

論文審査の結果の要旨および担当者

報告番号	※ 甲 第 12799 号
------	---------------

氏 名 李 東 珍

論 文 題 目

A numerical algorithm for the k-th eigenvalue problem of large matrices and its applications
(大規模行列のk番目の固有値問題に対する数値アルゴリズムとその応用)

論文審査担当者

主査	名古屋大学	教授	張 紹良
委員	名古屋大学	教授	古橋 武
委員	名古屋大学	教授	片桐 孝洋
委員	鳥取大学	准教授	星 健夫
委員	名古屋大学	准教授	曾我部 知広

論文審査の結果の要旨

李東珍君提出の論文「A numerical algorithm for the k -th eigenvalue problem of large matrices and its applications (大規模行列の k 番目の固有値問題に対する数値アルゴリズムとその応用)」は、科学技術計算に頻繁に現れる大規模固有値問題を解くことによって応用諸分野に役立てることを目的とし、エルミート定値一般化固有値問題における特殊なニーズに対する数値アルゴリズムの開発及び物質電子構造計算への応用の研究成果をまとめたものである。各章の概要は以下の通りである。

第1章「Introduction」では、エルミート定値一般化固有値問題の数値解法を説明し、既存解法の計算目標にあてはまらない k 番目の固有対に焦点をあて、それに向けた数値アルゴリズムの提案を本論文の主目的とした上で、提案アルゴリズムの位置づけを実世界データ循環の視点から述べている。

第2章「Preliminaries」では、Sylvesterの慣性則、Lanczos法など、提案アルゴリズムの基礎となる理論および解法を説明している。

第3章「An algorithm for the k -th eigenvalue problem」では、 k 番目の固有値問題のため、3つのステージから成る数値アルゴリズムを示している。第1ステージでは、 k 番目の固有値を含む短い区間の効率的な設定のため、区間の端点としてLanczos法のRitz値を用いている。第2ステージでは、大規模問題に対し、目的固有値の存在区間を狭めるため、疎行列向け LDL 分解に基づく2分探索を行っている。第3ステージでは、2分探索の反復回数の削減のため、区間内の固有値およびそれに対応する固有ベクトルをshift-and-invert Lanczos法に基づいて計算している。数値実験では、大規模実問題に対し、既存解法による全固有対の計算との比較により、提案アルゴリズムの精度および効率を確認している。

第4章「An algorithm for the k -th singular value problem」では、大規模疎行列に対し、 k 番目の特異値およびそれに対応する左右特異ベクトルの計算、すなわち k 番目の特異値問題のための数値アルゴリズムを示している。特異値問題はエルミート定値一般化固有値問題の特別な場合であるため、前章の提案アルゴリズムから k 番目の特異値問題の数値アルゴリズムを機械的に得ることができ、そのいくつかを具体的に示している。数値実験では、特異値分解との比較により、本章の数値アルゴリズムの計算精度および大規模行列に対する有効性を確認している。

第5章「Relation to data circulation」では、第3章およびそれに関連した物質の電子構造計算の研究を踏まえ、本論文の成果から期待できる実世界データ循環およびその波及効果について述べている。

第6章「Conclusion」では、本論文をまとめ、今後の課題を述べている。

以上のように本論文は、 k 番目の固有値問題の数値アルゴリズムおよびその応用に対して研究成果を示しているものであり、数理工学およびそれを基盤とする計算科学の発展に寄与するところが大きいと判断できる。よって、本論文の提出者である李東珍君は博士(工学)の学位を受けるに十分な資格があると判断した。