近似代数の算法と応用の研究

様式 C-19

科学研究費補助金研究成果報告書

平成２２年　５月２１日現在

研究種目：基盤研究（B）
研究期間：2007～2009
課題番号：１９３０００１
研究課題名（和文）　近似代数の算法と応用の研究

研究課題名（英文）　Study of Algorithms and Applications of Approximate Algebra

研究代表者
佐々木　建昭（SASAKI TATEAKI）
筑波大学・名誉教授
研究者番号：８００８７４３６

研究成果の概要（和文）：誤差を持つ多項式系に対するグレブナー基底算法の不安定性の原因を明らかにし、安定に計算する「高精度有効浮動小数法」を考案した。多変数代数関数の特異点での級数展開に関し、まとまりのよい展開法を考案し簡潔な展開公式を導出して、収束性と多価性を明らかにした。指定した領域内にある固有値だけを計算する算法を考案し、化学の大規模計算へ成功裏に応用した。国産数式処理システム GAL を C 上で稼動させた。

研究成果の概要（英文）：For computing Groebner bases with inaccurate input coefficients, we clarified origins of instability and proposed a stable method "high-precision method with effective floating-point numbers". As for series expansion of multivariate algebraic function at singular point, we devised a method which gives the series in a compact form, derived a simple expansion formula, and clarified many properties of convergence and many-valuedness. We devised a method which computes only eigenvalues located in a specified domain, and applied the method to large-scale chemical computations successfully. We made Japanese algebra system GAL run on C.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合　計
２００７年度	4,400,000	1,320,000	5,720,000
２００８年度	2,900,000	870,000	3,770,000
２００９年度	2,900,000	870,000	3,770,000
年度			
年度			
総　計	10,200,000	3,060,000	13,260,000

研究分野：計算機代数
科研費の分科・細目：情報学・情報学基礎
キーワード：アルゴリズム理論、数式処理、数値数式融合算法、数値解析

１．研究開始当初の背景
近似代数は本研究グループが創始・開拓した研究分野で、数式処理と数値計算を融合しようというスケールの大きなものである。代表者らの提唱した近似最大公約子や近似因数分解は現在では世界の多くの研究者が研究し、近似代数は既に数式処理の世界的トピックスになった。しかし、主な研究は近似最大公約子と近似因数分解、連立代数方程式の重根であり、研究の新たな展開が切望されてい

た。しかしながら、最も重要な概念と期待される近似グレブナー基底は未だ手に負えず「不可能な概念か」とまで言われる始末であるし、特異点周りの数値解析は「夢」と言われて久しい。

２．研究の目的

(1) 浮動小数係数の多変数多項式系の近似代数的処理法の確立。本課題の主眼は浮動小数グレブナー基底の安定で精度よい算法を開発し、それを基に近似グレブナー基底の概念と計算法を確立することである。
グレブナー基底は現在の計算代数における最重要な概念なので、近似グレブナー基底の計算法が確立されれば、従来は不可能だった多くの計算が可能になる。たとえば、近似特異系の検出と悪条件件連立代数方程式への応用、多変数多項式系のパラメータに関する近似代数関係の探索、などである。
(2) 特異点での級数展開を利用した新しい数値計算法の開拓。数値解析の夢の実現には特異点での扱い易い級数展開が不可欠だが、現状は未知の部分が余りに多く、未だ近似代数に利用できる状態にない。当面は、多変数多項式の根として定まる多変数代数関数の特異点での展開級数の研究、具体的にはその収束性や多価性、さらには効率的展開法の研究が主になる。
(3) 近似代数の手法を数値解析に取り込み新しい型の算法を追及する。当面、悪条件連立代数方程式を対象とする。
(4) 近似代数の企業での工学的利用のための利便性の向上。本課題では、本グループが研究開発に使用している国産の数式処理システムGALをC 言語上で稼動させることが当面の目的である。C 上で稼動すれば、GAL をパソコンで何処にでも手軽に持ち運べるし、数値計算の多くのプログラムとも容易に接続できるからである。

３．研究の方法

(1) 研究開始当初は、浮動小数グレブナー基底計算がなぜ不安定か、理由さえ明らかでなかった。一方、本研究グループは既に桁落ちモニターのため有効浮動小数を開発している。そこで、有効浮動小数を使って桁落ちの原因を究明し、不安定性が発生するメカニズムを理論化し、それを基に計算安定化の為の各種の工夫を行った。
(2) 本代表者らが発見した級数展開法は、特異点での Hensel 構成（これも本代表者らが考案した）に基づいており、従来と発想が全く異なるのみならず、得られる級数も従来とは全く異なる。最大の特徴は、級数が従変数の斉次有理式を係数とする全次数の分数べき級数になることである。当然、級数は分母の零点で発散する。まず、分母因子を理論的に解明するとともに、級数を多数の点で数値評価して収束性などを数値的に研究することから始めた。
(3) 本来は連立代数方程式を近似代数的に扱う予定だったが、近似グレブナー基底の開発が遅れ、このテーマは進展しなかった。それに代えて、固有値計算に対する新しい方法の有効性の実証研究と、それを用いた連立代数方程式の解法を考案した。
(4) 我がグループは GAL の普及には力を注いでこなかった（研究に集中するため）。しかし、今後は普及に努める。普及の最大の障壁はGAL の記述言語である Lisp が SUN ワークステーションのアセンブリ言語で書かれていることである。そこで Lisp 処理系を C 言語で記述することにより GAL を誰にも使用可能にする。

４．研究成果

(1) 浮動小数グレブナー基底計算の不安定性は主に①完全誤差項と②微小・巨大主項がもたらす大きな桁落ちに起因することを見出した。①は有効浮動小数で簡単に除去可能である。②は、多項式剰余列と同様に行列式表現で理論化でき、微小な主係数を記号で置き換えて計算する「記号係数法」を提案した。この方法は計算が非常に重い。一方、上記の桁落ちは入力式中の同じ項が異なる工程を経てあとで正確にキャンセルするものであることを見抜き、入力時点で係数を高精度化しておけば、誤差は高精度の部分から汚染していくので、入力部分は汚染を免れる。この考えに基づき「高精度有効浮動小数法」を考案した。この方法は正確な項キャンセル対策という点では非常に有効だが、近似グレブナー基底計算では不正確な項キャンセル量を正確に知る必要がある。そのため、係数の誤差部を二通りにマークした二つの入力系を用意し、グレブナー基底を計算したあと両者を比較し、各係数に生じた不正確な項キャンセル量を正確に見積もる「マーキング法」を考案した。なお、近似グレブナー基底を計算するには、上記以外の桁落ちをほぼ消滅させる工夫も必要である。
(2) 新しい級数は Hensel 構成で計算されるので Hensel 級数と命名した。まず、Hensel 級数の分母因子を終結式理論を基に探求したところ、Hensel 構成の初期因子を定める Newton 多項式のみから分母因子が決まることが判明した。さらに Hensel 級数を数値的に調べたところ、展開点の任意の微小近傍に収束領域と発散領域が混在し、展開点に近づくほど発散領域の割合が減少する、との非常に興味深い振舞いを発見した。また、５～８次程度で打ち切った級数でも、収束領域内では元の代数関数と非常によく一致すること

も分かった。これは Hensel 級数の数値解析での有用性を強く示唆する。
そこで、Hensel 級数の各項を Newton 多項式の根で表現したところ、非常に明快な展開公式が得られた。これは Taylor 展開の一般項の公式に対比できるもので、この公式を使って Hensel 級数の収束性と多価性が理論的にかなり解明できた。
(3) 指定された領域内の固有値だけを計算する方法は既に発表済みだが、その有効性と効率性は実証されていなかった。そこで理論化学者と協力し、化学の大規模計算に適用して有効性を実証した。効率に関しては倍精度実数を複数個組み合わせた多倍長演算システムを開発した。また、連立代数方程式に関して Dixon の終結式に固有値法を適用して良好な結果を得た。
(4) 全て C 言語で記述された Lisp 処理系を開発した。数式処理システム GAL は専用の記述言語で書かれており GAL 内部で Lisp に翻訳されるが、新しい処理系はそれを C に翻訳する。あとは C のコンパイラがコンパイルしてくれる。GAL のパッケージも分割コンパイルされ、make コマンド一つで C 版 GAL が出来あがる。
(5) 上記の外、１変数整係数多項式の近似因数分解算法（世界初)、１変数多項式の近接根クラスタの分離算法、パラメータを含む浮動小数係数有理式の近似不定積分、不要極が現れない有理関数近似算法、直線配置アルゴリズムへの計算機代数の利用、等の研究を行った。

５．主な発表論文等
（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計２３件）

1. J.Asakura, T.Sakurai ほか３ 名, A numerical method for polynomial eigenvalue problems using contour integral, Japan J. Indust. Appl. Math., 査読有 (accepted).
2. T.Ikegami, T.Sakurai, U.Nagashima, A filter diagonalization for generalized eigenvalue problems based on the Sakurai-Sugiura projection method, J. Comput, Appl. Math., 査読有 2010, pp.1927-1936.
3. Tateaki Sasaki, A practical method for floating-point Groebner basis computation, Proc. of Joint Conference of ASCM 2009 and MACIS, 査読有 2009, pp.167-176.
4. T.Sasaki and D.Inaba, Series expansion of multivariate algebraic functions at singular point−nonmonic case−, Proc. of Joint Conference of ASCM 2009 and MACIS, 査読有 2009, 177-186.
5. T.Sasaki and D.Inaba, Convergence and many-valuedness of Hensel series near the expansion point, Proc. of SNC’09, 査読有 2009, pp.159-167.
6. T.Sasaki and Y.Ookura, Approximate factorization of polynomials over Z, Proc. of SNC’09, 査読有 2009, pp.169-176.
7. T.Sasaki and A.Terui, Computing clustered close-roots of univariate polynomials, SNC’09, 査読有 2009, pp.177-184.
8. T.Sakurai ほか３名, Error analysis for a matrix pencil of Hankel matrices with perturbed complex moments, JSIAM Letters, 査読有 2009, pp.76-79.
9. T.Sakurai ほか４名, A method for finding zeros of polynomial equations using a contour integral based eigensolver, Proc. of SNC’09, 査読有 2009, pp.143-147.
10. J.Asakura, T.Sakurai, ほか３名, A numerical method for nonlinear eigenvalue problems using contour integrals, JSIAM Letters, 査読有 2009, pp.52-55.
11. H.Tadano, T.Sakurai and Y.Kuramashi, A new block Krylov subspace method for computing high accuracy solutions, JSIAM Letters, Vol.1, 査読有 2009, pp.44-47.
12. T.Sasaki and F.Kako, Floating-point Groebner base computation with illconditionedness estimation, LNAI Vol.5081, 査読有 2008, Springer-Verlag, pp.278-292.
13. 山崎育朗、櫻井鉄也ほか３名、精度混合型 Krylov 部分空間反復法における疎行列ベクトル積の Cell Be 上での実装と性能評価、情報処理学会論文誌コンピューティングシステム、１巻、査読有 2008, pp.51-60.
14. 山崎育朗、櫻井鉄也ほか４名、Cutoff を 2 重に用いた前処理の性能評価、日本応用数理学会論文誌、査読有、１８巻、2008, pp.135-153.
15. T.Kawata, H.Kai and Y.Tamura, A MathML content markup editor on the xfy, Electric Proc. Of ACA2008, 査読有 2008, pp.1-5.
16. T.Sasaki and F.Kako, Computing floating-point Groebner bases stably, Proc. SNC'07, 査読有 2007, pp.180-189.

17. D.Inaba and T.Sasaki, A numerical study of extended Hensel series, Proc. SNC'07, 査読有 2007, pp. 103-109.
18. M.Sanuki and T.Sasaki, Computing approximate GCDs in ill-conditioned cases, Proc. SNC'07, 査読有 2007, pp. 161-169.
19. T.Sasaki, Tighter bounds of errors of numerical roots, JJIAM Vol.24, 査読有 2007, pp.219-226.
20. X.Niu, T.Sakurai and H.Sugiura, A verified method for bounding clusters of zeros of analytic functions, J. Comput. Appl. Math., Vol.199, 査読有 2007, pp. 263-27
21. 先崎健太, 多田野寛人, 櫻井鉄也、AMLS法による固有値分布の推定、日本応用数理学会論文誌１７巻、査読有 2007, pp.511-521.
22. 岡田真幸, 櫻井鉄也,寺西慶太,近似係数行列に対する疎行列用直接解法を用いた前処理、日本応用数理学会論文誌１７巻、査読有 2007, pp.319-329.
23. H.Tadano, T.Sakurai, On single precision preconditioners for Krylov subspace iterative methods, LNCS Vol.4818, 査読有 2007, pp.708-715.

６．研究組織

(1)研究代表者

佐々木　建昭（SASAKI TATEAKI）
筑波大学・名誉教授
研究者番号：８００８７４３６

(2)研究分担者

櫻井　鉄也（SAKURAI TETSUYA）
筑波大学・大学院システム情報工学研究科・教授
研究者番号：６０１８７０８６
照井　章（TERUI AKIRA）
筑波大学・大学院数理物質科学研究科・助教
研究者番号：８０３２３２６０
（Ｈ２０→Ｈ２１：連携研究者）
甲斐　博（KAI HIROSHI）
愛媛大学・大学院理工学研究科・准教授
研究者番号：１０２７４３４１
加古　富志雄（KAKO FUJIO）
奈良女子大学・理学部・教授
研究者番号：９０１５２６１０
福井　哲夫（FUKUI TETSUO）
武庫川女子大学・生活環境学部・教授
研究者番号：７０２１８８９０