

平成21年5月20日現在

研究種目：若手研究(B)
研究期間：2006～2008
課題番号：18740055
研究課題名(和文) 微分作用素のスペクトル分布に対する精度保証とその応用
研究課題名(英文) Numerical verification for spectral distribution of differential operators and its applications

研究代表者

長藤 かおり (Nagatou Kaori)
九州大学大学院・数理学研究院・准教授
研究者番号：40326426

研究成果の概要：

バンド構造の本質的スペクトルを持つ1次元シュレディンガー作用素の固有値非存在範囲を精度保証付きで求める手法を開発し、検証数値例を与えた。本質的スペクトルのギャップにおける離散スペクトル(固有値)の存在・非存在は、半導体理論とも密接に関連する重要な問題である。本研究では、線形常微分方程式の基本解を計算機援用解析により厳密に求める手法をもとに、固有値が存在しない範囲を数学的に厳密に保証する方法を提案した。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	1,100,000	0	1,100,000
2007年度	1,000,000	0	1,000,000
2008年度	1,000,000	300,000	1,300,000
年度			
年度			
総計	3,100,000	300,000	3,400,000

研究分野：数値的検証法

科研費の分科・細目：数学・数学一般(含確率論・統計数学)

キーワード：シュレディンガー作用素・本質的スペクトル・スペクトルギャップ・数値的検証法

1. 研究開始当初の背景

非自己共役の場合も含む微分作用素の固有値に対する精度保証については、日本において研究代表者(長藤)らのグループが提案してきた手法と、ドイツのPlum教授をはじめとする研究グループによる手法が主流であったが、本質的スペクトルが現れる場合についてはまだ両者とも手付かずの状態であった。本研究はPlum教授とのこれまでのdiscussionに端を発したもので

あり、両グループによる研究連絡を密に行いながらお互いのこれまでのノウハウを融合させて、より効率のよい手法を確立したいという動機のもとで始められた。

2. 研究の目的

近年、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ひとつとして、精度保証付き数値計算法が注目を集めている。これは、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)としても急速に重要性を帯びつつある。

研究代表者(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に携わり、以下の研究成果を得てきた。

- (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数値的検証法の確立
- (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の提案
- (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の提案
- (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の提案
- (5) Kolmogorov Problemにおける分岐解安定性証明
- (6) 2次元のNavier-Stokes方程式の定常解に対する検証手法の提案
(適用例としてReynolds数が大きな場合のDriven Cavity 問題の定常解の存在証明に成功)

これらはすべて微分作用素のスペクトルの一種である離散スペクトル、すなわち「固有値」の精度保証およびその応用に関する結果であるが、連続スペクトルと剰余スペクトルを併せた「本質的スペクトル」を持たない作用素のみを対象としてきた。しかし、より実際問題に即した作用素を扱う際には、離散スペクトルに限らず、本質的スペクトルについての十分な考察が不可欠である。

本研究では、微分作用素のスペクトル問題という大きな枠組みの中で、これまでの研究で得られた手法を本質的スペクトル問題にも適用できるように拡張するという全体構想の中で、以下の3点を到達目標とした:

- ①1次元シュレディンガー作用素の固有値の存在・非存在範囲の精度保証
- ②線形化作用素が本質的スペクトルを持つタイプの非線形常微分方程式の解の精度保証
- ③2次元問題への拡張

①については、本質的スペクトルが理論的に特定できる作用素にコンパクトな摂動を具体的に与えた作用素について、本質的スペクトルに挟まれた領域での離散スペクトルの非存在範囲の保証および出現し得る離散スペクトルの包み込み(存在区間の精度保証)を行うことを目指す。

②については、無限次元ニュートン法を用いた解の包み込みを目指す。無限次元ニュートン法を適用するためには線形化作用素の絶対値最小固有値の評価が必要であり、①で得られることが期待される結果を用いる。③については①および②で扱う問題を2次元領域の場合に拡張することを目指す。

3. 研究の方法

周期的ポテンシャルを伴う1次元シュレディンガー作用素を考え、それにある性質を満たす摂動項を加えた作用素の固有値の存在・非存在範囲の精度保証についての研究を中心に進めた。これは本質的スペクトルを持つ作用素であり、これまで提案してきた固有値の存在・非存在範囲の保証法が本質的スペクトルに挟まれた領域でも適用可能であることを示す最初の一例とした。また、非有界領域における問題であることから、全体を有界な領域とその残りに分割し、有界な領域では有限要素法を用い、残りの非有界領域については、基本解を用いた巧妙な評価法を提案した。非有界領域における常微分作用素の基本解の数値的検証法はそれ自体で重要なテーマでもあり、全体として大がかりな検証アルゴリズムを実行することとなった。

また、Maxwell 方程式に関する同種の問題については、不連続関数が最高階の微分の部分に入っており、従来の手法では適用が不可能なため、数値的検証法の根幹から見直すこととなった。この際、有限次元部分と無限次元部分に異なる2種の射影作用素を用いることが可能であることを新たに発見し、1種の射影作用素に限定していた従来の検証法の大きな進展を導くことができた。

4. 研究成果

(1) 1次元シュレディンガー作用素のスペクトル問題を扱った。これはバンド構造の本質的スペクトルを持つ作用素であり、スペクトルギャップにおいて離散スペクトルが存在するかしないかを数学的に厳密に保証することは大変重要な問題である。固有値の非存在を保証する方法として、調べたい区間を十分狭い幅として固定し、固有ベクトルのみについての線形方程式の解の一意性を示す手法を用いる。この線形方程式を不動点定式化する際に、摂動項なしのポテンシャルを持つ線形常微分方程式の基本解を用いる手法を開発し、本質的スペクトルのギャップにおいて離散固有値が存在しない範囲を厳密に証明することに成功した。これは現時点で相当する他の手法がないuniqueな結果であり、その意義は大きいと思われる。

(2) 3次元 Photonic Crystal のバンド・ギャップの存在検証の定式化に取り組んだ。Photonic Crystal における電場と磁場の状態は周期関数を係数に伴う3次元全空間における Maxwell 方程式で記述される。Photonic Crystal は、誘電率の分布によってはある周波数を持つ電磁波を透過しない性質を持つことがあり、このような周波数帯はバンド・ギャップと呼ばれる。バンド・ギャップを確かに持つ材料をナノテクノロジーを用いてデザインすることは大変重要な問題であり、数多くの有益な応用がある。本研究では、与えられた誘電率に対してバンド・ギャップが存在することを、これまでに研究代表者らが開発してきた固有値非存在を保証する数値的検証法を拡張して適用することにより、数学的に厳密に証明する手法を開発した。現時点で使用可能な計算機性能では良好な検証数値例を得ることができなかったが、誘電率の分布の工夫や計算アルゴリズムの更なる改良を目指して今後も研究を続けていきたい。

(3) 非線形微分方程式系の周期境界値問題に対する数値的検証法を提案した。特に、作用素が非対称な場合の複素固有値の包み込みに成功した。固有値が多重あるいは非常に近接している場合には、単純固有値の精度保証法は適用できない。本研究では、固有関数が周期境界条件を満たす場合の多重複素固有値および複数の単純（実または複素）固有値を精度保証付きで求める手法を開発し、良好な検証数値例を得た。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 6 件)

- ① K. Nagatou, Numerical verification method for infinite dimensional eigenvalue problems, to appear in Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics 26-2/3. [査読有]
- ② K. Nagatou, Validated computations for fundamental solutions of linear ordinary differential equations, International Series of Numerical Mathematics, Vol. 157 (2008), pp. 43-50. [査読有]
- ③ M. T. Nakao, K. Hashimoto and K. Nagatou, A computational approach to constructive a priori and a posteriori error estimates for Bi-Harmonic problems, GAKUTO

International Series, Mathematical Sciences and Applications, 28 (2008), pp. 139-148. [査読有]

④ K. Nagatou, K. Hashimoto and M. T. Nakao, Numerical verification of stationary solutions for Navier-Stokes problems, Journal of Computational and Applied Mathematics, 199 (2007), pp. 445-451. [査読有]

⑤ K. Hashimoto, K. Nagatou, M. T. Nakao, A computational approach to constructive a priori error estimate for finite element approximations of bi-harmonic problems in nonconvex polygonal domains, Information 9 [4] (2006), pp. 573-580. [査読有]

[学会発表] (計 31 件)

- ① 長藤かおり, 非線形微分方程式系の周期境界値問題に対する数値的検証法, 2008年3月29日, 日本数学会2009年度年会, 東京大学.
- ② Kaori Nagatou, Eigenvalue Excluding on 3-D Photonic Crystals, 22-29 March 2009, International Workshop on Numerical Verification and its Applications 2009, Miyako Island.
- ③ Kaori Nagatou, Spectral Problem on 3-D Maxwell's Equations, 7-10 March 2009, International workshop on verified computations and related topics, University of Karlsruhe (TH), Germany.
- ④ Kaori Nagatou, Computer assisted proofs for differential equations, 26-28 January 2009, The 26th Kyushu Symposium on Partial Differential Equations, Kyushu University (Hakozaki Campus) International Hall.
- ⑤ Kaori Nagatou, Validated computations for elliptic systems of FitzHugh-Nagumo type, 29 September - 3 October 2008, 13th GAMM-IMACS International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Validated Numerics (SCAN 2008), The University of Texas at El Paso, USA.
- ⑥ 長藤かおり, 固有値問題に対する数値的検証法とその応用, 2008年9月17日, 日本応用数学会2008年度年会・オーガナイズドセッション特別講演, 東京大学柏キャンパス.

⑦Kaori Nagatou, Eigenvalue excluding on 1-D Schroedinger operators, 12-18 July 2008,
The 6th Gregynog Workshop on Computation and Analytic Problems in Spectral Theory, University of Wales, Gregynog Hall, Newtown(Powys), United Kingdom.

⑧Kaori Nagatou, Computer Assisted Proofs for Partial Differential Equations, 15-21 June 2008, Numbers, Functions, Equations '08, Noszvaj, Hungary.

⑨長藤かおり, 1次元シュレディンガー作用素のスペクトルに対する数値的検証法, 2008年3月26日, 日本数学会2008年度年会 特別講演, 近畿大学.

⑩Kaori Nagatou, Non-existence proof of point spectrum in a spectral gap, 1-7 March 2008, 2008 International Workshop on Numerical Verification and its Applications, Okinawa.

⑪Kaori Nagatou, Numerical verification method for a spectral problem on 1-D Schroedinger operators, 19 February 2008, Seminario Modellistica Differenziale Numerica, Universita' Di Roma "La Sapienza".

⑫Kaori Nagatou, Numerical verification for a spectral problem on 1-D Schroedinger operators, 15-17 January 2008, Spectral and Scattering Theory and Related Topics, RIMS, Kyoto University. (招待講演)

⑬長藤かおり, シュレディンガー作用素のスペクトル・ギャップにおける固有値非存在検証, 2007年9月24日, 日本数学会秋季総合分科会, 東北大学.

⑭Kaori Nagatou, Validated computations for fundamental solutions of linear ordinary differential operators, 18 September 2007,
NOLTA 2007 Special Session, Simon Fraser University at Harbour Centre, Vancouver, Canada.

⑮Kaori Nagatou, Eigenvalue problems on 1-D Schroedinger operators, 9-15 September 2007, Conference on Inequalities and Applications '07,
De La Motte Castle, Noszvaj, Hungary.

⑯Kaori Nagatou, Eigenvalue excluding in essential spectrum gaps, 26 February - 3 March 2007,
International Workshop on Numerical Verification and its Applications, Waseda, Japan.

⑰Kaori Nagatou, Validated computations for a Schroedinger equation with essential spectrum, 15th February 2007, Mathematics colloquium, University of Debrecen, Hungary.

⑱Kaori Nagatou, Verified numerical computations for infinite dimensional eigenvalue problems, 19th September 2006, Mathematics colloquium, University of Karlsruhe, Germany.

⑲Kaori Nagatou, Validated computation for infinite dimensional eigenvalue problems, 26-29 September 2006, 12th GAMM-IMACS International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Validated Numerics (SCAN 2006), Duisburg, Germany. (招待講演)

〔図書〕 (計0件)

〔産業財産権〕

○出願状況 (計0件)

〔その他〕

なし

6. 研究組織

(1) 研究代表者

長藤 かおり (Nagatou Kaori)

九州大学大学院・数理学研究院・准教授

研究者番号: 40326426