

【序】

分子振動のシュレディンガー方程式を解く際、従来の基底関数展開法を用いた変分計算では、必要とされる基底関数の数が次元数のべき乗に比例して増加するため、特に多次元・高励起状態の計算における計算コストの増大が深刻となる。そこで通常の線形変分計算の代わりに、波動関数を非線形試行関数により表現し、その未知パラメータを進化的方法で最適化するという試みが近年行われている。本研究では2次元振動状態計算において、その信頼性と効率性の向上を目的とし、評価関数・評価点の取り方などについて改善を試みた。

【理論及び計算結果】

本研究では、2次元振動状態の波動関数を表現する試行関数を以下のように提案している。粒子の座標を (x, y) とし、

$$\Psi = \prod_{j=1}^2 \left[w_{1,j} \cdot \text{gau}(\alpha_{1,j}, q_j - \Delta q_{1,j}) + w_{2,j} \cdot \text{gau}(\alpha_{2,j}, q_j - \Delta q_{2,j}) \right] \cdot \left[\sin\{w'_j \cdot \text{sig}(q_j - \Delta q'_j) \cdot \pi\} \right] \quad (1)$$

$$\text{ただし、} \begin{cases} q_1 = d_{11}x + d_{12}y \\ q_2 = d_{21}x + d_{22}y \end{cases}, \quad \text{sig}(q) = \frac{1}{1 + \exp(-q)}, \quad \text{gau}(\alpha, q) = \exp(-\alpha q^2)$$

ガウス型関数は無限遠点で0に収束するという境界条件を満足し、 α_{1j}, α_{2j} はその広がりを表す。また、 \sin 関数の項では、 $w'_j - 1$ が節の数に対応し、波動関数の振動部分を表現する。このように各パラメータの意味付けが明確なため、条件に基づいた初期個体の設定や計算結果の分析が容易である。

シュレディンガー方程式を解くにあたって、下記のような目的解に近い個体ほど1に近づくような評価関数 Err を定義し、その最小値問題として試行関数の各パラメータを最適化していた。

$$Err = \frac{\sum_{i=1}^N \{H(r_i) - E\} \Psi(r_i)}{\sum_{i=1}^N |\Psi(r_i)|} \quad (r_i : \text{評価点の座標}, N : \text{評価点の個数}) \quad (2)$$

しかし、この評価関数は、本来積分すべきところを離散点での和を取ることで近似している。分母に着目すると、波動関数の規格化に関する情報を離散点の和で与えようとしているため、精度の良い評価を行うためには、評価点を多く取らねばならないという問題点があった。そこで、試行関数の形を正規化可能なものにし、規格化の情報を含ませることを試みた。これにより、効率的かつ信頼性の高い計算を行うことができるかどうか検討し、当日報告する予定である。

また、評価点の取り方が、進化的計算の初期段階における探索効率に及ぼす影響について検討した。各評価点の取り方の概要を以下に示す。

レギュラー：定義域を等間隔に区切って取った評価点を使い続ける。

ランダム：定義域内においてランダムに評価点を取る。評価のたびに点は変わる。

モデルケースとして試行関数 Ψ^{trial} を既知の関数 Ψ^{teach} にフィッティングする計算を行なった。ここで、各個体(試行関数のパラメータの組)の評価関数は以下のように置いた。

$$Err = \frac{\left\{ \sum_{i=1}^N (\Psi^{trial} - \Psi^{teach})^2 \right\}}{N} \quad (N : \text{評価点の個数}) \quad (3)$$

ただし、 Ψ^{trial} ：(1)式の試行関数

Ψ^{teach} ：2次元調和振動子の波動関数(量子数 2-2)

表.1 に示す3種の評価点の取り方を用いて、20通りの異なる初期条件について計算を行なった。ただし、比較のため、どちらも計算終了後にレギュラーな共通の評価点 256 個で全ての個体に関して評価を行っている。

図.1 及び表.2 に結果を示す。ランダムな評価点(method3)を用いると少ない評価点で効率的かつ安定して良い解を探索できていることがわかる。method3 は評価のたびに評価関数の形状を動かすことができるので、繰り返し計算を行なっていく過程で局所解に落ちこんでしまった候補が淘汰される。そのため、大域的な探索を行なう計算初期においては、method1 又は 2 よりも method3 が有用であると考えられる。

さらに有用性を高めるため、各手法を組み合わせさせて使った場合などについても検討し、当日報告する予定である。

表.1 各 method の内容

	評価点の取り方	評価点数	GA 世代数
method1	レギュラー	441	500
method2	レギュラー	256	500
method3	ランダム	256	500

表.2 最良個体の比較

rank	method1	method2	method3
1 位	2	5	13
2 位	13	5	2
3 位	5	10	5
ave.	2.15	2.25	1.60

最適化手法は G A のみ

親集団の個体数：200，子集団の個体数：200

交叉法：UNDX

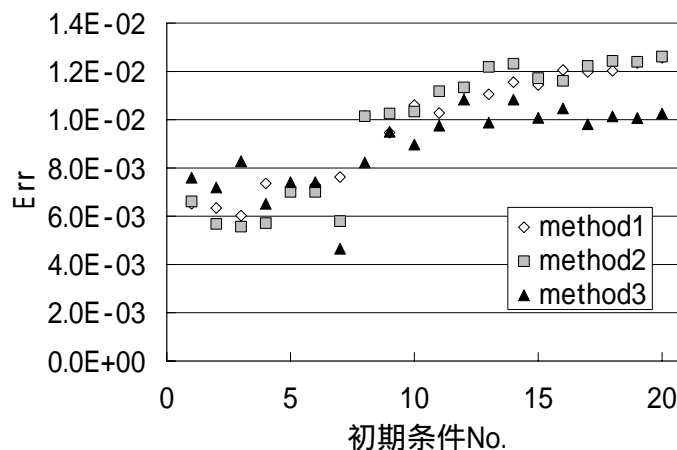


図.1 各手法における最良個体の Err