クレジット:
Mathematics and Informatics Center 計算機実験I 2020 藤堂眞治

東京大学
THE UNIVERSITY OF TOKYO

BY NC ND

本講義資料内に掲載している外部へのリンク先の著作物の利用に関しては、リンク先のそれぞれの権利者の定めるところに従ってください。

計算機実験 I (第 6 回)

藤堂眞治

2020/06/03

講義予定

- 2020-04-22: 第 1 回 環境整備
- 2020-05-07: 第 2 回 計算機実験の基礎
- 2020-05-13: 第 3 回 常微分方程式の解法
- 2020-05-20: 第 4 回 行列演算とライブラリ
- 2020-05-27: 第 5 回 連立一次方程式の解法
- 2020-06-03: 第 6 回 行列の対角化
- 2020-06-10: 第 7 回 疎行列に対する反復解法
- 2020-06-17: 第 8 回 特異値分解と最小二乗法

物理の問題にあらわれる行列演算

- 連立一次方程式・逆行列
  - 偏微分方程式の境界値問題
  - 非線形連立方程式に対するニュートン法
- 対角化・特異値分解
  - 固有値問題・行列関数
  - 最小二乗近似
- 計算機は大規模行列演算が得意
  - 直接法: $\sim 10^4$ 次元
  - 疎行列に対する反復解法: $\sim 10^9$ 次元
- 行列演算についてはライブラリがよく整備されている
  - それぞれの原理とその特徴を理解して正しく使うことが重要
  - 適切なライブラリを使うことで数十倍あるいはそれ以上速くなることも

時間依存しないシュレディンガー方程式

- 井戸型ポテンシャル中の一粒子問題

$$\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\Big]\psi(x)=E\psi(x)$$

$$V(x)=\begin{cases}0 & a\le x\le b\\ \infty & \text{otherwise}\end{cases}$$

- $\hbar^2/2m=1$、$a=0$、$b=1$ となるように変数変換して

$$\Big(\frac{d^2}{dx^2}+E\Big)\psi(x)=0 \qquad 0\le x\le 1$$

を境界条件 $\psi(0)=\psi(1)=0$ のもとで解けば良い

シュレディンガー方程式の行列表示

- シュレディンガー方程式

$$[-\frac{d^2}{dx^2} + V(x)]\psi(x) = E\psi(x)$$

- 連立差分方程式を行列の形で表す $(\psi(x_0) = \psi(x_n) = 0)$

$$\begin{bmatrix} \frac{2}{h^2} + V(x_1) & -\frac{1}{h^2} & & & \\ -\frac{1}{h^2} & \frac{2}{h^2} + V(x_2) & -\frac{1}{h^2} & & \\ & -\frac{1}{h^2} & \frac{2}{h^2} + V(x_3) & -\frac{1}{h^2} & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & -\frac{1}{h^2} & \frac{2}{h^2} + V(x_{n-1}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi(x_1) \\ \psi(x_2) \\ \psi(x_3) \\ \vdots \\ \psi(x_{n-1}) \end{bmatrix} = E \cdots$$

- $(n-1) \times (n-1)$ の疎行列の固有値問題
  - 固有値: 固有エネルギー
  - 固有ベクトル: 波動関数

固体物理・量子統計物理の多体問題に現れる行列の例

- 強束縛近似 (tight-binding approx.) のもとでの第二量子化表示

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c^\dagger_{i,\sigma} c_{j,\sigma} + h.c.) + \text{(相互作用)}$$

- 局在スピン模型 (ハイゼンベルグ模型)

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} [S^z_i S^z_j + \frac{1}{2}(S^+_i S^-_j + S^-_i S^+_j)]$$

- 格子点の数を N とすると、ハミルトニアンはそれぞれ $4^N \times 4^N$、$2^N \times 2^N$ の (疎) 行列で表される。
- N が大きくなると、行列の次元は指数関数的に増加
- 量子多体系に共通する困難

実対称行列 (エルミート行列) の性質

- $n \times n$ 実対称行列 A $(= A^T)$ の固有値問題

$$Ax = \lambda x$$

- n 個の固有値 $(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$ は全て実。固有ベクトル $(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_n)$ は互いに正規直交するようにとることができる。行列 U を

$$U = \left[\xi_1 \, \xi_2 \, \cdots \, \xi_n\right]$$

と定義すると、U は直交 (ユニタリ) 行列 $(U^T U = U^{-1} U = E)$

- A の固有分解 (固有値分解)

$$A = U \Lambda U^T \qquad \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \cdots, \lambda_n)$$

行列のべき乗・指数関数

- 行列のべき乗

$$
\begin{aligned}
A^p &= (U\Lambda U^T)(U\Lambda U^T)\cdots(U\Lambda U^T) \\
&= U\Lambda^p U^T \qquad \Lambda^p = \mathrm{diag}(\lambda_1^p, \cdots, \lambda_n^p)
\end{aligned}
$$

- 行列の指数関数

$$
\begin{aligned}
e^{xA} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}(xA)^k = U\left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}(x\Lambda)^k\right]U^T \\
&= Ue^{x\Lambda}U^T \qquad e^{x\Lambda} = \mathrm{diag}(e^{x\lambda_1}, \cdots, e^{x\lambda_n})
\end{aligned}
$$

- [逆行列 $A^{-1} = U\Lambda^{-1}U^T$] → 逆行列をあらわに求めるかわりに連立方程式を解く
- [行列式 $|A| = \prod_i \lambda_i$] → 対角化ではなく LU 分解を使う
- [対角和 (トレース) $\mathrm{tr}A = \sum_i \lambda_i$] → 対角化不要

行列の数値対角化

- 一般的に次元が 5 以上の行列の固有値は、あらかじめ定まる有限回の手続きでは求まらない
  - 必ず何らかの反復法 (+収束判定) が必要となる
- 密行列向きの方法
  - Jacobi 法
  - Givens 変換・Householder 法 (三重対角化) + QR 法など
- 疎行列向きの方法
  - べき乗法
  - Lanczos 法 (三重対角化) + QR 法など
- 固有ベクトル
  - QR 法で求めたものを逆変換
  - 逆反復法で精度改善

基本方針

- やってはいけない方法: 特性方程式

$$|\lambda E - A| = 0$$

  の係数を求めて、代数方程式として解く
  - 数値的に不安定 (代数方程式の解は係数の誤差に対して敏感)
  - 計算コスト大 [$\sim O(N!)$]
- スタンダードな方法: 行列を次々に直交変換して、対角行列 (あるいは三重対角行列) に近づけていく

$$A \to U_1^T A U_1 \to U_2^T (U_1^T A U_1) U_2 \to U_3^T (U_2^T (U_1^T A U_1) U_2) U_3 \to \cdots$$

- 固有値は変換された行列の固有値、固有ベクトルは変換後の行列の固有ベクトルに左から $U_1 U_2 U_3 \cdots$ を掛けたもの

Jacobi 法

- 直交行列 U_{pq} を以下のように選ぶ ($(p,p),(p,q),(q,p),(q,q)$ 成分を除くと単位行列)

$$
U_{pq} = \begin{bmatrix}
1 & & & & & & & & & \\
& \ddots & & & & & & & & \\
& & 1 & & & & & & & \\
& & & \cos\theta & & & \sin\theta & & & \\
& & & & 1 & & & & & \\
& & & & & 1 & & & & \\
& & & -\sin\theta & & & \cos\theta & & & \\
& & & & & & & 1 & & \\
& & & & & & & & \ddots & \\
& & & & & & & & & 1
\end{bmatrix}
$$

Jacobi 法による相似変換

- $B = U_{pq}^{-1} A U_{pq}$ により、A の p 行、q 行、p 列、q 列のみが変更を受ける

$$
\begin{aligned}
b_{pk} &= b_{kp} = a_{pk} \cos\theta - a_{qk} \sin\theta \qquad k \neq p, q \\
b_{qk} &= b_{kq} = a_{pk} \sin\theta + a_{qk} \cos\theta \qquad k \neq p, q \\
b_{pp} &= \frac{a_{pp} + a_{qq}}{2} + \frac{a_{pp} - a_{qq}}{2} \cos 2\theta - a_{pq} \sin 2\theta \\
b_{qq} &= \frac{a_{pp} + a_{qq}}{2} - \frac{a_{pp} - a_{qq}}{2} \cos 2\theta + a_{pq} \sin 2\theta \\
b_{pq} &= b_{qp} = \frac{a_{pp} - a_{qq}}{2} \sin 2\theta + a_{pq} \cos 2\theta
\end{aligned}
$$

- $b_{pq} = b_{qp} = 0$ とするには、θ を次のように選べば良い

$$
\tan 2\theta = -\frac{2a_{pq}}{a_{pp} - a_{qq}}
$$

Jacobi 法の収束

- 相似変換により対角和は不変に保たれるので

$$\mathrm{tr}\, A^T A = \mathrm{tr}\, B^T B \quad \Rightarrow \quad \sum_{i,j} a_{ij}^2 = \sum_{i,j} b_{ij}^2$$

- 一方、この変換で

$$b_{pp}^2 + b_{qq}^2 = b_{pp}^2 + 2b_{pq}^2 + b_{qq}^2 = a_{pp}^2 + 2a_{pq}^2 + a_{qq}^2$$

すなわち、変換により、対角成分の二乗和は増加する $\Rightarrow$ 非対角成分の二乗和は単調減少

- 全ての非対角成分が十分小さくなるまで繰り返す
- 固有値=対角成分、固有ベクトル $= U_1 U_2 U_3 \cdots$

3 重対角化

- 対角化は有限回の手続きでは行えない
- 3 重対角化であれば、$O(n^3)$ の有限回の計算で決定論的に行える
- Givens 変換: Jacobi 変換と同じ相似変換を利用
  - U_{32} で (3,1) と (1,3) を消去 $\Rightarrow U_{42}$ で (4,1) と (1,4) を消去 $\Rightarrow U_{52}$ で (5,1) と (1,5) を消去 $\Rightarrow U_{62}, \cdots, U_{n,2} \Rightarrow U_{43}, U_{53}, \cdots, U_{n,3} \Rightarrow \cdots \Rightarrow U_{n,n-1}$ で $(n, n-2)$ と $(n-2, n)$ を消去
  - $(4/3)n^3$ 回の乗算と $(2/3)n^3$ 回の加減算で 3 重対角化される
- Householder 変換: $U = E - 2ww^T/|w|^2$
  - $(2/3)n^3$ 回の乗算と加減算で 3 重対角化される
  - Givens 変換に比べ少し効率的なので、こちらが広く使われている

3 重対角行列の対角化

- 二分法、QR 分解、分割統治法、MRRR など様々な方法が知られている
- 固有ベクトル
  - QR 分解では 3 重対角行列の固有ベクトルも同時に求まる
  - あるいは、固有値を求めた後、逆反復法を用いて固有ベクトルを求める
- 逆反復法
  - 近似固有値を μ とするとき、行列 $(A-\mu E)^{-1}$ を考えると、固有ベクトルは A と同じ、固有値は $(\lambda-\mu)^{-1}$。
  - μ が十分に正確であれば、$(\lambda-\mu)^{-1}$ は絶対値最大の固有値。行列 $(A-\mu E)^{-1}$ を適当な初期ベクトルにかけ続けると λ に対応する固有ベクトルに収束 (c.f. べき乗法)
  - 実際には $(A-\mu E)x' = x$ という連立方程式を繰り返し解く

QR 法

- QR 分解
  - 行列 A を直交 (エルミート) 行列 Q と上三角行列 R の積に分解: $A = QR$
  - Gram-Schmit の直交化と等価
- QR 法による固有値と固有ベクトルの計算
  - 行列 A_1 を QR 分解 ($A_1 = Q_1 R_1$) → $A_2 = R_1 Q_1$
  - 行列 A_2 を QR 分解 ($A_2 = Q_2 R_2$) → $A_3 = R_2 Q_2$
  - 行列 A_k を QR 分解 ($A_k = Q_k R_k$) → $A_{k+1} = R_k Q_k$
  - 繰り返していくと対角より下の全ての成分は零に収束し、対角成分は固有値に収束する (証明略)
- 連続した直交変換: $A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^{-1} Q_k R_k Q_k = Q_k^{-1} A_k Q_k$
  - A_1 が対称 (エルミート) 三重対角行列の場合、A_k も対称 (エルミート) 三重対角
  - 密行列に対して最初から QR 法を適用するより、Householder 法で三重対角化した後で使う法が効率がよい

LAPACK の対角化ルーチン

- 様々な対角化ルーチンが準備されている
  - 倍精度実対称行列の対角化 dsyev http://www.netlib.org/lapack/explore-html/dd/d4c/dsyev_8f.html
  - Fortran による関数宣言

```
subroutine dsyev(character JOBZ, character UPLO,
  integer N, double precision, dimension(lda, *) A,
  integer LDA, double precision, dimension(*) W,
  double precision, dimension(*) WORK,
  integer LWORK, integer INFO)
```

- 他にも dsyevd、dsyevr、dsyevx などがある
  3 重対角化までは同じ。3 重対角行列の対角化が異なる
- 単精度版の ssyev、複素 (エルミート行列) 版の zheev など
- dsyev の使用例: diag.c
  - コンパイル方法: `cc -o diag diag.c -llapack -lblas -lm`
  - 実行方法: `./diag matrix1.dat`

複素エルミート行列の固有分解

- 固有値は実数
- これまでの方法がそのまま使える (ただし、転置 → 複素転置)
- 実対称行列用のライブラリを使っての対角化も可能
  - エルミート行列を実部と虚部に分ける: $A = R + iW$
  - エルミート行列の固有値問題 $(R + iW)(u + iv) = \lambda(u + iv)$ を $2n \times 2n$ の実対称行列の問題に書き換える

$$\begin{bmatrix} R & -W \\ W & R \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}$$

  - 固有値は同じ固有値が 2 度づつ現れる
  - 対応する複素行列の固有ベクトルは、$u + iv$ と $-v + iu$

