平成２１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２１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 21 年 9 月開催の日本応用数理学会年会(大阪大学)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 22 年 3 月 9 日開催の日本応用数理学会研究部会連合発表会(筑波大学)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。次いで、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：マルチコアに特化した固有値計算アルゴリズムの研究を実施した。特に次世代スパコンなど今後出現するであろう超並列計算機を視野に入れた研究を日本原子力研究開発機構・理化学研究所と共同で実施し高効率な固有値ソルバーの検討を実施している。また自動チューニングに関する研究を精力的に行い、対外的に発信している。

緒方秀教：偏微分方程式の数値解法である代用電荷法（基本解近似解法）の性質を、数理的な観点から理論・計算機実験の両面から精査した。代用電荷法は主にポテンシャル問題（Laplace 方程式）に対して多用され、その数理的性質もポテンシャル問題に対してよく調べられている。ところが、代用電荷法は他の偏微分方程式に対しても容易に適用・拡張可能であり、その場合代用電荷法はどのような数理的性質を持つかという問題が興味がもたれ、実用上も必要となる。本年度は波動問題（Helmholtz 方程式の Dirichlet 境界値問題）に代用電荷法を適用した場合の数理的性質を理論・実験の両面から調べた。とくにいちばん基本的な２次元円板外部領域問題について精査し、適切にパラメータ設定をすることにより近似解が真の解に（近似解の節点数に対し）指数関数的に収束することを示した。さらに、その収束の速度は２次元ポテンシャル問題の場合と定量的に一致することがわかった。この結果は、ポテンシャル問題に対してよく知られた代用電荷法の性質が他の偏微分方程式問題についても成立することを示唆し、理論的にも興味深いことは勿論、科学技術計算における代用電荷法の応用においても重要な知見である。

加古孝：流体音源の数値計算手法の開発と数値実験については、大学院生の水谷俊とエアリードによる音波の生成に関する研究を行い、PC による使い勝手の良いフロントエンドの作成を含む計算手法の開発と数値実験を通して、ジェットの不安定性や音響アナロジーによる音波の発生を確認し、これらの研究成果を研究集会で発表した。また、アンテナの数理モデルの検討と数値計算手法の開発については、大学院生の大井祥栄と共同研究を進め、完全吸収層(PML)を伴う FDTD 法による電磁場の３次元計算プログラムを作成し、高電気伝導度モデルによる完全導体の近似手法を考案し、デルタギャップ給電法によるアンテナからの電磁波の放射現象のシミュレーションに成功した。

小山大介：音響多重散乱問題の数値計算法として、近年開発された多重 Dirichlet-to-Neumann(DtN)有限要素法に対する事前誤差評価を導出した。その誤差評価では、有限要素法による離散化誤差ばかりでなく、DtN 境界条件の近似から生ずる誤差も同時に評価している。また、多重 DtN 有限要素法に基づく並列シュワルツ法を開発し、その収束証明を数理的に行い、数値的にも収束性を確認した。

中村健一：　生物種の生存競争の数理モデルとして広く用いられている２種競争系の進行波に関して、方程式の空間非一様性が進行波の伝播速度に与える影響を正確に見積もることにより、不均質環境下における外来種の空間的伝播に関する定量的かつ精密な評価を行った。

仲谷栄伸：スピン偏極電流注入磁壁移動現象についてのシミュレーション解析を行ない、垂直磁気異方性を有する磁性体では本現象が外部磁界の影響をほとんど受けないことを示し、又実験的にも確認を行なった。

村松正和：　数値的に不安定な錐線形計画に対し、面削減法を適用する事で安定な　錐線形

計画に変換できることを示し、またこれが多項式計画問題に対する　半正定値緩和問題の場合に、多項式の疎性を用いた変数の削減にある意味で対応している事を示した。

山本野人：精度保証付き数値計算の研究として①精度保証付き多倍長演算ライブラリの研究②常微分方程式境界値問題の精度保証法とその半自動化についての研究を行った。①については、既存のライブラリの特性を調べた結果、区間を表現するためには既存の上限・下限型ではなく、中心・半径型が望ましいという結論に達し、これにもとづいて設計開発を開始した。②については、MATLAB 上の数式処理ソフトを使って、精度保証付き区間演算ソフトであるINTLAB 上で起動可能な精度保証計算プログラムを自動生成する方法を開発し、あわせて分点数が大きい場合のシステムに対処する手法についても研究を行った。

３．平成 21 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：

2009 年

4/24: 緒方秀教(電気通信大学) 円外波動問題に対する基本解近似解法の理論誤差評価

6/19: 山田進(原子力研究開発機構) 密度行列繰り込み群法の基本原理と並列化手法

12/ 4: 軽部規夫(電気通信大学) 脆性材料の熱応力割断

2010 年

1/ 7: Craig C. Douglas(Univ. Wyoming) Algebraic Multigrid on GP-GPU Clusters

1/21: Frederic Hecht(Paris VI) FreeFem++ a tool to solve numerically 2d or 3d PDE with finite element method

1/22: 軽部規夫(電気通信大学) 脆性材料熱応力割断の破壊力学的取扱い

3/19: 佐藤順一氏(アーク情報システム)地震応答解析プログラムＴＤＡＰⅢの紹介

2）日本応用数理学会年会 OS「科学技術計算と数値解析」(2009/9/28 大阪大学）の運営に協力した。また、同学会の研究部会連合発表会 OS「科学技術計算と数値解析」(2010/3/9)についても運営に参加協力を行った。

４．外部資金の獲得状況

今村：平成 21 年度科研費基盤研究(B)；加古：平成 21 年度科研費基盤研究(C)；
村松：平成 21 年度科研費基盤研究(C)；仲谷：平成 21 年度科研費特定領域研究,受託研究:NEDO スピントロニクス不揮発機能技術プロジェクト,日立製作所,TDK 株式会社；委任経理金:情報ストレージ研究推進機構, 新日本製鐵；中村：平成 21 年度科研費基盤研究(C)；
山本：平成 21 年度科研費基盤研究(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）

平成 22 年度の半ばに本研究集会は 5 年の活動期間を終えることになるが、計算科学の分野は今後ますます重要性を増すことになることから、さらに発展させる形での研究ステーションを代表者も新たにして発足させることを計画している。

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)招待講演

1. 緒方秀教：波動問題などに対する代用電荷法の数理的性質, 京都大学数理解析研究所研究集会「数値解析と数値計算アルゴリズムの最近の展開」2009 年 12 月 16 日, 京都大学

2. 山本野人：精度保証付き数値計算と多倍長演算、デジタル解析学セミナー, 2009 年 10 月 19 日、早稲田大学

2）代表的な研究発表論文

1. Hidenori Ogata and Kaname Amano:Fundamental solution method for two-dimensional Stokes flow problems with one-dimensional periodicity, Japan J. Indust. Appl. Math., to appear.

2. Toshiyuki Imamura, Takuma Kano, Susumu Yamada, Masahiko Okumura, Masahiko Machida, High-Performance Quantum Simulation for Coupled Josephson Junctions on the Earth Simulator: A challenge to Schrodinger Equation on 2564Grids, International Journal of High Performance Computing, 2009, accepted and in print
3. 今村俊幸, MPI 通信ライブラリの自動チューニング, 特集　科学技術計算におけるソフトウェア自動チューニング＜ソフトウェア自動チューニング技術の応用＞, 情報処理 Vol.50, No.6, June.2009, pp.523-526.
4. Takashi Kako, Yushiharu Ohi: Numerical method for antenna radiation problem by FDTD method with PML, The proceedings of the 19th International Conference on Domain Decomposition Methods, to appear.
5. Daisuke Koyama: Error estimates of the finite element method for the exterior Helmholtz problem with a modified DtN boundary condition, Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol. 232 (2009) 109--121.
6. Daisuke Koyama: A parallel Schwarz method for multiple scattering problems, The proceedings of the 19th International Conference on Domain Decomposition Methods, to appear.
7. A. Yamaguchi, K. Motol, H. Miyajima, and Y. Nakatani: Magnetic field dependence of rectification radio frequency current flowing through a single layered ferromagnetic wire, J. Appl. Phys., 105, 07D301 (2009).
8. H. Tanigawa, T. Koyama, G. Yamada, D. Chiba, S. Kasai, S. Fukami, T. Suzuki: N. Ohshima, N. Ishiwata, Y. Nakatani, T. Ono: Domain Wall Motion Induced by Electric Current in a Perpendicularly Magnetized Co/Ni Nano-Wire, Appl. Phys. Express, 2, 053002, (2009).
9. Y. Uesaka, H. Endo, Y. Nakatani, N. Hayashi, H. Fukushima: Switching field and mechanism of flat and square particles, J. Appl. Phys. 105 07C126 (2009).
10. S. Fukami, Y. Nakatani, T. Suzuki, K. Nagahara, N. Ohshima, N. Ishiwata: Relation between critical current of domain wall motion and wire dimension in perpendicularly magnetized Co/Ni nanowires", Appl. Phys. Lett., 95, 232504, (2009).
11. Hayato Waki and Masakazu Muramatsu: Invariance under affine transformation in semidefinite programming relaxation for polynomial optimization problems, Pacific EJournal of Optimization, 5(2009)297--312.
12. Nobito Yamamoto & Takashi Komori: An Application of Taylor Models to the Nakao Method on ODEs, JJIAM. vol.26, No.2-3, pp.365-392,Oct. 2009.