

非可換調和振動子に関する coupling 型固有値問題の精度保証について

長藤 かおり

Kaori Nagatou

京都大学数理解析研究所

中尾 充宏

Mitsuhiro T. Nakao

九州大学大学院数理学研究科

若山 正人

Masato Wakayama

九州大学大学院数理学研究科

1 Introduction

本稿では、自己共役作用素

$$Q_{(\alpha,\beta)} \equiv I_{(\alpha,\beta)} \left(-\frac{\partial_x^2}{2} + \frac{x^2}{2} \right) + J \left(x\partial_x + \frac{1}{2} \right), \quad x \in \mathbb{R}$$

の固有値を精度保証付きで求める問題について考える。ここで、

$$I_{(\alpha,\beta)} \equiv \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}, \quad J \equiv \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \in \text{Mat}_2(\mathbb{R})$$

で、 α と β は、 $\alpha\beta > 1$ を満たす正定数である。

この作用素は、一次元調和振動子

$$\mathcal{H} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x^2$$

のハミルトニアンに関連しているが、そのスペクトルは、 $\alpha = \beta$ の場合を除いて分かっていない (cf. [5])。 $\alpha\beta > 1$ という条件のもとでは、 $Q_{(\alpha,\beta)}$ は実離散スペクトルのみをもつことが知られているため、ここでは $\alpha\beta > 1$ の場合のみを考えることにする。

我々は、非線形楕円型方程式に対する数値的検証法を応用して、楕円型固有値問題に対する数値的検証法を提案してきた (cf. [3, 4])。

本稿では、一次元調和振動子の固有関数からなる $L^2(\mathbb{R})$ の完全正規直交基底を用いて、上記の方法を、非有界領域における coupling 型固有値問題に適用する。

2 弱形式と不動点定式化

次の固有値問題を考える：

Find $\lambda \in \mathbb{R}$ and $0 \neq u \in (L^2(\mathbb{R}))^2$ satisfying

$$Q_{(\alpha,\beta)}u = \lambda u \quad (1)$$

はじめに、 $(\cdot, \cdot)_{L^2}$ および $\|\cdot\|$ を通常の $L^2(\mathbb{R})$ 内積、 $L^2(\mathbb{R})$ ノルムとし、 $u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$, $v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \in (L^2(\mathbb{R}))^2$ に対して、

$$(u, v)_{(L^2)^2} \equiv (u_1, v_1)_{L^2} + (u_2, v_2)_{L^2}$$

$$\|u\|_{(L^2)^2} \equiv (\|u_1\|^2 + \|u_2\|^2)^{\frac{1}{2}}$$

と定義する。次に、関数空間 V を、

$$V \equiv \{v \in (L^2(\mathbb{R}))^2 \mid v, v', xv \in (L^2(\mathbb{R}))^2 \text{ (in the distributional sense)}\}$$

と定義し、 V におけるノルム $\|\cdot\|_V$ を、

$$\|v\|_V \equiv (\|v'_1\|^2 + \|xv_1\|^2 + \|v'_2\|^2 + \|xv_2\|^2)^{\frac{1}{2}} \quad \text{for } v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \in V$$

と定義する。このとき、 V はノルム $\|\cdot\|_V$ について完備となる。

さて、対称な双線形形式 $b(\cdot, \cdot)$ を、

$$b(u, v) \equiv \langle Q_{(\alpha,\beta)}u, v \rangle_{V',V} \quad \text{for } u, v \in V,$$

と定義する。ここで、 V' は V の双対空間、 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{V',V}$ は双対内積である。

この b を使って、次の弱形式での固有値問題を考える：

Find $(u, \lambda) \in V \times \mathbb{R}$ satisfying

$$\begin{cases} b(u, v) = \lambda(u, v)_{(L^2)^2} & \text{for } v \in V \\ \|u\|_{(L^2)^2} = 1 \end{cases} \quad (2)$$

b は、coercive かつ連続となり、

$$b(u, u) \geq C_{(\alpha, \beta)} \|u\|_V^2 \quad \text{for } u \in V \quad (3)$$

$$b(u, v) \leq D_{(\alpha, \beta)} \|u\|_V \|v\|_V \quad \text{for } u, v \in V \quad (4)$$

を満たす正の実数 $C_{(\alpha, \beta)}$ と $D_{(\alpha, \beta)}$ が存在する。従って、Lax-Milgram の定理より、任意の $g \in (L^2(\mathbb{R}))^2$ に対して、

$$b(\phi, v) = (g, v)_{(L^2)^2} \quad \text{for } v \in V \quad (5)$$

を満たす一意解 $\phi \in V$ が存在する。 $g \in (L^2(\mathbb{R}))^2$ に対し、 Eg を、(5) の解 $\phi \in V$ として定めると、 E は、 $(L^2(\mathbb{R}))^2$ から V へのコンパクト作用素となる。

S_N を、

$$S_N \equiv \text{span}\{\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_N\}$$

で定義される、整数パラメータ N に依存する $L^2(\mathbb{R})$ の有限次元部分空間とする。このとき、 $(S_N)^2$ は V の有限次元部分空間となる。ここで、

$$\varphi_\nu(x) \equiv (2^\nu \nu!)^{-\frac{1}{2}} \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{2}} (-1)^\nu e^{x^2} \frac{d^\nu}{dx^\nu} e^{-x^2} \quad (\nu = 0, \dots, N)$$

で、 $\{\varphi_\nu\}_{\nu=0}^\infty$ は $L^2(\mathbb{R})$ の完全正規直交系である。

また、 $u \in V$ に対して、projection $P : V \rightarrow (S_N)^2$ を、

$$b(u - Pu, v_N) = 0 \quad \forall v_N \in (S_N)^2$$

で定義する。このとき、 $Q_{(\alpha, \beta)} u \in (L^2(\mathbb{R}))^2$ ならば、次の誤差評価を導くことができる：

$$\|u - Pu\|_V \leq \frac{D_{(\alpha, \beta)}}{C_{(\alpha, \beta)}} \frac{1}{\sqrt{(2N+3)C_{(\alpha, \beta)}}} \|Q_{(\alpha, \beta)} u\|_{(L^2)^2} \quad (6)$$

また、 L^2 評価として、

$$\|u - Pu\|_{(L^2)^2} \leq \frac{D_{(\alpha, \beta)}^2}{C_{(\alpha, \beta)}^2} \frac{1}{2N+3} \|Q_{(\alpha, \beta)} u\|_{(L^2)^2}$$

も得られる。

この誤差評価は、後で導く不動点方程式を、有限次元部分とその誤差 (無限次元部分) に分けたときに、無限次元部分を評価するときに用いる。

次に、(2) の近似解 $\hat{w}_N = (\hat{u}_N, \hat{\lambda}_N) \in (S_N)^2 \times \mathbb{R}$ を、

find $\hat{\lambda}_N \in \mathbb{R}$ and $0 \neq \hat{u}_N \in (S_N)^2$ satisfying

$$\begin{cases} b(\hat{u}_N, v_N) = \hat{\lambda}_N (\hat{u}_N, v_N)_{(L^2)^2} & \forall v_N \in (S_N)^2 \\ \|\hat{u}_N\|_{(L^2)^2} = 1 \end{cases} \quad (7)$$

で定め、

$$b(\bar{u}, v) = (\hat{\lambda}_N \hat{u}_N, v)_{(L^2)^2} \quad \text{for } v \in V \quad (8)$$

を満たす $\bar{u} \in V$ を考える。 $\hat{\lambda}_N \hat{u}_N \in (L^2(\mathbb{R}))^2$ のとき、このような $\bar{u}$ は V に一意に存在し、 $P\bar{u} = \hat{u}_N$ が成り立つことに注意。 $v_0 = \bar{u} - \hat{u}_N$ とおくと、 v_0 について次の a posteriori 誤差評価が成り立つ：

$$\|v_0\|_{(L^2)^2} \leq \frac{D_{(\alpha, \beta)}^2}{C_{(\alpha, \beta)}^2} \frac{1}{2N+3} \|Q_{(\alpha, \beta)} \hat{u}_N - \hat{\lambda}_N \hat{u}_N\|_{(L^2)^2} \quad (9)$$

ここで、 $\tilde{u} \equiv u - \bar{u}$, $\tilde{\lambda} \equiv \lambda - \hat{\lambda}_N$ とおくと、(2) の引き戻し形 (residual form)

$$\begin{cases} b(\tilde{u}, v) = ((\hat{\lambda}_N + \tilde{\lambda})(\hat{u}_N + v_0 + \tilde{u}) - \hat{\lambda}_N \hat{u}_N, v)_{(L^2)^2} & \text{for } v \in V \\ \|\hat{u}_N + v_0 + \tilde{u}\|_{(L^2)^2} = 1 \end{cases} \quad (10)$$

を得る。非線形作用素 $F : V \times \mathbb{R} \rightarrow V \times \mathbb{R}$ を、

$$F(\tilde{u}, \tilde{\lambda}) \equiv \begin{pmatrix} E((\hat{\lambda}_N + \tilde{\lambda})(\hat{u}_N + v_0 + \tilde{u}) - \hat{\lambda}_N \hat{u}_N) \\ \tilde{\lambda} + \|\hat{u}_N + v_0 + \tilde{u}\|_{(L^2)^2} - 1 \end{pmatrix} \quad (11)$$

で定義すると、 F は、 $V \times \mathbb{R}$ 上のコンパクト作用素となり、(10) は、 $w = (\tilde{u}, \tilde{\lambda})$ に対する不動点方程式

$$w = F(w) \quad \text{in } V \times \mathbb{R} \quad (12)$$

に書き直すことができる。

3 検証条件

不動点方程式 (12) を、projection P を用いて有限次元部分とその誤差 (無限次元部分) に分け、有限次元部分に、Newton-like method を適用するため、 $\rho \equiv (-v_0, 0)$ として次のような Newton-like 作用素を定義する：

$$\mathcal{N}(w) \equiv Pw - [I - F'(\rho)]_N^{-1}(Pw - PF(w))$$

ここで、 I は $V \times \mathbb{R}$ 上の恒等作用素で、 $F'(\rho)$ は、 F の ρ での Fréchet 導関数を表す。また、作用素 $P[I - F'(\rho)] : V \times \mathbb{R} \rightarrow (S_N)^2 \times \mathbb{R}$ を、 $(S_N)^2 \times \mathbb{R}$ に制限したものは、逆作用素 $[I - F'(\rho)]_N^{-1}$ を持つと仮定する。この仮定は、実際の計算時に確かめることができる。

次に、作用素 $T : V \times \mathbb{R} \rightarrow V \times \mathbb{R}$ を、

$$T(w) \equiv \mathcal{N}(w) + (I - P)F(w)$$

で定義する。このとき、 T は $V \times \mathbb{R}$ 上のコンパクト作用素になり、同値関係

$$w = T(w) \iff w = F(w)$$

が成り立つ。

さて、任意の $u \in V$ は、 $(S_N^\perp)^2$ を $(S_N)^2$ の V における直交補空間としたとき、

$$u = u_N + u_\perp, \quad u_N = \begin{pmatrix} \sum_{\nu=0}^N c_\nu^{(1)} \phi_\nu \\ \sum_{\nu=0}^N c_\nu^{(2)} \phi_\nu \end{pmatrix} \in (S_N)^2, \quad u_\perp \in (S_N^\perp)^2$$

と表すことができるので、 $w = (u, \lambda) \in V \times \mathbb{R}$ に対して、

$$(w)_i \equiv |c_i^{(1)}| \quad (i = 0, \dots, N)$$

$$(w)_i \equiv |c_{i-N-1}^{(2)}| \quad (i = N+1, \dots, 2N+1)$$

$$(w)_{2N+2} \equiv \|u_\perp\|_V$$

$$(w)_{2N+3} \equiv |\lambda|$$

と定義して、 $W_i > 0 (i = 0, \dots, 2N+3)$ に対して、解を含む候補者集合を、

$$W = \{w \in V \times \mathbb{R} \mid (w)_i \leq W_i \quad (i = 0, \dots, 2N+3)\}$$

とおく。また、

$$(T(0))_i \leq Y_i \quad (i = 0, \dots, 2N+3)$$

を満たすベクトル $(Y_0, \dots, Y_{2N+3}) \in \mathbb{R}^{2N+4}$, $Y_i > 0 (i = 0, \dots, 2N+3)$ と、任意の $w_1, w_2 \in W$ に対して、

$$(T'(w_1)w_2) \leq Z_i \quad (i = 0, \dots, 2N+3)$$

を満たすベクトル $(Z_0, \dots, Z_{2N+3}) \in \mathbb{R}^{2N+4}$, $Z_i > 0 (i = 0, \dots, 2N+3)$ を選ぶ。

$$K = \{v \in V \times \mathbb{R} \mid (v)_i \leq Y_i + Z_i \quad (i = 0, \dots, 2N+3)\}$$

とおくと、検証条件は次の定理で述べられる：

Theorem 2.

集合 $W = U \times \Lambda$ が、条件 $Y_i + Z_i < W_i \quad (i = 0, \dots, 2N+3)$ を満たすとき、次が成り立つ：

- i) $\exists^1 u^* : \text{eigenfunction s.t. } u^* - \bar{u} \in U, \|u^*\|_{(L^2)^2} = 1$
- ii) $\exists^1 \lambda^* : \text{eigenvalue s.t. } \lambda^* - \hat{\lambda}_N \in \Lambda$
- iii) $F(u^* - \bar{u}, \lambda^* - \hat{\lambda}_N) = (u^* - \bar{u}, \lambda^* - \hat{\lambda}_N)$
- iv) λ^* は幾何的多重度 1 の固有値

この定理は、Banach の不動点定理と、無限次元ホモトピー法を用いて証明することができる。具体的な検証手順は、[3, 4] と同様に考えられる。

4 固有値のパラメータ依存性

よく知られた、Minimum-Maximum principle を適用すると、作用素 $Q_{(\alpha, \beta)}$ の離散固有値 λ_k は、

$$\lambda_k = \min_{V_k \subset V, \dim V_k = k} \max_{0 \neq u \in V_k} \frac{b(u, u)}{(u, u)_{(L^2)^2}}$$

と特徴づけることができる。

$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$ に対して、

$$\begin{aligned} b(u, u) &= \frac{1}{2}\alpha(\|u'_1\|^2 + \|xu_1\|^2) - (xu'_2, u_1)_{L^2} \\ &\quad + \frac{1}{2}\beta(\|u'_2\|^2 + \|xu_2\|^2) + (xu'_1, u_2)_{L^2} \end{aligned}$$

であることより、 λ_k は、パラメータ α, β について連続で、単調性が成り立つことが分かる。

また、空間 $L^2(\mathbb{R})$ は、

$$\begin{aligned} L^2_+(\mathbb{R}) &= \text{span}\{\phi_\nu \mid \nu : \text{even}\} \\ L^2_-(\mathbb{R}) &= \text{span}\{\phi_\nu \mid \nu : \text{odd}\} \end{aligned}$$

を用いて、

$$L^2(\mathbb{R}) = L^2_+(\mathbb{R}) \oplus L^2_-(\mathbb{R})$$

と分解でき、作用素 $Q_{(\alpha, \beta)}$ が parity を保存することを考慮すると、前述の検証条件を満たす集合を求める計算は、even part と odd part に分けて計算することができ、even, odd に分けられない計算に比べて、メモリを節約することができる。

図 1 は、 $N = 800, \alpha = 3.0$ と固定したときに、横軸を $s = \beta/\alpha$ として、近似固有値 $\hat{\lambda}_N$ をプロットしたものである。ここで、太線は odd part から計算される固有値、細線は even part から計算される固有値を表す。

5 検証数値例

打ち切り項数を $N = 800$ として、 $\alpha = 3.0$ と固定し、 β をいろいろ動かした場合のいくつかの単純固有値を、even part と odd part に分けて検証することに成功した。計算は、区間演算ライブラリ PROFIL([1]) を用いて、Sun Enterprise 450 上で行った。

具体的には、図 1 の、A~F の 6 個の固有値の検証に成功し (いずれも多重度 1)、検証結果を表 1 に挙げた。(7) を満たす近似解 $\hat{u}_N, \hat{\lambda}_N$ は、非常に狭い区間で包み込まれた。 $\text{mid}[\hat{\lambda}_N]$ は、近似固有値 $\hat{\lambda}_N$ の包み込みの区間 $[\hat{\lambda}_N]$ の中点を表す。すなわち、真の固有値は、区間 $[\hat{\lambda}_N] + [-W_{2N+3}, W_{2N+3}]$ に存在する。

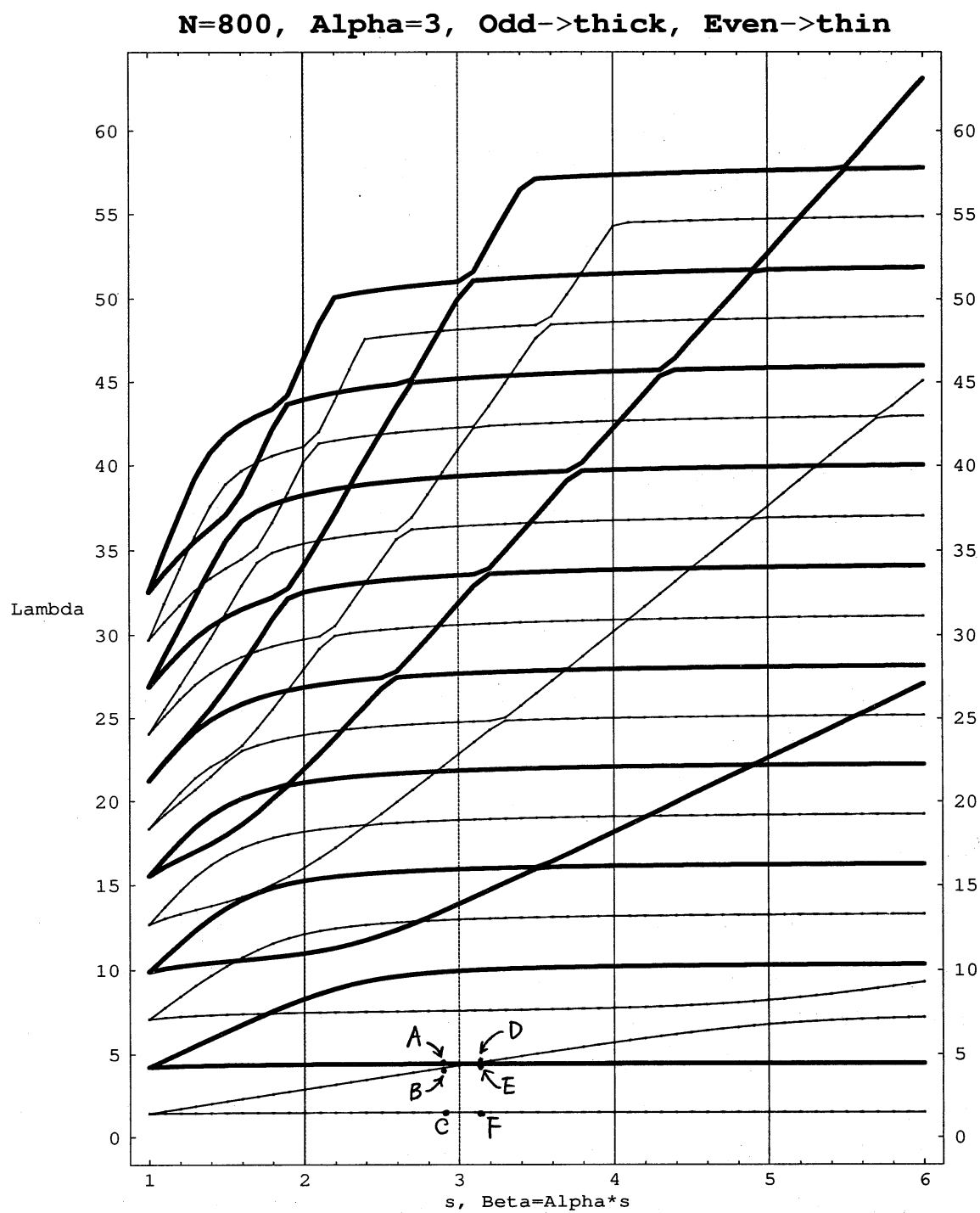


图 1: Approximate eigenvalue $\hat{\lambda}_N$

	W_{2N+3}	$\max_{i=0,\dots,2N+1}$	W_{2N+2}	$\text{mid } [\hat{\lambda}_N]$
A	2.092E-19	4.671E-20	1.1E-19	4.5
B	3.714E-18	1.625E-18	2.715E-18	4.45
C	7.102E-19	4.579E-19	3.295E-19	1.5
D	4.239E-18	1.913E-18	3.202E-18	4.55
E	1.632E-19	3.645E-20	8.702E-20	4.5
F	7.342E-19	4.737E-19	3.457E-19	1.5

表 1: 検証結果

また、A,E は odd part からくる単純固有値、B,D は even part からくる単純固有値であることと、A と B、D と E の間に固有値が存在しないことが [2, 4] のような方法で検証できたことから、固有値の、パラメータについての連続性と単調性ことから、結局、 $\alpha = 3.0$, $\beta \in [8.9, 9.1]$ のとき、 $\Lambda = [4.45, 4.55]$ の中に多重度 2 の固有値が存在することも保証されたことになる。

謝辞：

本研究を遂行するにあたり、ドイツ Clausthal 大学の Prof. Henning Behnke から有益なコメントをいただいたことに、深く感謝致します。

参考文献

- [1] O.Knüppel, PROFIL/BIAS - A fast interval library, Computing **53** (1994), 277-288.
- [2] K.Nagatou, N.Yamamoto and M.T.Nakao, An approach to the numerical verification of solutions for nonlinear elliptic problems with local uniqueness, Numerical Functional Analysis and Optimization, 20 (5 & 6), 543-565 (1999).
- [3] K.Nagatou, A numerical method to verify the elliptic eigenvalue problems including a uniqueness property, Computing **63**, 109-130 (1999).
- [4] M.T.Nakao, N.Yamamoto and K.Nagatou, Numerical Verifications for eigenvalues of second-order elliptic operators, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, Vol. 16 No. 3, 307-320 (1999).

- [5] A.Parmeggiani and M.Wakayama, Non-Commutative Harmonic Oscillators, Preprint Series in Mathematics, Kyushu University, **1998-12** (1998), 39 pages.
- [6] S.M.Rump, Solving algebraic problems with high accuracy, In:Kulisch, U., Miranker, W.L.(eds.) A new approach to scientific computation, New York:Academic Press (1983).