

再生核の理論の数値解析と逆問題への応用

群馬大工 齋藤三郎
Saburou Saitoh

Department of Mathematics, Graduate School of Engineering,
Gunma University, Kiryu 376-8515, JAPAN
e-mail : kbdmm360@yahoo.co.jp

概要

2004 年 論文 [51] で 再生核の理論をチコノフ正則化法に応用して、チコノフ正則化法における極値関数の新しい表現公式を導いて以来、共同研究者の松浦勉氏とともに、いろいろな問題の解を計算機に載せて、具体的に計算機画面上に実現する研究を行ってきた。難問とされてきた熱伝導における逆問題の解を 計算機画面上に実現することにも成功した。そこで、いろいろな微分方程式の解の構成方法なども導いてきた: すなわち、ポアソン方程式の解、デリクレ問題の解、特異積分方程式の解法、変数係数の線形微分方程式の解 の解法などである。

有名な難問の例である ラプラス変換の実逆変換の構成 にも、藤原宏志、澤野嘉宏氏などの協力で成功している。特に この難解な場合には 無限精度の概念に基づく、多倍長の概念を実現する藤原氏の強力な計算法 が必要である事が明らかになってきている。そこで、これら一連の研究の背景と具体的な成果を報告して、専門家の助言を求めた。

最近では、連立非線形方程式の解の 具体的な表現公式 を導く事にも、博士課程の学生 山田正人氏と成功しているので、それらの成果についても [52,53] に基づいて報告し、いろいろな助言を頂いた。

詳しい内容については 文献の論文を参照して下さい。ここでは、一般論の数学的な理論部分を主に述べる。

1 再生核ヒルベルト空間

まず、ヒルベルト空間の枠内で線形写像を考えると、自然に再生核の理論に結び付く事実をみ、再生核の理論が基本的な数学であることを示す。

$\mathcal{F}(E)$ を任意の集合 E 上で定義されるすべての複素数値関数の作る線形空間とする。 \mathcal{H} を内積 $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{H}}$ が入っているヒルベルト空間とする。 $h :$

$E \rightarrow \mathcal{H}$ を \mathcal{H} に値をとる E 上の任意に固定された写像とする. このとき, 次で定義される $f \in \mathcal{H}$ から $\mathcal{F}(E)$ への線形写像 L を考えよう:

$$f(p) = (Lf)(p) = (f, \mathbf{h}(p))_{\mathcal{H}}. \quad (1)$$

線形写像 (1) における最も基本的な問題は, $f(p)$ が L の像であることの特徴づけで, 次に入力 (原因) f と出力 (結果) $f(p)$ の間の関係であろう.

これらの問題を解く鍵は $E \times E$ 上で定義される複素数値関数

$$K(p, q) = (\mathbf{h}(q), \mathbf{h}(p))_{\mathcal{H}} \quad (2)$$

を考えることである. $\mathcal{R}(L)$ で \mathcal{H} の L による像である E 上の関数の全体を表す. そこに

$$\|f\|_{\mathcal{R}(L)} = \inf\{\|f\|_{\mathcal{H}}; f = Lf\} \quad (3)$$

で定義されるノルムを導入すると, このノルムから導かれる内積によって像関数空間はヒルベルト空間を構成する. 正確には

定理 1 (3) で $\mathcal{R}(L)$ にノルムが定義され, ノルムから内積も定義されて空間 $[\mathcal{R}(L), (\cdot, \cdot)_{\mathcal{R}(L)}]$ はヒルベルト空間になる. (2) で定義される $K(p, q)$ は次の性質をもつ.

- (i) 任意の $q \in E$ に対して, $K(p, q)$ は p の関数として $\mathcal{R}(L)$ に属する,
- (ii) 任意の関数 $f \in \mathcal{R}(L)$ と任意の $q \in E$ に対して, $f(q) = (f(\cdot), K(\cdot, q))_{\mathcal{R}(L)}$. ここで, (i) と (ii) を満たす関数 $K(p, q)$ は $\mathcal{R}(L)$ において一意に定まる. さらに L が \mathcal{H} から $\mathcal{R}(L)$ の上への等距離写像になるための完全条件は $\{\mathbf{h}(p); p \in E\}$ が \mathcal{H} において完全であることである.

関数 $K(p, q)$ の性質 (i) と (ii) はヒルベルト空間 $\mathcal{R}(L)$ における $K(p, q)$ の再生性と呼ばれ, この関数 $K(p, q)$ を再生核という. これは (ii) で内積の中の関数 f が内積をとった後にそのまま出てきているためである. このような再生核を持つヒルベルト空間を再生核ヒルベルト空間といい, RKHS (reproducing kernel Hilbert space) と略記する. 実は再生核を持つヒルベルト空間は定理 1 におけるように線形写像とは無関係に二次正定符号関数という性質 ((2) はそういう性質を持っている) を持つ核 $K(p, q)$ 自身からそれを再生核に持つヒルベルト空間として唯一つに固有に定ま

る. $K(p, q)$ から唯一つに定まるので H_K と記すと (1) の像関数空間は (2) の関数によって唯一つに定まる再生核を持つヒルベルト空間として $\mathcal{R}(L) = H_K$ として特徴づけられる. この視点から定理 1 は次のように述べられる.

定理 2 線形写像 (1) における \mathcal{H} の像関数空間 $\{f(p)\}$ は (2) で定義される $K(p, q)$ を再生核に持つヒルベルト空間 H_K として特徴づけられる.

このとき不等式 $\|f\|_{H_K} \leq \|f\|_{\mathcal{H}}$ が成り立つ. さらに, 任意の $f \in H_K$ に対して, 次の性質を持つ唯一つの \mathcal{H} の元 f^* が存在する:

$$E \text{ 上 } f(p) = (f^*, h(p))_{\mathcal{H}} \quad \text{かつ} \quad \|f\|_{H_K} = \|f^*\|_{\mathcal{H}}.$$

線形写像の像が再生核を持つヒルベルト空間として特徴づけられる事実は, 再生核の理論が線形代数学のように基本的で普遍的な数学の基礎になることを示している.

線形写像の逆写像

線形写像 (1) の逆写像を考えよう. 解析学における多くの場合に成り立つ逆変換公式を導くためにヒルベルト空間 \mathcal{H} と H_K が T と E 上の積分で次のように表現されているとする: $\mathcal{H} = L_2(T, dm)$, $H_K \subset L_2(E, d\mu)$.

(それぞれ $dm, d\mu$ 可測集合 T, E 上の $dm, d\mu - L_2$ 可測関数の作るヒルベルト空間.) それゆえに, 積分変換

$$f(p) = \int_T F(t) \overline{h(t, p)} dm(t) \quad (4)$$

を考える. ここで, $h(t, p)$ は $T \times E$ 上 $h(\cdot, p) \in L_2(T, dm)$ を満たす複素数値関数で, F は $F \in L_2(T, dm)$. 対応する再生核は

$$K(p, q) = \int_T h(t, q) \overline{h(t, p)} dm(t) \quad \text{on } E \times E.$$

再生核ヒルベルト空間 H_K は $L_2(E, d\mu)$ のノルムでノルムが表現されている. これらの条件の下で次を得る.

定理 3 次を満たす E の近似列 $\{E_N\}_{N=1}^{\infty}$ がとれるとする: (a) $E_1 \subset E_2 \subset \dots \subset \dots$, (b) $\bigcup_{N=1}^{\infty} E_N = E$, (c) $\int_{E_N} K(p, p) d\mu(p) < \infty$, ($N = 1, 2, \dots$).

そのとき, $f \in H_K$ が任意の N に対して $\int_{E_N} f(p) h(t, p) d\mu(p) \in L_2(T, dm)$ ならば,

$$\left\{ \int_{E_N} f(p) h(t, p) d\mu(p) \right\}_{N=1}^{\infty} \quad (5)$$

は, (4) に対する 定理 2 の F^* に $L_2(T, dm)$ ノルムの意味で収束する.

線形システムの同定

定理 2 において, 逆に等距離写像 (線形の仮定は不要) \tilde{L} が E 上で定義された再生核 $K(p, q)$ を持つ再生核ヒルベルト空間 H_K とヒルベルト空間 \mathcal{H} の間にあれば, 等距離写像と再生核を用いて 線形システム関数 (\tilde{L} の生成ベクトルと呼ばれる)

$$g_{\tilde{L}}(q) = \tilde{L}K(\cdot, q) \quad (6)$$

で等距離写像 \tilde{L} の逆写像は線形写像になり, それは次のように表現できる:

定理 4

$$f(p) = (f, g_{\tilde{L}}(p))_{\mathcal{H}}, \quad \text{for } f \in \mathcal{H} \quad (7)$$

に対して $\|f\|_{H_K} = \|f\|_{\mathcal{H}}$. 線形写像 (7) は等距離写像 \tilde{L} の逆写像を与え, $\{g_{\tilde{L}}(p); p \in E\}$ は \mathcal{H} で完全である.

ここで考えられた逆写像の公式 定理 3 は, (4) のとき, 積分方程式の基本形であるいわゆるフレッドホルムの第一種積分方程式において, 新しい視点と解法を与える. この解は, 次の特徴を持っている.

- (1) 個々の積分核によって固有に定まる像空間である再生核ヒルベルト空間 H_K を用いて求められる.
- (2) 一般には, もとの空間 \mathcal{H} での, ノルム収束の形で求められる.
- (3) 最小ノルムを持つ f^* が求められる.
- (4) 不適切な問題が適切な問題の形で求められる.

一般に, 線形問題で, 解の存在が言えないとき, 解の一意性が成り立たないとき, そして逆写像の連続性が成り立たないとき, 問題は何れの場合にもアダマールの意味で不適切であるという. そして線形写像 (1) は不適切問題の典型的な場合とされてきた. ここでの像関数空間の特徴づけは, 解の存在を保証し, 定理 2 で述べられているように最小ノルムを持つ逆と等距離同型写像であることは, 最小ノルムをもつ解を考えれば, 解の一意性が言え, 逆写像の連続性が保証されることを示している. しかし, これはあくまでも数学的, 理論的な視点であって, 自然現象が線形システムとして記述されていると仮定しても観測量は離散な有限個の点での値であることが多いので, 具体的な扱いにおいては, 困難な問題に直面する. それで, 逆問題における不適切問題 (ill-posed problem) という研究分野がある. 特に, 実際に現れる線形システムの場合には, データに誤差などが含まれるので, 数値解析的な扱いには以下の考え方が必要である.

関数の最良近似

まず、以下、 L を再生核ヒルベルト空間 H_K から任意のヒルベルト空間 \mathcal{H} への有界線形作用素とする。次の近似問題は、最小 2 乗近似として古くから考えられているように極めて基本的な問題である： \mathcal{H} の任意の元 \mathbf{d} に対して

$$\inf_{f \in H_K} \|Lf - \mathbf{d}\|_{\mathcal{H}}. \quad (8)$$

しかしながら、この問題は無限次元のヒルベルト空間の場合には Moore-Penrose 一般逆の考えに至るが、一般逆は定理 1 の方法で次のように複雑な構造を持つことが分かる：

定理 5 ([17]) \mathcal{H} の元 \mathbf{d} に対して、

$$\inf_{f \in H_K} \|Lf - \mathbf{d}\|_{\mathcal{H}} = \|L\tilde{f} - \mathbf{d}\|_{\mathcal{H}} \quad (9)$$

を満たす H_K の関数 \tilde{f} が存在するための完全な条件は

$$k(p, q) = (L^*LK(\cdot, q), L^*LK(\cdot, p))_{H_K}$$

を再生核に持つ再生核ヒルベルト空間 H_k に対して、

$$L^*\mathbf{d} \in H_k \quad (10)$$

となることである。さらに、(9) を満たす関数 \tilde{f} が存在するとき、 H_K の中で最小のノルムを持つ関数が唯一存在して、その関数 $f_{\mathbf{d}}$ は次のように表される：

$$f_{\mathbf{d}}(p) = (L^*\mathbf{d}, L^*LK(\cdot, p))_{H_k} \quad \text{on } E. \quad (11)$$

ここで、 L の共役作用素 L^* は、 $(L^*\mathbf{d})(p) = (L^*\mathbf{d}, K(\cdot, p))_{H_K} = (\mathbf{d}, LK(\cdot, p))_{\mathcal{H}}$ に注意すると、知られている $\mathbf{d}, L, K(p, q)$ と \mathcal{H} で表されていることが分かる。定理 5 から分かるように再生核ヒルベルト空間上の有界線形作用素を考えると、(9) における最良近似問題の解の存在性をある程度具体的に論じられ、極値関数が存在する時にはその表現がきちんと与えられることが分かり、再生核の理論が近似問題において基本的な役割を果たすことが分かる。また再生核ヒルベルト空間上の有界線形作用素の共役作用素が具体的な表現を持つことは重要な意味を持つ。関数 $f_{\mathbf{d}}$ が方程式 $Lf = \mathbf{d}$ における Moore-Penrose 一般逆 $L^\dagger \mathbf{d}$ である。定理 5 から、条件 (10) の判

定が難しいから Moore-Penrose 一般逆は \mathbf{d} に誤差や雑音が含まれるような実際的な場合には好ましくないことが分かる。そこで、Tikhonov 正則化法の考えをとり入れよう。

スペクトル解析

[6] にしたがって、良く研究されている必要な部分を準備しておこう。コンパクト作用素 L の場合には [7] を参照。

$\{E_\lambda\}$ を自己共役作用素 L^*L のスペクトル族とする。 L^*L が連続な逆を持つとき、

$$(L^*L)^{-1} = \int \frac{1}{\lambda} dE_\lambda.$$

このとき、Moore-Penrose 一般逆 (11) は

$$f_{\mathbf{d}}(p) = \int \frac{1}{\lambda} dE_\lambda L^* \mathbf{d}.$$

$\mathcal{R}(L)$ が閉でなく、 $\mathbf{d} \notin \mathcal{D}(L^\dagger)$, すなわち、 $Lf = \mathbf{d}$ が Moore-Penrose 一般逆を持たないとき、 $\alpha > 0$ をとり

$$f_{\mathbf{d},\alpha}(p) = \int \frac{1}{\lambda + \alpha} dE_\lambda L^* \mathbf{d}$$

を定義する。このとき、 $\|\mathbf{d} - \mathbf{d}^\delta\|_{\mathcal{H}} \leq \delta$ を満たす \mathbf{d}^δ に対して、 $f_{\mathbf{d},\alpha}$ と

$$f_{\mathbf{d}^\delta,\alpha}^\delta(p) = \int \frac{1}{\lambda + \alpha} dE_\lambda L^* \mathbf{d}^\delta$$

を次のように評価できる：

定理 6 $\mathcal{D}(L^\dagger)$ の元 \mathbf{d} に対して

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} (L^*L + \alpha I)^{-1} L^* \mathbf{d} = \lim_{\alpha \rightarrow 0} f_{\mathbf{d},\alpha} = f_{\mathbf{d}}. \quad (12)$$

さらに、

$$\|Lf_{\mathbf{d},\alpha} - Lf_{\mathbf{d}^\delta,\alpha}^\delta\|_{\mathcal{H}} \leq \delta, \quad \|f_{\mathbf{d},\alpha} - f_{\mathbf{d}^\delta,\alpha}^\delta\|_{H_K} \leq \frac{\delta}{\sqrt{\alpha}}.$$

定理 7 $\|\mathbf{d} - \mathbf{d}^\delta\|_{\mathcal{H}} \leq \delta$ を満たす $\mathcal{D}(L^\dagger)$ の元 \mathbf{d}^δ に対して関数 $f_{\mathbf{d}^\delta,\alpha}^\delta$ は次の極値問題の一意的解である：

$$\inf_{f \in H_K} \{ \alpha \|f\|_{H_K}^2 + \|\mathbf{d}^\delta - Lf\|_{\mathcal{H}}^2 \}. \quad (13)$$

もしも $\alpha = \alpha(\delta)$ が

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \alpha(\delta) = 0, \quad \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\delta^2}{\alpha(\delta)} = 0$$

を満たせば、このとき次が成り立つ：

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} f_{\mathbf{d}, \alpha}^{\delta} = f_{\mathbf{d}} = L^{\dagger}(\mathbf{d}). \quad (14)$$

観測には誤差が含まれるから、このような評価式は重要である。

Tikhonov 正則化法における極値関数の表現

我々の関心は抽象的な表現をもつ Tikhonov 正則化法における極値関数 $f_{\mathbf{d}, \alpha}$ や $f_{\mathbf{d}, \alpha}^{\delta}$ の具体的な求め方である。現在までのところ、 L がコンパクト作用素の場合のみ 極値関数の表現が特異値分解を用いて与えられているだけで、一般の有界線形作用素の場合には上記のような抽象的な表現が与えられているだけである。

そこで、再生核の理論を用いて一般的な場合に具体的な表現を与えよう。このために

$$K_L(\cdot, p; \alpha) = (L^*L + \alpha I)^{-1}K(\cdot, p)$$

を定義し、また任意の $\alpha > 0$ に対して、次で、内積を導入する：

$$(f, g)_{H_K(L; \alpha)} = \alpha(f, g)_{H_K} + (Lf, Lg)_{\mathcal{H}}. \quad (15)$$

この内積で H_K の関数からなる再生核ヒルベルト空間 $H_K(L; \alpha)$ をなすことが分かる。さらに、次が言える：

定理 8 ([51]) Tikhonov 汎関数

$$\inf_{f \in H_K} \{ \alpha \|f\|_{H_K}^2 + \|\mathbf{d} - Lf\|_{\mathcal{H}}^2 \} \quad (16)$$

における極値関数 $f_{\mathbf{d}, \alpha}(p)$ は $K_L(p, q; \alpha)$ を用いて

$$f_{\mathbf{d}, \alpha}(p) = (\mathbf{d}, LK_L(\cdot, p; \alpha))_{\mathcal{H}} \quad (17)$$

と表される。ここで、 $K_L(p, q; \alpha)$ はヒルベルト空間 $H_K(L; \alpha)$ の再生核で、これは正則な方程式

$$\tilde{K}(p, q; \alpha) + \frac{1}{\alpha}(L\tilde{K}_q, LK_p)_{\mathcal{H}} = \frac{1}{\alpha}K(p, q) \quad (18)$$

の解 $\tilde{K}(p, q; \alpha)$ として定まる。ここで、

$$\tilde{K}_q = \tilde{K}(\cdot, q; \alpha) \in H_K \quad \text{for } q \in E, \quad K_p = K(\cdot, p) \quad \text{for } p \in E.$$

(17) で、 \mathbf{d} が誤差や雑音を含むときには誤差評価が必要である。これについて

定理 9 ([34]). (17) において次の評価を得る：

$$|f_{\mathbf{d},\alpha}(p)| \leq \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \sqrt{K(p,p)} \|\mathbf{d}\|_{\mathcal{H}}.$$

この定理は良い近似を得るためには α を小さくとりたいが、それはデータの誤差 $\|\mathbf{d}\|_{\mathcal{H}}$ の関係で、制限を受けることを意味している。これは間違っただけのデータから真の解を得ることはできないから極めて自然なことを述べている。ここで、具体的な解法では予め α をどのくらいにとれば良いか、小さくとれる限界はどのようになるか等いろいろ難しいが、重要な問題があつていろいろな方法が提案されている。いづれにしても、 α をいくつか取って、対応する極値関数の様子を見るのが重要である。感覚的には、 α を次第にゼロに近づけていき、対応する極値関数がある関数に近づくさまを見て、逆にそれが乱れ出す前の α が、 α の取れる限界と考えられる。これらの具体的な応用、適用については最新の一連の論文を参照して下さい。

2 熱伝導における逆問題の例

難問とされてきた熱伝導における逆問題の 我々の方法における解を典型的な例として述べる。

$L_2(\mathbf{R}^n)$ 関数 F の積分変換

$$u_F(x,t) = (L_t F)(x) = \frac{1}{(4\pi t)^{n/2}} \int_{\mathbf{R}^n} F(\xi) \exp\left\{-\frac{|\xi-x|^2}{4t}\right\} d\xi \quad (19)$$

を考える。この表現が一般に初期条件 $u(x,0) = F(x)$ を満たす熱方程式 $u_t(x,t) = u_{xx}(x,t)$ の解 $u(x,t)$ を与えるが、この積分変換は数理物理で極めて基本的で、医学などでも盛んに問題にされている。例えば [23] とその文献を参照。

$n=1$ のとき 24 年ほど前 ([14]) 定理 5 の考えで、 $u_F(x,t)$ の関数の特徴づけを関数の複素解析性を用いて与え、それがもとで関数の解析接続に関する多くの具体的な公式を導き、国際会議会議録なども関係者と発表している ([18])。それを用いると複素関数を用いる逆変換は簡単であるが、実数値のみを用いる逆変換は複雑な公式になり、実軸上から関数の

解析性を捉らえる必要がある。例えばよく知られている次の公式は無限階数の微分を含んでおり実逆変換の困難性を良く示している：有界な連続関数 F に対して $t=1$ のとき

$$e^{-D^2}[(L_1 F)(x)] = F(x) \quad \text{pointwisely on } \mathbf{R}$$

([9], p. 182). 再生核として全空間の Sobolev 空間の再生核を用いて結構良い解を [41] で得たが、意外なことに [38] で、再生核ヒルベルト空間として強い条件を持つ解析関数からなる Paley-Wiener 空間を用いると各段によい結果が得られることが分かった。

Paley-Wiener 空間については [21,8] を参照、sampling theory として、膨大な文献がある。この空間を近似関数に用いる方法は sinc method と呼ばれている。

$L_2(\mathbf{R}^n, (-\pi/h, +\pi/h)^n), (h > 0)$ 関数 g のフーリエ変換

$$f(z) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbf{R}} \chi_h(t) g(t) e^{-iz \cdot t} dt$$

を考える。ここで、 $z = (z_1, z_2, \dots, z_n), t = (t_1, t_2, \dots, t_n), dt = dt_1 \cdot dt_2 \cdot \dots \cdot dt_n, z \cdot t = z_1 t_1 + \dots + z_n t_n$ で $(-\pi/h, +\pi/h)$ の特性関数 χ に対して $\chi_h(t) = \prod_{\nu=1}^n \chi(t_\nu)$. 像空間は再生核

$$K_h(z, \bar{u}) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbf{R}} \chi_h(t) e^{-iz \cdot t} e^{-i\bar{u} \cdot t} dt = \prod_{\nu} \frac{1}{\pi(z_\nu - \bar{u}_\nu)} \sin \frac{\pi}{h} (z_\nu - \bar{u}_\nu)$$

を持ち、Paley-Wiener 空間 W_h を成し、各 ν に対して、ある定数 C_ν で $z_\nu \rightarrow \infty$ のとき

$$|f(z_1, \dots, z_\nu, z_{\nu+1}, \dots, z_n)| \leq C_\nu \exp\left(\frac{\pi|z_\nu|}{h}\right), \quad \int_{\mathbf{R}} |f(x)|^2 dx < \infty$$

を満たす指数型の整関数からなる。このとき、更に、 $j = (j_1, j_2, \dots, j_n) \in \mathbf{Z}^n$ に対して等式

$$\frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbf{R}} |g(t)|^2 dt = h^n \sum_j |f(jh)|^2 = \int_{\mathbf{R}} |f(x)|^2 dx$$

が成り立つ。これは

$$f(x) = (f(\cdot), K_h(\cdot, x))_{H_{K_h}} = h^n \sum_j f(jh) K_h(jh, x) = \int_{\mathbf{R}} f(\xi) K_h(\xi, x) d\xi$$

を意味し、全体 $f(x)$ が離散点 $\{f(jh)\}_j$ で表されることを意味する (sampling theorem). $\{jh\}_j$ の有限個をとった場合の誤差評価については [17] を参照。この空間を用いると次の定理が得られる：

定理 10 ([38]) 任意の $L_2(\mathbf{R}^n)$ 関数 g と任意の $\alpha > 0$ に対して,

$$\begin{aligned} & \inf_{F \in H_{K_h}} \left\{ \alpha \|F\|_{H_{K_h}}^2 + \|g - u_F(\cdot, t)\|_{L_2(\mathbf{R}^n)}^2 \right\} \\ & = \alpha \|F_{t,\alpha,h,g}^*\|_{H_{K_h}}^2 + \|g - u_{F_{t,\alpha,h,g}^*}(\cdot, t)\|_{L_2(\mathbf{R}^n)}^2 \end{aligned} \quad (20)$$

の意味における最良近似関数 $F_{t,\alpha,h,g}^*$ が唯一つ存在して、それは

$$F_{t,\alpha,h,g}^*(x) = \int_{\mathbf{R}^n} g(\xi) Q_{t,\alpha,h}(\xi - x) d\xi \quad (21)$$

と表される。ここで、

$$Q_{t,\alpha,h}(\xi - x) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbf{R}^n} \frac{\chi_h(p) e^{-ip \cdot (\xi - x)} dp}{\alpha e^{|p|^2 t} + e^{-|p|^2 t}}.$$

H_{K_h} の関数 F に対して、関数 $u_F(x, t)$ を考え、 g として、 $u_F(\xi, t)$ を考えれば、 $\alpha \rightarrow 0$ のとき、一様に $F_{t,\alpha,h,g}^* \rightarrow F$ 。

Sobolev 空間のときには、 $\alpha = 0$ のとき、対応する (21) は存在しないが ([49])、現在の Paley-Wiener 空間 W_h の場合には $\alpha = 0$ に対して、積分 (21) はそのまま存在する。すなわち、定理 10 で、結果は $\alpha = 0$ に対して成り立つ。すなわち、いまの場合、Tikhonov 正則化法は必要ないことが分かる。さらに、 $(L_t F_{t,0,h,g}^*)(x) = (g(\cdot), K_h(\cdot, x))_{L_2(\mathbf{R}^n)}$ から、 $(L_t F_{t,0,h,g}^*)(x)$ は g の Paley-Wiener 空間 W_h 上への直交射影で、 $F_{t,0,h,g}^*$ と g の差 $\|L_t F_{t,0,h,g}^* - g\|_{L_2(\mathbf{R}^n)}$ を評価できる。もちろん $F_{t,0,h,g}^*$ は任意の $L_2(\mathbf{R}^n)$ 関数 g と W_h の関数 F に対する方程式 $L_t F = g$ における Moore-Penrose 一般逆である。

Sobolev 空間 H_S と Paley-Wiener 空間 W_h 何れの場合にも $\alpha \rightarrow 0$ と $h \rightarrow 0$ における収束性に興味があるが、数値実験では、30 倍くらい $h \rightarrow 0$ のときの収束の方が早くなっている。一般の $L_2(\mathbf{R}^n)$ 関数 g について、誤差評価が確立され、見かけ上再現が実証されているので、熱伝導における逆問題は一応の解決に達したと考える。

3 ラプラス変換の実逆変換

まずある自然な関数空間の関数 F のラプラス変換

$$(\mathcal{L}F)(p) = f(p) = \int_0^\infty e^{-pt} F(t) dt, \quad p > 0$$

の逆変換を求めよう。— より一般的な関数の場合には基本的な変換を施して、この関数空間に帰着させれば良い。— 普通は複素関数としての逆変換公式を考えるが、しかし、実正軸上の値のみを用いて逆変換を求めたい多くの場合が存在する。これが**実逆変換**の問題で、解析関数を正の実軸上の値で捉える必要があるので難問とされているものである。その困難性は良く知られている公式

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(-1)^n}{n!} \left(\frac{n}{t}\right)^{n+1} f^{(n)}\left(\frac{n}{t}\right) = F(t), \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{k=1}^n \left(1 + \frac{t}{k} \frac{d}{dt}\right) \left[\frac{n}{t} f\left(\frac{n}{t}\right)\right] = F(t)$$

([13]) などから分かる。さらに、[25] を参照。さらに大きな文献が [27,18] にある。特に解析接続との関連について [11,12] を参照。

まず有界線形作用素を考えるために、自然な再生核空間を定める。

正の実軸 \mathbf{R}^+ 上有限ノルム

$$\left\{ \int_0^\infty |F'(t)|^2 \frac{1}{t} e^t dt \right\}^{1/2}$$

を持ち、 $F(0) = 0$ を満たす絶対連続関数 F からなる再生核ヒルベルト空間 H_K を考える。この空間は再生核

$$K(t, t') = \int_0^{\min(t, t')} \xi e^{-\xi} d\xi \quad (22)$$

を持つ。このとき、

$$\int_0^\infty |(\mathcal{L}F)(p)p|^2 dp \leq \frac{1}{2} \|F\|_{H_K}^2; \quad (23)$$

すなわち H_K 上の $L_2(\mathbf{R}^+, dp) = L_2(\mathbf{R}^+)$ への線形写像 $(\mathcal{L}F)(p)p$ は有界である。これから一般論にしたがって次を得る：

定理 11 . 任意の $g \in L_2(\mathbf{R}^+)$ と任意の $\alpha > 0$ に対して、

$$\begin{aligned} & \inf_{F \in H_K} \left\{ \alpha \int_0^\infty |F'(t)|^2 \frac{1}{t} e^t dt + \|(\mathcal{L}F)(p)p - g\|_{L_2(\mathbf{R}^+)}^2 \right\} \\ & = \alpha \int_0^\infty |F_{\alpha, g}^*(t)|^2 \frac{1}{t} e^t dt + \|(\mathcal{L}F_{\alpha, g}^*)(p)p - g\|_{L_2(\mathbf{R}^+)}^2 \end{aligned} \quad (24)$$

の意味における最良近似関数 $F_{\alpha, g}^*$ が唯一つ存在して、次の表現を得る：

$$F_{\alpha, g}^*(t) = \int_0^\infty g(\xi) (\mathcal{L}K_\alpha(\cdot, t))(\xi) \xi d\xi. \quad (25)$$

ここで、 $K_\alpha(\cdot, t)$ は次の関数方程式で定まる： $K_{\alpha, t'} = K_\alpha(\cdot, t')$ 、 $K_t = K(\cdot, t)$ に対して

$$K_\alpha(t, t') = \frac{1}{\alpha} K(t, t') - \frac{1}{\alpha} ((\mathcal{L}K_{\alpha, t'}) (p)p, (\mathcal{L}K_t) (p)p)_{L_2(\mathbf{R}^+)}. \quad (26)$$

近似逆変換 $F_{\alpha, g}^*(t)$ を (25) を用いて求める. (26) の t についてのラプラス変換をとって、変数 t と t' を変えて

$$(\mathcal{L}K_\alpha(\cdot, t))(\xi) = \frac{1}{\alpha} (\mathcal{L}K(\cdot, t))(\xi) - \frac{1}{\alpha} ((\mathcal{L}K_{\alpha, t}) (p)p, (\mathcal{L}(\mathcal{L}K) (p)p))(\xi)_{L_2(\mathbf{R}^+)}. \quad (27)$$

ここで、

$$K(t, t') = \begin{cases} -te^{-t} - e^{-t} + 1 & \text{for } t \leq t' \\ -t'e^{-t'} - e^{-t'} + 1 & \text{for } t \geq t'. \end{cases}$$

$$(\mathcal{L}K(\cdot, t'))(p) = e^{-t'p} e^{-t'} \left[\frac{-t'}{p(p+1)} + \frac{-1}{p(p+1)^2} \right] + \frac{1}{p(p+1)^2}.$$

$$\int_0^\infty e^{-qt'} (\mathcal{L}K(\cdot, t'))(p) dt' = \frac{1}{pq(p+q+1)^2}.$$

ゆえに、 $(\mathcal{L}K_\alpha(\cdot, t))(\xi)\xi = H_\alpha(\xi, t)$ とおいて、第2種フレッドホルム積分方程式を得る：

$$\alpha H_\alpha(\xi, t) + \int_0^\infty H_\alpha(p, t) \frac{1}{(p+\xi+1)^2} dp = -\frac{e^{-t\xi} e^{-t}}{\xi+1} \left(t + \frac{1}{\xi+1} \right) + \frac{1}{(\xi+1)^2}.$$

この積分方程式を計算機を用いて一般的な方法で解いて ([36])、また杉原正顕氏たちの sinc method に基礎をおく方法 ([32]) や近年無限精度の数値計算の概念が提案され ([1, 19])、その根幹をなす多倍長計算を用いる藤原宏志氏たちの手法によって、従来にはない高精度かつ応用上は十分に満足できる数値計算結果が得られた ([31])。なお、この積分方程式の解法においては 定着している高橋一森による **DE formula** と呼ばれる二重指数関数による積分変数変換が用いられている ([22])。さらに驚くべきことには、Kryzhniy によって難解な場合として提起された例、すなわち超関数デルター関数のラプラス変換の逆変換の場合にも、我々の方法が超関数デルターを捉えていることである。これは、同時に (24) の形での近似を考えているので、再生核ヒルベルト空間 H_K で近似できるような広い関数族に対して逆変換が有効に働くことを示している。ラプラス

変換についての 最近に至るまでの詳しい解説については この講究録の藤原氏の論文を参照して下さい。

熱伝導における逆問題やラプラス変換の実逆変換には本質的な難しさがあるが、計算機の威力で解決できると考える。熱伝導の場合、最も難しい状況ではソボレフ空間を用いるとき、 α は 10^{-22} くらい、Paley-Wiener空間を用いるときには、 h は $1/300$ くらいに、ラプラス変換の実逆変換で最も難しい状況で良い結果を得るためには α を 10^{-400} くらいにとる必要があり、定理 15 の観点から、それらの問題の難しさが良く理解できる。

多くの問題を我々の方法で解く焦点は 正則な関数方程式 (18) の解法に移るが、それは離散化をどのようにして具体的にを行うかに関わる。それは問題の設定に左右されるが、 H に完全正規直交基底が簡単な形とれる場合には、それを用いて、そのフーリエ係数で離散化でき、そのような構造が複雑な場合には空間の点列をとって、点列に関する帰納的な方法で計算を実行できる。計算機の進歩で相当な線形問題が具体的に計算機に載って解決できる時代が近いのではないかと考える。

4 自然現象と数学

不可能と思われていたことを可能にした数学を、具体的な問題に適用して世の中に直接貢献したいと思い、工学部の先生たちとカメラに写ったひどくぼけた写真から元の人物像をできるだけ再生する研究を始めました。

ところがその第1歩でつまずき、次のような考えを持ち、克服する方法を考えました ([53]):

数学的な逆問題は、システムの入力と出力の物理的な明確な意味と物理的な実現（物理的な単位を含めて）が複雑であること、そしてより根本的には、システムが解析的に（微分）方程式や積分変換等で記述され、システムが現実の複雑な法則とずれているという点において、しばしば抽象的、いわば宙に浮いた理論になりがちである。そこで、これらの点を克服する方法として、入力、出力を、物理量を数値化した量として直接捉え、システムが全く解析的には与えられない現実のシステムの場合に適用できる新しい方法を提案した。実際、この方法は、線形システムが解析的には全く分からなくても、システムを繰り返し利用して、物理的に実現できる再生核をシステムに通し、実験値を用いることによってシステムの逆を構成する方法であり、一般的な方法として注目できると考える。

方法は Tikhonov 正則化法と再生核の理論に基づく公式 (17) と (18) を

用いるが、得られた方法が実際に有効か否かは実験と実証によらなければならないので、ラプラス変換等の数値実験の場合にもそうであったが、このような研究を進めるためには多くの人に協力を求めなければならない状況です。

参考文献

- [1] 今井 仁司, 応用解析における多倍長計算, 数学, 日本数学会編集, 岩波書店, **55**(2003), 316-325.
- [2] D.-W. Byun and S. Saitoh, A real inversion formula for the Laplace transform, *Z. Anal. Anw.*, **12**(1993), 597-603.
- [3] D.-W. Byun and S. Saitoh, Approximation by the solutions of the heat equation, *J. Approximation Theory*, **78** (1994), 226-238.
- [4] D.-W. Byun and S. Saitoh, Best approximation in reproducing kernel Hilbert spaces, *Proc. of the 2th International Colloquium on Numerical Analysis*, VSP-Holland, (1994), 55-61.
- [5] G. Doetsch, *Handbuch der Laplace Transformation*, Vol. 1., Birkhäuser Verlag, Basel, 1950.
- [6] H. W. Engl, M. Hanke and A. Neubauer, *Regularization of Inverse Problems, Mathematics and Its Applications*, **376**(2000), Kluwer Academic Publishers.
- [7] C. W. Groetsch, *Inverse Problems in the Mathematical Sciences*, Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft mbH, Braunschweig/Wiesbaden (1993).
- [8] J. R. Higgins, A sampling principle associated with Saitoh's fundamental theory of linear transformations, *Analytic Extension Formulas and their Applications*, (2001), Kluwer Academic Publishers, 73-86.
- [9] I.I. Hirschman and D.V. Widder, *The Convolution Transform*, Princeton University Press, Princeton, New Jersey, (1955).
- [10] H. Imai, T. Takeuchi and M. Kushida, On numerical simulation of partial differential equations in infinite precision, *Advances in Mathematical Sciences and Applications*, **9**(1999), 1007-1016.
- [11] V.V. Kryzhniy, Regularized inversion of integral transformations of Mellin convolution type, *Inverse Problems*, **19**(2003), 573-583.
- [12] V. V. Kryzhniy, Numerical inversion of the Laplace transform: analysis via regularized analytic continuation, *Inverse Problems*, **22** (2006), 579-597.

- [13] E. L. Post, Generalized differentiation, *Trans. Amer. Math. Soc.*, **32**(1930), 723-781.
- [14] S. Saitoh, The Weierstrass transform and an isometry in the heat equation, *Applicable Analysis*, **16**(1983), 1-6.
- [15] S. Saitoh, One approach to some general integral transforms and its applications, *Integral Transforms and Special Functions*, **3** (1995), 49–84.
- [16] S. Saitoh, Representations of inverse functions, *Proc. Amer. Math. Soc.*, **125** (1997), 3633–3639.
- [17] S. Saitoh, *Integral Transforms, Reproducing Kernels and their Applications*, *Pitman Research Notes in Mathematics Series*, **369** (1997), Addison Wesley Longman, UK.
- [18] S. Saitoh, N. Hayashi and M. Yamamoto (eds.), *Analytic Extension Formulas and their Applications*, (2001), Kluwer Academic Publishers.
- [19] S. Saitoh, T. Matsuura and M. Asaduzzaman, Operator Equations and Best Approximation Problems in Reproducing Kernel Hilbert Spaces, *Journal of Analysis and Applications*, **1**(2003), 131-142.
- [20] S. Saitoh, Constructions by Reproducing Kernels of Approximate Solutions for Linear Differential Equations with L_2 Integrable Coefficients, *International J. of Math. Sci.*, **2**(2003), 261-273.
- [21] F. Stenger, *Numerical Methods Based on Sinc and Analytic Functions*, Springer Series in Computational Mathematics, **20**, 1993.
- [22] H. Takahasi and M. Mori, Double exponential formulas for numerical integration, *Publ. RIMS. Kyoto Univ.*, **10**(1974), 721–741.
- [23] W. Ulmer and W. Kaissl, The inverse problem of a Gaussian convolution and its application to the finite size of measurement chambers/detectors in photon and proton dosimetry, *Phys. Med. Biol.*, **48**(2003), 707-727.
- [24] V. Vapnik, *Statistical Learning Theory*, John Wiley & Sons (1998).
- [25] D. V. Widder, *The Laplace Transform*, Princeton University Press, Princeton, 1972.
- [26] D. -X Zhou, Capacity of reproducing kernel spaces in learning theory, *IEEE Trans. Inform. Theory*, **49**(2003), 1743–1752.
- [27] <http://library.wolfram.com/inforcenter/MathSource/4738/>
- [28] <http://www.columbia.edu/~ww2040/abate.html>

- [29] Saitoh, Saburou, Theory of reproducing kernels—Applications to approximate solutions of bounded linear operator equations on Hilbert spaces. (Japanese) *Sugaku* 60 (2008), no. 3, 248–271.
- [30] Yamada, M. ; Saitoh, S. Identifications of non-linear systems. *J. Comput. Math. Optim.* 4 (2008), no. 1, 47–60.
- [31] Fujiwara, H. ; Matsuura, T. ; Saitoh, S. ; Sawano, Y. Real inversion of the Laplace transform in numerical singular value decomposition. *J. Anal. Appl.* 6 (2008), no. 1, 55–68.
- [32] Matsuura, T. ; Al-Shuaibi, A. ; Fujiwara, H. ; Saitoh, S.; Sugihara, M. Numerical real inversion formulas of the Laplace transform by using the sinc functions. *Far East J. Math. Sci.* 27 (2007), no. 1, 1-14.
- [33] Saitoh, S. Tikhonov regularization and the theory of reproducing kernels. *Cubo* 9 (2007), no. 3, 65-74.
- [34] Itou, H.; Saitoh, S. Analytical and numerical solutions of linear singular integral equations. *Int. J. Appl. Math. Stat.* 12 (2007), No. D07, 76–89.
- [35] Yamada, Masato; Matsuura, Tsutomu; Saitoh, Saburou, Representations of inverse functions by the integral transform with the sign kernel. *Fract. Calc. Appl. Anal.* 10 (2007), no. 2, 161–168.
- [36] Matsuura, T. ; Al-Shuaibi, Abdulaziz; Fujiwara, H.; 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), no. 2, 123–136.
- [37] Matsuura, T. ; Saitoh, S. Analytical and numerical solutions of the inhomogeneous heat equation. *J. Concr. Appl. Math.* 5 (2007), no. 3, 237–254.
- [38] Matsuura, T. ; Saitoh, S. Analytical and numerical inversion formulas in the Gaussian convolution by using the Paley-Wiener spaces. *Appl. Anal.* 85 (2006), 901–915.
- [39] Saitoh, Saburou, Tikhonov regularization and the theory of reproducing kernels. Finite or infinite dimensional complex analysis and applications, 291–298, Kyushu University Press, Fukuoka, 2005.
- [40] Matsuura, T. ; Saitoh, S. Applications of the Tikhonov regularization and reproducing kernels. *Mathematical sciences of fracture phenomena (Japanese)*, 27–46, *Sem. Math. Sci.*, 34, Keio Univ., Yokohama, 2005.
- [41] Matsuura, T.; Saitoh, S.; Trong, D. D. Approximate and analytical inversion formulas in heat conduction on multidimensional spaces. *Inverse problems: modeling and simulation. J. Inverse Ill-Posed Probl.* 13 (2005), no. 3-6, 479–493.
- [42] Saitoh, S. Applications of reproducing kernels to best approximations, Tikhonov regularizations and inverse problems. *Advances in analysis*, 439–445, World Sci. Publ., Hackensack, NJ, 2005.

- [43] Asaduzzaman, M. ; Matsuura, T.; Saitoh, S. Constructions of approximate solutions for linear differential equations by reproducing kernels and inverse problems. *Advances in analysis*, 335–343, World Sci. Publ., Hackensack, NJ, 2005.
- [44] Saitoh, S.; Matsuura, T.; Asaduzzaman, M. Operator equations and best approximation problems in reproducing kernel Hilbert spaces with Tikhonov regularization. *Advances in analysis*, 99–107, World Sci. Publ., Hackensack, NJ, 2005.
- [45] Matsuura, Tsutomu; Saitoh, Saburo, Dirichlet principle using computers. *Appl. Anal.* 84 (2005), no. 10, 989–100.
- [46] Saitoh, Saburo, Best approximation, Tikhonov regularization and reproducing kernels. *Kodai Math. J.* 28 (2005), 359–367.
- [47] Matsuura, T.; Saitoh, S. Numerical inversion formulas in the wave equation. *J. Comput. Math. Optim.* 1 (2005), no. 1, 1-19.
- [48] Matsuura, T.; Saitoh, S. Analytical and numerical solutions of linear ordinary differential equations with constant coefficients. *J. Anal. Appl.* 3 (2005), no. 1, 1–17.
- [49] Matsuura, T.; Saitoh, S. ; Trong, D. D. Numerical solutions of the Poisson equation. *Appl. Anal.* 83 (2004), no. 10, 1037–1051.
- [50] Matsuura, T.; Saitoh, S. Analytical and numerical solutions of the inhomogeneous wave equation. *Aust. J. Math. Anal. Appl.* 1 (2004), no. 1, Art. 7, 18 pp. (electronic).
- [51] Saitoh, S. Approximate real inversion formulas of the Gaussian convolution. *Appl. Anal.* 83(2004), no. 7, 727–733.
- [52] Yamada, M. and Saitoh,S., Numerical solutions of 2-nonlinear simultaneous equations, *Appl. Anal.* (in press).
- [53] Yamada, M. and Saitoh,S., Practical inversion formula for linear physical systems, *Advances in analysis*, World Sci. Publ., Hackensack, NJ (in press) , (Proceedings of the 6rd International ISAAC Congress, Ankara, 2007.8) .

Research Unit "Mathematics and Applications"

Department of Mathematics

University of Aveiro

3810-193 Aveiro

Portugal

e-mail: saburo.saitoh@gmail.com