

2P096 固有値問題の解法における基底関数ネットワーク構成法と  
パラメータ最適化改善法  
(電通大) 佐野達司

[序] 固有値問題は、ほとんどが変分法により数値的に解かれてきた。変分法に基づく有限要素法は、量子力学における境界値問題に対する有力な解法の一つであるが、節点に置かれる区分的線形関数は演算子積分を単純にするが、膨大な数の基底関数を必要とする。変分法とは全く異なるアプローチを用いて固有値問題を解く方法がいくつか提案されている。最近、Lagarisらは階層型ニューラルネットワークの概念を用いて固有値問題を微分方程式に対する解の最小2乗法的最適化問題とする数値的解法を提案した<sup>1</sup>。彼等の方法は、少ないパラメータで固有関数を正確に表現することが可能であり、特に局所演算子に対しては演算子積分を計算する必要はなく、変分法より計算コスト面で有利である。彼等は、隠れユニットとして大域的基底関数であるシグモイド関数を用いた多層パーセプトロンを固有値問題の解法に適用している。しかしながら、固有値問題における波動関数を表現するには大域的基底関数よりも多次元空間中に散在するデータを滑らかに結ぶ多変数補間能力に優れた局所的基底関数の方が適すると考えられる<sup>2,3</sup>。また、高い励起状態は節数も多く複雑な関数近似に対応可能な試行波動関数が要求される。

本研究では、高い励起状態固有関数を基底数を増大させないで求めるために POLYWOG 型 wavelet 基底関数を用いたネットワークが有効であることを示す。さらに、固有値問題に対して動径基底関数関数と楕円基底関数により構成されるネットワークにおける収束性および近似的固有関数の補間能力について比較検討する。

[計算方法] 固有値問題

$$H\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi(\mathbf{r})$$

が与えられているとする。この固有波動関数 $\psi(\mathbf{r})$ がある空間領域  $D$  において有界であり、境界上において $\psi(\mathbf{r}) = 0$ であると仮定し、空間領域  $D$  内にサンプリング点として有限個の離散的空間座標点を選択する。 $\psi(\mathbf{r})$ と $\varepsilon$ はこれらすべての離散的空間座標点  $\mathbf{r}_p$  において固有値方程式を満足しなければならないので、試行波動関数にパラメータを導入して $\psi(\mathbf{r}, \lambda)$ と表せば、固有値問題は規格化2乗誤差和

$$\text{Error}(\lambda, \varepsilon) = \int_p [H\psi(\mathbf{r}_p, \lambda) - \varepsilon\psi(\mathbf{r}_p, \lambda)]^2 / |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$$

を最小化する問題に帰着される。この規格化2乗誤差和を最小にするパラメータ $\lambda$ から構成される試行波動関数 $\psi(\mathbf{r}, \lambda)$ が近似的固有関数、同時に最適化されたパラメータ $\varepsilon$ が近似的固有値となる。さらに、既に  $n-1$  個の固有関数系が得られているとし、これらに直交する  $n$  番目の試行波動関数を求めるには、既知の固有関数系成分を射影して取り除いた試行波動関数に対する規格化2乗誤差和を最小化するようにパラメータ $\lambda$ と $\varepsilon$ を求めればよい。なお、波動関数の規格化定数および重なり積分は Gauss 求積法により数値的に評価する。

試行波動関数を基底関数ネットワークの概念に基づいて組み立てるには、ネットワークを  $n_i$  個の入力変数(空間座標)で与えられる入力層、 $n_H$  個の隠れユニットから成る隠れ層、 $n_o$  個の出力ユニットから成る出力層から構成する。ここでは、隠れユニットの基底関数として Gauss 型関数

$$K_G(\mathbf{z}) = \exp(-\mathbf{z}^T \mathbf{z} / 2)$$

と Gauss 型関数の導関数である POLYWOG 型 (Mexican hat) wavelet 関数

$$K_W^d(\mathbf{z}) = (\mathbf{z}^T \mathbf{z} - d) \exp(-\mathbf{z}^T \mathbf{z} / 2)$$

を用いる。ただし、 $d$  は次元とする。試行波動関数を重み係数  $v_k$  による楕円基底関数の線形結合として

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^n v_k K(\mathbf{D}_k \mathbf{R}_k (\mathbf{r} - \mathbf{c}_k))$$

で与える。ただし、 $\mathbf{c}_k$  は中心(translation)、 $\mathbf{D}_k$  は拡がり(dilation)に関する対角行列、 $\mathbf{R}_k$  は回転行列である。例えば、2次元系の場合は

$$\mathbf{D}_k = \begin{pmatrix} 1/s_{xk} & 0 \\ 0 & 1/s_{yk} \end{pmatrix} \quad \mathbf{R}_k = \begin{pmatrix} \cos \theta_k & -\sin \theta_k \\ \sin \theta_k & \cos \theta_k \end{pmatrix}$$

である。動径基底関数では  $s_{xk} = s_{yk}$  とする。これらのネットワークパラメータを最適化するのに大域的探索法である Solis-Wets 改良型ランダム探索法と局所的探索法であるパターン探索法を組み合わせたハイブリッド探索アルゴリズム<sup>4</sup>を用いる。

[計算結果] テスト計算モデルとして、1次元非対称二重井戸型ポテンシャル系に適用した。隠れユニット(基底関数)の数は8とし、空間座標[-6,6]から等間隔に60個のサンプリング点を取った。表1に非対称二重井戸型ポテンシャル系における Gauss 型と wavelet 基底関数ネットワーク(RBFN と RWN)から得られたエネルギー固有値と他の方法によるそれらの比較を示す。RWN は高準位状態に対して Zhirnov らの結果とほぼ一致する良い結果を与えるが、RBFN の精度は非常に悪い。図1に  $n=9$  準位の RBFN と RWN から得られた固有関数を示す。

図 1

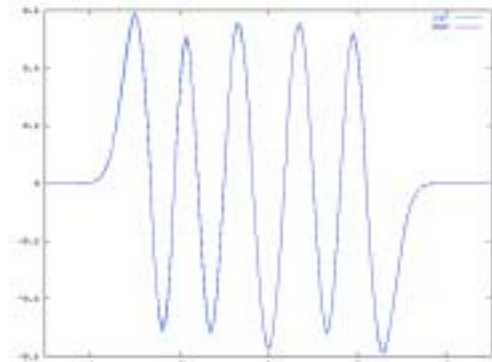
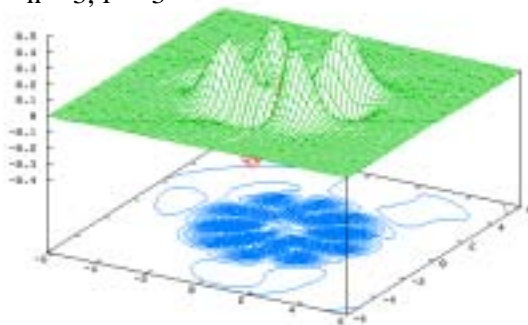


表 1

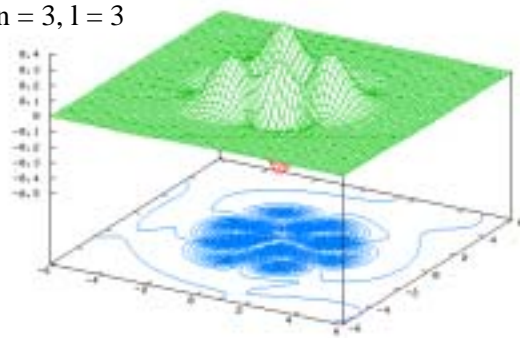
n	RWN	RBFN	Zhirnov et al
6	7.3540	7.3842	7.3649
7	11.2201	11.2711	11.2272
8	15.4129	15.5534	15.4132
9	19.9291	19.9883	-

図 2 に EBFN から得られた 2次元 Henon-Heiles ポテンシャル系の励起状態固有関数を示す。

図 2  $n=3, l=-3$



$n=3, l=3$



[参考文献]<sup>1</sup> IE Lagaris et al: Comput Phys Commun 104 (1997) 1 <sup>2</sup> T Sano: 1st APACTC, O19 (2004)

<sup>3</sup> T Sano: J Chem Phys 投稿中 <sup>4</sup> 佐野達司: 第 8 回理論化学討論会, 1P33(2004) <sup>5</sup> NI Zhirnov et al: Opt Spectrosc 47 (1980) 480