2007－HPC－112 (7)
2007／9／9

固有値解析とアンダーソン局在

村上 弘

首都大学東京 数理情報科学専攻

三重対角あるいは帯幅の狭い行列のサイズが大きく、要素の値に乱れがあるときには、固有ベクトルは局在化を起こし、各固有ベクトルの要素は極めて狭い区間でだけ値を持つようになる。この現象は固体物性科学の分野では「アンダーソン局在」として知られている。この現象の固有値問題解法への応用を考察する。

The Eigenvalue Analysis and the Anderson Localization

Murakami Hiroshi

Department of Mathematics and Information Sciences,
Tokyo Metropolitan University

All eigenvectors of a tridiagonal matrix or a narrow banded matrix, when the size of a matrix is huge and its elements contain the randomness, will be localized such that for each eigenvector those elements which have values are concentrated in a very narrow interval. This phenomena the Anderson localization has been known in the field of material science of solids. The applications of the phenomena to the fast solution method of the eigenproblem would be considered.

1 はじめに

Anderson 転移 (局在) は固体物性論の分野で 1977 年に Nobel 物理学賞を受賞した Anderson P. W. の有名な現象と理論 [4] である。

この現象は行列の固有値解析と関連が深く、理論研究にも大次元行列の数値対角化が行われているようである。

物性理論から離れた数値解析、数値解法の分野の固有値計算法に対し、Anderson の局在化の現象はこれまであまり注目されてこなかったように思われる。今回この現象について簡単に紹介し、局在化が示唆するもの、1) 固有値解法の解析との関係の可能性、2) 線形計算の反復法の性質との関係性や、3) 固有値問題の高速な解法の導出の可能性、など応用を模索してみたい。

2 導入

いま大次元の固有ベクトルが「ごく狭い範囲に集中した要素だけが (無視できない大きさの) 値を持つ」とき、固有ベクトル (状態) が局在化していると云う。ここでの値の大きさは相対的なものである (規格化すれば絶対的)。

三重対角行列とその固有ベクトルに対して普通に脳裏に沸いてくるイメージは、おそらく一次元 Laplacian の三点差分近似による行列と正弦波状の固有ベクトルで局在化していないものであろう。

三重対角行列の固有ベクトルが局在化を起こし得ることを明瞭に指摘している数値解析・数値解法の教科書は (あまり?) 見かけない。

ランダムな密行列 A の固有ベクトルを Householder 変換で求める場合を考えてみる。変換された三重対角行列 T の固有ベクトルが局在化していたとしても、逆変換で戻した A の近似固有ベクトルを見ても気がつかない。

Anderson のモデルは近所と相互作用を持つ格子の...(省略). スケーリングの議論から Anderson のモデルでは (低次元系である) 空間一、二次元の系は乱雑度によらずに全状態が局在化するが、三次元系では乱雑度によって非局在状態が生じる (Anderson 転移) とされる。

三重対角行列は隣接相互作用を持つ一次元系に相当し、要素に乱れがあるとき行列の次数が大きいと固有ベクトルは全て局在化する。(局在化は無限系に近い大規模行列で発現する。) 状態が局在を生じた場合、格子上の値はある「局在長」を尺度として局在中央からの距離に対して指数関数的減少をするとされる。

以下では、Anderson モデルの行列に限らず、低次

元系的な帯幅の狭い行列が要素に強い乱れを持つと、行列次数が大きくなると全ての固有ベクトルが局在化すると仮定している。(現時点ではこの作業仮説には疑問がある。)

> この作業仮説が誤っていても、もしも算法自身が局在化の成否を確かめられるのであれば間違いを犯すリスクがない。算法の性能のテストにランダム行列を用いる場合、行列の固有ベクトルが局在化すると、局在化のない場合に比べて性能が高目に出てしまう性質があることを問題とする場合には、この作業仮説に頼らずに直接 Anderson モデルの行列を用いてやればそれを実際に示せるはずである。

特異値の計算においても局在化現象が利用できる。乱雑性を持つ二重対角行列の最小特異値の限界評価が、特異ベクトルの局在性を仮定すれば高速にできるという報告が最近有った [3]。

固有ベクトルが局在化する場合にはその知識を利用して、情報を圧縮できる可能性があるだろう。

3 帯行列の場合の予想と疑問点

行列の帯幅を広げると、どうなるだろうか? おそらく帯幅が増やした倍率の程度だけ局在化の領域も長くなり、帯幅一定のまま行列の次数 N を増せば 1 次元系に該当すると予想される。つまり乱れがあると、全状態はほぼ確実に局在化するであろう。行列の次数 N に対して、帯幅を $O(N^{\alpha})$ とする場合、$\alpha = 0$ では一次元系的、$\alpha = 1/2$ では二次元系的、$\alpha = 2/3$ では三次元系的になると予想される。

疑問な点は、行列の次数 N が大きいが有限であるときに局在化の程度は、要素の乱れの強さの程度と N に依存するのではないか、そうして乱れの強さに対して N の大きさが不十分であると局在化は起きないかあるいは起きても不完全なのではないかと予想できる。どういった関係になっているかを (これは既に解決されている可能性があるが) 調べておく必要がある。

4 行列算法の性能評価への影響

従来のアルゴリズムの性能試験や計算量に対し、「局在化の発生」を前提に考慮すると大きな影響を持つ可能性が有る。例えば、性能のベンチマークや算法の性質を調べるために乱数を与えて得られた結果は、乱数的な性格が無い場合に対しては、適切な評価になっていない可能性が有る。

4.1 局在化された固有解の近似解法

局在化が起きていると、近似固有解を少ない計算量で求め得る。このためには、局在長の推定が必要となるか、または試行により決める。固有ベクトルを局在性に合わせて局在化範囲にない要素を零と置けば、極めて規模の小さい固有値問題が得られる。その小規模な固有値問題の固有ベクトルを求めて、仮定した局在化の傾向を満たしているものを選べば良い。より確実には、得られた固有ベクトルが元の問題の近似固有ベクトルになるかを判定すればよい (これも行列ベクトル積は添字が小規模な範囲に制限されるので高速にできる)。

4.2 算法の演算量の乱数データに基づく評価への影響

行列の次数が大きい場合、三重対角行列に対する算法 (例えば QR 反復法) は、行列要素がランダム性を持ち固有ベクトルが局在化している場合は局在化の無い場合に比べて性能が持ち上げられて有利となっている可能性はないだろうか? もしもそのようなことがあれば、ランダムなテスト行列を用いた評価結果は、ランダムでない問題に対しては性能の過大評価になる。

4.3 Lanczos 法の性質との関連可能性

ランダム性を持つ三重対角行列に対する固有ベクトルの局在化を考慮することで、Lanczos 法 (あるいは Krylov 部分空間法の系統の算法) の性質 (収束性、不安定性、等) に対して、洞察が得られないだろうか?

4.4 分割統治法による固有値解法との関係性

三重対角/帯行列に対しての分割統治法のうまく行く根拠が出てこないか。(局在化の位置により、固有ベクトルを一列に順序を付けて並べることができる....) 分割された部分問題のなかで、固有ベクトル

の台が分割の境界線をまたがないものについては、分割された部分問題の中での固有ベクトルが正しい固有ベクトルになる。するとごく一部の固有ベクトルを除いて、正しい近似固有ベクトルが得られる。そのような境界をまたぐ固有ベクトルについては、境界線をまたいだ (広めの) 台を要素位置に仮定して、小次元の固有値問題を解くことで予め求めておくことができる。この方法による再分割は、ある段階より先になると局在長との関係でそれ以上の適用ができなくなる

局在が起きている場合は、このようにすれば固有ベクトルを高速に求めることができそうだが、局在が起きていなければ、このような簡単なやりかたではうまくいきそうにない。

5 おわりに (おわび)

非常に不十分な理解と検討の段階でしかありませんので、本件予稿内容には間違いが非常に多いであろうと思います。

今後、暇を見て少しずつこの方面を調べようかと思っています。

収集した Anderson 局在 (転移) の参考文献や Web の URL を一応挙げておきます。

参考文献

[1] MACHIDA, Manabu, "Note on Anderson Localization", 資料"2003 年度宮下研夏の勉強会", URL(http://hatano-lab.iis.u-tokyo.ac.jp/machida/doc/localization_02.pdf)

[2] Junko Yamasaki, "A New algorithm of Analyzing the Anderson Localization",(MASTER THESIS), URL(http://hatano-lab.iis.u-tokyo.ac.jp/guidance/thesis/shuron2001/thesis_yamasaki.pdf)

[3] 木村欣司, 高田雅美, 坪井洋明, 中村佳正, 「特異値分解ライブラリのための最小特異値見積もり公式について」, 日本応用数学会「行列・固有値の解法とその応用部会」, 第 3 回研究会,2007 年 7 月 31 日, 旭川国際会議場.

[4] P.W.Anderson, "Absence of Diffusion in Certain Random Lattices", *Phys. Rev.*, **109**, (1958), 1492–1505.

[5] 福山秀敏, 「アンダーソン局在」, 物理学最前線 2, 共立出版 (1983).

[6] 川畑有郷, 「アンダーソン局在のスケーリング理論」, 物理学最前線 13, 共立出版 (1985).

[7] 小谷眞一, 「ランダム・ポテンシャルの問題」, 数学, **38**, 岩波書店 (1986), 53–61.

[8] 氷上忍, 「ランダム・ポテンシャルの問題に対する補足」, 数学, **38**, 岩波書店 (1986), 61–65.

[9] 小谷眞一,(論説) 「ランダム・ポテンシャルの問題 II」, 数学, **38**, 岩波書店 (1986), 193–201.

[10] 第 14 回日本数学会彌永賞 (小谷眞一), 「ランダムなポテンシャルをもつ Schrödinger 作用素のスペクトル理論」, 数学, **38**, 岩波書店 (1986), 265.

[11] 福島正俊, 「ランダム Schrödinger 作用素に関する小谷理論」, 数学, **38**, 岩波書店 (1986), 266–269.

[12] 小沢真, 「ランダム媒質のスペクトル」, 数学, **44**, 岩波書店 (1992), 306–319.

[13] 長岡洋介, 安藤恒也, 高山一, 「局在・量子ホール効果・密度波」, 1 章 1 節–2 節, 現代の物理学 18, 岩波書店 (1993).

[14] 大槻東巳, 「不規則電子系の金属-絶縁体転移」, 現代物理学最前線 2, 共立出版 (2000), 75–142.

[15] 小野嘉之, 「金属絶縁体転移」, 5 章–6 章, 朝倉物性物理シリーズ 1, 朝倉書店 (2002).