対称行列の固有値と固有ベクトル

1M－3

新上 和正
(株)ATR 環境適応通信研究所

量子化学の分野では、しばしばハミルトニアンに相当する対称行列の要素がそれを解いた時の固有ベクトルに依存する時の固有ベクトルを得る問題に出会う。この問題を最適化問題に還元して固有ベクトルを解く方法を紹介する。

§1. 始めに

分子などの電子状態を計算するのに電子状態に依存した非線形の Schrödinger 方程式を解く場合が生じる。例えば、Schrödinger 方程式は行列で与えられ、その行列要素は密度行列要素からなり、更にその要素は固有ベクトルから作られる。その固有ベクトルは元の Schrödinger 方程式の固有ベクトルという具合に。固有ベクトルを Self consisitent に得る方法として、Self consisitent な解を得る前後で適当に密度行列を混ぜる方法は、時々解が収束しない状況に陥る事がある。この状況を解決する1つの方法を紹介する。

§2. 最適化問題としての固有値問題

Schrödinger 方程式を行列 $F(c_{i\mu})$ で表す。その固有ベクトル $c_{i\mu}$ は $\sum_j F_{ij}(c_{i\mu})c_{j\mu} = \lambda_\mu c_{i\mu}$ を満たす。この固有値問題は、

$$E(c_{i\mu}) = \frac{1}{2}\sum_{\mu(\neq)\nu}|\sum_{ij} c_{i\nu}F_{ij}(c_{i\mu})c_{j\mu}|^2 + \sum_{\mu}|\sum_{i} c_{i\mu}^2 - 1|^2 \tag{0.1}$$

をコスト関数と取れば、$E(c_{i\mu})\ (=0)$ となる $c_{i\mu}$ が求める固有ベクトルとなる。右辺の第一項は F に対する (規格化されていない) 固有ベクトルであることを保証し、第二項は規格化ベクトルであることを保証する。

§3. 最適化問題をどう解くか

(1) 高次元アルゴリズム [1),2)] と (2) 準ニュートン法、共役勾配法を組み合わせます。コスト関数を2次形式で近似できることを利用する (2) は、最適解に近い $c_{i\mu}$ から出発する場合に使えます。そこまで $c_{i\mu}$ を持ってくるのに (1) を使う事 [3),4)] にします。(1) はコスト関数の最小値を荒っぽく ($\simeq 10^{-2}$) 探すのには適していますが、精度がありません。一方 (2) は精度 ($\simeq 10^{-12}$)[5)] がありますが、上述の欠点があります。これらの長所を組み合わせ、欠点を補うことによって固有値問題を解いて行きます。

手続きは、

(p_1) (1) により $0<E(c_{i\mu})<\epsilon_1$ になる $c_{i\mu}$ を計算する。

(p_2) それを出発点として (2) を実行する。

(p_3) 解を求めるのに失敗すれば、$0<\epsilon_2<\epsilon_1$ となる ϵ_2 選んで再度 (p_1)(p_2) を実行する。一方 (p_2) で解が求まれば終了する。同様な手続きを採用することで原子の平衡位置座標も効率よく計算することが出来ます。

§4. 結論

前の報告 [3),4),5)] では式 (0.1) で F が $c_{i\mu}$ 依存性を持たない場合で高次元アルゴリズムを使って固有値問題を解いた結果を報告しました。その時には、コスト関数の $c_{i\mu}$ 依存性が単純で (2) でもある程度問題を解くことが出来ましたが、今回では F の $c_{i\mu}$ 依存性のために (2) が成功するためには (1) がどうしても必要だということが分かりました。しかし、(1) では微分値である $\partial E(c_{i\mu})/\partial c_{i\mu}$ を必要とするために、計算時間が掛かるという欠点があります。今後、この計算量を減らす工夫をする予定です。原子の平衡位置の計算でも (p_1) に相当する手続きが非常に重要な役割を果たします。この場合には電子の場合に比べ、計算量は少なくて済みます。

参考文献

1) 新上和正, "高次元アルゴリズム", bit, vol. 31, No. 7, pp. 2-8(1999).
2) 新上和正, "高次元アルゴリズム -問題を解く一つの方法-", 日本ファジー学会誌, vol. 11, No. 3 ,pp. 382-395(1999).
3) 野口 孝明, 新上 和正, "行列の固有値と近似解法について", 情報処理学会第55回秋季大会, 3G-3(1997).
4) 新上 和正, 野口 孝明, "時間変動する対称行列への近似固有値解法の適用", 情報処理学会第55回秋季大会, 3G-4(1997).
5) 野口 孝明, 新上 和正, "対称行列の固有値問題における SD 法と Newton 法の収束性について", 情報処理学会第56回春期, 2L-6(1998).

Eigenvalues and eigenvectors of symmetric matrix, SHINJO Kazumasa
ATR Adaptive Communications Research Labs., 2-2 Hikaridai, Seika-cho, Soraku-gun, Kyoto 619-0288, JAPAN.