

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名：非線形系の精度保証付き数値計算法の基盤と

エラーフリーな計算工学アルゴリズムの探求

2. 研究代表者：大石 進一(早稲田大学理工学術院基幹理工学部 教授)

3. 研究概要

計算機によって数学的に正しい数値計算結果を得るための精度保証付き数値計算学を計算工学の分野へ導入し、それらの諸問題を誤りなく、しかも現実的な計算時間で解けるようにすることが本研究課題の目標である。計算工学に現れる有限次元非線形系に対する精度保証付き数値計算のブレークスルーによって、人が安心して利用できる誤らない計算工学アルゴリズムを設計可能とし、理工学・産業の諸分野に絶大な波及効果をもたらす。

4. 中間評価結果

4-1. 研究の進捗状況及び研究成果の現状

(1) 研究進捗状況

誤差の恐怖からの解放という大きな目標に向け、悪条件下の線形問題に関する画期的な高精度区間演算法はもとより、スパース系の固有値問題、非線形方程式の精度保証、非凸領域での境界値問題、計算工学のエラーフリー化等の諸問題で着実に成果を上げつつある。また、一部の成果は、企業との共同研究にも発展しており、全体として当初の目的・計画以上に進捗していると言える。

有限要素法の研究者、スーパーコンピューティング分野の研究者との協力関係を築き、精度保証を伴う高速区間演算をより幅広い分野に展開していくことは、今後世界的革新をもたらすと期待される。またエラーフリー計算工学の成果は企業との共同研究にも結び付いており、産業界への寄与も大きい。

スパコン「京」を始めとして、日本の計算機技術は非常に高く、同時にそれへの期待も大きい。しかしそれを実際の計算において安心して使うためには、高速性を損なわない精度保証が裏打ちされていなければならない。大石グループの成果は、丸めモードの変更を伴わない高速区間演算・高速精度保証関数計算法、スパース系の精度保証、非線形系に対する成果など、その科学的・技術的インパクトは極めて大きい。

しかし大石グループの国際的評価については、もっと **visible** な結果があってもしかるべきであり、その方向への継続的努力はもっとなされてよいだろう。

(2) 研究体制

早大グループ、東京女子大グループ、芝浦工大グループがそれぞれの得意技を持ち寄るとともに、役割分担と協働体制のバランスを巧みにとることにより、グループ間の連携が順調に機能して、多くの成果につながっている。ミーティング、交流会も密に行い、全国展開への努力も実行しており高く評価できる。また若手がのびのびと研究している雰囲気がかがえる点も良い。従来からの研究グループに加え、偏微分方程式の精度保証付き数値計算を研究してきたグループからの研究者も取り入れることにより、非線形問題への研究者層を厚くするなど、全体的な研究体制の強化も図っている。代表者のより困難な問題に対する強いリーダーシップも全体の士気向上にプラスに働いている。

今後、関連する数学者とのより踏み込んだ研究交流や海外の研究者との協働研究にもより一層踏み込んでもらえることを希望したい。

4-2. 今後の研究に向けて

非線形系への精度保証は困難な問題であるが、重要かつ影響力が大きい。既に任意多角形上での偏微分方程式の解の検証が可能となり、より実用的な応用問題や大規模スパース系へのより精密な解の検証を確立していくことも視野に入り、今後最も期待される研究方向である。回路理論を精度保証付きで再構築する課題も意

欲的で評価できる。さらには 100 万次元の非線形連立方程式を精度保証付きで解くことにより分子動力学やタンパク質折りたたみ問題への応用などにも展開できないか期待される。

数学、工学、そして産業界も視野においた幅広い連携は、今後大きなインパクトをもつと考えられる。既に述べたようにスパコンの大規模高速計算を裏で支えるのは、地道な高速化アルゴリズムと精度保証である。大石チームはこれを着実に果たしつつ、今後のシミュレーション技術への応用等を通して社会的インパクトの高い実質的貢献をなし得ると考えられる。また MATLAB などの汎用ソフトにおいて精度保証付き数値計算ツールが仕上がれば、波及効果は大きいだろう。全体として現時点ではアカデミアでの大きな成果であるが、今後は特に産業界への影響が期待される。

4-3. 総合的評価

100 万次元の非線形方程式系を精度保証可能にし、また計算工学の問題を計算時間平均2倍以内で完全精度保証化することなどを通じ、「数値計算において生じる誤差の恐怖から研究者を解放すること」を目指す研究であり、その今日的意義は大きい。今後産業界への貢献も期待され、極めて順調に研究が進捗していると言える。適度な計算速度を保ちつつ、精度はしっかりというのが、今後目指すべき数値計算の方向となっていくであろう。

応用面としては、偏微分方程式のみならず、確率微分方程式、分子動力学などより多様な方向を是非探索して欲しい。例えばコハツ CREST チームではモデル選択のために情報量基準の評価を実施しているが、高次多項式の最大値・最小値などの評価の精度保証ができると、関数の平坦部分が広いクラスに対してもなんらかの貢献ができる可能性があり、これは CREST チーム間協働研究にもつながり、本来の数学領域という Virtual Institute にとっても大きな刺激である。

最後になるが国際会議やワークショップなどの開催など、国際的 visibility をその成果に見合う程度にもっと盛り上げていただければと思う。