

**立教大学学術推進特別重点資金(立教SFR)  
プロジェクト研究(自由プロジェクト研究)  
2011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、統一的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に、ソフトウェアを作成し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た。

## 1. 計算手法の理論的研究

前年度は「グレブナー基底を用いた代数表式簡約アルゴリズムの構築」を行い、これを基盤として「量子化学に表れる代数表式を計算機代数で扱う基礎理論」と「実用レベルの問題に対しても適用できる高速な代数表式簡約アルゴリズム」の構築に成功した。これらを、システムの成果とあわせて、国際学会 ICCSA' 2011 で発表した [T. Osoekawa, Y. Mochizuki and K. Yokoyama, "Development of QC2AS---a computer algebra system for symbolic quantum chemical computations," Proceedings of the 11<sup>th</sup> International Conference on Computational Science and Its Applications, pp.102-109, 2011].

これらの成果を基礎として、本年度の計算手法の理論的研究として「第二量子化演算子」「代数表式の因数分解」および「中間テンソル縮約」の3つのテーマに取り組んだ。

これらは全て量子化学分野の概念であるが、それぞれを計算機代数の対象として扱えるようにするために、概念・計算対象のモデル化を行い、モデル上の操作と元々の概念における操作の対応を取ることで研究を進めた。理論的な研究のみならず、実用レベルの問題へ適用することを意識し、モデル化の時点で効率的なアルゴリズムが実現できるように、合理的なモデル構築を念頭に置いて研究を行った。

最初のテーマ「第二量子化演算子」では、第二量子化演算子を変数と見なしたとき、非可換な積を持つ多項式環上の演算と等価な計算となり、計算機代数の対象物として定式化できる。また、2乗すると0になる、積の順番を交換すると余分な項がでる、といった性質も同様に計算機代数の操作に翻訳できる。これらの定式化を行い、また表現が異なっても等価な項を同定し、足し合わせたりできるように第二量子化演算子の項の「標準形」を提案し、その計算アルゴリズムを構築した。この成果を2.で述べる数式処理システム QC2AS の機能として実装を行い、2011年9月9日-11日に行われた「日本数式処理学会第20回大会」で発表し、併せてシステムのデモも行った [小副川健, 齋藤雅明, 望月祐志, 横山和弘, 第二量子化演算子の代数的扱いとその実装, 日本数式処理学会第20回学会大会, 2011年9月9-11日, 神戸大学瀧川記念学術交流会館, 2011].

次の2テーマ「代数表式の因数分解」と「中間テンソル縮約」では、代数表式の因数分解は中間テンソル縮約の前処理として行うものである。多項式の因数分解の問題は、変数が非常に多い場合に様々な分解の可能性があるが、この中から目的に合った分解表現を得ることは、一般には難問として知られている。本研究で対象とする問題では、変数の数は非常に多いが、代数表式の構造に着目して解析を行った結果、多変数ホーナー法を適用することで、実用的な時間で効果的な中間テンソル縮約をもたらす(理想的な)分解が得られることが分かった。多変数ホーナー法は多くの手法が提案されているが、本研究では [C. E. Leiserson, L. Li, M. Moreno Maza and Y. Xie, "Efficient Evaluation of Large Polynomials," Proc. International Congress of Mathematical Software—ICMS 2010, Springer, 2010] の方法を基に、問題に適した効率化を行った。これを2.で述べる QC2AS への実装と共に、2012年1月21日-22日に行われた「第4回日本数式処理学会理論分科会&システム分科会合同研究会」で発表を行い、デモも行った [小副川健, QC2AS の開発 (2012年1月), 第4回日本数式処理学会理論分科会&システム分科会合同研究会, 2012年1月21日-22日, 仙台青葉カルチャーセンター, 2012].

## 研究【経過・成果】の概要 つづき

## 2. 数式処理システムの開発

前年度は数式処理システム QC2AS の基本部分を構築し、前年度の理論的成果の一つである「代数表式の簡約アルゴリズム」を実装した。ここでは、計算の効率化のために、グレブナー基底を計算するブッフバーガー算法ではなく独自の項書き換え系アルゴリズムを実装したが、この効率化により、市販の数式処理システム (Mathematica 7) のグレブナー基底計算を用いた場合に比べて、10 万倍以上の計算効率化を達成した。これは QC2AS の設計と実装が高いレベルで成功したことを示す一つの証左と言える。本年度は、前年度の成果を引き継ぎ、QC2AS に機能拡張するという形で開発を続け、1. で述べた理論的研究の成果として構築したアルゴリズムの実装を行った。

第二量子化演算子とその代数的扱いの基本操作は 1. の研究で確立できたので、それを QC2AS でも利用できるように実装を行った。QC2AS では第二量子化演算子の入出力と、第二量子化演算子の非可換な積を含む基本演算を、既存の実装と互換性を保った形で実装した。また、1. で述べた第二量子化演算子の標準形を計算する関数も実装した。

代数表式の因数分解は、1. で述べた通り、中間テンソル縮約に適した形に自然に因数分解するアルゴリズムとして、Leiserson-Li-Moreno Maza-Xie の多変数ホーナー法を実装した。アルゴリズムには「単項式集合」と「超辺集合の選択戦略」をパラメータとして与える必要があり、単項式集合の与え方は [C. E. Leiserson, L. Li, M. Moreno Maza, and Y. Xie, "Parallel computation of the minimal elements of a poset," Proc PASC0'10, ACM Press, 2010.] を参考にした。因数分解した代数表式を中間テンソル縮約する関数も実装した。

開発言語は C++ で、本プロジェクト終了時点でのソースコードの行数は 23012 行である。これは同程度の機能を持つ数式処理システムのおよそ半分程度である。少ないソースコードで多くの機能を実現することで、保守を容易にし、バグを入れる余地を少なくすることができると考えている。さらに、ソースコードが少ない利点として、プログラムの処理の流れが把握しやすくなり、無駄な処理を省くなどすることでソフトウェア全体のパフォーマンスを向上させることができることも挙げられる。

機能拡張を続けても QC2AS のソースコードが肥大化しない一番の要因は、QC2AS の設計が柔軟で、オブジェクト指向言語における数式処理システムの設計として、非常に適していたからと考えている。この設計方針は数式処理システムのみならず、他のソフトウェアの設計としても再利用可能である。これらの情報を 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」で発表を行い、内容は日本数式処理学会学会誌「数式処理」Vol. 18, No. 1 に採録された [小副川健, 望月祐志, 横山和弘, QC2AS の設計について, 日本数式処理学会誌 数式処理 Vol. 18, No. 1, pp16- 19, 2011].

本研究開発は計算機代数・数式処理の応用研究として、さらには本格的な数式処理システム開発として高く評価され、2 件の招待講演を受けた [小副川健, 量子化学計算のための数式処理システム QC2AS の開発, 計算機代数システムの進展, 2011 年 8 月 29- 31 日, 九州大学数理学研究院, マス・フォア・インダストリ研究所] [小副川健, 量子化学計算のための数式処理システム QC2AS の紹介, 数学ソフトウェアとフリードキュメント XIII, 信州大学, 2011 年 9 月 27 日].

**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図書 (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

●国際学会

「Development of QC2AS---a computer algebra system for symbolic quantum chemical computations」

T. Osoekawa, Y. Mochizuki and K. Yokoyama, 「Proceeding of the 11th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA-2011)」, pp. 102- 109, 2011.

2011年6月20- 23日, The University of Cantabria, Santander, Spain にて口頭発表.

●口頭発表・講究録

「電子相関理論のための数式処理システムの開発」

小副川健, 「京都大学数理解析研究所研究集会 数式処理研究の新たな発展」, 2011年7月6- 8日, 京都大学数理解析研究所.

この発表に関連した論文を「京都大学数理解析研究所講究録」に採録予定 (巻号未定).

●口頭発表・講究録

「QC2ASの開発」

小副川健, 「第4回日本数式処理学会理論分科会&システム分科会合同研究会」, 2012年1月21日- 22日, 仙台青葉カルチャーセンター.

この発表に関連した論文を「日本数式処理学会学会誌 数式処理」に採録予定 (巻号未定)

●口頭発表・講究録

「第二量子化演算子の代数的扱いとその実装」

小副川健, 齋藤雅明, 望月祐志, 横山和弘, 「日本数式処理学会第20回学会大会」, 2011年9月9- 11日, 神戸大学瀧川記念学術交流会館.

この発表に関連した論文を「日本数式処理学会学会誌 数式処理」に採録予定 (巻号未定).

●招待講演・講究録

「量子化学計算のための数式処理システム QC2ASの開発」

小副川健, 「計算機代数システムの進展」, 2011年8月29- 31日, 九州大学数理学研究院, マス・フォア・インダストリ研究所.

研究集会の記録は「九大数理グローバルCOEプログラムMIレクチャーノート」に採録された (Vol. 35, pp. 122- 130).

④

●招待講演

「量子化学計算のための数式処理システム QC2ASの紹介」

小副川健, 「数学ソフトウェアとフリードキュメント XIII」, 信州大学, 2011年9月27日.