

2P02

対称帯行列を係数とする一般化固有値問題解法 と量子化学への適用について

村上 弘

都立短期大学 経営情報学科 (〒196-8540 東京都昭島市東町 3-6-33)

【緒言】

局所密度汎関数法の軌道を決める方程式は、対称行列を係数とする一般化固有値問題 $Ax = Bx$ に帰着される。遠距離力のクーロン相互作用をポテンシャル場とし、軌道の展開には局所的な台を持つ基底関数系を用いると、相互作用と基底関数の局所性の反映により、離れた位置に属する基底間の行列要素は 0 になる。この為、基底に適切に番号を振ると、方程式の係数行列は帯行列となり、分子の形状が細長い程、行列の次元に対する帯幅の比が小さくなる。帯行列の対称一般化固有値問題を解くにはメモリ効率の良い方法が既によく知られている [1, 2]。今回はその紹介と適用について多少の考察を試みたい。

【方法】

対称帯行列を係数とする定値一般化固有値問題に対する [1, 2] の方法は、問題を同じ帯幅の対称行列の標準固有値問題に変換することで固有値を (必要なら全て) 求める。実用算法として LAPACK 2.0 以降や NAG ライブラリにも採用されている [5, 6]。行列の次数を n 、帯幅を b とすると、固有値のみを求めるのに必要な記憶量は $2bn + O(b^2)$ で、計算量は $O(bn^2)$ である。軌道を求めるには固有ベクトルが必要で、軌道の数と同数 $O(n)$ 程度求める必要がある。各固有値 に対し $A - B$ の LU 分解で逆反復を行うと固有ベクトル 1 本当たりの演算量は $O(nb^2)$ 、軌道全部では $O(n^2 b^2)$ となる。軌道を全て保持する記憶量は $O(n^2)$ だが、電荷密度 を構成する為だけの目的には、固有ベクトルは 1 本ずつ求めてその度に使い捨てにすることも可能である。

参考文献等

1. C.R.Crawford, "Reduction of a Band-Symmetric Generalized Eigenvalue Problem", Comm. of ACM, vol.16, No.1, pp.41-44, Jan 1973.
2. Linda Kaufman, "Banded Eigenvalue Solvers on Vector Machines", ACM Trans. on Math. Soft., vol.10, No.1, pp.73-86, Mar 1984.
3. Golub G.H. and van Loan C.F. "Matrix Computations", 3rd Ed., John Hopkins Univ. Press, 1996.
4. Parlett B.N. "The Symmetric Eigenvalue Problem", Prentice-Hall, 1980.
5. "NAG Fortran Library Routine Document", (章 F02-Eigenvalues and Eigenvectors の F02FHF), The Numerical Algorithms Group Ltd.
6. LAPACK 2.0 のルーチン xSBGST 及び、xPBSTF.