

Numerical Real Inversions of the Laplace Transform and their Applications

藤原宏志

京都大学大学院 情報学研究科

fujiwara@acs.i.kyoto-u.ac.jp

概要

本研究では Laplace 変換の実逆変換とその高精度数値計算について論じる。本研究で提案する手法は、再生核 Hilbert 空間において Tikhonov 正則化法を適用し、多倍長計算による数値計算をおこなう。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

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

の実逆変換の高精度数値計算の実現を目的とする。齋藤らによって与えられた枠組 [18, 17, 10] をもとに実逆変換を与え、数値実逆変換における有効性を示す。

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。実逆変換は数学、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, 20, 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。これまでに Bromwich 積分、Post-Widder の公式、正則化法や直交多項式などにもとづく数値計算手法が提案されている [3, 5, 6]。しかし、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、再生核 Hilbert 空間上での Tikhonov 正則化法による実逆変換が提案された [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, 9]. 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. これに基き、[17] に多倍長計算を適用して正則化パラメータを十分小さくとすることで、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 [10].

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. 論文 [18, 17] では、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ている. 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十分ではなく、[21] において、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た. 第 2 節および第 3 節において、この枠組での Laplace 変換の実逆変換を述べる.

本論文ではさらに、数値計算の実現のための [21] に対する修正を提案する. 第 4 節では、実逆変換の数値計算の実現に必要な具体的な再生核 Hilbert 空間の例を挙げる. さらに、この枠組で原函数に課せられる原点での条件 $f(0) = 0$ の緩和を第 5 節で述べる. 第 6 節では、典型的な函数に対する実逆変換の数値計算結果および応用問題での実逆変換の数値計算結果を示し、提案する手法の有効性を示す.

2 再生核 Hilbert 空間での Tikhonov 正則化法

本節では、[1, 19] に従って、再生核 Hilbert 空間上での Tikhonov 正則法について述べる.

定義 1. $X = X(\Omega)$ を領域 Ω 上の函数 Hilbert 空間とする. $K(p, q) : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ (または $\mathbb{C}$) が次を満たすとき、 K を X の再生核という.

(i) 任意の $q \in \Omega$ に対し、 $K_q(p) := K(p, q)$ は p の函数として X の元である. すなわち、 $K_q \in X$.

(ii) 任意の $p \in \Omega$ および任意の $f \in X$ に対して $f(p) = (f, K_p)_X$ が成立する.

X に再生核 K が存在するとき、 X を再生核 Hilbert 空間といい、(ii) を再生性という.

Hilbert 空間 X, Y と有界線型写像 $L \in B(X, Y)$ に対して

$$\mathcal{N}(L) = \{f \in X; Lf = 0\},$$

$$\mathcal{R}(L) = \{F \in Y; \exists f \in X \text{ s.t. } Lf = F\}$$

とする. $F, G \in \mathcal{R}(L)$ に対して、 $F = Lf, G = Lg$ となる $f, g \in X$ が存在する. このとき、

$$(F, G)_{\mathcal{R}(L)} := \left(P_{\mathcal{N}(L)^\perp} f, P_{\mathcal{N}(L)^\perp} g \right)_X$$

は well-defined で、 $(\mathcal{R}(L), (\cdot, \cdot)_{\mathcal{R}(L)})$ は Hilbert 空間となる. ただし $P_{\mathcal{N}(L)^\perp}$ は X の $\mathcal{N}(L)^\perp$ への正射影である.

定理 2. X, Y を領域 Ω 上の函数 Hilbert 空間とする. $L \in B(X, Y)$ に対して写像 $h : \Omega \rightarrow X$ が存在して

$$Lf(p) = (f, h_p)_X, \quad p \in \Omega \quad (2.1)$$

と表されたとする. このとき, $\mathcal{R}(L)$ は $k(p, q) = (h_q, h_p)_X$ を再生核とする再生核 Hilbert 空間である.

証明. $f_0 \in \mathcal{N}(L)$ に対し, $0 = (Lf_0)(p) = (f_0, h_p)_{\mathcal{R}(L)}$ であるから, 任意の $p \in \Omega$ に対して $h_p \in \mathcal{N}(L)^\perp$, 特に $P_{\mathcal{N}(L)^\perp} h_p = h_p$ である. $F \in \mathcal{R}(L)$ に対し, $F = Lf, f \in X$ とする. $k_p = k(\cdot, p) = Lh_p$ に注意すると,

$$\begin{aligned} (F, k_p)_{\mathcal{R}(L)} &= (Lf, Lh_p)_{\mathcal{R}(L)} = (P_{\mathcal{N}(L)^\perp} f, P_{\mathcal{N}(L)^\perp} h_p)_X = (P_{\mathcal{N}(L)^\perp} f, h_p)_X \\ &= (f, h_p)_X = Lf(p) = F(p). \end{aligned}$$

これは k が $\mathcal{R}(L)$ で再生性を有することを示している. □

最良近似 X を再生核 Hilbert 空間とし, その再生核を K とする. Y を Hilbert 空間とし, $L \in B(X, Y)$ の共役作用素を L^* とする. このとき $f \in X$ に対して

$$L^*Lf(p) = (L^*Lf, K_p)_X = (f, L^*LK_p)_X$$

であり, L^*L は (2.1) の形で表される. したがって 定理 2 より, $(\mathcal{R}(L^*L), (\cdot, \cdot)_{\mathcal{R}(L^*L)})$ は $k(p, q) = (L^*LK_q, L^*LK_p)_X$ を再生核とする再生核 Hilbert 空間となる. このとき, 次が成立する.

定理 3 (Ando, Saitoh[1]). X, Y を Hilbert 空間とし, $L \in B(X, Y)$ とする. $F \in Y$ に対し,

$$\|Lf - F\|_Y = \inf_{f \in X} \|L\tilde{f} - F\|_Y \quad (2.2)$$

となる $f \in X$ が存在するための必要十分条件は $L^*F \in \mathcal{R}(L^*L)$ となることである. このとき, そのような f の中で $\|\cdot\|_X$ ノルムを最小にする X の元 f_0 が唯一つ存在する. さらに, X に再生核 K が存在するならば, f_0 は

$$f_0(p) = (L^*F, L^*LK_p)_{\mathcal{R}(L^*L)}, \quad p \in \Omega.$$

で与えられる.

グラフノルムと再生核 正数 $\alpha > 0$ をひとつとる. $f, g \in X$ に対し,

$$(f, g)_{L, \alpha} := \alpha(f, g)_X + (Lf, Lg)_Y$$

とすると, $X(L, \alpha) := (X, (\cdot, \cdot)_{L, \alpha})$ は Hilbert 空間となる. さらに, 次が成立する.

定理 4 (Ando, Saitoh[1]).

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

を満たす $K_\alpha(p, q)$ が唯一つ存在する. この K_α は $X(L, \alpha)$ の再生核となる.

再生核 Hilbert 空間上の Tikhonov 正則化法 $f \in X(L, \alpha)$ に対し,

$$\hat{L}f := (\sqrt{\alpha}f, Lf)$$

で定義される $\hat{L}: X(L, \alpha) \rightarrow X \times Y$ を考える. $\hat{L}^*$ を $\hat{L}$ の共役とすると,

$$\begin{aligned} (h, \hat{L}^*[(f, g)])_{L, \alpha} &= (\hat{L}h, (f, g))_{X \times Y} = ((\sqrt{\alpha}h, Lh), (f, g))_{X \times Y} \\ &= \sqrt{\alpha}(h, f)_X + (Lh, g)_Y = (h, \sqrt{\alpha}f + L^*g)_X. \end{aligned}$$

したがって

$$\hat{L}^*[(f, g)] = \sqrt{\alpha}f + L^*g.$$

ただし $\hat{L}^*$ は $\hat{L}: X(L, \alpha) \rightarrow X \times Y$ の共役, L^* は $L: X \rightarrow Y$ の共役であることに注意する. $f \in X(L, \alpha)$ に対して

$$\begin{aligned} (\hat{L}^*\hat{L}f, g)_{L, \alpha} &= (\hat{L}f, \hat{L}g)_{X \times Y} = ((\sqrt{\alpha}f, Lf), (\sqrt{\alpha}g, Lg))_{X \times Y} \\ &= \alpha(f, g)_X + (Lf, Lg)_Y = (f, g)_{L, \alpha}, \end{aligned}$$

すなわち $\hat{L}^*\hat{L}f = f$ であるから, 集合として $X(L, \alpha) = \mathcal{R}(\hat{L}^*\hat{L})$. さらにそれぞれの内積について, 次が成立する.

$$(f, g)_{\mathcal{R}(\hat{L}^*\hat{L})} = (P_{\mathcal{N}(\hat{L}^*\hat{L})^\perp}f, P_{\mathcal{N}(\hat{L}^*\hat{L})^\perp}g)_{L, \alpha} = (f, g)_{L, \alpha}.$$

さて, $f \in X, F \in Y$ に対して

$$\inf_{\tilde{f} \in X(L, \alpha)} \|\hat{L}\tilde{f} - (\sqrt{\alpha}f, F)\|_{X \times Y}^2 = \inf_{\tilde{f} \in X(L, \alpha)} \left\{ \alpha \|\tilde{f} - f\|_X^2 + \|L\tilde{f} - F\|_Y^2 \right\} \quad (2.3)$$

を考える.

$$\hat{L}^*[(\sqrt{\alpha}f, F)] = \alpha f + L^*F \in X(L, \alpha) = \mathcal{R}(\hat{L}^*\hat{L})$$

だから, 定理 3 により最小二乗解が存在する. このとき, ノルム最小解 f_0 は

$$\begin{aligned} f_0(p) &= (\hat{L}^*[(\sqrt{\alpha}f, F)], \hat{L}^*\hat{L}K_{\alpha, p})_{\mathcal{R}(\hat{L}^*\hat{L})} = (\hat{L}^*[(\sqrt{\alpha}f, F)], K_{\alpha, p})_{\mathcal{R}(\hat{L}^*\hat{L})} \\ &= (\hat{L}^*[(\sqrt{\alpha}f, F)], K_{\alpha, p})_{L, \alpha} = ((\sqrt{\alpha}f, F), \hat{L}K_{\alpha, p})_{X \times Y} \\ &= \alpha(f, K_{\alpha, p})_X + (F, LK_{\alpha, p})_Y \end{aligned}$$

で与えられる. ただし $K_{\alpha, p}(\cdot) = K_\alpha(\cdot, p)$ である. 特に $f = 0$ の場合, (2.3) の右辺は Tikhonov 汎函数に一致し, その最小値を実現する正則化解 f_α が唯一存在する [14]. f_α はノルム最小解に一致するので,

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

で与えられる.

3 再生核 Hilbert 空間上の Laplace 変換作用素と実逆変換

$w(t) \in C^0(0, \infty)$ を正値関数とする. $t \geq 0$ で定義されて絶対連続で, $f(0) = 0$ かつ

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

を満たす函数 f からなる H_w を考える. 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. 実際,

$$\frac{d}{ds} K_t(s) = \begin{cases} w(s)^{-1}, & s \leq t; \\ 0, & s > t \end{cases} \quad (3.1)$$

より, $f \in H_w$ に対して

$$(f, K_t)_{H_w} = \int_0^\infty f'(s) K'_t(s) w(s) ds = \int_0^t f'(s) \frac{1}{w(s)} w(s) ds = f(t)$$

となり, 再生性が成立する. また, 正値関数 $u(p) \in C^0(0, \infty)$ 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, Laplace 変換を $\mathcal{L}$ として, $f \in H_w$ に対して

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

を考えると, 次が成立する.

定理 5 (Sawano, Fujiwara, and Saitoh [21]). 正値関数 $w, u \in C^0(0, \infty)$ が

$$I = \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-2pt} w(t)^{-1} u(p) dt dp < \infty \quad (3.2)$$

を満たすとき, $L: H_w \rightarrow L_u^2$ は単射かつコンパクト作用素である.

定理 5 により, $Lf = g, g \in L_u^2$ は Hadamard の意味で非適切となる [14]. これに対し, 正数 α を正則化パラメータとする Tikhonov 汎函数

$$J_\alpha(f) = \alpha \|f\|_{H_w}^2 + \|Lf - g\|_{L_u^2}^2 \quad (3.3)$$

を考えると, J_α を最小にする Tikhonov 正則化解 $f_\alpha \in H_w$ が唯一つ存在する. この正則化解は,

$$f_\alpha(t) = (g, LK_{\alpha, t})_{L_u^2} = \int_0^\infty g(p) LK_{\alpha, t}(p) u(p) dp$$

で与えられる. ここで, $K_{\alpha,t}(\cdot) = K_{\alpha}(\cdot, t)$ は定理 4 より

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

を満たす. L を s について作用させると,

$$\alpha LK_{\alpha}(p, t) + p \int_0^{\infty} e^{-ps} (LK_{\alpha,t}, LK_s)_{L_u^2} ds = LK(p, t)$$

を得る. $H_{\alpha} := LK_{\alpha}$ として, Fubini の定理により

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

(3.1) をもちいて部分積分を繰り返すことにより, 次を得る.

$$\begin{aligned} p \int_0^{\infty} e^{-ps} LK_s(q) ds &= \int_0^{\infty} p e^{-ps} \left(\int_0^{\infty} q e^{-qt} K_s(t) dt \right) ds \\ &= \int_0^{\infty} p e^{-ps} \left(\int_0^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} (e^{-qt}) K_s(t) dt \right) ds \\ &= \int_0^{\infty} \frac{\partial}{\partial s} (e^{-ps}) \left(\int_0^s e^{-qt} \frac{dt}{w(t)} \right) ds \\ &= \int_0^{\infty} e^{-ps} e^{-qs} \frac{1}{w(s)} ds \\ &= \mathcal{L} \left[\frac{1}{w} \right] (p+q). \end{aligned}$$

これは, L^* を $L: H_w \rightarrow L_u^2$ の共役とすると,

$$LL^*g(p) = \int_0^{\infty} g(q) \mathcal{L} \left[\frac{1}{w} \right] (p+q) u(q) dq, \quad g \in L_u^2$$

となることを示している.

以上により, 次を得る.

定理 6 ([17, 11]). 任意の正数 $\alpha, t > 0$ に対し, 積分方程式

$$\alpha H_{\alpha}(p, t) + \int_0^{\infty} H_{\alpha}(q, t) \mathcal{L} \left[\frac{1}{w} \right] (p+q) u(q) dq = LK_t(p) \quad (3.4)$$

の解 $H_{\alpha}(\cdot, t) \in L_u^2$ が唯一つ存在する. このとき $Lf = g$ に対する Tikhonov 正則化解 f_{α} は

$$f_{\alpha}(t) = \int_0^{\infty} g(p) H_{\alpha}(p, t) u(p) dp \quad (3.5)$$

で与えられる.

定理 7. $F \in \mathcal{L}(H_w)$ に対し, 次が成立する.

(1)

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

ここで, H_{α} は $(\alpha I + LL^*)H_{\alpha}(\cdot, t) = LK_t$ の解である.

(2)

$$\mathcal{L}^{-1} F(t) = \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{n < M} \frac{1}{\mu_n} \left(\int_0^\infty p F(p) g_n(p) u(p) dp \right) \varphi_n(t) \quad (3.6)$$

ここで, $\{\mu_n; \varphi_n, g_n\}$ は $L: H_w \rightarrow L_u^2$ の特異系である.

一方, $f^\dagger \notin H_w$ とし, $g^\dagger(p) := p \mathcal{L} f^\dagger(p) \in L_u^2$ となる場合を考える. この場合も $g^\dagger$ に対する正則化解 $f_\alpha^\dagger = L_\alpha^{-1} g^\dagger \in H_w$ が一意に存在する. この正則化解は, Tikhonov 汎関数 J_α を最小にするという意味で, H_w の元 $f_\alpha^\dagger$ による $f^\dagger \notin H_w$ の近似を与える.

4 重み函数

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. 本節では, (3.2) を満たす重み函数の組の例を挙げる.

例 1 [18, 17] $w(t) = e^t/t, u(p) = 1$. この場合, $I = 1/2$ であり,

$$LK_t(p) = \frac{1}{(p+1)^2} \left\{ 1 - e^{-t(p+1)} (t(p+1) + 1) \right\},$$

$$\mathcal{L} \left[\frac{1}{w} \right] (p) = \frac{1}{(p+1)^2}.$$

この例では, 0 でない任意の多項式 p_n に対して $p_n \notin H_w$ である.

例 2 $w(t) = (t+1)^{-2n}, u(p) = e^{-p-\frac{1}{p}}$. この場合, $I \approx 0.38$ ($n = 1$), 6.39 ($n = 2$), 828.95 ($n = 3$), 458661.07 ($n = 4$) であり,

$$LK_t(p) = \frac{(2n)!}{p^{2n+1}} \left\{ e_{2n}(p) - e_{2n}(p(1+t)) e^{-pt} \right\},$$

$$\mathcal{L} \left[\frac{1}{w} \right] (p) = \frac{(2n)!}{p^{2n+1}} e_{2n}(p)$$

ただし

$$e_k(p) = 1 + p + \frac{p^2}{2!} + \cdots + \frac{p^k}{k!}.$$

この例では, 原点で 0 となる n 次以下の多項式 p_m に対して, $p_m \in H_w$ である.

例 3 $w(t) = e^{-\sqrt{t}}, u(p) = e^{-p-\frac{1}{p}}$. この場合, $I \approx 0.2463$ であり,

$$LK_t(p) = \frac{1}{p} \left[1 - e^{-tp+\sqrt{t}} + \frac{1}{\sqrt{p}} e^{\frac{1}{4p}} \left\{ \operatorname{Erf} \left(\frac{1}{2\sqrt{p}} \right) + \operatorname{Erf} \left(\sqrt{tp} - \frac{1}{2\sqrt{p}} \right) \right\} \right],$$

$$\mathcal{L} \left[\frac{1}{w} \right] (p) = \frac{1}{p} \left\{ 1 + \frac{1}{\sqrt{p}} e^{\frac{1}{4p}} \operatorname{Erfc} \left(-\frac{1}{2\sqrt{p}} \right) \right\}.$$

ただし

$$\operatorname{Erf}(x) = \int_0^x e^{-t^2} dt, \quad \operatorname{Erfc}(x) = \int_x^\infty e^{-t^2} dt.$$

この例では, 原点で 0 となる任意の多項式 p_n に対し, $p_n \in H_w$ である.

5 原点における条件の緩和

本節では, $f \in H_w$ に課す $f(0) = 0$ の緩和について論じる.

$\rho \in C^0[0, \infty)$ で $\text{supp } \rho \subset [0, 2]$ となるものをひとつとる. 正数 $\epsilon > 0$ に対して

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

として

$$f_\epsilon(t) := \int_0^\infty \rho_\epsilon(s) f(s-t) ds$$

とすると, $f_\epsilon \in C^0[0, \infty)$, $f_\epsilon(0) = 0$ かつ $\mathcal{L} f_\epsilon = \mathcal{L} f \cdot \mathcal{L} \rho_\epsilon$ である. また f が $t = t_0$ で連続のとき,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow +0} f_\epsilon(t_0) = f(t_0) \quad (5.1)$$

が成立する. Laplace 変換像 $F = \mathcal{L} f$ が与えられたとき, $F_\epsilon := F \cdot \mathcal{L} \rho_\epsilon = \mathcal{L} f_\epsilon$ に対して前節で示した実逆変換を適用することで, $\mathcal{L}^{-1} F_\epsilon = f_\epsilon$ を得る. この f_ϵ は, 十分小さい ϵ に対して, (5.1) のとおり f の近似を与える.

以上より, H_α を $(\alpha I + LL^*)H_\alpha(\cdot, t) = LK_t$ の解とすると, $F \in L_u^2$ に対して次の近似実逆変換を得る.

$$f_{\alpha, \epsilon}(t) = \mathcal{L}_{\alpha, \epsilon}^{-1} F(t) = \int_0^\infty p F(p) \mathcal{L} \rho_\epsilon(p) H_\alpha(p, t) u(p) dp. \quad (5.2)$$

特異値分解 (3.6) に対しても同様である.

以上をみたま ρ の例として,

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

があり, この ρ に対しては $\mathcal{L} \rho_\epsilon(p) = \frac{1}{\epsilon^2 p^2} (e^{-\epsilon p} - 1)^2$ である.

6 数値実逆変換の例

本節では, 多倍長計算による (3.5), (5.2) の計算例を示し, その有効性を示す.

前述のとおり, 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十分小さくし, 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.

本節の数値計算は exflib [7] により 10 進 200 桁または 600 桁の精度でおこなった. 第二種積分方程式 (3.4) 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 [10].

Table 1: Test problems in [5]

$f_1(t) = J_0(t)$	$F_1(p) = (p^2 + 1)^{-1/2}$
$f_2(t) = (\pi t)^{-1/2} \cos(2t^{1/2})$	$F_2(p) = p^{-1/2} e^{-p^{-1}}$
$f_3(t) = e^{-t/2}$	$F_3(p) = (p + 1/2)^{-1}$
$f_4(t) = e^{-0.2t} \sin(t)$	$F_4(p) = ((p + 0.2)^2 + 1)^{-1}$
$f_5(t) = 1$	$F_5(p) = p^{-1}$
$f_6(t) = t$	$F_6(p) = p^{-2}$
$f_7(t) = te^{-t}$	$F_7(p) = (p + 1)^{-2}$
$f_8(t) = \sin(t)$	$F_8(p) = (p^2 + 1)^{-1}$
$f_9(t) = (\pi t)^{-1/2}$	$F_9(p) = p^{-1/2}$
$f_{10}(t) = H(t - 5)$	$F_{10}(p) = p^{-1} e^{-5p}$
$f_{11}(t) = -\gamma - \ln(t)$	$F_{11}(p) = p^{-1} \ln(p)$
$f_{12}(t) = \text{square wave}$	$F_{12}(p) = (p(1 + e^{-p}))^{-1}$
$f_{13}(t) = t \cos(t)$	$F_{13}(p) = (p^2 - 1)(p^2 + 1)^{-2}$
$f_{14}(t) = (e^{-t/4} - e^{-t/2})(4\pi t^3)^{-1/2}$	$F_{14}(p) = (p + 1/2)^{-1/2} - (p + 1/4)^{1/2}$
$f_{15}(t) = 2e^{-4/t}(\pi t^3)^{-1/2}$	$F_{15}(p) = e^{-4p^{1/2}}$
$f_{16}(t) = t^{-1} \sin(t)$	$F_{16}(p) = \arctan(p^{-1})$

6.1 典型的な問題への適用

実逆変換 (3.5) および (5.2) の有効性を確かめるため、Table 1 の例に対する数値計算結果を示す。

まず、重み函数の選択について考える。 $F_6 = \mathcal{L} f_6$ において、 $F_6 \notin L^2(0, \infty)$ であることに注意する。この場合、[17] で与えられた実逆変換、すなわち $w(t) = e^t/t, u(p) = 1$ として (3.5) で得られる実逆変換を Fig. 1(a) に示す。正則化パラメータは $\alpha = 10^{-100}$ であるが、この設定での数値計算は破綻している。一方、重み函数として $w(t) = (t + 1)^{-2}, u(p) = \exp(-p - 1/p)$ とすると、 $F_6 \in L^2_u$ である。(3.5) で得られる実逆変換を Fig. 1(b) に示す。

次に、原点での条件を調べるため、 $F_5 = \mathcal{L} f_5$ に対する実逆変換を考える。この場合、(3.5) で得られる実逆変換では Fig. 2(a) の結果を得る。一方、(5.2) で $\epsilon = 0.1, 0.01$ として得られる実逆変換を Fig. 2(b) に示す。計算結果より、 ρ_ϵ をもちいることで厳密解に対する近似が改善されることがわかる。

また、 $F_{12} = \mathcal{L} f_{12}$ を例に不連続性の影響を調べる。正則化パラメータを $\alpha \geq 10^{-12}$ の範囲でとった場合に (5.2) で得られる実逆変換を Fig. 3(a) に示す。一方、 $\alpha = 10^{-100}$ または $\alpha = 10^{-400}$ で得られる実逆変換を Fig. 3(b) に示す。これより、正則化パラメータ α を十分小さくすることが可能な多倍長計算による数値計算では、原函数が不連続性を有する場合にも高精度な近似解が得られることがわかる。

Table 1 に挙げた他の例に対して、 $w(t) = (t + 1)^{-2}, u(p) = \exp(-p - 1/p)$ とし、正則化パラメータを $\alpha = 10^{-100}$ として、(5.2) による実逆変換の数値計算をおこなった。原函数および像函数が $[0, \infty)$ で解析的な場合の実逆変換を Fig. 4 に、 $(0, \infty)$ で連続な場合

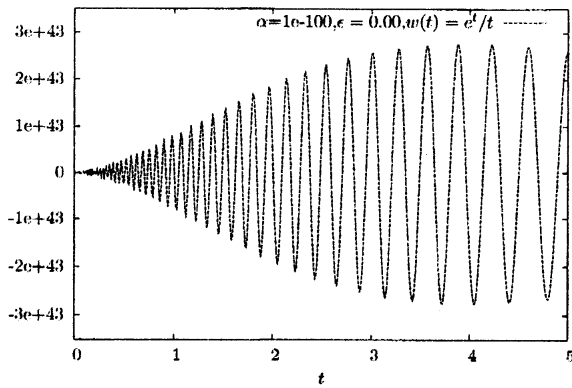
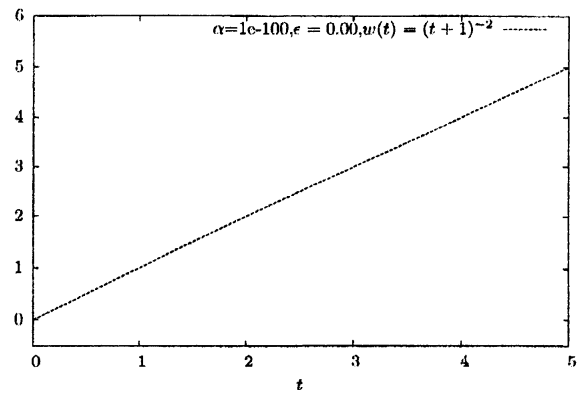
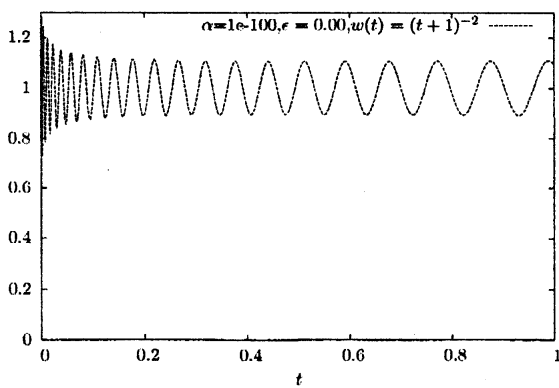
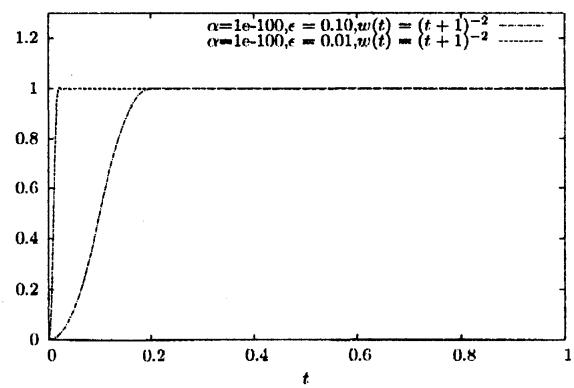
(a) $w(t) = e^t/t, u(p) = 1$ (b) $w(t) = (t+1)^{-2}, u(p) = \exp(-p - 1/p)$

Fig 1: Choice of weight functions in real inversion for a linear function $f_6(t)$ by (3.5), whose transform $F_8(p)$ does not belong to $L^2(0, \infty)$



(a) Numerical results for (3.5)



(b) Numerical results for (5.2)

Fig 2: Mollifier in real inversion for $f_5(t)$ with $f_5(0) \neq 0$, with $w(t) = (t+1)^{-2}, u(p) = \exp(-p - 1/p), \alpha = 10^{-100}$

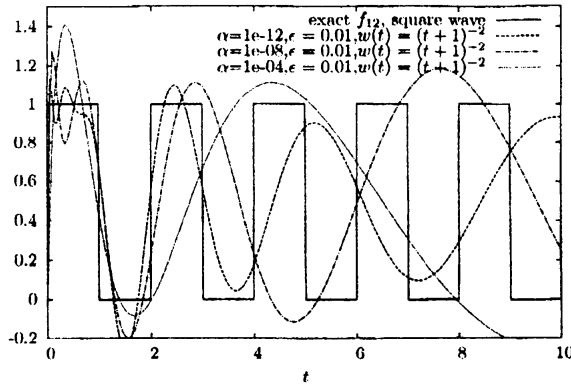
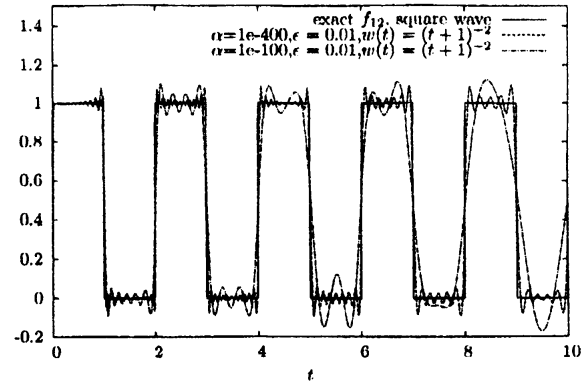
(a) $\alpha \geq 10^{-12}$ (b) $\alpha = 10^{-100}, 10^{-400}$

Fig 3: Choice of regularization parameters in real inversion for a discontinuous function $f_{12}(t)$, $w(t) = (t+1)^{-2}$, $u(p) = \exp(-p - 1/p)$, $\epsilon = 0.01$

の実逆変換を Fig. 5 に、不連続性を有する場合の実逆変換を Fig. 6(a) に示す。いずれも、数値実逆変換の計算結果を実線で、厳密解を破線で示している。解析的な枠組や、原点での値が有限である Fig 5(e),(f) においては、得られる数値解は厳密解を十分に近似していることがわかる。一方、Fig. 5(a),(b),(c),(d) では原函数が原点で発散しており、この場合には ϵ の選択あるいは重み函数の選択について注意を要することが示唆される。

また、像函数が実軸の正の領域において極を有する場合にも、極の上限が与えられれば、シフトによって提案手法の適用が可能となる [12]。例として、

$$F(p) = \frac{1}{p^2 - 1} \quad (6.1)$$

を考える。変数変換 $p = s + 1$ で得られる

$$\frac{1}{s^2 + 2s} = \int_0^\infty e^{-st} (e^{-t} f(t)) dt$$

に対しては (5.2) による実逆変換が可能となる。得られる数値計算の結果を Fig. 6(b) に示す。

6.2 数値実逆変換の応用

本節では、Laplace 変換の実逆変換の応用例に対し、提案する手法による数値計算の結果を示す。原函数の解析性や連続性、原点での挙動が a priori 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。ここでは、原函数の情報を a priori に与えることなく、 $w(t) = (t+1)^{-2}$, $u(p) = \exp(-p - 1/p)$, $\alpha = 10^{-100}$ または $\alpha = 10^{-400}$, $\epsilon = 0.01$ での (5.2) による実逆変換の数値計算結果を示す。

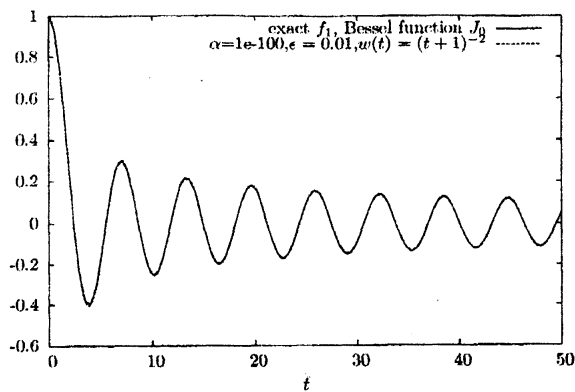
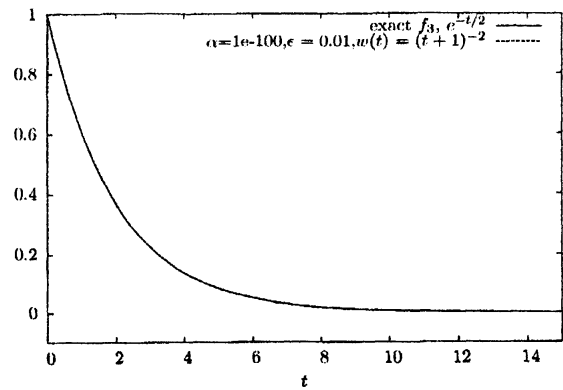
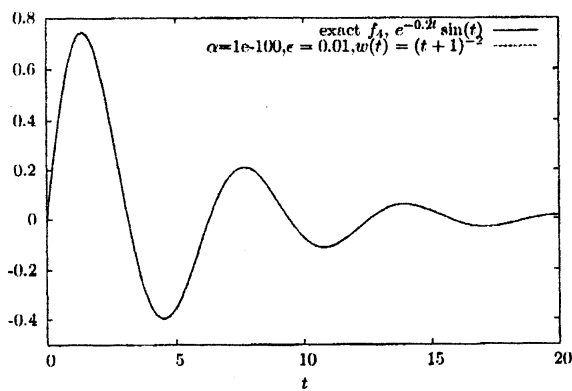
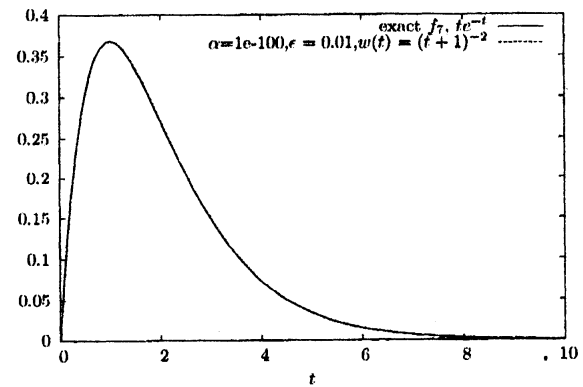
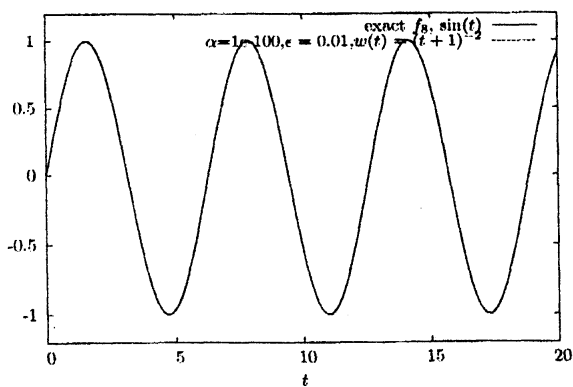
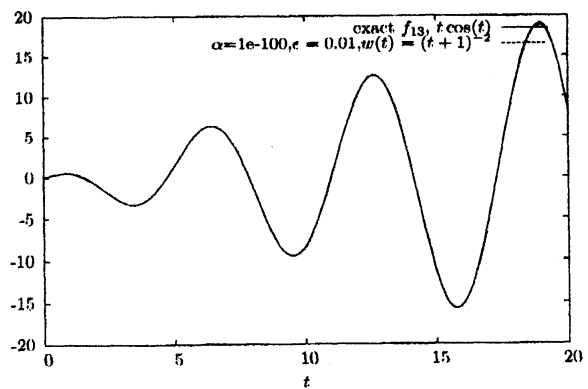
(a) $f_1(t)$ (b) $f_3(t)$ (c) $f_4(t)$ (d) $f_7(t)$ (e) $f_8(t)$ (f) $f_{13}(t)$

Fig 4: Numerical results for analytic functions in Table 1, $\alpha = 10^{-100}$, $\epsilon = 0.01$, $w(t) = (t+1)^{-2}$, $u(p) = \exp(-p - 1/p)$

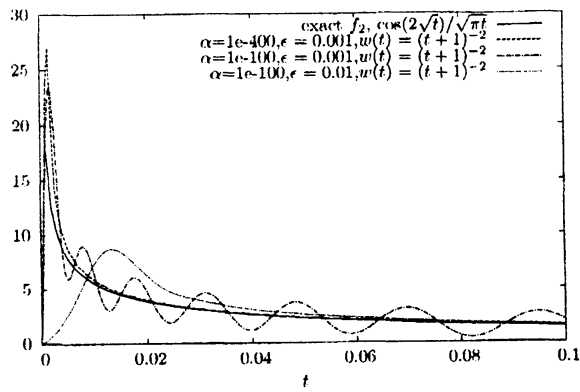
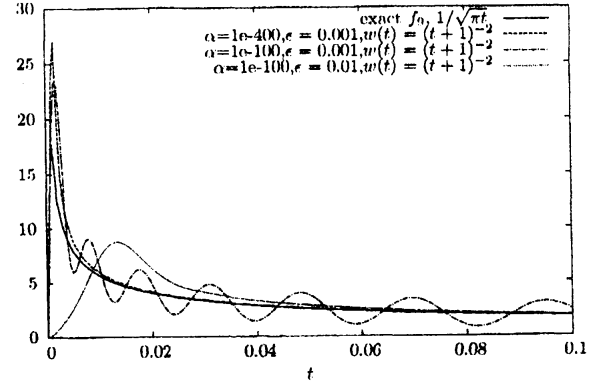
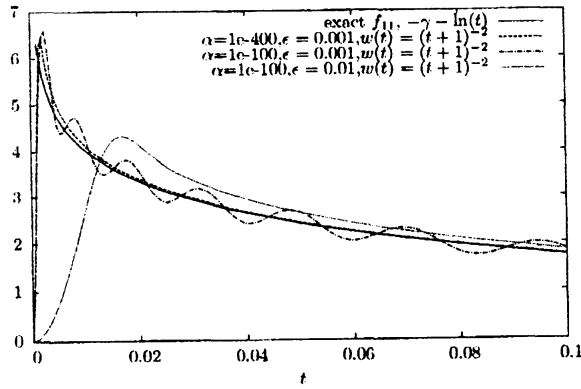
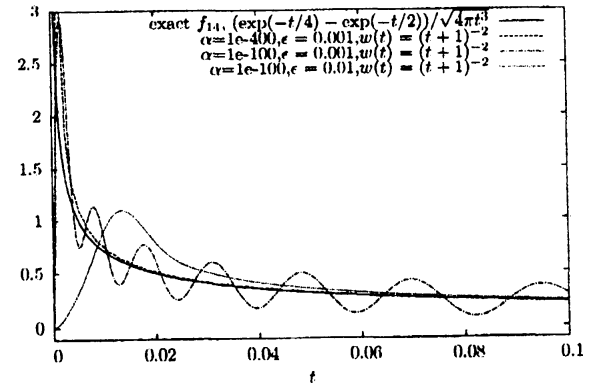
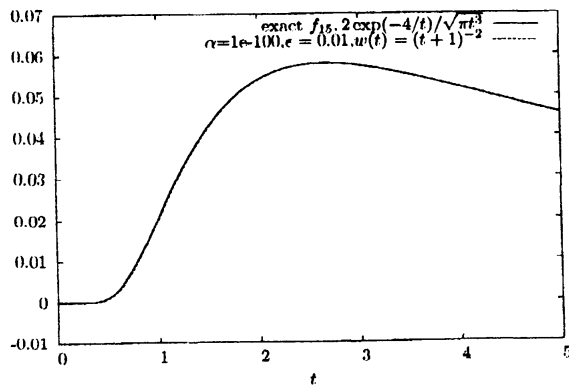
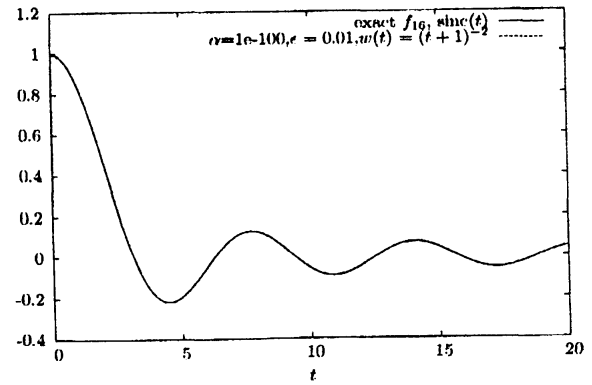
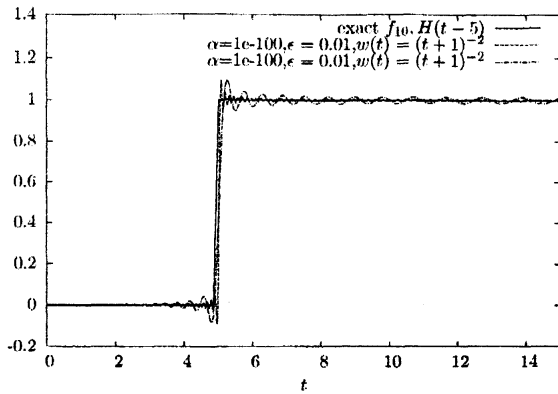
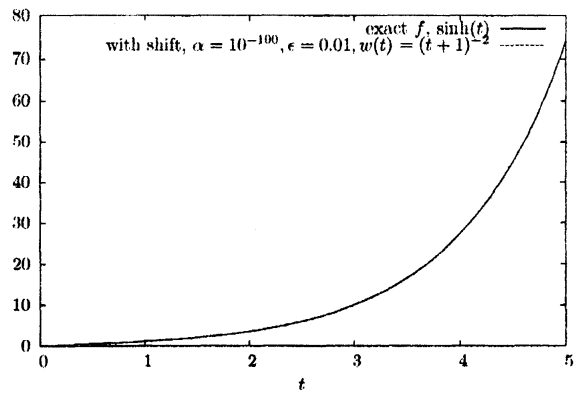
(a) $f_2(t)$ (b) $f_9(t)$ (c) $f_{11}(t)$ (d) $f_{14}(t)$ (e) $f_{15}(t)$ (f) $f_{16}(t)$

Fig 5: Numerical results for nonanalytic functions in Table 1, $w(t) = (t+1)^{-2}$, $u(p) = \exp(-p - 1/p)$



(a) Numerical results for $f_9(t)$, the original function is not continuous



(b) Numerical results with shift for (6.1) where the image function is not continuous

Fig 6: Numerical real inversion for discontinuous functions, $\epsilon = 0.01, w(t) = (t + 1)^{-2}, u(p) = \exp(-p - 1/p)$

例 1[16] 回路理論に現れる問題として, c, h を定数として

$$F(p) = \frac{1}{p(p+c)} \left(\frac{1}{2ph} - \frac{e^{-2ph}}{1-e^{-2ph}} \right) \quad (6.2)$$

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. 7(a) に示す.

例 2[24] 粘性流体の扱いにおいて,

$$F(p) = \frac{1}{p} \exp \left(-r \sqrt{\frac{p(1+p)}{1+cp}} \right) \quad (6.3)$$

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. 7(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

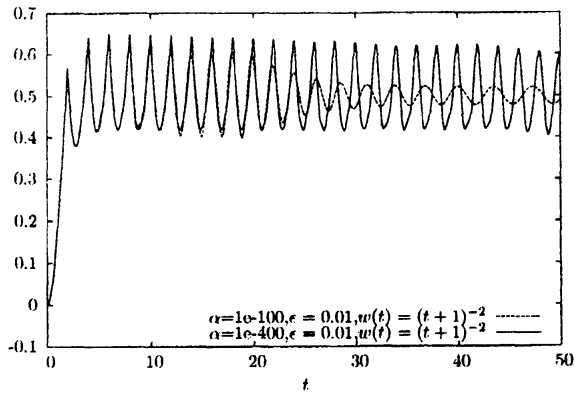
$$F(p) = \frac{(100p - 1) \sinh(\sqrt{p}/2)}{p(p \sinh \sqrt{p} + \sqrt{p} \cosh \sqrt{p})} \quad (6.4)$$

に対する実逆変換の数値計算の結果を Fig. 7(c) に示す.

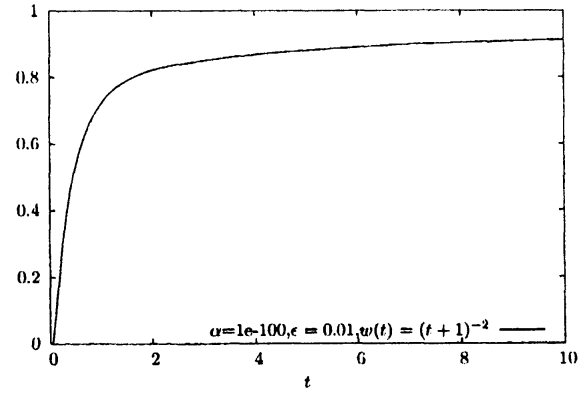
例 4[15] 二原子鎖での衝撃波で現れる

$$F(p) = \frac{\exp(-2\Psi_p)}{p}, \quad \cosh \Psi_p = \sqrt{1 + p^2 + p^4/16} \quad (6.5)$$

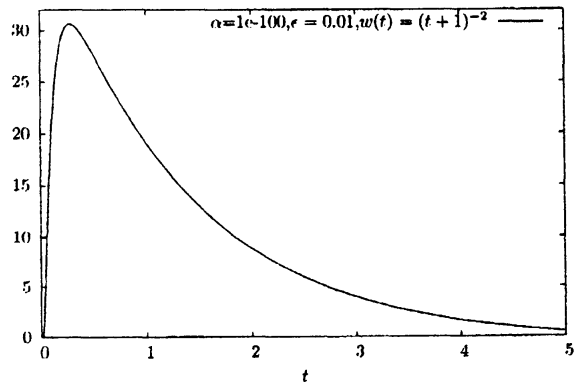
に対する実逆変換を Fig. 7(d) に示す.



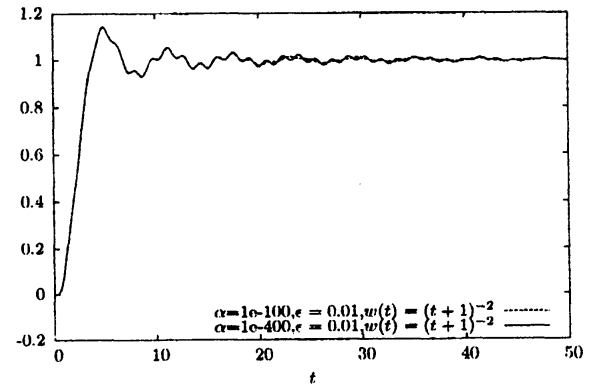
(a) Numerical results for (6.2) in circuit theory



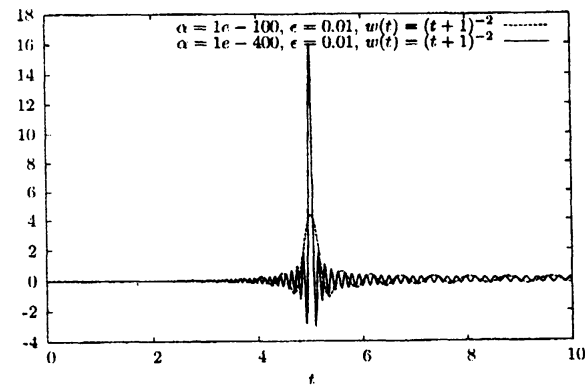
(b) Numerical results for (6.3) in an inviscid fluid mechanics problem



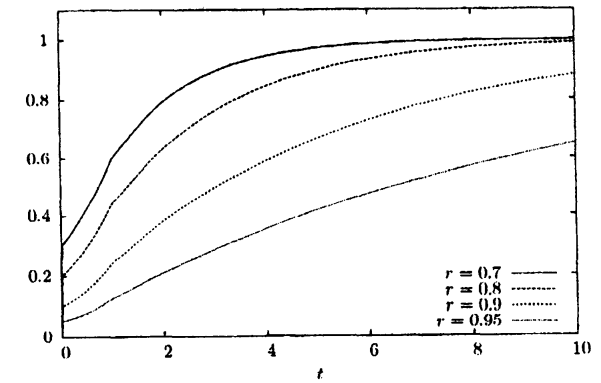
(c) Numerical results for (6.4) of the longitudinal impact on viscoplastic rods



(d) Numerical results for (6.5) of shock waves in diatomic chains



(e) Numerical results for (6.6) of the Gaussian distribution



(f) Numerical results for (6.7) of the waiting time distribution in the M/D/1 queue

Fig 7: Numerical real inversion of the Laplace transform in applications

例 5[20] Gauss 分布の Laplace 変換は

$$F(p) = \exp \left(\frac{\lambda}{\mu} \left\{ 1 - \left(1 + \frac{2\mu^2 p}{\lambda} \right)^{1/2} \right\} \right) \quad (6.6)$$

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. 7(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,

$$F(p) = \frac{1-r}{p-r(1-e^{-p})} \quad (6.7)$$

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. 7(f) に示す.

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, 不連続性を有する場合においても高精度な実逆変換が実現されることがわかる. また数値計算の視点からは, (3.5), (5.2) の積分表現による数値計算は並列計算に適しており, プロセス数に対して線型な速度向上が期待できる.

応用においては, 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. この場合, 誤差の中に必要な情報が埋もれていないか注意する必要がある. すなわち, 安易な正則化法の適用では, 必要な情報が誤差として処理される場合があるため, 解や混入する誤差についての知見, a priori に与えられる情報, 近似空間の性質を利用して, 必要な情報を抽出する工夫が必要となる.

謝辞 本研究の遂行にあたり, 齋藤三郎氏, 澤野嘉宏氏, 東森信就氏, 梶野直孝氏, 松浦勉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] BARONE, P., RAMPONI, A., and SEBASTIANI, G.: On the numerical inversion of the Laplace transform for nuclear magnetic resonance relaxometry, *Inverse Problems* **17** (2001), 77–94.
- [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, 磯祐介 : 64bit 計算環境に適した多倍長数値計算環境の構築と非適切問題の数値計算, *情報処理学会論文誌* **44**(3) (2003), 925–931.
- [10] 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.
- [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. *Appl. Anal. 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.