

ハイブリッド計算に適した固有値問題の解法

福井 哲夫 (詫間電波工業高専)、野田 松太郎 (愛媛大学工学部)
(Tetsuo FUKUI) (Matu-tarow NODA)

1 はじめに

本論では固有値問題を解くための今までとは異なった視点からのアプローチについて報告する。今後、この方向が有力な固有値問題に対する解法になるか否かについては、いまだ不明確な点が多々ある。しかし、現在の固有値問題の解法の大半が数値計算のみによるもので、それ特有の問題点(ある種の問題に対して精度が劣化したり計算量が非常に多くなったり)を含んでいることや、コンピュータの進歩と共に最近広く用いられつつある数式処理的手法とはあまりに異質であるなどの点で、新しい固有値問題へのアプローチも重要であると思われる。

ここで提案する方法は、物理学(特に量子力学)の分野で定着している変換技法の一つを一般の固有値問題の解法として見直そうとするものである。量子力学と線形代数との関連は竹内 [1] に詳しく述べられている。特に、次の点は注意しておく。

量子力学ではある系の状態を線形空間の一つの元に対応させ、観測量を測る演算子を作用素に対応させる。今、量子力学の作用素を H 、状態ベクトルを ψ とし、 $||\psi|| = 1$ と仮定する。状態 ψ で H で表される物理量を観測すれば必ず観測値 λ が得られる。すなわち

$$H\psi = \lambda\psi \quad (1.1)$$

と書ける。ここで観測値は実数なので、物理量を表す H はエルミート共役作用素となる。線形代数の言葉でいうなら、エルミート共役な行列 H の固有値問題を解くと固有値 λ と対応する固有ベクトル ψ が得られるといえる。

対象となる粒子がスピン(粒子の自転運動のようなもの)を持つと、状態ベクトルにはスピンの要素を取り入れる必要がある。陽子、電子などの粒子にスピン $1/2$ を持つ。そのスピンには上向きのもので下向きのものであり、各々ヘリシティ $+$ と $-$ と表わす。したがってスピン $1/2$ の粒子の状態は

$$\psi\left(+\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi\left(-\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

となる。そこで作用素 H の対角部分はヘリシティ $+$ の状態をヘリシティ $+$ の状態に、ヘリシティ $-$ の状態をヘリシティ $-$ の状態に移し、非対角部分はその逆に対応する。さらに、状態ベクトルには正エネルギーに対応する部分と負エネルギーに対応する部分(これらはある種の表現では各々電子と陽電子に対応する)が含まれ複雑になっていく。スピン $1/2$ の場合、考える系の状態 ψ は 4 成分スピノルに対応し、

$$i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} = H\psi(t), \quad \hbar = \text{プランク定数} / 2\pi, \quad (1.2)$$

なる方程式を満たす。電子の運動を表わす方程式 (1.2) は Dirac 方程式と呼ばれる。この場合 H は 4×4 行列で、適当なユニタリ変換により 2 つのエネルギー固有値に対応する 2 次元固有空間へスペクトル分解される。 H が弱い外場（電磁場など）を含むと、この分解にはずれが生じる。このずれたスペクトル分解を近似的に求めようというのが、本稿で考察する Foldy-Wouthuysen-Tani 変換 [2]（以下 FWT 変換と略する）である。特に、時間変化を考えない定常状態では Dirac 方程式は E を未知として

$$H\psi = E\psi \quad (1.3)$$

なる固有値問題に帰着する。

以下では、FWT 変換を一般の行列の固有値問題に適用することを考える。FWT 変換により、与えられた行列をブロック対角行列に変換し固有値を求める。以下、FWT 変換の概要を紹介し、一般の行列の固有値問題に適用する場合の可能性と問題点について述べる。

2 FWT 変換

FWT の対象とする 4×4 列エルミート行列 H を

$$H = m\beta + \mathcal{E} + \mathcal{O}, \quad (2.1)$$

とする。 $\beta, \mathcal{E}, \mathcal{O}$ はすべて 4×4 行列であり

$$\beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0_2 \\ 0_2 & -I_2 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{E} = \begin{pmatrix} *_2 & 0_2 \\ 0_2 & *_2 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{O} = \begin{pmatrix} 0_2 & *_2 \\ *_2 & 0_2 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

ただし、 I_2 は 2×2 単位行列、 $*_2$ は 2×2 非零正方行列、 0_2 は 2×2 零行列を表す。(2.1) の右辺第 1 項は質量項と呼ばれており、量子力学では粒子の質量 m は他の項に比べて大きい。FWT 変換では (2.1) に対してユニタリ変換を行い、正エネルギー部分（通常 ψ の上 2 成分）の式を分離する。ユニタリ変換は次のように表される。

$$\tilde{\psi} = e^{iS}\psi$$

$$\tilde{H}\tilde{\psi} = e^{iS}He^{-iS}\tilde{\psi} = E\tilde{\psi} \quad (2.3)$$

ここで S はエルミート行列であり、 S が微小なら次の良く知られた展開公式

$$e^{iS}He^{-iS} = H + i[S, H] + \frac{i^2}{2!}[S, [S, H]] + \cdots + \frac{i^n}{n!}[S, [S, \cdots, [S, H] \cdots]] + \cdots \quad (2.4)$$

が成り立つ。ここで $[A, B]$ は交換子を表し、 $[A, B] = AB - BA$ である。(2.1) の H に対して変換 (2.3) を適用する。この時、FWT 変換の目的は非対角ブロックを 0 に近づけることなので、 S として $\mathcal{O}$ を消去するように

$$\mathcal{O} + i[S, m\beta] = 0 \quad (2.5)$$

を満たすように選ぶ。(2.5) を満たす S は

$$S = -i \frac{\beta \mathcal{O}}{2m} \quad (2.6)$$

となり、オーダー $O(1/m)$ であることが分かる。FWT 変換された $\tilde{H}$ を、

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= H + i[S, H] - [S, [S, H]]/2 - i[S, [S, [S, H]]]/6 + \dots \\ &= m\beta + \tilde{\mathcal{E}} + \tilde{\mathcal{O}} \end{aligned}$$

とおく。ここで $\tilde{\mathcal{E}}$ はブロック対角行列、 $\tilde{\mathcal{O}}$ はブロック非対角行列を表わす。このとき、(2.6) から $\tilde{\mathcal{O}}$ の大きさは $O(1/m)$ の項が最大となる。さらに変換された行列 $\tilde{H}$ に対して (2.6) を満たす S を決め直し、変換 (2.3) を再度適用すると新しいブロック非対角行列の要素の大きさは $O(1/m^2)$ になることが分かる。このようにして上の操作を繰り返すとブロック非対角行列は微小行列になり、行列の近似的ブロック対角化が完成する。これが FWT 変換である。上の FWT 変換の要点はつぎのようにまとめられる。

1. 与えられた行列 H の質量項 ($m\beta$)、ブロック対角項 ($\mathcal{E}$)、ブロック非対角項 ($\mathcal{O}$) への分解
2. $\mathcal{O}$ -項を消去するようにユニタリ変換を e^{iS} を定める。 S は $O(1/m)$ となる。
3. ユニタリ変換を行い $\tilde{H}$ を求め、 $H = \tilde{H}$ とする。
4. 1 ~ 3 を $\mathcal{O}$ -項が十分小さくなるまで繰り返し、 H をブロック対角行列に変換する。

3 FWT 変換の任意の行列の固有値解法への拡張

2 で述べた過程を一般化する場合に次のような拡張が必要である。固有値を求めるべく与えられた行列の大きさは 4×4 であるとは限らず、大きさが奇数の場合もある。当然、行列 β や $\mathcal{O}$ の大きさも奇数になる。FWT 変換の β に含まれる 2 つのブロック単位行列 I_j は同じ大きさの単位行列であるが、この制約は保つ必要がない。また、これに対応して $\mathcal{O}$ 行列もブロック非対角ではあっても正方行列にはならない。よって、(2.2) は次のように拡張することができる。

$$\beta = \begin{pmatrix} I_{jj} & 0_{jk} \\ 0_{kj} & -I_{kk} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{E} = \begin{pmatrix} *_{jj} & 0_{jk} \\ 0_{kj} & *_{kk} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{O} = \begin{pmatrix} 0_{jj} & *_{jk} \\ *_{kj} & 0_{kk} \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

ここで、 $I_{jk}, 0_{jk}, *_{jk}$ 等は各々 $j \times k$ の単位行列、零行列、非零行列を表わすとする。このようにしても、 S は $\mathcal{O}$ -項を消去するように決めればいいので、(2.6) は変更しなくてよい。 $j=1$ と取ると、第1固有値とその他の固有値問題の直積に分割することが出来る。

以上より FWT 変換を一般の行列に適用する場合のアルゴリズムは以下のようにまとめられる。

アルゴリズム FWT 変換による固有値問題

入力: $n \times n$ エルミート共役行列, H ; 収束パラメタ, ε

方法

Step.1 $p := 0$; $H_p := H$;

Step.2 H_p を $m\beta + \mathcal{E}_p + \mathcal{O}_p$ に分割。

Step.3 $\mathcal{O}_p$ の各要素の絶対値 $< \varepsilon$ なら、 $m\beta + \mathcal{E}_p$ を出力。さもなければ、Step.4 以下を計算。

Step.4 S_p を $\mathcal{O}_p + i[S_p, m\beta]$ を満たすように決定。すなわち

$$S_p := -i\beta\mathcal{O}_p/2m \quad (3.2)$$

Step.5 ユニタリ変換

$$H_{p+1} := H_p + i[S_p, H_p] - [S_p, [S_p, H_p]]/2 - \cdots + i^q [S_p, [S_p, \cdots, [S_p, H_p] \cdots]]/q! \quad (3.3)$$

を行う。

Step.6 $p := p + 1$; Step.2 へ。

なお、Step.2 の分割は $n \times n$ エルミート共役行列 H を

$$H = \begin{pmatrix} A_{jj} & Q_{jk} \\ R_{kj} & B_{kk} \end{pmatrix}, \quad \text{ただし } R_{kj} = Q_{jk}^* \text{ (エルミート共役)}$$

とすると、(3.1) を用いて

$$H = m\beta + \begin{pmatrix} (A - mI)_{jj} & 0_{jk} \\ 0_{kj} & (B + mI)_{kk} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0_{jj} & Q_{jk} \\ R_{kj} & 0_{kk} \end{pmatrix}$$

と変形することを意味する。

このアルゴリズムには次のような特徴がある。

- **Step.5** のユニタリ変換で用いる交換子 $[S_p, H_p]$ の計算は簡単で、かつ無駄がない。
- **Step.3** の数値評価以外の全過程は記号的に計算することが可能である。
- m, q の設定が必要である。

以下に簡単な計算例を通して手法の実際と、各パラメタの選択について考察する。手法の概略を見るために、 H として簡単な次の 2×2 実対称行列を考える。

$$H = \begin{pmatrix} 10 & 1 \\ 1 & -10 \end{pmatrix}, \quad \varepsilon = 10^{-7}, \quad m = 10$$

この行列の固有値は $\sqrt{101} \simeq \pm 10.04987$ である。上の設定より

$$H_0 = H, \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{E}_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathcal{O}_0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

であり、

$$S_0 = -i \frac{\beta \mathcal{O}_0}{2m} = i \begin{pmatrix} 0 & -1/20 \\ 1/20 & 0 \end{pmatrix}$$

となる。よって、

$$H_0 + i[S_0, H_0] = \begin{pmatrix} 101/10 & 0 \\ 0 & 101/10 \end{pmatrix}$$

$$H_0 + i[S_0, H_0] - [S_0, [S_0, H_0]]/2 = \begin{pmatrix} 201/20 & -1/200 \\ -1/200 & -201/20 \end{pmatrix}$$

行列が対称なので、(3.3) の q の変化による対角項と非対角項のみを書くと

q	対角項の絶対値	非対角項の絶対値
1 10.1	(= 101/10)	0
2 10.05	(= 201/20)	0.005 (= 1/200)
3 10.0498	(= 60299/6000)	0.0033333 (= 1/300)
4 10.0499	(= 80399/8000)	0.00332917
5 10.0499		0.00333

となる。簡単のため、FWT 変換の展開次数を $q = 2$ と固定し変換回数 p を行列の非対角項の大きさが微小量 ε 以下になるまで増加させる。すなわち、

$$H_1 + i[S_0, H_0] - [S_0, [S_0, H_0]]/2 = \begin{pmatrix} 201/20 & -1/200 \\ -1/200 & -201/20 \end{pmatrix}$$

として、計算を続行する。

$$O_1 = \begin{pmatrix} 0 & -1/200 \\ -1/200 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_1 = i \begin{pmatrix} 0 & -1/4000 \\ 1/4000 & 0 \end{pmatrix}$$

再び $q = 2$ まで計算し、結果を H_2 とする。同様に H_3 を求めると

$$H_2 = \begin{pmatrix} 10.04983 & 1.6 \times 10^{-5} \\ 1.6 \times 10^{-5} & -10.04983 \end{pmatrix}, \quad H_3 = \begin{pmatrix} 10.04987 & -8.2 \times 10^{-8} \\ -8.2 \times 10^{-8} & -10.04987 \end{pmatrix}$$

となり、 H_3 の非対角項の大きさは ε 以下になる。この時、対角項は固有値の極めて良い近似を与えている。

次に、FWT 変換を固有値問題に適用した場合のパラメタとこの手法の適用可能行列との関連について若干の考察をする。まず、上の 2×2 実対称入力行列 H に対して FWT 変換が収束する条件をみる。以下の議論のため、行列を次ぎのようにおく。

$$H = \begin{pmatrix} A & Q \\ Q & B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m+P & Q \\ Q & -m+R \end{pmatrix}.$$

収束条件は $m > 0$ として

$$m > |P|, |R|, |Q|$$

である。すなわち

$$m > |A - m|, m > |B + m|, m > |Q| \quad (3.4)$$

を満たす m の存在が必要であり、FWT 変換を適用し得る行列は

$$A > 0 \text{ かつ } B < 0 \quad (3.5)$$

のものとなる。パラメタ m は次の条件を満たすように選ぶ必要がある。

$$m > \max(A/2, -B/2, |Q|). \quad (3.6)$$

4 むすび-FWT 変換は良い固有値問題の解法になるか？

以上で FWT 変換を一般の行列の固有値問題の解法とすることを考えてきた。はじめにも述べたように、本稿で述べた手法はいまだアイデアを少し拡張した程度のものである。しかし今後解析をより詳しく行い、計算遂行上必要な諸パラメタ（質量項の係数 m 、FWT 変換の展開次数 q 、打ち切りパラメタ ε と変換回数 p の関係）に関する考察を行いそれらの有効な設定ができれば、このアルゴリズムは

- 数値計算で開発された固有値問題のアルゴリズムとは全く異なっている
- 計算の手間は交換子の繰り返し計算のみで済み
- 収束判定での数値評価以外は記号計算が可能である
- 特に記号処理システムへのインプリメントは極めて容易である

などの特色がある。なお、

また、FWT 変換、にとどまらず物理学、特に量子力学の分野で開発されてきた様々な計算手法について、次のことが指摘し得る。これらの計算の大半は筆算による記号計算や式変形を中心にしており、従来の数値計算のみの分野では十分に活用されていなかった。またファイマングラフの計算などは数式処理システムの開発や発展のために用いられたが、それ以後物理的計算の多くで数式処理を道具として応用した研究はなされているが、新しいアルゴリズム開発などのために物理の財産を用いようとする視点はあまりなかったようにも思われる。その面でも本稿の手法の今後の発展が期待される。

参考文献

- [1] 竹内外史, "線形代数と量子力学", 裳華房, 1981.
- [2] A. Messiah, "Quantum Mechanics Vol.2", pp.940-948, North-Holland, 1970.
J.D. Bjorken and S.D. Drell, "Relativistic Quantum Mechanics", McGraw-Hill, 1964
他