数理解析研究所講究録 1320 巻 2003 年 121-130

無限次元固有値問題に対する精度保証付き数値計算の現状と今後の展望

State of the Art for the Numerical Verification Method of Infinite Dimensional Eigenvalue Problems

長藤 かおり (Kaori Nagatou)
九州大学大学院数理学研究院 (Faculty of Mathematics, Kyushu University)

1. はじめに

ある無限次元作用素の固有値および固有関数を求める問題を「無限次元固有値問題」と呼ぶことがある．具体的には，

$$(H, < \cdot, \cdot >) : \text{Hilbert space}, \quad \dim H = \infty$$

とし，$D(L)$ を H 上の線形作用素 L の定義域としたときに，

$$Lu = \lambda u, \quad u \in D(L) \backslash \{0\} \tag{1}$$

を満たす固有関数 u と固有値 λ の対 (u, λ) を求める問題である．このような無限次元固有値問題は理工学における様々な非線形現象を解明する際にしばしば現れる問題であり，特に，扱う問題に対する線形化作用素の固有値を調べることが重要な意味を持つ場合が多い．

本稿では，無限次元固有値問題に対する精度保証付き数値計算についての現状と今後の展望について，具体例を交えながら述べる．

2. 作用素のスペクトル

T を H における線形作用素とするとき，

$$\rho(T) \equiv \{z \in \mathbf{C} \mid (T - z)^{-1} : \text{有界線形作用素}\}$$

を T のレゾルベント集合といい，

$$\sigma(T) = \mathbf{C} - \rho(T)$$

を T のスペクトルという．$\sigma(T)$ は次の互いに素な三つの部分集合に分割される：

$$
\begin{aligned}
\sigma_P(T) &= \{z \in \sigma(T) \mid T - z \text{が逆作用素を持たない}\} \\
\sigma_C(T) &= \{z \in \sigma(T) \mid \text{稠密な定義域を持つ非有界な}\ (T - z)^{-1} \text{が存在する}\} \\
\sigma_R(T) &= \{z \in \sigma(T) \mid \text{稠密でない定義域を持つ}\ (T - z)^{-1} \text{が存在する}\}
\end{aligned}
$$

$\sigma_P(T), \sigma_C(T), \sigma_R(T)$ をそれぞれ，点スペクトル，連続スペクトル，剰余スペクトルという．$\lambda \in \sigma_P(T)$ であるための必要十分条件は，

$$Tu = \lambda u$$

を満たす恒等的に 0 でない $u \in H$ が存在することである．$\lambda \in \sigma_P(T)$ を T の固有値といい，対応する $0 \neq u$ を固有関数というが，我々の目的はこのような無限次元作用素の真の固有値および固有関数を求めることである．

3. 既存の固有値精度保証法

精度保証付き数値計算法とは，計算機での計算結果の信頼性の立場から見た科学技術計算法の一つであり，扱う問題の真の解と計算機による近似解との誤差を保証するという観点にとどまらず，理論的に解の存在証明が困難な問題に対して計算機上で解の存在を数値的に検証する方法（数値的検証法）として，近年急速に重要性を帯びつつある．

固有値問題に対する精度保証とは，(1) を満たす固有値 λ および対応する固有関数 u の存在範囲を厳密に求めることを意味するが，無限次元作用素の固有値に対する精度保証法はこれまでにもいくつか提案されてきた．以下，扱う作用素 L は対称作用素として話を進める．

3.1 D. Weinstein's bounds [2]

固有値の精度保証法の最も簡単なものとして, D. Weinstein's bounds が知られている．これは，$(\tilde{u}, \tilde{\lambda}) \in D(L) \times \mathbf{R}$ を近似固有対とし，

$$\delta \equiv \frac{\|L\tilde{u} - \tilde{\lambda}\tilde{u}\|}{\|\tilde{u}\|} \tag{2}$$

としたときに，区間 $[\tilde{\lambda} - \delta, \tilde{\lambda} + \delta]$ は作用素 L の固有値を少なくとも一つ含む，という結果である．これは，固有値の包含範囲を簡単に求めることができる一方で，包含

区間の精度が粗く，何番目の固有値に対する包含なのかという，固有値のインデックスについての情報が得られないという欠点がある．

3.2 Kato's bounds [3]

D. Weinstein の方法を改良した方法として，1949 年に提案された Kato's bounds がある．これは，$\tilde{u},\tilde{\lambda}$ を，

$$\tilde{\lambda} = \frac{< L\tilde{u},\tilde{u} >}{< \tilde{u},\tilde{u} >}$$

を満たす近似固有対とし，L の k 番目の固有値を λ_k としたときに，ある n について

$$\min\{\lambda_{n+1} - \tilde{\lambda}, \tilde{\lambda} - \lambda_{n-1}\} \geq \mu > 0 \quad (\lambda_0 \equiv -\infty)$$

が満たされるならば，(2) で定義される δ に対して

$$\lambda_n \in \left[\tilde{\lambda} - \frac{\delta^2}{\mu}, \tilde{\lambda} + \frac{\delta^2}{\mu}\right] \tag{3}$$

となるという結果である．この Kato's bounds は D. Weinstein's bounds に比べて精度がいいものの，真の固有値の位置についての情報が事前に必要であるという難点がある．

3.3 Rayleigh-Ritz bounds

$\tilde{u}_1, ..., \tilde{u}_N \in D(L)$ を一次独立な関数とし，N 次正方行列

$$\begin{aligned} A_1 &\equiv (< L\tilde{u}_i, \tilde{u}_j >)_{i,j=1,...,N}, \\ A_2 &\equiv (< \tilde{u}_i, \tilde{u}_j >)_{i,j=1,...,N} \end{aligned}$$

を定義する．このとき，行列固有値問題

$$A_1 x = \Lambda A_2 x, \ x \in \mathbf{R}^N \backslash \{0\} \tag{4}$$

の固有値を $\Lambda_i \ (i = 1, ..., N)$ とすると，

$$\lambda_i \leq \Lambda_i \ (i = 1, ..., N) \tag{5}$$

が成り立つ．これは，固有値の精度の良い上限としてよく知られている．下限については，次の結果がある．

3.4 Lehman-Goerisch bounds [1]

$\tilde{u}_1, ..., \tilde{u}_N \in D(L)$ を一次独立な関数とし，ある $\nu \in \mathbf{R}$ に対して $\Lambda_N < \nu \leq \lambda_{N+1}$ が成り立っているとする．ここで Λ_N は3.3節で述べたRayleigh-Ritz bounds とする．N 次正方行列

$$
\begin{aligned}
A_3 &\equiv (< L\tilde{u}_i, L\tilde{u}_j >)_{i,j=1,...,N}, \\
B_1 &\equiv A_1 - \nu A_2, \\
B_2 &\equiv A_3 - 2\nu A_1 + \nu^2 A_2
\end{aligned}
$$

を定義し，行列固有値問題

$$B_1 x = \mu B_2 x, \ x \in \mathbf{R}^N \backslash \{0\} \tag{6}$$

の固有値を $\mu_i \ (i = 1, ..., N)$ とすると，

$$\lambda_{N+1-i} \geq \nu + \frac{1}{\mu_i} \ (i = 1, ..., N) \tag{7}$$

が成り立つ．この方法も，Kato's bounds と同様に，比較定理などによる真の固有値 λ_{N+1} についての情報が事前に必要である．

3.4 Homotopy method [11]

Plum により提案されたHomotopy method では，扱う作用素 L についての Given Problem に対応する Base Problem を考える．ここで Base Problem とは，真の固有値が分かる作用素 L_0 についての固有値問題である．Plum による Homotopy method は，二つの作用素 L, L_0 を結ぶホモトピーとして

$$L_s \equiv (1-s)L_0 + sL, \quad s \in [0, 1]$$

を与え，パラメータ s についての固有値の連続性と単調性を利用して s を $s = 0$ から少しずつ増やすことによって作用素 L_s の固有値を精度保証付きで求めていき，最終的に $s = 1$，すなわち作用素 L の固有値を包みこむという手法である．

この他にも，Intermediate problems を利用した方法(Weinstein(1937), Aronszajn(1951), Bazley and Fox(1962), Beattie(1987), Beattie and Goerisch(1995) etc.) などがある

が，これらはいずれも実固有値に限定された精度保証法であり，扱う作用素が非対称の場合，つまり複素固有値の検証には適用することができない．また，流体問題においては線形化作用素の固有関数が重要な役割を果たすことがあるが，上記の方法は固有値についてのみの検証法であり，固有関数の精度保証に適用することはできない．

4. 我々の手法とその応用

筆者（長藤）はこれまで無限次元作用素の真の固有値（および固有関数）の存在範囲を精度保証付きで求める研究を行ってきたが，これまで提案してきた手法は原理的には非対称作用素に対する複素固有値・固有関数にも適用可能であるという利点がある．これは，固有値・固有関数を同時に求める非線形システムを考えることにより，非線形方程式の解に対する中尾の数値的検証法 [4] を拡張して適用した結果に基づくもので，作用素の対称性に関わらず，実固有対・複素固有対とも精度保証可能である．

これまでは主に対称作用素の実固有対および非対称作用素の実固有対に対する精度保証とそれらの応用について研究を進めており，以下の研究成果が得られている．

1. 自己共役作用素の固有値・固有関数に対する局所一意性付きの数値的検証法を確立した．([5, 7])
2. 非線形楕円型方程式の解に対する新しい数値的検証法を提案した．([6])
3. 非線形楕円型方程式の真の解による線形化固有値問題の精度保証方式を提案した．([8])
4. 無限領域における非可換調和振動子に関する coupling 型固有値問題に対する数値的検証法を提案した．([9])
5. Kolmogorov 問題に現れる Navier-Stokes 方程式の線形化固有値問題に精度保証付き数値計算を適用し，分岐解の安定性を証明した．([10])

以下，これらの研究成果の概要を述べる．

4.1 自己共役作用素の固有対の局所一意性付き検証法

線形な自己共役固有値問題：

$$\begin{cases} -\Delta u + qu &= \lambda u \quad \text{in } \Omega \\ \qquad\quad u &= 0 \quad \text{on } \partial\Omega \end{cases} \tag{8}$$

を考える．ここで Ω は $\mathbf{R}^2$ における有界凸領域とし，$q \in L^\infty(\Omega)$ とする．この楕円型作用素の固有値問題に，楕円型方程式の解に対する中尾の数値的検証法 (cf. [4])

を拡張して適用することに成功した．具体的には，問題 (8) を固有値と固有関数のペアに対する非線形システム：

Find $(\hat{u}, \lambda) \in H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R}$ s.t.

$$\begin{cases} -\Delta\hat{u} + (q - \lambda)\hat{u} &= 0, \\ \displaystyle\int_\Omega \hat{u}^2\,dx &= 1 \end{cases} \tag{9}$$

とし，非線形楕円型方程式の解に対する数値的検証法の1つとして知られている中尾の方法を，拡張して適用できるように定式化し，検証数値例を与えた [5]．また，この手法を拡張して，ホモトピー法を用いて精度保証付きで局所一意に包み込む手法を提案し，数値例を与えた [7]．さらに，[5] において固有値の非存在範囲の検証法についても提案し，[6] では [5] で提案した固有値の非存在範囲についての検証条件が一つの不等式で表現できることを示した．(一次元の場合における非自己共役な楕円型微分作用素の固有値の非存在範囲の検証については [14] を参照．) これらの結果によって，固有値に多重度がない場合，個々の固有値の分離が数値的に可能となった．

4.2 非線形楕円型方程式の解に対する数値的検証法

2階非線形楕円型境界値問題の厳密解の存在領域を，計算機による数値計算によって立証するものである．本研究では，4.1 の方法による固有値評価を使って線形化作用素の逆作用素を評価し，無限次元 Newton 法による数値的検証法を定式化し，実際の非線形楕円型境界値問題の解の数値的検証に適用した [6]．これは，既存の2つの方法（中尾の方法と Plum の方法）の長所を生かし欠点を補った，新たな方式を与えるものである．

4.3 非線形楕円型方程式の真の解による線形化固有値問題の精度保証

本研究では，ある非線形楕円型境界値問題に対し，その真の解で線形化した作用素の固有値問題を扱った．このような問題は解の安定性の判定や分岐点の特定などの，数学的に厳密な議論において重要である．本研究では，もとの非線形方程式と線形化作用素に対する固有値問題とを連立して定式化した．具体的には，

Find the triple $(u, v, \lambda) \in H_0^1(\Omega) \times H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R}$ s.t.

$$\begin{cases} -\Delta u &= f(u), \\ -\Delta v - f'(u)v &= \lambda v, \\ \displaystyle\int_\Omega v^2\,dx &= 1 \end{cases} \tag{10}$$

という非線形システムを考え，このシステムの解を検証することにより，非線形方程式の厳密解およびそのまわりで線形化した作用素の固有値・固有関数を求める手法を提案した. 数値例では, 特に最小固有値に対する検証が成功した例を示した [8].

4.4 非可換調和振動子に関する coupling 型固有値問題に対する数値的検証法

量子物理で重要な役割を果たす一次元調和振動子に関連した, 無限領域におけるカップリングタイプの固有値問題を扱った. 具体的には,

$$Q_{(\alpha,\beta)} \equiv I_{(\alpha,\beta)}\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{x^2}{2}\right)+J\left(x\frac{d}{dx}+\frac{1}{2}\right), \qquad x \in \mathbf{R}$$

で定義される作用素 $Q_{(\alpha,\beta)}$ のスペクトルの分布を調べる問題である. ここで行列 $I_{(\alpha,\beta)}$ と J は

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

で与えられ, α と β は $\alpha\beta > 1$ を満たす正定数である.

これは, 表現論の分野でも注目されている問題であり, スペクトラムの解析が理論的に困難な問題の一つでもある. つまり, 二つのパラメータ α と β が等しい場合には, 表現論の理論からその離散固有値は $\lambda_n = (n+1/2)\sqrt{\alpha^2-1}$ であることが得られるが, α と β が少しでも離れた場合には, 固有値の分布が理論的には証明できない問題である. [9] ではスペクトル法を併用して, α と β が異なる場合の固有値の高精度な検証を行い, 二つのパラメータが等しい場合に多重していた固有値がパラメータの変化に応じて分離していく様子を証明した. さらにパラメータに対する固有値の依存性およびそれを利用した多重固有値の検証についても言及し, 検証数値例を与えた. 現在提案している固有値検証手法では多重固有値の検証はできないが, この問題のように作用素の偶奇保存性などを上手に利用することにより, 多重固有値の存在範囲を検証することも可能であることを示すことができた.

4.5 Kolmogorov 問題に現れる線形化固有値問題の精度保証とその応用

流体解析において重要な 2 次元粘性非圧縮流体の Kolmogorov 問題:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t}+u\dfrac{\partial u}{\partial x}+v\dfrac{\partial u}{\partial y} &= \nu\Delta u-\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial p}{\partial x}+\gamma\sin\left(\dfrac{\pi y}{b}\right), \\ \dfrac{\partial v}{\partial t}+u\dfrac{\partial v}{\partial x}+v\dfrac{\partial v}{\partial y} &= \nu\Delta v-\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial p}{\partial y}, \\ \dfrac{\partial u}{\partial x}+\dfrac{\partial v}{\partial y} &= 0 \end{cases} \tag{11}$$

を扱った．ここで (u,v), ρ, p, ν はそれぞれ，速度ベクトル，質量密度，圧力，動粘性係数であり，γ は外力の強さを表す定数である．また，流れの領域は長方形領域 $[-a,a]\times[-b,b]$ で，両方向に周期境界条件が課されているものとし，領域のアスペクト比 α を b/a と定義する．

流れ関数を用いて式 (11) を書き直した上で線形化し，その線形化作用素のゼロ固有値とそれに対応する固有関数およびそれらを与える Critical Reynolds 数に対して精度保証付き数値計算を適用し，それらの精度保証結果を用いることにより, ある分岐解の安定性を証明した. 扱う領域のアスペクト比や Reynolds 数と分岐解の安定性との関係は, 線形化作用素が非自己共役作用素であることから, 理論的証明が困難な問題の一つである．この問題では, 領域のアスペクト比 α が $0<\alpha<1$ を満たすときにのみ解の分岐が起きることが知られており, α が十分小さい場合および 1 に十分近い場合については, 分岐解の安定性が理論的に証明されている．しかし, 0 と 1 の中間の α について分岐解の安定性を理論的に証明することは困難である．そこで本研究では, 数値的検証法を適用することにより, 任意のアスペクト比 α に対して分岐解の安定性を厳密に証明する手法を確立した．今後はこれらの手法を他の流体問題へ応用・発展させたいと考えている．

これらの研究の特色は，無限次元固有値問題のある固有値の存在範囲を計算機上で数学的厳密さをもって保証する, という点である．このことは, 得られた固有値の値に対する信頼性のみならず, その固有値（および固有関数）の評価を, 関連する別の無限次元問題の証明に使えるという大きな利点を備えている．これは, 数学的に厳密なという立場から非常に重要な点である．特に，これまで検討してきた固有値検証の手法が非自己共役固有値問題に対しても原理的に適用可能であることは，もしそれが実現すれば真に世界に先駆けた研究成果となることが期待できる．(論文投稿中 ([10]) である)4.5 節の研究成果は, 非自己共役作用素のゼロ固有値の検証に成功したもので, 非自己共役固有値問題の精度保証への第一歩と位置づけられる．

Remark: 固有値に多重度がある場合については [5, 7] で提案した固有値の精度保証法は適用できない．このような多重固有値の検証については [13] を参照されたい．[13] では，$Lu=\lambda u$ という無限次元固有値問題に対して，固有値 λ の期待される多重度を n として

$$LY=YM,\ Y\equiv(y_1,...,y_n),\ M\equiv\begin{pmatrix} m_{11} & \dots & m_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n1} & \dots & m_{nn} \end{pmatrix}$$

というシステムを考え，$Y_i\in H_0^1(\Omega)$, $m_{ij}\in\mathbf{R}$ として，多重固有値および対応する不変部分空間の基底 $(Y,M)\in(H_0^1(\Omega))^n\times\mathbf{R}^{n^2}$ の精度保証を行うという手法を提案している．これは，行列固有値問題の多重固有値に対する検証法 [12] の手法を無限

次元問題に拡張したものである.

5. 今後の展望

無限次元作用素の固有値および固有関数を求めることは，スペクトルの分布に対する代数学的な興味や，自然界における非線形現象を解明するための有力な道具としてなど，今後もその必要性および重要性は増すものと思われる．今後はこれまでの基本的な結果をもとに，非自己共役作用素の複素固有対の精度保証を成功させることを目指している．非自己共役な固有値問題については，固有値についての探索範囲がこれまでの実軸から複素平面になるという難点に加えて，精度保証の根幹である誤差評価が作用素の非自己共役性によってsharpになりにくいという問題もあり，その実用的な検証法については様々な工夫をしていく必要がある．また，精度保証された複素固有値を用いて分岐解の安定性を解析する手法を開拓することも重要な研究テーマである．さらに，多重固有値についての多重度の証明や対応する固有関数の検証・連続スペクトルや剰余スペクトルの限界の検証・非線形固有値問題の検証についての考察なども，無限次元固有値問題に関する将来的な課題であろう．

参考文献

[1] H. Behnke and F. Goerisch, Inclusions for Eigenvalues of Selfadjoint Problems, In: J.Herzberger(eds.), Topics in Validated Computations-Studies in Computational Mathematics, Elsevier, Amsterdam (1994).

[2] F. Chatelin, Spectral Approximations of Linear Operators, Academic Press, New York, 1983.

[3] T. Kato, On the upper and lower bounds of eigenvalues, J. Phys. Soc. Japan 4, 334-339 (1949).

[4] 中尾充宏・山本野人共著，精度保証付き数値計算，日本評論社，1998.

[5] 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).

[6] 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).

[7] K. Nagatou, A numerical method to verify the elliptic eigenvalue problems including a uniqueness property, Computing 63, 109-130 (1999).

[8] K. Nagatou and M. T. Nakao, An enclosure method of eigenvalues for the elliptic operator linearlized at an exact solution of nonlinear problems, a special issue of Linear Algebra and its Applications on LINEAR ALGEBRA IN SELF-VALIDATING METHODS 324/1-3, 81-106 (2001).

[9] K. Nagatou, M. T. Nakao and M. Wakayama, Verified numerical computations for eigenvalues of non-commutative harmonic oscillators, Numerical Functional Analysis and Optimization, 23(5 & 6), 633-650 (2002).

[10] K. Nagatou, A computer-assisted proof on the stability of the Kolmogorov flows of incompressible viscous fluid, submitted.

[11] M. Plum, Eigenvalue inclusions for second-order ordinary differential operators by a numerical homotopy method, J.Appl.Math.Phys.(ZAMP) 41, 205-226 (1990).

[12] S. M. Rump, Computational Numerical Bounds for Multiple or Nearly Multiple Eigenvalues, Linear Algebra and its Applications 324, 209-226 (2001).

[13] K. Toyonaga, M. T. Nakao and Y. Watanabe, Verified Numerical Computations for Multiple and Nearly Multiple Eigenvalues of Elliptic Operators, Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol.147, Issue 1, 175-190 (2002).

[14] 山本野人・小森喬・内田貴紀, 自己随伴でない楕円型微分作用素の固有値の非存在範囲に対する精度保証付き計算, 日本数学会2003年度年会 応用数学分科会講演アブストラクト, 126-128.