

戸田分子方程式のタウ関数による Laplace 変換の連分数展開

大阪大学大学院基礎工学研究科 中村 佳正 (Yoshimasa Nakamura)

本報告では可積分系の応用解析的側面の研究 (Applied Analysis of Integrable Systems) から, 1) 連続時間戸田分子のタウ関数による Laplace 変換の連分数展開, 2) 差分戸田分子のタウ関数による z -変換と離散 Laplace 変換の連分数展開の近似計算とノイズを含んだ離散時間データへの応用について文献 [12] を解説する.

1 戸田分子とそのタウ関数

1次元戸田分子の運動方程式は

$$\frac{dQ_k}{dt} = P_k, \quad \frac{dP_k}{dt} = \exp(Q_{k-1} - Q_k) - \exp(Q_k - Q_{k+1}), \quad k = 1, 2, \dots$$

と表される. Q_k は k 番目の格子点の変位, P_k はその運動量を表す. ただし, $Q_0 = -\infty$ なる境界条件が課されている. 戸田分子は無限自由度可積分系であるが, この境界条件のため安定なソリトン解を持たないばかりか, 格子点は $t \rightarrow \infty$ で自由粒子のように振舞う. 力学的には斥力の相互作用をする半無限個 ($k = 1, 2, \dots$) の格子点を記述している. 有限個の格子点についての1次元戸田分子は Moser(1975, [8]) によって導入され, その後, 行列の固有値計算法の QR アルゴリズムとの類似性が多くの応用数学者の興味をひいた [19]. 時刻 t から $t+1$ の時間発展が QR アルゴリズムの1ステップに一致し, 自由粒子への漸近はアルゴリズムの固有値への収束性に対応する.

なお, 2次元の有限戸田分子

$$\frac{\partial^2 Q_k}{\partial x \partial y} = \exp(Q_{k-1} - Q_k) - \exp(Q_k - Q_{k+1}), \quad k = 1, \dots, N$$

は場の理論にも登場する無限自由度可積分系で Hirota(1988, [4]) によって詳しく調べられた. 「戸田分子」の命名は広田氏によるもので, そのモチーフは2次元の高分子の運動のイメージとのことである.

一方, 上で述べた粒子の漸近的性質により1次元戸田分子には気体分子の運動というもうひとつの描像が可能である. そして, 自由粒子への漸近は解の平衡点への指数関数的収束を意味し, QR アルゴリズムに限らず, 広く数値計算法や最適化アルゴリズムと関係する物理学的背景となっている [13].

以下, 一連の変数変換により1次元無限戸田分子を変形する. まず, $V_k \equiv \exp(Q_k - Q_{k+1})$, $J_k \equiv P_k$ を導入すれば, $V_0 = 0$ を境界条件とする戸田分子の電流電圧表示

$$\frac{dV_k}{dt} = V_k(J_k - J_{k+1}), \quad \frac{dJ_k}{dt} = V_{k-1} - V_k$$

を得る。さらに、変数変換

$$V_k \equiv \frac{d^2 \log \tau_k}{dt^2}, \quad J_k \equiv \frac{d \log(\tau_{k-1}/\tau_k)}{dt}$$

により戸田分子の広田形式

$$\tau_k \frac{d^2 \tau_k}{dt^2} - \left(\frac{d\tau_k}{dt} \right)^2 = \tau_{k-1} \tau_{k+1}, \quad k = 1, 2, \dots$$

を得る。関数 $\tau_k = \tau_k(t)$ が戸田分子のタウ関数である [4]。ここに $\tau_0(t) \equiv 1$ である。なお、 $t \rightarrow \infty$ で $\tau_k(t) \rightarrow 0$ となる。

広田形式についてみれば、ソリトン方程式と同様、戸田分子を積分する手順が明解になる。線形系

$$\frac{dg_k}{dt} = g_{k+1}, \quad g_0 > 0, \quad k = 0, 1, \dots$$

によって定まる Hankel 行列式

$$\tau_k(t) \equiv \begin{vmatrix} g_0 & g_1 & \cdots & g_{k-1} \\ g_1 & g_2 & \cdots & g_k \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ g_{k-1} & g_k & \cdots & g_{2k-2} \end{vmatrix} (t)$$

を考えよう。行列式についての Jacobi の公式

$$\tau_k \begin{vmatrix} g_0 & \cdots & g_{k-2} & g_k \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ g_{k-2} & \cdots & g_{2k-4} & g_{2k-2} \\ g_k & \cdots & g_{2k-2} & g_{2k} \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} g_0 & \cdots & g_{k-1} \\ \vdots & & \vdots \\ g_{k-2} & \cdots & g_{2k-3} \\ g_k & \cdots & g_{2k-1} \end{vmatrix}^2 = \tau_{k-1} \tau_{k+1}$$

により上で定義した $\tau_k(t)$ は戸田分子のタウ関数に他ならないことがわかる。いいかえれば、戸田分子の解は線形系の解 $g_k(t)$ のなす Hankel 行列式により与えられることになる。

アフィン幾何 (双対幾何, 情報幾何) の観点から戸田分子は次のように解釈できる [10]。タウ関数の正值性 (cf. [15]) と正定値対称行列の空間の双対平坦構造より, 変数 $\{g_0, \dots, g_{2k-2}\}$ は $k \times k$ 正定値 Hankel 行列の空間の双対座標であることがわかる。ゆえに, 有限戸田分子は正定値 Hankel 行列の空間上の双対平坦な力学系 (∇ -linear system) を定める。同様な性質をもつ確率分布族の空間上の有限自由度完全積分可能系の例が [9] において論じられている。

2 戸田分子の可積分差分

説明が前後するが, ここでは「可積分系」という用語を何らかの意味で線形化可能な非線形力学系の意味で使っている。ソリトン方程式だけでなく, 有限自由度系や高次元の可

積分系を含んでいる。「可積分な離散時間力学系」も当然線形化可能性をもつものとして特徴づけたい。離散時間系が「可積分」とは奇妙だが作業仮説のつもりで使っている。離散時間可積分系を得るには、連続時間可積分系を線形化したレベルで差分化すればよいであろう。ソリトン方程式や分子型タウ関数をもつ可積分系に対してはタウ関数レベルで差分化することに相当する。これが広田差分 ([6]) の考え方であるが、タウ関数をもたない可積分系にも当然ながら適用可能である [14]。

離散時間可積分系を考える動機としては、まず、可積分系の精度のよい数値計算スキームの定式化があげられる。可積分系といえども任意の初期条件について厳密解を書き下せる訳はなく、精度のよい計算法が必要とされるのは一般の微分方程式と同じである。汎用的な差分法よりむしろ可積分性に注目した差分化が有効となろう。この他、可積分系の世界を広げ多様な非線形現象の記述に役立てること、連続関数について成立する数学的定理の直感的理解を助けることなどがあげられる。しばしば「離散では物事がトリビアルになる」と表現されている。もちろん、連続極限をとって微分積分学のフィールドにもちこむことで初めて理解できる事象もあり、連続系の解析学と離散系の解析学は相互に補うべき関係にあることは言うまでもない。 q -差分など離散系の研究も進展しつつあるが、離散系の解析学、つまり、広田氏が構想する「差分子学」[5] の建設と整備が焦眉の課題である。最近では、高橋氏、松木平氏、時弘氏等による「超離散可積分系」[20] や有限体上の可積分系による符号の復号法の開発 [11] といった従属変数をも離散化した可積分系が発見されたことを付記する。

離散時間可積分系のもうひとつの動機に「可積分系によるアルゴリズム開発」[13] がある。線形レベルでの差分化が保証する指数関数的収束性、可積分性の保存による数値安定性と大きな差分ステップ、このような離散時間可積分系の顕著な性質をアルゴリズムに生かそうというのである。ここでは、線形系の Euler 差分をもとの非線形の変数に書き直した差分系を「離散時間可積分系」とよぼう。広田氏によるタウ関数レベルでの差分化がこのクラスに入る。一般に、同じ連続極限をもつ複数の離散時間可積分系が存在する。そこで、離散時間可積分系の中で、解の漸近的な挙動や平衡点がもとの連続時間可積分系に一致するものを可積分系の「可積分差分, integrable discretization」と名づけることにする。可積分差分は可積分系によるアルゴリズム開発において中心的な役割を果たしている [13]。

戸田分子の可積分差分は以下の手続きで導かれる。タウ関数 $\tau_k(t)$ を定める Hankel 行列の各成分はいずれも $g_0(t)$ とその導関数であることに注意し、微分を Euler の前進差分で置き換える。

$$\frac{dg_0(t)}{dt} \Rightarrow \Delta_n g_0(n) \equiv \frac{g_0(n+1) - g_0(n)}{\varepsilon}$$

ここに ε は任意の正定数、連続時間 t と離散時間 n は $t = n\varepsilon$ の関係にあるものとする。

差分系では通常 $g_0(t) = g_0(n\varepsilon)$ を $g_0(n)$ などと書く. 高階微分は高階差分で置き換え

$$\frac{d^\ell g_0(t)}{dt^\ell} \Rightarrow \Delta_n^\ell g_0(n), \quad \ell = 2, 3, \dots$$

と書く.

この差分化の結果, 連続系のタウ関数 $\tau_k(t)$ の差分近似

$$\begin{aligned} \tau_k(n) &= \begin{vmatrix} g_0(n) & \Delta_n g_0(n) & \cdots & \Delta_n^{k-1} g_0(n) \\ \Delta_n g_0(n) & \Delta_n^2 g_0(n) & \cdots & \Delta_n^k g_0(n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta_n^{k-1} g_0(n) & \Delta_n^k g_0(n) & \cdots & \Delta_n^{2k-2} g_0(n) \end{vmatrix} \\ &= \frac{1}{\varepsilon^{k(k-1)}} \begin{vmatrix} g_0(n) & \cdots & g_0(n+k-1) \\ g_0(n+1) & \cdots & g_0(n+k) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_0(n+k-1) & \cdots & g_0(n+2k-2) \end{vmatrix} \end{aligned}$$

が導入される. 連続の場合と同様に Jacobi の公式より離散時間戸田分子の広田形式

$$\tau_k(n)\tau_k(n+2) - \tau_k(n+1)^2 = \varepsilon^2 \tau_{k-1}(n+2)\tau_{k+1}(n)$$

を得る, ただし, $\tau_0(n) \equiv 1$. 変数変換

$$V_k(n) \equiv \frac{\tau_{k-1}(n+1)\tau_{k+1}(n)}{\tau_k(n)\tau_k(n+1)}, \quad J_k(n) \equiv \frac{1}{\varepsilon} \left(1 - \frac{\tau_{k-1}(n)\tau_k(n+1)}{\tau_{k-1}(n+1)\tau_k(n)} \right)$$

により広田形式から

$$\Delta_n V_k(n) = V_k(n+1)J_k(n+1) - V_k(n)J_{k+1}(n), \quad \Delta_n J_k(n) = V_{k-1}(n+1) - V_k(n),$$

$V_0(n) = 0$, を得るが, これは明らかに連続極限 $\varepsilon \rightarrow 0$ で戸田分子の電流電圧表示に移行する. 任意の $\varepsilon > 0$ について連続系のタウ関数と同様に $n \rightarrow \infty$ で $\tau_k(n) \rightarrow 0$ がわかるので, 以下, この差分系を差分戸田分子 (戸田分子の可積分差分) とよぶことにする.

差分戸田分子を再度変形するため

$$J_k(n) = -\frac{q_k^{(n)} - 1}{\varepsilon}, \quad V_k(n) = \frac{e_k^{(n)}}{\varepsilon^2}$$

なる変数 $\{q_k^{(n)}, e_k^{(n)}\}$ を導入する. この結果, 偏差分方程式

$$q_k^{(n)} e_{k-1}^{(n)} = q_{k-1}^{(n+1)} e_{k-1}^{(n+1)}, \quad q_k^{(n)} + e_k^{(n)} = q_k^{(n+1)} + e_{k-1}^{(n+1)}$$

を得るが, これは Rutishauser[16] によって 1954 年に定式化された有理形関数の極をその Taylor 展開の係数から計算する qd アルゴリズム (quotient difference algorithm, 商差法) の漸化式に他ならない. Rutishauser はさらに qd アルゴリズムの $\varepsilon \rightarrow 0$ での連続

極限を計算して戸田分子の電流電圧表示や Lax 表示までも得ていた [17]. ソリトンを契機に Moser [8] が有限戸田分子を再発見したのは先駆 Rutishauser の約 20 年後である. なお, qd アルゴリズムについては, 例えば, 文献 [3], [21] が, 戸田分子と qd アルゴリズムの関わりについては文献 [6], [18] がある.

差分方程式の解 (漸化式の一般項) $\{q_k^{(n)}, e_k^{(n)}\}$ は差分戸田分子のタウ関数 $\tau_k(n)$ の比によって書き下される. しかし, Hankel 行列式 $\tau_k(n)$ を直接計算する必要はない.

$$q_1^{(n)} = \frac{g_0(n+1)}{g_0(n)}, \quad e_0^{(n)} = 0$$

を初期値として, 漸化式の計算を実行すれば $\{q_k^{(n)}, e_k^{(n)}\}$ は全て逐次的に定まる. これをわかりやすく書いたものが次の qd 表である.

$$\begin{array}{ccccccc} & & & & & & q_1^{(0)} \\ & & & & & & e_1^{(0)} \\ e_0^{(1)} & & & & & & q_1^{(1)} & & & & q_2^{(0)} \\ & & & & & & e_1^{(1)} & & & & e_2^{(0)} \\ e_0^{(2)} & & & & & & q_1^{(2)} & & & & q_2^{(1)} & \cdots \\ & & & & & & e_1^{(2)} & & & & \cdots \\ e_0^{(3)} & & & & & & q_1^{(3)} & & & & \cdots \\ & & & & & & \vdots & & & & \cdots \\ & & & & & & \vdots & & & & \cdots \end{array}$$

(いくつかの仮定のもとで) $n \rightarrow \infty$ とすれば $q_k^{(n)}$ はある定数に, $e_k^{(n)}$ は 0 に収束する. これは差分方程式の解の表現

$$q_k^{(n)} = \frac{\tau_{k-1}(n)\tau_k(n+1)}{\tau_{k-1}(n+1)\tau_k(n)}, \quad e_k^{(n)} = \frac{\tau_{k-1}(n+1)\tau_{k+1}(n)}{\tau_k(n)\tau_k(n+1)}$$

とタウ関数の漸近的性質を用いて証明される [1]. qd アルゴリズムを用いると, 有理形関数について Taylor 係数 $\{g_0(n)\}$ から関数の極や零点を全て同時に計算するだけでなく, $\{q_k^{(0)}, e_k^{(0)}\}$ の定めるある種の 3 重対角行列の固有値を求めることができる [21].

3 戸田分子のタウ関数による Laplace 変換の計算

qd アルゴリズムにはベキ級数の有理関数近似式の計算法としての側面もある. 形式的ベキ級数

$$P = g_0(0) + g_0(1)x + g_0(2)x^2 + \cdots$$

に対して $\tau_k(0) \neq 0$, $\tau_k(1) \neq 0$, $k = 1, 2, \dots$ であれば, かつそのときに限り, 連分数

$$C = \frac{g_0(0)}{1} - \frac{q_1^{(0)}x}{1} - \frac{e_1^{(0)}x}{1} - \frac{q_2^{(0)}x}{1} - \dots$$

を有限の連分数で打ち切れればそれは P の有限次までの近似という意味で C は P を近似する [2]. 具体的には, C の $x=0$ の周りでの Taylor 展開の k -次の打ち切りを W_k と書けば

$$P - W_k = O(x^k)$$

である. ここに, $\tau_k(\ell)$, $\ell = 0, 1$, は $\{g_0(k)\}$ のなす Hankel 行列式で

$$\tau_k(\ell) = \frac{1}{\varepsilon^{k(k-1)}} \begin{vmatrix} g_0(\ell) & \cdots & g_0(\ell+k-1) \\ g_0(\ell+1) & \cdots & g_0(\ell+k) \\ \vdots & & \vdots \\ g_0(\ell+k-1) & \cdots & g_0(\ell+2k-2) \end{vmatrix}$$

と書かれ戸田分子の可積分差分のタウ関数に他ならない. 級数と連分数がともに収束する場合には $P = C$ が成り立つから, タウ関数を通じて差分戸田分子を解くことは, ベキ級数の連分数展開の計算に相当することがわかる. $\{g_0(n)\}$ を解析関数 $g_0(t)$ の時刻 $t = n\varepsilon$ での値とみれば, この展開は ε という任意定数を含んでいる.

以上は Henrici の定理 [2] の差分戸田分子による解釈であるが, これを連続極限, $\varepsilon = \Delta t \rightarrow 0$, で見たらどうであろうか. 連続時間の戸田分子による連分数計算を議論しよう. 極限操作の準備として, 変数 s を

$$e^{-s\varepsilon} \equiv x$$

により導入する. $x=0$ は $s = \infty$ に対応する. このとき, $P \times \varepsilon$, $C \times \varepsilon$ はそれぞれ

$$P\varepsilon = \sum_{n=0}^{\infty} g_0(n)e^{-sn\varepsilon}\varepsilon,$$

$$C\varepsilon = \frac{g_0(0)e^{s\varepsilon}}{\frac{e^{s\varepsilon}-1}{\varepsilon} - \frac{q_1^{(0)}-1}{\varepsilon}} - \frac{\frac{q_1^{(0)}e_1^{(0)}}{\varepsilon^2}}{\frac{e^{s\varepsilon}-1}{\varepsilon} - \frac{e_1^{(0)}}{\varepsilon} - \frac{q_2^{(0)}-1}{\varepsilon}} - \dots$$

と表せる. ここで極限操作 $\varepsilon = \Delta t \rightarrow 0$ を行う. ただし, $n\varepsilon \rightarrow t$ とする. 第1式の右辺は

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_{n=0}^{\infty} g_0(n)e^{-sn\varepsilon}\varepsilon = \int_0^{\infty} g_0(t)e^{-st} dt$$

となり関数 $g_0(t)$ の Laplace 変換に移行する. $g_0(n)$ は $g_0(t)$ の $t = n\varepsilon$ であることを想起せよ. 一方, 定義より

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{q_k^{(0)} - 1}{\varepsilon} = -J_k(0), \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{e_k^{(0)}}{\varepsilon^2} = V_k(0)$$

となる。さらに、

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} q_k^{(0)} = 1, \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{e_k^{(0)}}{\varepsilon} = 0, \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{e^{s\varepsilon} - 1}{\varepsilon} = s$$

を考慮すると第2式より

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} C\varepsilon = \frac{g_0(0)}{s + J_1(0)} - \frac{V_1(0)}{s + J_2(0)} - \frac{V_2(0)}{s + J_3(0)} - \dots$$

が導かれる。特に興味あるのは $P = C$ が連続極限でも成り立つ場合で、このときには、 $G(s)$ を Laplace 変換とする解析関数 $g_0(t)$ について、以下のような、戸田分子のタウ関数による Laplace 変換の漸近展開を得る。

主定理 1) 連続時間戸田分子のある解 $\{V_k(t), J_k(t)\}$ は $s = \infty$ における $G(s)$ の漸近展開

$$\frac{g_0(0)}{s + J_1(0)} - \frac{V_1(0)}{s + J_2(0)} - \frac{V_2(0)}{s + J_3(0)} - \dots$$

を与える。

2) 係数 $\{V_k(0), J_k(0)\}$ は戸田分子の解の $t = 0$ での値で、 $g_0(t)$ とその導関数 $g_j = d^j g_0 / dt^j$ を成分とするタウ関数 $\tau_k(t)$ の対数微分により

$$V_k(t) = \frac{d^2 \log \tau_k(t)}{dt^2}, \quad J_k(t) = \frac{d \log(\tau_{k-1}(t) / \tau_k(t))}{dt}$$

$$\tau_k(t) = \begin{vmatrix} g_0 & \cdots & g_{k-1} \\ \vdots & & \vdots \\ g_{k-1} & \cdots & g_{2k-2} \end{vmatrix} (t)$$

と書き下される。

なお、Laplace 変換が有理関数となる場合は連分数展開は有限で途切れ厳密な Laplace 変換の漸近展開を与える。 $g_0(t) = \sin t$ など $g_0(0) = 0$ のときはこのままでは $g_0(t)$ の Laplace 変換は計算できないが、あらかじめ $g_0(t) + \alpha$, $\alpha \neq 0$, としてからタウ関数を計算し、後で連分数から α/s を減ずればよい。

簡単な例を与えよう。関数 $g_0(t) = (at + b)e^t$ の定める戸田分子の解は

$$V_1(t) = -\frac{a^2}{(at + b)^2}, \quad V_2(t) = 0,$$

$$J_1(t) = -\frac{at + a + b}{at + b}, \quad J_2(t) = -\frac{at - a + b}{at + b}$$

であるから, $g_0(t)$ の Laplace 変換は

$$G(s) = \frac{b}{s - \frac{a+b}{b}} - \frac{\frac{a^2}{b^2}}{s - \frac{-a+b}{b}} = \frac{bs + a - b}{(s-1)^2}$$

となる. 無限連分数が必要なケースとして $g_0(t) = c \exp(-\frac{1}{2}t^2)$ を考えよう.

$$V_k(t) = -k, \quad J_k(t) = t, \quad k = 1, 2, \dots$$

より Laplace 変換の展開

$$\frac{c}{s} + \frac{1}{s} + \frac{2}{s} + \frac{3}{s} + \dots$$

を得る.

4 離散 Laplace 変換の近似計算とその応用

もし関数 $g_0(t)$ のかわりに離散時刻で観測された有限個のデータ列 $g_0(0), g_0(1), \dots, g_0(M)$ が与えられたならば, 2節の差分戸田分子のタウ関数 $\tau_k(n)$ による有限次の連分数が計算される. $2N$ 個のデータからは N 次有理関数が得られる.

まず z -変換の計算について述べよう. z -変換とは, 与えられた離散データ列 $\{c_n \equiv g_0(n), n = 0, 1, \dots\}$ から関数

$$c(z) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^{-n}$$

を計算する手続きである [7]. 前節で述べたベキ級数の連分数展開についての Henrici の定理から直ちに関数 $c(z)$ の連分数表示が得られる. z -変換が一種の離散 Laplace 変換とされる理由も理解できよう. 応用上重要なのは有限個のデータから z -変換 $c(z)$ の近似計算を行う方法である. データ列 $c_0, c_1, \dots, c_{2N-1}$ が与えられたとする. タウ関数の計算で $\tau_{N+1}(0) = 0$ となるから, 近似式

$$c(z) \approx \sum_{n=0}^{2N-1} c_n z^{-n} = \frac{c_0 z}{z - q_1^{(0)}} - \frac{q_1^{(0)} e_1^{(0)}}{z - e_1^{(0)} - q_2^{(0)}} - \dots - \frac{q_{N-1}^{(0)} e_{N-1}^{(0)}}{z - e_{N-1}^{(0)} - q_N^{(0)}},$$

$$q_k^{(0)} = \frac{\tau_{k-1}(0)\tau_k(1)}{\tau_{k-1}(1)\tau_k(0)}, \quad e_k^{(0)} = \frac{\tau_{k-1}(1)\tau_{k+1}(0)}{\tau_k(0)\tau_k(1)},$$

$$\tau_k(\ell) = \frac{1}{\varepsilon^{k(k-1)}} \begin{vmatrix} c_\ell & \cdots & c_{\ell+k-1} \\ \vdots & & \vdots \\ c_{\ell+k-1} & \cdots & c_{\ell+2k-2} \end{vmatrix}$$

を得る. $c(z)$ の N 次有理関数近似であるので, どれだけの数のデータを事前に準備すればよいか考慮しなければならない. $2N$ 個のデータからの N 次有理関数の計算式としては, 右辺は最小 2 乗法に基づいて正規方程式を解いて得られる近似式と全く同じである. qd アルゴリズムを利用して係数を四則演算で決める場合の計算量は, Hankel 行列式の直接的な計算を回避できるため $O(N^2)$ であるが, もし, 正規方程式を Gauss の消去法で解けば $O(N^3)$ の計算が必要であるから, 本節で述べた z -変換の計算法はリアルタイムのデータ処理を要する場合に適している.

次に z -変換とは異なる意味でデータ列の離散 Laplace 変換の計算法を論じる. ε が小さい場合の近似

$$\frac{\exp(s\varepsilon) - 1}{\varepsilon} \approx s$$

に注意して, 離散 Laplace 変換の近似式

$$G(s) \approx R_{N,\varepsilon}(s) \\ \equiv \frac{g_0(0)}{s - \frac{q_1^{(0)} - 1}{\varepsilon}} \frac{\frac{q_1^{(0)} e_1^{(0)}}{\varepsilon^2}}{s - \frac{e_1^{(0)}}{\varepsilon} - \frac{q_2^{(0)} - 1}{\varepsilon}} \cdots \frac{\frac{q_{N-1}^{(0)} e_{N-1}^{(0)}}{\varepsilon^2}}{s - \frac{e_{N-1}^{(0)}}{\varepsilon} - \frac{q_N^{(0)} - 1}{\varepsilon}}, \\ q_k^{(0)} = \frac{\tau_{k-1}(0)\tau_k(1)}{\tau_{k-1}(1)\tau_k(0)}, \quad e_k^{(0)} = \frac{\tau_{k-1}(1)\tau_{k+1}(0)}{\tau_k(0)\tau_k(1)}, \\ \tau_k(n) = \frac{1}{\varepsilon^{k(k-1)}} \begin{vmatrix} g_0(n) & \cdots & g_0(n+k-1) \\ \vdots & & \vdots \\ g_0(n+k-1) & \cdots & g_0(n+2k-2) \end{vmatrix}$$

を得る. 必要とされるデータ数は常に偶数個である. この近似式には打ち切り誤差に加えて差分化誤差がある. 関数 $g_0(t)$ の値が十分な精度で観測されるとすれば, データ数を十分大きくすることで打ち切り誤差を無視でき, $R_{\infty,\varepsilon}(s) = G(s) + O(\varepsilon)$ より, $O(\varepsilon)$ の差分化誤差で Laplace 変換を近似計算できる. もちろん, $G(s)$ が N 次有理関数の場合, 有理関数 $R_{N,\varepsilon}(s)$ は $\varepsilon \rightarrow 0$ で $G(s)$ に収束する. この場合, $2N+1$ 個以上のデータを用意しても途中で qd アルゴリズムが停止して連分数展開が途切れ, 有理関数の次数 N が正しく定まる.

次の例 (図 1) は, 関数

$$g_0(t) = (\cos t - \sin t) \exp(-t)$$

に対し差分間隔 ε を取り替えながら 4 個のデータ $g_0(0), \dots, g_0(3\varepsilon)$ から有理関数 $R_{2,\varepsilon}(s)$ を計算し, 正しい Laplace 変換

$$G(s) = \frac{s}{s^2 + 2s + 2}$$

と比較したものである. $\varepsilon \rightarrow 0$ での $R_{2,\varepsilon}(s)$ の $G(s)$ への収束の様子がわかる.

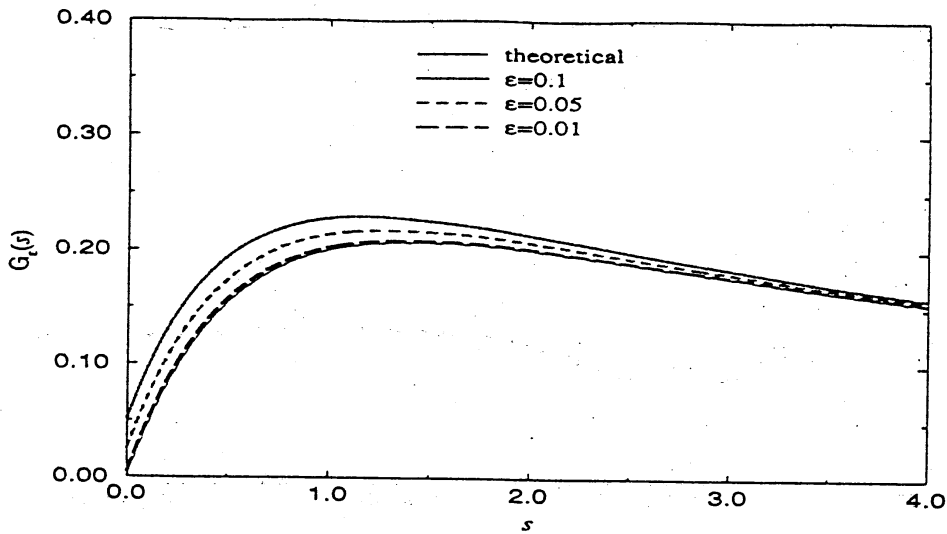


図 1

実際の観測データではノイズなどに起因して途中でタウ関数 $\tau_{N+1}(0)$, および, $e_N^{(0)}$ がゼロになることはなく, qd アルゴリズムが停止しないので, データを増やせばそれだけ有理関数のみかけの次数が増加する. この次数はシステムのパラメータの個数を正しく反映したものとは限らないから, Laplace 変換の近似精度がかえって悪化すると予想される. Laplace 変換 $G(s)$ が N 次有理関数であったとする. ノイズがなければ $2N+2$ 個以上のデータは同じ有理関数 $R_{N,\epsilon}(s)$ を与えるはずであるが, データにノイズや観測誤差が含まれれば, $R_{N,\epsilon}(s)$ は $R_{N-1,\epsilon}(s)$ だけでなく, $R_{N+1,\epsilon}(s)$ よりも精度がよいと考えられるのである. これは, Laplace 変換が意味をもつような定係数線形微分方程式で記述されるシステム, 例えば, 線形分布定数電気回路では, 観測されたノイズ混じりのデータから微分方程式の階数 (回路システムの次数) や微分方程式の係数 (システムパラメータの値) を同定できうることを意味する. これによりシステム同定 (system identification) と呼ばれる一種の逆問題の新しい解法が与えられたことになる.

以下の例はある電気回路において観測された実データである. 図 2 は直流のステップ入力に対するインダクタンス L の両端電圧の変化のグラフである. 図 3 の実線はその平均化 (実データ 50 個ずつ単純平均をとり凸凹を均したもの) を表す. これをデータ列 $\{g_0(n), n = 0, 1, \dots\}$ と考える. 次に, 差分間隔を $\epsilon = 4.3 \times 10^{-8}$ に設定する. ノイズが混じったデータの場合, あまり差分間隔が小さすぎるとノイズの影響を大きく感知し過ぎる. そして, 最初から数個のデータを用いてデータ列の近似 Laplace 変換を計算し, 得られた有理関数を逆 Laplace 変換して平均化されたデータ列と比較する. ただし, 逆 Laplace 変換は有理関数の部分分数展開により, 比較は差の 2 乗積分の大小で行う. この場合, Laplace 変換は回路のリアクタンス関数とよばれる有理関数で, その次数は回路システムの次数に一致し, 係数にシステムパラメータの値の情報を含んでいる.

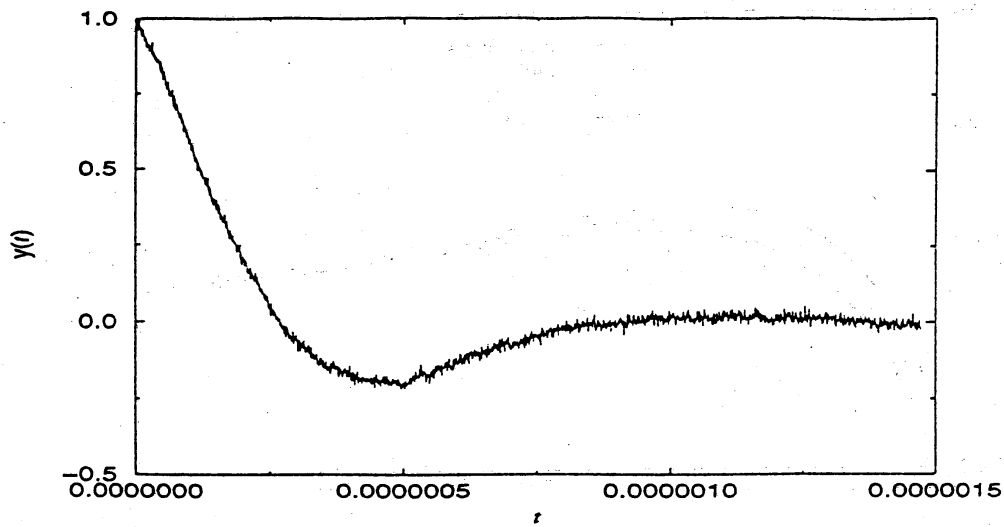


図 2

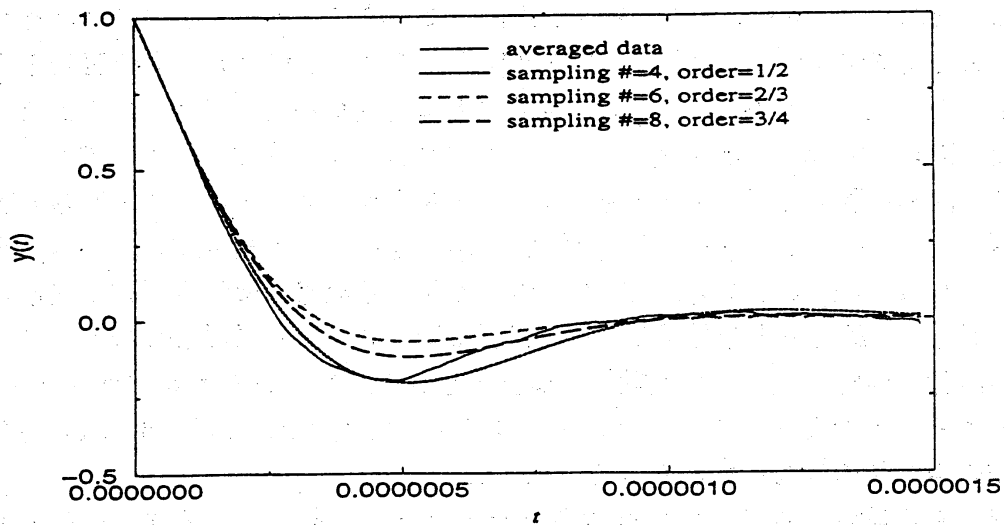


図 3

図 3 の破線はそれぞれデータ数を 4, 6, 8 有理関数の次数を 2, 3, 4 として計算した逆 Laplace 変換のグラフである。この結果、システムの次数は 2 と推定される。これは図 1 のデータを 1 段のはしご型線形 RLC 回路から採ったことを正しく同定している。図 4 は実データを採取した RLC 回路である。R は抵抗器、C はキャパシタを表す。

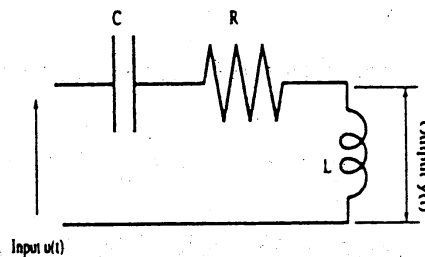


図 4

グラフにおいて近似の精度が十分でない理由として、ノイズの存在以外にもインダクタンス L が本当に線形で定数の特性をもつかどうかあげられよう。電気回路では市販のインダクタンスがこのような理論特性を持ち得ないことはよく知られている。実際、インダクタンスを除いた多段の線形 RC はしご型回路では、ノイズの入ったデータから回路システムの次数（回路素子 R と C の個数）だけでなく、素子の値までもカタログ値の $\pm 5\%$ の範囲に同定することができる。線形回路理論が有効な範囲で差分戸田分子による回路同定は一定の成果を納めたといえよう。なお、戸田方程式は物理的にはある種のはしご型非線形 LC 回路の方程式とみなせるが、それはこの線形回路同定の話とは無関係である。

5 おわりに

以上が文献 [12] のあらましである。qd アルゴリズムによるベキ級数の連分数展開と qd アルゴリズムの連続極限が可積分系戸田分子方程式になることを出発点に、与えられた解析関数の Laplace 変換の漸近展開が戸田分子のタウ関数を用いて書き下されうることが明らかになった。また、与えられた有限個のデータによる z -変換と離散 Laplace 変換の差分戸田分子による近似計算法が定式化された。

ベキ級数の連分数展開が Jacobi や Stieltjes に遡るのは小松氏が喝破した通りである。しかし、それでもなお「なぜ戸田分子が Laplace 変換を記述するのか？」という河合氏や大森氏の根源的な問いには十分には答えられない。qd アルゴリズムを経由せず戸田分子によって直接主定理を証明できないかという竹井氏の疑問も同様である。また、qd アルゴリズムによるベキ級数の連分数展開には戸田分子の可積分差分に起因する任意定数 ϵ が含まれているが、青本氏からこのパラメータの意味を明らかにせよとの問いが寄せられた。形式的連分数展開はいつ漸近展開になるのかという問題も含めて残された課題は少なくない。

本報告の結果の一部は雨谷昭弘氏（同志社大学）長岡直人氏（同志社大学）野中大介氏（ヤマハ発動機）矢崎健介氏（ローム）渡辺賢治氏（日本オラクル）等の協力と文部省科学研究費 08211106, 08874013, 09440077, 09559011 の援助を得てなされた。ここに感謝の念を表したい。

参考文献

- [1] P. Henrici, *Applied and Computational Complex Analysis Vol. 1*, John Wiley & Sons, New York, 1974.
- [2] P. Henrici, *Applied and Computational Complex Analysis Vol. 2*, John Wiley & Sons, New York, 1977.
- [3] P. ヘンリッチ, 数値解析の基礎, 一松, 平本, 本田訳, 培風館, 1973.
- [4] R. Hirota, Toda molecule equations, in: *Algebraic Analysis Vol. 1*, M. Kashiwara and T. Kawai eds., Academic, Boston, 1988, pp. 203–216.
- [5] 広田 良吾, 離散的時空におけるソリトン—差分学入門—, 数理科学, **405**(1997) 28–32.
- [6] R. Hirota, S. Tsujimoto and T. Imai, Difference scheme of soliton equations, in: *Future Directions of Nonlinear Dynamics in Physical and Biological Systems*, P. L. Christiansen, J. C. Eilbeck and R. D. Parmentier eds., Plenum, New York, 1993, pp. 7–15.
- [7] A. J. Jerri, *Linear Difference Equations with Discrete Transform Methods*, Kluwer, Dordrecht, 1996.
- [8] J. Moser, Finitely many points on the line under the influence of an exponential potential -An integrable system, in: *Dynamical Systems, Theory and Applications*, J. Moser ed., Lec. Notes in Phys. 38, Springer-Verlag, Berlin, 1975, pp. 467–497.
- [9] Y. Nakamura, Gradient systems associated with probability distributions, *Japan J. Indust. Appl. Math.* **11**(1994) 21–30.
- [10] Y. Nakamura, A tau-function for the finite Toda molecule, and information spaces, in: *Symplectic Geometry and Quantization*, Y. Maeda, H. Omori and A. Weinstein eds., Contemp. Math., Vol. 179, Amer. Math. Soc., Providence, 1994, pp. 205–211.
- [11] Y. Nakamura, The BCH-Goppa decoding as a moment problem and a tau-function over finite fields, *Phys. Lett. A* **223** (1996) 75–81.
- [12] Y. Nakamura, Calculating Laplace transforms in terms of the Toda molecule, preprint, 1996.
- [13] 中村 佳正, 戸田分子・Laplace 変換・BCH-Goppa 復号法—可積分系によるアルゴリズム開発は可能か—, 数理科学, **405**(1997) 13–19.
- [14] Y. Nakamura, K. Kajiwara and H. Shiotani, On an integrable discretization of the Rayleigh quotient gradient system and the power method with the optimal shift, preprint, 1996.
- [15] Y. Nakamura and Y. Kodama, Moment problem of Hamburger, hierarchies of integrable systems, and the positivity of tau-functions, *Acta. Appl. Math.* **39**(1995), 435–443.
- [16] Von H. Rutishauser, Der Quotienten-Differenzen-Algorithmus, *Z. angew. Math. Physik* **5**(1954), 233–251.
- [17] Von H. Rutishauser, Ein infinitesimales Analogon zum Quotienten-Differenzen-Algorithmus, *Arch. Math.* **5**(1954), 132–137.

- [18] K. Sogo, Toda molecule equation and quotient-difference method, *J. Phys. Soc. Japan* **62**(1993), 1081–1084.
- [19] W.W. Symes, The QR algorithm and scattering for the finite nonperiodic Toda lattice, *Physica* **4D**(1982), 275–280.
- [20] 高橋 大輔, ソリトン・セルオートマトン, 数理科学, **405**(1997) 33–39.
- [21] 戸川 隼人, マトリクスの数値計算, オーム社, 1971.