

固有ベクトル計算法 (その 3)

量子化学入門

中野 嘉弘 (札幌市、後 3 年で 91 歳)

FAX 専 011-588-3354

E-mail: yoshihiro@river.ocn.ne.jp

は し が き

今年、8 月以来の数ヶ月、固有値問題の話題が続いた。志村氏(文献 1, 2)、中野(文献 3, 4)、西川会長(文献 5, 6, 7)。昨年までには、中野は固有値問題で約 11 編 を報告した。

前の第 2 号(文献 4) では、量子化学の内、ベンゼンを主として扱った。

今回はさらに広げる。また、なお、これまでに気付いた関係論文中の Scripts (プログラム) のミスなどの修正なども、本稿末尾又は文献欄内に追記した。

結局、登場するプログラムは、

- 1) 古典的な Jacobi 法、
- 2) 志村報告内の char_lf、char_evec、
- 3) 中野報告内の nchar_lf、nchar_evec、
- 4) 中野新法の N_evec (見易い) である。

数学愛好者の仲間うちでも、J 言語そのものの「普及は今一つ」の恨みがある。

これは何とかせにやならん重大事であろう。

1. 永年方程式の対角化

永年方程式 *sequaler equation* では係数からなる行列を対角化できれば、固有値と固有ベクトルを求めることが出来る。その代表例はヤコービ Jacobi 法である。

ただし、与行列は「実対称行列」に限定され、それ以外では、計算しない。

と云うわけで、「固有値問題解法の分類学」へと発展するが、私には、どうも気に入らない。万能の解法としては、LF (ルベリエ・ファデーエフ) 法がある。

今回のシリーズ物のきっかけになったのは、西川会長の御専門である量子化学の例題であるが、それについて各解法の特徴を示したい。

2. エチレン と フォルムアルデヒド

1) エチレン Ethylene

エチレン $H_2C=CH_2$ の ヒュッケル Hückel 行列は $eth_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ である。

・従来の ヤコビ法 jacobi eth2 から

固有値 規格化・固有ベクトル(縦に読む)

```
-----  
| 1  _1 | 0.707107  _0.707107 |  
|   | 0.707107  0.707107 |  
-----
```

なお、 $0.707107 = 1/\sqrt{2}$ である。

・LF 法 nchar_evec eth2

```
-----  
| 1  | _1  | 固有値  
-----  
| 1 1 | _1  1 | 固有ベクトル  
| 1 1 |  1 _1 |  
-----
```

解を規格化すれば、以下の固有関数を意味する。

$$\phi_1 = (\chi_1 + \chi_2) / \sqrt{2}$$

$$\phi_2 = (\chi_1 - \chi_2) / \sqrt{2}$$

★ 仮称「中野新法」では、 u_2 を 2 次の単位行列として

```
(eth2 - (1*u2)) から  
_1  1  
1  _1  
(eth2 - (_1*u2)) から  
1  1  
1  1
```

即ち、前項の LF 法 の結果がダイレクトに得られた。

2) フォルムアルデヒド formaldehyde :HCHO

永年方程式は

$$\begin{vmatrix} -x & 1 \\ 1 & 1-x \end{vmatrix} = 0$$

ヒュッケル行列は $f_{12} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$

・ヤコビ法 `jacobi f12`

固有値 規格化・固有ベクトル (縦に読む)

1.61803	_0.618034		0.525731	0.850651
			0.850651	_0.525731

・LF法の演算:「中野関数 `nchar_lf`」

(`Scripts` を修正すれば、志村報告中の関数 `char_lf` でも

良い。本稿末尾、文献 1 の註を見よ！)

`nchar_lf f12` より

固有値 固有方程式

1		1.61803	_0.618034		_1	_1	1
---	--	---------	-----------	--	----	----	---

$$(1 \pm \sqrt{5})/2$$

分子軌道エネルギー $\epsilon_1 = \alpha + 1.618\beta$ 、 $\epsilon_2 = \alpha - 0.618\beta$

★ 仮称「中野新法 `N_evec`」では、

`u2` を 2 次の単位行列として

$$\begin{matrix} (f_{12} - (1.61803 * u_2)) \text{ から固有ベクトルは} \\ \begin{matrix} _1.61803 & 1 \\ 1 & _0.61803 \end{matrix} \end{matrix}$$

$$\begin{matrix} (f_{12} - (_0.61803 * u_2)) \text{ から固有ベクトルは} \\ \begin{matrix} 0.61803 & 1 \\ 1 & 1.61803 \end{matrix} \end{matrix}$$

(規格化すれば、Jacobi 法の結果と同じ)

3. シクロプロペニール (環状ポリエン)

3) シクロプロペニール `cyclopropenyl CH2CH:CH`

永年方程式は

$$\begin{vmatrix} -x & 1 & 1 \\ 1 & -x & 1 \\ 1 & 1 & -x \end{vmatrix} = 0$$

ヒュッケル 行列は `clp3 = . > 0 1 1; 1 0 1; 1 1 0`

・ヤコビ法 `jacobi clp3`

固有値 規格化・固有ベクトル (縦に読む)

2	_1	_1	0.57735	_0.707107	_0.408248
			0.57735	0.707107	_0.408248
			0.57735	0	0.816497

・LF 法 `Zclp = . nchar_evec clp3`

`pfmt Zclp`

_1.000	0.000	0.000	0.000
	0.000	0.000	0.000
	0.000	0.000	0.000
_1.000	0.000	0.000	0.000
	0.000	0.000	0.000
	0.000	0.000	0.000
2.000	3.000	3.000	3.000
	3.000	3.000	3.000
	3.000	3.000	3.000

★ 仮称「中野新法 `N_evec`」では、`u3` を 3 次の単位行列として

$(clp3 - (_1 * u3))$ の類、即ち

(与行列 - (固有値 * 単位行列)) を 仮称「中野行列」と呼ぶ

ことにする。

1) 固有値 2 以外の上記「中野行列」は 2 ケ 作れる。それら 2 ケ

の内積 inner product, `ip` を計算する。

$(clp3 - (_1 * u3))$ `ip` $(clp3 - (_1 * u3))$ は

3 3 3

3 3 3

3 3 3 で、これは固有値 2 に対応する固有ベクトル である。

2) 固有値 `_1` 以外の「中野行列」の内積の一組は、

$(clp3 - (2 * u3))$ `ip` $(clp3 - (_1 * u3))$ である。

固有値 λ_1 の状態は、2重に縮退があるので、該当する「中野行列」は

他に、もう一組ある事を考慮している。

以上の内積は、

```
0 0 0
0 0 0
```

0 0 0 で、固有ベクトルはゼロ・ベクトルである。これは LF 法の結果と合う。

しかし、Jacobi 法とは合わない。

4. ブタジエン 類

4) ブタジエン Butadiene $\text{CH}_2\text{:CH}\cdot\text{CH}\text{:CH}_2$

ヒュッケル Hückel 行列 btd_4 は $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ である。

・ ヤコビ法 $\text{Zjb} = \text{jacobi } \text{btd}_4$ から、先ず 固有値は

$\lambda\{\text{Zjb}\}$

```
┌──────────────────────────────────┐
| 1.61803 0.618034 _0.618034 _1.61803 |
└──────────────────────────────────┘
```

固有ベクトルは

$\text{v}\{\text{Zjb}\}$

```
┌──────────────────────────────────┐
| 0.371748 0.601501 0.601501 _0.371748 |
| 0.601501 0.371748 _0.371748 0.601501 |
| 0.601501 _0.371748 _0.371748 _0.601501 |
| 0.371748 _0.601501 0.601501 0.371748 |
└──────────────────────────────────┘
```

(縦に読む。規格化されている。)

・ LF 法 `Scripts` を修正した `char_lf` 関数を用い、

`char_lf btd4` より

固有値

固有方程式

```
┌──┴──┐
| 1 | 1.61803 _1.61803 0.618034 _0.618034 | 1 0 _3 0 1 |
└──┬──┘
```

$(1 \pm \sqrt{5})/2$

元来の 中野関数 `nchar_evec` を用い、

`Zbtd4 = nchar_evec btd4`

pfmt Zbtd4 (註:pfmt=: 7j3 ": L:0 /: ~ |:)

固有値 固有ベクトル

```
|-----|
|_1.618|_1.000 1.618 _1.618 1.000|
|      | 1.618 _2.618 2.618 _1.618|
|      | _1.618 2.618 _2.618 1.618|
|      | 1.000 _1.618 1.618 _1.000|
|-----|
|_0.618| 1.000 _0.618 _0.618 1.000|
|      | _0.618 0.382 0.382 _0.618|
|      | _0.618 0.382 0.382 _0.618|
|      | 1.000 _0.618 _0.618 1.000|
|-----|
| 0.618|_1.000 _0.618 0.618 1.000|
|      | _0.618 _0.382 0.382 0.618|
|      | 0.618 0.382 _0.382 _0.618|
|      | 1.000 0.618 _0.618 _1.000|
|-----|
| 1.618| 1.000 1.618 1.618 1.000|
|      | 1.618 2.618 2.618 1.618|
|      | 1.618 2.618 2.618 1.618|
|      | 1.000 1.618 1.618 1.000|
|-----|
```

★ 仮称「中野新法 N_evec」では、u4 を 4 次の単位行列

として

(1) 固有値 -1.618 に対応する固有ベクトルは、それ以外の

固有値に対応する仮称「中野行列」の内積から求められる。

```
bt1=.btd4 -(_0.618*u4=.un 4)
bt2=.btd4 -(0.618*u4)
bt3=.btd4 -(1.618*u4)
```

そして、bt1 ip bt2 ip bt3 から

```
_1.00005 1.61808 _1.618 1
1.61808 _2.61805 2.61808 _1.618
_1.618 2.61808 _2.61805 1.61808
1 _1.618 1.61808 _1.00005
(縦に読む。)
```

結果は LF 法の固有ベクトルと一致している。

(2) 固有値 -0.618 に対応する固有ベクトルは、それ以外の

bt0=. btd4 -(_1.618*u4) をも用意して、

内積 bt0 ip bt2 ip bt3 から

```

1.000005 _0.617924    _0.618      1
_0.617924  0.381877  0.382076    _0.618
_0.618    0.382076  0.381877 _0.617924
      1    _0.618 _0.617924  1.000005

```

(縦に読む。)

結果は LF 法の固有ベクトルと一致している。

(3) より先は読者の演算にまかせる。

以下では、細かい演算の説明は省くことがある。許されよ。

.....

5) シクロブタジエン cyclobutadiene

ヒュッケル Hückel 行列 cycbtd4 は 0 1 0 1

```

      1 0 1 0
      0 1 0 1
      1 0 1 0   である。

```

・ヤコビ法

jacobi cycbtd4

2	0	0	_2		0.5	_0.5	_0.5	_0.5
					0.5	_0.5	0.5	0.5
					0.5	0.5	0.5	_0.5
					0.5	0.5	_0.5	0.5

・LF 法

nchar_lf cycbtd4 から

固有値 固有方程式

1		2	_2	0	0		0	0	_4	0	1
---	--	---	----	---	---	--	---	---	----	---	---

nchar_evec cycbtd4 の固有値と固有ベクトル

2					_2					0					0			
4	4	4	4		_4	4	_4	4		0	0	0	0		0	0	0	0
4	4	4	4		4	_4	4	_4		0	0	0	0		0	0	0	0
4	4	4	4		_4	4	_4	4		0	0	0	0		0	0	0	0
4	4	4	4		4	_4	4	_4		0	0	0	0		0	0	0	0

★ 仮称「中野新法 N_evec 」では、

cycba=. cycbb =. cycbtd4 - (0 * u4)

```
cycbc=. cycbtd4 - (_2 * u4)
```

```
cycbd=. cycbtd4 - (2 * u4) らを用意して、
```

内積 `cycbd ip cycbc ip cycbb` から固有値 0 に対応する

固有ベクトルが求まる。

```
cycbd ip cycbc ip cycba から固有値 1 に対応する
```

固有ベクトルが求まる。それはゼロベクトルである。

```
cycbd ip cycbb ip cycba から固有値 _2 に対応する
```

固有ベクトルが求まる。LF 法のそれと同じ。

```
cycbc it cycbb ip cycba から固有値 2 に対応する
```

固有ベクトルが求まる。LF 法のそれと同じ。

どうも、演算結果は LF 法と同じであるが、演算論理は判り易い。

5. ヘキサトルエン hexatoluene C6H5CH3

ヒュッケル Hueckel 行列 `hxt16` は

```
0 1 0 0 0 0
1 0 1 0 0 0
0 1 0 1 0 0
0 0 1 0 1 0
0 0 0 1 0 1
0 0 0 0 1 0
```

```
Lhx6=. nchar_lf hxt16
```

1{Lhx6 固有値

```
| 1.80194 _1.80194 1.24698 _1.24698 0.445042 _0.445042 |
```

2{Lhx6 固有多項式

```
| _1 0 6 0 _5 0 1 |
```

Zhx6=. nchar_evec hxt16 固有ベクトル

```
pfmt Zhx6
```

```
| _1.802 | _1.000 1.802 _2.247 2.247 _1.802 1.000 |
|      | 1.802 _3.247 4.049 _4.049 3.247 _1.802 |
```


		_2.247	4.049	_5.049	5.049	_4.049	2.247		
		2.247	_4.049	5.049	_5.049	4.049	_2.247		
		_1.802	3.247	_4.049	4.049	_3.247	1.802		
		1.000	_1.802	2.247	_2.247	1.802	_1.000		

		_1.247	1.000	_1.247	0.555	0.555	_1.247	1.000	
		_1.247	1.555	_0.692	_0.692	1.555	_1.247		
		0.555	_0.692	0.308	0.308	_0.692	0.555		
		0.555	_0.692	0.308	0.308	_0.692	0.555		
		_1.247	1.555	_0.692	_0.692	1.555	_1.247		
		1.000	_1.247	0.555	0.555	_1.247	1.000		

		_0.445	_1.000	0.445	0.802	_0.802	_0.445	1.000	
		0.445	_0.198	_0.357	0.357	0.198	_0.445		
		0.802	_0.357	_0.643	0.643	0.357	_0.802		
		_0.802	0.357	0.643	_0.643	_0.357	0.802		
		_0.445	0.198	0.357	_0.357	_0.198	0.445		
		1.000	_0.445	_0.802	0.802	0.445	_1.000		

		0.445	1.000	0.445	_0.802	_0.802	0.445	1.000	
		0.445	0.198	_0.357	_0.357	0.198	0.445		
		_0.802	_0.357	0.643	0.643	_0.357	_0.802		
		_0.802	_0.357	0.643	0.643	_0.357	_0.802		
		0.445	0.198	_0.357	_0.357	0.198	0.445		
		1.000	0.445	_0.802	_0.802	0.445	1.000		

		1.247	_1.000	_1.247	_0.555	0.555	1.247	1.000	
		_1.247	_1.555	_0.692	0.692	1.555	1.247		
		_0.555	_0.692	_0.308	0.308	0.692	0.555		
		0.555	0.692	0.308	_0.308	_0.692	_0.555		
		1.247	1.555	0.692	_0.692	_1.555	_1.247		
		1.000	1.247	0.555	_0.555	_1.247	_1.000		

		1.802	1.000	1.802	2.247	2.247	1.802	1.000	
		1.802	3.247	4.049	4.049	3.247	1.802		
		2.247	4.049	5.049	5.049	4.049	2.247		
		2.247	4.049	5.049	5.049	4.049	2.247		
		1.802	3.247	4.049	4.049	3.247	1.802		
		1.000	1.802	2.247	2.247	1.802	1.000		

6. ベンゼン BZ Benzene C6H6

ベンゼンの ヒュッケル行列 BZ は

```

0 1 0 0 0 1
1 0 1 0 0 0
0 1 0 1 0 0
0 0 1 0 1 0
0 0 0 1 0 1
1 0 0 0 1 0

```

固有値は 既知で
2 $_2$ 1 1 $_1$ $_1$ である。

6 次の単位行列を u_6 とする。

仮称「中野法」を紹介する。6 ケの行列

$bza = .bzb = . BZ - (_1 * u_6)$

$bzc = . bzd = . BZ - (1 * u_6)$

$bze = . BZ - (_2 * u_6)$

$bzf = . BZ - (2 * u_6)$ を用意する。

6 ケ全ての行列の内積を作る。

$ALbz = . bza \text{ ip } bzb \text{ ip } bzc \text{ ip } bzd \text{ ip } bze \text{ ip } bzf$

6 ケ行列の何れかを、単位行列 u_6 に置き換える。

・最後の行列 bzf を 単位行列に置換した場合には、内積は
固有値 2 に対応する固有ベクトルを与える。結果は、全て 6
である。それは LF 法のそれに同じだ。

・行列 bze を 単位行列に置換した場合には、内積は
固有値 $_2$ に対応する固有ベクトルを与える。結果は、
6 と $_6$ の交代する行列であり、LF 法のそれに同じだ。

・重複する固有値に対応する所謂「中野行列」について
単位行列置換をした場合の内積の値は、重複行列が残存する場合は
ゼロ行列である。即ち、固有ベクトルは全て、ゼロである。
つまり、固有値に縮退がある場合には、固有ベクトルはゼロである。
LF 法の結果と同じである。

今回の志村論文に接して、最初に浮かんだ疑問は、確かに実現
したと云える。

しかし、重複が無くなる如く、置換した場合には、そうでは無い。
ゼロでは無い行列が残り得る。これは、志村氏の LF 法には無い新しい
知見である。

☆ 縮退ある固有値 $_1$ に対応する固有ベクトル

$]ALb2 = .u_6 \text{ ip } u_6 \text{ ip } bzc \text{ ip } bzd \text{ ip } bze \text{ ip } bzf$

```

_4 2 2 _4 2 2
2 _4 2 2 _4 2
2 2 _4 2 2 _4
_4 2 _2 _4 2 _2
2 _4 2 2 _4 2
2 2 _4 2 2 _4

```

◎ 縮退ある固有値 1 に対応する固有ベクトル

```

]ALb4=.u6 ip u6 ip bza ip bzb ip bze ip bzf
_4 _2 2 4 2 _2
_2 _4 _2 2 4 _2
2 _2 _4 _2 2 4
4 2 _2 _4 _2 2
2 4 2 _2 _4 _2
_2 2 4 2 _2 _4

```

◇ 縮退が若干解けた場合

(固有値 -1 で完全、 1 で不完全に解けた)

```

]ALb1_3b=.u6 ip u6 ip u6 ip bzc ip bze ip bzf
2 _1 _1 2 _1 _1
_1 _2 _1 _1 _2 _1
_1 _1 _2 _1 _1 _2
2 _1 _1 2 _1 _1
_1 _2 _1 _1 _2 _1
_1 _1 2 _1 _1 2

```

(固有値 -1 で不完全、 1 で完全に解けた)

```

]ALb_1_1=.bza ip u6 ip u6 ip u6 ip bze ip bzf
_2 _1 _1 2 1 _1
_1 _2 _1 1 2 1
1 _1 _2 _1 1 2
2 1 _1 _2 _1 1
1 2 1 _1 _2 _1
_1 1 2 _1 _1 _2

```

・ 上記の計算は、簡単に一手ずつ計算出来るが、もしも、まとめた

プログラムにすれば、志村論文の如きスタイルのものに近づこう。

目下のところ、志村論文のプログラムは ミスプリントか何かの不幸で、
円滑に動いて居らぬのが残念である。改良を追記してある。

・ 話の要点は尽きたが、量子化学の教科書類の話題に合わせて、さらに

若干を追加して置く。単なる親切心である。

```

pyr7
1 1 0 0 0 0 0
1 0 1 0 0 0 1
0 1 0 1 0 0 0
0 0 1 0 0.8 0 0
0 0 0 0.8 2 0.8 0
0 0 0 0 0.8 0 1
0 1 0 0 0 1 0

```

```
Lpyr=. nchar_lf pyr7
```

```
1{Lpyr
```

```
| 2.63252 2 _1.90945 1 _1 0.826036 _0.549107 |
```

```
2{Lpyr
```

```
| 4.56 1.16 _16.84 2.12 15.28 _4.28 _3 1 |
```

```
Zpyr=. nchar_evec pyr7
```

```
pfmt Zpyr
```

```

|_1.909| 7.185_20.904 16.365_10.344 4.234_10.344 16.365|
| | _20.904 60.819_47.614 30.096_12.317 30.096_47.614 |
| | 16.365_47.614 37.275_23.562 9.643_23.562 37.275 |
| | _10.344 30.096_23.562 14.893 _6.095 14.893_23.562 |
| | 4.234_12.317 9.643 _6.095 2.495 _6.095 9.643 |
| | _10.344 30.096_23.562 14.893 _6.095 14.893_23.562 |
| | 16.365_47.614 37.275_23.562 9.643_23.562 37.275 |
|_1.000| 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000|
| | 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 |
| | 0.000 0.000 _4.080 4.080 0.000 _4.080 4.080 |
| | 0.000 0.000 4.080 _4.080 0.000 4.080 _4.080 |
| | 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 |
| | 0.000 0.000 _4.080 4.080 0.000 _4.080 4.080 |
| | 0.000 0.000 4.080 _4.080 0.000 4.080 _4.080 |
|_0.549| 1.120 _1.735 _0.084 1.781 _1.118 1.781 _0.084|
| | _1.735 2.687 0.130 _2.758 1.731 _2.758 0.130 |
| | _0.084 0.130 0.006 _0.133 0.083 _0.133 0.006 |
| | 1.781 _2.758 _0.133 2.831 _1.777 2.831 _0.133 |
| | _1.118 1.731 0.083 _1.777 1.115 _1.777 0.083 |
| | 1.781 _2.758 _0.133 2.831 _1.777 2.831 _0.133 |
| | _0.084 0.130 0.006 _0.133 0.083 _0.133 0.006 |
|_0.826| _1.250 0.217 0.715 0.373 _0.508 0.373 0.715|
| | 0.217 _0.038 _0.124 _0.065 0.088 _0.065 _0.124 |
| | 0.715 _0.124 _0.409 _0.213 0.291 _0.213 _0.409 |

```

		0.373	_0.065	_0.213	_0.111	0.152	_0.111	_0.213		
		_0.508	0.088	0.291	0.152	_0.207	0.152	0.291		
		0.373	_0.065	_0.213	_0.111	0.152	_0.111	_0.213		
		0.715	_0.124	_0.409	_0.213	0.291	_0.213	_0.409		

	1.000		0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000		
		0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000		
		0.000	0.000	0.640	0.640	0.000	_0.640	_0.640		
		0.000	0.000	0.640	0.640	0.000	_0.640	_0.640		
		0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000		
		0.000	0.000	_0.640	_0.640	0.000	0.640	0.640		
		0.000	0.000	_0.640	_0.640	0.000	0.640	0.640		

	2.000		_7.680	_7.680	_3.840	0.000	4.800	0.000	_3.840	
		_7.680	_7.680	_3.840	0.000	4.800	0.000	_3.840		
		_3.840	_3.840	_1.920	0.000	2.400	0.000	_1.920		
		0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000		
		4.800	4.800	2.400	0.000	_3.000	0.000	2.400		
		0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000		
		_3.840	_3.840	_1.920	0.000	2.400	0.000	_1.920		

	2.633		1.385	2.261	2.284	3.751	9.488	3.751	2.284	
		2.261	3.692	3.728	6.123	15.490	6.123	3.728		
		2.284	3.728	3.766	6.185	15.644	6.185	3.766		
		3.751	6.123	6.185	10.158	25.694	10.158	6.185		
		9.488	15.490	15.644	25.694	64.996	25.694	15.644		
		3.751	6.123	6.185	10.158	25.694	10.158	6.185		
		2.284	3.728	3.766	6.185	15.644	6.185	3.766		

8. スチレン Styrene C6H5CH:CH2

ヒュッケル Hueckel 行列 str8 は

```

0 1 0 0 0 1 1 0
1 0 1 0 0 0 0 0
0 1 0 1 0 0 0 0
0 0 1 0 1 0 0 0
0 0 0 1 0 1 0 0
1 0 0 0 1 0 0 0
1 0 0 0 0 0 0 1
0 0 0 0 0 0 1 0

```

```
Lstr8=. nchar_lf str8
```

```
1{Lstr8 固有値
```

```
| 2.13578 _2.13578 1.41421 _1.41421 1 _1 0.662153 _0.662153 |
```

2{Lstr8 固有多項式

```
| 4 0 _16 0 19 0 _8 0 1 |
```

Zstr8=. nchar_evec str8

pfmt Zstr8 固有ベクトル

```
| _2.136|_42.305 32.492_27.092 25.369_27.092 32.492 25.369_11.878 |
| | 32.492_24.956 20.808_19.485 20.808_24.956_19.485 9.123 |
| | _27.092 20.808_17.349 16.246_17.349 20.808 16.246 _7.607 |
| | 25.369_19.485 16.246_15.213 16.246_19.485_15.213 7.123 |
| | _27.092 20.808_17.349 16.246_17.349 20.808 16.246 _7.607 |
| | 32.492_24.956 20.808_19.485 20.808_24.956_19.485 9.123 |
| | 25.369_19.485 16.246_15.213 16.246_19.485_15.213 7.123 |
| | _11.878 9.123 _7.607 7.123 _7.607 9.123 7.123 _3.335 |
|-----|
| _1.414| 1.414 0.000 _1.414 2.000 _1.414 0.000 _2.000 1.414 |
| | 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 |
| | _1.414 0.000 1.414 _2.000 1.414 0.000 2.000 _1.414 |
| | 2.000 0.000 _2.000 2.828 _2.000 0.000 _2.828 2.000 |
| | _1.414 0.000 1.414 _2.000 1.414 0.000 2.000 _1.414 |
| | 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 |
| | _2.000 0.000 2.000 _2.828 2.000 0.000 2.828 _2.000 |
| | 1.414 0.000 _1.414 2.000 _1.414 0.000 _2.000 1.414 |
|-----|
| _1.000| 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 |
| | 0.000 _1.000 1.000 0.000 _1.000 1.000 0.000 0.000 |
| | 0.000 1.000 _1.000 0.000 1.000 _1.000 0.000 0.000 |
| | 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 |
| | 0.000 _1.000 1.000 0.000 _1.000 1.000 0.000 0.000 |
| | 0.000 1.000 _1.000 0.000 1.000 _1.000 0.000 0.000 |
| | 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 |
| | 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 |
|-----|
| _0.662| 0.535 _0.492 _0.209 0.631 _0.209 _0.492 0.631 _0.952 |
| | _0.492 0.453 0.192 _0.581 0.192 0.453 _0.581 0.877 |
| | _0.209 0.192 0.082 _0.246 0.082 0.192 _0.246 0.372 |
| | 0.631 _0.581 _0.246 0.744 _0.246 _0.581 0.744 _1.123 |
| | _0.209 0.192 0.082 _0.246 0.082 0.192 _0.246 0.372 |
| | _0.492 0.453 0.192 _0.581 0.192 0.453 _0.581 0.877 |
| | 0.631 _0.581 _0.246 0.744 _0.246 _0.581 0.744 _1.123 |
| | _0.952 0.877 0.372 _1.123 0.372 0.877 _1.123 1.696 |
|-----|
| 0.662| _0.535 _0.492 0.209 0.631 0.209 _0.492 0.631 0.952 |
| | _0.492 _0.453 0.192 0.581 0.192 _0.453 0.581 0.877 |
| | 0.209 0.192 _0.082 _0.246 _0.082 0.192 _0.246 _0.372 |
| | 0.631 0.581 _0.246 _0.744 _0.246 0.581 _0.744 _1.123 |
```

	0.209	0.192	-0.082	-0.246	-0.082	0.192	-0.246	-0.372
	-0.492	-0.453	0.192	0.581	0.192	-0.453	0.581	0.877
	0.631	0.581	-0.246	-0.744	-0.246	0.581	-0.744	-1.123
	0.952	0.877	-0.372	-1.123	-0.372	0.877	-1.123	-1.696
1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	0.000	1.000	1.000	0.000	-1.000	-1.000	0.000	0.000
	0.000	1.000	1.000	0.000	-1.000	-1.000	0.000	0.000
	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	0.000	-1.000	-1.000	0.000	1.000	1.000	0.000	0.000
	0.000	-1.000	-1.000	0.000	1.000	1.000	0.000	0.000
	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
1.414	-1.414	0.000	1.414	2.000	1.414	0.000	-2.000	-1.414
	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	1.414	0.000	-1.414	-2.000	-1.414	0.000	2.000	1.414
	2.000	0.000	-2.000	-2.828	-2.000	0.000	2.828	2.000
	1.414	0.000	-1.414	-2.000	-1.414	0.000	2.000	1.414
	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
	-2.000	0.000	2.000	2.828	2.000	0.000	-2.828	-2.000
	-1.414	0.000	1.414	2.000	1.414	0.000	-2.000	-1.414
2.136	42.305	32.492	27.092	25.369	27.092	32.492	25.369	11.878
	32.492	24.956	20.808	19.485	20.808	24.956	19.485	9.123
	27.092	20.808	17.349	16.246	17.349	20.808	16.246	7.607
	25.369	19.485	16.246	15.213	16.246	19.485	15.213	7.123
	27.092	20.808	17.349	16.246	17.349	20.808	16.246	7.607
	32.492	24.956	20.808	19.485	20.808	24.956	19.485	9.123
	25.369	19.485	16.246	15.213	16.246	19.485	15.213	7.123
	11.878	9.123	7.607	7.123	7.607	9.123	7.123	3.335

9. ナフタレン Naphthalene C10H8

nap10

```

0 1 0 0 0 0 0 0 1 0
1 0 1 0 0 0 0 0 0 0
0 1 0 1 0 0 0 0 0 0
0 0 1 0 0 0 0 0 0 1
0 0 0 0 0 1 0 0 0 1
0 0 0 0 1 0 1 0 0 0
0 0 0 0 0 1 0 1 0 0
0 0 0 0 0 0 1 0 1 0
1 0 0 0 0 0 0 1 0 1
0 0 0 1 1 0 0 0 1 0

```

Lnap10=. nchar_lf nap10

1{Lnap10

2.30278	-2.30278	1.61803	-1.61803	1.30278	-1.30278	1	-1	0.618034	-0.618034
---------	----------	---------	----------	---------	----------	---	----	----------	-----------

2{Lnap10

|_9 0 43 0 _65 0 41 0 _11 0 1|

Znap10=. nchar_evec nap10
pfmt Znap10

```
|_2.303|_85.267 65.450_65.450 85.267 85.267_65.450 65.450_85.267130.900*****|
|   | 65.450_50.239 50.239_65.450_65.450 50.239_50.239 65.450*****100.478|
|   |_65.450 50.239_50.239 65.450 65.450_50.239 50.239_65.450100.478*****|
|   | 85.267_65.450 65.450_85.267_85.267 65.450_65.450 85.267*****130.900|
|   | 85.267_65.450 65.450_85.267_85.267 65.450_65.450 85.267*****130.900|
|   |_65.450 50.239_50.239 65.450 65.450_50.239 50.239_65.450100.478*****|
|   | 65.450_50.239 50.239_65.450_65.450 50.239_50.239 65.450*****100.478|
|   |_85.267 65.450_65.450 85.267 85.267_65.450 65.450_85.267130.900*****|
|   |130.900*****100.478*****100.478*****130.900*****200.955|
|   |*****100.478*****130.900130.900*****100.478*****200.955*****|
|-----|
|_1.618| 2.000 _3.236 3.236 _2.000 2.000 _3.236 3.236 _2.000 0.000 0.000|
|   |_3.236 5.236 _5.236 3.236 _3.236 5.236 _5.236 3.236 0.000 0.000|
|   | 3.236 _5.236 5.236 _3.236 3.236 _5.236 5.236 _3.236 0.000 0.000|
|   |_2.000 3.236 _3.236 2.000 _2.000 3.236 _3.236 2.000 0.000 0.000|
|   | 2.000 _3.236 3.236 _2.000 2.000 _3.236 3.236 _2.000 0.000 0.000|
|   |_3.236 5.236 _5.236 3.236 _3.236 5.236 _5.236 3.236 0.000 0.000|
|   | 3.236 _5.236 5.236 _3.236 3.236 _5.236 5.236 _3.236 0.000 0.000|
|   |_2.000 3.236 _3.236 2.000 _2.000 3.236 _3.236 2.000 0.000 0.000|
|   | 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000|
|   | 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000|
|-----|
|_1.303|_1.267 0.550 0.550 _1.267 _1.267 0.550 0.550 _1.267 1.100 1.100|
|   | 0.550 _0.239 _0.239 0.550 0.550 _0.239 _0.239 0.550 _0.478 _0.478|
|   | 0.550 _0.239 _0.239 0.550 0.550 _0.239 _0.239 0.550 _0.478 _0.478|
000 0.000|
|   | 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000 0.000|
0 0.550 1.267 1.100 _1.100|
|   | 0.550 0.239 _0.239 _0.550 _0.550 _0.239 0.239 0.550 0.478 _0.478|
```

途中、印刷を省略して、

```
| 2.303| 85.267 65.450 65.450 85.267 85.267 65.450 65.450 85.267130.900130.900|
|   | 65.450 50.239 50.239 65.450 65.450 50.239 50.239 65.450100.478100.478|
|   | 65.450 50.239 50.239 65.450 65.450 50.239 50.239 65.450100.478100.478|
|   | 85.267 65.450 65.450 85.267 85.267 65.450 65.450 85.267130.900130.900|
|   | 85.267 65.450 65.450 85.267 85.267 65.450 65.450 85.267130.900130.900|
|   | 65.450 50.239 50.239 65.450 65.450 50.239 50.239 65.450100.478100.478|
|   | 65.450 50.239 50.239 65.450 65.450 50.239 50.239 65.450100.478100.478|
|   | 85.267 65.450 65.450 85.267 85.267 65.450 65.450 85.267130.900130.900|
|   |130.900100.478100.478130.900130.900100.478100.478130.900200.955200.955|
|   |130.900100.478100.478130.900130.900100.478100.478130.900200.955200.955|
```


● 比較: 中野の新法 N_evec でやれば、結果は、よりスマートになる。

N_evec nap10

2.30278	_2.30278	1.61803	_1.61803	1.30278	_1.30278	1	_1	0.618034	_0.618034
---------	----------	---------	----------	---------	----------	---	----	----------	-----------

2.30278

85.267	65.450	65.450	85.267	85.267	65.450	65.450	85.267	130.900	130.900
65.450	50.239	50.239	65.450	65.450	50.239	50.239	65.450	100.478	100.478
65.450	50.239	50.239	65.450	65.450	50.239	50.239	65.450	100.478	100.478
85.267	65.450	65.450	85.267	85.267	65.450	65.450	85.267	130.900	130.900
85.267	65.450	65.450	85.267	85.267	65.450	65.450	85.267	130.900	130.900
65.450	50.239	50.239	65.450	65.450	50.239	50.239	65.450	100.478	100.478
65.450	50.239	50.239	65.450	65.450	50.239	50.239	65.450	100.478	100.478
85.267	65.450	65.450	85.267	85.267	65.450	65.450	85.267	130.900	130.900
130.900	100.478	100.478	130.900	130.900	100.478	100.478	130.900	200.955	200.955
130.900	100.478	100.478	130.900	130.900	100.478	100.478	130.900	200.955	200.955

_2.30278

_85.267	65.450	_65.450	85.267	85.267	_65.450	65.450	_85.267	130.900	*****
65.450	_50.239	50.239	_65.450	65.450	50.239	_50.239	65.450	*****	100.478
_65.450	50.239	_50.239	65.450	65.450	_50.239	50.239	_65.450	100.478	*****
85.267	_65.450	65.450	_85.267	85.267	65.450	_65.450	85.267	*****	130.900
85.267	_65.450	65.450	_85.267	85.267	65.450	_65.450	85.267	*****	130.900
_65.450	50.239	_50.239	65.450	65.450	_50.239	50.239	_65.450	100.478	*****
65.450	_50.239	50.239	_65.450	65.450	50.239	_50.239	65.450	*****	100.478
_85.267	65.450	_65.450	85.267	85.267	_65.450	65.450	_85.267	130.900	*****
130.900	*****	100.478	*****	*****	100.478	*****	130.900	*****	200.955
*****	100.478	*****	130.900	130.900	*****	100.478	*****	200.955	*****

1.61803

_2.000	_3.236	_3.236	_2.000	2.000	3.236	3.236	2.000	0.000	0.000
_3.236	_5.236	_5.236	_3.236	3.236	5.236	5.236	3.236	0.000	0.000
_3.236	_5.236	_5.236	_3.236	3.236	5.236	5.236	3.236	0.000	0.000
_2.000	_3.236	_3.236	_2.000	2.000	3.236	3.236	2.000	0.000	0.000
2.000	3.236	3.236	2.000	_2.000	_3.236	_3.236	_2.000	0.000	0.000
3.236	5.236	5.236	3.236	_3.236	_5.236	_5.236	_3.236	0.000	0.000
3.236	5.236	5.236	3.236	_3.236	_5.236	_5.236	_3.236	0.000	0.000
2.000	3.236	3.236	2.000	_2.000	_3.236	_3.236	_2.000	0.000	0.000

0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	_1.000	_1.000	0.000	0.000	_1.000	_1.000	0.000	1.000	1.000
0.000	_1.000	_1.000	0.000	0.000	_1.000	_1.000	0.000	1.000	1.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	_1.000	_1.000	0.000	0.000	_1.000	_1.000	0.000	1.000	1.000
0.000	_1.000	_1.000	0.000	0.000	_1.000	_1.000	0.000	1.000	1.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	1.000	1.000	0.000	0.000	1.000	1.000	0.000	_1.000	_1.000
0.000	1.000	1.000	0.000	0.000	1.000	1.000	0.000	_1.000	_1.000

|_1|

0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	1.000	_1.000	0.000	0.000	_1.000	1.000	0.000	_1.000	1.000
0.000	_1.000	1.000	0.000	0.000	1.000	_1.000	0.000	1.000	_1.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	_1.000	1.000	0.000	0.000	1.000	_1.000	0.000	1.000	_1.000
0.000	1.000	_1.000	0.000	0.000	_1.000	1.000	0.000	_1.000	1.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	_1.000	1.000	0.000	0.000	1.000	_1.000	0.000	1.000	_1.000
0.000	1.000	_1.000	0.000	0.000	_1.000	1.000	0.000	_1.000	1.000

|0.618034|

2.000	1.236	_1.236	_2.000	2.000	1.236	_1.236	_2.000	0.000	0.000
1.236	0.764	_0.764	_1.236	1.236	0.764	_0.764	_1.236	0.000	0.000
_1.236	_0.764	0.764	1.236	_1.236	_0.764	0.764	1.236	0.000	0.000
_2.000	_1.236	1.236	2.000	_2.000	_1.236	1.236	2.000	0.000	0.000
2.000	1.236	_1.236	_2.000	2.000	1.236	_1.236	_2.000	0.000	0.000
1.236	0.764	_0.764	_1.236	1.236	0.764	_0.764	_1.236	0.000	0.000
_1.236	_0.764	0.764	1.236	_1.236	_0.764	0.764	1.236	0.000	0.000
_2.000	_1.236	1.236	2.000	_2.000	_1.236	1.236	2.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

|_0.618034|

_2.000	1.236	1.236	_2.000	2.000	_1.236	_1.236	2.000	0.000	0.000
1.236	_0.764	_0.764	1.236	_1.236	0.764	0.764	_1.236	0.000	0.000
1.236	_0.764	_0.764	1.236	_1.236	0.764	0.764	_1.236	0.000	0.000
_2.000	1.236	1.236	_2.000	2.000	_1.236	_1.236	2.000	0.000	0.000
2.000	_1.236	_1.236	2.000	_2.000	1.236	1.236	_2.000	0.000	0.000

	_1.236	0.764	0.764	_1.236	1.236	_0.764	_0.764	1.236	0.000	0.000	
	_1.236	0.764	0.764	_1.236	1.236	_0.764	_0.764	1.236	0.000	0.000	
	2.000	_1.236	_1.236	2.000	_2.000	1.236	1.236	_2.000	0.000	0.000	
	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	
	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	

ま一、こんなところで、量子化学の処理も簡単になった気持ちである。

多量の数値の印刷であり、改良の余地はある。

文 献

1) 志村正人:「マトリックスの数学と数値計算 (1)

行列式と行列の固有値」pp. 47、JAPLA 夏の合宿 2010/8/3

Script 訂正ヒント: pp.23-24 char_lf にはミスプリントがあるらしいと既報

しておいた。

p.24, 上から5行目、ANS の左に |. (逆順) を挿入すべきと思う。

これを、修正すれば、志村報告の Scripts は有効に使える。

さも無い時は、中野関数、nchar_lf を使うか、固有ベクトル計算を含めた N_evec 関数を使えば良い。

2) 志村正人:「マトリックスの数学と数値計算 (2):行列の変換」

JAPLA 2010.9月25日報告 pp.40

3) 中野嘉弘:「固有ベクトル計算法 志村論文の理解のために」pp. 11

JAPLA 2010/9/25

4) 中野嘉弘:「固有ベクトル計算法 (その2) 量子化学の例題:ベンゼン」

pp. 18、JAPLA 2010/10/23

5) 西川利男:「nchar_evec 関数で、3~4次の行列で、固有ベクトル計算

例題のトレース」しました。FAX (2010.9.27 11.32)

6) 西川利男:「量子化学計算: ベンゼン BZ と クロロベンゼン QC の

分子軌道の固有ベクトル計算」を 志村・中野関数でトライした。

FAX(2010.9.28 14.56)

7) 参考書: 米沢貞次郎「量子化学入門(上)」化学同人社、1983.4刊 \3,500、
p.50, p.59。なお、「同(下)」は1983.10刊 \4,300。

7a) 中野註: 詳しくは 米沢貞次郎・永田親義・加藤博史・今村 詮・
諸熊けい治「三訂 量子化学入門(上)」化学同人、第3版第2刷 1984.5.10、
「同(下)」同、第3版第1刷 1983.10.1、\4,600

上記の米沢・永田・加藤・今村・諸熊「三訂 量子化学入門

(上)」1984.5刊では p.57 (2.22) に ベンゼンの永年方程式あり。

クロロベンゼンの記述は、残念ながら見えない。

7b) 中野嘉弘:FAX「ベンゼンの固有ベクトル中、固有値が ± 1 に対応する

4 つが全てゼロであるのは何故か? この縮退は、摂動もどきを加えて、
解くことが出来た。」2010.9.28 午後、-> 西川会長宛て FAX。

7c) 中田宗隆「量子化学 III 化学者のための数学入門 12 章」東京化学同人(東京都

文京区、単なる化学同人社は京都市山科区)、2005.10.1、\2400。

p.104, p.159、pp.128-129。

● 関数のスクリプト

```
LF0=: >@{:@p.@charn0

charn0 =: 3 : 0
In=. =@i.n=. # y
X=.In
i=.0
p=.1
for_k. >: i.n do.
X =. y + / . * X

trX =. +/(<0 1)|:X

pk=. -k%~trX
p=.p,pk
X=.X+ pk * In
i=.i + 1
end.
```

```

|.p
)

un=: 3 : '@i.y' NB. unit matrix

pfmt3 =: 3 : '7j3 ": L:0 /: ~ |: y'

sample=: 3 : 0
:
~./:"1~(i.x){"1 plist y
)
plist=:i.@!A.i.

nchar_lf =: 3 : 0 NB. by Nakano 2010 Sep.19
1; (LF0 y);charn0 y
)

nchar_evec=: 3 : 0 NB. by Nakano 2010 Sep.19
NB. char_evec=: 3 : 0
NB. EIGEN=: {> ; 1{ char_lf y

EIGEN=: {> ; 1{ nchar_lf y

EIGEN2=: {> L:0 EIGEN ^/L:0 |.i.# EIGEN

ADJMAT=: char_lf_evec_sub y
ANS=.<'
  for_LF. i. # y do.
NB.   for_LF. 0 1 2 4 3 5 do.
  wr ' LF(Eig2) = ', ": LF{EIGEN2
  wr ' ADJMART = '
  wr ADJMAT
  wr 'label of ADJMAT = '
  wr L. ADJMAT
  TMP=. +/> (> LF{ EIGEN2) * L:0 ADJMAT
  wr ' TMP = '
  wr TMP
ANS=. ANS,<TMP
end.
EIGEN,:}.ANS NB. Shimura
NB. wr 'EIGEN'
NB.wr EIGEN
NB.wr 'ANS'
NB.wr ANS
NB. (2, # y) $ (EIGEN) , (}.ANS)
NB.ANS
)

```

NB. by Y.Nakano 2010 Sept.

```

N_evec=: 3 : 0

yi=. LF0 y
wr ;/ yi
ny=. # yi
uy =. un ny
i=.0
alwk=. < uy
while. i<ny do.
wi0=(y - (i{yi)*uy)
alwk =. alwk , "1 < wi0
i=.i+1
end.
NB. wr ' i = ', ": i
lawk=. |. }.alwk
ns=. (ny-1) sample ny
j=.0
NB. alwk0=. }. lawk
while. j < # ns do.
wr < j{yi
wr pfmt3 < ip/>(j{ns){lawk
j=.j+1
end.
' '
)

```