様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９、Ｚ－１９　（共通）

科研費 KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２７ 年　 ６ 月 １１ 日現在

機関番号：３７１１２
研究種目：挑戦的萌芽研究
研究期間：2012～2014
課題番号：２４６５６０７３

研究課題名（和文）全空間周波数帯に亘り高性能な放射波動場計算法の開発

研究課題名（英文）A development of high performance method for the computation of radiation fields for all the space frequcencies

研究代表者
中嶋　徳正（Nakashima, Norimasa）

福岡工業大学・情報工学部・准教授

研究者番号：６０３８０６８０

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　3,100,000円

研究成果の概要（和文）：研究代表者はANSI/IEEE Std 754-2008 の仕様に従い，実数型および複素数型の1（単精度），2（倍精度），4（4倍精度），8，16，32，64倍精度浮動小数点演算ライブラリ（実数型，複素数型）を開発した．そして，作成した浮動小数点演算ライブラリを用いて200次を超えるLaguerre多項式とHermit多項式の零点を極めて高い精度で得ることに成功した．さらに，Gauss-Laguerreの数値積分公式の数値的誤差評価を行い，理論的な誤差評価式と定性的に一致することを確認した．ただし，これらの結果を得るためには数週間もの計算時間が必要であり，今後高速化が必要であることが分かった．

研究成果の概要（英文）：We have developed a 1 (single), 2 (double), 4 (quadruple), 8, 16, 32, 64 precision floating-point arithmetic library. This library is based on the ANSI / IEEE Std 754-2008 and used for the computation both for real and complex numbers. We succeeded in obtaining highly accurate zeros of the Laguerre polynomial and the Hermit polynomials over 200 orders by using the library. A numerical error estimation is done for the Gauss-Laguerre quadrature. We confirmed that the numerical error is qualitatively agreement with the theoretical one. It is, several weeks are necessary to obtain one computational result. Then we have to develop fast technique as future works.

研究分野：計算電磁気学

キーワード：放射波動場計算　多倍長演算　Gauss-Laguerreの数値積分公式　ANSI/IEEE Std 754-2008

１．研究開始当初の背景

波動場応用技術の核である放射波動場問題の解析においては，その複雑度および規模は拡大の一途を辿っており，高速，省メモリかつ高精度な高性能計算法が必須である．高速多重極アルゴリズム（FMA）は高速計算法の代表格であり，現在様々な形式が存在する．しかし，いずれの形式も演算量，メモリ量，精度のすべての面で優れている訳ではない．

２．研究の目的

研究代表者は放射波動場問題の主要な高速計算法：高速多重極アルゴリズム（FMA）の課題である全空間周波数帯に亘る高速化，省メモリ化，高精度化を解決する（※ 空間周波数＝波長の逆数）．提案手法では多くの有効桁数が必要となるため，IEEE754 形式準拠の 2n 倍精度浮動小数点演算ライブラリを開発する．さらに提案手法を GPU 計算機を対象に高並列処理させる．以上により全空間周波数帯対応型の高性能放射波動場計算ソフトウェアが完成する．

３．研究の方法

本研究課題ではスカラ波動場およびベクトル波動場を対象に新型 FMA をベースとした全空間周波数帯に亘り高性能な放射波動場計算ソフトウェアを完成させる．申請者ははじめにスカラ波動場を対象に(1) IEEE754 形式準拠の 2^n 倍精度浮動小数点演算ライブラリの開発，(2) 新型 FMA の実装に必要な Laguerre 多項式の次数と演算精度の関係解明，を平成 24 年度中に完了させる．そして，平成25年度にスカラ波動場を対象に項目(3) スカラ，ベクトル波動場向け新型 FMA の GPU 計算機上での高並列処理を実施する．申請者は平成 26 年度にはベクトル波動場へと発展させる．ただし，一旦(2)をベクトル波動場に対して検証したのち(3)に取り組む．研究を効率よく進めるため，一部の項目については関連する専門家を研究協力者として配置し，適宜助言を得る．

４．研究成果

(1) 平成 24 年度

研究代表者は ANSI/IEEE Std 754-2008 の仕様に従い，実数型および複素数型の 1（単精度），2（倍精度），4（4 倍精度），8，16，32，64 倍精度浮動小数点演算ライブラリ（Precision 型）の開発に取り組んだ．また，計算機およびコンパイラ側で標準装備されている既存の単精度および倍精度型との相互変換およびユーザ側からの数値の入出力に対応するためのインターフェースも用意した．これにより，表 1 に示すようにコンピュータにおける 10 進数の表現能力を飛躍的に向上させた．

表 1：各データ型の 10 進数値の表現能力（概算値，桁数は小数点を基準に正負値で表す）

データ型	最大・最小絶対値の桁数	計算機 ε の桁数
Precision 1	±38	-7
Precision 2	±308	-15
Precision 4	±4,932	-34
Precision 8	±78,913	-71
Precision 16	±1,262,611	-147
Precision 32	±20,201,781	-300
Precision 64	±323,228,497	-607

作成した浮動小数点演算ライブラリを用いて高次の Laguerre 多項式と Hermit 多項式の零点の求解を行った．数値実験の結果，どちらの関数に対しても現有の倍精度演算においては 10 次程度で得られた零点の精度が急激に劣化する．これに対して，64 倍精度まで拡張させることにより 100 次までの多項式に対して小数点以下 300 桁以上の非常に高精度な零点を得た．

上記により，従来の倍精度演算では実現が困難であった高次の Laguerre および Hermit 多項式の零点を高精度に得ることが可能となった．これらの多項式の零点はそれぞれ区間[0: ∞]および[-∞: ∞] を対象とする高精度数値積分公式である Gauss-Laguerre 公式および Gauss-Hermit 公式に利用できる．

(2) 平成 25 年度

研究代表者は平成 24 年度に開発した多倍長浮動小数点演算ライブラリの演算結果に著しい誤差を確認した．このため，約半年をかけて前 17 種類のライブラリのソースプログラムに対して誤差の原因の特定とその修正（バグフィックス）を行った．この作業と並行して第 2 四半期以降より，バグフィックスが終了したライブラリを利用して Gauss-Laguerre の数値積分公式の実行必要な高次 Laguerre 多項式のすべての零点とその零点における多項式の値（対象次数とは異なる．同公式における重み係数）の算定，ならびに多倍長演算ライブラリの性能評価に取り組んだ．C 言語において従来装備されている単精度ならびに倍精度型浮動小数点演算ではそれぞれ 18 次および 98 次の多項式までしか取り扱うことができない．これに対して，代表者が作成した 64 倍精度演算では 210 次を超える Laguerre 多項式に対してもその零点の相対誤差は 10^{-400} 以下と極めて高い精度のデータを得ることができた（図 1，図 2 参照）．ただし，この結果を得るためには数週間もの計算時間が必要であり，今後高速化が必要であることが分かった（図 3 参照）．

以上の成果はワークショップにて口頭発表し，数値解析の分野だけでなく Laguerre 多項式を利用する量子力学に関連する研究者からも高い関心を得た．また，調査活動の結果，計算時間の短縮のため並列演算を採用する場合は，アルゴリズムの特性上共有メモリ型計算機を取り入れるべきであることが分かった．

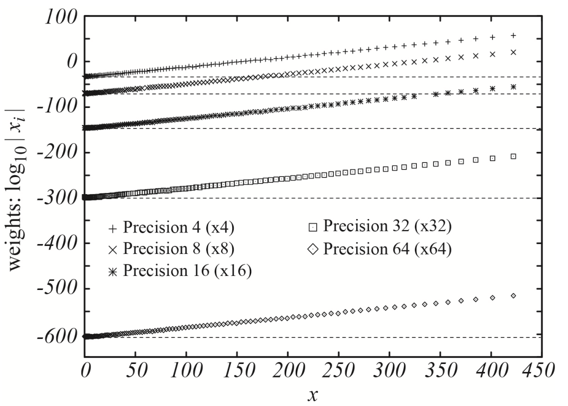

図 1：112 次の Laguerre 多項式の零点とその誤差

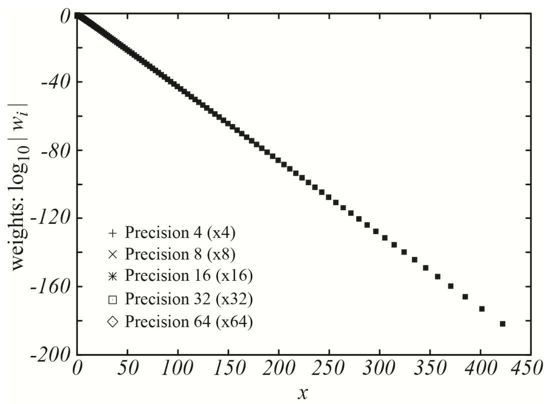

図 2：112 次の Gauss-Laguerre 多項式の分点に対する重み

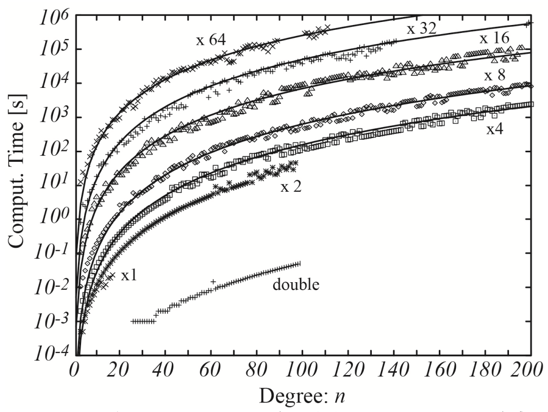

図 3：n 次の Laguerre 多項式のすべての零点を算定するのに要した時間

(3) 平成 26 年度

研究代表者は研究開始当初に発想した新型 FMA の実現可能性を検証するため，3 次元スカラ放射波動場問題を例にプログラム実装を行った．その結果，3 次元空間において波源と観測点の位置に非常に限定された規則性がある場合にのみ高精度計算が実現でき，現時点では汎用性が極めて乏しい結果となった．この原因を探るべく定式化から再検証を行っているが，研究期間終了までには解明には至らなかった．

前項と並行して平成 25 年度の実績である Gauss-Laguerre の数値積分公式の分点および重みを用いて同公式の数値的誤差評価を行った．ただし，多倍長ライブラリの演算速度は極めて遅いため，従来の倍精度演算に変換して誤差評価を行った．結果として，4 倍以上の精度で得られた分点および重みを倍精度に変換して利用すれば，実用的な演算時間で十分良好な計算結果を得ることが確認された．また，Gauss-Laguerre の数値積分公式の理論的な誤差評価式と定性的に一致した（図 4，図 5 参照）．

研究代表者は，Gauss-Laguerre の数値積分公式と同様に分点計算が非常に困難とされる Gauss-Hermite の数値積分公式に対しても分点（Hermite 多項式の零点）の高精度計算を実施した．結果として，200 次までの多項式に対して高精度な分点を得ることができた．

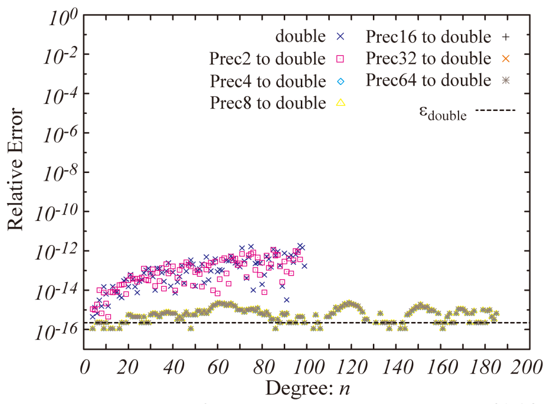

図 4：$f(x) = 1$ に対する Gauss-Laguerre の数値積分公式の誤差

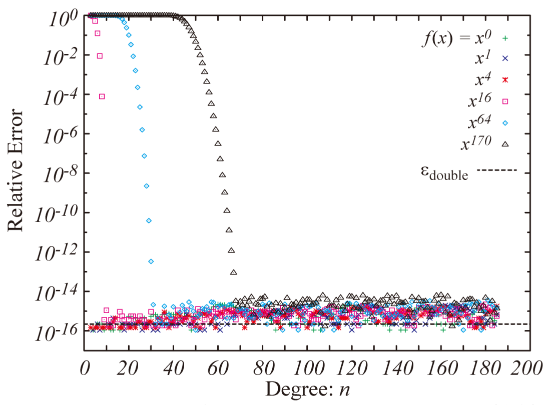

図 5：$f(x) = x^m$ に対する Gauss-Laguerre の数値積分公式の誤差

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 0 件）

〔学会発表〕（計 2 件）

① 中嶋徳正，藤野清次，多倍長演算による Laguerre 多項式の零点計算，今後の HPC

（基盤技術と応用）に関するワークショップ, 長崎市図書館（長崎県長崎市）, 査読無, 2013 年 12 月.

② N. NAKASHIMA, A Numerical Error Estimation of the Gauss-Laguerre Quadrature, International Workshop on Information Technology, Applied Mathematics and Science (IMS2015), 京都市生涯学習総合センター（京都府京都市）, 査読無, March 2015.

〔図書〕（計　1　件）

① 藤野清次, 阿部邦美, 杉原正顯, 中嶋徳正, 計算力学レクチャーコース　線形方程式の反復解法（6 章担当）, 丸善, pp. 157-211, 2013.

〔産業財産権〕

○出願状況（計　0　件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況（計　0　件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等
なし

６．研究組織

(1)研究代表者

中嶋　徳正（NAKASHIMA, Norimasa）
福岡工業大学・情報工学部・准教授
研究者番号：60380680

(2)研究分担者

なし
（　　　）

研究者番号：

(3)連携研究者

なし
（　　　）

研究者番号：