

1. 研究課題名：精度保証付き数値計算学の確立

2. 研究期間：平成 17 年度～平成 21 年度

3. 研究代表者：大石 進一（早稲田大学・理工学術院・教授）

#### 4. 研究代表者からの報告

##### (1) 研究課題の目的及び意義

Von Neumann が計算機を発案した大きな目標は非線形偏微分方程式を数値計算により数学的に厳密な意味で解くことであった。皮肉なことに、数値計算の誤差を厳密に把握することが理論的及び技術的に難しいという理由で、現代に至るまで数値計算とは誤差の把握を行わないものであるというのが主流の考え方になっている。しかし、学問的に見れば、(数学的に厳密な意味での) 必要な精度の解を得るのに必要な計算資源(計算時間とメモリ量など)を明らかにするのが数値計算学であるべきことは明らかであり、現状では学問の体をなしていない。ここでは、まず、数値計算の基礎となる線形系について、従来の近似解を求める計算の数倍程度の計算時間で精度保証付きに数値解を求める、本来的な意味での数値計算学を確立する。具体的には、(1)条件数(係数などの変動が解の変動に何倍に拡大されるかの倍率)が非常に高い問題について、本研究者が開発した誤差無し内積計算法を用いた効率的な精度保証付き数値計算法を確立する、(2)共役勾配法などの反復解法系を利用した超大規模線形系(100 万次元以上の連立系)の精度保証付き数値計算を確立する、(3)その応用として、Von Neumann の夢であった流体系非線形偏微分方程式の境界値問題等の解の存在と唯一性について、数値計算結果を基に証明する「計算機援用証明」法を確立し、その夢を実現する。

##### (2) 研究の進展状況及び成果の概要

本研究は、数値計算の基礎となる線形系について、従来の近似解を求める計算の数倍程度の計算時間で精度保証付きに数値解を求める、本来的な意味での数値計算学を確立し、その応用として、Von Neumann の夢であった流体系非線形偏微分方程式の境界値問題等の解の存在と唯一性について、数値計算結果を基に証明する「計算機援用証明」法を確立し、その夢を実現することを目的として推進されている。

研究は研究計画に沿って順調に進められている。具体的には次のような成果を得ている。

###### ① 大規模スパース線形系に対する精度保証法の検討

スパースで大規模な線形連立一次方程式の数値解を、BiCGStab 法や GMRES 法などの反復解法を利用して精度保証する理論と技術を開発し、この方法が大きな並列性をもつことを示した。また、ダイレクトスパース法に基づく対称正値系の精度保証法の原理を発見し、その有効性を示した。さらに、その精度保証を発展させて、100 万次元クラスの大規模な系に適用可能な方法を開発している。

###### ② 誤差無し内積計算法の発展と応用

浮動小数点数を要素とするベクトルの内積を、特別なハードウェアや多倍長ライブラリなどのソフトウェアを用意することなく、非常に効率的かつ高精度に内積を計算することができる現在世界最高速の方法を構築した。また、これを応用した悪条件線形問題に対する精度保証法を開発した。

###### ③ 流体系非線形偏微分方程式に対する解の数値的検証法の検討

2次元 Driven-Cavity 問題、熱対流問題、2次元重調和方程式など、様々な流体系非線形偏微分方程式に対し、有限要素法とその構成的誤差評価法やスペクトル法を用いた解の数値的検証法を構築し、その有用性を示した。

###### ④ カオス系の計算機援用証明法の検討

非線形常微分方程式の境界値問題の精度保証付き数値計算法について様々な角度から検討を行い、効率的な手法開発への方向性を得た。

#### 5. 審査部会における所見

##### A (現行のまま推進すればよい)

計算科学の基礎的研究として大きな意義が認められる。また①大規模スパース線形系に対する精度保証法の検討、②誤差無し内積計算法の発展と応用に関しては、順調に研究が進捗している。

一方、③流体系非線形偏微分方程式に対する解の数値的検証法の検討、④カオス系の計算機援用証明法の検討に関しては、やや遅れが見られる。これらについては、研究課題の選定等に工夫することによって、当初の目的を効果的に達成できるものと期待される。