Markov 過程の量子化を用いた Lyapunov 関数の構築

西村 悠樹*・山下 裕*

Construction of Lyapunov Function Using Quantization of Markov Process

Yuki NISHIMURA* and Yuh YAMASHITA*

This paper proposes a new method of getting Lyapunov functions using randomization, state discretization, and quantization of the Markov process. We deal with continuous deterministic systems as discrete stochastic systems and quantize the systems. The randomization of deterministic systems is introduced because we are aiming at the extension of the method to the stable stochastic case in future works. This procedure introduces Schrödinger-like equations. The problem of obtaining Lyapunov functions is replaced by the problem of solving eigen equations of the Schrödinger-like equations. In previous works of obtaining Lyapunov functions, for example, Fleming and Soner's method²⁾, there is the case that numerical approximated values diverge because of iteration of calculation. However, our method does not cause the problem because it is based on eigen analysis.

Key Words: Lyapunov function, finite-difference approximation, quantization, Markov process, Schrödinger equation

1. はじめに

動的システムにおいて, Lyapunov 関数を探すことでその安定性を調べる方法はよく知られている. Lyapunov 関数を得るための手法は, Krasovskii の方法^{4), 9), 15)}, 可変勾配法^{4), 15)}, Zubov の方法^{9), 15)}, Vannelli-Vidyasagar の方法¹⁵⁾などが提案されているが, 得られる Lyapunov 関数のクラスを限った議論にしていたり, べき級数・有理関数展開を用いているので原点回りでの近似になってしまっているなど, どの手法も欠点を有している.

Lyapunov 関数は, Lyapunov 方程式の解として得ることができる. 線形時不変システムにおいては, Lyapunov 関数の候補を正定 2 次形式に限定することで Lyapunov 方程式を代数方程式として導出できるため, 計算が比較的容易であるが^{11), 15)}, 非線形システムの Lyapunov 方程式は非線形偏微分方程式となるため, 一般的には解を求めることが困難である.

非線形システムにおける Lyapunov 方程式は, 非線形最適制御問題における Hamilton-Jacobi-Bellman 方程式 (以後, HJB 方程式) 中の入力を恒等的に零とした場合と一致する. 非線形の確率システムにおける HJB 方程式の近似解法として有力な手法のひとつが Fleming らによる有限差分近似法で

ある (注 1).

本稿では, Fleming らによるこの手法と “Markov 過程の量子化” を用いて, 連続時間非線形時不変な確定システムの Lyapunov 方程式に対する新しい近似計算法を提案し, これにより近似 Lyapunov 関数を構築できることを示す. なお, 本提案手法は制御対象そのものではなく Lyapunov 方程式を量子化しているため, 量子システムの制御問題についての研究 (たとえば 8)) とは異なる.

本稿の構成を記す. まず, 第 2 章にて本稿における用語説明, 特に Lyapunov 関数の定義と古典力学系の量子化についての説明をし, 第 3 章では問題の定式化を行なう. 第 4 章では, 対象となる確定システムを Markov 過程として扱った上で, Fleming らの手法²⁾を元に, 確率化 Lyapunov 方程式の状態について差分近似するとともに, 同手法について考察する. 第 5 章にて, 連続時間離散状態の確率化 Lyapunov 方程式に “1 次元 Markov 過程の量子化^{1), 7)}” を適用し, Lyapunov 方程式の解を求める問題を Schrödinger-like 方程式の解を求める問題に置き換える. 以上を用いて, Schrödinger-like 方程式の固有関数から Lyapunov 関数を構築する方法を提案する. 第 6 章では, 同提案手法をまとめ, 検討する. 第 7 章で, 提案手法をいくつかの例題に適用し, 有用性を検証する.

* 北海道大学大学院情報科学研究科 札幌市北区北 14 西 9
* Graduate School of Information Science and Technology,
Hokkaido University, N14W9, Kita-ku, Sapporo
(Received April 20, 2007)
(Revised November 27, 2007)

(注 1) より古くは Kushner による手法⁵⁾だが, この近似法の真値への収束性に関し, Kushner が確率的手法を用いたのに対して, Fleming らは楕円型偏微分方程式の適切な弱解 (粘性解) を用いたことで, 滑らかでない関数が解として許容されるようになった.

2. 準備

2.1 Lyapunov 関数

本稿では Lyapunov 関数を以下のように定義する。

【定義 1】 原点 $x(t) = 0$ のみを孤立平衡点として持つ n 状態の常微分方程式系

$$\dot{x}(t) = f(x(t)), \quad x \in M \subset \mathbb{R}^n \quad (1)$$

に対し、原点を含む有界な領域 $M' \subset M$ において正定関数 $W(x(t))$ が存在し、その時間微分 $\dot{W}(x(t))$ が負定関数となる

とき、 $W(x(t))$ を Lyapunov 関数と呼ぶ。◆

2.2 古典力学系の量子化

本稿では、各用語をつぎのように用いる。

- 確率化：確定システムを確率システムとみなすこと。
- 離散化：ある連続変数を離散変数に近似すること。
- 量子化：古典力学の法則を量子力学の法則に置換。

この意味での量子化には、質点系におけるエネルギー方程式を Schrödinger 方程式に置き換える Schrödinger の量子化¹⁷⁾、正準力学系における Poisson 括弧式を Heisenberg 方程式に置き換える Dirac の量子化^{10), 17), 20)}、状態が取りうるすべての経路の和をとった経路積分によって波動方程式を導く Feynman の量子化²⁰⁾、波動場において量子力学を適用した、場の量子化¹⁷⁾などがある。

このような物理学的な意味における量子化を制御理論に用いた例としては、Dirac の量子化を用いて最適レギュレーション問題における Hamilton-Jacobi-Bellman 方程式を Schrödinger 方程式に置き換える手法^{3), 10)}がある。また、制御理論と量子論のつながりという意味では、Nelson の確率量子化を確率制御問題としてみなす方法論¹⁹⁾がある。

本稿では 1 次元 Markov 過程の量子化^{1), 7)}を用いる。

3. 問題設定

本稿ではシステム(1)における Lyapunov 関数を構築する手法を提案する。システム(1)において、正定な Lagrangian を $L(x(t), t)$ 、その作用積分を $V(x(t), t)$ とする。 $V(x(t), t)$ が $V(0, *) = 0$ を満たし、積分の終端時刻 T について $\lim_{T \rightarrow \infty} x(T) = 0$ となるとき、

$$V(x(t_0), t_0) = - \int_{t_0}^{\infty} L(x(t), t) dt \quad (2)$$

となる。これが任意の初期時刻 t_0 について成り立つとき、 t_0 を t で書き直して微分形で表現すれば、非線形偏微分方程式

$$\frac{\partial V(x(t), t)}{\partial t} = -L(x(t), t) - \frac{\partial V(x(t), t)}{\partial x} \cdot f(x) \quad (3)$$

が得られる。本稿では(3)式をシステム(1)の Lyapunov 方程式と呼ぶ。ここで、領域 M' 内で、Lyapunov 方程式の解 $V(x(t), t)$ を時不変な正定関数として導出できれば、それは

Lyapunov 関数となる^(注 2)。しかし、(3)式は非線形偏微分方程式なので、一般的に解析解を得るのは困難である。そこで本稿では新たな近似解法を提案する。

また、本稿で提案する手法のためには、 $L(x(t), t)$ の形を

$$L(x(t), t) = q(x(t))V(x(t), t), \quad q(x(t)) \in \mathbb{R}^+ \quad (4)$$

と限定する必要がある(5.1 節を参照)が、つぎの定理で示すように、このことは扱えるシステムのクラスを限定しない。

《定理 1》 システム(1)が M' 内で漸近安定であることと、(3)、(4)式を満たす Lyapunov 関数があることは同値である。◆

(証明) Lyapunov の定理および Lyapunov の逆定理より、システム(1)が領域 M' 内で漸近安定であることと、Lyapunov 関数が存在することは同値である。そこで、Lyapunov 関数の一つ $v(x(t))$ に対し、新しい正定関数

$$v'(x(t)) := e^{-\int_{t_0}^t q(x(s)) ds} v(x(t_0)), \quad \forall x(t_0) \in M' \quad (5)$$

を定義すると、

$$\frac{d}{dt} v'(x(t)) = -q(x(t))v'(x(t)) \quad (6)$$

となる。よって、 $v'(x(t))$ は Lyapunov 関数となり、さらに、(3)、(4)式を満たしている。また、逆は自明である。■

4. 確率化と差分近似

システム(1)における Lyapunov 方程式(3)の近似解法を得るために、本稿ではシステム(1)を確率化し、

$$dx(t) = f(x(t))dt + \sigma(x(t))dB(t), \quad x \in M_s \subset \mathbb{R}^n \quad (7)$$

として考える。ここで、 $\sigma(x(t))$ は分散、 $dB(t)$ はランダムウォークである。さらに、このシステムは Markov 過程(ある時刻までの情報が与えられたときの未来の挙動が、ある時刻を初期時刻とする経路の挙動と一致するような過程)であるものとする¹²⁾。

なお、本稿で提案する手法は、確率システムに拡張することを念頭においているため $dB(t)$ を導入しているが、本質的な要素ではない。実際、(7)式の右辺第二項を恒等的に 0 としても以降の議論に支障を来さず、量子化も可能である。

いま、 $a(x(t)) = \sigma(x(t)) \cdot \sigma(x(t))^T$ 、 tr をトレースとすると、このシステムにおける Lyapunov 方程式は、

$$\frac{\partial V}{\partial t} = -L(x(t), t) - \frac{\partial V}{\partial x} \cdot f(x(t)) - \frac{1}{2} \text{tr} \left[a(x(t)) \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \right] \quad (8)$$

となる。本節では確率化 Lyapunov 方程式(8)を、Fleming ら²⁾による方法を用いて差分近似し、考察する。

(注 2) $V(x(t), t)$ が時変の場合、Lyapunov 関数となるためには一様性 $\underline{V}(x) \leq V(x(t), t) \leq \bar{V}(x)$ が必要となる。ただし $\underline{V}(x)$ は正定とする。

4.1 確率化 Lyapunov 方程式の差分近似 [文献 2), IX.3]

システム(7)において、状態 x の刻み幅を δ 、基底単位ベクトルを $e_1, e_2, \dots, e_n$ として離散変数 x_d で離散化すると、システムの状態空間 M_s は n 次元格子

$$M_d = \left\{ x_d = \delta \sum_{i=1}^n \gamma_i e_i, \forall \gamma_i \in \mathbb{Z} \right\} \quad (9)$$

に置き換えられる(注3)。

つぎに、表記の簡便化のため、以下を定義する。まず、 $i \neq j$ なる $i, j = 1, 2, \dots, n$ について

$$\begin{aligned} x_d^\pm &:= x_d \pm \delta e_i, & x_{d\pm} &:= x_d \pm \delta e_j, \\ x_{d\pm}^\pm &:= x_d + \delta e_i \pm \delta e_j, & x_{d\pm}^- &:= x_d - \delta e_i \pm \delta e_j \end{aligned} \quad (10)$$

と略記する。また、 $f(x_d)$ の各要素を $f_i(x_d)$ 、 $a(x_d)$ の各要素を $a_{ij}(x_d)$ とし、

$$f_i^\pm(x_d) := \max(\pm f_i(x_d), 0) \quad (11)$$

$$a_{ij}^\pm(x_d) := \max(\pm a_{ij}(x_d), 0) \quad (12)$$

とする。なお、本稿では符号はすべて複合同順とする。

関数 $V(x, t)$ についての1階微分を、

$$\frac{\partial V}{\partial x} \approx \begin{cases} V_i^+(x_d, t) := \frac{V(x_d^+, t) - V(x_d, t)}{\delta}, & f_i(x_d) \geq 0 \\ V_i^-(x_d, t) := \frac{V(x_d, t) - V(x_d^-, t)}{\delta}, & f_i(x_d) < 0 \end{cases} \quad (13)$$

また、2階微分を

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x_i^2} \approx V_{ii}^q(x_d, t) := \frac{V(x_d^+, t) + V(x_d^-, t) - 2V(x_d, t)}{\delta^2} \quad (14)$$

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \approx \begin{cases} V_{ij}^{q+}(x_d, t), & a_{ij}(x_d) \geq 0 \\ V_{ij}^{q-}(x_d, t), & a_{ij}(x_d) < 0 \end{cases} \quad (15)$$

と差分近似する。ここで、

$$\begin{aligned} V_{ij}^{q+}(x_d, t) &:= -\frac{1}{2\delta^2} \{ V(x_d^+, t) + V(x_d^-, t) + V(x_{d+}, t) \\ &\quad + V(x_{d-}, t) + V(x_{d+}^+, t) + V(x_{d-}^-, t) - 2V(x_d, t) \} \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} V_{ij}^{q-}(x_d, t) &:= \frac{1}{2\delta^2} \{ V(x_d^+, t) + V(x_d^-, t) + V(x_{d+}, t) \\ &\quad + V(x_{d-}, t) - V(x_{d+}^+, t) - V(x_{d-}^-, t) + 2V(x_d, t) \} \end{aligned} \quad (17)$$

とする。以上により Lyapunov 方程式(8)は

$$\frac{\partial V}{\partial t}(x, t) = -L(x_d, t) - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(x_d) V_{ij}^q(x_d, t)$$

(注3) なお、本稿では単純化のため、各状態とも同じ刻み幅 δ を取るものとして議論を進めるが、刻み幅は各状態 $x_1, x_2, \dots, x_n$ において異なる値を取る場合でも本項と同様の議論が成り立つ。

$$- \sum_{i=1}^n \{ V_i^+(x_d, t) f_i^+(x_d) - V_i^-(x_d, t) f_i^-(x_d) \} \quad (18)$$

と近似される。

また、 $x_d = x_d(t)$ から $x_d' = x_d(t')$ への遷移確率を $p((x_d, t) \rightarrow (x_d', t'))$ と定義する。システム(7)を状態離散化し、時間の刻み幅を $h(>0)$ として時間離散化をすると、1ステップでの遷移確率は時間変数 t に陽に依存しないので $p(x_d \rightarrow x_d', h) := p((x_d, t) \rightarrow (x_d', t+h))$ と表記する。このとき、

$$\begin{aligned} p(x_d \rightarrow x_d^\pm, h) &= \frac{h}{2\delta^2} \left\{ 2\delta f_i^\pm(x_d) + a_{ii}(x_d) - \sum_{j \neq i} |a_{ij}(x_d)| \right\} \end{aligned} \quad (19)$$

$$p(x_d \rightarrow x_{d\pm}^\pm, h) = \frac{h}{2\delta^2} a_{ij}^\pm(x_d), \quad i \neq j \quad (20)$$

$$p(x_d \rightarrow x_{d\pm}^-, h) = \frac{h}{2\delta^2} a_{ij}^\mp(x_d), \quad i \neq j \quad (21)$$

$$\begin{aligned} p(x_d \rightarrow x_d, h) &= 1 - h \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{|f_i(x_d)|}{\delta} - \frac{a_{ii}(x_d)}{2\delta^2} - \sum_{j \neq i} \frac{|a_{ij}(x_d)|}{\delta^2} \right\} \end{aligned} \quad (22)$$

$$p(x_d \rightarrow x_d', h) = 0, \quad (x_d' \neq x_d, x_d^\pm, x_{d\pm}^\pm, x_{d\pm}^\mp) \quad (23)$$

が得られる^{2), 5)}。最後の(23)式は、状態が1ステップでは隣り合わない格子点には行かないことを示している。(19)-(23)式を用いると、(18)式は

$$V(x_d, t-h) = \sum_{x_d' \in M_d} p(x_d \rightarrow x_d', h) V(x_d', t) + L(x_d, t) h \quad (24)$$

と表現することができる。ただし、時間微分は

$$\frac{\partial V}{\partial t}(x, t) \approx \frac{V(x_d, t) - V(x_d, t-h)}{h} \quad (25)$$

と差分近似している。

また、遷移確率 p の値域が $[0, 1]$ となるための条件は、時間の刻み幅 h および状態の刻み幅 δ が

$$h \sum_{i=1}^n \left[a_{ii}(x_d) - \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} |a_{ij}(x_d)| + \delta |f_i(x_d)| \right] \leq \delta^2 \quad (26)$$

を満たすことである^{2), 5)}。

(24)式を用いて $V(x_d, t)$ の値から $V(x_d, t-h)$ の値を求める、という計算を $V(x_d, t) \approx V(x_d, t-h)$ とみなせるまで行ない、そのときの $V(x_d, t)$ の値を(8)式の近似解として得る、というのが Fleming らによる手法 [文献 2) IX.3] である。

この方法は非常に有用であるが、実際の計算においては(9)式における γ_i の取りうる値を有限個にしなければならない。

つまり、状態の値域を有界にする必要がある。しかし、この手法は、境界条件が Neumann 条件となる場合しか真値への収束性を保証していない。そのため、計算領域の境界上で領域の外の値が必要となる場合は保証外であり、内側の値で代用するなどの工夫を行なった場合、(24)式について繰り返し計算を行なうときに、近似値が発散してしまうことがある。

なお、次章において時間刻み幅は $h \rightarrow 0$ として考えるため、その場合、(26)式は自動的に満たされる。

5. Markov 過程の量子化

本章では、連続時間離散状態の Lyapunov 方程式(38)を遷移確率速度を用いて表現し、Markov 過程のマスター方程式とみなすことで、1次元 Markov 過程の量子化^{1),7)}を適用することができることを示す。

5.1 連続時間離散状態の Lyapunov 方程式

本稿で提案する近似手法では、連続時間離散状態の Lyapunov 方程式を用いるため、時間についての差分近似(25)を経ずに、(18)式を式変形することを考える。まず、遷移確率速度を

$$w(x_d \rightarrow x_d', t) := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{p((x_d, t) \rightarrow (x_d', t+h)) - p((x_d, t) \rightarrow (x_d', t))}{h} \quad (27)$$

と定義する¹⁸⁾。状態は、同時刻には異なる値を取ることはありえないので、

$$p((x_d, t) \rightarrow (x_d', t)) = \delta_{x_d, x_d'} \quad (28)$$

である。また、前章で導入した1ステップでの遷移確率(19)-(23)を用いると、遷移確率速度は時不変となる。このときの遷移確率速度を $w(x_d \rightarrow x_d')$ と表記する。

以上の議論により得られた遷移確率速度

$$w(x_d \rightarrow x_d^\pm) = \frac{1}{2\delta^2} \left\{ 2\delta f_i^\pm(x_d) + a_{ii}(x_d) - \sum_{j \neq i} |a_{ij}(x_d)| \right\} \quad (29)$$

$$w(x_d \rightarrow x_{d\pm}^\pm) = \frac{1}{2\delta^2} a_{ij}^\pm(x_d), \quad i \neq j \quad (30)$$

$$w(x_d \rightarrow x_{d\pm}^\mp) = \frac{1}{2\delta^2} a_{ij}^\mp(x_d), \quad i \neq j \quad (31)$$

$$w(x_d \rightarrow x_d) = -\sum_{i=1}^n \left\{ \frac{|f_i(x_d)|}{\delta} - \frac{a_{ii}(x_d)}{2\delta^2} - \sum_{j \neq i} \frac{|a_{ij}(x_d)|}{\delta^2} \right\} \quad (32)$$

$$w(x_d \rightarrow x_d') = 0, \quad (x_d' \neq x_d, x_d^\pm, x_{d\pm}^\pm) \quad (33)$$

を、(18)式に代入すると、

$$\frac{\partial V}{\partial t} = - \sum_{x_d' \in M_d} w(x_d \rightarrow x_d') V(x_d', t) - L(x_d, t) \quad (34)$$

となる。ここで、

$$w^\sharp(x_d' \rightarrow x_d) := w(x_d' \rightarrow x_d), \quad x_d' \neq x_d \quad (35)$$

$$w^\sharp(x_d \rightarrow x_d) := q(x_d) - \sum_{x_d' \neq x_d} w^\sharp(x_d' \rightarrow x_d) \quad (36)$$

を定義すると、

$$L(x_d, t) = q(x_d) V(x_d, t) = \sum_{x_d' \in M_d} w^\sharp(x_d' \rightarrow x_d) V(x_d, t) \quad (37)$$

となり、3章で設定した Lagrangian を $w^\sharp(x_d' \rightarrow x_d)$ で表現できる。このとき、(34)式は、

$$\frac{\partial V}{\partial t} = - \sum_{x_d' \in M_d} \left\{ w(x_d \rightarrow x_d') V(x_d', t) + w^\sharp(x_d' \rightarrow x_d) V(x_d, t) \right\} \quad (38)$$

となる。これは連続時間離散状態の Lyapunov 方程式を遷移確率速度を用いて表わしたものである。

5.2 状態空間の限定と格子点の並べ替え

本節では、状態の値域を有限領域に限定した上で、状態空間を1次元化する。ただし、1次元化は、本提案手法において扱いやすい数値計算アルゴリズムを得るために行なうものであり、本質的ではない。したがって、 n 次元空間のままでも、次項で記述する Markov 過程の量子化の手続きは可能であり、5.5節で議論する固有関数展開も可能である。

まず、状態の値域を有限領域に限定する。定数 $l' \in \mathbb{N}^+$ を設定して1次元あたりの取りうる値の数を $l := 2l' + 1$ とし、新しい状態空間を

$$M_{df} = \left\{ x_d = \pm \delta \sum_{i=1}^n \gamma_i e_i, \gamma_i = 0, 1, 2, \dots, l' \right\} \quad (39)$$

とする。また、領域 M_{df} 内には全部で l^n 個の格子点が存在するが、これらを辞書的順序で1次元に並び替え、それらを $z_1, z_2, \dots, z_{l^n}$ と表記する。たとえば、 $n=2, l=3$ の場合、

$$\begin{aligned} z_1 &= -\delta e_1 - \delta e_2, & z_2 &= -\delta e_1 + 0e_2, & z_3 &= -\delta e_1 + \delta e_2, \\ z_4 &= +0e_1 - \delta e_2, & z_5 &= +0e_1 + 0e_2, & z_6 &= +0e_1 + \delta e_2, \\ z_7 &= +\delta e_1 - \delta e_2, & z_8 &= +\delta e_1 + 0e_2, & z_9 &= +\delta e_1 + \delta e_2 \end{aligned}$$

である。このとき、状態空間は

$$M_q = \{z_k, k = 1, 2, \dots, l^n\} \quad (40)$$

となる。さらに、これらの格子点について、

$$z := (\tau(z_1), \tau(z_2), \dots, \tau(z_{l^n})), \quad z \in M_{qv} \quad (41)$$

を定義する。ただし、 $k = 1, 2, \dots, l^n$ に対して状態が z_k にあるとき $\tau(z_k) = 1$ とし、このとき $k' \neq k$ なる k' について $\tau(z_{k'}) = 0$ であるとする。よって、 M_{qv} は l^n 次元単位基底ベクトル空間となる。この変数 z を用いると、連続時間離散状態の Lyapunov 方程式(38)は次式で表現される。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} V(z, t) \\ = - \sum_{z' \in M_{qv}} \{w(z \rightarrow z') V(z', t) + w^\sharp(z' \rightarrow z) V(z, t)\} \end{aligned} \quad (42)$$

n 次元空間上にある有限の格子点を 1 次元に並べ替えることによって、次項に示す 1 次元 Markov 過程の量子化を行なうことができる。

5.3 1 次元 Markov 過程の量子化

量子化の準備として、量子力学的記法を導入する。

複素ベクトル $y \in Y \subset \mathbb{C}^r$ の複素共役を y^* とし、ある関数 $\psi_1(y)$ および $\psi_2(y)$ の内積を $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$ と表わす。ここで、 Y は有界とし、 $\psi_1, \psi_2 : \mathbb{C}^r \rightarrow \mathbb{C}$ である。このとき、 y が離散値をとるならば、

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \sum_{y \in Y} \psi_1^*(y) \psi_2(y) \quad (43)$$

であり、任意の関数 $\psi : \mathbb{C}^r \rightarrow \mathbb{C}$ について

$$\langle y | \psi \rangle = \psi(y) \quad (44)$$

となる。また、ある演算子 $\mathcal{O}$ に対しての演算を

$$\langle \psi_1 | \mathcal{O} | \psi_2 \rangle := \sum_{y \in Y} \psi_1^*(y) (\mathcal{O} \psi_2)(y) \quad (45)$$

と定義する。さらに、この表記法において、ベクトル $|*\rangle$ の左からベクトル $\langle *|$ をかけると $\langle *|*$ となるように、ブラベクトル $\langle *|$ およびケットベクトル $|*\rangle$ を定義する。

連続時間離散状態の Lyapunov 方程式(42)を 1 次元 Markov 過程のマスター方程式とみなすことで、文献 1), 7) にて示されている「1 次元 Markov 過程の量子化」を行なうことができる。

(41)式における z に対するケットベクトルを

$$|z\rangle := |\tau(z_1), \tau(z_2), \dots, \tau(z_{l^n})\rangle \quad (46)$$

と定義すると、 $|z\rangle$ は離散値をとる正規直交基底となるので、

$$|V(t)\rangle := \sum_{z \in M_{qv}} V(z, t) |z\rangle \quad (47)$$

を定義でき、このとき、

$$V(z, t) = \langle z | V(t) \rangle \quad (48)$$

となる。ここで、“Hamiltonian 演算子” $\mathcal{H}$ を

$$\langle z | \mathcal{H} = \sum_{z' \in M_{qv}} \{w(z \rightarrow z') \langle z' | + w^\sharp(z' \rightarrow z) \langle z | \} \quad (49)$$

を満たすものとする、(42)式は

$$\frac{\partial}{\partial t} |V(t)\rangle = -\mathcal{H} |V(t)\rangle \quad (50)$$

となる。この式は、Schrödinger 方程式と同様の形であ

る(注 4)。

以上が(42)式の 1 次元 Markov 過程としての量子化である。これにより、連続時間離散状態の Lyapunov 方程式(38)が Schrödinger-like 方程式(50)に置換された(注 5)。

5.4 Hamiltonian 演算子の行列表現

演算子 $\mathcal{H}$ による関数 $V(z, t)$ への作用は、行列で表現することができる。以下にそれを示す。まず、状態が z_k 上にあるときのケットベクトルを $|z_k\rangle$ とする。すなわち、

$$|z_1\rangle := |1, 0, \dots, 0\rangle, \quad |z_2\rangle := |0, 1, 0, \dots, 0\rangle, \dots \quad (51)$$

とし、Hamiltonian 行列を次式で定義する。

$$\mathcal{H}_m := \begin{bmatrix} \langle z_1 | \mathcal{H} | z_1 \rangle & \langle z_1 | \mathcal{H} | z_2 \rangle & \dots \\ \langle z_2 | \mathcal{H} | z_1 \rangle & \langle z_2 | \mathcal{H} | z_2 \rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (52)$$

Hamiltonian 行列を用いることで、以下の補題が導かれる。

[補題 1] Hamiltonian 行列 $\mathcal{H}_m$ の各要素は次式となる。

$$\langle z | \mathcal{H} | z'' \rangle = \begin{cases} w(z \rightarrow z''), & (z'' \neq z) \\ w(z \rightarrow z) + q(z), & (z'' = z) \end{cases} \quad (53)$$

(証明) (49)式の両辺に右から $|z''\rangle$ をかけると、

$$\langle z | \mathcal{H} | z'' \rangle = \sum_{z' \in M_{qv}} \{w(z \rightarrow z') \langle z' | z'' \rangle + w^\sharp(z' \rightarrow z) \langle z | z'' \rangle\} \quad (54)$$

となる。 $|z\rangle$ は正規直交基底なので、 $z'' \neq z$ ならば $\langle z | z'' \rangle = 0$ であり、また右辺第一項は $z' = z''$ のとき以外は 0 となるので

$$\langle z | \mathcal{H} | z'' \rangle = w(z \rightarrow z''), \quad (z'' \neq z) \quad (55)$$

が導かれ、 $z'' = z$ ならば

$$\begin{aligned} \langle z | \mathcal{H} | z \rangle &= w(z \rightarrow z) + \sum_{z' \in M_{qv}} w^\sharp(z' \rightarrow z) \\ &= w(z \rightarrow z) + q(z) \end{aligned} \quad (56)$$

が得られる。(55), (56)式より、(53)式が導かれた。■

以上を用いて、つぎの命題を導く。

[命題 1] Hamiltonian 行列 $\mathcal{H}_m$ は、演算子 $\mathcal{H}$ による関数 $V(z, t)$ への作用を表わす。◆

(証明) (53)式および(47)-(49)式を用いると、

$$\langle z | \mathcal{H} | V(t) \rangle = - \sum_{z'', z' \in M_{qv}} \left(w(z \rightarrow z') \langle z' | z'' \rangle \right)$$

(注 4) (50)式において、時間 t を虚時間 $\tilde{t}$ を用いて $t = \sqrt{-1}\tilde{t}$ と表現することで、本来の Schrödinger 方程式と同様の式を得る。

(注 5) 文献 1), 7) にもあるように、Markov 過程の量子化で得られる Hamiltonian 演算子 $\mathcal{H}$ は一般に Hermite ではないので、(50)式は量子力学に現れる Schrödinger 方程式とは厳密には異なる。よって、本稿では(50)式を Schrödinger-like 方程式と呼んでいる。

$$\begin{aligned}
& + w^\#(z' \rightarrow z) \langle z | z'' \rangle \langle z'' | V(t) \rangle \\
& = - \sum_{z'' \in M_{qv}} \langle z | \mathcal{H} | z'' \rangle \langle z'' | V(t) \rangle \quad (57)
\end{aligned}$$

が得られる。ここで、(51)式を用いると(57)式は、

$$\begin{bmatrix} \langle z_1 | \mathcal{H} | V(t) \rangle \\ \langle z_2 | \mathcal{H} | V(t) \rangle \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle z_1 | \mathcal{H} | z_1 \rangle & \langle z_1 | \mathcal{H} | z_2 \rangle & \cdots \\ \langle z_2 | \mathcal{H} | z_1 \rangle & \langle z_2 | \mathcal{H} | z_2 \rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \langle z_1 | V(t) \rangle \\ \langle z_2 | V(t) \rangle \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (58)$$

となる。さらに、 $\mathcal{H}_m$ を用いて(58)式を整理すると、

$$\begin{bmatrix} (\partial V(z, t) / \partial t) |_{\tau(z_1)=1} \\ (\partial V(z, t) / \partial t) |_{\tau(z_2)=1} \\ \vdots \end{bmatrix} = -\mathcal{H}_m \cdot \begin{bmatrix} V(z_1, t) \\ V(z_2, t) \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (59)$$

となることから、演算子 $\mathcal{H}$ による関数 $V(z, t)$ への作用は、行列 $\mathcal{H}_m$ で表現できることがわかる。■

Hamiltonian 行列 $\mathcal{H}_m$ はブロック三重対角行列となる。そのことを示すために $\kappa_1, \kappa_2, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n \in \mathbb{N}^+$ として

$$H_{\kappa_1}^{\kappa_2} := -\langle z_{\kappa_1} | \mathcal{H} | z_{\kappa_2} \rangle \quad (60)$$

$$\alpha_i := (\beta_i - 1)l^i + 1, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (61)$$

と置いた上で、以下を定義する。まず、 $l^i \times l^i$ 対角行列を

$${}_i\mathcal{D}_{\kappa_1}^{\kappa_2} := \begin{bmatrix} H_{\kappa_1}^{\kappa_2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & H_{\kappa_1+1}^{\kappa_2+1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & H_{\kappa_1+l^i-1}^{\kappa_2+l^i-1} \end{bmatrix}_{l^i \times l^i} \quad (62)$$

とし、 $l \times l$ 三重対角行列を

$${}_1\mathcal{H}_{\beta_1} := \begin{bmatrix} H_{\alpha_1}^{\alpha_1+1} & H_{\alpha_1+1}^{\alpha_1+1} & 0 & \cdots & \cdots \\ H_{\alpha_1+1}^{\alpha_1+1} & H_{\alpha_1+1}^{\alpha_1+1} & H_{\alpha_1+1}^{\alpha_1+2} & 0 & \cdots \\ 0 & H_{\alpha_1+1}^{\alpha_1+1} & H_{\alpha_1+1}^{\alpha_1+2} & \ddots & \cdots \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{bmatrix}_{l \times l} \quad (63)$$

とする。さらに、 $i = 2, 3, \dots, n$ に対して

$${}_i\mathcal{H}_{\beta_i} := \begin{bmatrix} {}_{i-1}\mathcal{H}_{\alpha_i} & {}_{i-1}\mathcal{D}_{\alpha_i}^{\alpha_i+1} & 0 & \cdots \\ {}_{i-1}\mathcal{D}_{\alpha_i+1}^{\alpha_i+1} & {}_{i-1}\mathcal{H}_{\alpha_i+1} & {}_{i-1}\mathcal{D}_{\alpha_i+1}^{\alpha_i+2} & \cdots \\ 0 & {}_{i-1}\mathcal{D}_{\alpha_i+1}^{\alpha_i+1} & {}_{i-1}\mathcal{H}_{\alpha_i+2} & \ddots \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}_{l^i \times l^i} \quad (64)$$

を定義する。以上を用いることで、つぎの命題が導かれる。

[命題2] ブロック三重対角行列 ${}_n\mathcal{H}_1$ は、Hamiltonian 行列 $\mathcal{H}_m$ と一致する。◆

(証明) 遷移確率速度(29)-(33)および(52), (53)式を考慮すると、元のシステム(7)の次元数が $n = 1$ の場合、

$$\mathcal{H}_m = \begin{bmatrix} H_1^1 & H_2^2 & 0 & \cdots & \cdots \\ H_2^2 & H_2^2 & H_3^3 & 0 & \cdots \\ 0 & H_3^3 & H_3^3 & \ddots & \cdots \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots \end{bmatrix}_{l \times l} = {}_1\mathcal{H}_1 \quad (65)$$

となる。同様に、 $n = 2$ の場合は

$$\mathcal{H}_m = \begin{bmatrix} {}_1\mathcal{H}_1 & {}_1\mathcal{D}_1^{l+1} & 0 & \cdots \\ {}_1\mathcal{D}_{l+1}^{l+1} & {}_1\mathcal{H}_2 & {}_1\mathcal{D}_{l+1}^{2l+1} & \cdots \\ 0 & {}_1\mathcal{D}_{2l+1}^{l+1} & {}_1\mathcal{H}_3 & \ddots \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}_{l^2 \times l^2} = {}_2\mathcal{H}_1 \quad (66)$$

となる。さらに、 $n = 3$ の場合は

$$\mathcal{H}_m = \begin{bmatrix} {}_2\mathcal{H}_1 & {}_2\mathcal{D}_1^{l^2+1} & 0 & \cdots \\ {}_2\mathcal{D}_{l^2+1}^{l^2+1} & {}_2\mathcal{H}_2 & {}_2\mathcal{D}_{l^2+1}^{2l^2+1} & \cdots \\ 0 & {}_2\mathcal{D}_{2l^2+1}^{l^2+1} & {}_2\mathcal{H}_3 & \ddots \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}_{l^3 \times l^3} = {}_3\mathcal{H}_1 \quad (67)$$

となる。よって、 $n(>1)$ 次元の場合、帰納的に

$$\mathcal{H}_m = \begin{bmatrix} {}_{n-1}\mathcal{H}_1 & {}_{n-1}\mathcal{D}_1^{l^{n-1}+1} & 0 & \cdots \\ {}_{n-1}\mathcal{D}_{l^{n-1}+1}^{l^{n-1}+1} & {}_{n-1}\mathcal{H}_2 & {}_{n-1}\mathcal{D}_{l^{n-1}+1}^{2l^{n-1}+1} & \cdots \\ 0 & {}_{n-1}\mathcal{D}_{2l^{n-1}+1}^{l^{n-1}+1} & {}_{n-1}\mathcal{H}_3 & \ddots \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}_{l^n \times l^n} = {}_n\mathcal{H}_1 \quad (68)$$

が導かれる。(65)式および(68)式より、命題が成り立つ。■

ブロック三重対角行列は疎行列の一種であり、多くの先行研究があるため、固有値および固有ベクトルを数値計算することが比較的容易である⁶⁾。したがって、Hamiltonian 行列の固有値問題が解けるという前提($l^n \times l^n$ 疎行列が、現実問題として固有値および固有ベクトルを計算することができる程度の大きさであるという前提)のもとで、以降の議論を進める。

5.5 固有値問題

Schrödinger-like 方程式(50)が時間に陽に依存しない場合、固有値を E_ν 、固有ベクトルを ϕ_ν として

$$\mathcal{H}|\phi_\nu\rangle = E_\nu|\phi_\nu\rangle, \quad \nu = 0, 1, 2, \dots \quad (69)$$

と表現できる。(69)式が解けたとすると、時間に依存するSchrödinger-like 方程式(50)の解は、関数表現で

$$V_\nu(z, t) = C_\nu \exp(-E_\nu t) \phi_\nu(z) \quad (70)$$

とすることができる¹⁷⁾。ただし、 C_ν は任意の複素定数である。また、(70)式の形の解の重ね合わせも同様に(50)式の解である。(50)式が時間に陽に依存しない場合、基底固有値は $E_0 = 0$ で、

$$\mathcal{H}|V_0\rangle = 0 \quad (71)$$

より基底固有ベクトル $|V_0\rangle$ が得られるが、一般に基底固有値は0とはならないため、 V_0 を完全に時不変な関数として構成することはできない。

また、Markov 過程の量子化によるHamiltonian 演算子には複素固有値があり得るため(注5)、関数 $V(z, t)$ の値域は実空間 $\mathbb{R}$ から複素空間 $\mathbb{C}$ へと拡大した。

本節ではこれら二つの問題への解決策を示す。以下では、離散値をとる状態 $z \in M_{qv}$ を $x_d \in M_{df}$ に戻した上で連続変数 $x \in M_{sf}$ で補間したとし、システムも確定システム(1)に置換しなおしたとする。ただし、 M_{sf} は $M_{df} \subset M_{sf} \subset M_s$ を満たす有界な集合とする。このときのSchrödinger-like 方程式の解は、(70)式と同様に

$$V_\nu(x, t) = C_\nu \exp(-E_\nu t) \phi_\nu(x) \quad (72)$$

と表現される^(注6).

まず、最も単純なケースを考える。

〔仮定1〕 システム(1)の原点を含む空でない領域 $M'_{sf} \subset M_{sf}$ において正定となるような、Hamiltonian 演算子の実固有関数 $\phi_\alpha(x)$ が存在する。◆

《定理2》 仮定1のもとで、 ϕ_α に対応した実固有値を E_α について $E_\alpha < q(x)$ が成り立つならば、 $\phi_\alpha(x)$ は領域 M'_{sf} において近似的に Lyapunov 関数となる。◆

(証明) 任意の実定数を C_α とする。Schrödinger-like 方程式の解

$$V_\alpha(x, t) = C_\alpha \exp(-E_\alpha t) \phi_\alpha(x) \quad (73)$$

は(3)、(4)式の近似解なので、

$$\dot{V}_\alpha(x, t) \approx -q(x) V_\alpha(x, t) \quad (74)$$

である。これに(73)式を代入すると、次式を得る。

$$\dot{\phi}_\alpha(x) \approx (E_\alpha - q(x)) \phi_\alpha(x) \quad (75)$$

仮定1より、 $\phi_\alpha(x)$ は領域 M'_{sf} において正定なので、 $E_\alpha < q(x)$ のとき、領域 M'_{sf} において近似的に $\dot{\phi}_\alpha < 0$ となる。■

仮定1は、ある一つの固有関数が実正定であることを求めているため、一般的には成り立たない。そのような場合、Schrödinger-like 方程式の線形性を利用して解を重ね合わせることで実正定関数を構築する必要があるが、Hamiltonian 演算子 $\mathcal{H}$ の固有値および固有関数は複素空間上に存在するので、値域が実空間となるような重ね合わせが必要になる。

そこでまず、おのおのの固有値および固有関数を、複素共役関係が明らかになるように並べ替える。 $j \in \mathbb{N}^+$ とし、Hamiltonian 演算子の固有値 E_j 、固有ベクトル ϕ_j 、任意定数 C_j の複素共役をそれぞれ E_j^* 、 ϕ_j^* 、 C_j^* とする。ただし、 E_j 、 ϕ_j 、 C_j が実数値の場合はそれ自身を複素共役とする。また、 $|E_1| \leq |E_2| \leq \dots$ とする。そして、必ず実数値をとる Schrödinger-like 方程式の解

$$V_j^b(x, t) := C_j e^{E_j t} \phi_j(x) + C_j^* e^{E_j^* t} \phi_j^*(x) \quad (76)$$

を重ね合わせることで適切な近似解を求めることを考える。なお、重ね合わせる固有値および固有関数の一部または全部が実数値であっても以下の議論はそのまま成り立つ。

(76)式で表現される解を ξ 個、重ね合わせたときの解

$$V^b(x, t) := \sum_{j=1}^{\xi} V_j^b(x, t) \quad (77)$$

を用いた定理を導くために、以下を定義する。

(注6) 離散化された状態変数 z についての Schrödinger-like 方程式を解いた後に連続変数 x で補間するという手法の性質上、本提案手法では離散変数 z の下で算出した離散固有値のみを使うこととする。

まず、純虚数 $\mathbf{i}$ と $E_{jR}, E_{jI}, \phi_{jR}(x), \phi_{jI}(x), k_j, \mu_j \in \mathbb{R}$ を用いて

$$E_j := E_{jR} + \mathbf{i} E_{jI} \quad (78)$$

$$\phi_j(x) := \phi_{jR}(x) + \mathbf{i} \phi_{jI}(x) \quad (79)$$

$$C_j := C_{jR} + \mathbf{i} C_{jI} := k_j \{ \cos \mu_j + \mathbf{i} \sin \mu_j \} \quad (80)$$

とし、時不変関数を

$$W_j^b(x) := 2k_j (\phi_{jR}(x) \cos \mu_j - \phi_{jI}(x) \sin \mu_j) \quad (81)$$

$$W_j^h(x) := 2k_j (\phi_{jI}(x) \cos \mu_j + \phi_{jR}(x) \sin \mu_j) \quad (82)$$

$$W^h(x) := \sum_{j=1}^{\xi} W_j^h(x) \quad (83)$$

とする。また、実定数 K を、不等式

$$\sum_{j=1}^{\xi} (|W_j^h(x)| + |W_j^b(x)|) \leq K W^h(x) \quad (84)$$

を満たすものとして定義する。なお、状態空間を有界領域としているので、 K は必ず存在する。

〔仮定2〕 ある ξ および C_j の選び方によって、 $W^h(x)$ がシステム(1)の状態空間における原点を含む空でない領域 $M_{sf}^h \subset M_{sf}$ において正定関数となる。

《定理3》 仮定2のもとで、

$$K \max_{1 \leq j \leq \xi} (|E_{jR}|, |E_{jI}|) < q(x) \quad (85)$$

が成り立つならば、 $W^h(x)$ は領域 M_{sf}^h において、近似的に Lyapunov 関数となる。◆

(証明) まず、(78)-(80)式を用いると、関数 $V_j^b(x, t)$ は

$$\begin{aligned} V_j^b(x, t) &= (C_{jR} + \mathbf{i} C_{jI}) e^{E_j t} \phi_j + (C_{jR} - \mathbf{i} C_{jI}) e^{E_j^* t} \phi_j^* \\ &= 2e^{E_{jR} t} k_j \{ \phi_{jR}(x) \cos(\mu_j + E_{jI} t) \\ &\quad - \phi_{jI}(x) \sin(\mu_j + E_{jI} t) \} \end{aligned} \quad (86)$$

と表現することができる。また、関数 $V^h(x, t)$ は(3)、(4)式の近似解なので

$$\dot{V}^h(x, t) \approx -q(x) V^h(x, t) \quad (87)$$

が成り立つ。よって、

$$\begin{aligned} -q(x) V^h(x, t) &\approx \sum_{j=1}^{\xi} \left[E_{jR} V_j^b + 2e^{E_{jR} t} k_j \right. \\ &\quad \times \left\{ \left(\frac{\partial \phi_{jR}}{\partial x} \cdot f(x) - E_{jI} \phi_{jI}(x) \right) \cos(\mu_j + E_{jI} t) \right. \\ &\quad \left. \left. - \left(\frac{\partial \phi_{jI}}{\partial x} \cdot f(x) + E_{jI} \phi_{jR}(x) \right) \sin(\mu_j + E_{jI} t) \right\} \right] \end{aligned} \quad (88)$$

がすべての時間 t に関して近似的に成り立たなければならない。したがってこのとき、おのおのの j について、近似式

$$\frac{\partial \phi_{jR}}{\partial x} \cdot f(x) \approx E_{jI} \phi_{jI}(x) - E_{jR} \phi_{jR}(x) - q(x) \phi_{jR}(x) \quad (89)$$

$$\frac{\partial \phi_{jI}}{\partial x} \cdot f(x) \approx -E_{jR} \phi_{jI}(x) - E_{jI} \phi_{jR}(x) - q(x) \phi_{jI}(x) \quad (90)$$

が成り立つ必要がある。したがって、

$$\dot{W}^h(x) \approx -q(x)W^h(x) + \sum_{j=1}^{\xi} \{-E_{jR}W_j^b(x) + E_{jI}W_j^h(x)\} \quad (91)$$

となる。いま、(84)式を満たす定数 K が存在するので、

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{\xi} \{-E_{jR}W_j^b(x) + E_{jI}W_j^h(x)\} \\ & \leq \sum_{j=1}^{\xi} (|E_{jR}||W_j^b(x)| + |E_{jI}||W_j^h(x)|) \\ & \leq \max_{1 \leq j \leq \xi} (|E_{jR}|, |E_{jI}|) \sum_{j=1}^{\xi} (|W_j^h(x)| + |W_j^b(x)|) \\ & \leq K \max_{1 \leq j \leq \xi} (|E_{jR}|, |E_{jI}|) W^h(x) \end{aligned} \quad (92)$$

が成り立つ。したがって、

$$\dot{W}^h(x) < \left\{ -q(x) + K \max_{1 \leq j \leq \xi} (|E_{jR}|, |E_{jI}|) \right\} W^h(x) \quad (93)$$

となるので、(85)式が成り立つとき $\dot{W}^h(x) < 0$ が近似的に得られる。以上により、 $W^h(x)$ は近似的に Lyapunov 関数となる。■

6. 提案手法のまとめと検討

本稿で提案した手法をまとめる。

- (1) システム(1)の状態変数 x の取りうる領域を有限領域に限定し、刻み幅 δ で離散化する。その際、1次元あたりの取りうる値を l 個とする。その後、5.2節に従って、取りうる値を1次元に並べ替える。
- (2) 正の関数 $q(x)$ を適当に定める。
- (3) 遷移確率速度を(29)-(33)式より求める。
- (4) Hamiltonian 行列を(53), (52)式より求める。
- (5) Hamiltonian 行列の固有ベクトルのうち、固有値 $E_j = E_{jR} + iE_{jI}$ が $K \max_j \{|E_{jR}|, |E_{jI}|\} < q(x)$ を満たすものだけを用いて、正定性をもつように重ね合わせる。

以上により、Lyapunov 関数の離散近似を構築する。

本提案手法にて、近似が入っているのは以下の点である。

- (A) Lyapunov 関数の状態変数での偏導関数 $\partial V / \partial x$ を差分近似している点。
- (B) 本来は非有界な状態空間を有界領域に限定している点。
- (C) Lyapunov 関数の設計の際に用いる固有ベクトルを、非零の固有値に対応したものに限定していない点。

(A) および (B) は、Fleming らによる有限差分近似²⁾をそのまま踏襲したものである。差分近似式(13)より、(A)による近似誤差は Euler 法と同程度であることが見込まれるが、厳密な誤差評価については検討の余地があるため、今後の課題である。また、境界条件が Neumann 条件 $\partial V / \partial x = 0$ を満たす場合には (B) による近似誤差は発生しないが、このようなケースは稀であることが見込まれる。(B) による誤差の程度を推測する指標は今のところわかっていない。

また、文献2)では、 $\delta \rightarrow 0$ において、近似解が真の解に収束することを証明している。しかし、境界条件が Neumann 条件を満たすケースしか扱っていないため、本提案手法にそのまま当てはめることはできない。

本提案手法では、Lyapunov 方程式(3), (4)の近似解として求めた時変 Lyapunov 関数 ($V_\alpha(x, t)$ または $V^h(x, t)$) を用いて、時不変 Lyapunov 関数 ($W_\alpha(x)$ または $W^h(x, t)$) を構築している。したがって、得られた時不変 Lyapunov 関数を Lyapunov 方程式の近似解として考えるならば、(C) に起因した誤差が発生する。しかし、本稿では、時不変 Lyapunov 関数を得ることを主目的としているため、5.5節で明らかにしたように、小さな固有値だけを選べば (C) は $\dot{W}(x)$ の負定性の障害とはならない。

7. 例題

本稿で示した提案手法を用いて、いくつかの例題を考える。なお、状態空間の計算領域については、各システムにおいて、原点のみが孤立平衡点となるようにさえとればよく、格子点数については、実際に数値計算を行ない十分な数の近似値が得られたものを用いている。また、本章の例題では、2次形式の関数（もしくはそれに近い関数）が(3), (4)式の解のひとつとなるように $q(x)$ を設計しているが、本提案手法は解が2次形式（またはそれに近い形）となることを保証しない。

7.1 1次元システム

システム

$$\dot{x} = -\sin x = f(x), \quad x \in M_1 \subset \mathbb{R} \quad (94)$$

において、状態の領域を $M_1 = \{-1.0 \leq x \leq 1.0\}$ 、取りうる値を $l = 21$ 個に限定すると、状態の刻み幅は $\delta = 0.1$ となる。また、 $q(x) = 2.0$ とすると、遷移確率速度は、

$$w(x_d \rightarrow x_d \pm \delta) = \frac{f^\pm(x_d)}{\delta} \quad (95)$$

$$w(x_d \rightarrow x_d) = -\frac{|f(x_d)|}{\delta} \quad (96)$$

$$w(x_d \rightarrow x_d') = 0, \quad (x_d' \neq x_d, x_d \pm \delta) \quad (97)$$

となる。なお、システム(94)は確定システムなので、恒等的に分散は0である。これを用いると、Hamiltonian 行列は $l \times l$ の三重対角行列

$${}_1\mathcal{H}_1 = \frac{-1}{\delta} \begin{bmatrix} 2.0 - |f(z_1)| & f^+(z_1) & 0 & \cdots \\ f^-(z_2) & 2.0 - |f(z_2)| & f^+(z_2) & \\ 0 & f^-(z_3) & 2.0 - |f(z_3)| & f^+(z_3) \\ \vdots & & & \ddots \end{bmatrix} \quad (98)$$

Fig. 1 Approximated Lyapunov function of system (94)

となる。

この行列の固有値および固有ベクトルを数値計算により求め、その固有ベクトルを適切に重ね合わせると、 $W(x_d)$ が Fig. 1 となった。この図は、隣り合う離散値を線で結んだものである。これにより、関数 $W(x_d)$ は計算領域において正定となっている。また、計算結果を用いて $\dot{W}(x) = \partial W / \partial x \cdot (-\sin x)$ を線形近似により求めると、Fig. 2 となり、計算領域において負定となっていることがわかる。

以上により、システム(94)における Lyapunov 関数を近似できた。

7.2 2次元システム

システム

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_2 \\ \dot{x}_2 &= -2x_1 - 2x_2 - x_2^3 \end{aligned} \quad (99)$$

において、状態の領域を $M_2 = \{-1.0 \leq x_1 \leq 1.0, -1.0 \leq x_2 \leq 1.0\}$, x_1 および x_2 の取りうる値を $l = 21$ 個に限定すると、状態の刻み幅は $\delta = 0.1$ となる。そして $q(x) = 1.0$ とすると、

$$w(x_d \rightarrow x_d \pm \delta e_i) = \frac{f_i^\pm(x_d)}{\delta} \quad (100)$$

$$w(x_d \rightarrow x_d) = -\frac{|f_1(x_d)| + |f_2(x_d)|}{\delta} \quad (101)$$

$$w(x_d \rightarrow x_d') = 0, (x_d' \neq x_d, x_d \pm \delta e_i) \quad (102)$$

が得られる。ここで $i = 1, 2$ である。これを(66)式に代入すると、Hamiltonian 行列 ${}_2H_1$ が得られる。

この行列の固有値および固有ベクトルを数値計算により求め、その固有ベクトルを適切に重ね合わせると、 $W(x_d)$ が Fig. 3 となった。

原点付近における $W(x_d)$ の値は正定性を保っているが、原点からある程度離れると減少に転じているところがある。これは計算領域の問題であると思われる。つまり、領域 M_2 内にて、関数 $W(x)$ における原点を含む連結な閉領域のうち最大となるものを Ω とする(図中網掛け部分)と、 Ω の外では、状態の流れが領域 M_2 からはみ出してしまう可能性があるため、原点への収束性について明確な考察をすることができない。したがって、Fig. 3 における Ω 内での $W(x_d)$ の値を、 $W(x)$ の近似として考える。ここで、 Ω の境界を $\partial\Omega$ とする。

Fig. 2 Approximated $dW(x_d)/dt$ of system (94)

Fig. 3 Approximated Lyapunov function of system (99)

Fig. 4 Approximated $dW(x_d)/dt$ of system (99)

また、この計算結果を用いて $\dot{W}$ を双線形近似^(注7)により求めると、Fig. 4 となり、領域 Ω 内において負定となっているものと推測されることから、システム(99)の Lyapunov 関数を近似的に求めることができた。

Lyapunov 方程式の近似解を求める先行研究では、関数 $W(x)$ によって状態が計算領域から外に出てしまうような流れがある場合、繰り返し計算により値が発散してしまうことがよくある(たとえば、本稿 4.1 節で示したような場合)。しかし、本稿で提案した手法は、行列の固有ベクトルを重ね合わせているだけなので、発散は起こらない。したがって、本節で示した例題のような場合でも、計算領域内に、Lyapunov 関数として有効な領域を求めることができる可能性が高い。

8. おわりに

本稿では、確定的な常微分方程式システムを確率化し状態の離散化を行なった後に、Lyapunov 方程式を量子化すること

(注7) 一つの格子点を、隣接する4つの格子点の内分点と考えて、値を求める方法

で Schrödinger-like 方程式を導くことができることを示した。いい換えれば, Lyapunov 関数を求める問題を, 量子力学的システムにおける波動関数を求める問題に置換できることを示した。その際, Schrödinger-like 方程式中に現れる Hamiltonian 演算子の非 Hermite 性により, 波動関数が複素関数とすることがあるが, その場合の解決策を得た。また, 波動関数の重ね合わせにより Lyapunov 関数の離散近似を構築する手法を提案した。

また, 本稿の提案手法の有効性を示すため, いくつかの例題について数値計算を行なった。

確定システムを確率化した後の議論のほとんどは, 分散がある場合を含んでいるので, 確率安定な確率システムにおける Lyapunov 関数を構築できる可能性がある。

最後に, 本稿について多くの貴重なご意見を頂いた奈良先端科学技術大学院大学の中村文一助教, Markov 過程の量子化に関する参考文献をご紹介頂いた東京大学の西成活裕准教授に深く感謝いたします。

参 考 文 献

- 1) F.C. Alcaraz, M. Droz, M. Henkel and V. Rittenberg: Reaction-diffusion processes, critical dynamics and quantum chains, *Annals of Physics*, **230-2**, 250/302 (1994)
- 2) W.H. Fleming, H.M. Soner: *Controlled Markov processes and viscosity solutions*, Springer-Verlag (1993)
- 3) T. Itami: Nonlinear optimal control as quantum mechanical eigenvalue problems, *Automatica*, **41-9**, 1617/1622 (2005)
- 4) H.K. Khalil: *Nonlinear systems, second edition*, Prentice Hall (1996)
- 5) H.J. Kushner: *Probability methods for approximations in stochastic control and for elliptic equations*, Academic Press, New York (1977)
- 6) W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling and B.P. Flannery: *Numerical recipes in C: The art of scientific computing, second edition*, Cambridge University Press (1993)
- 7) N. Rajewsky, L. Santen, A. Schadschneider and M. Schreckenberg: The asymmetric exclusion process: comparison of update procedures, *Journal of statistical physics*, **92-1/2**, 151/194 (1998)
- 8) H.H. Rosenbrock: Doing quantum mechanics with control theory, *IEEE Transactions on Automatic Control*, **45-1**, 73/77 (2000)
- 9) S. Sastry: *Nonlinear systems: Analysis, stability, and control*, Springer (1999)
- 10) 伊丹哲郎: 量子力学的固有値解析を使った非定常最適フィードバック則の近似, システム制御情報学会論文誌, **19-6**, 211/219 (2006)
- 11) 井村順一: システム制御のための安定論, コロナ社 (2000)
- 12) エクセンダール: 確率微分方程式-入門から応用まで, シュプリンガー・フェアラーク東京 (1999)
- 13) 大住 晃: 確率システム入門, 朝倉書店 (2002)
- 14) 北原和夫: 非平衡系の統計力学, 岩波書店 (1997)
- 15) 国松, 浜田: 集中・分布システムの安定論, 実教出版株式会社 (1988)
- 16) 笹本智弘: 1 次元排他過程の定常状態について: 行列の方法と q -直交多項式, 京都大学数理解析研究所講義録, **1221-4**, 49/69 (2001)
- 17) シッフ: 量子力学, 吉岡書店 (1961)

- 18) 深尾 毅: 分散システム論—熱力学的システム論—, 昭晃堂 (1987)
- 19) 保江邦夫: 数理物理学方法序説 3 量子力学, 日本評論社 (2001)
- 20) 山本, 中村: 解析力学 I,II, 朝倉書店 (1998)

[著 者 紹 介]

西 村 悠 樹 (学生会員)

2005 年北海道大学大学院工学研究科システム情報工学専攻修士課程修了。同年北海道大学大学院情報科学研究科システム情報科学専攻博士後期課程に進学, 現在に至る。システム制御情報学会の会員。

山 下 裕 (正会員)

1986 年北海道大学工学研究科修士課程修了。88 年同博士課程退学。同年北海道大学工学部助手。96 年奈良先端科学技術大学院大学情報科学研究科助教授。04 年北海道大学大学院情報科学研究科教授, 現在に至る。非線形制御理論などの研究に従事。博士 (工学)。システム制御情報学会, 電子情報通信学会, 化学工学会などの会員。