

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 6 月 5 日現在

機関番号：14301  
 研究種目：基盤研究（B）  
 研究期間：2010～2012  
 課題番号：22340018  
 研究課題名（和文） 無現多倍長数値計算における数値解析学と数値計算手法の新しい展開  
 研究課題名（英文） Breakthrough in numerical analysis and numerical computation related with infinitely-precision arithmetic  
 研究代表者  
 磯 祐介（ISO YUUSUKE）  
 京都大学・情報学研究科・教授  
 研究者番号：70203065

## 研究成果の概要（和文）：

無限多倍長数値計算環境 exflib 等の次世代数値計算環境を活用した高精度な科学・技術計算の実現を目指し、理論と事例研究から数値解析学と数値計算法の研究を行ない、新たな知見を得て成果を挙げた。理論面では Banach Scale を利用して安定性評価を必ずしも伴わない差分スキームの収束証明を行ない、一方で現在の倍精度環境においては安定性評価をもつ差分スキームでも数値解が不安定となることを示した。多倍長計算を活用した事例研究では、素粒子物理における重要な積分が精度良く求められることを示し、またホモトピー法による行列固有値同時解法についての新たな可能性を示した。さらに GPGPU を用いた並列化による計算環境の向上についても検証を行なった。

## 研究成果の概要（英文）：

We have shown some new results aimed to accurate scientific computations based on effective use of infinitely-precision arithmetic. The project study has been carried out both by theoretical approaches and computational ones. In the theory of numerical analysis, convergence of an abstract difference scheme is proved with a technique of the Banach scale, and numerical instability of difference schema are discussed from a viewpoint of proper meaning of the CFL condition. In computation, we have obtained accurate numerical results for the problems appeared in the particle physics and the eigen-value problems. The GPGPU programmings are also discussed in order to realize fast computational environment.

## 交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
22 年度	4,600,000	1,380,000	5,980,000
23 年度	4,700,000	1,410,000	6,110,000
24 年度	3,300,000	990,000	4,290,000
年度			
年度			
総計	12,600,000	3,780,000	16,380,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：数学・数学一般(含確率論・統計学)

キーワード：数学一般・応用数学・数値数学・数理モデル・応用解析・数値解析・多倍長数値計算・非適切問題解析

## 1. 研究開始当初の背景

コンピュータを利用した科学・技術計算は、先端的な科学・技術の研究と開発にとって不可欠なものとなっている。それを支える計算環境の開発では、半導体開発を始めとする演算処理ユニットの高速化、ネットワークや並列処理の効率化、あるいは大規模メモリの開発などの話題が先行する一方で、計算精度については IEEE754 の「古典的」枠組みを越えるアプローチは少ない。現実には（単精度と）倍精度環境が教義的地位を占め、計算精度に対する関心は高いとはいえない。研究代表者はこのような状況に一石を投じるべく、研究分担者の藤原宏志氏と高速多倍長数値計算環境の研究を続け、一定の成果を挙げてきた。

10 進法で 100 桁以上の精度保証する多倍長数値計算は、科学・技術数値計算の世界では数値計算の過去の常識を越えるものであり、我々が永年利用している単精度・倍精度数値計算環境で培ってきた常識が必ずしも適用しない。その中でも研究代表者の提唱する計算精度が任意可変長である“無限多倍長数値計算環境”はいわば「異次元の世界」であり、これ迄の数値計算の常識の通用しない全く異質な計算環境としての考察が必要と考えられる。一方で、研究分担者である藤原宏志氏の設計により実現し、インターネットを介して我が国から世界に発信している

“無限多倍長数値計算環境” exflib の今後の一層を活用を目指した場合、この計算環境の欠点も含めた特徴を示す事例研究の蓄積が必要となっていた。

海外では、米国 SIAM では“The SIAM 100-Digit Challenge”という企画が 2002 年に図られ、その成果が 2004 年に出版されており、多倍長数値計算は国際的にも注目を受けるテーマといえよう。この 100 digit challenge では、数値計算が困難な問題の克服という知的好奇心に留まる部分も多く、計算時間も含めて多倍長数値計算による科学・技術数値計算という視点は希薄である。現在も SIAM ではこの傾向は特に改められずに現在に至っている嫌いがあり、次世代の大規模高精度科学技術シミュレーションを視野に入れている本課題研究の方が、科学・技術計算に密接しているという点で、時代のニーズに即応していると判断している。

## 2. 研究の目的

計算機内で処理される実数（実数型データ）は、有限桁の浮動小数点数によって表され、数値の丸めの規則も含め、その形式は IEEE754 規準により定められている。このた

め殆どどのエンドユーザが利用する数値計算環境では倍精度環境が標準化され、丸め誤差はある規定内で統一されており、それを暗黙の前提として、高精度数値シミュレーションの実現に向けた丸め誤差の扱いについての種々の議論がなされている。研究代表者はこの 10 年以上の間、単に数値表現の bit 数が多いだけではなく、丸め誤差を仮想的に取り除いた数値計算環境の科学・技術計算への活用を提案している。この方向は研究分担者の藤原宏志氏と共に継続され、藤原宏志氏が設計および実装した無限多倍長数値計算環境“exflib”としても公表されている。この“exflib”では、実数表現に要する桁数をプログラミング時に任意に宣言できるため、4 倍精度などの単に桁数が多いだけの多倍長とは根本的に異り、丸め誤差を任意の精度に小さくすることが可能であり、結果として論理的には丸め誤差の無い実数計算を仮想的に実行できるものである。ただし、現実には乗法と除法のアルゴリズムを効率化するため、現在の exflib では（10 進法換算で）1 万桁程度以下で用いることを想定している。

代表者が過去に研究代表を務めた科学研究費課題研究において、逆散乱問題等の（偏微分方程式の）逆問題の数値計算等において顕著な成果が挙げたが、それは非適切問題（ill-posed problems）の数値計算に特化するのではなく、“計算が困難な問題（ill-conditioned problems）”一般の扱いと共通点が多いことが明らかにされている。この先行事例を踏まえ、（無限）多倍長数値計算を計算の困難な問題を高精度で計算する次世代の高精度シミュレーションのツールと位置づけ、その確立を図ることが究極の研究目的である。exflib 等の無限多倍長数値計算の一層の活用を目的とする場合、理論としての数値解析も含め、多角的な再検討によって倍精度数値計算環境に過去の「数値計算の常識」を見直すことが必要である。例えば、事例研究に基づく数値計算法（アルゴリズム）の選択基準の再考等も急務の課題と判断し、本課題研究では重点を置いている。

現在の数値計算アルゴリズムの選択においては、無意識のうちに、現行の倍精度数値計算環境が前提となっているものも少なくない。例えば常微分方程式の Cauchy 問題に対する予測子・修正子法は、計算精度が容易に変更できるという利点があるものの、丸め誤差に係る線型多段階法の欠点から利用頻度は多いとはいえない。例えば 1980 年代に李天岩（Tien Yien Li）教授が提案した“ホモトピー法に基づく行列の全固有値の同時解法”は、固有値問題をホモトピーパラメータについての常微分方程式に帰着するもの

である。理論は整備されたものの計算時に用いられる予測子・修正子法の問題点も影響して、余り活用されていないまま現在に至っている。しかし無限多倍長数値計算環境の活用により予測子・修正子法の弱点が解決されれば、将来は大いに期待されるアルゴリズムと考えられる。

無限多倍長数値計算環境 exflib は、現行の倍精度環境を標準とした場合には、異次元の未来技術ともいえ、次世代の高精度数値シミュレーションの重要な担い手の一つと考えられる。このような先端的な数値計算の研究を我が国から発信していくためには、exflib の継続的な開発を行なうと共に、事例研究の地道な積み重ねが必要であり、また過去の「数値計算の常識」を様々な角度から再検討することも必要となる。このような研究を「無限多倍長数値計算の実現」という観点から総合的に行なうことが本課題研究である。なお、事例研究では的を絞る必要もあるため、固有値問題と医用断層撮影にかかる問題に焦点を当てている。また計算環境の改善という点では、いわゆる GPGPU の活用も視野に入れている。

### 3. 研究の方法

研究の方法は、文献を中心とした数値解析理論の検証、exflib を活用した数値計算の事例研究の蓄積、GPGPU を活用した並列化による多倍長数値計算環境の高速化を相互に関連させながら行なっている。

具体的には、多倍長数値計算環境を視野に入れた微分方程式の数値解析理論（特に安定性と収束性）の見直し、②多倍長数値計算による数値計算例の蓄積と新たな数値計算手法の提案、③無限多倍長数値計算環境 exflib の整備を行なった。目的の項にも記載した通り、適用事例には光トモグラフィ (DOT) の高解像度化も視野に入れ、一部では研究代表者が代表を務める挑戦的萌芽研究「応用逆問題におけるモデル誤差の評価とその正則化」との共同研究を行なった。研究分担者は研究代表者の統括の下でそれぞれのテーマ毎に分担課題の研究を行い、京都大学で定期的に行なわれている「数値解析・応用解析セミナー」等を利用して研究発表と討論を行ない、分担者間の相互理解と相互評価を図った。

研究組織の点では、これまでも共同研究を行ない、平素から微分方程式の数値解析理論および高精度数値シミュレーション等の研究連絡を相互に継続している研究者から成り立っている。特に藤原・今井・大西・西田・久保は過去の exflib の開発研究での共同研究者または研究協力者として繋がっており、無限多倍長数値計算研究の意義につ

いても共通の認識を有している。坂上は exflib のユーザであり、その有効性を高く評価し多くの数値シミュレーションを行なった実績をもつ。中村は代表者と同じ研究科にあって次世代科学技術計算の在り方について討論を続けており、特に効率的なアルゴリズムに関する研究連絡を平素から行なっている。海外の研究協力者のソウル大学の申東雨 (Dong Woo Sheen) は Laplace 逆変換の高精度計算を exflib により実現する研究を行なっており、代表者および分担者の藤原との共同研究を既に平成 21 年から開始している。また陳宜良 (I. Liang Chern) は逆問題の高精度数値計算の観点から代表者と継年の研究連絡を続けている。一方、福山はヒトの脳機能の研究では世界的な業績を有しているが、光トモグラフィの脳研究への適用の観点から、学内における共同研究を行っている。このように本課題研究の研究組織は多倍長数値計算に関する理論・数値計算・応用という立場の相違はあるものの、代表者の多倍長数値計算のこれまでの研究を理解してその方向性についての理解を共有している。この他に本学名誉教授の西田吾郎、西田孝明を時間雇用の研究員として雇用し、代表者の経験不足を大所高所からの助言によってサポートし、本課題研究の推進に寄与してもらった。

今般の基盤研究の遂行に当って、研究費の繰越に対する制限が緩やかになったことが多いに役に立ったので、その旨を付記しておく。多倍長数値計算環境 exflib の開発のために米国製の計算機を購入している。初年度末に購入計画のあった計算機は、東日本大震災による成田空港の混乱のために、入荷時期が一時不透明になった。また 2 年目には Thai の洪水による部品の供給不足が世界的に生じ、予定機種を購入時期が一時遅れた。本課題研究自体は理論面で当初予定以上の進歩があったために全体計画としては遅れや支障は生じなかったものの、2 年に渡って計算機の購入にやむを得ない遅れが生じた。過去の制度では予算の年度消化が優先され、このような事態に際して結果として研究遂行に大きな支障が生じたかも知れないが、今般の制度の改善により、無駄の無い円滑な研究費の執行が行なえた。制度を充実させた関係者に対する感謝も含め、特記事項としてここに記載する。

### 4. 研究成果

研究代表者および分担者(藤原宏志氏)によって環境整備が行なわれている高速な無限多倍長数値計算環境 exflib は、インターネットで広く公開されていることもあり、先端

的な科学・技術に関する数値シミュレーションを行なう内外の研究者の間で高い評価を受けるに至っている。また任意の桁数の精度で科学・技術に関する各種の数値計算が実行可能となり、過去には数値計算が不可能と思われていた問題の扱いや、あるいは実際的ではないと考えられていたアルゴリズムの実現も可能となっている。本課題研究の成果に即していえば、圧縮性流体の衝撃波の問題から派生する Tricomi 方程式については、スペクトル法と多倍長数値計算の組み合わせにより、これまでは困難であった解の数値シミュレーションを実現し、解の構造の可視化によって幾つかからの新たな問題提起を行なった。素粒子物理の解析から派生する多重積分の極限計算に多倍長数値計算を利用し、これまでは常識とされていた極限值が誤りであったことを指摘した。また、行列の固有値問題に対する homotopy 法の新たな実装を行ない、この数値計算手法の有効性を再発見した。

理論面では、必ずしも安定性を持たない差分スキームの収束証明を Banach scale を利用して行ない、差分スキームの安定性と収束性の(ある種の)独立性を示した。既に発表している成果は線型方程式の場合であるが、研究員で雇用した西田孝明の成果を利用すれば、非線型の場合も同様の結果が証明可能であると判断される。また、偏微分方程式の解の存在・非存在の数値計算からの検証に関し、限定的な場合ではあるが、先駆的な成果を挙げた。また、外国人研究協力者の申東雨のグループとの討論により、安定性条件を満たす差分スキームであっても数値解が特異な挙動を示すことに気付き、その解析をいわゆる CFL 条件や von Neumann 条件との関わりの中で論じ、丸め誤差解析に対する新たな知見を得るに至った。

最終年度には事例研究として光トモグラフィの数値計算に重点を置き、拡散方程式を数理モデルとしているこれまでの設定の問題点を数値計算を通して指摘すると共に、ラドン変換を利用するアプローチの再評価を行なった。

高精度計算環境の GPGPU に基づく並列計算による高速処理の研究も初年度と2年度に行なった。高速多倍長数値計算環として四則演算の高速化は実現され、逆 Laplace 変換の数値計算については顕著な成果が得られた。しかし一方で exlib の汎用的利用という点では限界があり、調査研究に留まった。

## 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 11 件)

(1) "Estimates for solutions to the transport equation under the perturbation of its attenuation and scattering terms" (査読有), D. Tanaka, N. Higashimori, Y. Iso, Tamkang J. of Math., vol. 43, pp. 313-320, (2012)

(2) "輸送方程式の初期・境界値問題に対する差分法と台形公式による数値解析" (査読無), 東森信就, 藤原宏志, 数理解析研究所講究録 vol. 1791, pp. 122-130,

(3) "Convergence of a semi-discrete finite difference scheme applied to the abstract Cauchy problem on a scale of Banach spaces" (査読有), Y. Iso, Proc. Japan Acad. Ser. A, vol. 87, pp. 109-113, (2011)

(4) "Simple numerical judgement on the singularity of the matrix by using the multiple-precision arithmetic" (査読有), H. Sakaguchi, H. Imai, Y. Iso, Theoretical and Applied Mechanics Japan, vol. 60, pp. 343-351, (2011)

(5) "Approximate Steady State Models for Magnetic Resonance Elastography", (査読有), Y. Jiang, H. Fujiwara, and G. Nakamura, SIAM J. of Appl. Math., Vol. 71, pp. 1965-1989, (2011)

(6) "多重格子法による輸送方程式の定常問題に対する差分法の高速解法" (査読有), 藤原宏志, 計算数理工学論文集, Vol. 11 pp. 13-18, (2011)

(7) "Numerical Simulation on Non-existence and Non-uniqueness of Solutions for the Tricomi Equation" (査読有), H. Imai, H. Sakaguchi, Y. Iso, GAKUTO Int'n'l Ser., Mathematical Sciences and Applications, Vol. 34, pp. 39-58, (2011)

(8) "スペクトル選点法を用いた遅延微分方程式の数値計算" (査読有), 安部 公輔, 今井 仁司, 中村 正彰, 日本大学理工学部一般教育教室彙報, Vol. 89, pp. 1-10 (2011)

(9) "輸送方程式の散乱核の等方性・異方性と数値解の挙動" (査読無), 藤原宏志, 東森信就, 第 60 回理論応用力学講演会講演論文集, (2011)

(10) "Numerical Continuation for the Laplace Equation with higher Order Regularization" (査読有), H. Imai,

and H. Sakaguchi, GAKUTO Intn'l Ser.,  
Mathematical Sciences and Applications,  
Japan, Vol. 32, pp. 131-144, (2010)

(11) "On Numerical Computation of the  
Toricomi Equation" (査読有), H. Imai, H.  
Sakaguchi, Y. Iso, Theoretical and Applied  
Mechanics Japan, vol. 59, pp. 359-372  
(2010)

[学会発表] (計 4 件)

(1) "Effective use of multiple-precision  
arithmetic for the inverse Laplace  
transform (招待講演)", Y. Iso, at: Laplace  
Transform Methods and Their Applications  
(2011, Nov., National Institute for  
Mathematical Science, Korea)

(2) "光トモグラフィの基礎 - 次代を拓  
くためのアプローチ" (特別講演) 藤原宏志,  
at: 第 13 回日本ヒト脳機能マッピング学会  
(2011 年 9 月, 国立京都国際会館)

(3) "To overcome ill-conditioned problems  
--- Effective use of multiple-precision  
arithmetic" (招待講演), Y. Iso, at: 6th  
East Asia SIAM Conference (2010 Jun.,  
University of Malaya, Kuala Lumpur,  
Malaysia)

(4) "High-Accurate Computation of One-Loop  
Integrals by Several Hundred Digits  
Multiple-Precision Arithmetic", H.  
Fujiwara, at: 3rd Computational Particle  
Physics Workshop, (2010 Sep., High-Energy  
Accelerator Research Organization,  
Tsukuba)

[図書] (計 0 件)

[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：  
取得年月日：

国内外の別：

[その他]

ホームページ等

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

磯 祐介 (ISO YUUSUKE)  
京都大学・情報学研究科・教授  
研究者番号：70203065

### (2) 研究分担者

藤原 宏志 (FUJIWARA HIROSHI)  
京都大学・情報学研究科・助教  
研究者番号：00362583

久保 雅義 (KUBO MASAYOSHI)  
京都大学・情報学研究科・講師  
研究者番号：10273616

西田 詩 (NISHIDA KOTOBA)  
鹿児島大学・理工学研究科・助教  
研究者番号：10274838

坂上 貴之 (SAKAJYOU TAKASHI)  
北海道大学・理学 (系) 研究科 (研究院)・  
教授  
研究者番号：10303603

大西 和栄 (OONISHI KAZUEI)  
茨城大学・理学部・教授  
研究者番号：20078554

中村 佳正 (NAKAMURA YOSHIMASA)  
京都大学・情報学研究科・教授  
研究者番号：50172458

今井 仁司 (IMAI HITOSHI)  
徳島大学・ソシオテクノサイエンス研究  
部・教授  
研究者番号：80203298

### (3) 連携研究者

( )

研究者番号：