

(続紙 1)

京都大学	博士（情報学）	氏名	山下 巧
論文題目	Studies on Methods for Computing Lower Bounds of the Minimal Singular Value of an Upper Bidiagonal Matrix and Their Applications		
(論文内容の要旨)			
本論文は、上二重対角行列の最小特異値の新しい下界及びその計算法を見だし、さらに、この下界公式を用いて原点シフト付き特異値計算アルゴリズムにおける新しいシフト戦略を提案したものである。 行列の最小特異値の下界は、計算量子化学における基底状態の推定や行列の条件数の上界の見積りのため等に研究がなされてきた。とりわけ、上二重対角行列の最小特異値の下界の2乗を原点シフト量としてシフト付き特異値計算アルゴリズムで採用することで、数値安定性を保ったまま、反復計算の収束が実用に耐える程度まで加速される。このため、より少ない計算コストでよりシャープな下界が求められている。 申請者は、本論文において、上二重対角行列の最小特異値の新しい下界及びその計算法を提案するとともに、その計算コストについても論じている。さらに、ある種のシフト付き特異値計算アルゴリズムに用いて従来法との性能比較を行っている。 第1章は序章として、研究の背景、目的、論文の構成を述べている。 第2章では、新しい下界として、対称三重対角行列のべき乗の逆行列のトレースによって定義されるM次一般化ニュートン下界を導入するとともに、その性質を述べている。ここに、Mは正の整数。 第3章では、O(M)の計算コストでM次一般化ニュートン下界を求めるための手法として、ある種の対称三重対角行列のべき乗の逆行列の対角成分を計算するための漸化式を導出している。この漸化式には一般に式中に減算が含まれている。 第4章では、第3章で与えられた漸化式と等価で減算を含まない漸化式を与えている。漸化式が正の値の間の加算、乗算及び除算のみで構成されることにより、数値計算における桁落ちの可能性が排除されている。この漸化式の導出は付録A、B及びCで詳述されている。 第5章ではM次一般化ニュートン下界を計算するための第3章及び第4章の漸化式による計算コストについて述べている。また、第4章の漸化式に対し、演算回数を減らす式変形を行い、さらに、2次及び3次の場合について、一般化ニュートン下界を計算するため効率的な実装方法について論じている。 第6章では、上二重対角行列のシフト付き特異値計算アルゴリズムであるdqds法（differential quotient difference algorithm with shifts）に対して、2次一般化ニュートン下界と他の複数の下界を用いたハイブリッド型の新しいシフト戦略を提案している。このシフト戦略では第4章に与えた漸化式及び第5章での実装の工夫が活用されている。さらに、このシフト戦略を米国の線形数値計算パッケージライブラリLAPACK3.4.0において公開されているdqds法のシフト戦略と比較して、大規模行列に対する提案手法の優位性を示している。 第7章は結論として、本論文で得られた結果の要約とともに、上二重対角行列以外の行列の最小特異値の下界の計算への応用に対する展望について述べている。			

(続紙 2)

(論文審査の結果の要旨)

本論文は、上二重対角行列の最小特異値の新しい下界及びその計算法を見だし、さらに、これに基づいて原点シフト付き特異値計算アルゴリズムにおける新しいシフト戦略を提案したものである。

本研究は、全ての対角要素および上副対角要素が正であるような上二重対角行列を対象としているが、任意の行列の特異値計算は前処理により本質的にこの形の行列の特異値計算に帰着する。この上二重対角行列の最小特異値に対し、本論文では、ある種の対称三重対角行列の M 乗の逆行列のトレースとして M 次一般化ニュートン下界が導入されている。さらに、 M 次一般化ニュートン下界は次数 M の値が大きいほど最小特異値に近く、よりシャープな下界となり、次数無限大の極限で最小特異値に収束することが示されている。

M 次一般化ニュートン下界を計算するのに必要な対称三重対角行列のべき乗の逆行列のトレースについては、1次と2次の場合は先行研究が存在する。申請者は、一般の M に対してこのトレースを計算する公式を漸化式の形で与えた。漸化式は2通りの形で与えられているが、このうちの1つは、 $O(M)$ の計算コストで一般化ニュートン下界を与える公式である。シャープな下界が少ないコストで計算される。もう1つはより複雑であるが、正の値の間の加算、乗算、除算のみで構成され、減算の後の除算による桁落ちの可能性がないものとなっている。また、2次の場合の先行研究と異なり、2通りの漸化式のいずれも相対的に計算時間がかかる平方根の計算を必要としない点も優れている。

さらに、申請者は、導入された一般化ニュートン下界をおよび漸化式の応用として、シフト付き特異値計算アルゴリズムであるdqds法に対して、2次一般化ニュートン下界を他の複数の下界と組み合わせたシフト戦略を提案している。このシフト戦略では、2次一般化ニュートン下界計算の実装において、計算時間を短縮するための変数の取り方の工夫がなされている。標準パッケージライブラリLAPACK3.4.0との比較数値実験において、アグレッシブシフトと呼ばれる従来法を実装した最新のDLASQコードとの比較に対して、全てのテストケースで反復回数がDLASQより少なくなるなど一定の高性能化が検証されている。

本学位申請に係る研究は、対称三重対角行列のべき乗の逆行列のトレースを通じた上二重対角行列の最小特異値の下界とその計算法について理論的に貢献すると同時に、応用においてもシフト付き特異値計算アルゴリズムの実装コードの性能向上に寄与するものである。また、より一般の行列の特異値の下界に関する理論とそのシフト付き特異値計算アルゴリズムへの応用に対して今後の更なる発展が期待される。

このように本論文は、理論上の新しい知見を含むだけでなく、特異値計算法の発展に貢献する研究として高く評価されるものである。

よって、本論文は博士(情報学)の学位論文として価値あるものと認める。

また、平成24年8月8日に実施した論文内容とそれに関連した試問の結果合格と認めた。