

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

$$(4) \quad R_k = P_k^t A P_k - S_k = \begin{bmatrix} 0 \cdots 0 & 0 \cdots 0 \\ \cdots & \cdots \\ 0 \cdots 0 & 0 \cdots 0 \\ 0 \cdots 0 & \\ \cdots & A_k \\ 0 \cdots 0 & \end{bmatrix}$$

なる部分的分解が与えられているとき、次の段で

$$(5) \quad N_j^k = \| A_k - a_j^t (a_j^k)^t / \alpha_j^k \|, \quad (j = k+1, \dots, n)$$

を最小にする添字 j を求め、それを $j(k)$ とする。ただし、 A_k は $n-k$ 次の行列、 a_j^k は A_k の第 $(j-k)$ 列ベクトルとし、 α_j^k は A_k の第 $(j-k)$ 対角要素とする。このとき、

$$(6) \quad d_{k+1} = \alpha_{j(k)}^k$$

$$(7) \quad l_{k+1} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \alpha_{j(k)}^k / \alpha_{j(k)}^k \end{pmatrix}, \quad P_{k+1} = Q_k P_k,$$

とおくと

$$(8) \quad R_{k+1} = P_{k+1}^t A P_{k+1} - S_{k+1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & A_{k+1} \end{bmatrix},$$

という表現を得る。ただし、 Q_k は $k+1$ と $j(k)$ を交換する置換行列、 A_{k+1} は

$$(9) \quad A_k - d_{k+1} l_{k+1} (l_{k+1})^t = R^t \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & A_{k+1} \end{bmatrix} R, \quad (R: \text{置換行列})$$

となる $n-k-1$ 次の正定値行列である。このプロセスを反復することにより、分解(1)を得る。式(5)の定義においてフロベニウスノルムを用いるとき

$$(10) \quad \begin{aligned} (N_j^k)^2 &= \| A_k - a_j (a_j)^t / \alpha_j \|_F^2 \\ &= \| A_k \|_F^2 - 2(a_j^t A_k a_j) / \alpha_j + (\| a_j \|_2^2 / \alpha_j)^2 \\ &\leq \| A_k \|_F^2 - (a_j^t A_k a_j) / \alpha_j \\ &\leq \| A_k \|_F^2 - (\| a_j \|_2^2 / \alpha_j)^2, \end{aligned}$$

となり、 N_j^k を最小にすることは、

$$(11) \quad F_0 = 2(a_j^t A_k a_j) / \alpha_j - (\| a_j \|_2^2 / \alpha_j)^2,$$

を最大にすることと同値である。また不等式(10)から、 F_0 を最大にする j を選ぶ代りに

$$(12) \quad F_1 = (a_j^t A_k a_j) / \alpha_j,$$

$$(13) \quad F_2 = \| a_j \|_2^2 / \alpha_j,$$

を最大にするものを選ぶ方法も考えられる。