

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	ランク構造固有値問題に対する階層的QR分解とLDL分解
Title(English)	Hierarchical QR and LDL Decomposition for Rank-Structured Eigenvalue Problems
著者(和文)	ApriansyahMuhammad Ridwan
Author(English)	Muhammad Ridwan Apriansyah
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第12560号, 授与年月日:2023年9月22日, 学位の種別:課程博士, 審査員:横田 理央,宮崎 純,関嶋 政和,下坂 正倫,小野 峻佑
Citation(English)	Degree:Doctor (Engineering), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第12560号, Conferred date:2023/9/22, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	審査の要旨
Type(English)	Exam Summary

論文審査の要旨及び審査員

報告番号	甲第		号	学位申請者氏名	Muhammad Ridwan Apriansyah	
論文審査 審査員		氏名	職名		氏名	職名
	主査	横田 理央	教授	審査員	小野 峻佑	准教授
	審査員	宮崎 純	教授			
		関嶋 政和	准教授			
下坂 正倫		准教授				

論文審査の要旨 (2000 字程度)

本論文は「Hierarchical QR and LDL Decomposition for Eigenvalue Problems」と題し、電子状態計算や量子化学計算等に代表される幅広いアプリケーションに用いられる密行列の固有値問題の計算量を $O(N^3)$ から $O(N^2)$ もしくは $O(N \log N)$ に低減する方法を提案するもので、英文で書かれており全6章からなる。

1章「Introduction」では、これまでに提案された密行列の固有値問題の計算量を低減する手法について概説し、QR分解を用いて全固有値を求めるもの、LDL分解と二分探索を用いて一部の固有値を求めるものに分けて議論している。また、HODLR行列、HSS行列、H行列、 H^2 行列などの階層的低ランク近似行列を、それぞれQR分解とLDL分解に適用した既存研究について紹介している。その上で、既存手法では並列化の性能が不十分であることや適用範囲が限定的であることを踏まえた上で、これらの問題点を解消できる手法を提案することを目的として挙げている。

2章「Eigenvalue Problem」では、本論文が対象とする固有値問題の高速解法について理解するための前提知識として、行列式、特性方程式、行列の標準形、Rayleigh商などの基本的な概念について解説している。また、QR分解についても正規直交化の方法にGram-Schmidtの射影、Householderの鏡映、Givensの回転などがあり、それぞれが数値安定性やアルゴリズムの並列度に関して異なる特性を持っていることを述べている。さらに、QR分解を繰り返すことで全固有値を求めるQR法についても解説している。LDL分解については、Gaussの消去法、Cholesky分解から順を追ってアルゴリズムの詳細を述べ、対角行列Dの正の要素の数が正の固有値の数と一致する性質を利用して単位行列による固有値のシフトを繰り返しながら二分探索を行うことで特定の固有値を求めることができることを示している。

3章「Hierarchical Low-Rank Approximation」では、行列のランクの数学的な定義にはじまり、特異値分解、低ランク近似及びその高速解法であるrandomized SVD、rank revealing QR分解、interpolative decompositionについて述べている。密行列を再帰的にブロック分割し、そのブロックを低ランク近似する場合、データを格納する方法によって計算効率が大きく変わることを挙げ、効率的なデータ構造について述べている。このような階層的な低ランク近似行列にはBLR行列、BLR²行列、HODLR行列、HSS行列、H行列、 H^2 行列など様々なものが提案されているが、それぞれの長所や短所を時間計算量、空間計算量、並列度、アプリケーションへの適用範囲の観点から分析している。

4章「Block Low-Rank QR Decomposition for Eigenvalue Problems」では、ブロックQR分解の最も素朴な方法であるblocked modified Gram-Schmidt QR分解について紹介し、この方法では直交性が悪くなることを述べている。次に、この直交性の問題を解決できる方法としてblocked Householder QR分解及びその並列度を高めたtiled Householder QR分解について提案している。また、それらのブロックを低ランク近似した際の計算量の低減を理論的にも実験的にも示している。実験結果では計算量の少ないblocked Householder QR分解は並列数が少ない場合は優位であるが、並列数を上げていくとtiled Householder QR分解が優位になることを示している。さらに、条件数が大きい行列に提案手法を適用することで既存手法と比べて高い直交性が実現できることも確かめている。最後に、提案手法をQR法に組み込むことで全固有値の計算が高速に行えることを示している。

5章「Hierarchical LDL Decomposition for Eigenvalue Problems」では、LDL分解をBLR行列、HSS行列、 H^2 行列に適用する方法について提案している。これにより従来法では $O(N^3)$ であった計算量を $O(N^2)$ もしくは $O(N)$ にまで低減できることを理論的にも実験的にも示している。また、これら

の高速な LDL 分解を用いて二分探索を行うことで特定の固有値を $O(N \log N)$ で求めることができることも示している。電子状態計算において原子の最外殻にある k 番目の電子軌道に相当する k 番目の固有値を求める問題に提案手法を適用し、これまで数千原子規模でしかできなかった計算を数十万、数百万規模で実施できること実験的に示している。

6 章「Conclusion」では、得られた知見と結論についてまとめている。主要な結論としては、従来法の BLR 行列を用いた blocked modified Gram-Schmidt QR 分解に対して提案法の BLR 行列を用いた blocked Householder QR 分解が直交性の面で優れていること、tiled Householder QR 分解を用いることで並列数が大きい場合は blocked Householder QR 分解よりも高速になること、 H^2 行列の LDL 分解と二分探索を併用することで特定の固有値を $O(N \log N)$ で求めることができ、現在使われている LAPACK を用いた $O(N^3)$ の手法に比べて大幅な高速化が実現できたことが挙げられる。

以上より、本論文で提案している手法を用いることでこれまで LU 分解などにしか適用されてこなかった階層的な低ランク近似法を QR 分解や LDL 分解に拡張し、それらを QR 法や二分探索と併用することで初めて固有値問題にまで拡張することができ、これまで $O(N^3)$ の計算量が必要であった密行列の固有値問題を $O(N \log N)$ にまで低減することができることを示している。これは電子状態計算や量子化学計算等に代表される幅広いアプリケーションにおいて工学的に重要な貢献であるため博士（工学）の学位に相応しいと判断できる。

注意：「論文審査の要旨及び審査員」は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。