1次元シュレディンガー作用素の固有値問題に対する力学系的アプローチと計算機援用証明

氏名　関坂　歩幹*

所属 九州大学数理学府修士2年

この度は，第7回城崎新人セミナーで発表させて頂きありがとうございました．大変有意義な時間を過ごすことができました．運営委員の皆様，参加者の方々にお礼申し上げます．

1　はじめに

近年，力学系の研究や現象の数理モデルにおける問題に対して，力学系理論と精度保証付き数値計算を組み合わせた解析が盛んである．力学系理論とは，微分方程式や差分方程式により数学的に表現された現象の時間発展を解析する，あるいはその手法を研究する分野である．また，精度保証付き数値計算とは計算機による数学的に厳密な誤差評価を伴う数値計算のことである．

シリコンなどの綺麗な結晶構造を持つ電子のポテンシャル $U(x)$ は，周期的な関数とみなせる．よってこのようなモデルの1次元シュレディンガー方程式は

$$-u_{xx} + U(x) = Eu \tag{1.1}$$

と表せる．ポテンシャルが周期的なので，電子が取り得るエネルギー準位は連続的に分布している部分とそうでない部分とに分かれてバンド構造を持つ．ここで不純物を混ぜることにより，x でのポテンシャルに変化を与えると，本来エネルギー準位が存在しえない領域においてエネルギー準位が現れることがある．半導体理論ではこのようなエネルギー準位を電子が経由して違うエネルギー準位に移ることを利用する．

本稿ではこの現象を数学的にモデル化した $L^2(\mathbb{R})$ 空間上の自己共役作用素

$$Lu := -u_{xx} + A\cos(2\pi x)u + Ce^{-x^2}u \tag{1.2}$$

の固有値問題

$$Lu = \lambda u \tag{1.3}$$

に対して計算機援用による力学系理論を用いた固有値の存在の証明を行う．ここで，$A, C \in \mathbb{R}$ はパラメータである．

2　基本的な性質

$(H, <\cdot,\cdot>)$ を Hilbert space とし，$D(L)$ を H 上の線型作用素 A の定義域とする．このとき，

$$\rho(A) := \{\lambda \in \mathbb{C} |\ \text{定義域が稠密で連続な}\ (A-\lambda)^{-1}\text{が存在する．}\} \tag{2.1}$$

を T のレゾルベント集合といい，

$$\sigma(A) := \mathbb{C} \setminus \rho(A) \tag{2.2}$$

* sekisaka@math.sci.hokudai.ac.jp

を L のスペクトルという．$\sigma(L)$ は次の互いに素な 2 つの部分集合に分割される：

$$\sigma_p(A) := \{\lambda \in \mathbb{C} | (L-\lambda) \text{ が逆作用素を持たない．}\} \tag{2.3}$$

$$\sigma_{ess}(L) := \sigma(L) \setminus \sigma_p(L) \tag{2.4}$$

$\sigma_p(A)$，$\sigma_{ess}(A)$ をそれぞれ点スペクトル，本質的スペクトルという．$\lambda \in \sigma_p(A)$ であるための必要十分条件は，

$$Au = \lambda u \tag{2.5}$$

を満たす恒等的に 0 でない $u \in H$ が存在する事である．$\lambda \in \sigma_p(A)$ を L の固有値といい，対応する $u \neq 0$ を固有関数という．

自己共役作用素 L のスペクトル $\sigma(L)$ は実軸上にある．すなわち $\sigma(L) \subset \mathbb{R}$.

コンパクトな摂動項 $Ce^{-x^2}u$ のない作用素

$$L_0 := -u_{xx} + A\cos(2\pi x)u \tag{2.6}$$

については $\sigma_p(L_0) = \emptyset$ である．また，$\sigma_{ess}(L_0) = \sigma_{ess}(L)$ である．

3 幾何学的構造

我々は本来エネルギー準位の無い領域に，コンパクトな摂動を加えたときに現れる固有値の存在に興味がある．すなわち，$\rho(L_0)$ 内に現れる $\sigma_p(L)$ を探す．特に，$\sigma(L_0$，$\rho(L_0)$ が持つ幾何学的な性質を見るために，スペクトル問題

$$L_0 := -u_{xx} + A\cos(2\pi x)u = \lambda u \tag{3.1}$$

を，λ をパラメータと考えて，

$$-u_{xx} + (A\cos(2\pi x) - \lambda)u = 0 \tag{3.2}$$

と変形して置く．これは線形常微分方程式であるので，次のように 1 階線形常微分方程式系に書き直すことができる．

$$\frac{d}{dx}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = P(x;\lambda)\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \tag{3.3}$$

ただし，$v = \frac{du}{dx}$ とし，$P(x;\lambda)$ は 2×2 行列で，

$$P(x;\lambda) := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ (A\cos(2\pi x) - \lambda) & 0 \end{pmatrix} \tag{3.4}$$

により定義される．スペクトル問題は常微分方程式 (3.2) の解の漸近挙動と関係がある．式 (3.2) の基本解行列を $\Phi(x;\lambda)$ と書く．これは $\Phi(0;\lambda) = I$，$\frac{d\Phi(x;\lambda)}{dx} = P(x;\lambda)\Phi(x;\lambda)$ を満たす．今，$P(x+1;\lambda) = P(x;\lambda)$ であるから，式 (3.2) の漸近挙動は $\Phi(1;\lambda)$ の固有値 $\nu(\lambda)$ によって理解することができる．$\det\Phi(x;\lambda) = 1$ であるので，$\Phi(1;\lambda)$ の固有値 $\nu_1(\lambda)$，$\nu_2(\lambda)$ は $\nu_1(\lambda)\nu_2(\lambda) = 1$ を満たす．ゆえに，$\nu_1(\lambda)$，$\nu_2(\lambda)$ は：

1. 複素平面において単位円上にあるか,
2. $\nu_1(\lambda)$，$\nu_2(\lambda)$ は共に実で，$\nu_1(\lambda) > 0 > \nu_2(\lambda)$ あるいは $\nu_1(\lambda) < 0 < \nu_2(\lambda)$ であるか,
3. $|\nu_1(\lambda)| = |\nu_2(\lambda)| = 1$

のいずれかである．このとき $\Phi(1;\lambda)$ の固有値と $\Phi(x;\lambda)$ は Floquet 理論より次のように関連付けられる．1. の場合，$\Phi(x;\lambda)$ は x に関して周期的である．2. の場合，$\Phi(x;\lambda)$ は $x \to \infty$ で 0 に収束する部分空間と，$x \to -\infty$ で 0 に収束する部分空間を持つ．すなわち，$|\nu_1(\lambda)| > 0$ に属する一般化固有空間 $\mathbb{E}^u(\lambda)$ を初期値とする (3.2) の解は，$x \to -\infty$ で 0 に収束し，$|\nu_2(\lambda)| < 0$ に属する一般化固有空間 $\mathbb{E}^s(\lambda)$ を初期値とする (3.2) の解は，$x \to \infty$ で 0 に収束する．

$\sigma(L_0$，$\rho(L_0)$ と (3.2) の漸近挙動の関係を示す定理として次がある．

定理 3.1. ([1]，[2]，[3])

$\Phi(1:\lambda)$ を上で定義したものとする．このとき，

$\rho(L_0)=\{\lambda\in\mathbb{R}|\Phi(1;\lambda)$ の固有値が 2．の場合 $\}$

$\sigma_{ess}(L_0)=\{\lambda\in\mathbb{R}|\Phi(1;\lambda)$ の固有値が 1.，3．の場合 $\}$

が成り立つ．

この定理を用いることで，$\rho(L_0)$，$\sigma_{ess}(L_0)$ を求めることができる．これらは $\mathbb{R}$ 上で下図のようにギャップ構造を持って分布しており，コンパクトな摂動を加えることで，$\rho(L_0)$ 内に固有値が現れることがある．

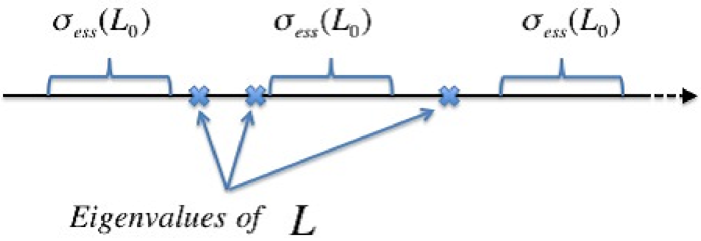

図 1　spectral gap

次に作用素 L の固有値問題 (1.3) を考える．この場合も L_0 のスペクトル問題と同様に次のように常微分方程式に書き直すことができる．

$$\frac{d}{dx}\begin{pmatrix}u\\v\end{pmatrix}=Q(x;\lambda)\begin{pmatrix}u\\v\end{pmatrix} \tag{3.5}$$

ただし，

$$Q(x;\lambda):=\begin{pmatrix}0 & 1\\(A\cos(2\pi x)+Ce^{-x^2}-\lambda) & 0\end{pmatrix} \tag{3.6}$$

により定義される．

我々は今，$\rho(L_0)$，$\sigma_{ess}(L_0)$ の情報を持っており，$\rho(L_0)$ 内に現れる L の固有値に興味がある．そこで $\rho(L_0$ のギャップを一つ固定しておき，それを (g_-,g_+) と表す．$\lim_{|x|\to\infty}P(x;\lambda)=Q(x;\lambda)$ より，式 (3.5) の x が無限遠での挙動は式 (3.3) により記述される，すなわち，式 (3.3) の基本解 $\Psi(x;\lambda)$ は無限遠において $\Phi(x;\lambda)$ に一致する．特に，$\lambda\in(g_-,g_+)$ に対しては，$\Phi(1;\lambda)$ に対して安定な部分空間と不安定な部分空間が存在することから，式 (3.3) は $x\to\infty$ で 0 に収束する初期値の空間と，$x\to-\infty$ で 0 に収束する初期値の空間が存在する．$\lambda\in(g_-,g_+)$ が L の固有値であることと，これらの初期値の空間が一致することは同値である．すなわち，

$$\lambda\in(g_-,g_+)\text{ が }L\text{ の固有値}\Leftrightarrow\exists u(x;\lambda)\text{ s.t. }\lim_{x\to\pm\infty}u(x;\lambda)=0\ ,\ u(x,\lambda)\neq 0. \tag{3.7}$$

このことから，(3.3) の解

$$\phi_\lambda:\mathbb{R}^2\times\mathbb{R}\to\mathbb{R}^2\times\mathbb{R},\quad ((u,v)\in\mathbb{R}^2,x\in\mathbb{R}) \tag{3.8}$$

に対して，

$$\phi_\lambda(x):\mathbb{R}^2\times\{x\}\to\mathbb{R}^2\times\{x+1\}\ ,x\in\mathbb{Z} \tag{3.9}$$

によって (u,v)-平面上の非自励的離散力学系を構成したとき，λ が固有値であるためには，x が負の無限遠における不安定部分空間と x が正の無限遠で安定部分空間を結ぶ connecting orbit が存在しなければならない．$\phi_\lambda(x)\to\Phi(1;\lambda)$ $(|x|\to\infty)$ であるので，特に $\phi_\lambda(\infty)$ の原点の安定，不安定部分空間をそれぞれ $\mathbb{E}^s_\infty$，$\mathbb{E}^u_\infty$，$\phi_\lambda(-\infty)$ の原点の安定，不安定部分空間をそれぞれ $\mathbb{E}^s_{-\infty}$，$\mathbb{E}^u_{-\infty}$ と表す．

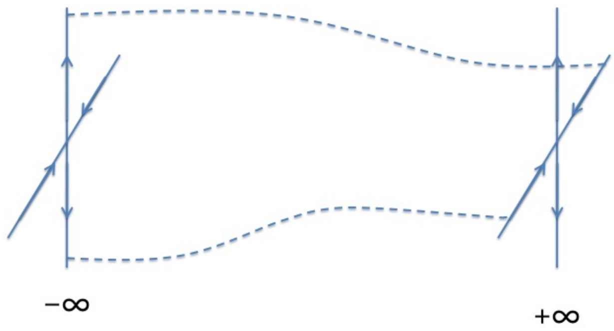

図 2　λ が固有値であるときの幾何学的構造

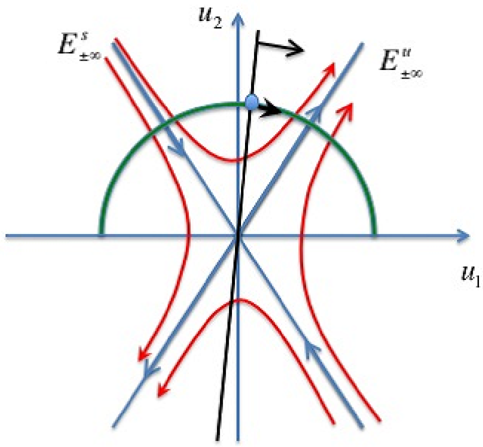

図 3　点と原点を結ぶ直線の振る舞い

ここで，図 3 のように $\phi_\lambda(\infty)$ の反復によって動く点と，その点を通る原点からの直線を考えれば，単位時間写像の反復によって直線は不安定固有空間に漸近する．ゆえに，単位時間写像 $\phi_\lambda(x)$ が誘導する 1 次元射影空間 $\mathbb{RP}^1$ 上の写像 ψ^x_λ は，x が無限遠において $\mathbb{E}^s_{\pm\infty}$，$\mathbb{E}^u_{\pm\infty}$ を不動点として持つ．

以上のことから，L の固有値問題は，常微分方程式 (3.3) を，$\mathbb{RP}^1$ の座標近傍として原点から出る半直線と u 軸がなす角 θ によって変換した常微分方程式

$$\dot{\theta} = (A\cos(2\pi x) + Ce^{-x^2} - \lambda + 1)\cos^2\theta - 1 \tag{3.10}$$

から得られる非自励的離散力学系

$$\psi^x_\lambda : \mathbb{RP}^1 \to \mathbb{RP}^1 \tag{3.11}$$

の安定な不動点と安定な不動点を結ぶヘテロクリニックの存在問題に帰着される．

4　主結果

定理 4.1. $\lambda \in (g_-, g_+)$ に対し，$\theta(x;\lambda)$ を (3.10) の解で $x = -\infty$ で $\theta_s = [\mathbb{E}^u_{-\infty}]$ を出発するものとする．$\lambda_1, \lambda_2 \in (g_-, g_+)$，$\lambda_1 < \lambda_2$ に対し，$\lim_{x\to\infty}\theta(x;\lambda_1) < \theta_u = [\mathbb{E}^s_\infty] < \lim_{x\to\infty}\theta(x;\lambda_2)$ ならば，$[\lambda_1, \lambda_2]$ に L の固有値が存在する．$\lim_{x\to\infty}\theta(x;\lambda_1) > \theta_u = [\mathbb{E}^s_\infty] > \lim_{x\to\infty}\theta(x;\lambda_2)$ に対しても同様．

証明はこれまでの議論と中間値の定理より明らか．

5　計算機援用証明

以上の結果を用いて，計算機によって厳密に作用素 L の固有値を計算することができる．この手法については講演にて述べたのでここでは省略する．パラメータ $A=5$ に対して，下図で赤く塗られている領域に必ず L の固有値が存在する．

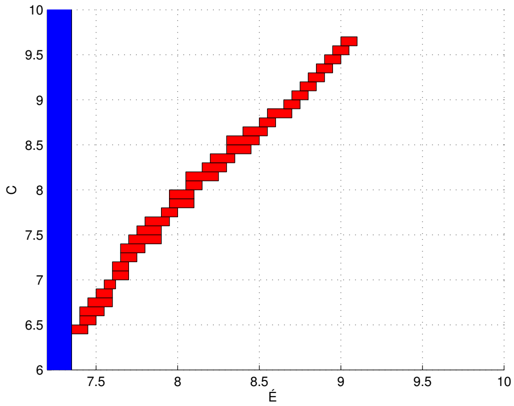

図 4　固有値の分布

6　まとめ

本手法は作用素の固有値，特にギャップの中に現れる固有値にのみ焦点を当てている．そのため，固有値であるときの幾何学的な構造のみを必要とし，$\pi_1(RP)^1=\mathbb{Z}$ であることを利用することで，固有値の存在を $\mathbb{RP}^1$ 上の回転数という指数によって判断しており，他の情報はほとんど捨ててしまっている．しかし，それゆえに計算機によって固有値を計算する場合には従来の手法に比べ計算量が少なく，従来の手法にあらわれるいくつかの問題もこの手法では起こらない．今後の課題としては，系がシステムになった場合，すなわち q_i，s_i をそれぞれ周期関数および $|x|\to\infty$ で 0 となるような関数としたとき，

$$L\begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u_{1xx}+q_1(x)u_1+s_1(x)u_1 \\ \vdots \\ -u_{nxx}+q_n(x)u_n+s_n(x)u_n \end{pmatrix} \tag{6.1}$$

のように定義される作用素の固有値問題を考えることができる．この場合，単純に回転数を計るということはできない．このような問題に対しては π_2 を見ることや，Maslov 指数を見るということで問題が回避できることが知られている．このような手法と精度保証付き数値計算を上手く組合わせることができると予想している．

参考文献

[1] K.J.Palmer, *Exponential dichotomies and transversal homoclinic points*, J. Diff. Eqns, **55** (1984), 225-256.

[2] K.J.Palmer, *Exponential dichotomies and Fredholm operators*, Proc. Amer. Math. Soc, **104** (1988), 149-156.

[3] 小谷眞一・俣野博, 微分方程式と固有関数展開, 岩波書店,（2006).