

再生核 Hilbert 空間上の Tikhonov 正則化法と Laplace 実逆変換の数値計算への応用

藤原宏志 東森信就
京都大学大学院 情報学研究科

概要

本論文では Laplace 変換の数値実逆変換について論じる。提案する手法は、再生核 Hilbert 空間において Tikhonov 正則化法を適用し、数値計算においては多倍長計算を適用する。多倍長計算をもちいることにより、正則化法の数値計算が数値的に不安定となる場合にも丸め誤差の影響を受けない数値計算が実現され、高精度な数値実逆変換が実現される。さらに、典型的な例および応用で現れる問題に適用することで、その有効性を示す。

1 緒言

本研究は、Laplace 変換

$$F(p) = \mathcal{L} f(p) = \int_0^{\infty} e^{-pt} f(t) dt$$

の実逆変換の数値的実現を目的とする。再生核 Hilbert 空間での Tikhonov 正則化をもちいることで特異性を有する原函数を近似し、多倍長計算をもちいることでその数値的取り扱いを実現する。また、幾つかの問題への適用例を示し、その有効性を示す。

実逆変換とは、正の実軸上で与えられた像函数 $F(p)$, $p > 0$ に対して原函数 $f = \mathcal{L}^{-1} F$ を求める問題である。実逆変換は理工学、情報学、数理経済学など広範な分野にわたって現れる [2, 4, 13, 22]。一般には Laplace 変換表を索いて原函数を求めるが、これは順変換が解析的に求まる場合に限られるため、数値計算による実逆変換も必要とされる。これまでも幾つかの数値計算手法が提案されているが [3, 5, 6]、実逆変換の Hadamard の意味での非適切性 (ill-posedness) に起因して、その直接離散化が数値的に不安定 (ill-conditioned) となることから、決定的な解決には至っていない。

これに対し、齋藤らは、再生核 Hilbert 空間上での Tikhonov 正則化法をもちいる実逆変換を提案した [17]。そこで現れる Fredholm の第二種積分方程式は適当な位相のもとで適切 (well-posed) であり、したがってその離散化スキームは解が一意に存在し、安定性かつ収束性を有することが期待される。しかし、離散化スキームの理論的な安定性と、その電子計算機上での数値計算過程の安定性、すなわち計算誤差の影響を受けずに進行することは、必ずしも同値ではない。Tikhonov 正則化法においては、解の不連続性や特異性を捉えるためには正則化パラメータを小さくする必要があるが、その場合、離散化スキームが理論的には安定であるにも関わらず、その数値計算過程は不安定となることがある [8]。

正則化方程式は一般になめらかさを有することを考慮すると、その数値計算には多倍長計算による高精度数値計算が有効となる。これにもとづき、多倍長計算を適用して正則化パラメータを充分小さくすることで、原函数が特異性を含む場合においても高精度な数値実逆変換が可能であることが示された [9].

再生核 Hilbert 空間による近似においては、函数空間の設定が重要である。齋藤らは、再生核 Hilbert 空間の元 f に

$$\int_0^{\infty} |f'(t)|^2 \frac{e^t}{t} dt < \infty,$$

すなわち、導函数が指数函数程度で減衰することを課した [18, 17]. しかし実逆変換の応用の立場からは、この函数空間による近似は充分ではない。一方、再生核 Hilbert 空間の重み函数を適当に選ぶことで、より広い函数空間での実逆変換が提案され [21], 典型的な問題に対する数値計算例が示されている [10].

本論文では、再生核 Hilbert 空間上での Tikhonov 正則化法について次節で述べ、Laplace 実逆変換への適用を第 3 節で述べる。その数値的実現について第 4 節で述べ、工学などで現れる問題に対する数値計算例をとおしてこれらの手法の有効性を示す。

2 再生核 Hilbert 空間上の Tikhonov 正則化法

X, Y を Hilbert 空間, $L: X \rightarrow Y$ を単射な有界線型作用素とする。 $F \in Y$ に対して線型方程式 $Lf = F$ を考える。このとき、任意の正数 α に対し、Tikhonov 汎函数 $J_\alpha(f) = \alpha \|f\|_X^2 + \|Lf - F\|_Y^2$ の最小化元 $f_\alpha \in X$ がただひとつ存在し、 $(\alpha I + L^*L)f_\alpha = L^*F$ の解として得られる [14]. さらに X が再生核空間の場合は、次が成立する。

定理 1. X, Y を Hilbert 空間とし、 $L: X \rightarrow Y$ を単射な有界線型作用素とする。さらに X は再生核 $K(p, q)$ を有するとする。このとき、 $Lf = F$ に対し、正則化パラメータ α のもとでの Tikhonov 正則化解 f_α は、

$$f_\alpha(q) = (F, LK_{\alpha,q})_Y$$

と表される。ここで、 $K_{\alpha,q}(p) = K_\alpha(p, q)$ は

$$\alpha K_\alpha(p, q) + (LK_\alpha(\cdot, q), LK(\cdot, p))_Y = K(p, q)$$

のただひとつの解である。

証明. $K_q(p) = K(p, q)$ とする。再生性により、

$$\begin{aligned} f_\alpha(q) &= (f_\alpha, K_q)_X \\ &= ((\alpha I + L^*L)^{-1}L^*F, K_q)_X \\ &= (F, L(\alpha I + L^*L)^{-1}K_q)_Y \end{aligned}$$

ここで $K_{\alpha,q} = K_{\alpha}(\cdot, q) := (\alpha I + L^*L)^{-1}K_q$ とすると, $f_{\alpha}(q) = (F, LK_{\alpha,q})_Y$ であり, $K_{\alpha,q}$ は $(\alpha I + L^*L)K_{\alpha,q} = K_q$ を満たす. さらに,

$$\begin{aligned} K(p, q) &= (K_q, K_p)_X \\ &= ((\alpha I + L^*L)K_{\alpha,q}, K_p)_X \\ &= \alpha(K_{\alpha,q}, K_p)_X + (LK_{\alpha,q}, LK_p)_Y \\ &= \alpha K_{\alpha,q}(p) + (LK_{\alpha,q}, LK_p)_Y \\ &= \alpha K_{\alpha}(p, q) + (LK_{\alpha}(\cdot, q), LK(\cdot, p))_Y \end{aligned}$$

を得る. □

3 Tikhonov 正則化による Laplace 実逆変換

$w(t)$ を $t > 0$ で定義される正値関数とする. $t \geq 0$ で定義されて絶対連続で, $f(0) = 0$ かつ

$$\|f\|_{H_w}^2 := \int_0^{\infty} |f'(t)|^2 w(t) dt < \infty$$

を満たす関数 f からなる H_w を考える. この H_w は

$$K(s, t) = \int_0^{\min(s,t)} w(\xi)^{-1} d\xi$$

を再生核とする再生核 Hilbert 空間である. また, $p > 0$ での正値関数 $u(p)$ に対して,

$$L_u^2 := L^2((0, \infty), u(p)dp) = \left\{ f; \int_0^{\infty} |f(p)|^2 u(p) dp < \infty \right\}$$

とする. このとき, $f \in H_w$ に対して

$$Lf(p) := p \mathcal{L} f(p) = p \int_0^{\infty} e^{-pt} f(t) dt$$

とすると, 次が成立する.

定理 2 ([17, 11]). 正値関数 $w(t), u(p)$ が

$$\int_0^{\infty} e^{-2pt} w(t)^{-1} u(p) dp dt < +\infty \quad (3.1)$$

を満たすとする. このとき, 任意の正数 $\alpha, t > 0$ に対し, 積分方程式

$$\alpha H_{\alpha}(p, t) + \int_0^{\infty} H_{\alpha}(q, t) \mathcal{L} \left[\frac{1}{w} \right] (p+q)u(q) dq = LK_t(p) \quad (3.2)$$

の解 $H_{\alpha}(\cdot, t) \in L_u^2$ がただひとつ存在する. さらに $Lf = g$ に対する Tikhonov 正則化解 f_{α} は

$$f_{\alpha}(t) = (g, H_{\alpha}(\cdot, t))_{L_u^2} \quad (3.3)$$

で与えられる.

証明. $f \in H_w$ に対して,

$$Lf(p) = p \int_0^\infty e^{-pt} f(t) dt = \int_0^\infty e^{-pt} f'(t) dt$$

であるから,

$$|Lf(p)| \leq \int_0^\infty |e^{-pt} w(t)^{-1/2}| |f'(t) w(t)^{1/2}| dt \leq \left(\int_0^\infty e^{-2pt} w(t)^{-1} dt \right)^{1/2} \|f\|_w.$$

よって

$$\int_0^\infty |Lf(p)|^2 u(p) dp \leq \left(\int_0^\infty \int_0^\infty e^{-2pt} w(t)^{-1} u(p) dt dp \right) \|f\|_w^2.$$

したがって (3.1) のもとで, $L : H_w \rightarrow L_u^2$ は有界である [21]. 定理 1 より, Tikhonov 正則化解 $f_\alpha \in H_w$ は次で与えられる.

$$f_\alpha(t) = (g, LK_{\alpha,t})_{L_u^2}.$$

ここで, $K_{\alpha,t}(s) = K_\alpha(s, t)$ は

$$\alpha K_\alpha(s, t) + (LK_{\alpha,t}, LK_s)_{L_u^2} = K(s, t)$$

の解である. L を s について作用させて $H_\alpha := LK_\alpha$ とすることにより,

$$\alpha H_\alpha(p, t) + \int_0^\infty H_\alpha(q, t) \left[p \int_0^\infty e^{-ps} LK_s(q) ds \right] u(q) dq = LK(p, t).$$

さらに,

$$p \int_0^\infty e^{-ps} LK_s(q) ds = \mathcal{L} \left[\frac{1}{w} \right] (p+q)$$

より, (3.2) を得る. □

定理 3 ([17, 10]). $F \in L_u^2$ を H_w の元の Laplace 変換像とする. 各 $t > 0$ に対して次が成立する.

$$\mathcal{L}^{-1} F(t) = \lim_{\alpha \rightarrow +0} \int_0^\infty p F(p) H_\alpha(p, t) u(p) dp.$$

ここで, H_α は (3.2) のただひとつの解である.

応用においては, $f^\dagger \notin H_w$ に対しても近似函数を構成することが重要である. 定理 2 によると, $g^\dagger(p) := p \mathcal{L} f^\dagger(p) \in L_u^2$ であるならば, g^\dagger に対する正則化解 $f_\alpha^\dagger = L_\alpha^{-1} g^\dagger \in H_w$ がただひとつ存在するが, $f_\alpha^\dagger \in H_w$ と $f_\alpha \notin H_w$ の意味付けには注意を要する.

4 Laplace 実逆変換の数値的実現

再生核 Hilbert 空間による近似理論においては、その函数空間の設定が重要となる。以下で示す数値計算例においては、(3.1) を満たす w, u として

$$w(t) = \frac{1}{(t+1)^2}, \quad u(p) = \exp\left(-p - \frac{1}{p}\right)$$

をもちいる [11].

また、 $f \in H_w$ には $f(0) = 0$ を課しており、その近似のひとつとして軟化子の利用が考えられる。ここでは、

$$\rho(t) = \begin{cases} t, & 0 \leq t < 1; \\ 2-t & 1 \leq t < 2; \\ 0 & 2 \leq t \end{cases}$$

に対して

$$\rho_\epsilon(x) := \frac{1}{\epsilon} \rho\left(\frac{x}{\epsilon}\right), \quad x \geq 0$$

をもちいる。このとき正則化解に対する近似として

$$f_{\alpha, \epsilon}(t) = \mathcal{L}_{\alpha, \epsilon}^{-1} F(t) = \int_0^\infty p F(p) \mathcal{L} \rho_\epsilon(p) H_\alpha(p, t) u(p) dp. \quad (4.1)$$

を考えると、 f_α が $t = t_0$ で連続ならば

$$\lim_{\epsilon \rightarrow +0} f_{\alpha, \epsilon}(t_0) = f_\alpha(t_0)$$

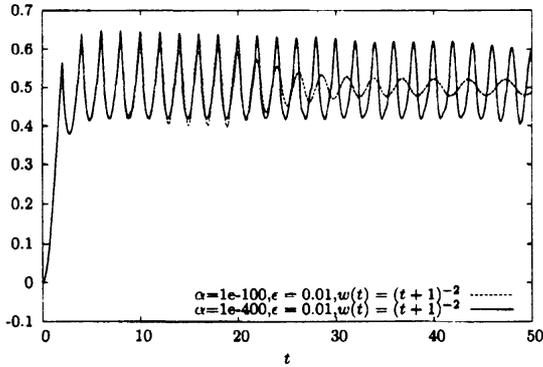
が成立する [10].

一般に正則化方程式は適当な位相のもとで適切性を有し、その離散化スキームは安定性かつ収束性を有することが多い。しかしながら、実際の数値計算過程においては計算誤差が増大して数値計算が破綻することがある。そのため、信頼できる数値計算のためには、高精度離散化によって離散化誤差を充分小さくし、多倍長計算によって丸め誤差の影響を抑えることが有効である。本研究においては、exflib [7] により 10 進 200 桁または 600 桁の精度でおこない、丸め誤差の影響を抑制した。第二種積分方程式 (3.2) の離散化には選点法をもちい、積分則としては二重指数型積分則 [23] をもちいた [9]。正則化パラメータには、 $\alpha = 10^{-100}$ または $\alpha = 10^{-400}$ をもちい、 $\epsilon = 0.01$ として (4.1) の数値計算をおこなった。

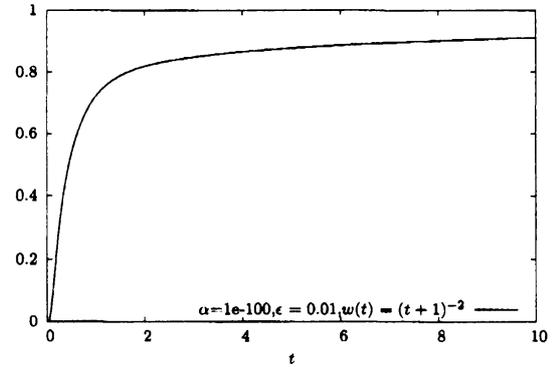
例 1[16] 回路理論に現れる問題として、 c, h を定数として

$$F(p) = \frac{1}{p(p+c)} \left(\frac{1}{2ph} - \frac{e^{-2ph}}{1-e^{-2ph}} \right) \quad (4.2)$$

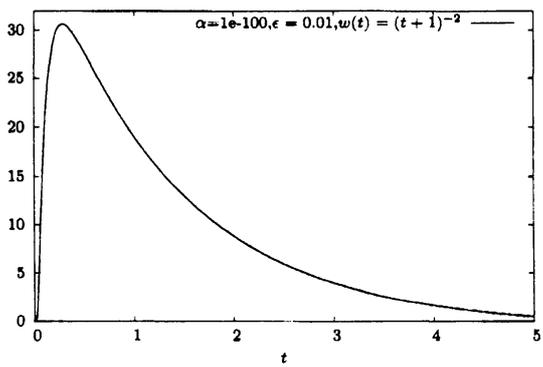
に対する実逆変換を考える。 $c = h = 1$ としたときの実逆変換の数値計算を Fig. 1(a) に示す。



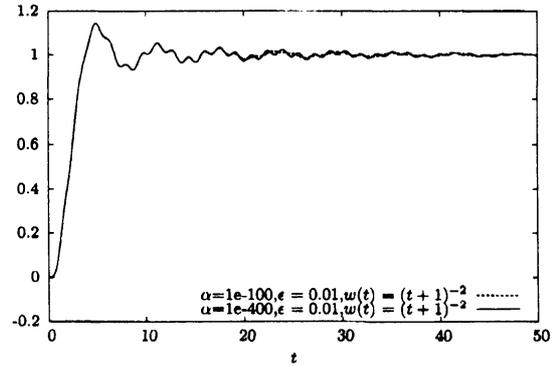
(a) Numerical results for (4.2) in circuit theory



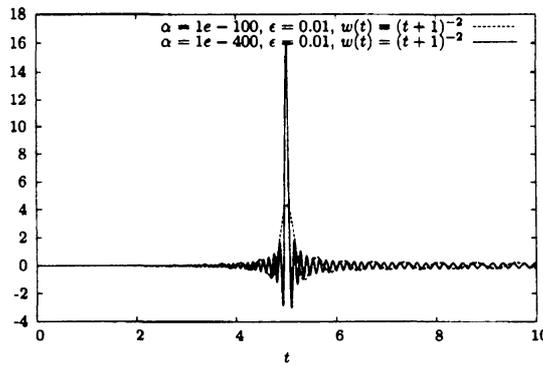
(b) Numerical results for (4.3) in an inviscid fluid mechanics problem



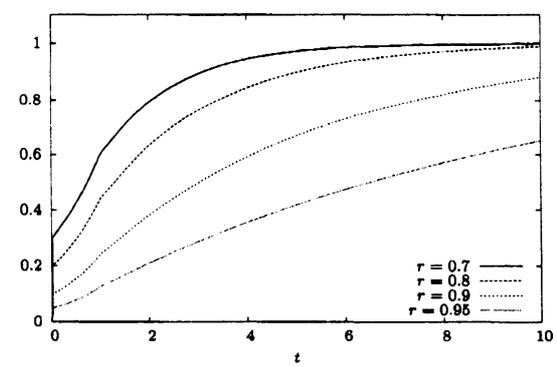
(c) Numerical results for (4.4) of the longitudinal impact on viscoplastic rods



(d) Numerical results for (4.5) of shock waves in diatomic chains



(e) Numerical results for (4.6) of the Gaussian distribution



(f) Numerical results for (4.7) of the waiting time distribution in the M/D/1 queue

Fig 1: Numerical real inversion of the Laplace transform in applications

例 2[24] 粘性流体の扱いにおいて,

$$F(p) = \frac{1}{p} \exp\left(-r\sqrt{\frac{p(1+p)}{1+cp}}\right) \quad (4.3)$$

の実逆変換が現れる. $c = 0.4, r = 0.5$ としたときの数値計算結果を Fig. 1(b) に示す.

例 3[25] 塑性体に対する繊維方向の衝撃波の扱いで現れる

$$F(p) = \frac{(100p - 1) \sinh(\sqrt{p}/2)}{p(p \sinh \sqrt{p} + \sqrt{p} \cosh \sqrt{p})} \quad (4.4)$$

に対する実逆変換の数値計算の結果を Fig. 1(c) に示す.

例 4[15] 二原子鎖での衝撃波で現れる

$$F(p) = \frac{\exp(-2\Psi_p)}{p}, \quad \cosh \Psi_p = \sqrt{1 + p^2 + p^4/16} \quad (4.5)$$

に対する実逆変換を Fig. 1(d) に示す.

例 5[20] Gauss 分布の Laplace 変換は

$$F(p) = \exp\left(\frac{\lambda}{\mu} \left\{ 1 - \left(1 + \frac{2\mu^2 p}{\lambda}\right)^{1/2} \right\}\right) \quad (4.6)$$

で与えられる. $\mu = 5, \lambda = 10^6$ に対する数値実逆変換の結果を Fig. 1(e) に示す.

例 6[13] M/D/1 型の待ち行列における待ち時間の扱いで,

$$F(p) = \frac{1 - r}{p - r(1 - e^{-p})} \quad (4.7)$$

の実逆変換が現れる. $r = 0.7, 0.8, 0.9, 0.95$ としたときの数値計算結果を Fig. 1(f) に示す.

一方, 数式処理ソフトウェア Maple12 (12.02, December 10 2008, Maple Build ID 377066, Linux にて利用) をもちいることで, 例 5 に対する逆変換は, 数式として

$$\frac{1}{8000000} \frac{\sqrt{2} e^{\frac{1}{200000} - 20000t} - \frac{1}{3200000000000000}}{\sqrt{\pi t^{3/2}}}$$

と求まる. 他の例に対しては Maple12 では逆変換を得ることができなかった.

以上の数値計算例から, 多倍長計算と高精度離散化をもちいることで, 正則化法に対する誤差, 離散化誤差および丸め誤差を任意に小さくすることが可能となり, 原関数を数值的に構成することが可能となることがわかる.

応用においては, 原関数の解析性や連続性, 原点での挙動が事前に与えられる場合には, それに応じた函数空間およびパラメータを選択することが望ましい. また, 像函数が離散的に与えられる場合や誤差を含む場合への対処も必要となる.

謝辞 本研究の遂行にあたり、齋藤三郎氏にご助言を頂きました。また日本学術振興会科学研究費(課題番号 20740057, 19340022)の助成を頂きました。

参考文献

- [1] ANDO, T. and SAITOH, S.: Restrictions of reproducing kernel Hilbert spaces to subsets (preliminary reports), 数理解析研究所講究録 **743** (1991), 164–187.
- [2] 荒井政大, 角孝平, 伏見祐介, 松田哲也: 均質化法を用いた CFRP 積層板の粘弾性構成式の評価, 計算数理工学論文集 **8** (2008), 53–58.
- [3] COHEN, A. M. : *Numerical methods for Laplace transform inversion*, Springer (2007).
- [4] CRADDOCK, M., HEATH, D. and PLATEN, E. : Numerical inversion of Laplace transforms: a survey of techniques with applications to derivative pricing, *J. Comput. Finance* **4(1)** (2000), 57–81.
- [5] DAVIES, B., and MARTIN, B. : Numerical inversion of the Laplace transform: a survey and comparison of methods, *J. Comput. Phys.* **33(1)** (1979), 1–32.
- [6] DUFFY, D. G. : On the numerical inversion of Laplace transforms: comparison of three new methods on characteristic problems from applications, *ACM Trans. Math. Software* **19(3)** (1993), 333–359.
- [7] <http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~fujiwara/exflib>
- [8] FUJIWARA, H. and ISO, Y.: Some remarks on the choice of regularization parameters under multiple-precision arithmetic, *Theoretical and Applied Mechanics Japan* **51** (2002), 387–393.
- [9] 藤原宏志: Numerical real inversions of the Laplace transform by multiple-precision arithmetic, 数理解析研究所講究録 **1566** (2007), 181–195.
- [10] 藤原宏志: Numerical real inversions of the Laplace transform and their applications, 数理解析研究所講究録 **1618** (2008), 192–209.
- [11] FUJIWARA, H., KAJINO, N. and SAWANO, Y. : Compactness of the Laplace transform on reproducing kernel Hilbert spaces, in preparation.
- [12] 細野敏夫: 数値ラプラス変換, 電気学会論文誌 A **99(10)** (1979), 494–500.
- [13] ISEGER, P. D. : Numerical transform inversion using Gaussian quadrature, *Probab. Eng. Inf. Sci.* **20** (2006), 1–44.
- [14] KRESS, R.: *Linear Integral Equations (1st Ed.)*, Springer-Verlag (1989).

- [15] MUSGRAVE, M. J. P. and TASI, J.: Shock waves in diatomic chains – I. linear analysis, *J. Mech. Phys. Solids* **24** (1976), 19–42.
- [16] MCLACHLAN, N. W.: *Complex variable theory and transform calculus with technical applications (2nd Ed.)*, Cambridge University Press (1953).
- [17] MATSUURA, T., AL-SHUAIBI, A., FUJIWARA, H. and SAITOH, S.: Numerical real inversion formulas of the Laplace transform by using a Fredholm integral equation of the second kind. *J. Anal. Appl.* **5** (2007), 123–136.
- [18] SAITOH, S.: Approximate real inversion formulas of the Laplace transform. *Far East J. Math. Sci.* **11** (2003), 53–64.
- [19] SAITOH, S.: Approximate real inversion formulas of the Gaussian convolution. *Applicable Analysis* **83** (2004), 727–733.
- [20] SAKURAI, T. : Numerical inversion for Laplace transforms of functions with discontinuities, *Adv. Appl. Prob.* **36** (2004), 616–642.
- [21] SAWANO, Y., FUJIWARA, H. and SAITOH, S. : Real inversion formulas of the Laplace transform on weighted function spaces, *Complex analysis and operator theory* **2(3)** (2008), 511–521.
- [22] SPADA, G. and BOSCHI, L. : Using the Post-Widder formula to compute the Earth's viscoelastic Love numbers, *Geophys. J. Int.* **166** (2006), 309–321.
- [23] TAKAHASI, H. and MORI, M.: Double exponential formulas for numerical integration. *Publ. Res. Inst. Math. Sci.* **9** (1974), 721–74.
- [24] TANNER, R. I.: Note on the Rayleigh problem for a visco-elastic fluid, *ZAMP* **XIII** (1962), 573–580.
- [25] TING T. C. T., and SYMONDS P. S.: Longitudinal impact on viscoplastic rods. *J. Appl. Mech.* **31(2)** (1964), 199–207.