1版

様　式　C－19、F－19－1、Z－19　（共通）

科研費 KAKENHI

# 科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　６ 年　６ 月　４ 日現在

機関番号：１７１０２

研究種目：若手研究

研究期間：2020～2023

課題番号：２０Ｋ１９７４５

研究課題名（和文）実計算代数手法に関する効率化と数理科学分野への応用

研究課題名（英文）Efficiency improvements concerning real computational algebraic methods and their application in the mathematical sciences

研究代表者

深作　亮也（Fukasaku，Ryoya）

九州大学・数理学研究院・助教

研究者番号：４０７７８９２４

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　2,400,000円

研究成果の概要（和文）：本研究課題では、固定された重複度を持つホップ分岐に関連する代数的な判定法を提案するとともに、包括的グレブナー基底系の表現の簡略化などの方法を提案することができ、一定の成果をあげることができたと考えている。特に、ホップ分岐の重複度はリミットサイクルの個数の上限となる概念である。力学系と関連するような実計算代数手法を提案できたことを意義深く感じる。また、包括的グレブナー基底系の表現の簡略性は実限量記号消去の計算時間や使用メモリなどに強い影響を与える。計算代数手法は膨大な計算時間や使用メモリを要求しやすいので、包括的グレブナー基底系の表現の簡略化は計算効率に関連する非常に重要なトピックの一つである。

研究成果の学術的意義や社会的意義
計算代数手法は厳密な計算やパラメータを記号的に使うような計算を行うことができる。一方で、数値計算手法などと比べて膨大な計算資源（計算時間・計算メモリなど）を要求し易いような傾向を持っている。本研究では、厳密な計算やパラメータを記号的に使うような計算が可能であるというメリットを数理科学分野に活用してきた。また、膨大な計算資源が要求され易い傾向を持つというデメリットを、計算の効率化などを目指すことで、解消しようとする研究であると考えている。そして、今後、多くの学術的問題・社会的問題に計算代数手法を用いることを目指しているという点に学術的意義や社会的意義を持っていると考える。

研究成果の概要（英文）：We have achieved certain results in this research project by proposing an algebraic method related to Hopf bifurcations with fixed multiplicities, as well as a simplified representation of comprehensive Groebner systems and other methods. In particular, the multiplicities of Hop bifurcations is a concept that serves as an upper bound on the number of limit cycles. It is significant that we were able to propose a computational algebra method that is relevant to dynamical systems. In addition, the simplicities of the representations of comprehensive Groebner systems has a strong influence on the computation time and memory used for real quantifier eliminations. Since computational algebra methods tend to require a large amount of computation time and memory, the simplicity of the representation of comprehensive Groebner systems is one of important topics related to computational efficiency.

研究分野：計算代数

キーワード：包括的グレブナー基底系　ホップ分岐

## １．研究開始当初の背景

計算代数手法は、厳密な計算を行うことができるだけではなく、パラメータを係数に含むような多変数多項式を操作することができる。特に、係数に含まれているパラメータを「記号的」に扱うことができるので、パラメータを係数に含む代数方程式や半代数方程式などの構造を包括的に考察することすらもできる。

parameters: $s_{12}, s_{13}, s_{23}$,　variables: $\ell_1, \ell_2, \ell_3$

$$\begin{cases} 0 = -2\ell_1\ell_2^2\ell_3^2 + \ell_1\ell_2^2 + s_{13}\ell_2^2\ell_3 + \ell_1\ell_3^2 + s_{12}\ell_2\ell_3^2 - s_{12}\ell_2 - s_{13}\ell_3 \\ 0 = -2\ell_1^2\ell_2\ell_3^2 + \ell_1^2\ell_2 + s_{23}\ell_1^2\ell_3 + s_{12}\ell_1\ell_3^2 + \ell_2\ell_3^2 - s_{12}\ell_1 - s_{23}\ell_3 \\ 0 = -2\ell_1^2\ell_2^2\ell_3 + s_{23}\ell_1^2\ell_2 + s_{13}\ell_1\ell_2^2 + \ell_1^2\ell_3 + \ell_2^2\ell_3 - s_{13}\ell_1 - s_{23}\ell_2 \end{cases}$$

$$\overset{\text{CGS}}{\iff} \begin{cases} \text{no solustions} \quad (\text{if } s_{12}s_{13}s_{23}(s_{12} - s_{13}s_{23})(s_{13} - s_{12}s_{23})(s_{23} - s_{12}s_{13}) = 0) \\ s_{23}\ell_1 - s_{12}\ell_3 = s_{13}\ell_2 - s_{12}\ell_3 = s_{12}\ell_3^2 - s_{13}s_{23} = 0 \quad (\text{otherwise}) \end{cases}$$

例えば、右の図では、包括的グレブナー基底系（Comprehensive Groebner System; CGS）を用いることによって、パラメータ$s_{12}, s_{13}, s_{23}$を係数に含む代数方程式を、パラメータ空間の分割に応じた解き易い代数方程式に同値変形している。そして、ざっくりと言えば、包括的グレブナー基底系はパラメータを係数に含む多変数多項式イデアルのグレブナー基底であることから、このような変形を実現することができる。

また、限量記号消去（Quantifier Elimination; QE）と呼ばれる手法もあり、この手法は実数領域における万能な計算代数手法である。

$$\begin{aligned} &\text{minimize} \quad f(x_1, x_2) = x_1 - x_1x_2 + 5 \\ &\text{subject to} \quad 4x_1 = \theta^2, 1 \le x_1 \le 4, 1 \le x_2 \le 2, \theta > 0 \\ \xrightarrow{\text{FOF}} \quad &\exists x_1 \in \mathbb{R}\ \exists x_2 \in \mathbb{R}\ (z = f(x_1, x_2) \text{ and } 4x_1 = \theta^2 \text{ and } 1 \le x_1 \le 4 \text{ and } 1 \le x_2 \le 2 \text{ and } \theta > 0) \\ &\overset{\text{QE}}{\iff} \quad 2 \le \theta \le 4 \text{ and } \frac{1}{4}(20 - \theta^2) \le z \le 5 \end{aligned}$$

例えば、左の図では、パラメータを係数に含む多項式最適化問題を限量記号消去で解いている。実行結果からもわかるように、最適化問題を一階述語論理式（First Order Formula; FOF）として表し、パラメータである$\theta$を記号的に扱うことで、最適化問題の解を包括的に得ることができている。

研究開始当初には、このようなことが可能な計算代数手法の効率化に関わる研究を行うとともに、数理科学分野への応用に関わる研究を行うことを目指していた。

## ２．研究の目的

上のような包括的・厳密な計算を計算代数手法は実現できる一方で、膨大な計算資源（計算時間・計算メモリなど）を要求し易いような傾向を、残念ながら、持っている。反対に、数値計算で上のようなことを実現することは非常に難しいと言わざるを得ない一方で、数値計算においては膨大な計算資源は要求されにくいという傾向がある。

| 計算手法 | 代数計算 | 数値計算 |
|---|---|---|
| 計算負荷 | 大きい | 小さい |
| 包括的・厳密な計算 | 可能 | 困難 |

本研究では、計算負荷が大きいというデメリットを計算効率化・メモリ節約の観点などから解消していくとともに、包括的・厳密な計算を行うことができるというメリットを数理モデルなどにおいて活用することを目指してきた。

特に、研究開始当初は力学系の分岐問題の一つである「ポアンカレ・アンドロノフ・ホップ分岐」における計算代数手法の活用や、新たな計算代数手法の確立などを目指していた。以降で記すように、一定の成果を上げることができたと考えている。また、詳細を研究成果でも説明するように多変量解析モデルの一つである「因子分析モデル」での活用にも本研究期間中に着手することができた。

また、限量記号消去でも活用されている包括的グレブナー基底系の表現の簡略化や、パラメトリックボーダー基底の新たな計算手法の構築などを行うことで、実計算代数手法の計算効率化を達成するということを、研究開始当初には目指していた。こちらについては、研究成果で説明するように、包括的グレブナー基底系の表現の簡略化を実現できたと考えている。

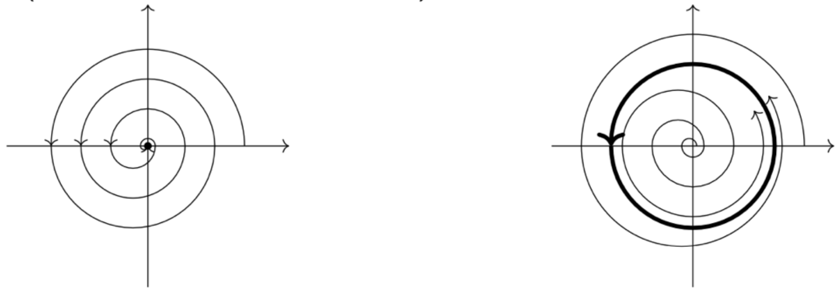
## ３．研究の方法

例えば、包括的グレブナー基底系に基づく限量記号消去法の効率性は、内部で計算された包括

的グレブナー基底系の表現の簡略性に、強く依存している。なぜなら、再帰的に限量記号がついた変数を消去していく中で用いるエルミートの二次形式の簡略性が包括的グレブナー基底系の表現の簡略性に依存し、その二次形式の簡略性が再帰的に出力されていく一階述語論理式の表現に強く影響するためである。また、数理モデルに対して包括的グレブナー基底系を応用する場合に、複雑な表現では計算結果からモデルに対して考察していくことは難しくなる。こうした二つの観点から、本研究では包括的グレブナー基底系の表現の簡略化に取り組んだ。特に、パラメータ空間の分割を制約するノットイコールに関する不等式の構造を用いた。そして、この不等式の構造を用いるために飽和イデアルの構造を用いることで、表現の簡素化に繋げるという方法を採用した。

　また、研究開始当初、下の例のようにリミットサイクルを発生させるパラメータ $\mu$ の分岐点を

$\dot{\boldsymbol{x}}(t) = \begin{pmatrix} -y(t) + x(t)(\mu - x(t)^2 - y(t)^2) \\ x(t) + y(t)(\mu - x(t)^2 - y(t)^2) \end{pmatrix}$ の解軌道 $\boldsymbol{x}(t)$ たちが $t \to \infty$ に対して



$\mu \leq 0$ の場合は原点に収束し、　$\mu > 0$ の場合は円に巻き付く

厳密に求める計算代数手法に関連する研究を行うことを考えていた。特に、こうした分岐は「ポアンカレ・アンドロノフ・ホップ分岐」として力学系分野などで知られている。また、研究開始当初、以下の論文が arXiv に投稿されており、彼らのアルゴリズムを数式処理システム SageMath に実装するところからスタートした。

[1] Niclas Kruff, Sebastian Walcher. Coordinate-independent criteria for Hopf bifurcations. Discrete and Continuous Dynamical Systems - S, 2020, 13(4): 1319-1340.

## ４．研究成果

　上の方法をもとに行った包括的グレブナー基底系の簡略化のための手続きを実装し、国際会議で発表した。こうした簡略化は、上の研究の方法のように、ノットイコールに関する不等式制約を飽和イデアルによって扱うことで、実現されている。特に、不要なパラメータを含む係数を削除する、同値な生成元でも簡略な生成元を選ぶ、などのようなことができる。そして、以前の出力では応用している際に解釈できなかった計算結果が、現在の実装では解釈できるようになった。例えば、多変量解析モデルの一つである「因子分析モデル」の因子回転問題での応用において、そのような入力を数多く確認することができている。現段階では論文として投稿することができていないので、論文化については今後行なっていくことを計画している。

　また、上で挙げている「ポアンカレ・アンドロノフ・ホップ分岐」については、先行研究 [1] の結果を実装して計算代数手法を応用するだけでなく、固定された重複度を持っているポアンカレ・アンドロノフ・ホップ分岐の判定アルゴリズムを、新たな計算代数手法として提案することもできた。なお、この手法は査読つき国際会議であり、計算代数分野のトップカンファレンスである International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation (ISSAC) 2021 に採択されている。

　最後に、研究期間の最終年度となった昨年度は、数理統計分野の多変量解析モデルの一つである「因子分析モデル」における不適解問題の解明のための応用研究にも着手することができた。因子分析モデルは与えられたデータの背景にある原因を探るための多変量解析モデルである。因子分析モデルでは母分散を、対数尤度関数を最大化するような最適化問題を扱う「最尤法」などによって推定する。そして、不適解問題は母分散を最尤法などで推定しようとした際に、ゼロ以下の値が推定されてしまうことがあるという、因子分析モデルにおける未知な課題であり、40 年以上、解明されていない。最尤法で推定される最尤解は尤度方程式（対数尤度関数の停留点を特徴づけている方程式）と呼ばれる代数方程式の解になっていることから、本研究ではグレブナー基底の理論を基に得られた解き易い・同値な代数方程式の実数解を全て求めている。また、尤度方程式が無限個存在するような場合は、対応する解のタイプを特定した上で代数円柱分解によって連結空間から標本点を求めることにより、最尤解を決定している。最終年度は国内学会や国際会議などで成果を発表することができ、さらに、論文を三月末に投稿することができた。

　このように、本研究では、効率化・応用に関する両面で一定程度の成果をあげることができた。今後は、本研究で得られた知見も活かしながら、更なる効率化・応用の研究に取り組んでいく。

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕　計1件（うち査読付論文　1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<br>Fukasaku Ryoya | ４．巻<br>- |
| ２．論文標題<br>Criteria for Hopf Bifurcations with Fixed Multiplicities | ５．発行年<br>2021年 |
| ３．雑誌名<br>Proceedings of the 2021 on International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation | ６．最初と最後の頁<br>147-154 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子）<br>10.1145/3452143.3465519 | 査読の有無<br>有 |
| オープンアクセス<br>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<br>－ |

〔学会発表〕　計11件（うち招待講演　0件／うち国際学会　3件）

| |
|---|
| １．発表者名<br>深作亮也，廣瀬慧，加葉田雄太朗，寺本圭佑 |
| ２．発表標題<br>因子分析へのグレブナー基底に基づくアプローチ |
| ３．学会等名<br>RIMS共同研究（公開型）「Computer Algebra - Foundations and Applications 」 |
| ４．発表年<br>2022年 |

| |
|---|
| １．発表者名<br>深作亮也，田島慎一 |
| ２．発表標題<br>効率的な一変数留数計算アルゴリズム |
| ３．学会等名<br>日本数学会 |
| ４．発表年<br>2022年 |

| |
|---|
| １．発表者名<br>Ryoya Fukasaku |
| ２．発表標題<br>Criteria for Hopf bifurcations with fixed multiplicities |
| ３．学会等名<br>The International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation (ISSAC) 2021（国際学会） |
| ４．発表年<br>2021年 |

１．発表者名
深作亮也，田島慎一

２．発表標題
一変数留数計算について

３．学会等名
RIMS共同研究（公開型）「Computer Algebra - Foundations and Applications」

４．発表年
2021年

１．発表者名
深作亮也

２．発表標題
重複ホップ分岐が発生するようなパラメータ条件の計算アルゴリズム

３．学会等名
日本数式処理学会第29回大会

４．発表年
2020年

１．発表者名
深作亮也,田島慎一

２．発表標題
単純ホップ分岐判定法の実装

３．学会等名
RIMS共同研究(公開型)Computer Algebra Theory and its Applications

４．発表年
2020年

１．発表者名
深作亮也，廣瀬慧，加葉田雄太朗，寺本圭佑

２．発表標題
代数計算に基づく因子分析モデルの最尤推定値候補の算出

３．学会等名
日本数式処理学会第32回大会

４．発表年
2023年

| |
|---|
| １．発表者名<br>深作亮也，廣瀬慧，加葉田雄太朗，寺本圭佑 |
| ２．発表標題<br>計算機代数に基づく因子分析の最尤推定 |
| ３．学会等名<br>日本計算機統計学会第37回大会 |
| ４．発表年<br>2023年 |

| |
|---|
| １．発表者名<br>Yosuke Sato, Ryoya Fukasaku |
| ２．発表標題<br>On simplification of comprehensive Groebner systems |
| ３．学会等名<br>The 28th International Conference on Applications of Computer Algebra ACA’2023（国際学会） |
| ４．発表年<br>2023年 |

| |
|---|
| １．発表者名<br>Ryoya Fukasaku, Kei Hirose, Yutaro Kabata, Keisuke Teramoto |
| ２．発表標題<br>An algebraic approach to factor analysis |
| ３．学会等名<br>10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics（国際学会） |
| ４．発表年<br>2023年 |

| |
|---|
| １．発表者名<br>深作亮也 |
| ２．発表標題<br>因子分析における代数計算の可能性 |
| ３．学会等名<br>九州大学IMI共同利用・短期共同研究「記号計算の高速化と産業課題解決への応用」 |
| ４．発表年<br>2023年 |

〔図書〕　計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

| |
|---|
| 重複ホップに関する実装<br>https://www2.math.kyushu-u.ac.jp/~fukasaku/software/Bifurcation/ |

## 6．研究組織

| | 氏名<br>（ローマ字氏名）<br>（研究者番号） | 所属研究機関・部局・職<br>（機関番号） | 備考 |
|---|---|---|---|

## 7．科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕　計0件

## 8．本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

| 共同研究相手国 | 相手方研究機関 |
|---|---|