論文の内容の要旨

論文題目　　行列の特異値および固有値の数値計算アルゴリズムの基礎研究

氏名　相　島　　健　助

現在，理工学の様々な分野において，行列に関する数値計算は広く応用されている．本論文では，行列の特異値および固有値の数値計算法に対する理論解析を行っている．

前半では，特異値計算を扱っている．応用上，全特異値を必要とする場合もあれば，最大特異値のみ必要とする場合，あるいは大きい方からいくつかの特異値を必要とする場合もあり，目的に応じて用いるアルゴリズムは異なってくる．本論文では，すべての特異値を数値計算するアルゴリズムについて考える，この場合，最初に与えられた行列を直交同値変換により上 2 重対角行列に変換し，この上 2 重対角行列に対してある種の反復計算を行うことで特異値を求めるのが標準的である．上 2 重対角行列の特異値計算アルゴリズムとしては，従来 QR 法に基づくものが定番であったが, 1994 年に Fernando-Parlett により提案された dqds (differential quotient difference with shifts) 法が近年注目されている．この dqds 法は，数値安定性に優れており，シフトというものを適切に設定することで高速な特異値計算が可能であることから，線形計算用ライブラリ LAPACK において DLASQ として実装されており，また特異値分解および固有値分解のための MRRR (Multiple Relatively Robust Representations) 法と呼ばれる一連の手法の中に組み込まれており，よく用いられるアルゴリズムである．

dqds 法の理論的側面について，最近，著者らは初等的かつ直接的な収束証明を与え，これにより漸近的な収束速度を明らかにすることが可能となった．収束速度はシフトに依存するが，著者らは Johnson シフトを用いる場合の漸近収束速度が 1.5 次であることを示し，その後，山本らはこの方針に基づき，いくつかのシフト戦略に対して漸近収束次数を明らかにしている．例えば，Ostrowski シフトで 1.5 次，Brauer シフトで超 1.5 次の収束速度を実現することが示されている．また，木村らにより一般化 Newton シフトが提案され，これを用いることでより高次の収束速度が達成されることも報告されている．本論文の dqds 法に対する成果も，こういった収束速度に関する一連の研究に属するものである．

まず超 2 次収束が達成されるシフト戦略を新たに提案する．従来のシフト戦略の構成法としては, 反復過程において現れる上 2 重対角行列の最小特異値のシャープな下界を見積もることを目指してきたが，本論文では dqds 法の収束定理を基にアルゴリズムから直接的に超 2 次収束シフトを導出している点に特色がある．

次に，Rutishauser シフト により dqds 法が 3 次収束することの厳密な証明を与える．もともとこのシフトは，Rutishauser が，反復の終盤のある 1 反復で 3 次収束を実現するために提案したものであって，漸近的な意味での 3 次収束性を実現するシフト戦略は与えられていなか

った．そこで本論文では，Rutishauser シフトを基に漸近的に 3 次収束する具体的なシフト戦略を構成し，その 3 次収束性の厳密な証明を与えた．そしてさらに詳細な収束性解析を行い，Rutishauser シフトが設定可能な条件は，反復過程において一旦満たされれば，その後の反復でも常に満たされることを示している．これは切り替えが必要なシフトの中で，Rutishuaser シフトに対してのみ成り立つ特徴的な性質である．

さらに，実際に LAPACK に実装されている DLASQ ルーチンの収束速度が超 2 次であることを示している．DLASQ では，高速化のため様々なシフトが併用されており，そのアルゴリズムは非常に複雑なものとなっているが，収束定理を基にした解析により，比較的単純な議論で収束速度を導出している．

本論文の後半では，対称行列の固有値計算を扱っている．対称行列のすべての固有値を計算する場合，特異値計算と同様，計算量の観点から前処理的に行列を対称 3 重対角行列に変換し，この対称 3 重対角行列に対してある種の反復計算を行うことで固有値を求めるのが標準的である．対称 3 重対角行列の固有値計算アルゴリズムとしては，QR 法がよく知られており，収束加速のために，通常，Wilkinson シフトが用いられ，この場合大域的収束性と 2 次以上の収束速度が理論保証されている．近年，行列の大規模化に伴い並列計算に適したアルゴリズムが必要とされているが，通常の Wilkinson シフト付 QR 法を並列化することは困難である．これに対し 1989 年，Bai-Demmel は，QR 法にシフトを複数導入することで並列計算に適した QR 法を提案した．これはマルチシフト QR 法と呼ばれるもので，後に Braman，Byers，Mathias により優れた実装が与えられ，現在 LAPACK に DHSEQR ルーチンとして組み込まれている．

本論文では，まず通常のシングルシフトの QR 法について考え，Wilkinson シフト付き QR 法の収束性解析を行っている．Wilkinson シフト付き QR 法の収束性解析については，1968 年に Wilkinson が収束証明を与えた後も，継続的に大域的収束の別証明や収束速度の評価が行われており，収束速度は行列に依存して 2 次の場合，3 次の場合に分類されることが知られている．本論文では，現状では 2 次収束までしか理論保証されていない行列に 3 次収束するものが含まれていることを実験的考察により指摘し，これをもとに 2 次となる場合，3 次となる場合を完全な形で分類する定理を与えている．

最後に，シフトを複数導入したマルチシフト QR 法に対して Wilkinson シフトを拡張したシフト戦略を提案し，この Wilkinson 型マルチシフト QR 法の大域的収束性を示している．通常，反復過程において現れる対称 3 重対角行列の右下の副対角成分の収束を加速することを目的にシフト戦略は構成されるものであるが，従来のシフト戦略では，収束証明はあるものの右下とは異なる副対角成分が収束するような不自然な収束振舞をする場合があったのに対し，本論文で提案する Wilkinson 型マルチシフト QR 法においては，右下の副対角成分の収束を証明しており，自然な収束定理を与えている．