

立教大学学術推進特別重点資金（立教 S F R）
プロジェクト研究（自由プロジェクト研究）
2010年度研究【経過・成果】報告書

研究代表者	所属・職名		氏名		
	理学部・教授		横山和弘 印		
研究課題	計算機代数の量子化学への応用				
研究組織	所属大学名等・職名		氏名		
	理学部・教授 理学部・PD		望月祐志 小副川健		
研究期間	2010	年度	～ 2011	年度	
研究経費	2010	年度	2011	年度	総計
		3,000 千円		3,000 千円	6,000 千円

研究の概要 (200～300字で記入、図・グラフ等は使用しないこと。)

本研究の目的は量子化学の特に高次電子相関理論に現れる代数表式の操作を、計算機代数の知識を用いて統一的に行うための手法を確立することである。量子化学の代数表式の操作は計算機代数における記号計算としてモデル化することができ、これに計算機代数の種々の計算技法を適用することで、人手で扱うのが困難な高次のモデル化学を計算機で扱えるようになる。また、本研究で確立された手法を独自に開発している数式処理システム QC²AS に実装し、計算機代数の専門家でない量子化学の研究者が、我々の構築した計算手法を利用できる手段を提供する。

キーワード (研究内容をよく表しているものを3項目以内で記入。)

[代数的最適化] [高次電子相関理論] [数式処理システム開発]

研究【経過・成果】の概要 (図・グラフ等は使用しないこと。)

本研究の目標は、量子化学の高次電子相関理論に現れる代数表式の操作を計算機代数の問題としてモデル化し、統一に行えるような計算手法の確立である。また、これらの手法を計算機代数の知識がなくても使えるよう、ソフトウェアを作って提供することも本研究の目的の一つである。このため、本研究は「計算手法の理論的研究」と「数式処理システムの開発」という二つの方向で研究を進めている。本文書は 2010 年度におけるこれら二つの研究の経過を報告したものである。

1. 計算手法の理論的研究

計算手法の研究に関して、2010 年度は特に「代数表式の簡約アルゴリズムの完成」を目標として研究を行った。アルゴリズムの完成とは、正確に言うと、実際に計算機上で実行したときに、目標とする大きさの問題 (MP4 レベル) を、実用時間で解くことができるアルゴリズムの構築が目標である。このためには、代数表式や量子化学で使われている記号を、適切な形で多項式 (計算機代数で扱える代数的な式) として定式化し、記号の定義などからくる記号の等値性などを代数的に表現することが必要となる。

アルゴリズムの理論的研究は SFR に採択される以前の研究から引き継いだ部分があり、本年度の研究経過を説明するためにまず、その結果を一部紹介する。

簡約操作を構築する上で核となるのは、記号の等値性を全て考えあわせたいと、ある項とある項が等しいか、そうでないかを求めることにある。我々は既に先行研究で、「グレブナ基底」という計算機代数における強力な理論体系を用いて、そのアルゴリズムを提案している。その方法は、記号の等値性をそれぞれ多項式として表し、それらの多項式の集合のグレブナ基底を求め、代数表式をそのグレブナ基底によって簡約するというものである。グレブナ基底による簡約の結果は、簡約に使った多項式に依らず一意的に決まることが知られており、これによって、項の間の等値性を、代数的に判断する方法を手に入れたことになる。また、この研究では、グレブナ基底を計算するための基本的なアルゴリズムである「ブッフバーガーのアルゴリズム」を使わずとも、この計算に必要なグレブナ基底が得られることを示し、ブッフバーガーのアルゴリズムよりも効率のよいアルゴリズムも併せて提案していた。

これらの結果は 2009 年度の国際学会 ICCSA' 2010 (10th International Conference on Computational Science and Its Applications) で発表をした。[Takeshi Osoekawa, Naoyuki Shinohara, Yuji Mochizuki and Kazuhiro Yokoyama, "Gröbner basis technique for algebraic formulas in electron correlation theories," Proceeding of the 10th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA-2010), pp. 17- 23, 2010] この結果は、計算機代数の応用分野を拓く研究としては十分な評価を得たものの、アルゴリズムの実行に多くのメモリと時間を要求するもので、我々が解こうとしているサイズの問題に適用するには不十分な面があり、大幅な改良を必要としていた。

これをふまえて、本年度は元のアルゴリズムを根本的に見直し、計算効率の大幅な改良を行った。効率化の鍵になったのは、グレブナ基底をそれぞれ独立した部分に分解し、代数表式の簡約に必要な部分のみの計算に絞ったことである。また、グレブナ基底のデータ構造自体も、二分木を基にしたデータ構造に変えることで、必要な操作を高速に行えるよう工夫した。さらに、我々の場合、グレブナ基底を得るための計算は、ブッフバーガーのアルゴリズムを「グラフの探索アルゴリズム」に置き換えられることを示し、このアルゴリズムを基に代数表式の簡約アルゴリズムを構築した。これらのアイデアを用いて代数表式の簡約を行うプログラムを実装し、計算機上で実証実験を行ったところ、従来手法で数時間を要していた MP3 レベルの問題が 1 秒以内で計算できるなど、劇的な計算効率の向上が確認され、今回開発したアルゴリズムが、ターゲットのサイズの問題を解くのに、十分有効であることを確認した。実証実験の計算時間 (ベンチマーク) は、後述する数式処理システム「QC²AS」の着想とともに、2010 年 7 月 7 日～9 日に京都大学数理解析研究所で行われた研究集会「数式処理研究の新たな発展 (Developments in Computer Algebra Research 2010)」で発表を行った。[小副川健、望月祐志、横山和弘、電子相関理論のための数式処理システムにむけて、京都大学数理解析研究所講究録、巻号未定 (2011 年度中に刊行)]

研究【経過・成果】の概要 つづき

応用のためにはベンチマークテストの結果が良好であれば十分であるが、計算機代数の研究のためには、そのアルゴリズムが問題のサイズに対してどのくらいのメモリ・時間で実行できるのか、という指標となる「計算量」を評価することも重要である。我々のアルゴリズムに対してもこの計算量評価を行い、問題のサイズに対して2乗程度の計算量で抑えられることがわかった。これは非常に理想的な計算量で、アルゴリズムの設計がうまくいっていることを示している。また、計算量と実計算時間の比も、かなり高い精度で一致していることを確認した。この結果と、数式処理システム QC²AS の設計・開発に関する記述を論文にまとめ、国際学会 ICCSA' 2011 (11th International Conference on Computational Science and Its Applications) に投稿し、極めて高い評価を獲得して受理された。[Takeshi Osoekawa, Yuji Mochizuki and Kazuhiro Yokoyama, Development of QC²AS --- a computer algebra system for symbolic quantum chemical computations, Proceeding of the 11th International Conference on Computer Science and Its Applications (ICCSA-2011), 2011年6月刊行予定]

2. 数式処理システムの開発

数式処理システムの開発は、1. で述べてきたような計算手法を、誰でも使えるような手段を提供するためのものであり、新たなパラダイムを構築するのに重要な役割を果たすものである。我々は、量子化学の記号計算に特化した数式処理システムとしてこのソフトウェアを独自に開発している。我々はこの数式処理システムを「QC²AS」と名付けた。名前は「Quantum Chemistry」と「Computer Algebra System」それぞれの頭文字を並べたものである。

本格的な実装を始める前に、国産数式処理システム Risa/Asir の開発者である神戸大学の野呂正行教授に、数式処理システムの基本的な設計や、構文解析器の作り方などについて助言をいただいた(2010年7月16日~17日)。また、QC²AS の知的財産権やライセンスについて、KNOPPIX Math の開発・管理を行っている福岡大学の濱田龍義氏に、随時助言をいただいている。

QC²AS は現在 C++ で書かれた約 1 万 6 千行のプログラムでできており、2010 年 9 月から実装を開始した。現在のバージョンは 0.2.0 で、Windows 上で動くバイナリが <http://www2.rikkyo.ac.jp/web/fullmoon/qc2as/> にて公開されている。コードは非公開であるが、ソフトウェアは BSD スタイルのライセンスの下、フリーウェアとして利用できる。

QC²AS の大きな特徴は、二電子積分などの量子化学の記号を、多項式の変数のように扱えることにある。このことと、数式処理システムとしての基本機能である多項式演算を組み合わせることで、ユーザが直観的に代数表式の操作を行えるようになってきている。また、1. で述べた計算手法も組み込まれており、式を関数に流すだけで、任意の式の簡約結果が得られる。ユーザはこの際、簡約アルゴリズムの詳細をわかっている必要はなく、アルゴリズムのブラックボックス化に成功している。

システムの設計は、オブジェクト指向言語である C++ のメリットを最大限活用しており、システムの各構成要素(クラス)の独立性を保ったまま拡張できている。クラスの独立性が高いことで、新たなクラスの追加や、既存のクラスの仕様変更などに強い設計になっている。

1. で述べたものに加えて、以下の学会・研究集会で QC²AS の設計や実装に関する発表を行ってきた。2010 年 12 月 1 日~3 日に京都大学数理解析研究所で開催された研究集会「Computer Algebra--Design of Algorithms, Implementations and Applications 2010」にて、開発の報告とシステムのデモンストレーションを行った。[小副川健、望月祐志、横山和弘、QC²AS—電子相関理論のための数式処理システムの設計とその利用、京都大学数理解析研究所講究録、巻号未定(2011年度中に刊行)] 2011 年 1 月 22 日~23 日に福岡大学で開催された「日本数式処理学会システム分科会研究会」で、設計についての詳細な発表を行った。[小副川健、望月祐志、横山和弘、QC²AS の設計について、日本数式処理学会システム分科会研究会、2011 年 1 月 22 日~23 日、福岡大学] 2011 年 3 月 21 日~23 日に神戸大学で開催された「Risa/Asir Conference 2011+第 3 回六甲博多計算代数会議」にて、設計と実装や開発環境に関する発表を行った。[小副川健、望月祐志、横山和弘、QC²AS の開発と設計、Risa/Asir Conference 2011・第 3 回六甲博多計算代数会議、2011 年 3 月 21 日~23 日、神戸大学]

また、東日本大震災の影響で実現しなかったものの、「数学ソフトウェアとフリードキュメント 12」(2011 年 3 月 19 日)で QC²AS の開発を通じた計算機代数の応用分野開拓の試みについての発表を行う予定であった。

研究発表 (研究によって得られた研究経過・成果を発表した①~④について、該当するものを記入してください。該当するものが多い場合は主要なものを抜粋してください。)

- ① 雑誌論文 (著者名、論文標題、雑誌名、巻号、発行年、ページ)
- ② 書 (著者名、出版社、書名、発行年、総ページ数)
- ③ シンポジウム・公開講演会等の開催 (会名、開催日、開催場所)
- ④ その他 (学会発表、研究報告書の印刷等)

- ①
- [1] 小副川健、望月祐志、横山和弘、
電子相関理論のための数式処理システムにむけて、
京都大学数理解析研究所講究録、巻号未定 (2011年度中に刊行)
- [2] Takeshi Osoekawa, Yuji Mochizuki and Kazuhiro Yokoyama,
Development of QC2AS --- a computer algebra system for symbolic quantum chemical
computations,
Proceeding of the 11th International Conference on Computer Science and Its
Applications (ICCSA' 2011), 2011年6月刊行予定
- [3] 小副川健、望月祐志、横山和弘、
QC²AS—電子相関理論のための数式処理システムの設計とその利用、
京都大学数理解析研究所講究録、巻号未定 (2011年度中に刊行)
- ④
- [4] 小副川健、望月祐志、横山和弘、
QC2ASの設計について、
日本数式処理学会システム分科会研究会、2011年1月22日~23日、福岡大学
- [5] 小副川健、望月祐志、横山和弘、
QC2ASの開発と設計、
Risa/Asir Conference 2011・第3回六甲博多計算代数会議、2011年3月21日~23日、神戸大学