

令和 2 年 6 月 1 日現在

機関番号：14501

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2019

課題番号：15K00016

研究課題名(和文) 基盤的な数値数式融合計算における数値的安定性と数学的安定性の研究

研究課題名(英文) numerical and mathematical stabilities in fundamental symbolic-numeric computations

研究代表者

長坂 耕作 (Nagasaka, Kosaku)

神戸大学・人間発達環境学研究科・准教授

研究者番号：70359909

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,700,000円

研究成果の概要(和文)：数値数式融合計算は、代数的に表現された問題に対して、誤差を含む場合や、数値的な方法により厳密な問題を解く場合に用いられる。本研究課題では、多くの問題に対するアルゴリズムにおいて必要とされる基盤的な数値数式融合計算に関して、数値的安定性と数学的安定性の両面から研究を行った。成果として、既知の近似GCDアルゴリズムの多様な組み合わせにより、精度や速度の面で劇的な改善が可能であること示し、そのソフトウェアを公開した。また、パラメータを含む場合への拡張や、それらの近似無平方分解への適用を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

数値数式融合計算を含む計算機代数分野は、計算機に直接数学の問題を解かせる場合に必要とされ、理工系分野の理論研究から実践現場までの幅広い領域において必要不可欠なツールとなっている。本研究課題では、多様なアルゴリズムが存在する近似GCDに対し、統一した枠組みを用意することで比較検討やさらなる効率化を可能とさせたこと、工学的な設計などに表れる設計パラメータを含んだままの問題に適用可能な、パラメータを含むGCD計算アルゴリズムを提案したこと、などにより必要不可欠なツールの機能を大きく拡張した意義をもつ。

研究成果の概要(英文)：Symbolic-numeric computations are used in the case where the given algebraic expression has a priori error, or for solving the given non-numeric problem by some numerical methods. In this project, we had studied numerical and mathematical stabilities in fundamental symbolic-numeric computations used in many algorithms. Our contributions are as follows. 1) we built a better performance framework that covers and interchanges known approximate GCD algorithms, 2) we published its implementations, 3) we gave the theory of parametric greatest common divisors by means of comprehensive Groebner systems (CGS), and 4) we applied them to approximate squarefree decomposition.

研究分野：計算機代数

キーワード：アルゴリズム 数式処理 最大公約因子 近似最大公約因子 近似GCD

1. 研究開始当初の背景

数値数式融合計算と多項式 GCD に関しては、実践現場における代数的に表現される問題を解く場合、誤差を含む入力への対応や計算結果の保証(検証)が問題となり、長らく数値計算と計算機代数(数式処理)の両面から研究が行われている。線形問題については、Rump による INTLAB で実現されているように、数値計算の側面から精度保証計算の実用化が進んでいる。一方、非線形問題については、計算機代数の側面からの研究が行われており、そのトップカンファレンス(ISSAC 2014 など)でも多くの議論が行われている。計算精度を向上しようとする初期研究から、現在では、数学的な保証(代数的な意味の保証)を行う研究へと発展してきている。

数値数式融合計算を含む多くの代数計算において基盤的な演算とされるのが、多項式の GCD (最大公約因子)である。例えば、重根(またはクラスター)を精度良く検出するため、浮動小数点数により多項式の GCD 計算を近似的に行い、数値的な無平方分解(重複因子を分離した状態)を求める方法などが知られている。また、因数分解も重要な基礎的な演算であるが、係数に誤差が含まれる場合は、浮動小数点数による多項式の GCD 計算を必要としている。このように、多項式の GCD 計算は、基盤的な数値数式融合計算の一つであることが分かる。

2. 研究の目的

数値数式融合計算に現れる多項式の GCD 問題を数値的に解いた論文は、1974 年に初めてみられるが、計算機代数分野において、佐々木と野田による 1989 年の悪条件問題と近似的無平方分解に関する論文をきっかけに多くの研究が行われている(近似 GCD のみを扱った Paola Boito の 2007 年の博士論文では、参考文献数が 150 となっている)。近年の近似 GCD アルゴリズムでは、Sylvester 行列や部分終結式行列の構造に着目し、構造化 QR 分解による効率化を行っている。構造化 QR 分解は、Matrix Computation の第 4 版に収録されるなど、その重要性が認識されている。しかしながら、構造化 QR 分解の近似 GCD への応用は近年始まったばかりであり、その数値的な安定性に関する議論が進んでいない。数値数式融合計算における基盤的な演算として活用するためには、数値的な安定性に関する研究が今後一層重要となる。これが本研究課題の研究目的の一つであった。

一方、誤差を含む非線形代数方程式の解法としての Groebner 基底計算に関しては、誤差をパラメータとして扱い、パラメータの取りうる範囲毎に、Groebner 基底を厳密に計算する包括的 Groebner 基底の研究が進んでいる。これにより、数値的な算法の厳密な評価も一定程度可能となっている。しかしながら、近似 GCD に関してはこの種の研究が進んでいない。包括的 Groebner 基底は、パラメータを含む Groebner 基底の数学的な安定性の理論(Kalkbrener, 1997)に基づいており、多項式の GCD に対する同様の数学的な安定性の理論が必要とされている。実際、多項式の GCD も 1 変数の問題に関しては、Groebner 基底に帰着可能であり、それらの成果に加え、構造化特異値分解による近似 Groebner 基底計算などの研究を応用することで、パラメータをもつ多項式の GCD 計算は実現可能と考えられる。これも本研究課題の研究目的の一つであった。

また、これらの研究目的に関する研究成果に基づき、より上位のアルゴリズムの改善に取り組むことも研究目的の一つとして挙げており、都合、以下の 3 点が本研究課題の研究の目的であった。(1) 構造化 QR 分解に基づく近似 GCD の数値的な安定性の向上、(2) パラメータを持つ多項式 GCD の数学的な安定性の解明、(3) 2 つの安定性理論に基づく、上位アルゴリズムの改善。

3. 研究の方法

研究代表者の予備的研究に基づき、(1) Delvaux らによる構造化 QR 分解法を拡張し、近似 GCD で現れる逐次的な構造化行列へ対応させ、また、(2) 擬除算と有理関数体上の包括的 Groebner 基底計算に基づく、直接的な数学的な安定性の計算方法を実現する。また、順次、(3) Delvaux らによる構造化 QR 分解法の計算精度が、Cauchy-like 行列と Toeplitz-like 行列で異なるという予備的研究に基づき、その解析により数値的な安定性を向上、(4) Kalkbrener の理論を多項式の GCD に対して拡張し、近似 GCD の数学的な安定性の計算方法を高速化、(5) 数値的な安定性を向上させた近似 GCD による求根問題の改善の解析と、数学的な安定性による近似因数分解の解析、(6) 近似因数分解の改善のために、数値的な安定性を向上させた近似 GCD の多変数多項式への拡張を行う。

- M.Kalkbrener. On the Stability of Groebner Bases Under Specializations. Journal of Symbolic Computation, Vol. 24(1), 1997, Pages 51-58.
- S.Delvaux, L.Gemignani and M.V.Barel. QR-factorization of displacement structured matrices using a rank structured matrix approach. Advances and Applications, Vol. 199, 2010, Pages 229-254.

4. 研究成果

本研究課題の研究目的に基づく3つの課題(構造化 QR 分解に基づく近似 GCD の数値的安定性の向上, パラメータを持つ多項式 GCD の数学的安定性の解明, 2つの安定性理論に基づく上位アルゴリズムの改善)に分けて, その研究成果を報告する。

(1) 構造化 QR 分解に基づく近似 GCD の数値的安定性の向上

予備的研究に基づき, Delvaux らによる構造化 QR 分解 (計算量が $O(n^2)$) を用いることで既存の近似 GCD アルゴリズムの改善を試みた。特に, Delvaux らにより Toeplitz-like 行列では数値的に不安定であることが報告されており, それを改善するために, Givens 回転の修正, unimodularity を保存するような修正, 計算過程においてアルゴリズムの前提条件が満たされない場合にそれを検出可能な修正 (Toeplitz-like の representation graph を Cauchy-like に埋め込み) などを試みたが, 近似 GCD アルゴリズムに用いるに十分な数値的な安定性を得るには至らなかった。

一方, この試みの副産物として, そのフレームワークが概ね似ている既存の近似 GCD アルゴリズムである QRGCD, ExQRGCD, UVGCD, Fastgcd について, 相互の特徴を組み合わせることで劇的な改善が可能であることを発見した。特に, 比較的古典的なアプローチを採用している ExQRGCD に, UVGCD の refinement ステップを組み合わせることで, 精度の上で評価の高い UVGCD や, 理論計算量の上で評価の高い Fastgcd に比肩する性能になることが判明した。そのため課題1では, 構造化 QR 分解に固執せず, この新たな枠組みによる性能向上を目指すこととした。

本方式は, 数式処理学会や京都大学数理解析研究所の研究集会, 国際研究集会 (MICA2016 (Milestones in Computer Algebra, 2016)) での講演と ISSAC2016 (International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation, 2016)でのポスター発表などで報告するとともに, 新たに GPGCD や STLN などに基づく近似 GCD アルゴリズムとの組み合わせも含め, 最終的にはサブルーチンの組み合わせなどによる 200 種を超えるアルゴリズムが利用可能な近似 GCD の計算ライブラリとして構築を行いウェブに公開した。これまでの近似 GCD アルゴリズムは, 提案者が提案者の選択したプラットフォームでの試験実装を公開するだけでなく, アルゴリズム間の比較が難しかったが, 本ライブラリによりその比較がある程度可能となるなど, 今後の近似 GCD アルゴリズム研究において大きな意義をもつといえる。

(2) パラメータを持つ多項式 GCD の数学的安定性の解明

パラメータを持つ多項式 GCD を求めるアルゴリズムは, 1変数多項式向けや1パラメータ向けのものに限られていたが, 本研究課題では, Gianni と Trager (1985), Sasaki と Suzuki (1992)による Groebner 基底を用いた GCD 計算アルゴリズムを, パラメータを伴う GCD 計算に拡張し, 多パラメータを伴う多変数多項式の最大公約因子計算法を始めて明らかにした。方法としては, minimal CGS (極小包括的グレブナー系) の性質を活用し, GCD が確定するようにパラメータ空間の分割を進めるものとなっている。証明を伴わない速報を京都大学数理解析研究所の研究集会などで発表したのち投稿し, 査読者などからの意見に基づき, アルゴリズムの見直し (特に, 計算効率の観点から, minimal CGS の計算を Groebner cover 計算に差し替える) を行ったものが採択され, ISSAC2017 で発表した。

本方式は, 包括的グレブナー系と呼ばれる Groebner 基底を用いてパラメータを持つ多項式の GCD 計算法を確立したものとなったが, 計算速度の点で課題が残されていた。しかしながら, 本研究発表を機会に, パラメータを伴う多項式の GCD 計算法への注目が集まり, 別の研究者により解決されている。GCD 計算は基盤的な計算の一つであり, これを契機に, より多くの代数的演算においてパラメータを伴う計算が可能になると期待される。

(3) 2つの安定性理論に基づく上位アルゴリズムの改善

2018年9月11日から13日まで, ワークショップ「GCD and related topics」を開催し, GCD と関連研究の整理に関する講演7件, 未解決問題や改善の方向性に関するディスカッション3件などを行った。ワークショップでは, 「2つの安定性理論に基づく上位アルゴリズムの改善」のような GCD の直接的な応用だけではなく, 代数曲面の接合や有理関数近似など, 隣接分野への応用に関しても知見が得られた。

本研究課題では, 2つの安定性理論に基づく上位アルゴリズムの改善として「近似無平方分解」に取り組み, その新たな定義と算法を開発した。前述のワークショップと京都大学数理解析研究所の研究集会で速報を発表したのち, 計算機実験も踏まえた論文を執筆した (本研究成果報告書記載時において査読に基づく論文修正中)。本方法では, 先行研究で取られている「誤差を係数に含む多項式への無平方分解の直接的拡張」ではなく, 無平方部分を拡張した上で, それを用いて近似無平方分解を導入する新たなアプローチを採用している。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Nagasaka Kosaku	4. 巻 -
2. 論文標題 Parametric Greatest Common Divisors using Comprehensive Groebner Systems	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Proceedings of the 2017 ACM on International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation	6. 最初と最後の頁 341-348
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1145/3087604.3087621	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nagasaka Kosaku	4. 巻 51(1)
2. 論文標題 Seeking better algorithms for approximate GCD	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 ACM Communications in Computer Algebra	6. 最初と最後の頁 15-17
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1145/3096730.3096733	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Nagasaka Kosaku	4. 巻 -
2. 論文標題 Toward the best algorithm for approximate GCD of univariate polynomials	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Symbolic Computation	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計14件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 3件）

1. 発表者名 長坂耕作
2. 発表標題 近似GCDアルゴリズムの性能評価と選択基準
3. 学会等名 第27回日本数式処理学会大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 長坂耕作
2. 発表標題 GCDと関連研究の整理(1)
3. 学会等名 ワークショップ「GCD and related topics」
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 長坂耕作
2. 発表標題 近似GCDの枠組みでの近似無平方分解
3. 学会等名 研究集会 Computer Algebra - Theory and its Applications
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 長坂耕作
2. 発表標題 STLN-GCDの実装とその性能評価について
3. 学会等名 第26回 日本数式処理学会大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 長坂耕作
2. 発表標題 近似GCDアルゴリズムの新たな組み合わせ
3. 学会等名 研究集会 Computer Algebra - Theory and its Applications
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Kosaku Nagasaka
2. 発表標題 Parametric Greatest Common Divisors using Comprehensive Groebner Systems
3. 学会等名 ISSAC 2017 (International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation, 2017) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 長坂耕作
2. 発表標題 近似GCDの大規模実験とExQRGCDの性能向上について
3. 学会等名 第25回 日本数式処理学会大会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Kosaku Nagasaka
2. 発表標題 Approximate GCD and Its Implementations
3. 学会等名 Milestones in Computer Algebra, MICA2016 (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Kosaku Nagasaka
2. 発表標題 Seeking Better Algorithms for Approximate GCD
3. 学会等名 International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation, ISSAC2016 (Poster Presentations) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 長坂耕作
2. 発表標題 パラメータを含んだ多項式の最大公約因子の計算法
3. 学会等名 研究集会 Computer Algebra and Related Topics
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 長坂耕作
2. 発表標題 パラメータを伴う最大公約因子計算における停止性
3. 学会等名 日本数式処理学会合同分科会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 長坂耕作
2. 発表標題 近似GCD向けChasingアルゴリズム改良の試み
3. 学会等名 第24回 日本数式処理学会大会
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 長坂耕作
2. 発表標題 近似GCDにおける逐次的なQR分解法とその実装について
3. 学会等名 RIMS共同研究 数式処理研究の新たな発展
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 長坂耕作
2. 発表標題 近似GCDにおける逐次的なQR分解法とその実装について II
3. 学会等名 RIMS研究集会 Computer Algebra and Related Topics
4. 発表年 2015年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

LIBSNAP https://wwwmain.h.kobe-u.ac.jp/~nagasaka/research/snap/
--

6. 研究組織			
	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考