で発表し、構造連成問題の摂動計算に関する論文も発表した。

小山大介：3次元無限領域における水面波動散乱問題に対するDtN(Dirichlet-to-Neumann)有限要素法の事前誤差評価を導出した。昨年度は散乱体が完全水没しているという仮定のもとに導出したが、今年度は散乱体が水面に浮いているという仮定のもとに導出した。また、修正Bessel関数とHankel関数の新たな性質を発見することにより、DtN境界条件を表現する無限級数の打ち切り誤差の評価に関し、昨年度のものを精密化した。Helmholtz方程式の外部多重散乱問題に対する多重DtN有限要素法のメッシュサイズのみに対する事前誤差評価を導出した。

中村健一：不均質環境における侵入生物の空間伝播に関して重定らにより提案された拡張フィッシャー方程式に対して均質化法のアイデアを適用することにより、環境変動が非常に小さいスケールで起こっている場合の進行波解の伝播速度に関する公式が従来よりも平易な方法で得られることを示した。

仲谷栄伸：シミュレーションおよび実験により電界による磁化反転の可能性を示した。さらに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。

村松正和：多項式最適化問題に対する半正定値計画緩和に関して、数値的に非常に悪条件となる例があることを見つけ、その悪条件の原因を究明した。現在、その悪条件をシステム的に取り除く研究を行っている。

山本野人：常微分方程式に対する精度保証法について、Taylor Model法の研究・周期解についての研究など、現時点での技法の整備やさらなる発展に寄与した。

3. 平成 20 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の「計算科学セミナー」を年 7 回開催した：4 月 25 日：脇隼人（電通大）”多項式最適化問題に対する半正定値計画緩和”，5 月 23 日：田邊國士（早大）”Universal Induction Machines PLRM and dPLRM for Probabilistic Multiclass Discrimination and its Applications”，6 月 20 日：Jacques Rappaz (EPF-Lausanne) : “Modelling and domain decomposition method for computing ferromagnetic effects”，9 月 5 日：Guillaume Jovet (EPF-Lausanne) ” Numerical simulation of free boundary problems using a volume-of-fluid formulation and applications”，9 月 16 日：久保隆貴（筑波大）”DE-Sinc-Nystrom 法を用いた数値計算法について”，山中脩也（早大）：“DE 公式を用いた高速精度保証付き自動積分法の改良”，木下武彦（九大）：“Legendre 多項式による境界値問題の解の高精度数値検証”，松田望（電通大）：“多倍長演算と精度保証付き数値計算”，10 月 27 日：小林亮（広島大）：“講演タイトル：真正粘菌変形体とその数理モデル”，3 月 23 日：DENG, Li (Rensselaer Polytechnic Inst.): “Application for a Novel Perturbation Expansion Method”

2) 第 4 回「計算科学研究ステーション」研究集会：2009 年 3 月 3 日（電通大）を開催した。講演プログラム：山本野人（電通大 情報工学科）、Seng Ratha（電通大大学院 情報工学専攻 M2）：ローレンツ方程式の周期解の精度保証による存在証明、脇隼人（電通大 学振特別研究員）、中田真秀（理化学研究所）、村松正和（電通大 情報工学科）：半正定値計画緩和に対する多倍長計算の有効性について、小山大介（電通大 情報工学科）：多重 DtN 境界条件が課された Helmholtz 問題の一意可解性、佐藤知徳（電通大大学院 情報工学専攻 M1）：Cell Broadband Engine を利用したマイクロマグネティックシミュレーションの高速化、Sukma Puruwanoto Bagus（電通大大学院 情報工学専攻 M2）、加古孝（電通大 情報工学科）：津波遡上の数値シミュレーションにおける境界条件について、池永雅幸（電通大大学院 情報工学専攻 M2）、加古孝（電通大 情報工学科）：3 次元ヘルムホルツ方程式に対する有限要素計算と音声生成シミュレーション、中村健一（電通大 情報工学科）：不均質環境における侵入生物の伝播速度-均質化法によるアプローチ

3) 日本応用数学会年會 OS「科学技術計算と数値解析」2008 年 9 月 19 日（東京大学）への参加協力。および、日本応用数学会研究部会連合発表会 OS「科学技術計算と数値解析」3 月 8 日（京都大学）への参加協力。

4. 外部資金の獲得状況

緒方：平成 20 年度科研費基盤研究(C)；加古：平成 20 年度科研費基盤研究(C)；村松：平成 20 年度科研費基盤研究(C)；仲谷：委任経理金 情報ストレージ研究推進機構、新日本製鉄、受託研究 TDK、日立製作所中央研究所、NEDO スピントロニクス不揮発性機能技術プロジェクト、科研費特定領域研究；山本：科研費基盤研究(C) など

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、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。特に、UEC ソフトウェアリポジトリの計画に数値計算ソフトや科学技術計算ソフトの分野で貢献していくことを目指したい。

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) 招待講演

1) KAKO, Takashi: Numerical Method for Maxwell Equation by FDTD Method with PML Applied to MRI Problem, SCA (Scientific Computing and Applications) 2008/6 韓国(釜山)
2) KAKO, Takashi : Numerical simulation of voice generation and vocal tract shape design problem via resonance poles, DCABES (Distributed Computing and Algorithms for Business, Engineering, and Sciences) 2008/7 中国(大連)

2) 代表的な研究発表論文

1. Hayato Waki, Hiroshi Sugimoto, Masakazu Kojima and Masakazu Muramatsu, Sarse

- POP: a sparse semidefinite programming relaxation of polynomial optimization problems, *ACM Transaction of Mathematical Software*, Vol. 35, No.2, 15(2008).
2. Masakazu Muramatsu, and Masakazu Kojima, Equality based contraction of semidefinite programming relaxation in polynomial optimization, *Cong Vo, Journal of Operations Research Society of Japan*, 52(2008)111-125.
 3. D. Chiba, M. Sawicki, Y. Nishitani, Y. Nakatani, F. Matsukura, and H. Ohno, Magnetization vector manipulation by electric fields, *Nature*, 455, 515-518(2008).
 4. H. Tanigawa, T. Koyama, M. Barkowiak, S. Kasai, K. Kobayashi, T. Ono, and Y. Nakatani, Dynamical Pinning of Domain Wall in a Magnetic Nanowire Induced by Walker Breakdown, *Phys. Rev. Lett.* 101, 207203 (2008).
 5. S. Kasai, P. Fischer, Mi-Y. Im, K. Yamada, Y. Nakatani, K. Kobayashi, H. Kohno, and T. Ono, Probing the spin polarization of current by soft X-ray imaging of current-induced magnetic vortex dynamics, *Phys. Rev. Lett.* 101, 237203 (2008).
 5. K. Yamada, S. Kasai, Y. Nakatani, K. Kobayashi, and T. Ono, Switching magnetic vortex core by a single nanosecond current pulse, *APL*, 93, 152502 (2008).
 6. 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).
 7. T. Ono, and Y. Nakatani, Magnetic Domain Wall Oscillator, *Appl. Phys. Express*, 1, 061301, (2008).
 8. K. Kondou, N. Ohshima, S. Kasai, Y. Nakatani and T. Ono, Single shot detection of the magnetic domain wall motion by using TMR effect, *Appl. Phys. Express*, 1, 061302, (2008).
 9. H. Tomita, K. Konishi, T. Nozaki, H. Kubota, A. Fukushima, K. Yakushiji, S. Yuasa, Y. Nakatani, T. Shinjo, M. Shiraishi, and Y. Suzuki, Single-Shot Measurements of Spin-Transfer Switching in CoFeB/MgO/CoFe/B Magnetic Tunnel Junction, *Appl. Phys. Express*, 1, 061303, (2008).
 10. P. Warnicke, Y. Nakatani, S. Kasai, and T. Ono, Long-range vortex domain wall displacement induced by an alternating current: Micromagnetic simulations, *Phys. Rev. B* 78, 012413 (2008).
 11. A. Thiaville, and Y. Nakatani, Electrical recrification effect in single domain magnetic microstrips: A micromagnetics-based analysis, *JAP*, 104, 093701 (2008).
 12. T. Koyama, G. Yamada, H. Tanigawa, S. Kasai, N. Ohshima, S. Fukami, N. Ishiwata, Y. Nakatani, and T. Ono, Control of Domain Wall Position by Electrical Current in Structured Co/Ni Wire with Perpendicular Magnetic Anisotropy, *APE*, 1, 101303, (2008).
 13. D. Koyama, Error estimates of the finite element method for the exterior Helmholtz problem with a modified DtN boundary condition, *J. Comput. and Appl. Mathematics*, in press.
 20. 小森喬・山本野人, 常微分方程式境界値問題の精度保証法の初期値問題への適用, *日本応用数学会論文誌*, Vol. 18, No. 3, 2008, 303-319.
 21. 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, *日本応用数学会論文誌*, 18-1(2008) 87-105.
 22. H. Ogata, Fundamental solution method for periodic plane elasticity, *J. Numer. Indust. Appl. Math. (JNAIAM)*, vol.3 (2008) pp.249-267.
 23. 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, *数理解析研究所講義録 1597 「第4回生物数学の理論とその応用」*, pp.62--68, (2008.5).
 24. 今村俊幸, LOBPCGにおける段階的収束とwindowの効果について, *情報処理学会研究報告*, Vol.2008, No.74 (2008-HPC-116), pp.121-126 (2008).
 25. Deng, Li, Douglas, Craig C., Haase, Gundolf, Kako, Takashi, Hagiwara, Ichiro, Application for a novel perturbation expansion method, *Journal of Algorithms & Computational Technology*, 3 (2009), no. 1, 1-22.