九州大学大学院数理学研究科修士論文

楕円型逆固有値問題の解に対する精度保証付き計算

指導教官　　中尾 充宏 教授

提出者　　西川 一郎

提出日　　平成１１年１月２９日

序文

逆問題 (Inverse Problems) という言葉が、理学及び工学など自然科学を中心として、多くの分野で使われるようになってきている。逆問題とは、簡単にいえば、結果から原因を推定しようとする問題、あるいは、出力より入力を推定しようとする問題のことをいう。しかし、このような問題には、順問題にはない、問題の不適切性と呼ばれる困難な性質が存在する。不適切な問題とは、

1. 解の存在 (existence)
2. 解の一意性 (uniqueness)
3. 解の連続性 (stability)

という 3 つの要件が 1 つでも満たされないような問題を指す。このような不適切性を伴う問題に対しては、強引に数値計算により解こうとしても、得られた結果に信頼性が無いことは、いうまでもない。

本論文では、固有値問題に対して、逆固有値問題を扱う。以下、本論文で扱う逆固有値問題は次のような楕円型逆固有値問題である。

与えられたデータの集合 $\{\mu_i\}_{i\in\mathrm{N}}$ (固有値) に対して、以下を満たす potential 関数 q を求める ：

$$\left\{\begin{array}{rcll} -\Delta u_i + q u_i &=& \mu_i u_i & \text{in } \Omega \\ u_i &=& 0 & \text{on } \partial\Omega \end{array}\right. \qquad (\ {}^{\forall} i \in \mathrm{N})$$

このような問題は、 1 次元の Strum-Lioville 型の方程式に対しては、多くの研究がなされている ([4] など多数)。しかしながら、計算機により精度保証付きで逆固有値問題を解く研究は、まだ非常に少ないのが現状である。

現在、Strum-Lioville 型の逆固有値問題の解を計算機内で包み込める手法が、Neher [12, 13] により開発されている。その方法とは、有限個の入力データ (固有値) を与え potential 関数を一意に再構成するために、それを有限個の領域に対して対称な関数の 1 次結合として表し、その係数を精度保証付きで同定しようとするものである。この場合、再構成する potential 関数が、領域の重心に対して対称でないと不適切な問題となってしまうことに注意する (2 章 **Example.1**)。それを回避するために、対称性の条件を課して問題の定式化している。Neher は、この問題を解くために次のような方法をとっている。固有値問題の固有値が potential 関数の汎関数になることを利用して、potential 関数に対する固有値とデータ固有値の差を potential 関数の汎関数とみなし、その関数の零点を求めるために、区間 Newton 法を適用している。その際、区間 Newton 法の反復の過程で現れる、順問題を Shooting-method [3] と固有関数の零点の個数を手がかりに、精度保証付きで求めている。

しかし、この方法では、 2 次元問題を扱うことは、不可能である。それに対し、本研究では、順問題の検証部分を見直し、中尾の方法 [11] を適用することにより 2 次元の逆固有値問題の定式化、そして、解の検証に成功した。このように、逆問題の精度保証は、まだ世界的に例が少なく、多次元に拡張することは、今後、理学及び工学分野において重要な研究手段を与えるものと確信している。

本論文を作成するにあたって、熱心に御指導また御協力して頂いた中尾充宏 教授、山本野人 講師、大型計算機センターの渡部義隆 助教授、後期博士課程の長藤かおりさんに感謝いたします。

目 次

1 Introduction **3**

2 問題の定式化 **4**

3 Potential 関数の再構成の手順 **5**
3.1 Newton 法 5
3.2 区間演算 7
3.3 区間 Newton 法 8

4 再構成における精度保証付き計算の詳細 **10**
4.1 順問題に対する固有値、固有関数の包み込み 10
4.1.1 固有値、固有関数の一意性付き検証法 10
4.1.2 固有値でないところの検証 14
4.2 区間 Newton 法とその Jacobian の計算 17

5 数値例 **21**

6 結論 **26**

7 今後の課題 **26**

A 付録 :ベクトル Y, Z の選び方 **27**

参考文献 **31**

1 Introduction

本論文では、次のような $Dirichret\ boundary\ condition$ を伴う偏微分方程式の固有値問題 ：

$$\begin{cases} -\Delta u + q(x,y)u &= \lambda u \quad \text{in } \Omega \\ u &= 0 \quad \text{on } \partial\Omega \end{cases} \tag{1.1}$$

を考える。ここで、Ω は $\mathbf{R}^2$ の有界凸領域、$q \in C(\bar{\Omega})$ とする。

本来、固有値問題とは、(1.1) を満たす固有値と固有関数の組 (λ_i, u_i) を求めることである。これら、固有値は、可算無限個存在し、重複するものを同一視するものとすると、次のような関係式をもつことが知られている ：

$$\lambda_1(q) \leq \lambda_2(q) \leq \cdots \leq \lambda_N(q) \leq \cdots \to +\infty$$

Remark 1 ここで、$\lambda_i := \lambda_i(q)$ と書いたのは、第 i 番目の固有値は、potential 関数の汎関数とみなすことができるからである。この事実は、逆問題を定式化するにあたって本質的なものである。

これに対し逆問題とは、固有値をあたえて、potential 関数 $q(x,y)$ を再構成することである。しかし、固有値をすべて (無限個) 与えることは、不可能なので、最小のものから、有限個与えるものとする。これは、工学的には、大変重要であろうと思われる (無限個のデータを与えたとき、再構成が一意にできるかという問題がある。 1 次元問題のときは再構成すべき potential 関数が領域の中心に対して対称なら一意に再構成できる [4]。しかし、 2 次元問題のときには、知られていない)。 従って、再構成される potential 関数も、次のような集合に属すものでなければならないであろう ：

$$S := \left\{ q \;\middle|\; q := \hat{q} + \sum_{j=1}^{M} \alpha_j q_j \quad \hat{q}, q_j \in C(\bar{\Omega}) \right\} \tag{1.2}$$

ここで、M は、与えた データ (固有値) の個数、$\hat{q}$ を補助 potential (初期近似 potential) とする。また、集合 S の与え方によって逆問題の解は、信頼性のない解や、もはや、解自体が存在しないことがある。これは、問題が不適切問題であるためである。即ち、この問題を解くにあたっては、適切な解集合の中で解を探さなければならない。
本論文の目的は、適切な解空間の中で、(1.2) における係数 $\alpha_1, \ldots, \alpha_M$ 精度保証付きで求めることである。

以下、本論文では、Neher の方法に基づいて、 2 次元の逆固有値問題の定式化を行う。この、定式化にあたって 1 次元問題の時より、より強い仮定を課していることに注意する (2 節)。次に、この定式化により得られた非線形連立方程式を解くアルゴリズム (Newton 法) を紹介する。しかし、このアルゴリズムの中では、無限次元の方程式 (順問題) を解く必要がある。そこで、厳密に非線形連立方程式を解く為に、区間による Newton 法を適用する (3 節)。次に、Newton 反復の過程で現れる順問題の検証方法について述べる。ここでは、Neher の方法とは異なり中尾の方法を適用した (4 節前半)。また、後半では、 2 次元問題のときの Jacobian の導出と区間 Newton 法についての定理を述べる。Jacobian の導出にあたって、ある偏微分方程式の解が一意に存在するときに 1 次元のものと同じ形であることがわかった。Jacobian の導出の際に現れる偏微分方程式の解の検証は、今後の課題である (4 節後半)。実際の数値例では、上記の偏微分方程式の解の検証を行わないで、 3 , 4 節に基づいた数値結果を述べる。

2　問題の定式化

この節では、逆固有値問題を解くための定式化の手順を述べる。

簡単のため $\Omega := (a,b) \times (c,d) \subset \mathbf{R}^2$ とする。
まず、集合 S と入力データの与え方に対する仮定を述べる。ここで、簡単な **Example** を挙げる。

Example 1 $\{\mu_i\}_{i\in\mathrm{N}}$を次の固有値問題の固有値とする ：

$$\left\{ \begin{array}{rcll} -\Delta u(x,y) + q(x,y)u(x,y) &=& \mu u(x,y) & \text{in } \Omega \\ u(x,y) &=& 0 & \text{on } \partial\Omega \end{array} \right.$$

この時、$\{\mu_i\}_{i\in\mathrm{N}}$ は、次の固有値問題の固有値になる ：

$$\left\{ \begin{array}{rcll} -\Delta u(s-x,t-y) + q(s-x,t-y)u(s-x,t-y) &=& \mu u(s-x,t-y) & \text{in } \Omega \\ u(s-x,t-y) &=& 0 & \text{on } \partial\Omega \end{array} \right.$$

ただし、$s := a+b, t := c+d$ とする。 ∎

この **Example** により、一意に potential 関数を再構成するには、potential 関数は、

$$q(x,y) = q(s-x,t-y) \tag{2.1}$$

という条件を満足しなければならないことがわかる。

そこで、再構成する potential に次を仮定する。

Assumption 2.1 potential 関数は、領域の重心について対称。 ∎

また、入力データに関しては、重複固有値を除外する。即ち、次の仮定を設ける。

Assumption 2.2 入力データ (固有値) は、重複して与えてはならない。 ∎

さて、集合 S を次で定義しておく ：

$$S := \left\{ q \;\middle|\; q = \hat{q} + \sum_{j=1}^{M} \alpha_j q_j \quad \alpha_j \in \mathbf{R}\ ,\ \hat{q}, q_j \in C(\bar{\Omega}) \text{ かつ , 領域の重心について対称} \right\} \tag{2.2}$$

ここで、問題を次のように定式化する。

有限個の入力データ $\mu_1 < \mu_2 < \cdots < \mu_M$ と 補助 potential $\hat{q}$ と S の基底関数 $q_1, \ldots, q_M$を与える。この時、

$$\lambda_i(q(\alpha)) = \mu_i,\ i = 1,2,\ldots,M \tag{2.3}$$

を満たす、potential 関数 $q(x,y)$ を次の形で求める ：

$$q(x,y) = q(\alpha) := \hat{q} + \sum_{j=1}^{M} \alpha_j q_j \in S \tag{2.4}$$

ただし、$\alpha := (\alpha_1, \ldots, \alpha_M)^t \in \mathbf{R}^M$, $\lambda_i(q(\alpha))$ は、次の固有値問題の第 i 番目の固有値とする ：

$$\begin{cases} -\Delta u + q(\alpha)u &= \lambda u & \text{in } \Omega \\ u &= 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases}$$

ここで、$f : \mathbf{R}^M \to \mathbf{R}^M$ を次のように定義する ：

$$f(\alpha) = (f_i(\alpha)) := (\lambda_i(q(\alpha)) - \mu_i),\ i = 1, \ldots, M \tag{2.5}$$

このように置くことにより、問題は α に関して次のような、有限次元の非線型方程式に帰着する ：

$$f(\alpha) = 0 \tag{2.6}$$

即ち、問題は、関数 f の零点を求めることである。これは、

$$f(\alpha) = 0 \Longleftrightarrow \mu_1, \ldots, \mu_M \text{は potential } q(\alpha) \text{ に対する固有値}$$

という同値関係に基づくものである。よって、本研究の目的は、

非線型方程式 $f(\alpha) = 0$ を精度保証付きで解くこと

である。しかしながら、ここで注意すべきことは、f の形が具体的に与えられているわけでなくて、f は無限次元固有値問題を介して、陰的に定まるという点である。

3 Potential 関数の再構成の手順

前節では逆固有値問題は、有限次元の連立非線型方程式に帰着されることを述べた。この節では、実際この方程式がどのような手順で解かれるかについて、その概略を述べる。しかし、数学的な詳細は、次節で述べることにする。

3.1 Newton 法

前節で、導いた非線型方程式は、次のようなものであった ：

$$f(\alpha) = 0 \tag{3.1}$$

ただし、$f : \mathbf{R}^M \to \mathbf{R}^M$ は、次で定義される ：

$$f(\alpha) = (f_i(\alpha)) := \lambda_i(q(\alpha)) - \mu_i,\ i = 1, \ldots, M$$

Remark 2 f の形は具体的にはわからないが、potential 関数に依存する関数であることがわかる。また、f の Jacobian は具体的に求めることができる。

よって、(3.1) を解くにあたって、次の Newton 法を適用する:

$$\begin{aligned} \alpha^{(k+1)} &:= \alpha^{(k)} - \left(\frac{\partial f_i}{\partial \alpha_j}(\alpha^{(k)}) \right)^{-1} f(\alpha^{(k)}),\quad k = 0, 1, \ldots \\ \alpha^{(0)} &: \quad \text{初期値} \end{aligned} \tag{3.2}$$

以下に、有限個の入力データ $\mu_1, \ldots, \mu_M$ を元にして、近似 potential 関数 q を再構成するアルゴリズムを紹介する [6],[12]:

Algorithm 1

1. 初期値 $\alpha^{(0)} \in \mathbf{R}^M$ を選ぶ。また、補助 potential $\hat{q}$ と S の基底関数 $q_1, \ldots, q_M$ を選ぶ。
2. $k = 0, 1, \ldots$ に対して、以下を繰り返す。
   (a) $i = 1, 2, \ldots, M$ に対して、
      i. potential 関数を

$$q^{(k)}(x, y) := q(\alpha^{(k)}) = \hat{q} + \sum_{j=1}^{M} \alpha^{(k)} q_j$$

      としたときの固有値問題:

$$\begin{cases} -\Delta u + q^{(k)} u &= \lambda u \quad \text{in } \Omega \\ u &= 0 \quad \text{on } \partial\Omega \end{cases} \tag{3.3}$$

      の近似固有値 $\widetilde{\lambda}_i(q^{(k)})$ を計算する。
      ii. 同様に $\widetilde{\lambda}_i(q^{(k)})$ に対応する近似 L^2 -正規化固有関数 $\widetilde{g}_i(\alpha^{(k)})$ を計算する。
   (b) Newton 法の残差、

$$f_i(\alpha^{(k)}) = \widetilde{\lambda}_i(q^{(k)}) - \mu_i$$

      を計算する。
   (c) $f(\alpha^{(k)})$ の Jacobian

$$\left(\frac{\partial f_i}{\partial \alpha_j}(\alpha^{(k)}) \right) = \int_\Omega \widetilde{g}_i^2(\alpha^{(k)}) q_j \, dx dy, \ i, j = 1, \ldots, M \tag{3.4}$$

      を計算する。
3. Newton 反復の過程

$$\alpha^{(k+1)} := \alpha^{(k)} - \left(\frac{\partial f_i}{\partial \alpha_j}(\alpha^{(k)}) \right)^{-1} f(\alpha^{(k)})$$

   を実行する。

(反復終了条件) 与えられた正定数 ε に対して、

$$\|\alpha^{(k)} - \alpha^{(k-1)}\|_1 < \varepsilon \|\alpha^{(k-1)}\|_1$$

が満たされるとき。ただし、ノルム $\|\cdot\|_1$ は、$x := (x_1, \ldots, x_M) \in \mathbf{R}^M$ に対して、

$$\|x\|_1 = \sum_{j=1}^{M} |x_j|$$

で定義する。 ∎

(Algorithm 1 に対する注釈)

1. f の Jacobian が (3.4) で与えられることは、次節で述べる。
2. このアルゴリズムの中では無限次元方程式の固有値問題を解かなければならない。従って、上記のような浮動小数点演算による近似計算では、このような解を厳密に解くことができない。また、問題が不適切問題であることや、解くべき方程式の非線型性により、このアルゴリズムから得られた解が十分に信頼できるものであるとは限らない。

3.2 区間演算

ここでは、 **Algorithm 1**-2.(i) で現れる固有値問題 (3.3) を精度保証付きで計算するために、また、Newton 法自体を精度保証付きで計算するために区間を導入する。
まず、実閉区間の集合全体を **IR** とする。また、**IR** に属する元を $[\cdot]$ と書くことにする。$[x] \in \mathbf{IR}$ とは、

$$[x] := [\underline{x}, \overline{x}]$$

を意味する。ここで、$\overline{x}$ は、実数 x の上限、$\underline{x}$ は、下限をあらわす。次に連続関数、

$$\underline{w}(x,y), \overline{w}(x,y) \ (\underline{w}(x,y) \leq \overline{w}(x,y) \text{ in } \Omega \subset \mathbf{R}^2)$$

において、区間関数を次で定義する ：

$$\begin{aligned} [w](x,y) &:= [\underline{w}(x,y), \overline{w}(x,y)] \\ &:= \{w(x,y) \in C(\bar{\Omega}) \mid \underline{w}(x,y) \leq w(x,y) \leq \overline{w}(x,y), \quad {}^{\forall}(x,y) \in \bar{\Omega}\} \end{aligned}$$

さらに、再構成したい potential 関数を $q([\alpha])$ として、$q([\alpha])$ を次のように定義する ：

$$\begin{aligned} q([\alpha]) &:= \hat{q} + \sum_{j=1}^{M} [\alpha_j] q_j \\ &:= \left\{ \hat{q} + \sum_{j=1}^{M} \alpha_j q_j \ \middle| \ \alpha_j \in [\alpha_j] \right\} \end{aligned} \tag{3.5}$$

また、区間を用いるにあたって、$q([\alpha])$ の微分、積分の計算が実数演算のようにできる必要がある。例えば、基底関数が微分可能ならば、実定数のように区間係数を扱うことができ、さらに、次を満たす、$\left(\frac{\partial q([\alpha])}{\partial x}\right)$ を区間関数の微分と定義する ：

$$\left(\frac{\partial q([\alpha])}{\partial x}\right) := \left\{ \frac{\partial q}{\partial x} \ \middle| \ q \in q([\alpha]) \right\}$$

y についても同様である。
次に、区間関数 $g_i([\alpha])$ を、次を満たす区間関数にとる ：

$$\{g_i(\alpha) \mid \alpha \in [\alpha]\} \subset g_i([\alpha]) \tag{3.6}$$

ここで、$g_i(\alpha)$ は次の固有値問題の第 i 番目の固有値 $\lambda_i(q(\alpha))$ に対応する L^2 -正規化固有関数である ：

$$\left\{ \begin{array}{rcll} -\Delta u + q(\alpha) u &=& \lambda u & \text{in } \Omega \\ u &=& 0 & \text{on } \partial\Omega \end{array} \right.$$

同様に、$[\alpha]$ における f の Jacobian を、

$$\left\{ \left(\frac{\partial f_i}{\partial \alpha_j}(\alpha)\right) \ \middle| \ \alpha \in [\alpha] \right\} \subset \left(\frac{\partial f_i}{\partial \alpha_j}([\alpha])\right) \tag{3.7}$$

で与えられる区間行列 $\left(\dfrac{\partial f_i}{\partial \alpha_j}([\alpha])\right)$ により定義する。
写像 $m : \mathbf{IR}^M \to \mathbf{R}^M$ を次で定義する:

$$m([\alpha]) := (mid([\alpha_j]))_{j=1,\ldots,M} := (\frac{\underline{\alpha_j} + \overline{\alpha_j}}{2})_{j=1,\ldots,M}$$

また、区間行列 $[A]$ と区間ベクトル $[b]$ に対して、集合 $\mathbf{ILSS}([A],[b])$ を次のように定義する ：

$$\mathbf{ILSS}([A],[b]) := \{x \mid Ax = b,\ A \in [A],\ b \in [b]\}$$

これらを用いることにより、(3.3) に対応する interval Newton operator **IN** は、次のように与えられる ：

$$\mathbf{IN}([\alpha]^{(k)}) := m([\alpha]^{(k)}) - \mathbf{ILSS}\left(\left(\frac{\partial f_i}{\partial \alpha_j}([\alpha]^{(k)})\right), f(m([\alpha]^{(k)}))\right) \tag{3.8}$$

3.3 区間 Newton 法

ここでは、前節のことをふまえて、区間による Newton 法のアルゴリズムを紹介する [12] ：

Algorithm 2

1. 初期区間ベクトル $[\alpha]^{(0)} \in \mathbf{IR}^M$ を選ぶ。
2. $k = 0, 1, \ldots$ に対して、以下を繰り返す。
   (a) $i = 1, \ldots, M$ に対して、
      i. potential 関数を

$$m(q^{(k)}) := q(m([\alpha]^{(k)})) = \hat{q} + \sum_{j=1}^{M} mid([\alpha_j]^{(k)}) q_j$$

とする。このとき固有値問題 ：

$$\begin{cases} -\Delta u + m(q^{(k)})u &= \lambda u & \text{in } \Omega \\ u &= 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases} \tag{3.9}$$

の固有値 $[\lambda_i(m(q^{(k)}))]$ を精度保証付きで計算する。
      ii. 同様に、potential 関数を

$$q([\alpha]^{(k)}) := \hat{q} + \sum_{j=1}^{M} [\alpha_j]^{(k)} q_j$$

とする。このとき固有値問題 ：

$$\begin{cases} -\Delta u + q([\alpha]^{(k)})u &= \lambda u & \text{in } \Omega \\ u &= 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases} \tag{3.10}$$

の L^2 -正規化固有関数 $g_i([\alpha]^{(k)})$ を精度保証付きで計算する。

(b) 区間ベクトル $f_i(m([\alpha]))$ を

$$[\lambda_i(m(q^{(k)}))] - \mu_i \subseteq f_i(m([\alpha])) \tag{3.10}$$

となるように計算する。

(c) $f([\alpha]^{(k)})$ の Jacobian として、区間行列 $\left(\frac{\partial f_i}{\partial \alpha_j}([\alpha]^{(k)})\right)$ を

$$\int_\Omega g_i^2([\alpha]^{(k)}) q_j \; dxdy \subseteq \left(\frac{\partial f_i}{\partial \alpha_j}([\alpha]^{(k)})\right), \; i,j = 1,\ldots,M \tag{3.11}$$

となるように計算する。

(d) 区間 Newton 反復の過程

$$\mathbf{IN}([\alpha]^{(k)}) := m([\alpha]^{(k)}) - \mathbf{ILSS}\left(\left(\frac{\partial f_i}{\partial \alpha_j}([\alpha]^{(k)})\right), f(m([\alpha]^{(k)}))\right) \tag{3.12}$$

を計算し、

if

$$\mathbf{IN}([\alpha]^{(k)}) \subseteq [\alpha]^{(k)} \Longrightarrow \text{検証終了} \tag{3.13}$$

else

$$[\alpha]^{(k+1)} := \mathbf{IN}([\alpha]^{(k)}) \cap [\alpha]^{(k)} \tag{3.14}$$

として、Step.(a) へ ∎

(Algorithm 2 に対する注釈)

1. Step.2-a において、解くべき固有値問題が (3.9), (3.10) と異っている理由を簡単に述べる。まず、固有値は区間 Newton 法の残差にあたる部分、固有関数は、Jacobian にあたる部分に必要であることに注意する。interval Newton operator の性質により、f の $[\alpha]^{(k)}$ における Jacobian は、(3.10) の固有関数でなければならないことがわかる。しかし、固有値については、(3.9) の方を採用する。これは、固有値の包み込みをより精密にする必要があるからである。また、(3.10) より、(3.9) の固有値がより精密に包み込めるのは、次節で紹介する中尾の方法の定式化より明らかであろう。
2. f の Jacobian を包含する区間行列が (3.11) で与えられることは、次節で述べる。
3. 非線形方程式 $f(\alpha) = 0$ の解の検証は、interval Newton operator (3.12) を用いた、区間 Newton 法を適用する。
4. (3.14) において、$[\alpha]^{(k)}$ から $[\alpha]^{(k+1)}$ に進むステップでは、δ -inflation の技法 [12] を用いる。

以上、 2 つのアルゴリズムを紹介したが、実際の計算では、

1. **Algorithm 1** を実行する。それによって得られた、近似 potential を表す係数ベクトルを $\widetilde{\alpha} := (\widetilde{\alpha}_1, \ldots, \widetilde{\alpha}_M)$ とする。
2. 補助 potential を **Algorithm 1** により得られた近似 potential $(\hat{q} := q(\widetilde{\alpha}))$ として、**Algorithm 2** を実行する。

という手順で行う。

4　再構成における精度保証付き計算の詳細

4.1　順問題に対する固有値、固有関数の包み込み

ここでは、**Algorithm 2** の Step.2-(a) であらわれる順問題 ：

$$\begin{cases} -\Delta u + qu &= \lambda u & \text{in } \Omega \\ u &= 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases} \tag{4.1}$$

の解の検証について述べる。ただし、$q := q([\alpha]^{(k)})$ である。Neher は、 Shooting-method を主な道具として、微分作用素の固有値と固有関数を数値的に検証した。この方法では、固有関数の零点の数の情報が手がかりとなり、一般に 2 次元問題には適用できない。本研究では、以下に挙げる中尾の方法 [8, 9] により固有値と固有関数を数値的に検証する。この方法は、一般の 2 次元有界凸領域に成り立つものであり、これを用いることにより、 2 次元の逆固有値問題に拡張することができた。

4.1.1　固有値、固有関数の一意性付き検証法

まず、検証に必要な定義と仮定を述べておく。

整数 k に対して、k 次の L^2- Sobolev 空間を次で定義する ：

$$H^k(\Omega) := \{v \mid D^j v \in L^2(\Omega) \ \ {}^\forall j \ \text{ such that } \ |j| \le k\}$$

ここで、$j := (j_1, j_2)$, $0 \le j_i \in \mathrm{N}$ $(i = 1, 2)$ で、

$$|j| := j_1 + j_2, \ D^j v := \frac{\partial^{|j|} v}{\partial x^{j_1} \partial y^{j_2}}$$

とする。また、$H_0^1(\Omega)$ を $C_0^1(\Omega)$ の $H^1(\Omega)$ における閉包とする。ここで、$C^1(\Omega)$ の部分集合 $C_0^1(\Omega)$ は、次で定義される集合である ：

$$C_0^1(\Omega) := \left\{\phi \in C^1(\Omega) \mid supp(\phi) : \text{コンパクト}\right\}$$

そして、$H_0^1(\Omega)$ の内積を次で定義する ：

$$(u, v)_{H_0^1(\Omega)} := (\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)}$$

次に記号を導入する。
S_h : パラメータ h に依存する $H_0^1(\Omega)$ の有限要素部分空間
$S_h^\perp$: $H_0^1(\Omega)$ における S_h の直交補空間
P_{h0} : $H_0^1(\Omega)$ から S_h への H_0^1 -projection 即ち、 ${}^\forall u \in H_0^1(\Omega)$ に対して、

$$(\nabla(u - P_{h0}u), \nabla\phi)_{L^2} = 0, \ \ {}^\forall \phi \in S_h$$

P_h : $H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R}$ から $S_h \times \mathbf{R}$ への projection 即ち、

$$P_h(u, \lambda) := (P_{h0}u, \lambda)$$

I_0 : $H_0^1(\Omega)$ での恒等作用素
I : $H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R}$ での恒等作用素

ここで、定数についての仮定と Lemma を挙げておく。

Assumption 4.1 $u \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ に対して、次を満たす、h に無関係な定数 C_1 が存在する ：

$$\inf_{\chi \in S_h} \|u - \chi\|_{H_0^1(\Omega)} \leq C_1 h |u|_{H^2(\Omega)} \tag{4.2}$$

ここで、$|u|_{H^2(\Omega)}$ は、次で定義される $H^2(\Omega)$ 上のセミノルムを表す ：

$$|u|_{H^2(\Omega)} := \sum_{i+j=2} \left\| \frac{\partial^2 u}{\partial x^i \partial y^j} \right\|^2_{L^2(\Omega)}$$

∎

Lemma 4.1 $^\forall \psi \in L^2(\Omega)$ に対して、 $^{\exists 1}\ \phi \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$ such that

$$\left\{ \begin{array}{rcll} -\Delta \phi & = & \psi & \text{in } \Omega \\ \phi & = & 0 & \text{on } \partial\Omega \end{array} \right.$$

かつ、

$$|\phi|_{H^2(\Omega)} \leq C_2 \|\psi\|_{L^2(\Omega)} \tag{4.3}$$

を満たす、h に無関係な定数 C_2 が存在する。特に、Ω が凸多角形のときは、$C_2 = 1$ となる。 ∎

以下、固有値問題 (4.1) を考える。固有値と固有関数を同時に検証したいので、空間 $H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R}$ を考える。その内積とノルムを次で定義する。 $^\forall w_i := (u_i, \lambda_i) \in H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R}\ (i = 1, 2)$ に対して、

$$< w_1, w_2 >_{H_0^1(\Omega) \times R} := (u_1, u_2)_{H_0^1(\Omega)} + \lambda_1 \lambda_2$$
$$\|w_i\|^2_{H_0^1(\Omega) \times R} := \|u_i\|^2_{H_0^1(\Omega)} + |\lambda_i|^2$$

まず、ここで、問題 (4.1) を次のように正規化する ：
Find $(u, \lambda) \in H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R}$ such that

$$\left\{ \begin{array}{rcl} -\Delta u + qu & = & \lambda u \\ \displaystyle\int_\Omega u^2 \, dxdy & = & 1 \end{array} \right. \tag{4.4}$$

$\widehat{w}_h := (\widehat{u}_h, \widehat{\lambda}_h) \in S_h \times \mathbf{R}$ を次で定義される (4.4) の有限要素近似解とする ：

$$\left\{ \begin{array}{rcl} (\nabla \widehat{u}_h, \nabla \phi_i)_{L^2} & = & ((\widehat{\lambda}_h - q)\widehat{u}_h, \phi_i)_{L^2}, \quad ^\forall \phi_i \in S_h \\ \displaystyle\int_\Omega \widehat{u}_h^2 \, dxdy & = & 1 \end{array} \right. \tag{4.5}$$

この $\widehat{w}_h$ の近傍に (4.4) 真の解が存在することを、区間演算を用いて計算機で数値的に検証する。その際、一般的には、$a\ posteriori$ 誤差評価による検証方法 [11] を用いるが、ここでは、区分 1 次要素を用いるため、残差反復の効果が小さくなるので、それを採用しないことにする。次に、(4.4) を不動点定式化する。問題は、$(\widehat{u}_h, \widehat{\lambda}_h)$ の周りに、(4.4) の真の解を探すことなので、

$$u := \widehat{u}_h + \widetilde{u},\ \lambda := \widehat{\lambda}_h + \widetilde{\lambda}$$

とおくと、(4.4) は、$(\widetilde{u}, \widetilde{\lambda})$ について、

$$\left\{ \begin{array}{rcl} -\Delta(\widehat{u}_h + \widetilde{u}) & = & (\widehat{\lambda}_h + \widetilde{\lambda} - q)(\widehat{u}_h + \widetilde{u}) \\ \displaystyle\int_\Omega (\widehat{u}_h + \widetilde{u})^2 \, dxdy & = & 1 \end{array} \right.$$

と書ける。そこで、作用素 $F : H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R} \to H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R}$ を、

$$F\begin{pmatrix} \tilde{u} \\ \tilde{\lambda} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} (-\Delta)^{-1}\{(\widehat{\lambda}_h + \widetilde{\lambda} - q)(\widehat{u}_h + \widetilde{u})\} - \widehat{u}_h \\ \widetilde{\lambda} + \displaystyle\int_\Omega (\widehat{u}_h + \widetilde{u})^2 dxdy - 1 \end{pmatrix} \tag{4.6}$$

とおくと、(4.4) は、$w := (\widetilde{u}, \widetilde{\lambda})$ について、コンパクト作用素 F の不動点方程式、

$$w = F(w) \tag{4.7}$$

になる。ここに、次の仮定をおく。

Assumption 4.2 作用素 F の $(0,0)$ での Fréchet 導関数 $F'(0,0)$ が存在するとき、作用素

$$P_h[I - F'(0,0)] : H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R} \to S_h \times \mathbf{R}$$

を $S_h \times \mathbf{R}$ 上に制限したとき、逆作用素

$$P_h[I - F'(0,0)]_h^{-1} : S_h \times \mathbf{R} \to S_h \times \mathbf{R}$$

を持つ。 ∎

この仮定の正当性は、実際の計算過程で数値的に確かめられる。

さて、(4.7) を有限次元と無限次元に分けることにより、次のように書ける ：

$$\begin{cases} P_h w &= P_h F(w) \\ (I - P_h)w &= (I - P_h)F(w) \end{cases} \tag{4.8}$$

(4.8) の有限次元部分に $S_h \times \mathbf{R}$ 上の擬 Newton 法を用いる ：

$$N_h(w) := P_h w - [I - F'(0,0)]_h^{-1}(P_h w - P_h F(w))$$

として、

$$T(w) := N_h(w) + (I - P_h)F(w) \tag{4.9}$$

と定義すると、T はコンパクト作用素になる。この時、次が成り立つ ：

$$w = T(w) \Longleftrightarrow w = F(w) \tag{4.10}$$

ここで、$w = T(w)$ の解を一意に包み込む定式化を述べる。

$w \in H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R}$ を 次の形で書く ：

$$w = (v_h, \mu) + (v_\perp, 0)$$

ただし、$(v_h, \mu) \in S_h \times \mathbf{R}, (v_\perp, 0) \in S_h^\perp \times \{0\}$ である。また、$N = dim(S_h)$ として、v_h を $v_h = \sum_{i=1}^N v_i \phi_i$ ($\{\phi_i\}$ は S_hの基底関数) と書く。ここで、記号を導入する。

$$\begin{aligned} (w)_i &:= |v_i|,\ i = 1, \ldots, N \\ (w)_{N+1} &:= |\mu| \\ (w)_{N+2} &:= \|v_\perp\|_{H_0^1(\Omega)} \end{aligned}$$

そして、解を含む集合 (候補者集合) を、$U_i, \Lambda_0 > 0$ $(i = 1, \ldots, N, N+2)$ として、

$$\begin{aligned} U &:= \Big\{ u := \sum_{i=1}^{N} u_i \phi_i + u_\perp \in H_0^1(\Omega) \ \Big| \\ &\qquad |u_i| \le U_i \ (i = 1, \ldots, N), \|u_\perp\|_{H_0^1(\Omega)} \le U_{N+2} \Big\} \qquad (4.11) \\ \Lambda &:= \{ \lambda \in \mathbf{R} \mid |\lambda| \le \Lambda_0 \} \qquad (4.12) \end{aligned}$$

とする。次に、以下を満たすベクトル $Y = (Y_1, \ldots, Y_{N+2}) > 0$ を 1 つ選ぶ。 (選び方は、後述)

$$(T(0))_i \le Y_i, \ i = 1, \ldots, N+2 \qquad (4.13)$$

また、Y によって決まるベクトル $Z(Y) = (Z_1(Y), \ldots, Z_{N+2}(Y)) > 0$ を次を満たすように 1 つ選ぶ。 (選び方は、後述)

$$(T'(w_1)w_2)_i \le Z_i(Y), \ i = 1, \ldots, N+2, \ {}^\forall w_1, w_2 \in U \times \Lambda \qquad (4.14)$$

さて、ここで、集合 $\Theta(Y, Z)$ を次で定義する :

$$\Theta(Y, Z) := \{ v \in H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R} \mid (v)_i \le Y_i + Z_i \ (i = 1, \ldots, N+2) \} \qquad (4.15)$$

Remark 3 $\Theta(Y, Z)$ の選び方は、一意でない。

この時、検証条件は、次の定理で与えられる。

Theorem 4.2

$$\overline{\Theta(Y, Z)} \subset int(U \times \Lambda) \qquad (4.16)$$

ならば、T の不動点は、集合$\Theta(Y, Z)$ に存在し、それは、固有値、固有関数の対として $U \times \Lambda$ の中で一意である。

Proof. [8] を見よ。 ∎

この定理では、$U \times \Lambda$ の中では、固有値、固有関数の対としての一意性は言えたが、Λ の中での固有値の一意性が言えたわけではない。 (Λ の中に U とは異なる $\widehat{U}$ に固有関数を持つ固有値がある可能性もある。) しかし、次の定理により、Λ の中での固有値の一意性が保証される。

Theorem 4.3 (4.16) が成り立てば、次が成り立つ :

1. ${}^{\exists 1}\ u^*$ such that $u^* - \widehat{u}_h \in U, \int_\Omega (u^*)^2 = 1$
2. ${}^{\exists 1}\ \lambda^*$ such that $\lambda^* - \widehat{\lambda}_h \in \Lambda$
3. $F(u^* - \widehat{u}_h, \lambda^* - \widehat{\lambda}_h) = (u^* - \widehat{u}_h, \lambda^* - \widehat{\lambda}_h)$
4. λ^* は単純

Proof. [8] を見よ。 ∎

実際の計算では、最初に第 1 番目の固有値とそれに対応する固有関数を包み込む $H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R}$ の部分集合 (U_1, Λ_1) を求める。それを 2 番目 (U_2, Λ_2) ,...,M 番目 (U_M, Λ_M) と次々と求めていく。ここで、$\Lambda_i \cap \Lambda_{i+1} = \emptyset$ $(i = 1, \ldots, M-1)$ を前提とする。

4.1.2　固有値でないところの検証

前小節では、固有値と固有関数の対の検証を行うための方法を述べた。その方法によって得られた集合を $(U_i, \Lambda_i)_{i=1,\ldots,M}$ とする。次に、区間 Γ_i を次で定義する ：

$$\Gamma_i := [\sup(\Lambda_i), \inf(\Lambda_{i+1})],\ i = 1, \ldots, M-1$$

Theorem 4.2,4.3 の主張では、各 Γ_i の中に固有値が存在しないことを保証しない。ここでは、Γ_i の中に固有値が存在しないことをいうための方法を述べる。

方程式は、(4.1) を考える。そして、Γ_i を L 等分する。このとき、$\{\gamma_s\}_{s=1,\ldots,L+1}$ を次のようにおく ：

$$\gamma_1 := \inf(\Gamma_i)\ ,\ \gamma_{s+1} := \gamma_s + \frac{diam(\Gamma_i)}{L}\quad s = 1, \ldots, L$$

また、区間列 $\{[\gamma]_s\}_{s=1,\ldots,L}$ を次で定義する ：

$$[\gamma]_s := [\gamma_s, \gamma_{s+1}]$$

ここで、 $^\forall s \in \{1, \ldots, L\}$ を 1 つ選び、それを固定する。そこで、$\gamma \in [\gamma]_s$ に対して、作用素 L_γ を次で定義する ：

$$L_\gamma(u) := -\Delta u + (q - [\gamma]_s)u$$

このとき、L_γ は、線形作用素になるので、$u \equiv 0$ は、

$$\left\{ \begin{array}{rcll} L_\gamma(u) & = & 0 & \text{in } \Omega \\ u & = & 0 & \text{on } \partial\Omega \end{array} \right. \tag{4.17}$$

の解になる。よって、(4.17) の解の一意性がいえれば、$[\gamma]_s$ の中には、(4.1) の固有値が存在しないことがいえる。これを $[\gamma]_1, \ldots, [\gamma]_L$ に対して実行する。そして、全てにおいて固有値の非存在がいえれば、

$$\Gamma_i = \bigcup_{s \in \{1,\ldots,L\}} [\gamma]_s$$

に固有値がないことがいえる。これを $\Gamma_1, \ldots, \Gamma_{M-1}$ と続ければよい。

以下、$[\gamma]_s$ での (4.17) の解の一意性の示し方について述べる。

$^\forall \gamma \in [\gamma]_s$ をとり、それを固定する。そして、次の固有値問題を考える ：

$$\left\{ \begin{array}{rcll} -\Delta u & = & (\gamma - q)u & \text{in } \Omega \\ u & = & 0 & \text{on } \partial\Omega \end{array} \right. \tag{4.18}$$

$F_\gamma : H_0^1(\Omega) \to H_0^1(\Omega)$ を次で定義する ：

$$F_\gamma(u) := (-\Delta)^{-1}(\gamma - q)u \tag{4.19}$$

このとき、(4.18) は、コンパクト線形作用素 F_γ の不動点方程式 ：

$$u = F_\gamma(u) \tag{4.20}$$

と書ける。ここで、**Assumption 4.2** と同様に次の仮定を設ける。

Assumption 4.3 $P_{h0}[I_0 - F_\gamma]$ を S_h 上に制限したものは、逆作用素 $[I - F_\gamma]_h^{-1}$ をもつ。 ∎

この仮定の正当性は、実際の計算過程により数値的に確かめられる。

次に、

$$\begin{aligned}(N_{h0})_\gamma(u) &:= P_{h0}u - [I_0 - F_\gamma]_h^{-1}(P_{h0}u - P_{h0}F_\gamma(u)) \\ T_\gamma(u) &:= (N_{h0})_\gamma(u) + (I_0 - P_{h0})F_\gamma(u)\end{aligned}$$

とおくと、T_γ はコンパクト線形作用素で、

$$u = T_\gamma(u) \Longleftrightarrow u = F_\gamma(u) \tag{4.21}$$

が成り立つ。

Theorem 4.4 $\overline{\cup_{\gamma\in[\gamma]_s} T_\gamma U} \subset int(U)$ を満たす $H_0^1(\Omega)$ の有界凸閉集合 U が見つかれば、各 $\gamma \in [\gamma]_s$ に対し、$u = T_\gamma(u)$ の解、即ち、$u = F_\gamma(u)$ の一意解が $int(U)$ に存在する。

∎

この定理より、各 $\gamma \in [\gamma]_s$ に対して (4.17) の解の一意性が言える。以下、**Theorem 4.4** を用いた解の一意性検証の手順を述べる。

$U_0 := (U_j^{(0)})_{j=1,\ldots,N}$ を区間ベクトル、また、正の実数 α_0 に対して、集合 $U_h, U_\perp$ を次で定義する ：

$$\begin{aligned}U_h &:= \sum_{j=1}^{N} U_j^{(0)}\phi_j, \quad N = dim(S_h) \\ U_\perp &:= \{\psi \in S_h^\perp \mid \|\psi\|_{H_0^1(\Omega)} \le \alpha_0\}\end{aligned}$$

また、

$$U := U_h + U_\perp$$

と定義する。このとき、検証条件は、次で書ける ：

$$\begin{cases} \overline{(N_{h0})_\gamma(U)} & \subset \quad int(U_h) \\ \overline{(I_0 - P_{h0})F_\gamma(U)} & \subset \quad int(U_\perp) \end{cases} \tag{4.22}$$

(4.22) が、成り立てば、前定理により、$U = U_h + U_\perp$ の中に (4.17) の一意解が存在することがわかる。以下、(4.22) と同値な検証条件を導く。

$^\forall v \in U$ を次の形で書く ：

$$v := v_h + v_\perp, \quad v_h \in S_h,\ v_\perp \in U_\perp$$

この v に対して $(N_{h0})_\gamma(v)$ は、

$$\begin{aligned}(N_{h0})_\gamma(v) &= P_{h0}(v_h + v_\perp) - [I_0 - F_\gamma]_h^{-1}(P_{h0}(v_h + v_\perp) - P_{h0}F_\gamma(v_h + v_\perp)) \\ &= v_h - [I_0 - F_\gamma]_h^{-1}(v_h + P_{h0}F_\gamma(v_h))\end{aligned}$$

となり、両辺に $P_{h0}[I_0 - F_\gamma]$ を掛けて、整理することにより、

$$P_{h0}[I_0 - F_\gamma](N_{h0})(v) = P_{h0}F_\gamma(v_\perp) \tag{4.23}$$

となる。次に、

$$(N_{h0})_\gamma U \subset \sum_{j=1}^{N} B_j\phi_j$$

を満たす区間ベクトル $B := (B_j)_{j=1,\ldots,N}$ の求め方を述べる。このために S_h の部分集合 X を次で定義する ：

$$X := \Big\{ x := \sum_{j=1}^{N} x_j\phi_j \in S_h \quad \Big| \quad (P_{h0}[I - F_\gamma]x, \phi_i)_{H_0^1(\Omega)} = (P_{h0}F_\gamma(v_\perp), \phi_i)_{H_0^1(\Omega)}, \\ {}^\forall v_\perp \in U_\perp,\ i = 1, \ldots, N \Big\} \tag{4.24}$$

(4.24) の条件式の左辺は、$i = 1, \ldots, N$ に対して、

$$\begin{aligned} &(P_{h0}[I - F_\gamma]x, \phi_i)_{H_0^1(\Omega)} \\ &\quad = \sum_{j=1}^{M} x_j((\nabla\phi_j, \nabla\phi_i)_{L^2(\Omega)} + ((q - \lambda)\phi_j, \phi_i)_{L^2(\Omega)}) \end{aligned} \tag{4.25}$$

また、右辺は、

$$(P_{h0}F_\gamma(v_\perp), \phi_i)_{L^2(\Omega)} = \int_\Omega (\gamma - q)v_\perp\phi_i \ dxdy \tag{4.26}$$

となる。よって、行列 $G = (g_{ij})_{i,j=1,\ldots,N}$ と区間ベクトル r を

$$\begin{aligned} g_{ij} &:= (\nabla\phi_j, \nabla\phi_i)_{L^2(\Omega)} + ((q - \lambda)\phi_j, \phi_i)_{L^2(\Omega)} \quad (i = 1, \ldots, N) \\ r &:= ([-r_i, r_i])_{i=1,\ldots,N},\ r_i := C_1C_2h\|(\gamma - q)\phi_i\|_{L^2(\Omega)} \end{aligned}$$

とおくと、区間ベクトル B は、次で決定される ：

$$B = \alpha_0 G^{-1} r \tag{4.27}$$

また、(4.22) の無限次元部分に対しては、

$$\alpha := C_1C_2h \sup_{v\in U} |(\gamma - q)v\|_{L^2(\Omega)}$$

として、

$$\begin{aligned} \alpha &:= C_1C_2h \sup_{v\in U} \|(\gamma - q)v\|_{L^2(\Omega)} \\ &\le C_1C_2h \left\{ \sup_{v_h\in S_h} \|(\gamma - q)v_h\|_{L^2(\Omega)} + \sup_{v_\perp\in U_\perp} \|(\gamma - q)v_\perp\|_{L^2(\Omega)} \right\} \\ &\le C_1C_2h \sup_{v_h\in U_h} \|(\gamma - q)v_h\|_{L^2} + (C_1C_2h)^2\alpha_0\|\gamma - q\|_{L^\infty} \end{aligned}$$

で決定される。

以上により、(4.22) に代わる同値な検証条件は、次の定理で与えられる ：

Theorem 4.5 (4.22) は、次と同値 ：

$$C_0 h \sup_r \|(\gamma - q)\Phi^t \cdot G^{-1} r\|_{L^2} + (C_0 h)^2 \|\gamma - q\|_\infty < 1 \tag{4.28}$$

ただし、$\Phi^t := (\phi_1, \ldots, \phi_N)$, $C_0 := C_1 C_2$ である。

Proof. [9] を見よ。 ∎

4.2 区間 Newton 法とその Jacobian の計算

区間 Newton 法の定式化においては、f の Jacobian を求めることは、本質的な役割を果たす。これは、(3.12) で与えられた、interval Newton operator **IN** の性質上、近似的なもので代用することができないためである。実際、ここでは、Jacobian の導出を行うが、求められた Jacobian は、1 次元の逆固有値問題のものと同じ形のものであることがわかった。しかし、1 次元のときは、ある 2 つの初期値問題の解として構成することができたが [6]、2 次元のときでは、そのようなことができない。2 次元問題に対しては、以下に述べる方法で、Jacobian の導出を行う。この方法により、2 次元問題に対しては、ある偏微分方程式の解が存在するときに Jacobian が存在することがわかった。

ここで、記号を整理する ：

f : (2.5) で定義された関数
$[\alpha]^{(k)}$: **Algorithm 2** において生成された区間ベクトル
$q([\alpha]^{(k)})$: **Algorithm 2** の (3.10) で定義した区間関数 :

$$q([\alpha]^{(k)}) := \hat{q} + \sum_{j=1}^{M} [\alpha_j]^{(k)} q_j$$

$\lambda(q(\alpha))$, $g_i(\alpha)$: 固有値問題、

$$\begin{cases} -\Delta u + q(\alpha)u &= \lambda u & \text{in } \Omega \\ u &= 0 & \text{on } \partial\Omega \end{cases}$$

の第 i 番目の固有値及び、それに対応する L^2- 正規化固有関数

また、簡単のために、$[\alpha] := [\alpha]^{(k)}, q([\alpha]) := q([\alpha]^{(k)})$ と書くことにする。

ここで、Jacobian を導出するために次の仮定を設ける。

Assumption 4.4 $u \in H_0^1(\Omega), \eta \in \mathbf{R}$ を与えたとき、$^\forall \alpha \in [\alpha]$ に対して、

$$\begin{cases} -\Delta v + (q(\alpha) - \eta)v &= (\mu - q_j)u \\ \displaystyle\int_\Omega uv \; dxdy &= 0 \end{cases} \tag{4.29}$$

を満たす、$(v, \mu) \in H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R}$ が一意に存在する。 ∎

Lemma 4.6 f を (2.5) で与えられている関数とする。このとき f の $[\alpha]$ における Jacobian を表す区間行列は、**Assumption 4.4** のもとで、次式のように表される ：

$$\left(\frac{\partial f_i}{\partial \alpha_j}([\alpha])\right) = \int_\Omega g_i^2([\alpha]) q_j \, dxdy \tag{4.30}$$

ただし、$g_i([\alpha])$ は、(3.6) で定義された区間関数である。

Proof. $^\forall \alpha \in [\alpha]$ に対して、 $\lambda_i := \lambda_i(q(\alpha)),\ g_i(\alpha)$ は、固有値問題 ：

$$\begin{cases} -\Delta u + q(\alpha)u &= \lambda u \quad \text{in } \Omega \\ u &= 0 \quad \text{on } \partial\Omega \end{cases}$$

の固有値および L^2 正規化された固有関数なので、次式を満たす ：

$$\begin{cases} -\Delta g_i + q(\alpha) g_i &= \lambda_i g_i \\ \displaystyle\int_\Omega g_i^2 \, dxdy &= 1 \end{cases} \tag{4.31}$$

(4.31) の両辺を α_j で偏微分する ：

$$-\Delta\left(\frac{\partial g_i}{\partial \alpha_j}\right) + \frac{\partial q(\alpha)}{\partial \alpha_j} g_i + q(\alpha)\frac{\partial g_i}{\partial \alpha_j} = \frac{\partial \lambda_i}{\partial \alpha_j} g_i + \lambda_i \frac{\partial g_i}{\partial \alpha_j} \tag{4.32}$$

$$\int_\Omega g_i \frac{\partial g_i}{\partial \alpha_j} \, dxdy = 1 \tag{4.33}$$

ここで、$v := \dfrac{\partial g_i}{\partial \alpha_j},\ \mu := \dfrac{\partial \lambda_i}{\partial \alpha_j}$ とおく。また、$\dfrac{\partial q(\alpha)}{\partial \alpha_j} = q_j$ になることを用いると、

$$\begin{cases} -\Delta v + (q(\alpha) - \lambda_i) v &= (\mu - q_j) \\ \displaystyle\int_\Omega g_i v \, dxdy &= 0 \end{cases} \tag{4.34}$$

を得る。また、仮定により、このような解 (v, μ) は一意に存在し、(4.34) の両辺に g_i をかけて積分する ：

$$(-\Delta v, g_i)_{L^2} + ((q(\alpha) - \lambda)v, g_i)_{L^2} = ((\mu - q_j) g_i, g_i)_{L^2} \tag{4.35}$$

ここで、$(\cdot,\cdot)_{L^2}$ は、Ω 上の L^2−内積を表す。また、部分積分により、

$$(-\Delta v, g_i)_{L^2} = (\nabla v, \nabla g_i)_{L^2} = (v, -\Delta g_i)_{L^2}$$

となるので、(4.35) は次のようになる ：

$$(v, -\Delta g_i + (q(\alpha) - \lambda_i) g_i)_{L^2} = ((\mu - q_j) g_i, g_i)_{L^2}$$

(4.31) と $(g_i, g_i)_{L^2} = 1$ より、

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f_i}{\partial \alpha_j}(\alpha)\right) &= \left(\frac{\partial \lambda_i}{\partial \alpha_j}(\alpha)\right) \\ &= \int_\Omega g_i^2(\alpha) q_j \, dxdy \end{aligned}$$

以上のことが、$\forall \alpha \in [\alpha]$ に対して成り立つので、$\left(\dfrac{\partial f_i}{\partial \alpha_j}([\alpha])\right)$ の定義 (3.7) により、結論を得る。 ∎

Remark 4 実際には、(4.34) を検証しなければならないことに注意する。また、(4.34) の解の一意存在を検証するにあたって、直接これを扱うのではなく、次の命題に述べられている方程式 (4.36) に対して零解の検証を行えばよい。これについては、今後の課題と言えよう。

Proposition 4.1 次は同値である ：

1. $^{\exists 1}\ (v,\mu) \in H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R}$ such that (4.34).
2. $$I \begin{pmatrix} v \\ \mu \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} (-\Delta^{-1})(q([\alpha]) - \lambda_i) & -\Delta^{-1} g_i \\ \int_\Omega g_i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v \\ \mu \end{pmatrix} = 0 \tag{4.36}$$

   ならば、$(v,\mu) = (0,0)$

Proof. $K : H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R} \to H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R}$ を次で定義する ：

$$K := \begin{pmatrix} (-\Delta^{-1})(q([\alpha]) - \lambda_i) & -\Delta^{-1} g_i \\ \int_\Omega g_i & 1 \end{pmatrix}$$

このとき、K は、コンパクトになり、Fredholm の択一定理 [2] により結論することが許される。 ∎

ここで、区間 Newton 法についての定理を述べる。その前に、基本的な定理を 1 つ挙げておく。

Theorem 4.7 D を $\mathbf{R}^M$ の有界凸な開集合とする。また、$f : \mathbf{R}^M \to \mathbf{R}^M$ を D 上で微分可能で、$\overline{D}$ 上で連続な関数とする。この時、$\forall y, z \in D$ に対して $^{\exists} B(y,z) \in \mathbf{R}^{M \times M}$ such that

$$B(y,z) : \text{正則}$$
$$f(z) - f(y) = B(y,z)(z-y)$$

∎

Theorem 4.8 (Neher [12]) interval Newton operator **IN** は、(3.8) で定義されているものとする:

$$\mathbf{IN}([\alpha]) := m([\alpha]) - \mathbf{ILSS}\left(\left(\frac{\partial f_i}{\partial \alpha_j}([\alpha]) \right), f(m([\alpha])) \right)$$

このとき、$[x] \neq \emptyset$ に対して、次のどちらかが成り立つ ：

1. $$\mathbf{IN}([x]) \subseteq [x] \tag{4.37}$$

   ならば、f の解は、$\mathbf{IN}([x])$ で存在し、また、$[x]$ で一意である。
2. $$[x] \cap \mathbf{IN}([x]) = \emptyset \tag{4.38}$$

   ならば、f の解は、$[x]$ には存在しない。

Proof.
(4.37) のとき、
$m := m([x])$ とおく。また、前定理により $B(x,m) \in \mathbf{R}^{M\times M}$ は、$^{\forall}x \in [x]$ に対して存在し、また、正則である。$p : [x] \to \mathbf{R}^M$ を次で定義する ：

$$p(x) := x - B(x,m)^{-1} f(x) \quad {}^{\forall}x \in [x] \tag{4.39}$$

この p が $[x]$ の中で、不動点を一意にもつことを示す。

$$\begin{aligned} p(x) &= x - B(x,m)^{-1} f(m) + B(x,m)^{-1}(f(m) - f(x)) \\ &= x - B(x,m)^{-1} f(m) + (m - x) \\ &\in m - \mathbf{ILSS}\left(\left(\frac{\partial f_i}{\partial \alpha_j}([x])\right), f(m)\right) = \mathbf{IN}([x]) \qquad {}^{\forall}x \in [x] \end{aligned}$$

よって、Brouwer の不動点定理により、

$${}^{\exists}x^* \in [x] \text{ such that } p(x^*) = x^*$$

次に、不動点の一意性をいう。$x_1^*, x_2^* \in [x]$ を

$$x_1^* \neq x_2^*,\ x_i^* = p(x_i^*) \quad (i = 1, 2)$$

を満たすものとする。このとき、次が成り立つ ：

$$0 = f(x_2^*) - f(x_1^*) = B(x_2^*, x_1^*)(x_2^*, x_1^*)$$

これと、$B(x_2^*, x_1^*)$ が、正則より、$x_1^* = x_2^*$ が導かれる。これは、矛盾である。$^{\forall}x \in [x]$ で以上が成り立つので、結局、

$${}^{\exists 1}\ x^* \in [x] \text{ such that } f(x^*) = 0$$

(4.38) のとき、
f の不動点が $x^{**} \in [x]$ であるとする。このとき、

$$x^{**} = p(x^{**}) = x^{**} - B(x^{**}, m)^{-1} f(x^{**}) \in \mathbf{IN}([x])$$

が成り立つ。これより、(4.38) に矛盾する。 ∎

この定理より次が直ちにいえる。

Theorem 4.9 $[\alpha]^{(k)}$ は、**Algorithm 2** で定義された区間ベクトル列とする。このとき、$^{\exists}k_0 \in \mathrm{N}$ such that

$$\mathbf{IN}([\alpha]^{(k_0)}) \subseteq [\alpha]^{(k_0)}$$

ならば、

$${}^{\exists 1}\ \alpha^* \in [\alpha]^{(k_0)} \text{ such that } f \text{ の零点 .}$$

さらに、集合

$$q([\alpha]^{(k_0)}) := \hat{q} + \sum_{j=1}^{M} [\alpha_j]^{(k_0)} q_j$$

は、入力データ $\{\mu_i\}_{i=1,\ldots,M}$ に対応する potential 関数

$$q^*(x,y) := q(\alpha^*) = \hat{q} + \sum_{j=1}^{M} \alpha_j^* q_j$$

を包み込む。 ∎

5 数値例

ここでは、第 3 節、第 4 節に基づいたアルゴリズムにより得た計算結果を述べる。計算には、SUN/ENTERPRISE 2 (167MHz)、処理系は gcc、また、区間演算には、精度保証計算ライブラリ Profil [7] を用いた。

問題
$\Omega := (0,\pi) \times (0,\pi) \subset \mathbf{R}^2$ とする。
与えられた有限個の入力データ $\{\mu_i\}_{i=1,\ldots,M}$ $(\mu_1 < \cdots < \mu_M)$ に対して、$\{\mu_i\}_{i=1,\ldots,M}$ が次の固有値問題の固有値となるように

$$\begin{cases} -\Delta u + q(x,y)u &= \mu u \quad \text{in } \Omega \\ u &= 0 \quad \text{on } \partial\Omega \end{cases}$$

potential 関数を、

$$q(x,y) := \hat{q}(x,y) + \sum_{j=1}^{M} \alpha_j q_j(x,y)$$

の形で、再構成する。

数値例 **1** $M = 4$ のとき、入力データ $\{\mu_i\}_{i=1}^4$ ：

$$\mu_1 = 1.503\ 421\ 284\ 541\ 218 \qquad \mu_2 = 4.566\ 872\ 691\ 354\ 092$$
$$\mu_3 = 4.964\ 010\ 337\ 712\ 807 \qquad \mu_4 = 8.027\ 424\ 385\ 802\ 431$$

に対して、以下の条件で、potential 関数を再構成する。
⋆ 再構成する $q(x,y)$ の形 ：$q(x,y) := \alpha_1 + \alpha_2 \cos(2x) + \alpha_3 \cos(2y) + \alpha_4 \cos(2x)\cos(2y)$
⋆ Algorithm 1 の補助 potential ：$\hat{q}(x,y) := \cos(2x)$
⋆ Newton 法の初期値 ：$\alpha_i = 0.0 \quad (i = 1,\ldots,4)$
⋆ 順問題での分割数 ：x, y 方向に、それぞれ 30
⋆ 順問題での有限要素空間の基底 ：Ω 上連続な区分的双 1 次多項式

結果 **1**

反復回数 4 回で、次の関数の集合の中に逆問題の解を一意に検証した。

$$\begin{aligned} q([\alpha]) &:= [-0.010677447675780, 0.010677456071099] \\ &+ [\ \ 0.968746018177651, 1.031254005966614]\cos(2x) \\ &+ [-0.032304757891254, 0.032304763700003]\cos(2y) \\ &+ [-0.077673723478976, 0.077673713202151]\cos(2x)\cos(2y) \end{aligned}$$

次の図は、再構成された potential 関数の断面 $(y = \frac{\pi}{2})$ における包み込みと近似解の様子を表す。

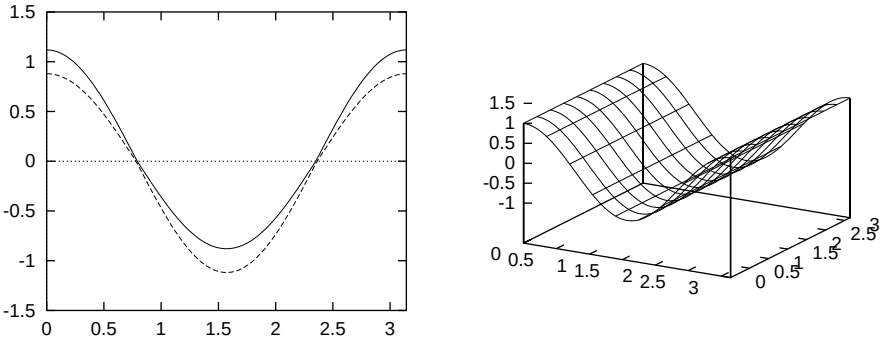

図 $:y = \frac{\pi}{2}$ における包み込み (左) と近似解 (右)

数値例 **2** $M = 4$ のとき、入力データ $\{\mu_i\}_{i=1}^{4}$:

$$\mu_1 = 1.751\ 715\ 449\ 599\ 032 \qquad \mu_2 = 4.566\ 881\ 150\ 504\ 744$$
$$\mu_3 = 4.963\ 972\ 875\ 651\ 052 \qquad \mu_4 = 8.027\ 424\ 389\ 621\ 792$$

に対して、以下の条件で、potential 関数を再構成する。

⋆ 再構成する $q(x, y)$ の形 : $q(x, y) := \alpha_1 + \alpha_2\cos(2x) + \alpha_3\cos(2y) + \alpha_4\cos(2x)\cos(2y)$

⋆ Algorithm 1 の補助 potential : $\hat{q}(x, y) := \cos(2y)(1 + \cos(2x))$

⋆ Newton 法の初期値 : $\alpha_i = 0.0 \quad (i = 1, \ldots, 4)$

⋆ 順問題での分割数 : x, y 方向に、それぞれ 30

⋆ 順問題での有限要素空間の基底 : Ω 上連続な区分的双 1 次多項式

結果 **2**

反復回数 3 回で、次の関数の集合の中に逆問題の解を一意に検証した。

$$\begin{aligned} q([\alpha]) &:= [-0.010605219795136, 0.010605220551586] \\ &+ [-0.032152085170424, 0.032152066751251]\cos(2x) \\ &+ [\ \ 0.968926415455938, 1.031073590568250]\cos(2y) \\ &+ [\ \ 0.922238411770732, 1.077761563540443]\cos(2x)\cos(2y) \end{aligned}$$

次の図は、再構成された potential 関数の断面 $(y = 0, \frac{\pi}{2})$ における包み込みと近似解の様子を表す。

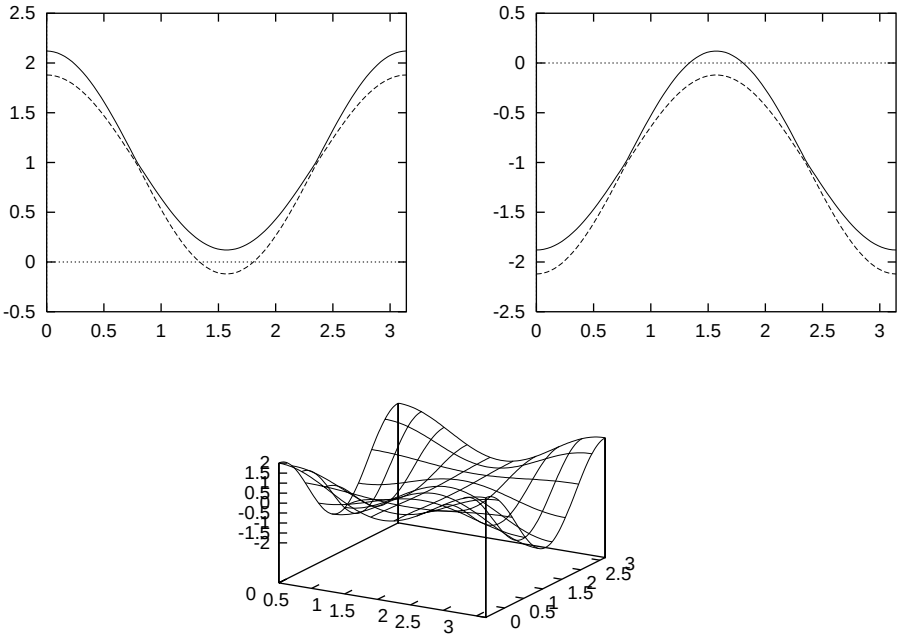

図 :$y = 0$ における包み込み (左)、$y = \frac{\pi}{2}$ における包み込み (右) と 近似解 (下)

数値例 **1** に対する注釈
これらの例で、再構成する potential 関数を

$$1, \quad \cos(2x), \quad \cos(2y), \quad \cos(2x)\cos(2y)$$

の線形結合としたのは、$q(x, y)$ を領域の重心について対称な関数な関数で Fourier 級数展開し、その有限和をとったためである。

数値例 **3** 数値例 1 の入力データに対して、次の形で摂動を与える :

$$\widetilde{[\mu_i]} := [(1.0 - p)\mu_i, (1.0 + p)\mu_i]$$

$\widetilde{[\mu_i]}$ $(i = 1, \ldots, 4)$ を入力データとする。

数値例 **3** に対する注釈
現実的な問題では、計算機の打ち切り誤差や観測誤差などで、入力データが正確 (厳密) に表すことができないので、区間により入力データを与えた。この実験により、入力データの摂動に対する逆固有値問題の解の感度解析ができる。

結果 **3**
次の表は、摂動 p とそのときの検証の成否を表す。

p	0.0	0.00001	0.00005	0.0001	0.0005	0.001
検証の成否	成功	成功	成功	成功	失敗	失敗

表 :p の値と検証の成否

次の表は、p の値とそのときに検証できた区間の下限 $(\underline{\alpha_i} := \inf([\alpha_i]))$ と上限 $(\overline{\alpha_i} := \sup([\alpha_i]))$ とその幅を表す。

1. $p = 0.0$ (数値例 1)

	$\underline{\alpha_i}$	$\overline{\alpha_i}$	$\lvert[\alpha_i]\rvert$
$[\alpha_1]$	−0.010 677 447 675 780	0.010 677 456 071 099	0.021 354 903 746 880
$[\alpha_2]$	0.968 746 018 177 651	1.031 254 005 966 614	0.062 507 987 788 963
$[\alpha_3]$	−0.032 304 757 891 254	0.032 304 763 700 003	0.064 609 521 591 257
$[\alpha_4]$	−0.077 673 723 478 976	0.077 673 713 202 151	0.155 347 436 681 127

2. $p = 0.00001$

	$\underline{\alpha_i}$	$\overline{\alpha_i}$	$\lvert[\alpha_i]\rvert$
$[\alpha_1]$	−0.010 810 091 047 805	0.010 810 099 443 122	0.021 620 190 490 927
$[\alpha_2]$	0.968 288 129 718 306	1.031 711 894 425 957	0.063 423 764 707 651
$[\alpha_3]$	−0.032 775 839 065 883	0.032 775 844 874 632	0.065 551 683 940 516
$[\alpha_4]$	−0.078 942 208 989 725	0.078 942 198 712 903	0.157 884 407 702 629

3. $p = 0.00005$

	$\underline{\alpha_i}$	$\overline{\alpha_i}$	$\lvert[\alpha_i]\rvert$
$[\alpha_1]$	−0.011 252 235 621 219	0.011 252 244 016 535	0.022 504 479 637 755
$[\alpha_2]$	0.966 761 834 853 825	1.033 238 189 290 438	0.066 476 354 436 612
$[\alpha_3]$	−0.034 346 109 647 982	0.034 346 115 456 729	0.068 692 225 104 712
$[\alpha_4]$	−0.083 170 494 025 562	0.083 170 483 748 737	0.166 340 977 774 299

4. $p = 0.0001$

	$\underline{\alpha_i}$	$\overline{\alpha_i}$	$\lvert[\alpha_i]\rvert$
$[\alpha_1]$	−0.011 473 307 907 925	0.011 473 316 303 242	0.022 946 624 211 168
$[\alpha_2]$	0.965 998 687 421 587	1.034 001 336 722 676	0.068 002 649 301 089
$[\alpha_3]$	−0.035 131 244 939 030	0.035 131 250 747 777	0.070 262 495 686 808
$[\alpha_4]$	−0.085 284 636 543 474	0.085 284 626 266 649	0.170 569 262 810 124

数値例 **4** 数値例 1 に対して、再構成すべき potential 関数を以下の様に変えてみた。

$\alpha_1 = \alpha_3 = \alpha_4 = 0.0$ (数値例 1 と同じ)

α_2 :0.2 づつ変化させる。

ただし、与えた入力データは異なるが、それ以外の条件は、全て数値例 1 と同じである。

数値例 **4** に対する注釈

この例では、ホモトピー的に再構成する potential 関数を変えてみた。一般的に、再構成する potential 関数の最大値 (L^∞ ノルム) が大きいと再構成することが困難であるという事実がある。(1 次元のときで $\|q\|_{L^\infty} > 20.0$ となる q の再構成は難しい。[12]) また、$q = 0$ の再構成は、**Assumption 2.2** に反するものであることに注意する。α_2 の値が小さくなれば、2 番目と 3 番目の固有値の差が小さくなり、再構成が困難になる。

結果 **4**

次の表は、α_2 の値と検証の成否、及び、検証にかかった反復回数を表す。

α_2	検証の成否	反復回数	$\lvert\mu_2 - \mu_3\rvert$
0.4	失敗	–	0.16
0.6	成功	5	0.24
0.8	成功	4	0.32
1.0	成功	4	0.40
1.2	成功	4	0.48
⋮	⋮	⋮	⋮
2.0	成功	4	0.80
⋮	⋮	⋮	⋮
3.0	成功	6	1.19
3.2	失敗	–	1.27

表 :α_2 の値と検証の成否

数値例 5 数値例 1 に対して、順問題の分割数を変えてみた。

結果 5
次の表は、順問題の分割数 N と検証の成否を表す。

N	20	25	30	35
検証の成否	失敗	失敗	成功	成功

表 :N の値と検証の成否

次の表は、$N = 35$ のときに検証できた区間の下限 $(\underline{\alpha_i} := \inf([\alpha_i]))$ と上限 $(\overline{\alpha_i} := \sup([\alpha_i]))$ を表す。

	$\underline{\alpha_i}$	$\overline{\alpha_i}$
$[\alpha_1]$	−0.007 699 790 949 604	0.007 699 790 949 604
$[\alpha_2]$	0.978 921 755 933 619	1.021 078 244 066 381
$[\alpha_3]$	−0.021 985 544 647 203	0.021 985 544 647 203
$[\alpha_4]$	−0.054 322 396 681 230	0.054 322 396 681 230

次の表は、$N = 30, 35$ のときに検証できた区間幅 $|[\alpha_i]|$ を表す。

	$N = 30$	$N = 35$
$\lvert[\alpha_1]\rvert$	0.021 354 903 746 880	0.015 399 581 899 208
$\lvert[\alpha_2]\rvert$	0.062 507 987 788 963	0.042 156 488 132 761
$\lvert[\alpha_3]\rvert$	0.064 609 521 591 257	0.043 971 089 294 407
$\lvert[\alpha_4]\rvert$	0.155 347 436 681 127	0.108 644 793 362 461

表 :30 分割と 35 分割のときの区間幅の比較

6　結論

数値例 **1,2** で、2 次元の逆固有値問題に対しても、本論文で与えた定式化で potential 関数を再構成することに成功した。これにより、本論文で与えた定式化の妥当性を確かめることができた。数値例 **3** より、再構成される potential 関数は、入力データに対して敏感であることがわかった。また、大きな摂動に対しては、再構成に失敗した。数値例 **4** より $\|q\|_{L^\infty} > 3.0$ となる q の再構成に失敗している。また、入力データ $\{\mu_i\}_{i=1,\ldots,M}$ に対して、$|\mu_i - \mu_{i+1}|$ の値が小さいとき、再構成が難しくなり、この数値例では、$|\mu_i - \mu_{i+1}| \sim 0.16$ の時に、再構成に失敗している。数値例 **5** により検証できた区間の大きさは $O(\frac{1}{N^2})$ のオーダーになっていることがわかった。これは、順問題で、固有値を包み込む区間幅と同じオーダーであることがわかった。また、分割数が 30 より少ないとき、検証に失敗してる。

しかし、これらは、高次要素による $a\ posteriori$ 誤差評価を用いた順問題の検証や順問題を検証するときの分割数を増やすなどすれば、改善されるであろう。

7　今後の課題

本論文では、2 次元の逆固有値問題の精度保証付き計算に関して、その定式化を与え、基本的な数値的検証例を与えた。しかし、2 次元の逆固有値問題を扱う上で、幾つかの課題が残っている。たとえば、

1. 高次要素、$a\ posteriori$ 誤差評価を用いた、順問題の数値的検証
2. Jacobian の導出の際に導かれた偏微分方程式に対する数値的検証法の定式化とその実現
3. potential 関数の基底に高次のスプライン関数を用いるなど、種々の数値実験的考察

等が挙げられる。1 に対しては、本論文では、計算コストの面で行っていない。しかし、1 の実行により、順問題をより精度良く解けることは確かである。2 に対しては、Fredholm の択一定理により、(4.36) の零解の存在を数値的に検証できればよいことがわかった。(4.36) の零解の存在を検証するための定式化とその実現が今後の課題である。3 に対しては、より多様な potential 関数を再構成するために不可欠なことであろう。これにより、調和振動子における potential 関数の再構成など、理学及び工学において現実的な問題に適用することが可能になるであろう。

A　付録 :ベクトル Y, Z の選び方

ここでは、第４節で述べた、$(4.13), (4.14)$ を満たすベクトル Y, Z の選び方を述べる。

作用素 $T : H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R} \to H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R}$ は、(4.9) で与えられるものとし、$\{\Phi_j\}$ を次を満たす、空間 $S_h \times \mathbf{R}$ の基底とする ：

$$\begin{aligned} \Phi_j &:= \begin{pmatrix} \phi_j \\ 0 \end{pmatrix}, \quad j = 1, \ldots, N \quad (N := dim(S_h)) \\ \Phi_{N+1} &:= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

また、$< \cdot, \cdot >$ で、空間 $H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R}$ の内積をあらわす。即ち、$w_i := (u_i, \lambda_i) \in H_0^1(\Omega) \times \mathbf{R}$ $(i = 1, 2)$ に対して、

$$< w_1, w_2 >= (u_1, u_2)_{H_0^1} + \lambda_1 \lambda_2$$

とする。

Y の選び方

簡単な計算より、

$$\begin{aligned} T(0) &= N_h(0) + (I - P_h)F(0) \\ &= [I - F'(0)]_h^{-1} P_h F(0) + [I - P_h]F(0) \end{aligned}$$

となるので、有限次元部分に関しては、つまり、ベクトル $(Y_j)_{j=1,\ldots,N+1}$ については、

$$P_h T(0) = [I - F'(0)]_h^{-1} P_h F(0) \subset (\sum_{j=1}^{N} [Y_j]\phi_j, [Y_{N+1}]) \tag{A.1}$$

なる区間ベクトル $[Y] := ([Y_1], \ldots, [Y_{N+1}])^t$ を求めて、

$$Y_j := |[Y_j]|, \ j = 1, \ldots, N+1$$

とおけばよい。$(A.1)$ より、

$$[I - F'(0)]_h P_h T(0) = P_h F(0)$$

となり、区間ベクトル $[Y]$ を求めるために、次の集合 Y が分かればよい ：

$$\begin{aligned} Y := \Big\{ y := (\sum_{j=1}^{N} [Y_j]\phi_j, [Y_{N+1}]) \in S_h \times \mathbf{R} \ \Big| \\ < P_h[I - F'(0)]_h y, \Phi_i >=< P_h F(0), \Phi_i >, \ (i = 1, \ldots, N+1) \Big\} \end{aligned} \tag{A.2}$$

$(A.2)$ の条件式の左辺は、

$$
\begin{aligned}
< P_h[I - F'(0)]_h y, \Phi_i > &= \sum_{j=1}^{N} [Y_j]\{(\nabla\phi_j, \nabla\phi_i)_{L^2} + ((q - \widehat{\lambda}_h)\phi_j, \phi_i)_{L^2}\} \\
&\quad - [Y_{N+1}](\widehat{u}_h, \phi_i)_{L^2} \qquad (1 \le i \le N) \\
< P_h[I - F'(0)]_h y, \Phi_{N+1} > &= \sum_{j=1}^{N} [Y_j]\{-2(\widehat{u}_h, \phi_j)_{L^2}\}
\end{aligned}
$$

となり、同様に右辺は、

$$
\begin{aligned}
< P_{h0}F(0), \Phi_i > &= ((\widehat{\lambda}_h - q), \phi_i)_{L^2} + (\nabla\widehat{u}_h, \nabla\phi_i)_{L^2} \ (1 \le i \le N) \\
< P_{h0}F(0), \Phi_{N+1} > &= \int_\Omega \widehat{u}_h^2 \, dxdy - 1
\end{aligned}
$$

よって、集合 Y を求めるために、行列 $G := (g_{ij})_{i,j=1,\ldots,N+1}$ を次で定義する ：

$$
\begin{aligned}
g_{ij} &:= (\nabla\phi_j, \nabla\phi_i)_{L^2} + ((q - \widehat{\lambda}_h)\phi_j, \phi_i)_{L^2} \quad (i, j = 1, \ldots, N) \\
g_{i\ N+1} &:= -(\widehat{u}_h, \phi_i)_{L^2} \quad (i = 1, \ldots, N) \\
g_{N+1\ j} &:= -2(\widehat{u}_h, \phi_j)_{L^2} \quad (j = 1, \ldots, N) \\
g_{N+1\ N+1} &:= 0
\end{aligned}
$$

また、区間ベクトル $[r] := ([-r_i, r_i])_{i=1,\ldots,N+1}$ で定義する。ただし、各 r_i は、

$$
\begin{aligned}
r_i &:= \left| ((\widehat{\lambda}_h - q), \phi_i)_{L^2} + (\nabla\widehat{u}_h, \nabla\phi_i)_{L^2} \right| \\
r_{N+1} &:= \left| \int_\Omega \widehat{u}_h^2 \, dxdy - 1 \right|
\end{aligned}
$$

である。このとき、区間ベクトル $[Y]$ は、

$$
[Y] = G^{-1}[r]
$$

で求められる。また、無限次元部分に関しては、簡単な計算より、

$$
\|(I - P_h)T(0)\|_{H_0^1 \times R} \le C_1 C_2 h \|(\widehat{\lambda}_h - q)\widehat{u}_h\|_{L^2}
$$

を得るので、

$$
Y_{N+2} := C_1 C_2 h \|(\widehat{\lambda}_h - q)\widehat{u}_h\|_{L^2}
$$

とすればよい。 ∎

Remark 5 ここで、述べた擬 Newton 法における、Jacobian にあたる行列 G は、必ずしも正確なものである必要はなく、近似的なものでよい。つまり、$q := q([\alpha])$ に対して G を作る必要はなく、q を $q(m([\alpha]))$ に置き換えて、G を作ればよい。

Z の選び方

先の Y のときと同様に、簡単な計算より、 $^{\forall}w_1, w_2 \in U \times \Lambda$ に対して、

$$\begin{aligned} T'(w_1)w_2 &= N_h'(w_1)w_2 + [I - P_h]F'(w_1)W_2 \\ &= [I - F'(0)]_h^{-1} P_h(F'(w_1)w_2 - F'(0)P_h w_2) + (I - P_h)F'(w_1)w_2 \end{aligned}$$

を得る。有限次元部分に関しては、つまり、ベクトル $(Z_j)_{j=1,\ldots,N+1}$ については、

$$\begin{aligned} & P_h T'(w_1)w_2 \\ & \quad = [I - P'(0)]_h^{-1} P_h(F'(w_1)w_2 - F'(0)P_h w_2) \subset (\sum_{j=1}^{N} [Z_j]\phi_j, [Z_{N+1}]) \end{aligned} \tag{A.3}$$

なる区間ベクトル $[Z] := ([Z_1], \ldots, [Z_{N+1}])^t$ を求めて、

$$Z_j := |[Z_j]|, \ j = 1, \ldots, N+1$$

とおけばよい。$(A.3)$ より、

$$[I - F'(0)]_h P_h T(w_1)w_2 = P_h(F'(w_1)w_2 - F'(0)P_h w_2)$$

となり、区間ベクトル $[Z]$ を求めるために、次の集合 Z が分かればよい ：

$$\begin{aligned} Z := \Big\{ z := (\sum_{j=1}^{N} [Z_j]\phi_j, [Z_{N+1}]) \in S_h \times \mathbf{R} \ \Big| \\ < P_h[I - F'(0)]_h z, \Phi_i > = < P_h(F'(w_1)w_2 - F'(0)P_h w_2), \Phi_i >, \\ {}^{\forall}w_1, w_2 \in U \times \Lambda \ \ (i = 1, \ldots, N+1) \Big\} \end{aligned} \tag{A.4}$$

$(A.4)$ の条件式の左辺は、Y の時と同様にできる。また、右辺は、

$$\begin{aligned} < P_h(F'(w_1)w_2 - F'(0)P_h w_2), \Phi_i > &= \int_\Omega \{(\widehat{\lambda}_h - q)(I - P_{h0})u_2\}\phi_i \ dxdy \\ &\quad + \int_\Omega \{\lambda_1 u_2 + u_1 \lambda_2\}\phi_i \ dxdy \qquad (1 \le i \le N) \\ < P_h(F'(w_1)w_2 - F'(0)P_h w_2), \Phi_{N+1} > &= 2\int_\Omega u_1 u_2 \ dxdy + 2\int_\Omega \widehat{u}_h(I - P_{h0})u_2 \ dxdy \end{aligned}$$

となる。よって、集合 Z を求めるために、区間ベクトル $[r] := ([-r_i, r_i])_{i=1,\ldots,N+1}$ を定義する。また、各 r_i は、次で与えられるものとする ：

$$\begin{aligned} r_i &:= \left| \int_\Omega \{(\widehat{\lambda}_h - q)(I - P_{h0})u_2 + \lambda_1 u_2 + u_1 \lambda_2\}\phi_i \ dxdy \right| \\ r_{N+1} &:= \left| 2\int_\Omega u_1 u_2 \ dxdy + 2\int_\Omega \widehat{u}_h(I - P_{h0})u_2 \ dxdy \right| \end{aligned}$$

このとき、区間ベクトル $[Z]$ は、

$$[Z] = G^{-1}[r]$$

で求められる。また、無限次元部分に関しては、簡単な計算より、

$$\|(I-P_h)T'(w_1)w_2\|_{H_0^1\times R} \le C_1C_2h\|(\widehat{\lambda}_h+\lambda_1-q)u_2+\lambda_2(u_1+\widehat{u}_h)\|_{L^2}$$

を得るので、

$$Z_{N+2} := C_1C_2h \sup_{(u_i,\lambda_i)\in U\times\Lambda} \|(\widehat{\lambda}_h+\lambda_1-q)u_2+\lambda_2(u_1+\widehat{u}_h)\|_{L^2}$$

とおけばよい。 ∎

参考文献

[1] Alefeld,G., Gienger,A. and Potra,F., Efficient numerical validation of solutions of nonlinear systems, SIAM J. Numer 31 (1994), 252-260.

[2] Brezis,H., 関数解析, 産業図書, 1988.

[3] Greenberg,L.,Babuška,I., A continuous analogue of Strum sequences in the context of Strum-Lioville equations, SIAM J. Numer 26 (1989), 920-945.

[4] Gel'fand,I.M., and Levitan,B.M., On the determination of a differential operator from its spectral function, Amer Math Soc Transl 1 (1975), 253-304.

[5] Groetsch,C.W., 数理科学における逆問題, サイエンス社, 1996.6.

[6] Kirsch,A., An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems, Springer, 1996.

[7] Knüppel,O., PROFIL/BRAS - A fast interval liblary, Computing 53 (1994), 277-288.

[8] Nagatou,K., Yamamoto,N. and Nakao,M.T., A numerical enclosure method including a uniquness property for elliptic eigenvalue problems, Preprint Series in Mathematics, Kyushu University, 1998-8 (1998), 22pages.

[9] Nagatou,K., Yamamoto,N. and Nakao,M.T., An approach to the numerical verification of solutions for nonlinear elliptic problems with local uniqueness, Preprint Series in Mathematics, Kyushu University, 1998-14 (1998), 23pages.

[10] Nakao,M.T. and Yamamoto,N. and Nagatou,K., Numerical Verifications for eigenvalues of second-order elliptic operators, to appear in Japan J. Industrial and Applied Mathematics.

[11] 中尾充宏, 山本野人, 精度保証付き数値計算 –コンピュータによる無限への挑戦–, 日本評論社, 1998.

[12] Neher,H., Ein Einschließungsverfahren für das inverse Dilichletproblem, Dissertation,Universität Kerlsruhe, 1993.

[13] Neher,H., Enclosing Solutions of an Inverse Strum-Lioville Problem with Finite Data, Computing 53 (1994), 379-395.

[14] Neher,H., Enclosing solutions of an inverse Strum-Lioville problem for an impedence, SCAN97 アブストラクト集, 1997.

[15] 山本哲朗, 数値解析入門, サイエンス社, 1976.

[16] 『特集 逆問題のひろがり』, 数理科学, No 403, サイエンス社, 1997-1.