

予め求めておくことはできないので、まず最初に $P_r A P_c$ (P_r, P_c は置換行列) の形の変換、即ち、変数と方程式の並べかえ、によって A をブロック三角化しておき、パラメタ値 θ が与えられる毎に各部分問題を解くことになる。

ところで、多くの実際の問題においては、 $A=A(\theta)$ の要素のうちパラメタ θ に依存しないものが相当多くある。例えば、方程式 (1) が非線形方程式 $f(x)=0$ を Newton 法で解くためのものであるとすると、 $f(x)$ の線形項から生じる A の要素は一定値である。

ここでは、方程式 (1) が θ に依存しない係数をもつ方程式と実質的に依存する方程式に分けられているとして、 A が

$$(2) \quad A = \begin{bmatrix} Q \\ T(\theta) \end{bmatrix}$$

(ただし、 Q は定行列、 $T(\theta)$ の非零要素は実質的に θ に依存する) の形に書けているとする。(より一般の場合にも、適当な補助変数を導入すれば、この形に書けることに注意。)

方程式 (1) の係数が (2) の形をしているとき、 Q の部分は θ に依らないから通常の消去法のような演算を前もって施すことができる。従って、同じ構造の方程式系を数多く解く際の前処理として、置換行列 P_r, P_c, P_r と正則行列 S を用いて

$$(3) \quad P_r \begin{bmatrix} S & \\ & P_r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q \\ T(\theta) \end{bmatrix} P_c$$

の形の変換によるブロック三角化を行なうことができる。

本発表では、このような変換の下でのブロック三角化のうち最も細かいものが一意的に定まり、しかも効率的な算法によって求められることを示した。

参 考 文 献

- 1) Murota, K. (1987). *Systems Analysis by Graphs and Matroids—Structural Solvability and Controllability*, Springer.
- 2) Murota, K., Iri, M. and Nakamura, M. (1987). Combinatorial canonical form of layered mixed matrices and its application to block-triangularization of systems of linear/nonlinear equations, *SIAM J. Alg. Disc. Meth.*, 8, 123-149.

蛋白質分子の構造エネルギー関数の高速微分

早稲田大学社会科学部 輪 湖 博

蛋白質分子は鎖状の生体高分子であり、その物性を研究することは生命現象を理解する上で重要である。生体内には多種類の蛋白質分子が存在し、その生理的活性を発現するために、それぞれがそれぞれに固有の立体構造をとることが知られているが、そこで、われわれは、この蛋白質分子の特異的な立体構造をとる機構を立体構造エネルギー解析法によって解明することを試みている。また、最近、遺伝子操作技術の進歩により、蛋白質分子設計への期待が強まっているが、そのための理論面の基礎を固め、更には、設計支援システムを開発することも目標の一つとなっている。

蛋白質分子の立体構造エネルギー解析法の基本的な作業としては、立体構造エネルギー関数

の極小化 (Newton 法による), そこで得られた極小エネルギー構造 (即ち, エネルギー関数極小値) のまわりでの規準振動解析およびモンテ・カルロ・シミュレーション等が現時点ではルーチン・ワークとして行われている. 従って, 計算では, 単にエネルギー関数の値だけではなく, その一次, 二次の微係数の値が必要となる.

ここで, 蛋白質分子の立体構造を表す独立変数が問題となる. それは, 各原子のデカルト座標をとるか, 化学結合の結合長, 結合角を固定して結合のまわりの回転角をとるかの選択の問題であるが, 計算機を扱う立場からは, 計算時間が短くて, 記憶容量が少なくてよいことが重要であり, そのため独立変数の数が少なくて済む後者をわれわれは採用している. ところが, エネルギー関数は構成原子間の距離の関数として与えられているため, 従来, 回転角を採用すると二次の微係数を求めるには構成原子数の 4 乗に比例する計算量が必要とみなされ, 計算機で二次の微係数を計算するのは不可能と考えられてきた. しかし, 郷らによって, 構成原子数の 2 乗に比例する計算量でできる高速計算のアルゴリズムが発見され^{1,2)}, 更には, スーパーコンピュータの出現とそれに適したアルゴリズムとプログラムのコーディング^{3,4)}によって, 構造エネルギー解析法は実用的な手法となった.

この高速微分計算法のアルゴリズムの基本的な考え方は, tree 構造を持った系に対して一般的に成り立ち, 鎖状高分子系にはもちろんのこと, 同様の構造をもつ他の系への適用も期待できるであろう.

参 考 文 献

- 1) Noguti, T. and Go, N. (1983). *J. Phys. Soc. Jpn.*, **52**, 3685.
- 2) Abe, H., Braun, W., Noguti, T. and Go, N. (1984). *Comp. Chem.*, **8**, 239.
- 3) 輪湖, 郷 (1985). Supercomputer workshop, report **4**, 154.
- 4) Wako, H. and Go, N. (1986). *J. Comp. Chem.*, in press.

チヨレスキー法におけるピボット選択法と不完全分解法

統計数理研究所 田 辺 國 士

正定値行列 A のチヨレスキー分解

$$(1) \quad P^t A P = L D L^t \quad (L: F \text{ 三角行列}, D: \text{対角行列}, P: \text{置換行列})$$

におけるピボット (置換行列 P) の新しい選択法を提案した.

L の第 i 列ベクトルを l_i , D の第 i 要素を d_i とするとき, 分解 (1) は

$$(2) \quad P^t A P = d_1 l_1 l_1^t + d_2 l_2 l_2^t + \cdots + d_n l_n l_n^t,$$

と書ける. いいかえると, $P^t A P$ を部分和,

$$(3) \quad S_k = d_1 l_1 l_1^t + d_2 l_2 l_2^t + \cdots + d_k l_k l_k^t,$$

で逐次近似するプロセスであると考えることができる. このプロセスの各段階で, 残差が小さくなるように P を選び直すという選択法が考えられる. 即ち, 第 k 段で