

平成 22 年 4 月 1 日現在

研究種目：特別推進研究

研究期間：2005～2009

課題番号：17002012

研究課題名（和文） 精度保証付き数値計算学の確立

研究課題名（英文） Establishment of Verified Numerical Computation

研究代表者

大石 進一（OISHI Shin'ichi）

早稲田大学・理工学術院・教授

研究者番号：20139512

研究成果の概要（和文）：精度保証付き数値計算学の確立

偏微分方程式や線型方程式等において、計算機を用いて数値的に得られた近似解に対し、その誤差限界も定量的に計算機で与える精度保証付き数値計算の研究を推進した。ベクトルの総和や内積を計算する問題は科学技術計算の基本であるが、この問題に対して精度が数学的厳密に保証された結果を返す世界最高速のアルゴリズムを開発した。このアルゴリズムは、応用として、スパース行列に関する計算や計算幾何学にも波及した。また、偏微分方程式の解の存在証明、一意性の証明及び近似解の精度保証を行う多くの有用な方式を開発することに成功した。

研究成果の概要（英文）：Establishment of Verified Numerical Computation

We have studied verified numerical computations for partial differential equations and systems of linear equations using digital computers. Calculating sum of a vector and dot product of two vectors with guaranteed high accuracy is ubiquitous in scientific computing. We have developed such algorithms for accurate sum and dot product, which are known to be the fastest so far. As applications, we have applied the fast and accurate algorithms to sparse matrix computations, computational geometry and so forth. Moreover, we have succeeded in proving the existence and uniqueness of a solution of a partial differential equation, and in calculating an error bound of its approximate solution.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2005年度	58,200,000	17,460,000	75,660,000
2006年度	83,098,755	24,929,626	108,028,381
2007年度	91,200,000	27,360,000	118,560,000
2008年度	66,600,000	19,980,000	86,580,000
2009年度	56,407,211	16,980,000	73,387,211
総計	355,505,966	106,709,626	462,215,592

研究分野：工学，数物系科学

科研費の分科・細目：【電気電子工学】通信・ネットワーク工学 【数学】大域解析学

キーワード：数値解析，数値計算，非線形方程式，情報数理，アルゴリズム

1. 研究開始当初の背景

J. von Neumann が計算機を発案した大きな目標は非線形偏微分方程式を数値計算により数学的に厳密な意味で解くことであった。数値解析という分野が長年の研究において発展し、アルゴリズムの収束性などの議論がなされてきたが、丸め誤差までを考慮した解析ではないため、数値計算の誤差を計算機によって定量的に（かつ実用的な値で）把握することが理論的及び技術的に難しかった。よって、皮肉なことに von Neumann の夢は現代に至るまで叶わない状況が続いていた。

2. 研究の目的

学問的に見れば、数学的に厳密な意味に必要な精度の解を得るのに必要な計算資源（計算時間とメモリ量など）を明らかにするのが数値計算学であるべきことは明らかであり、現状では学問の体をなしていない。本研究では、まず、数値計算の基礎となる線形系について、従来の近似解を求める計算の数倍程度の計算時間で精度保証付きに数値解を求める、本来的な意味での数値計算学を確立する。具体的には、条件数（係数などの変動が解の変動に何倍に拡大されるかの倍率）が非常に高い問題について、本研究者が開発したエラーフリー変換に基づく内積計算法を用いた効率的な精度保証付き数値計算法を確立する。また共役勾配法などの反復解法系を利用した超大規模線形系（100 万次元以上の連立系）の精度保証付き数値計算を確立する。さらにその応用として、von Neumann の夢であった流体系非線形偏微分方程式の境界値問題等の解の存在と唯一性について、数値計算結果を基に証明する「計算機援用証明」法を確立し、その夢を実現する。

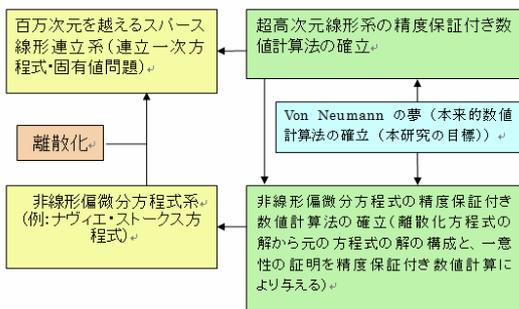


図 1. 研究目的

3. 研究の方法

本研究者が提案した IEEE 754 浮動小数点規格の丸めモード制御精度保証法とエラーフリー変換に基づく内積計算法をベースにして、100 万次元を超える超大規模線形系の反復解法を利用した精度保証付き数値計

算法を開発した。

また、非線形偏微分方程式の解の精度保証付き数値計算に基づく存在検証法については「中尾の方法」が開発されており、これと大規模線形系の反復解法を利用した精度保証付き数値計算法と組み合わせ、クラスタ計算機やスーパーコンピュータ上で計算を実行することで von Neumann の夢を実現した。

4. 研究成果

(1) 大規模スパース連立一次方程式に対する精度保証法の開発

PC クラスタ等を用いた並列計算により、一般化優対角行列を係数行列とする連立一次方程式であれば 1000 万次元程度まで、また、対称正定値行列を係数行列とする連立一次方程式であれば 50 万次元程度の連立一次方程式まで、精度保証付きで数値解を生成できることを示した。さらに理論を進展させることや 500 コアまで拡張された PC クラスタを利用することにより、一般の数百万次元のスパースな連立一次方程式も扱える見通しができた。後述の(1)とも関連するが、スパース行列とベクトルの積は、連立一次方程式に対する反復法で大きな役割を担っているが、高精度かつ高速な行列・ベクトル積を実行する関数を作成することに成功し、近似解の収束性の向上に貢献をした。

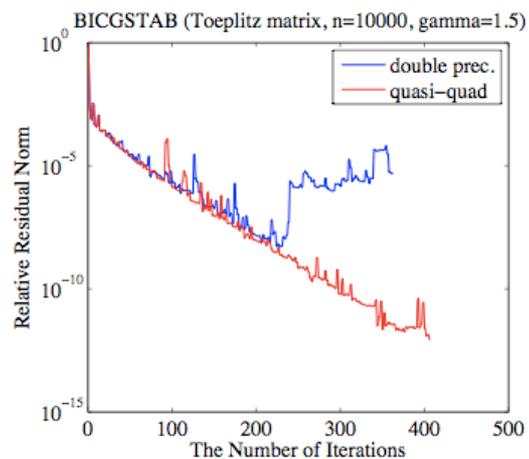


図 2. 残差ノルムの収束履歴。反復法において、従来方式（青線）では収束しないが、提案方式（赤線）では収束しているのがわかる。

(2) エラーフリー変換に基づく高精度内積計算法の発展と応用

浮動小数点数を要素とするベクトルの内積を、エラーフリー変換に基づいて高精度かつ高効率で計算する方式を開発した。さらに任意に条件数が大きい行列を係数とする連立一次方程式に対する Rump 法の収束性の証明を与えた。そして、Rump 法に基づき、任意に条件数が大きい行列を係数とする連立一

次方程式に対する精度保証法を開発した。これらは、本研究で開発した高精度内積計算法を用いることにより、係数行列の条件数がどんなに大きかったとしても、条件数に応じた計算時間で、与えられた精度を必ず持つ解を導く適応的な数値計算アルゴリズムを構築するという新しい研究分野を開拓したと評価される。そして、この方法は、様々な数値線形代数のアルゴリズムに拡張できる基本的な方法となると評価される。また、エラーフリー変換に基づく内積計算法の応用として、計算幾何学に現れる低次の行列式の符号を正しくかつ高速に出力する手法を開発できた。さらに、共有メモリ型計算機上での高精度内積計算の効率的な並列アルゴリズムへの拡張も行った。

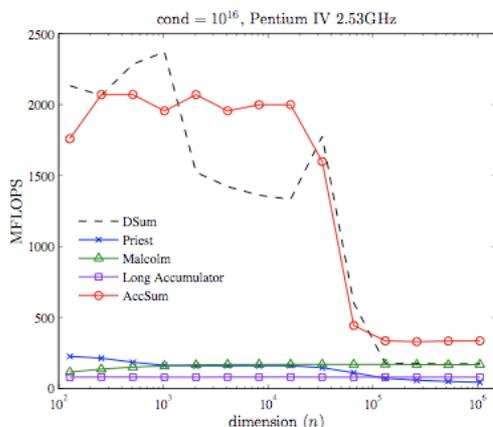


図 3. 総和アルゴリズムの計算速度(MFLOPS). 他の方式と比較して、提案方式(赤線)は高い性能を出していることがわかる。

(3) 流体系非線形偏微分方程式に対する解の数値的検証法の検討

Navier-Stokes 方程式の精度保証法について、熱対流問題の分岐解の数値的検証を3次元の場合に拡張定式化し、分岐解の検証に成功するなど大きな進展が得られた。具体的には、2次元 Driven-Cavity 問題、空間2次元熱対流問題の解の分岐点、2次元重調和方程式、反応拡散方程式の定常解の存在と(局所)唯一性や精確な解の包み込みなどの計算機援用証明法が精度保証付き数値計算で構築できることが示され、精度保証付き数値計算の有効性を示すことができた。また並行 Poiseuille 流れを記述する Navier-Stokes 方程式の安定性問題から導出される非自己共役複素固有値問題に対する計算機援用証明に取り組み、固有値の非存在範囲を効率的に特定する手法を開発した。よって、流体系非線形偏微分方程式に対する解の数値的検証法の検討について、多くの有用な手法を開発できたと評価できる。

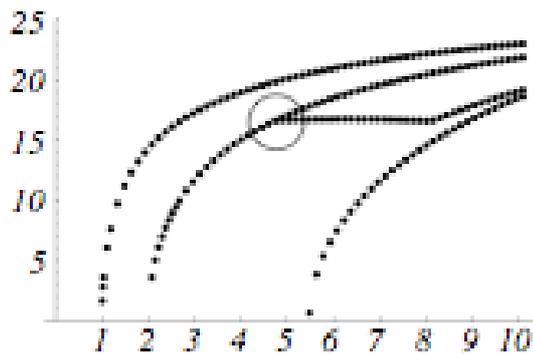


図 4. 熱対流問題の分岐解の数値的検証。分岐解の検証に成功している。

(4) カオス系の計算機援用証明法の検討

常微分方程式の精度保証法について、中尾の方法に基づく手法を確立するなどの大きな進展があった。また、Affine 演算を用いて区間演算のラッピング効果を効率よく低減する方法を確立した、これにより、ポアンカレマップを構成するための初期値問題の長時間包み込み法を確立した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 36 件)

T. Ogita, S. Oishi: Fast Verified Solutions of Linear Systems, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 26:2 (2009), 169-190. (査読あり)

K. Ozaki, T. Ogita, S. M. Rump, S. Oishi: Adaptive and Efficient Algorithm for 2D Orientation Problem, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 26:2 (2009), 215-231. (査読あり)

S. Oishi, T. Ogita, S. M. Rump: Iterative Refinement for Ill-conditioned Linear Systems, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 26:2 (2009), 465-476. (査読あり)

Y. Nakaya, T. Nishi, S. Oishi, M. Claus: Numerical Existence Proof of Five Solutions for Certain Two-Transistor Circuit Equations, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 26:2 (2009), 327-336. (査読あり)

N. Yamamoto, T. Komori: An Application of

Taylor Models to the Nakao Method on ODEs, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 26:2 (2009), 365-392. (査読あり)

Y. Watanabe, M. T. Nakao: Numerical Verification Method of Solutions for Elliptic Equations and Its Application to the Rayleigh-Bernard Problem, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 26:2 (2009), 443-463. (査読あり)

Y. Watanabe: A Numerical Verification Method for Two-Coupled Elliptic Partial Differential Equations, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 26: 2 (2009), 233-247. (査読あり)

M. T. Nakao, Y. Watanabe, N. Yamamoto, T. Nishida, M. Kim: Computer assisted proofs of bifurcating solutions for nonlinear heat convection problems, Journal of Scientific Computing, 10 (2009), 1-18. (査読あり)

T. Nishida, Y. Teramoto: Pattern formations in heat convection problems, Chinese Annals of Mathematics, Ser. B, 30:6 (2009), 769-784. (査読あり)

T. Nishida, Y. Teramoto: Bifurcation theorems for the model system of Benard-Marangoni convection, Journal of Mathematical Fluid Mechanics, 11:3 (2009), 383-406. (査読あり)

Y. Shibata, S. Shimizu: On a resolvent estimate of the Stokes system in a half-space arising from a free boundary problem for the Navier-Stokes equations, Math. Nachr., 282:3 (2009), 482--499. (査読あり)

T. Kinoshita, K. Hashimoto, M. T. Nakao: On the L^2 a priori error estimates to the finite element solution of elliptic problems with singular adjoint operator, Numerical Functional Analysis and Optimization, 30 (2009), 289 - 305. (査読あり)

T. Ogita, S. Oishi: Tight Enclosures of Solutions of Linear Systems, International Series of Numerical Mathematics, 157 (2009), 167-178. (Inequalities and Applications, C. Bandle,

A. Gilányi, L. Losonczi, Z. Páles, M. Plum eds., Birkhäuser Verlag). (査読あり)

N. Yamanaka, T. Ogita, S. M. Rump, S. Oishi: A Parallel Algorithm for Accurate Dot Product, Parallel Computing, 34:6-8 (2008), 392-410. (査読あり)

S. M. Rump, T. Ogita, S. Oishi: Accurate Floating-Point Summation Part I: Faithful Rounding, SIAM Journal on Scientific Computing, 31:1 (2008), 189-224. (査読あり)

S. M. Rump, T. Ogita, S. Oishi: Accurate Floating-Point Summation Part II: Sign, K-fold Faithful and Rounding to Nearest, SIAM Journal on Scientific Computing, 31:2 (2008), 1269-1302. (査読あり)

M. T. Nakao and K. Hashimoto: Guaranteed error bounds of finite element approximations for non-coercive elliptic problems and its applications, Journal of Computational and Applied Mathematics 218: 1 (2008), 106-115. (査読あり)

Y. Shibata: On the Oseen semigroup with rotating effect, Functional Analysis and Evolution Equations, The Gunter Lumer Volume, H. Amann, W. Arendt, M. Hieber, F. Neubrander, S. Nicaise, J. von Below (eds), 2008, 595--611. (査読あり)

M. Kim, M. T. Nakao, Y. Watanabe, T. Nishida: A numerical verification method of bifurcating solutions for 3-dimensional Rayleigh-Bernard problems, Numerische Mathematik, 111 (2008), 389-406. (査読あり)

K. Ozaki, T. Ogita, S. Miyajima, S. Oishi, S. M. Rump: A Method of Obtaining Verified Solutions for Linear Systems Suited for Java, Journal of Computational and Applied Mathematics, 199:2 (2007), 337-344. (査読あり)

S. Oishi, K. Tanabe, T. Ogita, S. M. Rump: Convergence of Rump's Method for Inverting Arbitrarily Ill-conditioned Matrices, Journal of Computational and Applied Mathematics, 205:1 (2007), 533-544. (査読あり)

K. Nagatou, K. Hashimoto and M.T. Nakao: Numerical verification of

stationary solutions for Navier-Stokes problems, Journal of Computational and Applied Mathematics 199 (2007), 424-431. (査読あり)

T. Minamoto and M.T. Nakao: Numerical method for verifying the existence and local uniqueness of a double turning point for a radially symmetric solution of the perturbed Gelfand equation, Journal of Computational and Applied Mathematics 202 (2007), 177-185. (査読あり)

Y. Shibata, S. Shimizu: Decay properties of the Stokes semigroup in exterior domains with Neumann condition, Journal of the Mathematical Society of Japan, 59 (2007), 1--35. (査読あり)

T. Yamamoto, S. Oishi: A Mathematical Theory for Numerical Treatment of Nonlinear Two-Point Boundary Value Problems, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, 23:1 (2006), 31-62. (査読あり)

宮島 信也, 荻田 武史, 大石 進一: 実対称行列の各固有対の精度保証付き数値計算法, 日本応用数学会論文誌, 16:4 (2006), 535-552. (査読あり)

尾崎 克久, 荻田 武史, S. M. Rump, 大石 進一: 点と平面との位置関係を判定する高速かつロバストなアルゴリズム, 日本応用数学会論文誌 16:4 (2006), 553-562. (査読あり)

大石 進一, 荻田 武史, 太田 貴久: 高精度内積計算アルゴリズムを用いた連立一次方程式の精度保証付き数値計算法, シミュレーション, 25:5 (2006), 170-178. (査読あり)

荻田 武史, 大石 進一: 連立一次方程式のメモリ量を低減した精度保証付き数値計算法, シミュレーション, 25:5 (2006), 179-184. (査読あり)

太田 貴久, 荻田 武史, S. M. Rump, 大石 進一: 悪条件連立一次方程式の精度保証付き数値計算法, 日本応用数学会論文誌, 15:3 (2005), 269-287. 【日本応用数学会 論文賞 受賞】(査読あり)

T. Ogita, S. M. Rump, S. Oishi: Accurate Sum and Dot Product, SIAM

Journal on Scientific Computing, 26:6 (2005), 1955-1988. (査読あり)

宮島 信也, 荻田 武史, 大石 進一: 実対称行列の各固有値に対する精度保証付き数値計算法, 日本応用数学会論文誌, 15:3 (2005), 253-268. (査読あり)

荻田 武史, 大石 進一: 大規模連立一次方程式のための高速精度保証法, 情報処理学会論文誌: 数理モデル化と応用, 46:SIG10 (TOM12) (2005), 10-18. (査読あり)

Y. Shibata, T. Kubo: On the Stokes and Navier-Stokes equation in a perturbed half-space Advances in Differential Equations, 10:6 (2005), 695--720. (査読あり)

Y. Shibata, T. Kubo: On the Stokes and Navier-Stokes flows in a perturbed half space, Regularity and other aspects of the Navier-Stokes equations, Banach Center Publications, 70 (2005), 157-167. (査読あり)

T. Nishida, Y. Teramoto, H. Yoshihara: Hopf bifurcation in viscous incompressible flow down an inclined plane, J. Math. Fluid Mechanics, Vol.7, (2005), 29-71. (査読あり)

〔学会発表〕(計 17 件)

山本 野人: 常微分方程式の精度保証付き計算の技法と利用法, 天体力学N 天体力学研究会, 千葉大学, 2010年3月19日.

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, 早稲田大学, 2009年10月19日.

S. Oishi: Error free transformations of floating point numbers and its applications to constructing error free algorithms, Symbolic Numeric Computation (SNC 2009), Kyoto, Japan, (2009/8/3-5).

S. Oishi: Numerical existence theorem for solutions of fixed point type equations and its applications, International Conference on Engineering and Computational Mathematics (ECM2009), The Hong-Kong Polytechnic University, Hong-Kong (2009/5/27-29).

Y. Watanabe: An eigenvalue excluding

method for the Orr-Sommerfeld problem, International Conference on Engineering and Computational Mathematics (ECM2009), The Hong Kong Polytechnic University, Hong Kong, China (2009/5/27-29).

大石 進一: Maxwell 方程式によるナノ領域電磁界計算の精度保証, 2009 年春季 第 56 回応用物理学関係連合講演会(シンポジウム: ナノフォトニクスにおけるナノ加工の最前線と理論基盤), 筑波大学, 2009 年 3 月 30 日.

S. Oishi (Waseda Univ./JST): Accurate and Fast Sum of Floating Point Numbers and Applications to Verification Algorithms, The 13th GAMM - IMACS International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic and Verified Numerical Computations, The University of Texas at El Paso (2008/9/29-10/3).

T. Nishida, Pattern formations in heat convection problems, Parabolic and Navier-Stokes Equations, Banach Center, Bedlewo, Poland (2008/9/4).

Y. Shibata, On resolvent problems for generalized Stokes equation arising from free boundary problem, International Conference on Parabolic and Navier-Stokes Equations 2008, Banach center, Poland (2008/9/1-5).

M. T. Nakao: Some remarks on the Aubin-Nitsche trick of FEM solutions for elliptic problems with singular adjoint operator, 6th International Conference on Scientific Computing and Applications(SCA2008), Pusan National University, Busan, Korea (2008/6/3).

大石 進一: 高速で高精度な浮動小数点数の内積計算と精度保証付き数値計算, 日本数学会 (企画特別講演), 大阪府立大学 (2008/3/22).

S. Oishi: Iterative Refinement for Ill-Conditioned Linear Systems, International Workshop on Numerical Validation in Current Hardware Architectures at Dagstuhl Seminar, Germany (2008/1/7-11).

S. Oishi: Fast and Accurate Dot Product Algorithm and its Applications to Verified Numerical Computation, The 3rd East Asia SIAM Conference, Xiamen, China

(2007/11/2-5)

S. Oishi: Numerical Uniqueness and Existence Theorem for Solution of Lippmann-Schwinger Equation, 九州大学数理学府 21 世紀 COE シンポジウム特別講演 (2007/10/1-4).

大石 進一: 疎連立一次方程式の解の反復解法を用いた数値的精度保証法, 日本応用数理学会環瀬戸内応用数理研究部会 第 9 回シンポジウム, 2005 年 11 月 12 日

S. Oishi: Numerical Verification for Solutions of Linear Systems, Algebraic and Numerical Algorithms and Computer-assisted Proofs, Dagstuhl Seminar, Dagstuhl, Germany (2005/9/29).

大石 進一: 数値線形計算の精度保証に関する最新の発展 - 任意に精度を変更でき、大規模な問題を扱え、高速に計算するには - , 力学系の研究 - トポロジーと計算機による新展開, 京大数理解析研究所, 2005 年 6 月 22 日

6. 研究組織

(1) 研究代表者

大石 進一 (OISHI SHIN'ICHI)
早稲田大学・理工学術院・教授
研究者番号: 20139512

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

中尾 充宏 (NAKAO MITSUHIRO)
九州大学・数理学研究院・教授
研究者番号: 10136418

西田 孝明 (NISHIDA TAKAAKI)
早稲田大学・理工学術院・教授
研究者番号: 70026110

柴田 良弘 (SHIBATA YOSHIHIRO)
早稲田大学・理工学術院・教授
研究者番号: 50114088

山本 野人 (YAMAMOTO NOBITO)
電気通信大学・電気通信学部・教授
研究者番号: 30210545

渡部 善隆 (WATANABE YOSHITAKA)
九州大学・情報基盤研究開発センター・准教授
研究者番号: 90243972