

## 常微分方程式の安定性解析とその並列化について

幸谷智紀\* 大梶弘順\*

本稿では、非線型常微分方程式の漸近安定性解析を高速に行う手法について議論する。我々は既に補外法と多倍長浮動小数点ライブラリを用いて漸近安定性解析を行うソフトウェアを作成し、仮想化した細胞間モデルの漸近安定性を示している。しかし、多大な計算時間を要するため、より大次元の問題に対応するには並列化が欠かせない。そこでこれらの計算の主要部分を並列化し、分散メモリ環境のPC cluster上で全体の計算時間を短縮することに成功した。

### On Stability Analysis for Systems of ODEs and its Parallelization

Tomonori Kouya\* Kojun Ohsugi\*

In this paper, the methods for speedup of asymptotical stability analysis of nonlinear systems of ODEs are discussed. We have already constructed a set of softwares for the stability analysis with extrapolation methods and multiple precision floating-point libraries, and shown that a virtualized cell-cell interface model is asymptotically stable. This numerical process requires very long computational time to finish the analysis, therefore it must be parallelized in order to analyze more large-scale systems of ODEs. We have succeeded to shorten total computational time by parallelizing some primary parts of the analysis on distributed memory PC clusters.

#### 1. 初めに

本稿では、非線型の多次元自励系常微分方程式が平衡点を持ち、その近傍で漸近安定性 (Asymptotical Stability) を持つかどうかを高速かつ高精度に調べる方法について議論する。

細胞内及び細胞間における包括的な蛋白質と mRNA(messenger RNA) との促進・抑制関係を記述した Segment Polarity Network(SPN) モデル [4] や、簡易化・仮想化したモデル [7] は、多次元常微分方程式系として表現されるもので、

- 一定時間 ( $t_c$ ) 経過後には定常状態になる
- 一定数以下の細胞が死滅しても再生し、再度この定常状態に戻る

ことも期待される。所謂“Robust”な常微分方程式とは、これらの性質を満足するようにパラメータを選んで構築されたものである。従って、通常はRobustな系になるよう、常微分方程式を数値計算し、パラメータを風潰しに調べる必要がある。

しかし、常微分方程式の数値計算を行ったところで、それが漸近安定な平衡点を持つかどうかの確証を得ることはできない。近似的な数値計算を積み重ねることで、平衡点の存在とその近傍における漸近安定性を示すことが出来れば、数学的にはあやふやなRobustという概念を用いずに済むことになる。ここでは、打切り誤差と丸め誤差を任意に設定できるようなアルゴリズムとソフトウェアが求められる。

我々は、仮想化モデル [7] に対して、平衡点の導出とその近傍における漸近安定性を示し得ることを

既に述べた [5] が、同時に膨大な時間が必要であることもここでは判明している。本稿ではその原因と、PC cluster を用いた高速化について述べる。

#### 2. 常微分方程式の漸近安定性解析

対象となる  $N$  次元自励系常微分方程式の初期値問題を

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{Y}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{Y}) \\ \mathbf{Y}(t_0) = \mathbf{Y}_0 \end{cases} \quad (1)$$

とする。ここで  $\mathbf{Y}_0, \mathbf{F}(\mathbf{Y}) \in \mathbb{R}^N$  である。また、 $\mathbf{F}(\mathbf{Y})$  は非線型関数である。この常微分方程式の平衡点  $\mathbf{Y}^*$  は、非線型方程式

$$\mathbf{F}(\mathbf{Y}) = 0 \quad (2)$$

の解である。この平衡点の近傍で (1) が漸近安定であるとは、 $\mathbf{Y}^*$  における関数  $\mathbf{F}$  の Jacobi 行列

$$\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{Y}}(\mathbf{Y}^*) = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial Y_1}(\mathbf{Y}^*) & \cdots & \frac{\partial F_1}{\partial Y_N}(\mathbf{Y}^*) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_N}{\partial Y_1}(\mathbf{Y}^*) & \cdots & \frac{\partial F_N}{\partial Y_N}(\mathbf{Y}^*) \end{bmatrix}$$

の全ての固有値の実部が負になること、即ち

$$\Re \left( \lambda_i \left( \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{Y}}(\mathbf{Y}^*) \right) \right) < 0 \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (3)$$

を満足することをいう [2]。

(1) の漸近安定性のみを確認したい場合は、適切な範囲に初期値  $\mathbf{Y}_0$  が存在していれば、(1) の解  $\mathbf{Y}(t)$  について

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{Y}(t) = \mathbf{Y}^*$$

\*静岡理科大学  
\*Shizuoka Institute of Science and Technology

が期待される。即ち、非線型方程式 (2) を直接解いて得た数値解と、常微分方程式 (1) の数値解との比較を行い、両者が極めて近くなっていることを確認して  $\mathbf{Y}^*$  の存在を数値的に推定できることになる。

よって、漸近安定性を数値計算によって確認 (or 推定) するためには次のステップを踏むことになる。

- (a) 適当な時間の閾値  $t_c$  を決め、(1) の数値解  $\mathbf{Y}(t_c)$  を求める。
- (b) 非線型方程式 (2) を解き、数値解  $\mathbf{Y}^*$  を求める。
- (c)  $\|\mathbf{Y}^* - \mathbf{Y}(t_c)\| < \varepsilon \|\mathbf{Y}^*\|$  であることを確認する。
- (d)  $\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{Y}}(\mathbf{Y}^*)$  の全ての固有値の実部が負であることを確認する。まず Gerschgorin の定理に基づくチェックを行い、それで分からなければ固有値を計算する。

これで分かるのは、1つの平衡点  $\mathbf{Y}^*$  が存在して、これは漸近安定点である、ということだけである。平衡点が興味のある範囲内で本当に唯一か、他に平衡点がないのかどうかは分からない。よって、せめて計算結果に対しては、経験的な誤差推定法 [11] に基づいて、打ち切り誤差と丸め誤差を推定できるようにする必要がある。具体的には、打ち切り誤差については補外法を用いて、丸め誤差については多倍長浮動小数点数 [14, 15, 13] を用いて、任意精度計算で実現できる。

しかし、次元数  $N$  が増えると計算時間が膨大なものになるので、(a)~(d) のうち特に計算量の多い所を並列化して計算時間を短縮しなければならない。

### 3. 数値計算の並列化について

漸近安定性解析のための数値計算 (a)~(d) のうち、並列化によって計算時間の短縮を図ることが出来ると期待される部分は (a), (b), (d) である。但し、今回は (d) において固有値そのものの数値計算は不要な仮想化モデルについてのみ計算を行ったため、(a), (b) 及び (d) の Jacobi 行列計算の並列化についてのみ考えることにする。ベンチマークに使用した環境は次の通りである。

#### 使用ハードウェア

cs-pcluster2 Pentium IV 2.8GHz, Vine Linux 2.6, 11 nodes

VTPCC Dual Xeon 3.0GHz, Redhat 8.0, 8 nodes(max 16PEs)

#### 使用ソフトウェア

- GMP 4.1.4, MPFR 2.1.1, BNCpack[13]
- MPICH2 1.0.1(cs-pcluster2), MPICH 1.2.5(VTPCC)
- gcc-3.4.3(cs-pcluster2), gcc-3.2(VTPCC)

表 1: ベンチマーク結果 ( $N = 50$ (上) と  $N = 200$ (下) の場合)

N = 50					
BNCpack					
	double	50桁	100	200	500
1PE	0.82	7.21	10.15	21.78	70.12
5PEs	6.50	5.53	5.97	8.10	16.03

N = 200					
BNCpack					
	double	50桁	100	200	500
1PE	3.28	30.68	39.70	85.98	284.74
10PEs	22.82	24.10	24.90	31.96	59.99

### 3.1 常微分方程式の数値計算

今回対象とする常微分方程式 (1) は漸近安定性が期待されるが故に解析を行うものである。従って、ある時刻  $t_c \in \mathbb{R}$  を超えた  $t > t_c$  においては、解  $\mathbf{Y}(t)$  の挙動は至極おとなしいものとなる。このような安定した問題に対しては、ステップ幅制御を用いた陽的解法を、IEEE754 倍精度で計算すれば十分な精度を得ることが出来る。今回は打ち切り誤差を任意に設定できるよう、補外法に基づいた GBS アルゴリズム [1] を使用する。

大次元になった場合はベクトル単位で各 PE に分割して並列化することも可能であるが、今回対象とする非線型問題では 1 ステップ進むごとに、Allgather を行って  $\mathbf{Y}$  を全ての PE において集結させ、関数  $\mathbf{F}(\mathbf{Y})$  を呼び出す必要があり、ネットワークの遅い分散メモリ環境では並列化の効果はあまり期待できない。実際、比較的低次元の仮想化モデルに対して 4 段 (8 次相当) の GBS アルゴリズムを用いたベンチマークテストを行ってみると、表 1 のようになる。

この程度の次元数では並列計算の効果は全くなく、むしろ計算時間は増大している。逆に多倍長計算では低い次元数でもそれなりに効果があることが分かるが、前述したようにこれ程の精度は必要ない。また、ステップ幅制御機構のあるソルバを使用したにもかかわらず、0.1 程度の初期ステップ幅を与えておけば、殆どの部分でこのステップ幅での計算が実行されることも判明している。

よって、この部分 (a) においては (b) 以降の計算を実施する前に、あらかじめ並列化せずに IEEE754 倍精度で計算しておく方が効率的である。但し、より大次元の場合にも対応でき、後述する Jacobi 行列の並列計算にも利用できるように、並列化した関数  $\mathbf{F}(\mathbf{Y})$  は用意し、少なくとも (b) 以降の計算で使用される Jacobi 行列が常微分方程式の  $\mathbf{F}(\mathbf{Y})$  と同じものを用いて計算されたものである、という証明を行え

るようにすると共に、より高速な Jacobi 行列の評価が可能ないようにしておく。

### 3.2 Jacobi 行列の数値計算

Jacobi 行列の計算は最も精度が要求される部分であるため、精度を任意に設定できる計算法が必要である。従って、ここでも各要素の偏微分  $\partial F_i / \partial Y_j$  の計算には中点公式 (3 点公式) を初期系列とする補外法 [9, 10] を使用し、全て多倍長計算で行うことにする。補外計算は最大 10 段まで行うようにしているため、現在の実装では全ての要素を計算するためには最大  $20N^2$  回の関数  $F(\mathbf{Y})$  呼び出しが必要となる。このため、(a)~(d) のうち大部分の計算時間はこの Jacobi 行列の計算に費やされてしまう。よって、この部分の並列化が出来れば、全体の計算時間の大幅な縮減が期待できる。

今回は、並列分散化した  $F(\mathbf{Y})$  を用い、図 1 のように Jacobi 行列の計算を行単位に分割し、各 PE で並列計算させることにした。

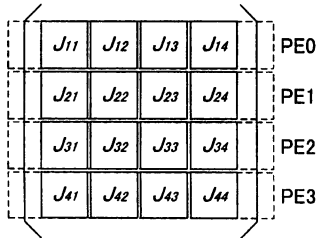


図 1: Jacobi 行列計算の並列化

実際の並列化の効果については後述する。

### 3.3 非線型方程式の数値計算

非線型方程式 (2) の解  $\mathbf{Y}^*$  を求める計算は、Newton 法及びその変種の反復アルゴリズムを用いることで実現できる。平衡点のみを高速に計算するのであれば

- 反復法の初期値に  $\mathbf{Y}(t_c)$  を採用する
- なるべく Jacobi 行列を用いずに済む変種法 (準 Newton 法や Regula-Falsi 法) を使用する
- 反復計算の中に現れる連立一次方程式を Krylov 部分解法のように、並列化が容易なアルゴリズムで計算する [3]

という高速化手法を取るべきである。しかし、「平衡点探索ツール」として本計算を考えると、これとは逆に

- 反復法の初期値に、(1) の初期値  $\mathbf{Y}_0$  を採用し、 $\mathbf{Y}(t_c)$  とはかけ離れた平衡点に収束しないことを確認する

- あえて馬鹿正直に Jacobi 行列を用いた Newton 法を用い、 $\mathbf{Y}(t_c)$  に近い平衡点に収束することをもって、Jacobi 行列の正しさを確認する

というやり方もある。今回はこの後者の考え方を採用し、高速化は並列化した Krylov 部分解法 (GPBiCG 法 [6] を採用) のみで行うことにした。従って、(2) を解くための反復計算回数そのものは少なくなっているものの、Jacobi 行列の評価回数は増えているため、全体の計算時間はかなり増大している。

## 4. 仮想化した細胞間再生モデル

今回は、仮想化した細胞間再生モデル [7] についてのみ、安定性解析を行った。ここではこのモデルの考え方を数値例も含めて説明する。

円環状に連なった  $n$  個の細胞にそれぞれにおいて蛋白質グループ  $x_i(t)$ ,  $y_i(t)$  が存在しているものとする。これらの蛋白質グループの各要素は、他の要素によって生成を促進されたり抑制されたりする。もしある蛋白質  $z(t)$  が、別の複数の蛋白質の働きによって生成が促進される場合、これらを線型結合した  $u(t)$  によって

$$\frac{d}{dt}z(t) = \frac{(u(t))^q}{b_u + (u(t))^q} - a_z z(t) \quad (4)$$

と表現される。逆に、生成が抑制される場合は、抑制効果のある要素の線型結合  $v(t)$  を用いて

$$\frac{d}{dt}z(t) = \frac{1}{b_v + (v(t))^p} - a_z z(t) \quad (5)$$

と表現される。ここで、 $a_z z$  は自壊する量、各パラメータ  $a_z, b_u, b_v \in \mathbb{R}$ ,  $p, q \in \mathbb{N}$  は正定数である。

このような促進・抑制効果をまとめて記述すると (6) 式のようなになる。(1) の次元数でいえば、 $N = 2n^2$  となる。

ここで、 $f_j^{(i)}(t)$ ,  $g_j^{(i)}(t)$ ,  $h_j^{(i)}(t)$  は各蛋白質成分の線型結合で表現される関数である。今回は図 2 ( $n = 5$  の場合) に示されるような促進・抑制関係を使用するので、これらの関数は

$$\begin{aligned} f_j^{(i)}(t) &= x_{j-2}^{(i-1)}(t) + x_{j+2}^{(i-1)}(t) + x_{j-2}^{(i+1)}(t) + x_{j+2}^{(i+1)}(t) \\ g_j^{(i)}(t) &= \sum_{k=1, k \neq j}^n y_k^{(i)}(t) \\ h_j^{(i)}(t) &= y_j^{(i-1)}(t) + y_j^{(i+1)}(t) \end{aligned}$$

となる。但し、1 番目と  $n$  番目の細胞が繋がって円環状になっているため、この添字は

$$\begin{aligned} i-1 < 1 \quad \text{の時は} & \quad (i-1) + n \\ i+1 > n \quad \text{の時は} & \quad (i+1) - n \\ j-2 < 1 \quad \text{の時は} & \quad (j-2) + n \\ j+2 > n \quad \text{の時は} & \quad (j+2) - n \end{aligned}$$

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \vdots \\ \mathbf{x}_i(t) \\ \mathbf{y}_i(t) \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vdots \\ \frac{(h_j^{(i)}(t))^{p_x}}{b_x + (h_j^{(i)}(t))^{p_x}} - a_x x_j^{(i)}(t) \\ \vdots \\ \frac{(y_j^{(i)}(t))^{p_y} + c_f (f_j^{(i)}(t))^{p_f}}{b_y + (y_j^{(i)}(t))^{p_y} + c_f (f_j^{(i)}(t))^{p_f} + c_g (g_j^{(i)}(t))^{p_g} + c_h (h_j^{(i)}(t))^{p_h}} - a_y y_j^{(i)}(t) \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (6)$$

(正定数:  $a_x, a_y, b_x, b_y, c_f, c_g, c_h \in \mathbb{R}, p_x, p_y, p_f, p_g, p_h \in \mathbb{N}$ )

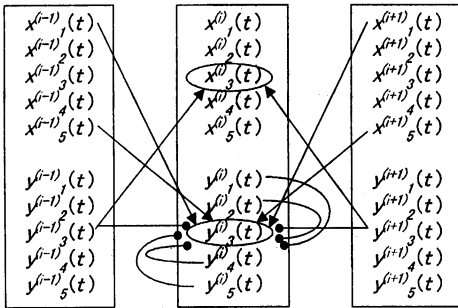


図2:  $n = 5$  の場合の促進・抑制関係図

となる。

このモデルに必要とされる性質は次のようになる。

1. 十分時間が経過した時点 ( $t > t_c$ ) において

$$\frac{y_i^{(i)}(t)}{y_j^{(i)}(t)} \geq 10 \quad (j \neq i)$$

となる。

2.  $t_d > t_c$  において、一定数以下の細胞が死滅 ( $\mathbf{x}_i(t_d) = 0, \mathbf{y}_i(t_d) = 0$ ) しても再生する (上記の条件を満足する)。

特に2の性質は重要であり、これが「細胞間再生モデル」という名前の由来となっている。一部の細胞が死滅すると、その部分は何の細胞にもなりうるオールマイティな幹細胞に入れ替わる。一定時間経

つこの幹細胞が元の細胞の性質を持つようになる。数学的には  $i$  番目の細胞ならば、蛋白質  $y_i^{(i)}(t)$  がその他の  $y_i(t)$  の成分に比べて10倍以上優越するようになることを意味する。

今回もパラメータとしては大相ら [7] が使用した

$$\begin{aligned} b_x &= 1000, a_x = 10, p_x = 3 \\ b_y &= 10^{-9}, a_y = 10^{-1}, p_y = 1 \\ c_f &= 10^{-1}, p_f = 3, c_g = 1, p_g = 3 \\ c_h &= 10^{-9}, p_h = 2 \end{aligned}$$

を用いる。安定化の後には、細胞の死滅があっても再生してこの値に戻ることを考えると、これが平衡点で、その周囲ではかなり強い漸近安定性を持つと考えられる。

## 5. 仮想化した細胞間再生モデルを用いた数値実験

$N = 50, 200 (n = 5, 10)$  次元までの、図2のような促進・抑制関係を持つ仮想化モデルの漸近安定性は既に確認済みである [5] が、今回並列化を行うことによって、 $N = 800, 1800 (n = 20, 30)$  次元の漸近安定性を確認することが出来た。なお、(b)~(d)までの全ての計算は10進50桁相当(2進167bits)の多倍長計算で行っている。

### 5.1 漸近安定性の確認

前述した仮想化モデルの促進・抑制関係を用いた場合は、今回調査した200, 800, 1800次元全てにおいて、平衡点におけるJacobi行列は対角優位非対称行列となり、対角成分は-10もしくは-0.0990のどちらである。例として  $N = 8 (n = 2)$  の時のJacobi行列と平衡点を図3に示す。

$$\frac{\partial F}{\partial Y}(Y^*) = \begin{bmatrix} -1.0e+1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -4.1e-47 & 0 \\ 0 & -1.0e+1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3.0e-2 \\ 0 & 0 & -1.0e-1 & 5.2e-38 & 1.5e-12 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -6.4e-39 & -9.9e-2 & 0 & -2.9e-49 & 0 & -1.7e-48 \\ 0 & 0 & 3.0e-2 & 0 & -1.0e+1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -4.1e-47 & 0 & -1.0e+1 & 0 & 0 \\ -2.9e-49 & 0 & -1.7e-48 & 0 & 0 & 0 & -9.9e-2 & -6.4e-39 \\ 0 & 1.5e-12 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5.2e-38 & -1.0e-1 \end{bmatrix}$$

ここで  $Y^* = \begin{bmatrix} -4.85294803825705009448219411407783514907e-48 \\ 8.8888888859272571565517338593902275969e-2 \\ 9.9999999900044929050272711437470141813 \\ 2.11720493992969174634832967759936526331e-35 \\ 8.8888888859272571565517338593902275969e-2 \\ -4.85294803825705009448219411407783514907e-48 \\ 2.11720493992969174634832967759936526331e-35 \\ 9.9999999900044929050272711437470141813 \end{bmatrix}$

図 3:  $N = 8(n = 2)$  の Jacobi 行列と平衡点  $Y^*$

図 3 の平衡点は Newton 法で 4 回反復した後に得られたものであるが、他の次元数においては 6 回の反復で収束することが確認できた。また、これらの平衡点のユークリッドノルム値  $\|Y^*\|_2$  と、 $t = 100$  における常微分方程式の数値解のノルム値  $\|Y(100)\|_2$  はかなり近いものであることが確認できた (表 2)。

表 2:  $Y^*$  と  $Y(100)$ (上), Gerschgorin disc(中, 下)

$N$	$\ Y^*\ _2$	$\ Y(100)\ _2$
200	3.16236e+1	3.16242e+1
800	4.47224e+1	4.47230e+1
1800	5.47736e+1	5.47732e+1
$N$	max radius for $-10$	
200	$ \lambda - (-1.00e+1)  \leq 1.50e-1$	
800	$ \lambda - (-1.00e+1)  \leq 1.50e-1$	
1800	$ \lambda - (-1.00e+1)  \leq 1.50e-1$	
$N$	max radius for $-0.0990$	
200	$ \lambda - (-9.90e-2)  \leq 1.23e-5$	
800	$ \lambda - (-9.90e-2)  \leq 1.26e-5$	
1800	$ \lambda - (-9.90e-2)  \leq 1.29e-5$	

更に、各対角成分ごとに Gerschgorin disc の半径を計算してみると、最大でも 0.15 もしくは  $1.23 \times 10^{-5}$  ~  $1.29 \times 10^{-5}$  であり、固有値を計算するまでもなく、その実数部は負になることが判明した。

## 5.2 並列化による計算時間の縮減効果

10PEs の並列計算を行った (b)~(d) の総計算時間は、 $N = 200, 800, 1800(n = 10, 20, 30)$  の場合で、VT-PCC 及び cs-pcluster2 どちらも、それぞれ約 3 分、

209 分、2448 分程度であった。後述する結果から判断すると、これらを 1PE で行った場合は約 100 倍の時間を要することになる。

計算時間の内訳を、 $N = 200(n = 10)$  の場合に限って、詳細に見ることにする。

表 3: Jacobi 行列の計算時間と並列化の効率

# of PEs	VT-PCC		cs-pcluster2	
	Sec.	Ratio	Sec.	Ratio
1	2270.9	1.0	2361.4	1.0
2	567.1	4.0	583.6	4.0
5	91.3	24.9	93.4	25.3
10	22.8	99.8	23.8	99.2

まず、Jacobi 行列の系列化の効果を表 3 に示す。ほぼ PE 数の 2 乗で計算効率が上がっていることから、並列分散化した  $F(Y)$  の計算時間の低減率と、各 PE が計算する要素数の低減率が着実に効いていることが分かる。逆に言えば、現状の実装には問題が多いということになる。

では、反復 1 回毎に Jacobi 行列の評価を行う Newton 法の計算時間と、それに Jacobi 行列の評価時間がどの程度占めているのか。その結果を表 4 に示す。10PEs の場合は若干下がっているが、概ね 80% 以上を占めていることが分かる。従って、Jacobi 行列計算そのものを減らすか、その計算時間を減らすことで、全体の計算時間を縮減することが出来ることになる。

最後に、表 5 に全体の計算時間を示す。Newton 法の計算時間に、 $\frac{\partial F}{\partial Y}(Y^*)$  の評価時間を加えたものが全

表 4: Newton 法の反復 1 回あたりの計算時間と Jacobi 行列計算時間の占める割合

# of PEs	VTPCC		cs-pcluster2	
	Sec.	%	Sec.	%
1	2710.0	83.8	2761.8	85.5
2	673.3	84.2	692.0	84.3
5	109.2	83.6	111.8	83.6
10	29.7	76.7	29.8	79.9

表 5: (b)~(d) 全体の計算時間 (単位:秒)

# of PEs	VTPCC	cs-pcluster2
1	18531.2	18932.4
2	4606.8	4736.1
5	746.7	765.0
10	200.9	202.6

体の計算時間になっていることが分かる。

全体を通じて見ると、VTPCC と cs-pcluster2 の計算時間は殆ど差がない。前者は後者に比べて各 PE 間のデータ転送速度が 2 倍以上速いことが分かっている [12] が、それは殆ど影響せず、CPU の性能差程度の違いしかない。Jacobi 行列の並列分散計算ではデータ転送が殆ど発生しないためであろう。

## 6. 結論と今後の課題

漸近安定性解析を行うために必要な数値計算の主要部分、特に Jacobi 行列の並列計算によって大幅な計算時間の縮減を達成することが出来、1800 次元の非線型常微分方程式の漸近安定性を確認することが可能となった。

しかし、現時点の並列化はまだ改善の余地がある。特に

- Jacobi 行列の要素毎に繰り返し  $F(\mathbf{Y})$  を呼び出している
- Jacobi 行列の sparsity を考慮していない

という部分が残っており、ここを改善することで (b)~(d) 全体の計算時間を減らすことが可能となる。今後の課題としては、さらに Jacobi 行列の計算効率化を図ることで、より大規模な常微分方程式の漸近安定性を示すことが挙げられる。

## 謝辞

cs-pcluster2 は静岡理科大学学内研究費の補助によって構築された。VTPCC は名古屋大学情報科学研究科三井斌友研究室所有のものを使用させて頂いた。関係者各位に感謝する。

## 参考文献

- [1] E.Hairer, S.P.Nørsett, G.Wanner, Solving Ordinary Differential Equations I (2nd ed.), Springer-Verlag, 1993.

- [2] M.W.Hirsch, S.Smale, 力学系入門, 岩波書店, 1976.
- [3] C.T.Kelley, Solving Nonlinear Equations with Newton's Method, SIAM, 2003.
- [4] G. von Dassow et al., "The segment polarity network is robust developmental module", Nature Vol.406, pp.188-192, 2000.
- [5] 幸谷智紀・大相弘順, 仮想化した細胞間モデルの安定性解析, HOKKE2005, 2005.
- [6] 幸谷智紀, Windows を用いた PC cluster 上における並列多倍長数値計算ライブラリ MPIBNCpack の性能評価, HPCS2005 ポスターセッション, 2005.
- [7] 大相弘順・他, 単純化した相互作用ルールによる擬似細胞のパターン形成と再生, 静岡理科大学紀要 Vol.11, 2003.
- [8] 幸谷智紀・大相弘順, Segment Polarity Network Model に基づく細胞間再生モデル, 研究集会「常微分方程式とその周辺」, 2005.
- [9] 永坂秀子・福井義成, "数値微分の誤差", 情報処理学会論文誌, vol.22, No.5, pp.411-416.
- [10] 福井義成, "数値微分の補外法の収束判定について", 数値解析研究会報告 Vol.44, No.4, pp.21-28.
- [11] 幸谷智紀, 数値計算における誤差について-数値微分を例に-, [http://na-inet.jp/na/na\\_error\\_diff.pdf](http://na-inet.jp/na/na_error_diff.pdf)
- [12] 幸谷智紀, PC cluster の性能評価 -メモリ及びネットワーク帯域計測編-, <http://na-inet.jp/na/netpipebench.pdf>
- [13] BNCpack, <http://na-inet.jp/na/bnc/>
- [14] GMP, <http://swox.com/gmp/>
- [15] MPFR, <http://www.mpfr.org/>