

氏 名 福井 義成

学位（専攻分野） 博士（学術）

学位記番号 総研大乙第 179 号

学位授与の日付 平成 19 年 9 月 28 日

学位授与の要件 学位規則第 6 条第 2 項該当

学位論文題目 数値シミュレーションの基礎と応用の研究

論文審査委員 主 査 教授 土谷 隆
教授 田村 義保
教授 中野 純司
教授 小柳 義夫（工学院大学）

論文内容の要旨

科学技術分野では、理論、実験に続く第3の科学としての計算科学が定着しつつある。計算科学においては、モデル化、離散化、数値計算アルゴリズム・データ構造、結果の可視化、の広い範囲に渡る、分野横断的視点に基づいた研究が重要である。本論文は、そのような立場から、数値シミュレーションの基礎と応用に関連して、

1. 数値微分の誤差解析と補外法の適用
2. 回路シミュレーションの高速化
3. 連立一次方程式反復解法システム TiS
4. 計算機シミュレーションと仮想研究環境

についての研究を行ったものである。本論文中には、著者が長年企業（東芝）に在職して遂行した研究成果が含まれている。論文は全6章からなる。第1章と第6章は序論と結論であり、第2章から第5章までが研究の本体である。

第2章においては、等間隔の分点を用いる数値微分について論じられている。数値微分は、微分を差分により近似する手法であるが、有限精度で計算が行われるため、刻み幅を小さくするにつれて、丸め誤差の影響が増大し、必ずしも小さな刻み幅で精度の良い計算値が得られるとは限らない。そのため、打ち切り誤差と丸め誤差の両方を考慮し、最適刻み幅を求めることは、実用上重要な問題点である。本研究では、特に、高階微分に関して近似誤差を解析し、最適刻み幅を導出している。ところが、この解析により求められる最適刻み幅を計算するには、関数の高階微分の情報が必要となる。そこで、その困難を避けるために刻み幅を徐々に小さくして計算し、補外により高階の数値微分を求めることを考え、誤差解析を行っている。そして補外計算による丸め誤差の累積が殆ど無視できることを明らかにし、丸め誤差と打ち切り誤差のバランスを考えて、最良に近い近似値が得られるような刻み幅を自動的に求める手続きを考案し、数値実験によりその振る舞いを検証している。

第3章においては、回路シミュレーションの高速化を扱っている。ベースとなる、回路シミュレーションシステム SPICE-GT に種々の高速化技法を適用化し、300倍以上の高速化を実現した。回路解析には、DC 解析、AC 解析、過渡解析等があり、過渡解析が最も計算時間を要する解析である。過渡解析は、回路行列の構成、回路行列の求解、その他に大別される。本研究では、過渡解析を中心に高速化が図られている。回路行列の構成においては、並列性が高いため、マルチタスキングとベクトル化を適用し、回路行列の求解にあたっては、コード生成による、行列の疎性を生かした LU 分解の技法を開発した。後者の部分はそれだけで特に数十倍の高速化を実現することに成功している。高速化の結果として、歩留まり向上に必要なパラメトリックスタディが可能となり、半導体生産に重要な貢献をした。開発された技術により、パラメータを変えてシミュレーションを行って最適化する、パラメトリックスタディが、回路設計において可能になり、特に、製造プロセスの変動に対してロバストな回路を事前にシミュレーションに基づいて設計することができるようになった。その結果として、大幅な歩留まりの向上が実現された。改良後の SPICE-GT は、東芝、IBM、シーメンスの 256Mbit-DRAM 共同研究開発プロジェクトの標準ツールにも採用された。本章の成果に裏打ちされた「パラメトリックスタディの重要性」は、本論文を貫く問題意識の重要な部分を成しており、特に第5章のシステム構築へとつながるものである。

第4章では、大規模疎行列 A を係数とする連立一次方程式 $Ax = b$ の反復解法の評価システム TiS について述べている。大規模連立一次方程式の解法においては、問題に適した前処理や

解法を選択が重要であるが、TiS では、利用者は、web 上で問題をアップロードし、複数の前処理と反復解法の組み合わせで説いた解と残差ノルムの収束経過を表した評価データを受け取る。一方、研究者、管理者側では、投稿された問題とそれを解いた結果が蓄積されていくこととなり、双方にとって利点があるシステムとなっており、実際にこれが利用された例も報告されている。

第5章では、計算機シミュレーションと仮想研究環境について議論している。第3章の例でも見られるように、計算機シミュレーションを真に有用なものとするためには、パラメトリック・スタディが重要なものであると考えられる。本章では、そのような問題意識に立脚して構築された、計算機シミュレーション普及のためのポータルサイト「ITBL ポータル」について論じている。このサイト上には、いくつかの計算機シミュレーションシステムに利用者が問題を解かせることができ、計算機シミュレーションの有用性を体験できるようになっている。

論文の審査結果の要旨

[論文の概要について]

科学技術分野では、「理論」、「実験」に続く「第3の科学」としての「計算科学」が定着しつつある。このような状況を背景として、本論文においては、計算機シミュレーションの基礎と応用についての研究を行っている。提出された論文の草稿は全6章143頁からなり、日本語で執筆されている。2章から5章までは、著者の原著論文を元にした内容となっており、1章では序論として、研究の背景・目的、概要、意義が述べられており、一連の研究に対する福井氏の問題意識を提示している。6章は2章から5章の総括及び問題意識のまとめにあてられている。

2章では、数値微分の丸め誤差と打ち切り誤差の解析を行い、浮動小数点計算における数値微分の振る舞いを解明している。特に高階微分の数値微分の悪条件性を、誤差解析と最適刻み幅の導出を行って明らかにし、精度良い高階微分を自動的に計算するために補外法を用いた場合の誤差解析を行っている。そして、補外法における打ち切り誤差と丸め誤差の伝播の性質を明らかにし、最適な数値微分値を得るための収束判定条件を提案している。

3章では、回路シミュレータの高速化を扱っている。これは、申請者が企業においてDRAM開発に実際に携わり直面した問題であり、数値計算技術的には非線形常微分方程式系の積分の高速化問題と捉えることができる。申請者は、大規模疎行列を係数とする連立一次方程式の求解のためのコード生成やベクトル化などの諸手法を実施することにより、従来に比して300倍の高速化を達成することに成功した。これにより、多数のパラメータについて計算機シミュレーションを行って、最適なDRAM設計を行う、パラメトリック・スタディが実現可能となった。

4章では、申請者によって開発された、web上の連立1次方程式反復解法評価システム TiS について論じている。これは、利用者がwebを利用して、解きたい連立1次方程式の例をこのシステムにサブミットすることにより、いくつかの代表的な解法を一度にテストし、プログラムを作ることなく自分の問題にふさわしい反復解法と前処理を選択することができるものである。

5章では、申請者によって開発された、web上のポータルサイト ITBL を扱っている。これは、パラメトリック・スタディーにより、製品の最適化や歩留まりを向上させることが実現可能であることを示すことが、計算機シミュレーションを普及させる上では重要であるという考えの下に設計された、計算機シミュレーションのためのポータルサイトである。このシステムでは、パラメトリック・スタディーを効率的にするために、グリッド・システムを有効に活用することが試みられている。

[論文の評価]

2章において、数値微分という、数値計算における基本的で重要な技法について、仔細に検討を重ね、高階微分に関する打ち切り誤差と丸め誤差の関係を解析して明らかにし、そして、正確な値を求めるために補外法を適用した場合に、最適な数値微分値を得るための収束判定条件を提案していることは評価できる。3章で扱った回路シミュレータの高速化手法は、他の科学技術計算にも活用可能であり、特に疎行列のLU分解の高速化手法は広い分野で有効であると考えられる。並列化、ベクトル化も世界に先駆けて実現し、実際の生産現場でも256メガのDRAM開発に大きな貢献をしており、スパコンによるシミュレーション技術が生産に直結して生かされた先駆的な実例として、高く評価できる。4章では、大規模疎行列を係数と連立一次方程式を反復解法で解く際に重要である、前処理の選択、解法の選択の参考にすることができるように、前処理、反復解法の評価システムを構築している。このシステムは、数値解法の利用者、数値解法の研究者、計算機システムの研究者の、データや計算結果の共有を可能にし、

利用者が最適な解法を選ぶことを可能にするだけでなく、新たな数値解法の研究のためのシーズともなりうる。5章のITBLポータルにおいては、その提案システムにより、新たな計算機シミュレーション・ユーザの開拓を可能にしていることが評価できる。以上より、審査委員会は、本論文は学位を授与するに相応しい内容を備えていると判断した。