

大石 進一

早稲田大学理工学術院
教授

モデリングのための精度保証付き数値計算論の展開

§1. 研究実施体制

(1)「大石」グループ

- ① 研究代表者:大石 進一 (早稲田大学理工学術院 教授)
- ② 研究項目
 - ・モデリングのための精度保証付き数値計算法の開発

(2)「荻田」グループ

- ① 主たる共同研究者:荻田 武史 (東京女子大学現代教養学部 准教授)
- ② 研究項目
 - ・無誤差変換法を用いた高速・高精度な数値線形代数アルゴリズムの開発

(3)「山本」グループ

- ① 主たる共同研究者:山本 野人 (電気通信大学情報理工学部 教授)
- ② 研究項目
 - ・微分方程式に対する精度保証の開発

(4)「高橋」グループ

- ① 主たる共同研究者:高橋 大輔 (早稲田大学理工学術院 教授)
- ② 研究項目
 - ・可積分系研究の厳密解析の展開

(5)「渡部」グループ

- ① 主たる共同研究者:渡部 善隆 (九州大学情報基盤研究開発センター 准教授)

② 研究項目

- ・非線形偏微分方程式に対する計算機援用証明

(6)「小林」グループ

① 主たる共同研究者:小林 健太 (一橋大学商学研究科 教授)

② 研究項目

- ・有限要素法の誤差評価と精度保証付き数値計算への応用

(7)「尾崎」グループ

① 主たる共同研究者:尾崎 克久 (芝浦工業大学システム理工学部 准教授)

② 研究項目

- ・線形計算に対する高精度かつ高速なアルゴリズムの開発とその応用

(8)「山中」グループ

① 主たる共同研究者:山中 脩也 (明星大学情報学部 准教授)

② 研究項目

- ・精度保証理論に基づく計算基盤技術の高性能化

§2. 研究実施の概要

モデリングのための精度保証付き数値計算の構築のために8本の柱である「不確定要素問題」、「悪条件性問題」、「大規模性問題」、「構造問題」、「精度保証基盤技術の高度な展開」、「精度保証に必要なキー定数の具体的算出」、「精度保証フロンティアの開拓」、「可積分系研究の展開」の研究を行っている。

今年度の研究実施の概要をそれぞれ以下に記述する。

(1) 不確定要素問題:

ペナルティ関数を導入し、Affine 演算におけるダミー変数を削減するアルゴリズムを前年度開発した。その有効性を確認する為、このアルゴリズムを高橋グループで研究されている可積分な離散力学系の数値計算に応用した。

(2) 悪条件性問題:

モデリングにおける悪条件性問題の解決を目指して、条件数が10の30乗程度までの悪条件性を持つ連立一次方程式に適用可能な高精度数値計算法を開発した。具体的には、エラーフリー変換法をベースとして、悪条件行列に対する効果的な前処理方式を開発した。

(3) 大規模性問題:

精度保証付きライブラリを用いた線形計算関数群を開発し、応用分野で実際に使用されている行列に対する誤差解析・性能評価を行うことにより、大規模性問題解決のための知見を得た。また、大規模行列に対する正定値性の保証法の検討を進めた。

(4) 構造問題:

水面波の数理モデルである Degasperis-Procesi 方程式の自己適合移動格子スキームの構築に成功した。また、水の土壌への浸透を記述する数理モデルに対して自己適合移動格子スキームを構築し、数値計算法として有効であることを示した。

(5) 精度保証基盤技術の高度な展開:

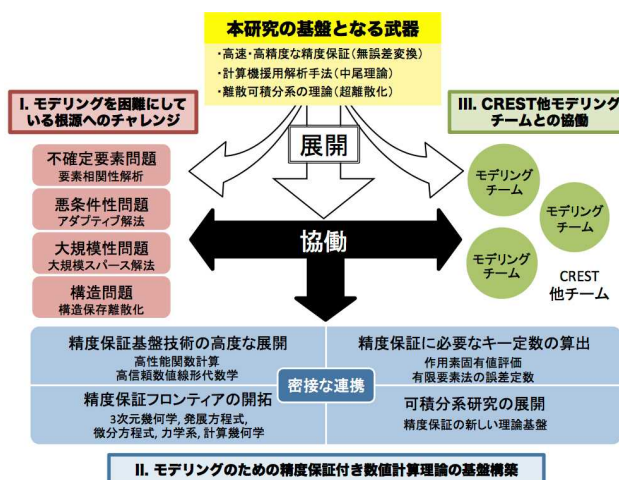
これまでに達成した特殊関数の精度保証計算法の、複素数入力への拡張を行ない、ガンマ関数と第2種修正ベッセル関数において、それらを達成する計算法を考案した。また、faithful rounding を達成する行列積アルゴリズムを提案した。

(6) 精度保証に必要なキー定数の具体的算出:

非適合有限要素法を利用して、トレース定理の定数の厳密な値を算出するアルゴリズムを開発した。

(7) 精度保証フロンティアの開拓:

時間発展を伴うシステムの平衡点や不動点の近傍での解の振る舞いを解析するための非常に強力なツールとなる Lyapunov 関数を構築するための一般的な方法を、精度保証法を用いて開発してきた。今年度はこの方法を発展させ、力学系の分野で困難な問題であるホモクリニック軌道や



ヘテロクリニック軌道の存在証明などにその応用を広げた.

量子化学分野において, 基底状態にある分子のエネルギーの計算はとても重要であり, この問題に対する精度保証付き数値計算法を提案した. また, 2数の大小関係を判定する浮動小数点フィルタを開発し, 成果は論文として採録された.

(8)可積分系研究の展開:

max 方程式の解の複雑度による分類, リャプノフ関数による解の漸近挙動の解析, 可解方程式の高階への拡張, 確率粒子系の相転移に関する厳密解析を行った.

代表的な原著論文

- [1] Makoto Mizuguchi, Akitoshi Takayasu, Takayuki Kubo, and Shin'ichi Oishi, A method of verified computations for solutions to semilinear parabolic equations using semigroup theory, SIAM J. Numer. Anal., Vol. 55, No.2, pp.980-1001, 2017.
- [2] A. Takayasu, K. Matsue, T. Sasaki, K. Tanaka, M. Mizuguchi, and S. Oishi: Numerical validation of blow-up solutions of ordinary differential equations, J. Comput. Appl. Math., Vol. 314, pp.10-29, Apr. 2017.
- [3] Ryo Kobayashi, Takuma Kimura, Shin'ichi Oishi, A method for verifying the accuracy of numerical solutions of symmetric saddle point linear systems, Numerical Algorithms, Vol. 76, Issue 1, pp.33--51, September 2017.