氏　名	小碇　創司

（論文内容の要旨）

複素正則関数は、複素数 z のべき級数として定義されるが、級数の引数 z を正方行列 A に置き換えると、行列を引数とし、行列を値とする関数に拡張される。本論文では、正則関数である合流型超幾何関数 ${}_1F_1(\alpha, \gamma; z)$ のうち、α が 1 で γ が自然数の場合について、z を行列に拡張したものの数値計算法を研究している。実際の計算では、この関数を γ の階乗で割った、φ 関数と呼ばれる行列関数が用いられるので、論文では一貫して φ 関数について議論している。

第１節では、φ 関数が必要となる背景を述べ、本研究の動機を説明している。Navier-Stokes 方程式のような移流・拡散方程式を数値的に解く場合、まず空間に関して離散化を行い、時間に関する常微分方程式 $y' = Ly + f(t, y)$ を得る。ここで y は系の状態を表すベクトルで、行列 L はたとえばラプラシアンの表現行列であり、関数 f は移流項等に対応する非線形項である。このような方程式の時間積分では、しばしば線形項に起因する著しい不安定性が見られるので、それを除去するためのさまざまな工夫が提案されてきており、その一つに、ETD 法と呼ばれる、線形項を厳密に取り扱う方式がある。この厳密に取り扱う方式では、表現行列 L が時間に依存しないと仮定した上で、常微分方程式を定数変化法で等価な積分方程式

$$y(t_n + h) = \mathrm{e}^{Lh} y(t_n) + \int_0^h \mathrm{e}^{L(h-\tau)} f(t_n + \tau, y(t_n + \tau))\, \mathrm{d}\tau$$

に変換する。そして被積分関数に含まれる関数 f を変数 τ の多項式で近似した上で、積分を厳密に計算することで時間積分公式を導出する。従って導かれた公式では、行列指数関数および行列指数関数に τ のべきをかけたものの積分、すなわち φ 関数

$$\varphi_j(Lh) = \frac{1}{(j-1)!\, h^j} \int_0^h \mathrm{e}^{L(h-\tau)} \tau^{j-1}\, \mathrm{d}\tau = \frac{1}{j!}\, {}_1F_1(1, j+1; Lh)$$

が必要となる。このような ETD 法からの要請に応えるために、φ 関数の数値計算法を研究している。提案の計算法は、本論文の第２節と第３節に記述されている。

第２節では、行列指数関数の計算に用いるスケーリング＆スクエアリング法を φ 関数に拡張し、その誤差解析を行っている。スケーリング＆スクエアリング法とは、(1) 行列 A を 2 の s 乗で割り、(2) 割った行列の指数関数を有理関数近似し、(3) その近似を s 回自乗して A の指数関数を得る、という計算法である。自然数 s を適切に選ぶことで、有理関数近似の精度を確保している。この方法は指数法則を利用しているが、同様の性質が φ 関数の組に対して成立する。すなわち $A/2$ で評価された φ 関数の組から A における φ 関数の組を得る漸化式があり、これを利用すると、上記の方法を φ 関数に拡張することができる。φ 関数の有理関数近似として何を用いるべきか、そしてその精度を確保するには s をどう選べばよいか、について詳細に検討している。この方法では、引数を倍にする自乗演算を繰り返すので、自乗演算の安定性に注目して誤差解析を行っている。その結果、漸化式の数学的安定性は、行列 A の対数ノルムの φ 関数を、行列の φ 関数のノルムで割ったもので表されること、A が正規であって複素平面上で一番右の固有値が実数ならば、漸化式は安定であることがわかった。また、一回の自乗演算で発生する φ 関数の丸め誤差は、指数関数のそれより常に小さいということも示された。

スケーリング＆スクエアリング法の欠点は、行列のサイズやノルムが大きいとき、丸め誤差で精度が落ちることである。これを補うため、第３節では Schur-Parlett 法を検討して

氏　名	小碇　創司

いる。この方法の適用範囲は上三角行列に限られるが、任意の正方行列は、ユニタリ行列が定める相似変換で上三角行列 T に変換されるため、一般性は失われない。Schur-Parlett 法では、まず行列 T をブロック分割し、対角ブロックの関数値を他の方法で計算した後に、関数値の対角ブロックと非対角ブロックを関連づける漸化式を解いて、非対角ブロックを得る。この方法における最大の難問は、ブロック分割の決定法である。従来は、T の異なる対角ブロックが、近接した固有値をもたない、という条件のみを用いていたが、本研究では、漸化式の安定性が、固有値のみからはわからないことから、対角摂動増幅率に基づいて分割を決めることを提案している。対角摂動増幅率とは、関数値の対角ブロックに入った摂動が、漸化式によって何倍に増幅されるかを表す量であり、提案では、増幅率が指定値以上となる分割を禁止している。対角摂動増幅率は、セップインバース関数という量で表されるが、従来この関数が漸化式の安定性と本当に関連があるのかどうか疑問視されていた。何故なら、行列 T に対角行列が定める相似変換を施すと、対角ブロック間のセップインバース値は変わるが、漸化式自体は変わらないからである。本研究では、この考え方が、一つのベクトル空間にノルムを２つ入れたことによる誤りであり、セップインバース関数を使うのが妥当であることを示している。提案のブロック分割法を用いた数値実験では、対角摂動の増大が回避され、アルゴリズムの信頼性が向上しているのが確認された。また、ブロック分割の適切な導入により、スケーリング＆スクエアリング法の欠点が解消することもわかった。

　提案した上記２種類の計算法を実装したソフトウェアが、ＡＣＭ（アメリカ計算機学会）に登録され、来年度中に公開される予定である。様々な利用の仕方に対応する為、(1) 実数と複素数、(2) ４種類の精度が異なる浮動小数点数、(3)対角・上三角・正方行列、の組み合わせのそれぞれを処理する関数が提供される。また、メモリアクセスを局所化するためのブロックアルゴリズムを採用することで、広く用いられている他のライブラリと同等の実行効率が実現されている。

氏　名	小碇　創司

（論文審査の結果の要旨）

本論文は、φ 関数と呼ばれる行列関数のあるクラスの数値計算法を研究した成果についてまとめたものである。φ 関数は、常微分方程式の時間積分において用いられるもので、行列の指数関数、対数関数、sign 関数などとならんで、実用上重要な関数である。得られた主な成果は以下の通りである。

[１]行列指数関数を計算するためのスケーリング＆スクエアリング法を、その性能を損ねることなく、φ 関数に拡張した。そして、得られたアルゴリズムにおいて、φ 関数を自乗する際に発生する丸め誤差が、指数関数を自乗する際に発生する丸め誤差よりも、常に小さくなることを証明した。

[２]スクエアリング、すなわち$\{\varphi_j(A/2^s)\}$から$\{\varphi_j(A)\}$を計算するアルゴリズムについて、その相対条件数の上界を導出した。相対条件数とは、入力に入った相対的摂動が、出力において何倍の相対誤差となって現れるかを表す量であり、アルゴリズムの安定性を知る上で基本的に重要なものである。

[３]行列関数を計算するための Schur-Parlett 法を再検討し、新しい提案を幾つか行った。この方法では行列のブロック分割を行うが、従来の分割方式において暗黙の内に課されていた制約を外し、重なりをもった対角ブロックを導入した。これによってブロック分割の可能性を広げ、更にブロック対角化と等価ではない、異なるアルゴリズムとしての存在理由を確立した。

[４]また、従来の Schur-Parlett 法では、固有値のみに基づいてブロック分割を決定していたが、本研究では、対角摂動の増幅率に基づいて、再帰的にブロック分割を決めることを提案した。これによって、漸化式の不安定性が回避され、アルゴリズムの信頼性が大きく向上することを確認した。

以上の成果、特に[３]と[４]は、一般的な行列関数の数値計算に際して有益なものであり、学術上、実際上寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士（工学）の学位論文として価値あるものと認める。また、平成 21 年 1 月 27 日、論文内容とそれに関連した口頭試問を行った結果、合格と認めた。