楕円型逆固有値問題におけるポテンシャル関数の包み込みについて

Enclosing Potential Functions of an Inverse Elliptic Eigenvalue Problem with Finite Data

渡部 善隆 † 山本 野人 ‡ 中尾 充宏 *

Yoshitaka Watanabe Nobito Yamamoto Mitsuhiro T.Nakao

† 九州大学情報基盤センター ‡ 電気通信大学情報工学科 * 九州大学大学院数理学研究院

要旨

与えられた有限個の入力データに対し，これらのデータが楕円型固有値問題の固有値となるようなポテンシャル関数を計算機を用いて再構成するアルゴリズムを提案する．ポテンシャル関数の構成手順は打ち切り誤差および丸め誤差を考慮したものであり，得られる結果は数学的に厳密なものである．

1 問題と定式化

有限個 (M 個) の順序付き実入力データ

$$\mu_1 < \mu_2 < \cdots < \mu_M$$

が与えられたとき，$\{\mu_i\}_{1\le i\le M}$ が次の楕円型固有値問題の固有値となるようなポテンシャル関数 $q(x,y)$ を構成する問題を考える:

$$\left\{ \begin{array}{rcll} -\Delta u + qu &=& \lambda u & \text{in} \quad \Omega, \\ u &=& 0 & \text{on} \quad \partial\Omega. \end{array} \right. \tag{1}$$

ここで Ω は 2 次元凸多角形領域とする．有限個のデータからポテンシャル関数を精度保証付きで再構成する手法については Neher が 1 次元問題に対する提案を行なっている [6, 7]．しかしこの手法は 1 次元 Sturm-Liouville 問題の理論的結果を援用したものであり，多次元に直接拡張することはできない．本稿では，これまで筆者らによって提案された順問題に対する解の一意性を含む大域的包み込みの手法を多次元逆問題に適用することによりポテンシャル関数の再構成を試みる．

q は Ω の重心について対称な関数 $\hat{q}$ および基底関数 $q_j \in C(\bar{\Omega})$, $1 \le j \le M$ で張られる空間:

$$S := \left\{ q \in C(\bar{\Omega}) \mid q = \hat{q} + \sum_{j=1}^{M} \alpha_j q_j,\ \alpha_j \in \boldsymbol{R} \right\}$$

内に構成することとする．$\hat{q}$ は補助ポテンシャルと呼ばれ，通常，何らかの方法で求めた近似解として決定される．S 内にポテンシャル関数を構成するということは，対応する係数ベクトル

$$\alpha := (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_M)^T \in \boldsymbol{R}^M$$

を決定するということと同値である．$\alpha \in \boldsymbol{R}^M$ に対して決まる S の元を

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

と書き表し，$q(\alpha)$ に対する固有値問題 (1) の第 i 番目の固有値を $\lambda_i(\alpha)$ とおくと，逆固有値問題は $\boldsymbol{R}^M$ 上の写像

$$f(\alpha) := (\lambda_1(\alpha) - \mu_1,\ \lambda_2(\alpha) - \mu_2,\ \ldots,\ \lambda_M(\alpha) - \mu_M)^T$$

の零点を求める問題に帰着される．ここで，有限次元非線形方程式 $f(\alpha) = 0$ の形は具体的には決定できず，無限次元楕円型固有値問題を介し陰的に定まることに注意が必要である．

2　区間 Newton 法による解の包み込み

ポテンシャル関数の包み込みを行なうため区間の概念を導入する．上端と下端を持つ M 個の区間

$$[\alpha_i] := [\underline{\alpha}_i, \overline{\alpha}_i] \qquad 1 \le i \le M$$

に対する区間ベクトルを $[\alpha] = ([\alpha_i]) \subset \boldsymbol{R}^M$ とおき，区間係数を持つ S の部分集合 $q([\alpha])$ を次で定義する:

$$\begin{aligned} q([\alpha]) &= \hat{q} + \sum_{j=1}^{M} [\alpha_j]\, q_j \\ &:= \left\{ \phi \in S \mid \phi = \hat{q} + \sum_{j=1}^{M} a_j q_j,\ a_j \in [\alpha_j] \right\}. \end{aligned}$$

また，$\mathrm{mid}([\alpha])$ を $[\alpha]$ の各要素区間の中点を取ったベクトルとする．さらに，$[\alpha]$ によって決まる $q([\alpha])$ に対する固有値問題 (1) の第 i 番目の固有値を $\lambda_i([\alpha])$，L^2- 正規化された固有関数を $u_i([\alpha])$ と表す．

非線形方程式 $f(\alpha) = 0$ の解の包み込みは Neher によって提案された区間 Newton 法 [7] を拡張したアルゴリズムにより行なう．

Interval Newton Iteration

1. 初期区間ベクトル $[\alpha]^{(0)} \subset \boldsymbol{R}^M$ を与える．$k = 0$ とする．
2. $q([\alpha]^{(k)})$ に対する順問題の固有関数 $u_i([\alpha]^{(k)})$ および $m^{(k)} := \mathrm{mid}([\alpha]^{(k)})$ に対する順問題の固有値 $\lambda_i(m^{(k)})$ を $1 \le i \le M$ に対し精度保証付きで評価する．
3. $f(m^{(k)}) = (f_i(m^{(k)}))$ を次で定める:
$$f_i(m^{(k)}) := \lambda_i(m^{(k)}) - \mu_i \qquad 1 \le i \le M.$$
4. $f([\alpha]^{(k)})$ の Jacobian に対応する区間行列 $J := \left(\dfrac{\partial f_i}{\partial \alpha_j}([\alpha]^{[k]}) \right)_{ij} \subset \boldsymbol{R}^{M \times M}$ を評価する．
5. $[\beta]^{(k)} := m^{(k)} - J^{-1} f(m^{(k)})$ を計算する．
6. $[\beta]^{(k)} \subset [\alpha]^{(k)}$ または $[\beta]^{(k)} \cap [\alpha]^{(k)} = \emptyset$ ならば停止．そうでない場合は与えられた反復回数まで $[\alpha]^{(k)} := [\alpha]^{(k)} \cap [\beta]^{(k)}$, $k := k + 1$ として 2. へ．

この時，以下の定理が成立する [6]．

Theorem 1 区間 *Newton* 法アルゴリズムの停止条件がある k で成立した時，

- $[\beta]^{(k)} \subset [\alpha]^{(k)}$ ならば $f(\alpha) = 0$ の解が存在し，$[\beta]^{(k)}$ 内で一意である．したがって，

$$q([\beta]^{(k)}) := \hat{q} + \sum_{j=1}^{M} [\beta_j]^{(k)} q_j \subset S$$

  の範囲にポテンシャル関数 $q(x, y)$ が一意に再構成される．また，入力データ $\{\mu_i\}_{1 \le i \le M}$ は $q(x, y)$ に対する順問題の固有値となる．

- $[\beta]^{(k)} \cap [\alpha]^{(k)} = \emptyset$ ならば $f(\alpha) = 0$ の解は $[\alpha]^{(k)}$ に存在しない．

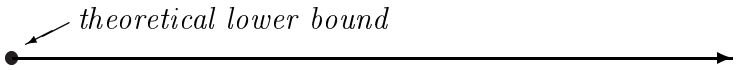
3 順問題に対する精度保証付き数値計算

前節の区間 Newton 法アルゴリズム 2. の評価のためには，区間係数をもつポテンシャル関数 $q([\alpha])$ に対する順問題:

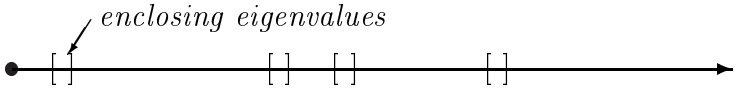
$$\begin{cases} -\Delta u + q([\alpha])u &= \lambda u \quad \text{in} \quad \Omega, \\ u &= 0 \quad \text{on} \quad \partial\Omega, \\ \displaystyle\int_\Omega u^2 \, dx &= 1 \end{cases}$$

の固有値および固有関数を精度保証付きで計算する必要がある．ここでは，順問題の固有値を順序付きで包み込む手法の概要を示す．

1. $q([\alpha])$ に定数を加えその正定値性を調べることにより，固有値の (粗い) 下限を得る [2]．



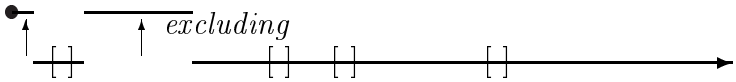
2. 順問題を $H_0^1(\Omega)$ における不動点問題に定式化し，Banach の不動点定理を満足する候補者集合を計算機内で自動的に構成する手法を適用することにより，局所一意性を持つ固有値の区間を求める [4]．



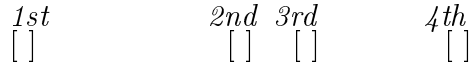
3. 固定した区間 Λ に対し $L(\lambda) := -\Delta u + (q - \lambda)u$ とおき，線形方程式:

$$\begin{cases} L(\lambda) &= 0 \quad \text{in} \quad \Omega, \\ u &= 0 \quad \text{on} \quad \partial\Omega \end{cases}$$

   が任意の $\lambda \in \Lambda$ で一意解を持つことを精度保証付きで検証する．この検証が成功すれば，Λ は固有値を含まないことが確認できる [2]．



4. 3. の手続きを繰り返すことによって固有値を含まない区間を排除し，M 個の固有値を順序付きで包み込む．



4 Jacobian の計算

区間 Newton 反復アルゴリズム 4. における Jacobian の存在を保証する条件として，以下を示すことができる．

Theorem 2 $\forall\alpha \in [\alpha]$ に対し $q(\alpha) \in S$ を与えた時の順問題の i 番目の固有値， L^2- 正規化された固有関数を $[\lambda_i, u_i] \in \boldsymbol{R} \times H_0^1(\Omega)$， $f_i(\alpha) := \lambda_i(\alpha) - \mu_i$ とするとき，線形方程式:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} -\Delta v + (q(\alpha) - \lambda_i)v &=& (\mu - q_j)u_i, \\ \displaystyle\int_\Omega u_i\, v\, dx &=& 0 \end{array} \right. \tag{2}$$

をみたす $[\mu, v] \in \boldsymbol{R} \times H_0^1(\Omega)$ が一意に存在するならば，

$$\frac{\partial f_i}{\partial \alpha_j}(\alpha) = \int_\Omega u_i^2\, q_j\, dx.$$

Fredholm の択一定理より， (2) をみたす $[\mu, v] \in \boldsymbol{R} \times H_0^1(\Omega)$ が一意に存在するという条件は，対応する同次問題:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} -\Delta v + (q(\alpha) - \lambda_i)v &=& \mu u_i, \\ \displaystyle\int_\Omega u_i v\, dx &=& 0, \end{array} \right.$$

が零解 $[\mu, v] = [0, 0]$ しか持たないという条件と同値である．したがって，零解のまわりの候補者集合における縮小性を検証することで， Jacobian の存在条件を確認することができる [5] ．

5 数値例

$\Omega = (0, \pi) \times (0, \pi)$ とする．ポテンシャル関数を構成する空間 S，固有関数を包み込む空間 X および X の近似空間 X_N を次のように設定する:

$$\begin{aligned} S &:= \left\{ \sum_{i=0}^{K} \sum_{j=0}^{L} \alpha_{ij} \cos(2ix) \cos(2jy) \right\}, \\ X &:= \left\{ \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} A_{mn} \sin(mx) \sin(ny)\ ;\ \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} (m^2 + n^2)^2 A_{mn}^2 < \infty \right\}, \\ X_N &:= \left\{ \sum_{m=1}^{M} \sum_{n=1}^{N} \hat{A}_{mn} \sin(mx) \sin(ny) \right\} \subset X. \end{aligned}$$

また， X から X_N への H_0^1-projection P_N を次で定義する:

$$\int_\Omega \nabla(u - P_N u) \nabla \phi_N\, dx = 0 \qquad \forall \phi_N \in X_N.$$

このとき， projection の近似による a priori 誤差評価

$$\|\nabla(u - P_N u)\|_{L^2(\Omega)} \le C(N) \|\Delta u\|_{L^2(\Omega)} \qquad \forall u \in X$$

が成り立ち， $C(N)$ は数値的に評価できる定数として決定できる．

数値計算は Fujitsu GP7000F モデル 900(SPARC64-GP: 300MHz) 上で Fujitsu Fortran Compiler Driver Version 4.0.2 によって行なった．丸め誤差を考慮するため，区間演算モジュール `INTLIB_90` [1] を利用した．区間 Newton 反復における連立 1 次方程式の解法は Brouwer の不動点定理に基づく Rump の手法 [5] を適用した．

各数値例の α_i は

$$q(x, y) = \alpha_1 + \alpha_2 \cos(2x) + \alpha_3 \cos(2y) + \alpha_4 \cos(2x) \cos(2y)$$

の係数に対応する．

●数値例 1

$q(x,y)=\cos(2x)$ の再構成． $M=N=10,\ K=L=1.$

○入力データ:

$\nu_1 = 1.4706543549338$

$\nu_2 = 4.4706543549338$

$\nu_3 = 4.9791892157514$

$\nu_4 = 7.9791892157514$

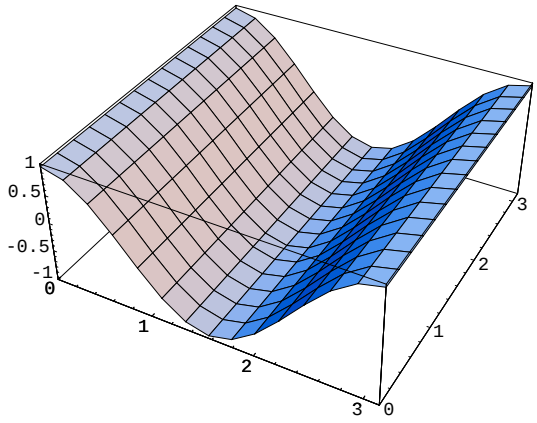
○包み込みに成功した区間:

$\alpha_1 = \quad \pm 0.2318158745 \times 10^{-9}$

$\alpha_2 = \ 1 \quad \pm 0.1249671717 \times 10^{-8}$

$\alpha_3 = \quad \pm 0.9019854253 \times 10^{-9}$

$\alpha_4 = \quad \pm 0.4868747948 \times 10^{-9}$



$q(x,y)$ の形状

●数値例 2

$q(x,y)=-2+\cos(2x)-\cos(2x)\cos(2y)$ の再構成． $M=N=10,\ K=L=1.$

○入力データ:

$\nu_1 = \ -0.8270142949509$

$\nu_2 = \ \ 2.4615199904499$

$\nu_3 = \ \ 2.9500526665779$

$\nu_4 = \ \ 5.9765623708221$

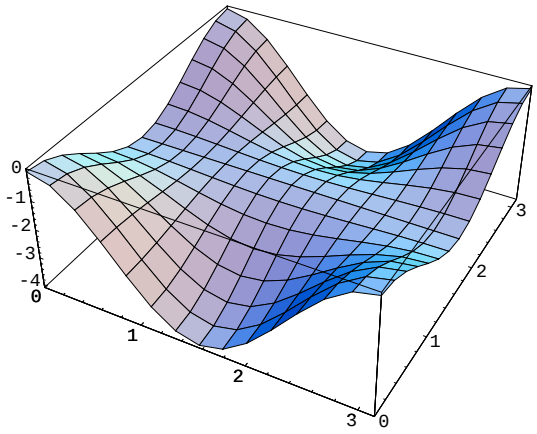
○包み込みに成功した区間:

$\alpha_1 = \ -2 \quad \pm 0.3089173380 \times 10^{-8}$

$\alpha_2 = \ \ 1 \quad \pm 0.1490897049 \times 10^{-7}$

$\alpha_3 = \quad \pm 0.2416657724 \times 10^{-7}$

$\alpha_4 = \ -1 \quad \pm 0.1037820952 \times 10^{-6}$



$q(x,y)$ の形状

●数値例 3

$q(x,y)=10+5\cos(2x)+3\cos(2y)+3\cos(2x)\cos(2y)$ の再構成． $M=N=15,\ K=L=1.$

○入力データ:

$\nu_1 = 8.9232011202383$

$\nu_2 = 11.9106924233670$

$\nu_3 = 13.6562169567569$

$\nu_4 = 16.7797156194290$

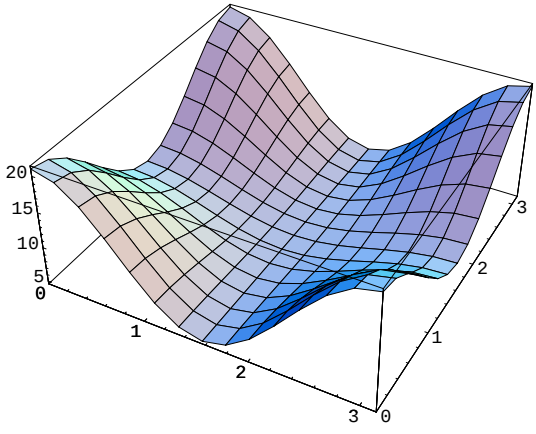
○包み込みに成功した区間:

$\alpha_1 = \ 10 \quad \pm 0.4072392255 \times 10^{-8}$

$\alpha_2 = \ \ 5 \quad \pm 0.5651032512 \times 10^{-8}$

$\alpha_3 = \ \ 3 \quad \pm 0.4740982608 \times 10^{-8}$

$\alpha_4 = \ \ 3 \quad \pm 0.6225533666 \times 10^{-8}$



$q(x,y)$ の形状

●数値例 4

$q(x,y)=\cos(2x)$ の再構成． $N_1=N_2=10$, $K=L=1$. 入力データを区間

$$\begin{aligned}\mu_1 &= 1.470654354933839 + [-\delta,\delta]\\ \mu_2 &= 4.470654354933839 + [-\delta,\delta]\\ \mu_3 &= 4.979189215751357 + [-\delta,\delta]\\ \mu_4 &= 7.979189215751357 + [-\delta,\delta]\end{aligned}$$

として与え，区間幅 δ を変化させた．以下の表は包み込みに成功した区間の最大幅を表示したものである．

δ	$\max_i\{\|\alpha_i\|\}$	δ	$\max_i\{\|\alpha_i\|\}$	δ	$\max_i\{\|\alpha_i\|\}$
10^{-10}	0.665×10^{-8}	10^{-6}	0.156×10^{-4}	10^{-2}	0.159
10^{-9}	0.207×10^{-7}	10^{-5}	0.156×10^{-3}	10^{-1}	failed
10^{-8}	0.161×10^{-6}	10^{-4}	0.156×10^{-2}		
10^{-7}	0.156×10^{-5}	10^{-3}	0.156×10^{-1}		

参考文献

[1] Kearfott, R.B. and Kreinovich, V(eds.), *Applications of Interval Computations*, Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 1996. (`http://interval.usl.edu/kearfott.html`)

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

[3] Nagatou, K. and Nakao, M.T., An enclosure method of eigenvalues for the elliptic operator linearlized at an exact solution of nonlinear problems, to appear in a special issue of Linear Algebra and its Applications on *Linear Algebra in Self-Validating Methods*.

[4] Nakao, M.T., Yamamoto, N. and Nagatou, K., Numerical verifications for eigenvalues of second-order elliptic operators, *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics* **16**, (1999), 307–320.

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

[6] Neher, M., *Ein Einschließungsverfahren für das Inverse Dirichletproblem*, Dissertation, Universität Karlsruhe, 1993

[7] Neher, M., Enclosing solutions of an inverse Strum-Lioville problem with finite data, *Computing* **53** (1994), 379–395.