

数理解析研究所講究録 1614

計算科学の基盤技術としての
高速アルゴリズムとその周辺

京都大学数理解析研究所

2008年10月

RIMS Kôkyûroku 1614

*High Performance Algorithms for Computational Science
and Their Applications*

October, 2008

Research Institute for Mathematical Sciences

Kyoto University, Kyoto, Japan

This is a report of research done at the Research Institute for Mathematical Sciences, Kyoto University. The papers contained herein are in final form and will not be submitted for publication elsewhere.

計算科学の基盤技術としての高速アルゴリズムとその周辺 High Performance Algorithms for Computational Science and Their Applications

RIMS 研究集会

京都大学数理解析研究所の共同研究事業の一つとして、下記のように研究集会を催しますので、ご案内申し上げます。

研究代表者 張 紹良
(名古屋大学大学院工学研究科)

記

日時 平成 19 年 11 月 14 日 (水) 10:40 ~ 11 月 16 日 (金) 17:00
場所 京都市左京区北白川追分町 京都大学数理解析研究所 4 階 420 号室
市バス 京大農学部前または北白川下車

プログラム

11 月 14 日

- 10:40-11:20 尾崎 克久 (Katsuhisa Ozaki, 早稲田大学), 荻田 武史 (Takeshi Ogita, JST / 早稲田大学), Siegfried M. Rump (ハンブルグ工科大学), 大石 進一 (Shin'ichi Oishi, 早稲田大学)
計算幾何学に現れる行列式の符号に対する高速精度保証法
Fast and Robust Algorithms for Geometric Predicates
- 11:20-12:00 渡部 善隆 (Yoshitaka Watanabe, 九州大学)
並行 Poiseuille 流れの不安定性に対する計算機援用証明
A computer-assisted instability proof for the plane Poiseuille flow
- 13:30-14:30 (Invited talk) 相島 健助 (Kensuke Aishima, 東京大学), 松尾 宇泰 (Takayasu Matsuo, 東京大学), 室田 一雄 (Kazuo Murota, 東京大学), 杉原 正顯 (Masaaki Sugihara, 東京大学)
特異値計算アルゴリズム dqds 法の収束定理
Convergence Theorems of the dqds Algorithm for Singular Values
- 14:30-15:10 荻田 武史 (Takeshi Ogita, JST / 早稲田大学)
大規模疎行列の正定値性の精度保証
Verification of positive definiteness of Large Sparse Matrices
- 15:20-16:20 (Invited talk) 星 健夫 (Takeo Hoshi, 鳥取大学)
超大規模電子構造理論と数値計算アルゴリズム
Ultra-large-scale electronic structure theory and numerical algorithm
- 16:20-17:00 Martin van Gijzen (Delft University of Technology)
IDR(s): a family of simple and fast algorithms for large nonsymmetric systems of linear equations

11 月 15 日

- 09:10-09:50 小藤 俊幸 (Toshiyuki Koto, 名古屋大学), 平出 優佳 (Yuka Hiraide, 名古屋大学)
IMEX 線形多段階スキームの安定性解析
Stability analysis of IMEX linear multistep schemes
- 09:50-10:30 小林 亮 (Ryo Kobayashi, 広島大学)
生物に学ぶ最短経路探索問題の解法
Biologically Motivated Shortest Path Finding Algorithm
- 10:40-11:20 降旗 大介 (Daisuke Furihata, 大阪大学)
微分方程式の局所的性質と大域的性質の関係性の差分作用素の逆作用素による離散的再現
Inverse difference operators preserve structure between local properties and global ones of differential equations

- 11:20-12:00 森 正武 (Masatake Mori, 東京電機大学), アヒニヤズ ヌルメメット (Ahniyaz Nurmuhammad, 東京電機大学), マイヌル メメット (Mayinur Muhammad, 東京電機大学)
二重指数変換に基づく Sinc 展開による特異摂動問題の数値解法
DE Sinc method for singularly-perturbed boundary value problem
- 13:30-14:30 (Invited talk) Gerard L.G. Sleijpen(Utrecht University)
Computing dominant poles of transfer functions
- 14:30-15:10 曾我部 知広 (Tomohiro Sogabe, 名古屋大学), 張 紹良 (Shao-Liang Zhang, 名古屋大学)
QMR 法のシフト複素対称線形方程式への適用について
On an application of the QMR method to complex symmetric shifted linear systems
- 15:20-16:20(Invited talk) 藤澤 克樹 (Katsuki Fujisawa, 中央大学)
半正定値計画問題に対する主双対内点法の高速&安定計算
Fast, exact and stable computation of the primal-dual interior-point method for the semidefinite program
- 16:20-17:00 成島 康史 (Yasushi Narushima, 東京理科大学), 矢部 博 (Hiroshi Yabe, 東京理科大学)
無制約最適化問題に対する新しい非線形 3 項共役勾配法について
A new 3-term nonlinear conjugate gradient method
- 11 月 16 日
- 09:10-09:50 近藤 弘一 (Koichi Kondo, 同志社大学), 杉本 昌平 (Shohei Sugimoto, 同志社大学), 岩崎 雅史 (Masashi Iwasaki, 京都府立大学)
2 次非線形方程式系の解法に基づく行列の対角化法
Matrix diagonalization methods based on solving quadratic nonlinear systems
- 09:50-10:50(Invited talk) 寺本 敬 (Takashi Teramoto, 千歳科学技術大学), マルシオ ガメイロ (Marcio Gameiro, 北海道大学)
計算ホモロジーの複雑な空間パターンへの応用
Applications of computational homology to complex patterns analysis
- 11:00-12:00 (Invited talk) 伊庭 幸人 (Yukito Iba, 統計数理研究所)
マルコフ連鎖モンテカルロ法: 新しい応用分野と手法の発展
Markov Chain Monte Carlo: Novel Applications and Techniques
- 13:30-14:10 田端 正久 (Masahisa Tabata, 九州大学)
多流体問題の数値シミュレーション
Numerical simulations of multifluid flow problems
- 14:10-14:50 小林 健太 (Kenta Kobayashi, 金沢大学)
メッシュリファインメントを用いた有限要素解の事前誤差評価
A priori error estimation for finite element discretizations in a non-convex domain using mesh refinement
- 14:50-15:30 多田野 寛人 (Hiroto Tadano, 京都大学), 木原 崇智 (Takanori Kihara, 筑波大学), 櫻井 鉄也 (Tetsuya Sakurai, 筑波大学)
Cell Broadband Engine における CIRR 法の実装と性能評価
An implementation and performance evaluation of the CIRR method on the Cell Broadband Engine
- 15:40-16:20 松本 純一 (Junichi Matsumoto, 産業技術総合研究所)
直交基底気泡関数要素安定化法による流体解析
Orthogonal Basis Bubble Function Element Stabilization Method for Fluid Analysis
- 16:20-17:00 杉浦 洋 (Hiroshi Sugiura, 南山大学), 長谷川 武光 (Takemitsu Hasegawa, 福井大学)
Abel の方程式の解法: 分数階微分の一様近似
Quadrature rule for Abel's equations: uniformly approximating fractional derivatives

計算科学の基盤技術としての高速アルゴリズムとその周辺
 High Performance Algorithms for Computational Science and Their Applications
 RIMS 研究集会報告集

2007年11月14日～11月16日
 研究代表者 張 紹良 (Shao-Liang Zhang)

目 次

1. 点と直線の位置関係の計算をロバストに行う 点と平面の位置関係の精度保証法 -----	1
早大・理工学(Waseda U.)	尾崎 克久(Katsuhisa Ozaki)
東京女子大・文理(Tokyo Woman's Christian U.) / 早大・理工学(Waseda U.)	荻田 武史(Takeshi Ogita)
早大・理工学(Waseda U.)	大石 進一(Shin'ichi Oishi)
2. 並行 Poiseuille 流れの不安定性に対する計算機援用証明 -----	11
九大・情報基盤研究開発センター(Kyushu U.)	渡部 善隆(Yoshitaka Watanabe)
Karlsruhe U.	Michael Plum
九大・数理学(Kyushu U.)	中尾 充宏(Mitsuhiro T. Nakao)
3. 特異値計算アルゴリズム dqds 法の収束定理 -----	20
東大・情報理工学系(U. Tokyo)	相島 健助(Kensuke Aishima)
"	松尾 宇泰(Takayasu Matsuo)
"	室田 一雄(Kazuo Murota)
"	杉原 正顯(Masaaki Sugihara)
4. 大規模疎行列の正定値性の保証法 -----	34
東京女子大・文理(Tokyo Woman's Christian U.) / 早大・理工学(Waseda U.)	荻田 武史(Takeshi Ogita)
Hamburg U. Tech. / 早大・理工学(Waseda U.)	Siegfried M. Rump
早大・理工学(Waseda U.)	大石 進一(Shin'ichi Oishi)
5. Ultra-large-scale electronic structure theory and numerical algorithm -----	40
鳥取大・工(Tottori U.) / CREST-JST	星 健夫(Takeo Hoshi)
6. The IDR (s) method for solving nonsymmetric systems: a performance study for CFD problems -----	53
Delft U. Tech.	Martin B. van Gijzen
"	Peter Sonneveld
7. IMEX 線形多段階スキームの安定性解析 -----	64
名大・情報科学(Nagoya U.)	小藤 俊幸(Toshiyuki Koto)
"	平出 優佳(Yuka Hiraide)

8.	微分方程式の局所的性質と大域的性質の関係性の差分作用素の 逆作用素による離散的再現 -----	78
	阪大・サイバーメディアセンター(Osaka U.) 降旗 大介(Daisuke Furihata)	
9.	二重指数変換に基づくSinc展開による特異摂動問題の数値解法 -----	92
	東京電機大・理工(Tokyo Denki U.) 森 正武(Masatake Mori)	
	" Ahniyaz Nurmuhammad	
	" Mayinur Muhammad	
	" 峰村 晋策(Shinsaku Minemura)	
1 0.	COMPUTING DOMINANT POLES OF TRANSFER FUNCTIONS -----	111
	Utrecht U. Gerard L. G. Sleijpen	
	NXP Semiconductors Corporate I&T / Design Tech. & Flows	
	Joost Rommes	
1 1.	On the use of the QMR_SYM method for solving complex symmetric shifted linear systems -----	124
	名大・工学(Nagoya U.) 曾我部 知広(Tomohiro Sogabe)	
	" 張 紹良(Shao-Liang Zhang)	
1 2.	SDPA Project and New Features of SDPA 7.1.0 -----	136
	中央大・理工(Chuo U.) 藤澤 克樹(Katsuki Fujisawa)	
	東工大・情報理工学(Tokyo Inst. Tech.) 小島 政和(Masakazu Kojima)	
	" 中田 和秀(Kazuhide Nakata)	
	" 福田 光浩(Mituhiro Fukuda)	
	神奈川大・工(Kanagawa U.) 山下 真(Makoto Yamashita)	
	理化学研究所(RIKEN) 中田 真秀(Maho Nakata)	
1 3.	A new three-term nonlinear conjugate gradient method for unconstrained optimization -----	144
	東京理大・理(Tokyo U. Sci.) 成島 康史(Yasushi Narushima)	
	" 矢部 博(Hiroshi Yabe)	
1 4.	2次非線形方程式系の解法に基づく行列の対角化法 -----	156
	同志社大・工(Doshisha U.) 近藤 弘一(Koichi Kondo)	
	同志社大・工学(Doshisha U.) 杉本 昌平(Shohei Sugimoto)	
	京都府立大・人間環境(Kyoto Prefectural U.) 岩崎 雅史(Masashi Iwasaki)	
1 5.	Applications of computational homology to 3D morphology transitions -----	166
	千歳科学技術大(Chitose Inst. Sci. Tech.) 寺本 敬(Takashi Teramoto)	
	北大・電子科学研(Hokkaido U.) Marcio Gameiro	
	" 西浦 廉政(Yasumasa Nishiura)	

16.	マルコフ連鎖モンテカルロ法：新しい応用分野と手法の発展 -----	172
	統数研(Inst. Statistical Math.)	伊庭 幸人(Yukito Iba)
17.	多流体問題の数値シミュレーション -----	173
	九大・数理学(Kyushu U.)	田端 正久(Masahisa Tabata)
18.	メッシュリファインメントを用いた有限要素解の事前誤差評価 -----	180
	金沢大・自然科学(Kanazawa U.)	小林 健太(Kenta Kobayashi)
19.	直交基底気泡関数要素安定化法による流体解析 -----	187
	産総研(AIST)	松本 純一(Junichi Matsumoto)
20.	Quadrature rule for Abel's equations: uniformly approximating fractional derivatives -----	199
	南山大・数理情報(Nanzan U.)	杉浦 洋(Hiroshi Sugiura)
	福井大・工学(U. Fukui)	長谷川 武光(Takemitsu Hasegawa)