

A study on efficient eigenvalue computation using a contour integral based solver

著者	二村 保徳
その他のタイトル	周回積分に基づく解法を用いた効率的な固有値計算の研究
学位授与大学	筑波大学 (University of Tsukuba)
学位授与年度	2013
報告番号	12102甲第6865号
URL	http://hdl.handle.net/2241/00122398

氏名(本籍)	二村 保徳 (愛知県)		
学位の種類	博士 (工学)		
学位記番号	博 甲 第 6865 号		
学位授与年月日	平成26年 3月25日		
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当		
審査研究科	システム情報工学研究科		
学位論文題目	A study on efficient eigenvalue computation using a contour integral based solver (周回積分に基づく解法を用いた効率的な固有値計算の研究)		
主査	筑波大学 教授	博士(工学)	櫻井鉄也
副査	筑波大学 教授	理学博士	矢花一浩
副査	筑波大学 教授	理学博士	佐藤三久
副査	筑波大学 教授	博士(理学)	高橋大介
副査	筑波大学 准教授	博士(工学)	山際伸一

論 文 の 要 旨

行列の固有値問題はさまざまな科学技術計算で現れ、それらの計算のボトルネックとなっている。大規模疎行列の一般化固有値問題に対する解法として Sakurai-Sugiura 法がある。この解法は同じく大規模疎行列固有値解法である Arnoldi 法や Jacobi-Davidson 法などの基底の逐次直交化に基づく解法と異なり、独立に計算できる値の数値積分による基底の生成を行うため、大規模並列計算に適している。しかしながら、Sakurai-Sugiura 法はアルゴリズムの中で複数の線形方程式を解く必要があり、この計算が大部分を占めるため、実用のためには問題に応じた適切な解法を与える必要がある。さらに同法では複数のパラメータの設定が必要であり、それらが精度や計算量に大きく影響する。このような背景から、本論文では Sakurai-Sugiura 法で現れる線形方程式の特殊な形を生かした効率的な解法と、Sakurai-Sugiura 法の効率的なパラメータ設定手法を提案している。本論文の内容は次の4つの項目に分かれている：「1. Sakurai-Sugiura 法の効率的なパラメータ設定と実装」「2. 固有値分布の確率的推定法」「3. Block bilinear form の Block 双共役勾配法に基づく近似法の提案」「4. 複数シフト・複数右辺ベクトルをもつ線形方程式の共役勾配法に基づく解法の提案」。

第1の項目では Sakurai-Sugiura 法における数値周回積分を、入力ベクトルを固有ベクトル成分に対するフィルタとして解釈し、周回積分の領域外部の固有値に対応する固有ベクトル成分の減衰率について解析している。この結果から周回積分を行う閉曲線内部の固有値数に関わるパラメータが絞りこまれ、パラメータ設定が容易になる。また、フィルタの解析から閉曲線周辺の固有値分布を知る必要があるということが確認されている。それを受けて第2の項目では固有値分布の確率的推定法を提案している。第2の項目での提案法は行列トレースの周回積分から固有値数が得られるという性質に着目し、さらに行列トレースの計算に必要な逆行列計算に行列トレースの確率的推定法を応用することで実現される。結果的に提案法は Sakurai-Sugiura 法と同じ形の複数の線形方程式の求解に帰着され、この求解が計算時間の大部分を占めることになる。

Sakurai-Sugiura 法で固有値のみを求める場合や、固有値分布の確率的推定法では、複数の線形方程式を解く必要があるが、これらは特殊な形をしており、Block bilinear form を計算するという問題に置き換えられる。第3の項目ではこの Block bilinear form の近似法について述べている。本項目で提案している近似法は Block 双共役勾配法の基づいており、線形方程式の右辺ベクトルの本数が1の場合に対してすでに提案されている双共役勾配法に基づく近似法の一般化となっている。提案法の近似値は Block 双共役勾配法の近似解から作る Block bilinear form と数学的に等価であるが、数値的にはその結果が異なることが示されている。

固有値問題が標準固有値問題で行列がエルミートの場合、Sakurai-Sugiura 法や固有値分布の確率的推定法で現れる線形方程式は複数シフト・複数右辺ベクトルの線形方程式とみることができる。第4の項目ではこれらを効率的に解く解法を提案している。本提案法は複数シフトまたは複数右辺ベクトルのどちらか片方の場合に対して効率的な2つの既存解法のメリットを組み合わせた解法となっている。また、本項目での提案法に第3項目のアプローチを適用し、複数シフトの Block bilinear form の計算手法も提案している。また、本論文で提案した解法や手法の性能を数値実験によって評価し、その有効性を確かめている。

審 査 の 要 旨

【批評】

本論文では、大規模疎行列の一般化固有値問題に対する解法である Sakurai-Sugiura 法において、その高性能化が必要となる各種のパラメータ設定のために固有空間のフィルタ理論を構築し、それに基づいたパラメータ設定指針を与えている。また、方法での計算時間の主要部である線形方程式について、方法中で現れる特殊な形を利用した計算手法の導出方法や、高速化や安定化の方法についても提案している。提案手法は従来手法と比べて計算時間や記憶容量の点で大きな改善が見られ、並列化を想定した大規模固有値問題の解法の開発において、理論面、実装技術面の両面で貢献している。物理や工学分野で現れる実問題に適用し、実用性の実証が望まれる。

【最終試験の結果】

平成26年1月29日、システム情報工学研究科において、学位論文審査委員の全員出席のもと、著者に論文について説明を求め、関連事項につき質疑応答を行った。その結果、学位論文審査委員全員によって、合格と判定された。

【結論】

上記の学位論文審査ならびに最終試験の結果に基づき、著者は博士（工学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。