現代の数理科学と連携するモデリング手法の構築
平成 26 年度採択研究代表者

H27 年度
実績報告書

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 （一橋大学大学院商学研究科、准教授）

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 （帝京平成大学現代ライフ学部、助教）

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」について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．

不確定要素問題：区間演算の一つにアフィン演算という演算を繰り返すことによる区間幅の増大を抑えられる演算方法が知られている．しかし，アフィン演算は非線形演算を繰り返す度に変数を追加するために実行速度が遅くなってしまう．そこで，追加した変数の重要度を確認する手法を考案し，重要度が低い変数を削除することで，アフィン演算の実行速度の向上を可能にした．

悪条件性問題：通常使用される浮動小数点数を用いては，精度の良い近似解が得られず，2倍の精度を使用しないとならない連立一次方程式の問題に対して，通常の多倍長精度演算を用いるよりも効率的な計算手法とその実装法の開発に成功した．

大規模性問題：非自己共役固有値問題に対する精度保証付き数値計算に取り組み，従来丸め誤差の影響から実現出来なかった高精度な検証結果を与えるとともに，大規模性問題解決のための知見を得た．

構造問題：多粒子系を表す確率セルオートマトンについて，基本図の厳密解析の新しい手法を構築した．

精度保証基盤技術の高度な展開：半無限区間を積分区間に持つ精度保証付き数値積分手法のフレームワークの構築を行なった．従来手計算が必要であった箇所に，最大値の原理を基礎とする複素区間演算を用いることにより，高精度かつ実用的な数値積分手法を構築した．また，悪条件問題を高速に解くための，構造を持った行列の積を高精度に計算するコードを実装した．

精度保証に必要なキー定数の具体的算出：三角形要素および四面体要素の補間誤差解析について，Babuska-Aziz による最大角条件についての結果を，行列の Kronecker 積を用いて再構成することにより，Lp 空間における高次 Lagrange 補間の評価へ拡張した．

精度保証フロンティアの開拓：非線形関数方程式に対する精度保証付き数値計算に取り組み，残差引き戻しとニュートン法に基づく汎用性の高い計算機援用証明手法を導くことに成功した．また，この手法の基盤を成す線形化作用素に対する可逆性の検証とその逆作用素ノルム評価理論を深化させるとともに，具体的な非線形問題への適用によりその有効性を確認した．

可積分系研究の展開：アフィン演算を用いた精度保証の可積分系向けの改良，および可積分・非可積分それぞれに対する手法の有効性の差異の検証を行った．さらに，多成分系や空間多次元問題に対する構造保存型差分スキームを構築した．

本年度の代表論文：

[1] Y. Watanabe, M. T. Nakao: A numerical verification method for nonlinear functional equations based on infinite-dimensional Newton-like iteration, Applied Mathematics and Computation, Vol. 276, Issue C (2016), pp.239-251.

[2] K. Kobayashi, T. Tsuchiya: A priori error estimates for Lagrange interpolation on

triangles, Applications of Mathematics, Vol.60, Issue 5 (2015), pp.485-499.