

Numerical Real Inversions of the Laplace Transform by Multiple-Precision Arithmetic

藤原宏志

京都大学大学院 情報学研究科

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

概要

本研究では Laplace 変換の実逆変換の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 Laplace 変換作用素のコンパクト化をおこない、そこから導かれる再構成法の離散化の、多倍長計算による高精度数値計算である。再構成法としては Tikhonov 正則化法と特異値分解による spectral cut-off 正則化法の 2 つを扱う。提案する手法では、原函数が特異性を有する場合にも、信頼性が高く、近似精度も高い数値解が得られる。

1 緒言

本研究は、Laplace 変換

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

の実逆変換とその数値計算スキームを、齋藤 [12] による枠組をもとにして与え、さらに多倍長計算による高精度数値計算を示す。具体的には、逆変換をコンパクト作用素による非適切問題 (ill-posed problem) として扱い、Tikhonov の正則化法と spectral cut-off 正則化法による逆変換を考え、それぞれの離散スキームと数値計算を示す。

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。Bromwich 積分による複素表示の逆変換が知られているが、実逆変換は制御や回路方程式など、種々の工学分野において基礎的な解析手法として現れる。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、数値計算による近似的な逆変換が必要となる。これまでも多くの実逆変換の数値計算法が提案されているが、この問題の直接離散化は数値的に不安定 (ill-conditioned) であり、決定的な解決には至っていない。

一般的な科学技術数値計算は、IEEE754 [6] で定義される倍精度演算でおこなわれ、実数は 10 進法で約 16 桁の精度での浮動小数点演算により近似して扱われる。そのため、真値と浮動小数点数値の間に丸め誤差 (rounding error) とよばれる計算誤差が生じる。数値的に不安定な問題の数値計算では、計算過程における丸め誤差の著しい増大により数値計算が破綻するため、その計算機上での取り扱いは不可能と考えられていた。

これに対して今井らは、スペクトル法と多倍長計算により、解析函数の範疇において、数値的に不安定な問題の直接数値計算の可能性を示した [7, 4]。しかし応用においては、不連続性などの特異性を含む場合にも適用可能な数値計算法が必要である。

本研究ではこれらの問題に対して、正則化法、高精度離散化、そして多倍長計算の利用による逆変換の数値計算法を提案する。正則化法は、非適切問題を適切な問題 (well-posed problem) によ

り近似する手法である [17]. ここで, 正則化方程式は数学的にはある位相で安定であるが, その離散化が数値的に安定とは限らないことに注意する. 特に, 正則化解が元の問題の “解”, すなわち原函数を十分に “近似” するように正則化パラメータを小さく設定すると, 元の問題の不安定性が現れて, その離散化は数値的に不安定となる. このため, 倍精度計算では数値計算が破綻する場合があります, 正則化パラメータの値を任意に設定することはできない.

一方, 計算桁数を任意に設定することが可能な多倍長計算では, 計算桁数を十分に確保することにより, 仮想的に丸め誤差のない数値計算が実現される. これにより, 数値的に不安定な問題に対して信頼性の高い数値計算が可能となり, 特に正則化パラメータを任意に小さく設定しての正則化方程式の数値計算が実現される. さらに, 提案する手法では, 解が特異性を有する場合にも, 正則化法によって解析函数を求める問題に帰着され, 高精度離散化が有効と考えられる. そこでは, 無限区間における積分の近似が現れ, 高精度な近似を実現するために充分大きな打ち切りパラメータの設定が必要となるが, これに対しても多倍長計算が有効である.

すなわち多倍長計算をもちいることで, 正則化解による原函数の充分な近似と, 正則化方程式の高精度な離散化が同時に達成される. この枠組を §3 で導入し, それに対する Tikhonov 正則化法と [9] の数値計算の精密化を §4 で述べる. ここでは, Laplace 変換において重要なステップ函数やインパルス函数に対しても, 高精度な数値計算結果が得られることを示す. §5 では, §3 で導入したコンパクト作用素の特異値分解による実 Laplace 逆変換とその数値計算について述べる.

2 実 Laplace 逆変換の不安定性

正数 $\omega > 0$ に対して, $f_\omega(t) = \sqrt{\omega} \sin \omega t$ とする. この f_ω に対して,

$$F_\omega(p) = \mathcal{L} f_\omega(p) = \frac{\omega \sqrt{\omega}}{p^2 + \omega^2}$$

であり, これは

$$\sup_{p \geq 0} |F_\omega(p)| \leq \frac{1}{\sqrt{\omega}}$$

を満たす. これより $\omega \rightarrow \infty$ のとき, $\|F_\omega\|_\infty \rightarrow 0$ であるが, $\|f_\omega\|_\infty \rightarrow \infty$ である. これは逆変換 $\mathcal{L}^{-1}$ が $\|\cdot\|_\infty$ の位相で安定性を有さないことを示している. したがって, その直接的な離散化は数値的に不安定となり, 一般的な数値計算環境では, 種々の計算誤差の急激な増大をとともうため, 直接的な数値計算を実現するのは困難である.

3 コンパクト作用素による実 Laplace 逆変換

$x \geq 0$ で定義されて絶対連続で, $f(0) = 0$ かつ

$$\|f\|_{H_K}^2 := \int_0^\infty |f'(t)|^2 \frac{e^t}{t} dt < \infty$$

を満たす函数 f からなる H_K を考える [12]. H_K は

$$K(s, t) = \int_0^{\min(s, t)} \xi e^{-\xi} d\xi = \begin{cases} -se^{-s} - e^{-s} + 1, & s \leq t; \\ -te^{-t} - e^{-t} + 1, & t < s \end{cases}$$

を再生核とする再生核 Hilbert 空間である. Laplace 変換作用素 $\mathcal{L}$ に対して H_K 上の作用素 L を

$$Lf(p) := (\mathcal{L}f)(p)p, \quad f \in H_K$$

と定義すると, $L: H_K \rightarrow L^2(0, \infty)$ は有界線型作用素であり,

$$\|Lf\|_{L^2(0, \infty)} \leq \frac{1}{\sqrt{2}} \|f\|_{H_K}$$

が成立する. 本研究ではさらに, 次が成立することに注目する. (証明は [5] で述べる.)

定理 1 $L: H_K \rightarrow L^2(0, \infty)$ は単射かつコンパクトである.

L の随伴作用素を L^* , $K_t(s) := K(s, t)$ とすると, 再生性により

$$L^*F(t) = (L^*F, K(\cdot, t))_{H_K} = (F, LK_t)_{L^2(0, \infty)} = \int_0^\infty F(\xi)H(\xi, t) d\xi$$

と表される. ここで,

$$H_t(\xi) = H(\xi, t) := LK_t(\xi) = \frac{1}{(\xi+1)^2} \left\{ 1 - e^{-t(\xi+1)} (t(\xi+1) + 1) \right\}$$

である. また,

$$LL^*F(p) = \int_0^\infty \frac{F(\xi)}{(p+\xi+1)^2} d\xi \quad (3.1)$$

である.

さて, 作用素 L と, $G \in L^2(0, \infty)$ に対して, $f \in H_K$ を未知函数とする方程式

$$Lf = G \quad (3.2)$$

を考える. ここで G は, Laplace 変換像に相当する函数 F に対して $G(p) = F(p)p$ である. L のコンパクト性から, (3.2) は Hadamard の意味で非適切となり, L は有界逆をもちえない.

非適切問題の直接数値計算に対しては, 通常は正則化法の適用がおこなわれる. そこでは, 正則化パラメータをひとつ固定して得られる正則化方程式の離散化をおこなうが, 正則化解が元の問題の“解”を近似するためには, 正則化パラメータを小さく設定する必要がある. 正則化法を適用した問題は, 任意の正則化パラメータに対して数学的に安定であるが, 特に小さい正則化パラメータに対しては, その離散スキームの数値的安定性は保証されず, 通常の倍精度での数値計算では, 正則化パラメータの設定に際して計算環境に起因する制限を受ける. しかし多倍長計算では, 数値的に不安定なスキームを扱い得ることから, 正則化パラメータを任意に設定しての数値計算が可能となり, 十分に近似精度の高い正則化解の数値計算が期待される.

4 Tikhonov 正則化法による実 Laplace 逆変換の数値計算

本節では, 非適切問題 (3.2) に対して Tikhonov の正則化を考える. すなわち, 正数 $\alpha > 0$ と $G \in L^2(0, \infty)$ に対して, H_K 上の汎函数

$$J_\alpha(f) := \|Lf - G\|_{L^2(0, \infty)}^2 + \alpha \|f\|_{H_K}^2, \quad f \in H_K \quad (4.1)$$

を考える. 定理 1 より, J_α を最小にする元 $f_{\alpha, G} \in H_K$ がただひとつ存在する. この再生核空間における Tikhonov 正則化法では, 正則化解 $f_{\alpha, G}$ の表現が与えられる. 精確には次の定理が成立する.

定理 2 ([12, 13, 9]) 任意の正数 $\alpha > 0$ と $G \in L^2(0, \infty)$ に対して, $f_{\alpha, G} \in H_K$ が唯一つ存在して

$$J_{\alpha}(f_{\alpha, G}) = \inf_{f \in H_K} J_{\alpha}(f)$$

を満たす. さらに, 任意の $\alpha > 0, t \geq 0$ に対して Fredholm 第二種積分方程式

$$(\alpha I + LL^*)H^{\alpha, t} = H_t \quad (4.2)$$

の解 $H^{\alpha, t} = H_{\alpha}(\cdot, t) \in L^2(0, \infty)$ が唯一つ存在して,

$$f_{\alpha, G}(t) = \int_0^{\infty} G(\xi) H_{\alpha}(\xi, t) d\xi \quad (4.3)$$

が成立する.

$G \in L(H_K)$ のときは,

$$\|f_{\alpha, G} - L^{-1}G\|_{H_K} \rightarrow 0, \quad \alpha \rightarrow 0$$

が成立する. 一方, $f^{\dagger} \notin H_K$ に対して $G^{\dagger}(p) := (Lf^{\dagger})(p)$ $p \in L^2(0, \infty)$ とすると, $G^{\dagger}$ に対する正則化解 $f_{\alpha, G^{\dagger}} \in H_K$ は, J_{α} を最小にするという意味で $f^{\dagger}$ の近似を与える.

4.1 第二種方程式の数値計算と逆変換の離散スキーム

定理 2 にもとづく Laplace 逆変換の数値計算について述べる. 積分方程式 (4.2) の解 $H_{\alpha}(\cdot, t)$ は

$$C_l := \left\{ \phi(\xi) \in C^0[0, \infty) : \lim_{\xi \rightarrow \infty} \phi(\xi) \text{ が存在する} \right\}$$

に属する連続関数である. さらに (4.2) より, $H_{\alpha}(\xi, t)$ は ξ について解析的となる.

まず, $\alpha > 0$ を適当にとり, $t \geq 0$ を任意にひとつとめて, Nyström 法により積分方程式 (4.2) の数値解を構成する. 打ち切りパラメータ U, L および離散化パラメータ $N \in \mathbb{N}$ に対して

$$h = \frac{U-L}{N}, \quad x_j = L + jh, \quad a_j = \exp\left(\frac{\pi}{2} \sinh x_j\right), \quad w_j = \frac{\pi}{2} h a_j \cosh x_j \quad (4.4)$$

とする. この記号のもとで, 二重指数型積分公式 [16]

$$\int_0^{\infty} f(\xi) d\xi \approx \sum_{j=0}^N f(a_j) w_j$$

をもちいて (4.2) を離散化すると, 連立一次方程式

$$\alpha H_i^{\alpha, t} + \sum_{j=0}^N \frac{w_j}{(a_i + a_j + 1)^2} H_j^{\alpha, t} = H(a_i, t), \quad 0 \leq i \leq N \quad (4.5)$$

を得る. ここで $H_i^{\alpha, t}$ は $H_{\alpha}(a_i, t)$ 相当値であり, $\{H_i^{\alpha, t} : 0 \leq i \leq N\}$ をもちいて第二種積分方程式 (4.2) の近似解

$$H_{\alpha}^{(N)}(\xi, t) = \frac{1}{\alpha} H(\xi, t) - \frac{1}{\alpha} \sum_{j=0}^N \frac{w_j}{(a_j + \xi + 1)^2} H_j^{\alpha, t}$$

を得る。(4.5)の可解性と Nyström 法の C_l での収束性と誤差評価については [15] に従って調べられる。以上で得られる $H_i^{\alpha,t}$ により, 実 Laplace 逆変換の公式 (4.3) の離散スキームは

$$f_{\alpha,G}^{(N)}(t) = \sum_{j=0}^N G(a_j) w_j H_j^{\alpha,t} \quad (4.6)$$

となる。

4.2 数値計算結果

本節では, $F(p)p \in L^2(0, \infty)$ を満たす典型的な例に対して, (4.5),(4.6) による正則化法の数値計算結果を示す。

Example 1

$$F(p) = \frac{1}{p(p+1)^2} (1 - (p+2)e^{-(p+1)})$$

の場合を考える。この F は

$$f(t) = \begin{cases} -te^{-t} - e^{-t} + 1, & 0 \leq t \leq 1; \\ 1 - 2e^{-1}, & 1 \leq t \end{cases}$$

によって $\mathcal{L}f = F$ で与えられる。特に $f \in H_K$ であることに注意する。

離散化パラメータを $L = -2, U = 2, N = 20$ として, 前節で述べた手法を倍精度数値計算でおこなった結果を図 1 に示す。正則化パラメータ α が小さければ, 正則化解 f_α は厳密解 f の充分な近似を与えていることがわかる。

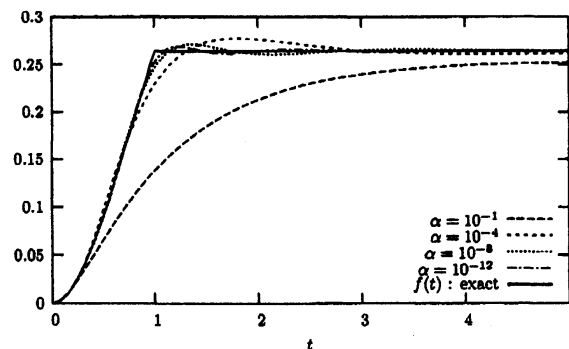


図 1: $f \in H_K$ (Example 1) に対する Tikhonov 正則化解, $L = -2, U = 2, N = 20$, 倍精度

Example 2

$$F(p) = \frac{1}{p} \exp(-p)$$

とする。これは, 階段函数

$$f(t) = \begin{cases} 0, & 0 < t < 1; \\ 1, & 1 < t, \end{cases}$$

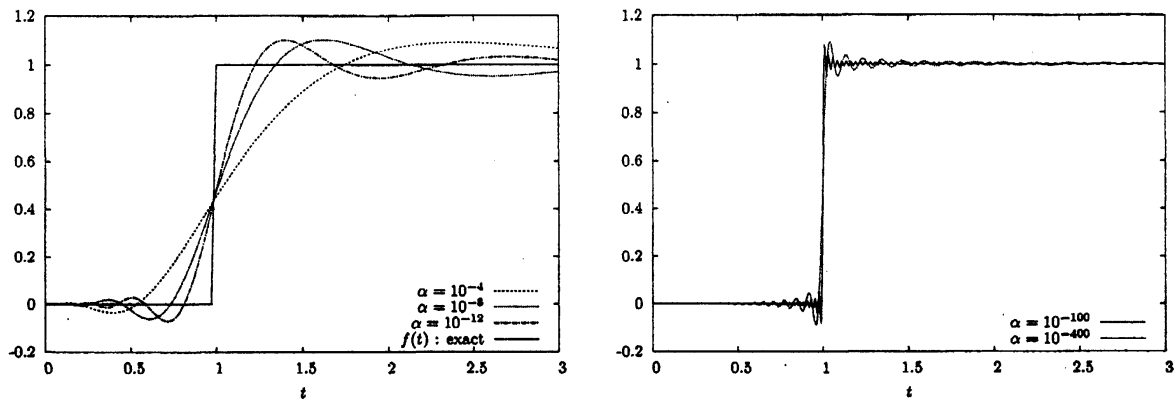
(a) $\alpha = 10^{-4}, 10^{-8}, 10^{-12}$ (b) $\alpha = 10^{-100}, 10^{-400}$

図 2: 階段函数 (Example 2) に対する Tikhonov 正則化解

によって $\mathcal{L}f = F$ で与えられる。ただし $f \notin H_K$ である。この F に対する数値計算結果を図 2 に示す。図 2(a) は、正則化パラメータ $\alpha = 10^{-4}, 10^{-8}, 10^{-12}$ に対する正則化解を、(b) は $\alpha = 10^{-100}, 10^{-400}$ に対する正則化解である。(a) の正則化解に比して (b) の正則化解 f_α は、原函数 f を十分に近似しており、小さい正則化パラメータをもちいる本手法の有効性がわかる。

これらの数値計算は、離散化パラメータを $L = -7, U = 7, N = 7000$ ($h = 1/500$) として、多倍長計算 exflib [2] により 600 桁の精度でおこなった。(本節の以下の例でも同じ離散化パラメータと計算精度をもちいる)。Opteron (2.2GHz) および Athlon64 (2.2GHz) による 28 プロセスの MPI 並列計算で、(4.5) の計算時間は約 4 時間 20 分 (Cholesky 分解に約 1 時間 25 分、2000 点の t に対する後退代入に約 2 時間 55 分)、メモリは合計で 10GB を要した。また (4.6) の数値計算は、600 桁での逐次計算で約 1 分 20 秒を要した。

Example 3

$$F(p) = \frac{1}{p} \left(\exp(-p/2) - \exp(-3p/2) \right)$$

の場合を考える。これは、区間 $[1/2, 3/2]$ の特性函数

$$f(t) = \chi_{[1/2, 3/2]}(t) = \begin{cases} 1, & \frac{1}{2} < t < \frac{3}{2}; \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

の Laplace 変換像である。この場合の計算結果を図 3 に示す。

また、 $\left[\frac{1}{2}, 1\right] \cup \left[\frac{3}{2}, \frac{5}{2}\right] \cup \left[3, \frac{7}{2}\right]$ の特性函数に対する逆変換の数値計算結果を図 4 に示す。

Example 4

$$F(p) = \exp(-p)$$

の場合を考える。これは δ_{t-1} の超函数の意味での Laplace 変換 [14] であることに注意する。この F に対する計算結果を図 5 に示す。

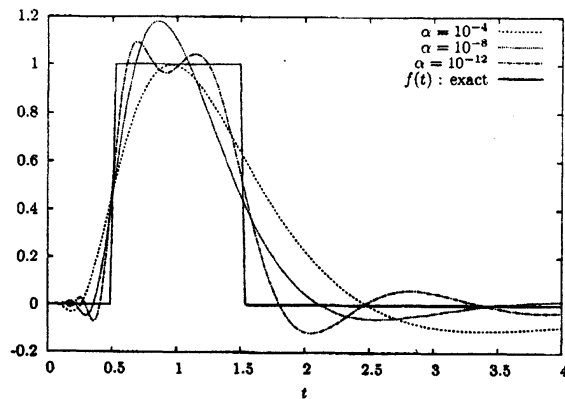
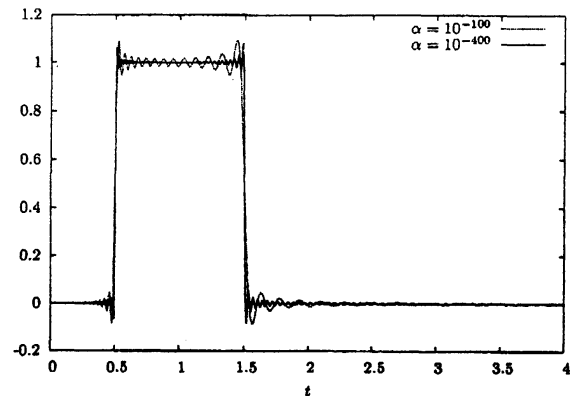
(a) $\alpha = 10^{-4}, 10^{-8}, 10^{-12}$ (b) $\alpha = 10^{-100}, 10^{-400}$

図 3: 特性函数 (Example 3) に対する Tikhonov 正則化解

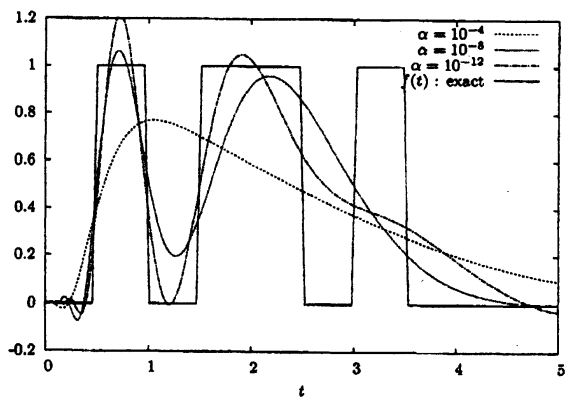
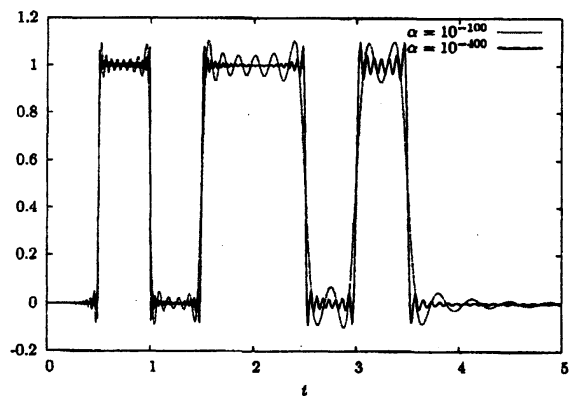
(a) $\alpha = 10^{-4}, 10^{-8}, 10^{-12}$ (b) $\alpha = 10^{-100}, 10^{-400}$

図 4: 特性函数 (Example 3) に対する Tikhonov 正則化解

Example 1(図 1) より, 原函数が $f \in \mathcal{L}(H_K)$ となる場合は, 倍精度計算でも f を十分に近似する計算結果が期待される. 一方, 不連続性などにより原函数が $f \notin \mathcal{L}(H_K)$ となる場合は, 各図の (a) に示すとおり, 倍精度で設定可能な $\alpha \geq 10^{-12}$ の範囲の正則化パラメータでは, 正則化解は原函数の十分な近似とはいえず, 正則化法で高精度近似を実現するには α を小さく, 例えば図 4(b) では 10^{-400} などとする必要がある. IEEE754 倍精度数では, 10 進法で約 16 桁の精度の演算で, 正規化された浮動小数点数で表現し得る範囲はおよそ 10^{-308} から 10^{308} である. そのため, 積分方程式に対して高精度な離散化を達成するための上述の打ち切りパラメータ L, U や, (b) に示した正則化パラメータ 10^{-400} を含む数値計算では, 情報落ち (loss of trailing digits) などの丸め誤差や, オーバーフローやアンダーフローの発生により, 信頼できる数値計算は実現されない. 図 (b) に示す高精度な正則化解の数値計算には, 任意に計算精度が設定可能で, 広い範囲の数を表現可能な多倍長計算が有効である.

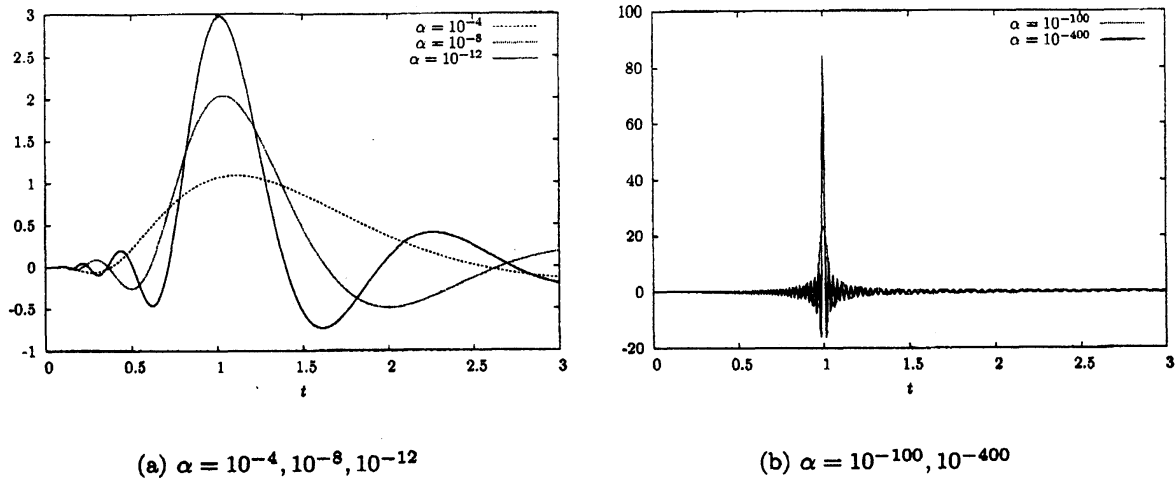


図 5: 超函数の意味での δ_{t-1} の Laplace 変換 (Example 4) に対する Tikhonov 正則化解

5 特異値分解による実 Laplace 逆変換の数値計算

本節では、非適切問題 (3.2) に対して、コンパクト作用素 L の特異値分解を考える。定理 1 より、 L の特異系 $\{\mu_n; \varphi_n, g_n\}_{n=1}^{\infty}$ が存在する [8]。すなわち、

$$L\varphi_n = \mu_n g_n, \quad L^*g_n = \mu_n \varphi_n, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (5.1)$$

特異系により定理 2 の Tikhonov 正則化解は次で表される。

$$f_{\alpha, G}(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\mu_n}{\alpha + \mu_n^2} \left(\int_0^{\infty} G(p) g_n(p) dp \right) \varphi_n(t).$$

また、Picard の定理により、 $\mathcal{L}f = F$, $f \in H_K$ とすると、実 Laplace 逆変換は次で与えられる。

$$f(t) = \mathcal{L}^{-1} F(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\mu_n} \left(\int_0^{\infty} F(p) g_n(p) p dp \right) \varphi_n(t).$$

これより、任意の $G \in L^2(0, \infty)$ に対し、正整数 M を spectral cut-off 数としたときの $Lf = G$ に対する spectral cut-off 正則化解は

$$f_{M, G}(t) = \sum_{n=1}^M \frac{1}{\mu_n} \left(\int_0^{\infty} G(p) g_n(p) dp \right) \varphi_n(t) \quad (5.2)$$

で与えられる。 $G \in L(H_K)$ のときは、 $f_{M, G} \rightarrow L^{-1}G$ ($M \rightarrow \infty$) が成立する。

5.1 L の数値特異値分解と逆変換の離散スキーム

コンパクト作用素の特異系は離散的であり、数値計算による構成することが考えられる [10]。特に (5.2) の計算に十分な個数の特異系を求めるには多倍長計算が有効である [3]。 L の特異系を数値的に構成するために、

$$\mu^2 g = LL^*g, \quad g \in L^2$$

の離散化を考える。ここで、 g は解析的であり、(4.4) のもとで離散化すると、固有値問題

$$\bar{\mu}^2 \tilde{g}_i = \sum_{j=0}^N \frac{w_j}{(a_i + a_j + 1)^2} \tilde{g}_j, \quad 0 \leq i \leq N \quad (5.3)$$

を得る。ただし $(\tilde{g}_0, \dots, \tilde{g}_N)$ は

$$\tilde{g}_0 \geq 0 \quad \text{かつ} \quad \sum_{j=0}^N w_j \tilde{g}_j^2 = 1$$

で正規化されているとする。この数値計算にあたっては、次の定理が有用である。(証明は梶野氏による。)

定理 3 LL^* の固有空間の次元は全て 1 である。

証明 $\mu \neq 0$ に属する特異関数を g とする。Legesgue の定理と $g \in L^2(0, \infty)$ より g は有界連続関数で、

$$g'(p) = -\frac{2}{\mu^2} \int_0^\infty \frac{g(\xi)}{(\xi + p + 1)^3} d\xi$$

より

$$|g'(p)| \leq \frac{\|g\|_\infty}{\mu^2(p+1)^2}$$

であり、 $g' \in L^1(0, \infty) \cap L^2(0, \infty)$ が従う。部分積分により

$$\mu^2 g(p) = \frac{g(0)}{p+1} - \int_0^\infty \frac{g'(\xi)}{\xi + p + 1} d\xi.$$

両辺を p で微分すると

$$\mu^2 g'(p) = -\frac{g(0)}{(p+1)^2} - \int_0^\infty \frac{g'(\xi)}{(\xi + p + 1)^2} d\xi$$

となるので、 g' は次を満たす。

$$(LL^* + \mu^2 I)g'(p) = -\frac{g(0)}{(p+1)^2}.$$

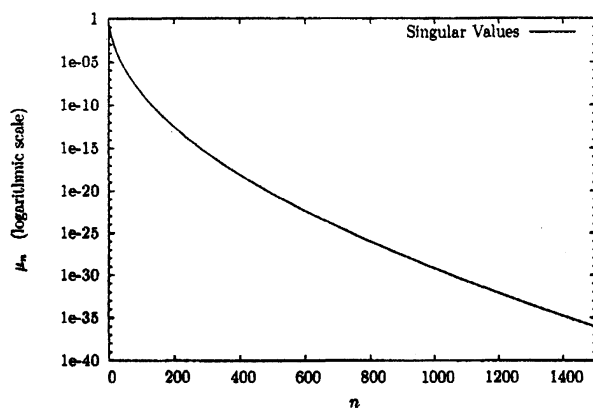
LL^* が $L^2(0, \infty)$ 上でコンパクトかつ $\mu^2 > 0$ であることから、 $(LL^* + \mu^2 I)^{-1}$ は $L^2(0, \infty)$ 上の有界線型写像を与え、 $g' \in L^2(0, \infty)$ および $g \in L^2(0, \infty)$ は $g(0)$ に応じて唯一つに定まる。□

定理 1, 定理 3 から、適当な離散化パラメータのもとで (5.3) の固有値は非負で重複しないことが期待される [1]。これを大きい順に $\bar{\mu}_1, \dots, \bar{\mu}_{N+1}$ とし、 $\bar{\mu}_n$ に属する固有ベクトルを $(\tilde{g}_{n,0}, \dots, \tilde{g}_{n,N})$ とする。このとき、 $\bar{\mu}_n, \tilde{g}_{n,i}$ は、それぞれ $\mu_n, g_n(a_i)$ に相当する。この $\bar{\mu}_n, \tilde{g}_{n,i}$ をもちいて Nyström 法と同様にして、特異関数 φ_n, g_n の近似として次を得る。

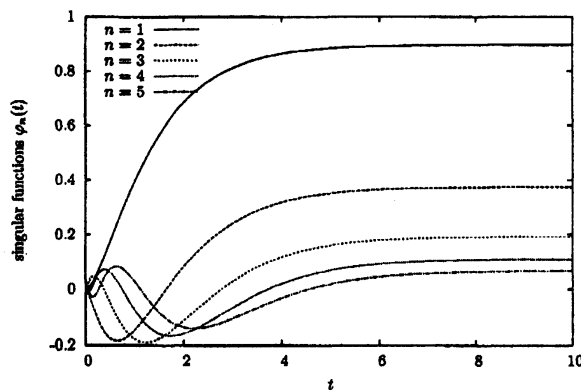
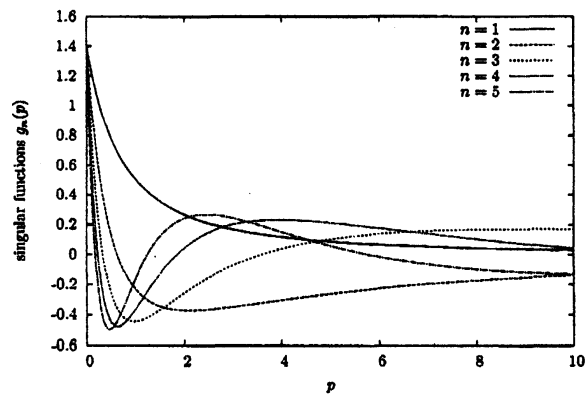
$$\begin{aligned} \varphi_n^{(N)}(t) &= \frac{1}{\bar{\mu}_n} \sum_{j=0}^N H(a_j, t) w_j \tilde{g}_{n,j}, \\ g_n^{(N)}(p) &= \frac{1}{\bar{\mu}_n^2} \sum_{j=0}^N \frac{w_j}{(p + a_j + 1)^2} \tilde{g}_{n,j}. \end{aligned}$$

さらに (5.2) を離散化して、 $Lf = G$ に対する逆変換の離散スキームとして次を得る。

$$f_{M,G}^{(N)}(t) = \sum_{n=1}^M \frac{1}{\bar{\mu}_n^2} \left(\sum_{j=0}^N G(a_j) w_j \tilde{g}_{n,j} \right) \left(\sum_{j=0}^N H(a_j, t) w_j \tilde{g}_{n,j} \right). \quad (5.4)$$



n	Computed μ_n
1	0.63385083662845985406
2	0.26410894288321943850
3	0.13597862611602033697
4	0.07771564257385000623
5	0.04743480283724090860
6	0.03032839290174012146
7	0.02008389262686200914
8	0.01367448966964374462
1500	$9.5760396312657578231 \times 10^{-37}$

図 6: L の特異値に対する数値計算結果(a) $\varphi_n \in H_K$ (b) $g_n \in L^2(0, \infty)$ 図 7: L の特異関数に対する数値計算結果

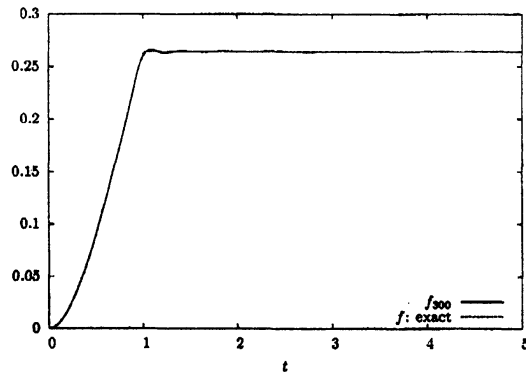
5.2 数値計算結果

本節では (5.3), (5.4) に対する数値計算結果を示す. ここでは, 離散化パラメータを $L = -7, U = 7, N = 12000$ とし, 多倍長計算 exflib により 10 進法で 400 桁の精度でおこなった. 固有値分解に三重対角陰的 QL 法 [11] をもちい, Opteron と Athlon64 により 28 プロセスの並列計算をおこなったところ, 計算時間は約 86 時間 10 分 (三重対角化に 45 時間 40 分, QL 法に 40 時間 30 分), メモリは合計で約 24 GB を要した. 得られた特異値のうち, $\{\mu_n\}_{n=1}^{1500}$ を図 6 に, $H_K, L^2(0, \infty)$ での L の特異関数をそれぞれ図 7(a), (b) に示す.

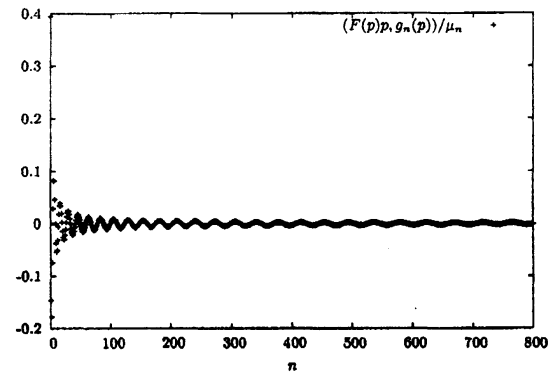
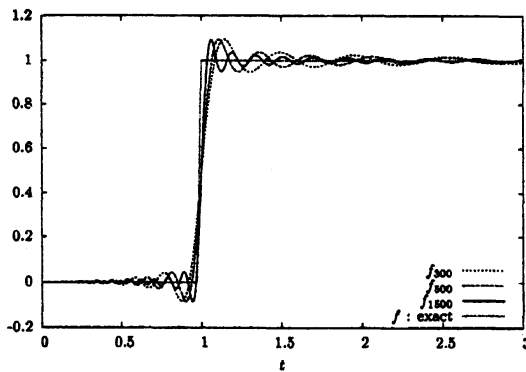
さらに前節の Example 1 から Example 4 に対して, (5.4) による数値計算結果を図 8 から図 12 に示す. それぞれ (a) は $M = 300, 500, 1500$ などでの spectral cut-off 正則化解を示し, (b) は横軸に特異系の番号 n を, 縦軸に

$$\frac{1}{\mu_n} (G, g_n)_{L^2(0, \infty)} = \frac{1}{\mu_n} \int_0^\infty F(\xi) g_n(\xi) \xi d\xi$$

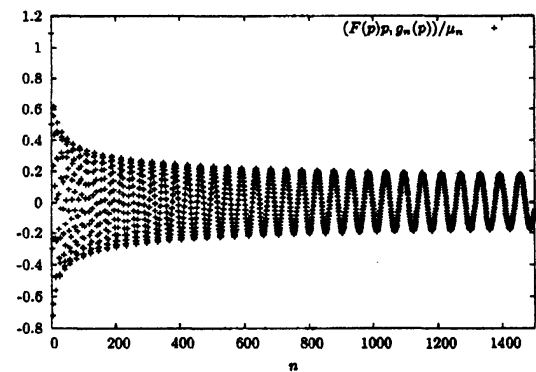
の値を示している.



(a) Spectral cut-off 正則化解

(b) $(F(p)p, g_n(p))/\mu_n$ 図 8: $f \in H_K$ の場合 (Example 1) に対する数値特異値分解

(a) Spectral cut-off 正則化解

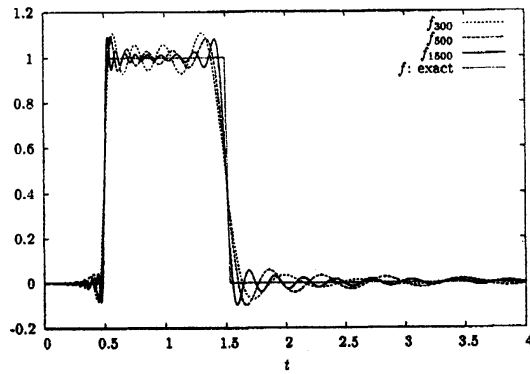
(b) $(F(p)p, g_n(p))/\mu_n$ 図 9: f が不連続性を有する場合 (Example 2) に対する数値特異値分解

また,

$$F(p) = \begin{cases} 0, & 0 < p < 1, 2 < p; \\ 1, & 1 < p < 2 \end{cases}$$

に対して (5.4) で $M = 1500$ とした場合の正則化解を図 13 (a) に示し, この正則化解の Laplace 変換像を図 13(b) に示す.

前節の計算結果と比較すると, Tikhonov 正則化法による離散スキーム (4.6) のほうが計算時間が少なく, 原函数に対する正則化解の近似精度も高い. しかしこの方法では, 求めたい t 毎に $H_\alpha(\cdot, t)$ が必要であり, 連立方程式 (4.5) を解く必要がある. 一方, spectral cut-off 正則化法による離散スキーム (5.4) では, t は $H(\cdot, t)$ の引数としてのみ現れる.



(a) Spectral cut-off 正則化解

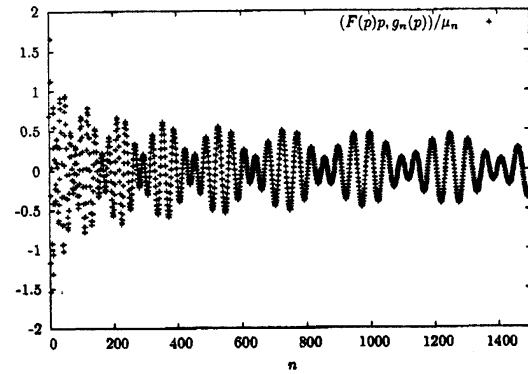
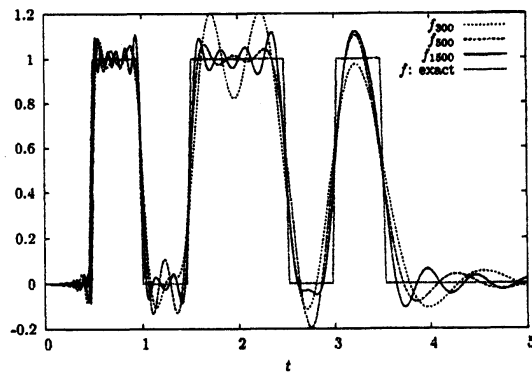
(b) $(F(p)p, g_n(p))/\mu_n$

図 10: 特性函数 (Example 3) に対する数値特異値分解



(a) Spectral cut-off 正則化解

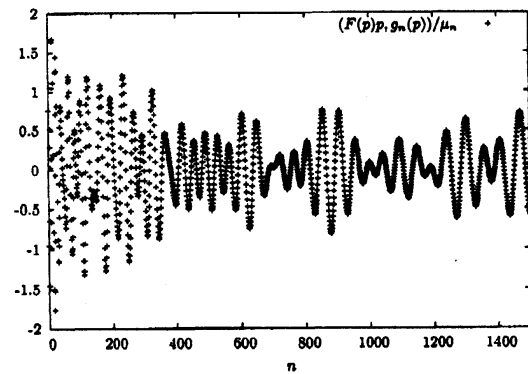
(b) $(F(p)p, g_n(p))/\mu_n$

図 11: 特性函数 (Example 3) に対する数値特異値分解

さらに図 7 の数値特異値分解から, L の特異系に対して次の 2 つが成立することが予想される.

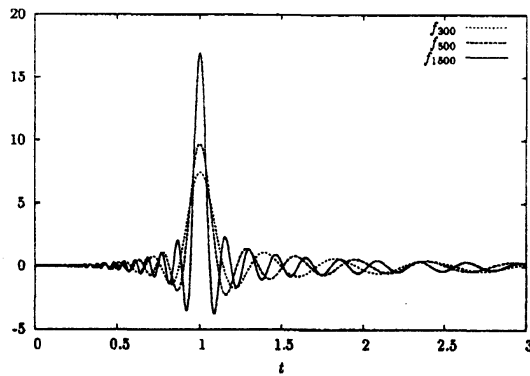
作用素 L の特異系に対する予想

1. $\varphi_n \in C_l$, すなわち φ_n は $t \rightarrow \infty$ で収束して,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |\varphi_n(t)| = \sqrt{2}\mu_n, \quad \text{for all } n.$$

2. g_n は原点で連続で,

$$|g_n(0)| = \sqrt{2}, \quad \text{for all } n.$$



(a) Spectral cut-off 正則化解

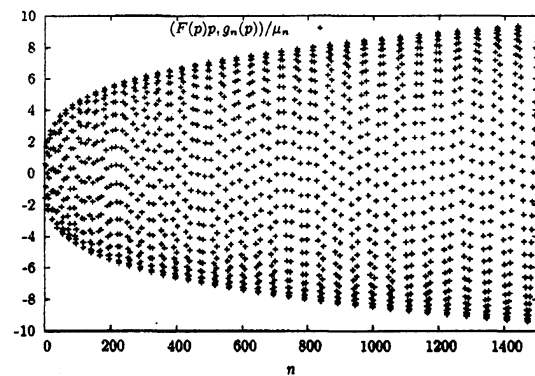
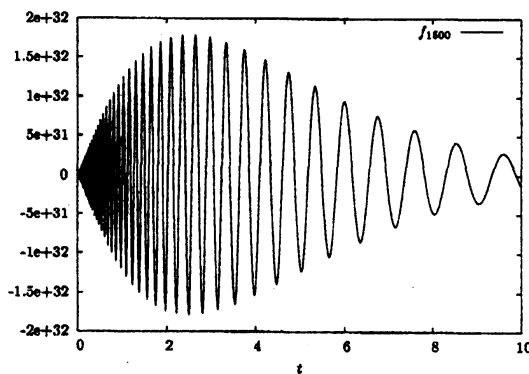
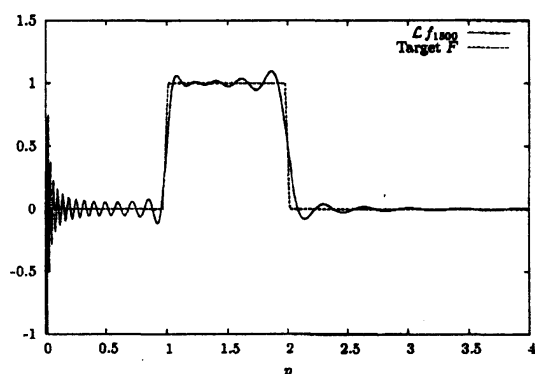
(b) $(F(p)p, g_n(p))/\mu_n$ 図 12: 超関数の意味での δ_{t-1} の Laplace 変換 (Example 4) に対する数値特異値分解(a) Spectral cut-off 正則化解 f_{1500} (b) Laplace Image $\mathcal{L} f_{1500}$

図 13: 特性函数を Laplace 変換像とする場合の数値特異値分解

6 Concluding Remarks

本研究では、実 Laplace 逆変換の問題を、再生核 Hilbert 空間上でのコンパクト作用素による非適切問題とみて、正則化法と多倍長計算をもちいることで、原函数を十分に近似する数値解を構成する手法を示した。提案する手法は、特異性を有する原函数に対しても、正則化パラメータを小さく設定することにより高精度な数値解を与える。正則化パラメータを小さく設定した場合、正則化方程式は数値的に不安定となるが、多倍長計算によりその計算機上での扱いを可能にしている。多倍長計算は、通常の倍精度計算に比して大きな計算時間とメモリ容量を要するが、高速な実装である exflib と並列計算により、現実的な計算時間とメモリ量での数値計算が実現された。

なお、本手法は作用素 $L: H_K \rightarrow L^2(0, \infty)$ に基く手法であり、例えば、一次函数 $f(t) = t$ に対しては

$$L[t](p) = \frac{1}{p} \notin L^2(0, \infty)$$

であるから、提案する逆変換法を適用することはできないことに注意する。

従来、実 Laplace 逆変換が現れる問題においては、その高精度な数値計算の困難さから、Laplace 逆変換を回避することが考えられていた。しかし、本研究で提案する手法を適用することで、より直接的な問題解法の提案が可能になると考えている。

謝辞 本研究の遂行にあたり、齋藤三郎教授に多くのご助言を頂きました。松浦勉氏、澤野嘉宏氏、梶野直孝氏とは有益な議論をして頂きました。また日本学術振興会科学研究費（課題番号 17740057, 16340024）の助成を頂きました。

参考文献

- [1] ATKINSON, K. E.: The numerical solution of the eigenvalue problem for compact integral operators. *Trans. Amer. Math. Soc.* **129** (1967), 458–465.
- [2] FUJIWARA, H., exlib home page, <http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~fujiwara/exlib>.
- [3] FUJIWARA, H.: High-accurate numerical method for integral equation of the first kind under multiple-precision arithmetic. *Theoretical and Applied Mechanics Japan* **52** (2003), 192–203.
- [4] FUJIWARA, H., IMAI, H., TAKEUCHI, T. and ISO, Y.: Numerical treatment of analytic continuation with multiple-precision arithmetic. *Hokkaido Math. J.* (to appear).
- [5] FUJIWARA, H., MATSUURA, T., SAITOH, S. and SAWANO, Y.: The real inversion of the Laplace transform by numerical singular value decomposition. (in preparation).
- [6] IEEE standard for binary floating-point arithmetic : ANSI/IEEE std 754-1985 (1985). Reprinted in *SIGPLAN* **22** (1987), 9–25.
- [7] IMAI, H. and TAKEUCHI, T.: Some advanced applications of the spectral collocation method. *GAKUTO Internat. Ser. Math. Sci. Appl.* **17** (2002), 323–335.
- [8] KRESS, R.: *Linear Integral Equations (1st Ed.)*. Springer-Verlag (1989).
- [9] 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.
- [10] MIKHLIN, S. G. and SMOLITSKIY, K. L.: *Approximate Methods for Solution of Differential and Integral Equations*. American Elsevier (1967).
- [11] PRESS, W. H., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W. T. and FLANNERY, B. P.: *Numerical Recipes in C++*, 2nd ed. Cambridge University Press (2002).
- [12] SAITOH, S.: Approximate real inversion formulas of the Laplace transform. *Far East J. Math. Sci.* **11** (2003), 53–64.
- [13] SAITOH, S.: Approximate real inversion formulas of the Gaussian convolution. *Applicable Analysis* **83** (2004), 727–733.

- [14] シュワルツ L.: 物理数学の方法. 岩波書店 (1966).
- [15] SLOAN, I. H.: Quadrature methods for integral equations of the second kind over infinite intervals. *Math. Comp.* **36** (1981), 511–523.
- [16] TAKAHASI, H. and MORI, M.: Double exponential formulas for numerical integration. *Publ. Res. Inst. Math. Sci.* **9** (1974), 721–74.
- [17] TIKHONOV, A. N. and ARSENIN, V.: *Solutions of ill-posed problems*. Wiley, New York (1977).