

ニューラルネットワークに基づくシュレディンガー方程式の数値解法

電通大 佐野 達司

解析的に解けないシュレディンガー方程式の固有状態を求めるためには変分法が一般に用いられる。例えば、有限要素法は有力な数値解法の一つである。しかしながら、膨大な数の節点が必要であり、大次元対角化は避けられない。Lagarisらは選点法と階層型ニューラルネットワーク(パーセプトロン)を組み合わせた、変分法に基づかない数値解法を提案した[1]。彼らの方法では波動関数をパーセプトロンによりシミュレートし、評価関数の2乗誤差和を最小にする最適なネットワークパラメータを準ニュートン法により探索している。しかしながら、これらの評価関数の2乗誤差和は多峰性関数である場合も多いと考えられ、そのような場合には局所的探索法では大域的最小解を求めるのは困難となる。これらの問題に対して、中西と菅原はミクロ遺伝的アルゴリズムを用いることにより、良い収束性が得られることを報告している[2]。本研究においては、これらの問題に対処するためにカオス的最急降下法を用いた。いくつかの系に対してテスト計算を試みて、この方法の固有状態解への収束性能を検討した。

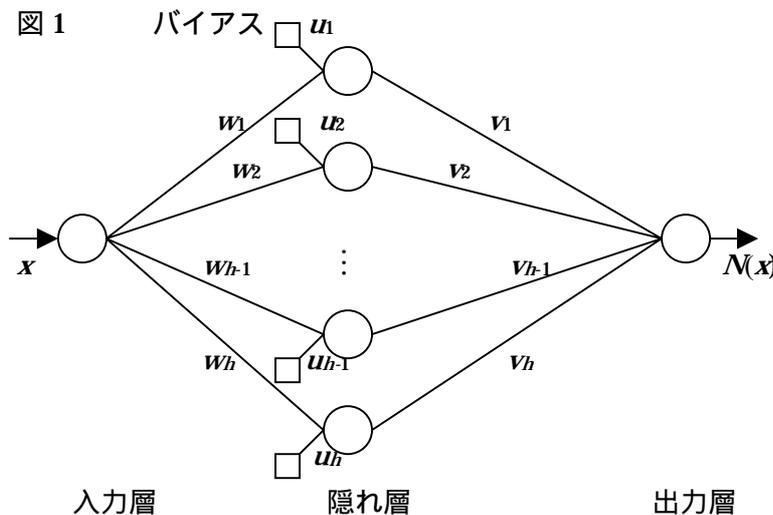
選点法と3層パーセプトロン(3LP)を組み合わせた数値解法では、固有値問題

$$H\Psi(x) = \epsilon\Psi(x)$$

の固有値および固有関数を求めるために、3LPを用いて境界条件をを満足する試行関数を組み立てる。隠れ層のユニットからの出力としてシグモイド関数

$$\tau(z) = \frac{1}{1 + e^{-kz}}$$

を用いれば、図1のような3LPでは入力を x 、隠れ層のユニット数を h 、結合荷重 w_k 、 v_k 、バイアス u_k とするとネットワークの出力は



$$N(x, w, u, v) = \sum_{i=1}^h v_i \tau(w_i x + u_i)$$

で与えられる。ここで、領域を格子点に離散化して、これらの入力 x_p に対する出力 $N(x_p, w, u, v)$ から構成される $\Psi(x_p, w, u, v)$ に関する 2 乗誤差和

$$E(w, u, v, \lambda) = \sum_p (H - \varepsilon) \Psi(x_p, w, u, v, \lambda) / \int |\Psi(x)|^2 dx$$

を定義すれば、固有値問題は結合荷重などのパラメータについて評価関数の 2 乗誤差和 E を最小にする問題に帰着する。ただし、エネルギー固有値 ε は Gauss 求積法などを用いて評価する。

誤差逆伝播学習(BP)法においては、誤差を最小にする結合荷重とバイアスを求めるために最急降下法(SD)の勾配系

$$\frac{dw_i}{dt} = - \frac{\partial E(w, u, v, \lambda)}{\partial w_i}$$

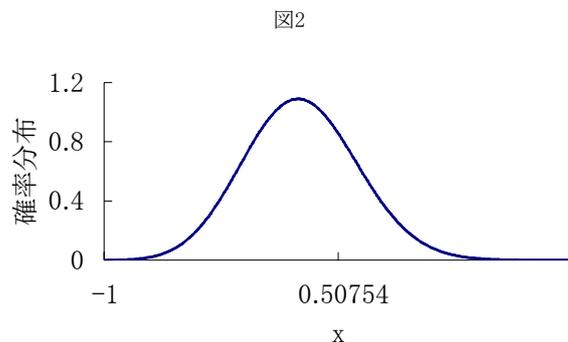
を用いる。結合荷重 w_i とバイアス u_i についても同様に表される。これらの式を差分化して得られる漸化式から最適なパラメータを求める。

カオスの最急降下法(CSD)では、局所的探索法である SD に慣性項と非線形抵抗特性を持つ散逸項を付加することにより大域的最適解の探索がなされる[3,4]。BP における結合荷重 w_i に対する時間発展式は

$$m \frac{d^2 w_i}{dt^2} + f\left(\frac{dw_i}{dt}, t\right) = -\eta \frac{\partial E(w, u, v, \lambda)}{\partial w_i} + \delta$$

で与えられる。ただし、 $f(dw_i/dt, t)$ は散逸項、 δ は発散を防ぐためのペナルティ項である。結合荷重 w_i とバイアス u_i についても同様に表されて、これらはルンゲ-クッタ法を用いて数値的に解の軌道から E を最小にするパラメータの最適解が求められる。SD あるいは CSD を用いた BP における初期パラメータは乱数により生成する。

Morse ポテンシャル系についての基底状態の確率分布の結果を図 2 に示す。2 次元系、3 次元系や複数の出力層ユニットから構成される試行関数など、より複雑な系のテスト計算は現在進行中である。



参考文献

- [1] IE Lagaris, A Likas, DI Fotiadis: *Comp Phys Commun*, 104 (1997) 1
- [2] H Nakanishi, M Sugawara: *Chem Phys Lett*, 327 (2000) 429
- [3] 谷 淳, 電子情報通信学会論文誌(A), J74-A (1991) 1208
- [4] 藤田得光, 安田恵一郎, 横山隆一: 電子情報通信学会論文誌(A), J77-A (1994) 881