

パデ解析による波動関数の特異性診断 —その壱—¹

山田物理学研究所 山田弘明²
立命館大学 理工学部 池田研介³

(2012年5月///日受理)

「天地は一体にして上無く下無く統べて互性なるべし」⁴

abstract: 量子不可逆性の起源を波動関数の特異性に探る試みを紹介する。数値的に波動関数の特異性を診断する方法としてパデ解析 (パデ近似) を採り上げ、その可能性を本稿と次稿で試してみる。準備として、本稿ではパデ近似を紹介し、それに関して知られている、いくつかの数学的知見を紹介する。これに平行して、パデ解析の応用可能性の実際を試すために、真性特異点、分岐点、自然境界などの諸特異性が、パデ解析でどのように検出されるかを具体的なテスト関数で「実験」する。特に自然境界に関心があるので空隙ベキ級数やランダム冪級数に関する定理や準解析関数との関係についても議論する。波動関数の特異性診断の結果は次稿において議論される。

1 はじめに

代表的な可積分系である調和振動子の運動やケプラー運動、さらに対称独楽の運動など教科書に取り上げられる規則的な(多重)周期運動に代表される決定論的な力学的世界観と、日常生活の中に頻出する現実の不規則で予測困難な時間発展現象とのギャップは、カオスという現象が存在する古典系の世界では埋められたかに見える。しかし、ミクロ世界を支配する量子論に目を向けたとき、古典論世界には存在しない波動としての可干渉性が強調される一方で、量子系に於ける運動の不規則さ、予測困難性というダイナミックスの複雑さの解明に関する視点が未だきわめて曖昧であるように見える [1, 2]。

ポアンカレは古典力学の運動に関し、積分可能で規則的な多周期運動を帰結するような系が自然な摂動にさらされると、エネルギー以外の解析的な運動の積分がなくなる事を証明し、その意味で積分可能な系が存在する確率が零である事を示した [3]。古典力学系と

¹この原稿は二部構成の第一部である。

²E-mail: hyamada[at]uranus.dti.ne.jp

³E-mail: ahoo[at]ike-dyn.ritsumeai.ac.jp

⁴安藤昌益「自然真営道」

違って、束縛量子系の量子状態はそれぞれが古典調和振動子と言っていいような安定な振動をする。すなわち、量子系は基本的に多重周期運動の重ねあわせであり、波動としての可干渉性(コヒーレンス)を保ちつつ運動する。古典論では摂動によって可積分性が壊されて現れる不安定性(指数関数的不安定性、すなわち multiplicative な記憶喪失)が乱雑さの原因であるが、量子論では指数関数的不安定性は実現し得ないため、量子論における運動に古典系と同格の不規則性が生じることはありえない。実際、すぐ後で言及するように不規則格子を伝播する電子の波束でさえ時間反転に対して驚くべき安定性を保つ。

最近の量子論の発展は、工学的応用と制御を目指すかのように見える。この場合、量子計算や量子通信等の量子情報処理を請け負うものは、このように安定な量子ダイナミクスであろう。さらに、目的にかなうような量子性をきわだたせる人工量子系の設計問題も盛んになっている。

しかし、一方で、量子系ではコヒーレントなはずの量子波束が、外場や他自由度との接触といった「自然な摂動」により容易に古典確率化するという事実がある。系によっては、その古典アンサンブルの運動を生成するにあたり、古典論を使うより対応する量子論の波動関数を使う方が数値計算に必要な時間が少ないというパラドックスすら存在する⁵。そのような例に出会うと、「量子論それ自体において不可逆世界を**自発的に**作り出す契機を内包している」と考えたくなる。実際に、上記の描像を示唆する現象的証拠をいくつか示しておこう。

最初の例は、古典極限で相空間が有界の理想カオス系になる量子系を二つ相互作用させて、その一方の自由度を消去した時の量子エントロピー(vN エントロピー)⁶を結合定数の関数として見たものである(図1参照)。二つの量子系が古典的に無視できる \hbar 程度の結合定数で結合すると相転移的に vN エントロピーが0から最大値にまで増大する。これは、二つの系の状態が量子的な微小摂動で分離不能に絡み合うことを明確に示唆している[4]。

もう一つの例は、非有界量子系の典型例である一次元不規則格子の拡散運動に対して行った数値的時間反転実験に観測することができる⁷。波束の平均二乗変位は Dt (t は経過時間、 D は拡散係数) のように正常拡散的に広がりつつある波束に対し、ある時刻で強度 η の摂動を加え、ついで時間発展規則を完全に反転させて系の時間発展が逆転するかどうか見たものが図2である[5, 6]。明らかに摂動強度にある閾値 η_{th} が存在し、この値より小さな摂動に対して系はコヒーレントに振る舞い運動は反転して元に戻ろうとする。このような安定性は指数関数的不安定性を備えた古典拡散運動ではとても期待できない。しかし、その閾値より大きい摂動に関しては反転直後から元に戻ろうとする記憶を完全に喪失して拡散運動が回復し、波動関数はコヒーレンスのない古典拡散運動と化す。閾値の大きさは先の例と同じく \hbar に比例する。このような運動は少数自由度の系であっても、古典極限でカオスになるいわゆる量子カオス系や、不規則格子系できわめてありふれて観察できる。しかも、この時間反転特性は系の詳細によらない普遍性をもつ[5, 6]。

⁵これは量子計算機アルゴリズムか!

⁶フォノンイマンエントロピー、観測に伴うエントロピーの最小値、つまり「最良の確定的観測」によって軽量した不確定さ。

⁷一次元不規則系は通常 Anderson 局在するので2個以上の phonon mode と結合させている。

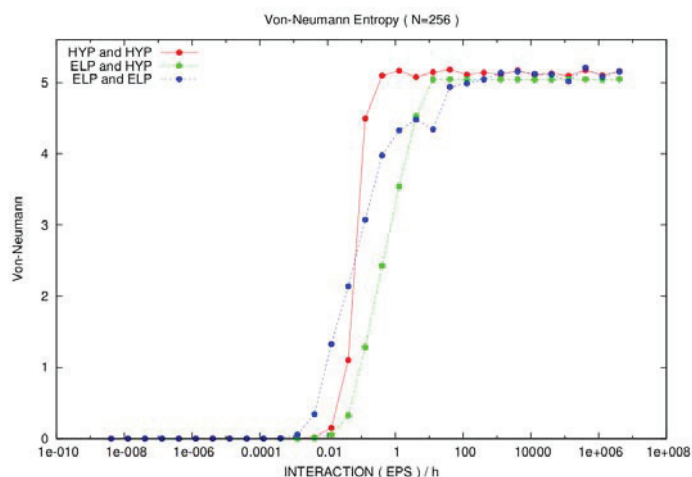


図 1: (Color online) 量子エントロピーの結合定数 (ϵ) 依存性。ここでは、二つの量子猫写像を結合したものをを用いている。HYP や ELP は、二つの系のパラメータによる相空間構造の異なる状態を表す。詳細は文献 [4] を参照のこと。

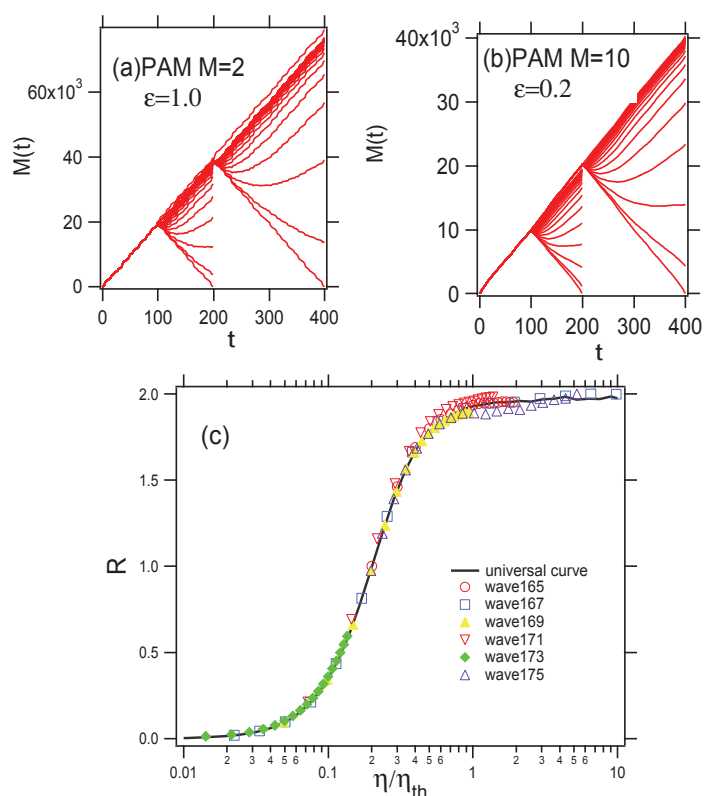


図 2: (Color online) (a)(b) 平均二乗変位の時間反転の様子。(c) 時間反転特性の反転時摂動強度依存性。系は一次元ランダム系に 2 個以上の phonon モードを結合しており、 ϵ はその結合強度を表す。詳細は文献 [5, 6] を参照のこと。

実際、拡散運動の原因が古典カオス的な不安定性であれ、格子をつくるポテンシャルの不規則性であれ、外部からパラメトリックに印加される雑音であれ、「統計的に並進対称な」量子系ではコヒーレントな運動がむしろ稀であり、不可逆的に見える複雑な運動（ダイナミクス）がむしろ普遍的であるように見える。量子系と言えばコヒーレンスを維持する規則性のある系——典型的には束縛系なら調和振動子、水素原子、非束縛系なら Bloch 電子と言った古典可積分系の量子化版——をついつい連想しがちであるが、そのような系はむしろ例外中の例外であり、自然な摂動にさらされた量子系は自発的にコヒーレンスを喪失すると思われる。コヒーレンスの喪失といえば Caldeira-Leggett 模型に代表されるようなマクロな環境と相互作用して「多勢に無勢でやむを得ずコヒーレンスを奪われる」量子系を想像しがちである。しかし、そのような消極的なものではなく、結合カオス系の例に見るように量子系は自発的にコヒーレンスを喪失する契機を内包するように見える。これを**脱可干渉性**と表現してもいいであろう⁸。

ポアンカレが証明したように、古典論では多重周期運動に代表される積分可能運動は、任意強度の自然な摂動を印加することによって存在を保証されなくなる。このポアンカレの非可積分性定理は、時計のように規則正しく一定の単位で進行する機械的なニュートンの決定論的世界の描像に疑問を投げかけた。同様の視点が量子力学の世界でも存在するのではなかろうか？「自然な量子系とは自発的にコヒーレンスを喪失する契機を内包する脱可干渉的な系である」、とみる根拠が正当化できるならば量子系に対する見方も一変する。少なくとも量子系を制御可能な工学的応用という偏った方向からしか見ない、ボブとアリスが走り回る人工的に純粋培養された世界の中でしか実現されないダイナミクスとは質的に異なる、「自然」な量子ダイナミクスとは何かという問いに輪郭を与えることができるはずである。

本稿の記事は一見非常にテクニカルに見えるかもしれないが、実はそのような妄想が背景にある。それを踏まえて論文の動機を簡潔に記すと次のようになる。

量子系に於ける「脱可干渉性」あるいは「自発的不可逆性」の発生を促すような数理的構造が何かをつきとめたい。それらを導く量子系の波動関数は、特異な構造をもつものであるに違いない。そのような複雑さ、その解析的特異性を解明する第一歩の試みを「物性研究」という public な場を借りて人に見られつつまとめてみたいというのが、本稿の主題である。

ここで、再び古典力学のポアンカレの定理に戻り、手がかりを探ってみよう。ポアンカレは自然な摂動によって系の完全可積分性が破壊された状態の研究を「力学の基本問題」としてとした。それに対して、Kolomogorov-Arnold-Moser(KAM)は「位相論的には一般的摂動が相空間殆ど至るところを病的にするが、測度論的には有限測度上で運動は可積分の規則運動を保つ」ことを証明した。確かに、我々が住む実(数)の世界ではその通りであり、相空間のほとんどの部分では可積分系における多重周期運動、即ちトーラスが生

⁸量子カオス系において、可積分系とは異なる量子状態の複雑さを、位相空間における零点配列の乱れや位相情報の欠陥として特徴づける研究も行われている [7, 8]。量子状態に内在する不可逆性の起源を探りたいという動機もふくめ、本研究と通じる点がある。

き残る。ところが、複素空間を考え、トーラスを複素世界へ解析接続するとトーラスには必ず消滅する限界が存在すると言われている。そこでは特異点が集積し、それ以遠には Weierstrass の意味でどうしても出て行けない境界が存在し「自然境界」と呼ばれている⁹。自然境界は、摂動強度が小さければ複素世界にわだかまっているが、摂動強度が増大するとそれが実面（実数のリアルな観測世界）に接近してくる、すると実面の運動が非常に複雑なものになり時間反転困難な運動形態であるカオスが出現する¹⁰。「このアナロジーはそのまま量子世界でも成り立つのではないか」ということが、我々がずっと以前から抱いてきた妄想のひとつであった [9, 10, 11]。脱可干渉性は波動関数の自然境界と関係するのではないかと。この妄想を具現化するためには、波動関数の複素領域を含む解析性、特に自然境界というものの有無を調べる必要がある。しかし、それは容易なことではない。そもそも数値解しか求まらないような波動関数の特異性を診断する手法は、パデ近似くらいしか知られていない¹¹。以下においては、留数の情報も含めパデ近似の情報を様々な形で利用しながら、関数の特異性の議論を行うため、パデ近似のことを「パデ解析」と呼ぶこともある。その意味で本稿の表題も「パデ解析」とした次第である。

本稿では、パデ近似と自然境界の紹介を中心に、次稿において、力学系の不変曲線の特異性と量子系の波動関数の特異性に関するパデ近似による具体的診断について示す予定である。以下のような2部構成である。

その壱 (本稿):パデ近似とその簡単な応用、自然境界を中心に説明

その弐 (次稿):力学系の不変曲線の特異性、量子状態の特異性に関する物理が中心

改めて、本稿の目的の一つは、パデ近似を用いることにより、様々なタイプの関数の特異性がパデ近似の極の分布などによりどう表されるのか、数値的に調べることである。パデ近似で検出する特異性は極のみなので、真性特異点、分岐点、自然境界などの特異性がどう表せるかを具体的なテスト関数で診断していく。Baker らはパデ近似に関する数理的な研究を長年続けており、その著書には様々な観点からパデ近似に関連することがまとめられている [14, 15, 16, 17]。それにより、単純な極や真性特異点はパデ近似のオーダーを上げて調べることであり、特定できることがある程度知られている。しかし、分岐点(ブランチカット)や自然境界を形成する特異性をパデ近似によるポールによりどの程度近似できるのかなど、不明な点も多い。

本稿の構成は次のようになる。2節と3節で、パデ近似の簡単な説明をし、4節で、孤立極、真性特異点、分岐点をもつテスト関数への適用結果を示す。5節は自然境界をもつ空隙級数に対しパデ近似の適用結果をあたえる。6節では、ランダム級数に対するパデ近似について議論し、ノイズの効果を考察する。7節では、テイラー展開やZ-変換の係数にノイズが入った場合に対しパデ近似を利用し、ノイズを取り除くことが信号解析などにも

⁹解析関数をもつ自然な解析接続可能領域の限界という意味で「自然境界」とよばれたのであろう。次節でもう一度触れる。

¹⁰自然境界はトンネル効果に劇的効果をおよぼす [12]。これはポアンカレの定理による保存量消失後の力学構造が量子現象として顕在化したものである。トンネル軌道と自然境界に関連して文献「Dynamical tunneling」 [13] の表紙にはそのイラストが載せられている。(ちなみに、そのイラストには間違いがある。)

¹¹パデ近似を拡張した有理型関数近似も存在する。

利用されていることの紹介を通して、準解析関数との関連に言及する。付録には、パデ近似の計算方法や本文を補う数学定理などを記してある。本稿に関連する複素関数論の数学的内容に興味のある方は、文献 [18, 19, 20] に詳しい説明があるのでそちらを参照されたい。

まずは、本題に入る前に次節において、簡単にパデ近似と自然境界のことを概観することから始める。なを、パデ近似や自然境界に馴染みのなる読者は、本稿（その壺）の以後の部分をスキップして、次稿「パデ解析による波動関数の特異性診断-その貳-」から読み始めても良い。

2 パデ近似と自然境界:概観

パデ近似 (Padé 近似) が数学に登場してから約 150 年、物理学の問題に応用されてから約 40 年が経過している [14, 15, 16]。既に Padé 近似に関する論文は 10^4 のオーダーは存在するであろう。特に、物理学における応用分野としては、散乱理論における Rayleigh-Schrodinger 摂動級数 [22]、臨界現象 [23, 24, 25, 26, 27] をはじめ、時系列データからのノイズ除去 [28, 29]、ハミルトン力学系位相空間軌道の特異性の検出 [30, 31, 32] などがある。

数学的にはパデ近似は関数の解析性を評価するために用いられる。実際に、パデ近似は関数が特異点を含む場合テイラー展開による近似に比べはるかによく機能する。具体的な定義などは次節で行うことにして、簡単にその様子を示す。まず、関数 $f(z) = \sqrt{\frac{1+2z}{1+z}}$ を考える。この関数は $z = -1$ と $z = -1/2$ に分岐点をもち、収束半径は $|z| < 1/2$ である。(詳しくは次節以降で議論するが) これを分子、分母それぞれを 2 次までとった (4 次の) [2|2] パデ近似を求めると、

$$f(z) \sim \frac{16 + 52z + 41z^2}{16 + 44z + 29z^2} \quad (1)$$

となり、 $x \rightarrow \infty$ においてすら、 $41/29 = 1.4137\dots$ となり厳密解 ($\sqrt{2} = 1.4142$) をかなりよく再現する。つまり、この近似は収束半径を超えたところでも意味を持っていることがわかる。もともと、収束半径を決めている特異点は、実軸上の高々一点でしかない。その特異点で関数は分岐したり、発散したりするが、複素空間でうまく経路をたどることができれば、これらの特異点による収束半径を超えても解析接続可能である¹²。

パデ近似の物理への応用としては、臨界現象がなじみ深い [23, 26]。Lee と Yang は有限系の分配関数の零点を調べることによる相転移の研究を開拓した [24]。これらの零点は、一般には温度や密度や逸散能 (fugacity) の様な実際の物理量に対応する正の実軸上にはないが、熱力学的極限において実軸に接近し、これが相転移点に対応する。たとえば、Ising

¹²級数が発散する「いわゆる特異摂動問題」で Padé 近似が威力を発揮するわけである。しかし、パデ近似の数学的正当性に関する証明は無いようである。多くの数学的ミステリーが解析性に関わっているというが、Padé 近似もその一例であろう。

系の帯磁率 χ に対する低温展開や高温展開計算

$$\chi = \sum_n c_n u^n \quad (2)$$

を考え、臨界点 $u = u_c$ で帯磁率 χ は次のように発散するものとする。

$$\chi \sim (u - u_c)^{-\gamma}. \quad (3)$$

ここで、 u は温度や相互作用の適当な関数と思えばよい。このとき、対数微分は、

$$\frac{\chi'}{\chi} \sim \frac{\gamma}{(u - u_c)} \quad (4)$$

となり、臨界点 $u = u_c$ は極に、臨界指数 γ はその留数に対応する。これらの展開で数少ない展開係数しか求められない場合でも、パデ近似によりかなり良く、臨界点や臨界指数が得られることは有名である。パデ近似に使う展開係数 c_n の数が増えるほど、複素平面での特異性（極の数）は増える。もし係数 c_n が n に関し十分速く減衰するなら $u = u_c$ における特異性は素直になり、微分可能性が高まる。2次元 ising model の感受率は複素温度平面で自然境界をもつことが示されており、高温展開に特異な短距離成分 ($\log T$ 項) と関係して、普遍的なスケーリング極限 (臨界点近傍) からのずれの原因となる推測もある [25]¹³。

著者の一人が、相転移以外の物理の内容で、特に量子系で「自然境界」という文字を初めて目にしたのは Economou によるグリーン関数の本 [33] であった。 H をエルミート演算子として、 $(z - H)G(z) = 1$ で定義されるものがグリーン関数である。このとき、グリーン関数 $G(z)$ は実軸（エネルギー軸: $E = \text{Re}z$ ）上以外では解析的である。 H が離散固有値を持つ場合、実軸上の H の固有値がグリーン関数 $G(z)$ の極に対応し、極の位数が固有値の縮退度に対応する。このとき、固有状態は指数関数的局在を示す。一方、 H が連続固有値を持ちブロッホ状態などの様に空間的に減衰しない広がった状態の場合、グリーン関数は実軸上で存在しブランチカットを持つ。他方、それらの中間的なものとして、 H が連続固有値を持ち実空間で固有関数が減衰する状態が存在する場合は、グリーン関数は実軸で存在しない。すなわち、「実軸が自然境界となる」という、推測が記されていた。しかし、その後ランダム系研究や局在・非局在転移などの研究の中で自然境界という特異性に言及したものはないと思う。それは、ハーパーモデルなどの特異連続スペクトルを持つような準周期系や準結晶の研究が盛んになっていったからかもしれない。この量子状態とグリーン関数の解析性に関しては、次稿においてより詳細に議論する予定である。

¹³ 「自然境界 (natural boundary)」と呼ぶ正確な理由は不明。地理学の用語で、政治境界ではなくて、海洋や河川 や山やそれらの混合領域を境として地表空間を表現することを「自然境界」と呼ぶ。我々も、複素変数空間での関数の特異性の位置やその性質に関する「地図」を作成したい、ということから「自然境界」と呼ぶことの意味は実感できる。解析接続で行けない境界のあちら側では、「国境の長いトンネルを抜けると雪国であった」ごとく、別世界が広がっているかもしれない。(この論文ではトンネル効果などは扱わないが。) ちなみに、自然境界で検索すると、物理の文脈では意味の全く異なる「自然境界条件」の検出がほとんどである。

3 パデ近似

この節では、パデ近似の定義とその収束性などの基本的性質、および経験的に知られている事などを簡単に整理しておく。

関数 $f(z)$ の $z=0$ まわりでテイラー展開は、

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n, \quad (5)$$

で与えられるものとする。 c_n は展開係数を表す。テイラー展開を z^N の項 (N 次の多項式) までで打ち切ったものを $f^{[N]}(z) = \sum_{n=0}^N c_n z^n$ と表すことにする。これに対して、 $N = L + M + 1$ 位の有理関数

$$f^{[L|M]}(z) \equiv \frac{P_L(z)}{Q_M(z)} \quad (6)$$

$$= \frac{a_0 + a_1 z + a_2 z^2 + \dots + a_L z^L}{1 + b_1 z + b_2 z^2 + \dots + b_M z^M}, \quad (7)$$

を考える。

次の条件を満たすとき、 $f^{[L|M]}(z)$ を関数 $f(z)$ のパデ近似 (Padé 近似、パデ展開) という。 $([L|M])$ パデ近似とも表記する。

$$f(z) - f^{[L|M]}(z) = O(z^{L+M+1}). \quad (8)$$

この条件は、

$$f^{[L|M]}(0) = f(0), \quad (9)$$

$$\left. \frac{d^k}{dz^k} f^{[L|M]}(z) \right|_{z=0} = \left. \frac{d^k}{dz^k} f(z) \right|_{z=0}, \quad k = 1, 2, \dots, L + M, \quad (10)$$

と同等である。 $M=0$ の場合がテイラー展開である。またこの条件式は、 $(L+M+1)$ 個のテイラー展開の係数から $(L+M+1)$ 個のパデ近似の係数 $\{a_i\}$, $\{b_i\}$ を決める次の同時方程式になっている。

$$\sum_{j=1}^M c_{L+i-j} b_j = -c_{L+i} \quad (i = 1, \dots, M), \quad (11)$$

$$\sum_{j=0}^n c_{n-j} b_j = a_n \quad (n = 0, \dots, L). \quad (12)$$

方程式 (11) により、係数 $\{b_i\}$ を決定し、それを用いて、方程式 (12) により、係数 $\{a_i\}$ を決定すればいいことになる。式 (11) における $M \times M$ 行列が特異行列 (非正則行列) に近くなる場合における数値計算上の注意のいくつかを付録 A に挙げてある。

一般的には、パデ近似における分子・分母の多項式の次数が L, M よりも小さくなることがあり得る。このとき、 $\mu \leq L, \nu \leq M$ で整数の組 (μ, ν) が

$$\frac{P_\mu(z)}{Q_\nu(z)} \in f^{[\mu|\nu]}(z), \quad (13)$$

を満たす一番小さな整数なら、

$$\delta \equiv \min\{L - \mu, M - \nu\}, \quad (14)$$

をパデ近似 $f^{[L|M]}(z)$ の「欠陥」と呼ぶことがある。すなわち、

$$f^{[L|M]}(z) - f(z) = O(z^{L+M+1-\delta}). \quad (15)$$

となるとき、パデ近似 $f^{[L|M]}(z)$ に関して欠陥 δ をもつという。特に、5節で見るような、展開係数 $\{c_i\}$ が疎らにしか存在しない空隙級数のパデ近似などは欠陥を持ちやすい。

以下では、関数 $f(z)$ の $(L + M + 1)$ 位のパデ近似の表示を $[L|M]$ (または、 $[L|M]_f$) と表す場合もある。一般に、 L と M は $L + M + 1 = N$ を満たす正の整数として、 $[L|M]$ パデ近似が一意に存在する。これは、式 (7) において、 $b_0 = 1$ と設定 (規格化) したためである。これが無い場合は、方程式 (11) が解けるために、行列式が正則であるなどの条件が加わる。

このように $[L|M]$ パデ近似の関数を M 行 L 列に並べたもの、

$$\begin{array}{cccccc} [0|0] & [0|1] & [0|2] & [0|3] & \dots & \\ [1|0] & [1|1] & [1|2] & [1|3] & \dots & \\ [2|0] & [2|1] & [2|2] & [2|3] & \dots & \\ [3|0] & [3|1] & [3|2] & [3|3] & \dots & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \end{array} \quad (16)$$

をパデ表とう。この一般のパデ近似について、要素間の関係 (連分数表示の漸化式) を使いそれ以外の要素を決めていく研究や、一般のパデ関数表の要素を数値的に決めていく場合の安定性に関する研究もおこなわれている。

さらに、パデ近似の収束性に関しては、対角型パデ近似 $L = M$ の場合のほうが非対角型よりも良いことが知られている。これは、対角型パデ近似は連分数展開による近似と同型であるので、連分数展開の収束性の良さから予想できることである (付録 B)。対角型の $[M|M]$ パデ近似や準対角型の $[M-1|M]$ パデ近似、 $[M|M-1]$ パデ近似がよく利用される。本稿および次稿の数値計算では $L = M$ の対角型パデ近似のみを用いる。

一般に、パデ近似は分母 $Q_M(z) = 0$ の極により未知関数の特異性を表現できる場合に有用である。その意味では、分子の係数 a_n は重要ではない。しかし、数学的には、パデ近似の極が一般的な特異性 (分岐点、真性特異点、自然境界など) をどのように表現するのか不明である。極や真性特異点を検出する場合より、ブランチカットや自然境界を検出する場合に次数の高いパデ近似が必要となると考えられる。また、以下に述べる Nutall-Pomeranke の定理をのぞいてパデ近似の次数が上がれば、未知関数のより良い近

似になるという完全な証明は無いようである。以下の節では、数値的な安定性を考慮して $M = 20 - 70$ 程度の対角型の $[M|M]$ パデ近似を用いる。

この節を終える前に、解析性が未知の関数にパデ近似を適用する場合に知られているいくつかの注意点を挙げておく [15]。

- 近似の次数をあげても分子、分母の多項式の係数の収束性はないと思われる。つまり、分子、分母の次数をひとつ増減させただけで係数全てが変化する。これは、Padé展開が無限展開形を打ち切ったものでないという事実と関わる。
- 近似の次数を変えて、大きく動く（不安定な）極や零点は有意なものでないと思われる。極の位置や集積の仕方に関しては、次数を上げて収束性を check すべきである。特に、分布の対称性が悪いものは、高次のオーダーまでとり収束を確かめるべきであろう。
- 収束半径が大きい（大きな値の極がある）場合などは、展開係数をスケールして計算精度を保つべきである¹⁴。
- 一般にパデ近似は分岐点 (branch point) よりも極を探すのに適している。有限個の分岐点をもつ場合の対角型パデ近似はそのほとんどの極と零点が分岐点から発した孤に沿って生じる。極と零点が交互に並ぶとその先には、分岐点がある。（例は後で示す。）
- 零点 ($P_M(z) = 0$ の根) と極 ($Q_M(z) = 0$ の根) はしばしば打ち消しあう。これは、pole-zero ghost pairs とか spurious pole-zero pairs と呼ばれている。この pair になったパデ近似の極と零点は特異性の評価から取り除くべきである。（例は後で示す。）
- 有界なランダムな係数をもつ多項式の極と零点は単位円上に集積する (Froissart doublets)。パデ近似の次数が上がるほど、計算による丸め誤差の混入で生じるノイズによる極も生じる。特に、未知関数のがのもつ自然境界などに対応するパデ近似の極の集積と区別ができなくなるため注意が要る。

さらに、パデ近似の収束性に関する注意を付しておく。関数 $f(z)$ が正則関数の場合や（有限個の零点や極をもつ）有理型関数の場合、パデ近似の収束定理は存在する [34]。

Nuttall – Pomeranke の定理 (1970, 1973) : $f(z)$ が孤立極 (数は有限、多重極も含む) や真性特異点を除いて正則とする。任意の正の数 ϵ, δ に対し、ある M_0 が存在し、全 $M > M_0$ とそれで決まる $L \sim M$ に対し、 $|f(z) - f^{[M|M]}| < \epsilon$ が、 δ 以下の測度をもつ集合を除いたある閉有界領域 R で成り立つ。

一般に、パデ近似の次数を上げるほど原理的には近似の精度が上がる。また、数値実験でもある程度まで近似の精度は良くなる事は確認できる。しかし、有限個の極しかない正

¹⁴収束半径 R のべき級数展開 $f(z) = \sum_n a_n z^n$ を考える。このとき、 $\sum_n a_n (Rz)^n$ が自然境界 $|z| = 1$ をもつならば、 $f(z)$ は自然境界 $|z| = 1/R$ をもつ。

則関数をそれより次数の高い多項式を分母において近似する場合、分子の零点が意味のない極を打ち消しておらねばならない。これが spurious poles であるが、数値計算してみると完全な cancel は起きない事を制限精度内で確かめる事ができる。したがって、パデ近似の次数を上げれば収束は起こるが、このような「欠陥」近傍は取り除かねばならない¹⁵。この「パデ近似の収束性に関する欠陥」の測度が δ である。この事実に基づいて、孤立極以外で正則な関数に対し、「近似がダメになる defects = pair-zero pair が猖獗するせまい領域」を除いて、パデ近似の次数を上げた極限で、近似が収束しない領域の「容量」を評価する流儀のややこしい定理に発展している [34]。さらに、収束定理の真性特異点や分岐点が存在する場合などへの拡張 (Stahl の定理 (1987)) もあるが、著者らの能力やこの小論の目的を超えるので、文献をみてもらいたい [35, 36]。

4 いくつかの関数にたいするパデ近似の例

この節では、いくつかのテスト関数に対するパデ近似の計算結果とその特徴を観る。

4.1 テイラー展開とパデ展開の比較

$x = -1$ に分岐点を持つ次の関数 $f_1(z)$ を考える。

$$f_1(z) = \frac{\log(1+z)}{z}. \quad (17)$$

$N = 4$ で打ち切った $x = 0$ まわりのテイラー展開は

$$f_1^{[4]}(z) = 1 - \frac{1}{2}z + \frac{1}{3}z^2 - \frac{1}{4}z^3 + \frac{1}{5}z^4. \quad (18)$$

である。対応するオーダーの [2|2] パデ近似は、式 (11) より、

$$\begin{pmatrix} 1/3 & -1/2 \\ -1/4 & 1/3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/4 \\ -1/5 \end{pmatrix} \quad (19)$$

から $b_1 = 6/5, b_2 = 3/10$ となり、式 (12) から $a_0 = 1, a_1 = 7/10, a_2 = 1/30$ が決まり、

$$f_1^{[2|2]}(z) = \frac{1 + \frac{7}{10}z + \frac{1}{30}z^2}{1 + \frac{6}{5}z + \frac{3}{10}z^2}. \quad (20)$$

となる。

図 3 は、上記の $f_1(z), f_1^{[4]}(z), f_1^{[2|2]}(z)$ が表示されている。 $f_1^{[4]}(z)$ は、 $|x| < 1$ では収束するが、 $z > 1$ では急速に発散していく。一方、 $f_1^{[2|2]}(z)$ は収束半径をはるかに超えた $x \sim 10$ まで $f_1(z)$ を十分良く近似している。 $f_1^{[2|2]}(z)$ の係数は全て、べき級数展開の係数 c_n から決めたのだから、収束半径の外側で発散するべき級数展開でも、テスト関数 $f_1(z)$ の情報を含んでいるといえる。そして、パデ近似がこの情報を露わに回復させたものとみなすことができる。テイラー展開からパデ展開への変換は、収束性を加速し収束半径の外側でもかなりの精度で近似値を与える。

¹⁵この節の前半でみたパデ近似の多項式の次数に関する「欠陥」とは異なる意味での「欠陥」である。

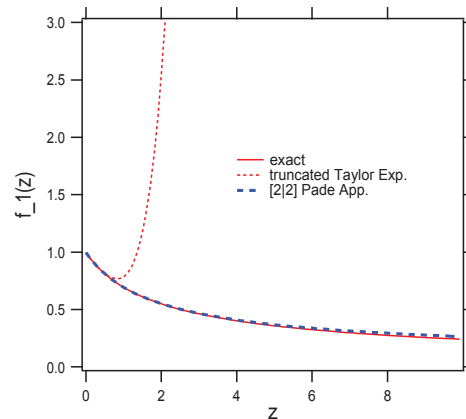


図 3: (Color online) テスト関数 $f_1(z)$ に対するパデ近似 $f_1^{[2/2]}(z)$, と同じ次数のテイラー展開近似 $f_1^{[4]}(z)$ の比較。

4.2 Fibonacci 母関数に対するパデ近似

先に進む前に、正確にパデ近似が成立し、極を拾い出すことができる場合を見ておく。べき級数展開の係数列 c_n をフィボナッチ数 F_n に取った場合、関数

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} F_n z^n, \quad (21)$$

をフィボナッチ母関数と呼ぶ。ここで、 F_n をフィボナッチ数列 F_n は、

$$F_n = F_{n-1} + F_{n-2} (n \geq 2), F_0 = 0, F_1 = 1. \quad (22)$$

で生成される。このとき、フィボナッチ母関数

$$f_F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} F_n z^n \quad (23)$$

$$= \frac{z}{1 - z - z^2} \quad (24)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{5}} \frac{1}{1 - \phi^+ z} - \frac{1}{\sqrt{5}} \frac{1}{1 - \phi^- z}, \quad (25)$$

と表され、黄金比 $\phi^+ \equiv \frac{1+\sqrt{5}}{2} (= 1.61803\dots)$ と $\phi^- \equiv \frac{1-\sqrt{5}}{2} (= -0.61803\dots)$ がフィボナッチ母関数の極であることがわかる。また、フィボナッチ母関数の収束半径は

$$R_c = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{F_n}{F_{n+1}} = \frac{\sqrt{5} - 1}{2}, \quad (26)$$

である。

これを有限項 $n = N$ で打ち切って、 $f_F^{[N]}(z) = \sum_{n=0}^N F_n z^n$ に対し、対角型のパデ近似 $f_F^{[\frac{N}{2}|\frac{N}{2}]}(z)$ を計算する。このとき、 $N \geq 2$ に対して

$$f_F^{[\frac{N}{2}|\frac{N}{2}]}(z) = \frac{z}{1 - z - z^2} + O(z^{N+1}), \quad (27)$$

となり、パデ近似の分子、分母の多項式が正確に決まる。つまり、数値的に計算をするまでもなく、このパデ近似によりどの次数であってもフィボナッチ母関数の正確な極を検出できる。このことは、近似される元の関数が有理関数である場合に一般に成立する。これについては、付録Dを参照されたい。

4.3 特異性へのパデ近似の適用例 1

次のテスト関数を考える。

$$f_2(z) = e^{-z}, \quad (28)$$

$$f_3(z) = \sqrt{\frac{1+2z}{1+z}}, \quad (29)$$

$$f_4(z) = e^{-z/(1+z)}. \quad (30)$$

ここで、 $f_2(z)$ は全空間で解析的（特異性なし）であり、 $f_3(z)$ は代数的分岐点を $z = -1$ と $z = -1/2$ の持ち区間 $[-1, -1/2]$ がブランチカット（分岐線）である、 $f_4(z)$ は $z = -1$ に真性特異点がある。

図4(a)に、 $f_2(z)$ に対するパデ近似の極と零点の分布を複素 z 平面にプロットした。このテスト関数の場合、一般に分子、分母の多項式の係数には $P_M(z) = Q_M(-z)$ と対称性があるので、パデ近似関数の極と零点は虚軸 ($\text{Re}z = 0$) に対して対称になる。具体的に、

$$P_M(z) = \sum_{k=0}^M \frac{(2M-k)!M!}{(2M)!k!(M-k)!} (-z)^k, \quad (31)$$

と求められる。実際、全ての極は左半平面 $\text{Re}z > 0$ に、全ての零点は右半平面に分布し半円状になっている。テスト関数 $f_2(z)$ は全平面内で解析的故、近似のオーダー M を増大すると、極と零点も $|z| = \infty$ の彼方に消えてゆく。言い換えれば、無限大の収束半径に漸近していくということになる。

図4(b)に、 $f_3(z)$ に対するパデ近似の極と零点の分布を示す。分岐点 $z = -1$ と $z = -1/2$ を結ぶブランチカットに沿って、極と零点が交互に並んでいることがわかる。

図4(c)に、 $f_4(z)$ に対するパデ近似の極と零点の分布を示す。全ての極は左半平面 $\text{Re}z > 0$ に、全ての零点は右半平面に分布し真性特異点 $z = -1$ まわりに、円状に分布している。一見、図4(a)における様子と類似であるが、真性特異点を持つテスト関数 $f_4(z)$ の場合、近似のオーダー M を増大すると、極と零点が真性特異点 $z = -1$ に漸近してくる傾向がある。

ここまでは、テスト関数に関するパデ近似では、極と零点が打ち消しあうということが無い範囲でテスト関数の特異性を診断した。

4.4 特異性へのパデ近似の適用例 2

さらに、次のテスト関数にパデ近似を適応する。

$$f_5(z) = \tan z^4, \quad (32)$$

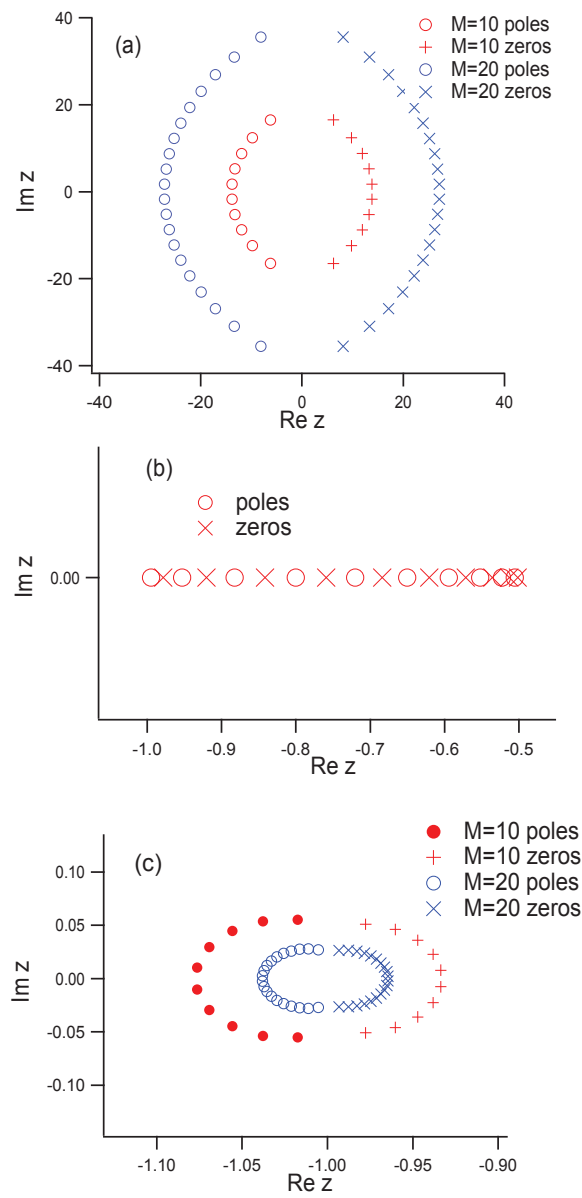


図 4: (Color online) テスト関数 (a) $f_2(z)$, (b) $f_3(z)$, (c) $f_4(z)$ に対する、 $[M|M]$ パデ近似の極 (\bullet, \circ) と零点 ($+, \times$) の分布。

$$f_6(z) = \log(z^4 + 2). \quad (33)$$

$f_5(z)$ は $z = e^{i\pi\frac{m}{4}}$ ($m = 0, 1, 2, \dots, 7$) に極を持つ。この関数に対する [50|50] パデ近似の結果が図 5(a) である。単位円の外側で、原点から発する 8 方向へパデ近似の極と零点が並び、単位円上の真の極に近づくと密になっていることがわかる。また、 $f_6(z)$ は $z = 2^{1/4}e^{i\pi\frac{m}{4}}$ として、 $m = 1, 3, 5, 7$ に対数的分岐点を持つ。この関数に対する [20|20] パデ近似の結果を図 6 に示す。其々の分岐点から極と零点が分岐線上に交互に並んで $z = \infty$ まで伸びている。真の分岐点に近づくと密になっていることがわかる。単位円内の極と零点はペアを成しキャンセルしている。

図 5(b) は、 $f_5(z)$ のパデ近似のオーダーを上げた [75|75] パデ近似の結果である。図 5(a) と同様の極と零点の並びの他に、単位円の周辺に極と零点の分布が現れている。これらは spurious poles とか Froissart doublets などと呼ばれ、キャンセルするが、真の特異性診断に対しては邪魔なものである。(図 6 でも同様であった。) これについては 6 節のランダム級数に対するパデ近似のところでも詳しく議論する。

5 自然境界:空隙テイラー級数

この節では、教科書でもよく見掛ける、自然境界特異性をもつ典型的な疎な係数をもつ無限級数を紹介する。

5.1 空隙定理

一般に、解析関数は一価正則関数とは限らない。連続曲線に沿って順次直接解析接続を繰り返していくと、多価正則関数が現れる。すなわち、多価関数であったとしても任意の分枝の対が直接解析接続できるならば、それら分枝あるいは関数要素¹⁶全体が一つの解析関数を定義することができる。直接解析接続ができるような最大領域全体がその解析関数の定義域になるが、その最大領域の境界を自然境界と呼ぶ。この定義に従って、自然境界の外側にある任意の点にはいかなる方法でも、内側で定義された解析関数を直接解析接続によって接続する事はできない。

自然境界の分かりやすい例はいわゆる空隙定理から導かれる非常に疎な係数をもつ無限級数に多い。例えば、式 (34) のように、 $z^1, z^2, z^4, z^8, z^{16}, z^{32}, z^{64}, \dots$ の係数だけが 1 で他は零であるような、係数が疎らな級数を空隙的級数 (lacunary series) という¹⁷。単位円 $|z| = 1$ の上に自然境界を持つ歴史的にも有名な関数として次のものがある。

$$f_{Jac}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} z^{2^n}, \quad (34)$$

¹⁶関数要素とは、正則関数 f とその部分定義領域 R の組 (f, R) のことを言う。

¹⁷一般に、ある $q > 1$, $N \geq 1$ があり、 $N \leq n$ で $q\lambda_n \leq \lambda_{n+1}$ となるとき、整数列 $0 \leq \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n \dots$ を空隙的 (lacunary) という。

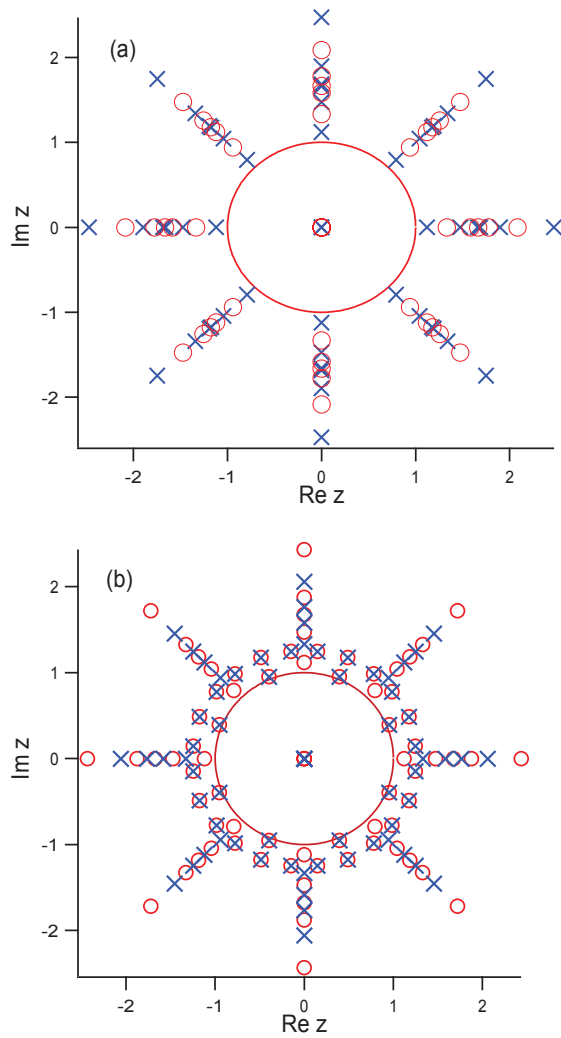


図 5: (Color online) テスト関数 $f_5(z)$ に対する、 $[M|M]$ パデ近似の極 (○) と零点 (×) の分布。(a)[50|50] パデ近似, (b)[75|75] パデ近似。

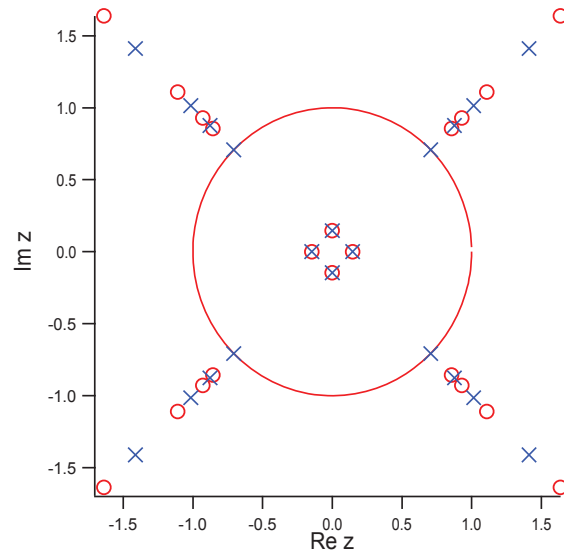


図 6: (Color online) テスト関数 $f_6(z)$ に対する [20|20] パデ近似の極 (○) と零点 (×) の分布。

$$f_{Wie}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} z^{n!}, \quad (35)$$

$$f_{Kro}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} z^{n^2}, \quad (36)$$

ここで、 $f_{Jac}(z)$, $f_{Wie}(z)$, $f_{Kro}(z)$ は Jacobi, Weierstrass, Kronecker にちなんで表記した。空隙定理は Weierstrass に始まり、Hadamard が改良し、Farey が "optimal" とされる程密 (!?) な係数列に対してまで発展させている。

Weierstrass の空隙定理 : 1 変数の幕級数

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^{b^n}, \quad b \in \mathbb{N}, b \neq 1, \quad (37)$$

において、 a_n は正の数とする。このとき、 $|z| = 1$ が収束円ならば、 $|z| = 1$ はこの関数の自然境界となる。

Weierstrass が初めに考えた $a_n = a^n$ ($0 < a < 1$) とする場合に証明の概要を示す。より正確な証明に関しては付録 E を見られたい。例 (34) の $f_{Jac}(z)$ は $a_n = 1$, $b = 2$ の場合である。

証明概要 (背理法): 収束半径上の一点 z_0 に於いて解析関数 $f(z)$ が存在し、収束半径は $r > 0$ とする。その一点が突破口となり解析接続した $f(z)$ が存在すると仮定する。このとき、

$$z_{m,k} = z_0 e^{2\pi i k / b^m} \quad (k = 0, 1, \dots, b^m - 1)$$

も有限項をのぞいた $\sum_{n=m}^{\infty} a^n z_{m,k}^{b^n}$ の部分が z_0 まわりと同じ状況になっている。したがって、 $f(z)$ は $z_{m,k}$ においても収束半径 $r > 0$ をもつ。これが、任意の m で言えるので結局収束半径は 1 より拡大され、一点が突破口という仮定に矛盾する。よって突破口は存在せず、収束半径の外に向かって解析接続できないことになる。

Fabry の空隙定理 (1896) : 収束半径が 1 である冪級数

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^{\lambda_n}, \quad (38)$$

において、

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\lambda_n}{n} = \infty, \quad (39)$$

ならば、 $|z| = 1$ に自然境界をもつ。

この条件が現在最良のものである。これらの定理の証明に関しては文献 [19, 20, 21] を参照せよ。

注意: 自然境界には特異点が集積するので、それを自然境界を越えて解析関数を接続することはできない。しかし、特異点であってもその点で関数値が発散的になるとは限らない。例えば、分岐点型特異点が集積する場合がそうである。実際、Hamilton 系の不変曲面が摂動によって破断する場合の自然境界は有界の分岐点型である。発散的な自然境界は「強い自然境界」と呼ばれる事もある。これらの点に関しては、次稿でもう一度議論する。

この節で用いたテスト関数を含めて付録 E に、自然境界をもつ lacunary series に関する上記以外の空隙定理や関連事項を与えてある。

5.2 収束円 $|z| = 1$ に自然境界をもつ関数のパデ近似

この節では、特異性として $|z| = 1$ に自然境界をもつ冪級数関数に対し、パデ近似を行い、その関数の解析性がどのように表現されるか観察する。単位円周辺の関数の特異性をみるために、極表示 $z = re^{i\theta}$ を用い、 θ を変数とする関数 $f(\theta)$ を $[0, 2\pi]$ でプロットする。 $(\theta$ -表示。) すなわち、

$$f_r(\theta) = f(z = re^{i\theta}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (re^{i\theta})^n. \quad (40)$$

である。このとき、 $r < 1$ で級数はいつでも収束するので、 r は収束因子である。 $r = 1$ の場合、ここで用いた空隙的級数の自然境界上 ($|z| = 1$) での関数形を観ることになり、 $r < 1$ の場合は少し内側 ($|z| < 1$) の解析的な領域での関数形を見ることに対応する。 $|z| < 1$ の場合は、力学系において、トーラス崩壊直前の共役関数の形 (特異性) を見ることにとも対応する¹⁸。以下の計算では、関数を表示する場合、解析領域内もしくは収束領域の直上をみるという意味で、収束因子として $r = 0.98$ 、もしくは $r = 1$ を用いている。

¹⁸これに関しては次稿で扱う。

5.2.1 例 1: Jacobi の関数

$|z| = 1$ に自然境界をもつテスト関数 $f_{Jac}(z)$ に対し、パデ近似を行う。
実はこの場合、パデ近似は次のように与えられる。

$$f_{Jac}^{[2^N]}(z) \sim f_{Jac}^{[2^{N-1}|2^{N-1}]}(z) = \frac{A_{Jac}^N(z)}{1 + \sum_{k=0}^{N-2} z^{2^k} - z^{2^{N-1}}}, \quad (41)$$

分子 $A_{Jac}^N(z)$ は多少複雑な多項式になるため省略する。(付録 F に与えてある。) 従って、 $[2^{N-1}|2^{N-1}]$ パデ近似の極は代数方程式

$$1 + \sum_{k=0}^{N-2} z^{2^k} - z^{2^{N-1}} = 0. \quad (42)$$

の根によって与えられる。空隙 (スプース) 多項式 $f_{Jac}^{[2^N]}(z)$ に対応する $f_{Jac}^{[2^{N-1}|2^{N-1}]}(z)$ の分母もまた空隙多項式となり、それぞれの零点の分布は同じ性質を持つと予想され、Erdos-Turan の定理などから $N \rightarrow \infty$ では単位円上に分布する [38]。次数の低い場合の数値計算の結果が厳密に式 (41) の解と一致することなどは、直接 MATHEMATICA など確かめることもできる。

図 7(a) に、 $f_{Jac}(\theta)$ の $[64|64]$ パデ近似の極と零点の分布を示した。いくつかの零点は単位円内に存在するが、極は $|z| = 1$ 周辺に集積している。 $|z| = 1$ の内側にある極は零点とキャンセルする spurious pair をなすものである。

図 7(b) には、パデ近似の $f_{Jac}^{[32|32]}(\theta)$, $f_{Jac}^{[64|64]}(\theta)$ を表示してある。これは自然境界上での関数形の近似的様子を表していることになる。この図における激しい振動構造は、自然境界上での関数の特異性の現れである。近似のオーダーが高いほど関数の特異性をよくあらわしていることがわかる。

5.2.2 例 2: Fibonacci 空隙関数

もう一つの例として、 $|z| = 1$ に自然境界をもつテスト関数 $f_{Fib}(z)$

$$f_{Fib}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} z^{F_n}, \quad (43)$$

に対し、パデ近似を行う。ここで、 F_n は n 番目の Fibonacci 数であり、再帰式 $F_n = F_{n-1} + F_{n-2}$ ($n \geq 2$), $F_0 = 0, F_1 = 1$ で決まる。この場合の結果も例 1 の $f_{Jac}(z)$ の場合と類似している。

パデ近似は次のように与えられる。

$$f_{Fib}^{[F_N]}(z) \sim f_{Fib}^{[\frac{F_N}{2}|\frac{F_N}{2}]}(z) = \frac{A_{Fib}^{F_N}(z)}{1 + z^{F_{N-4}} - z^{F_{N-2}}}, \quad (44)$$

多少複雑な多項式になる分子 $A_{Fib}^{F_N}(z)$ は付録 F に与えてある。

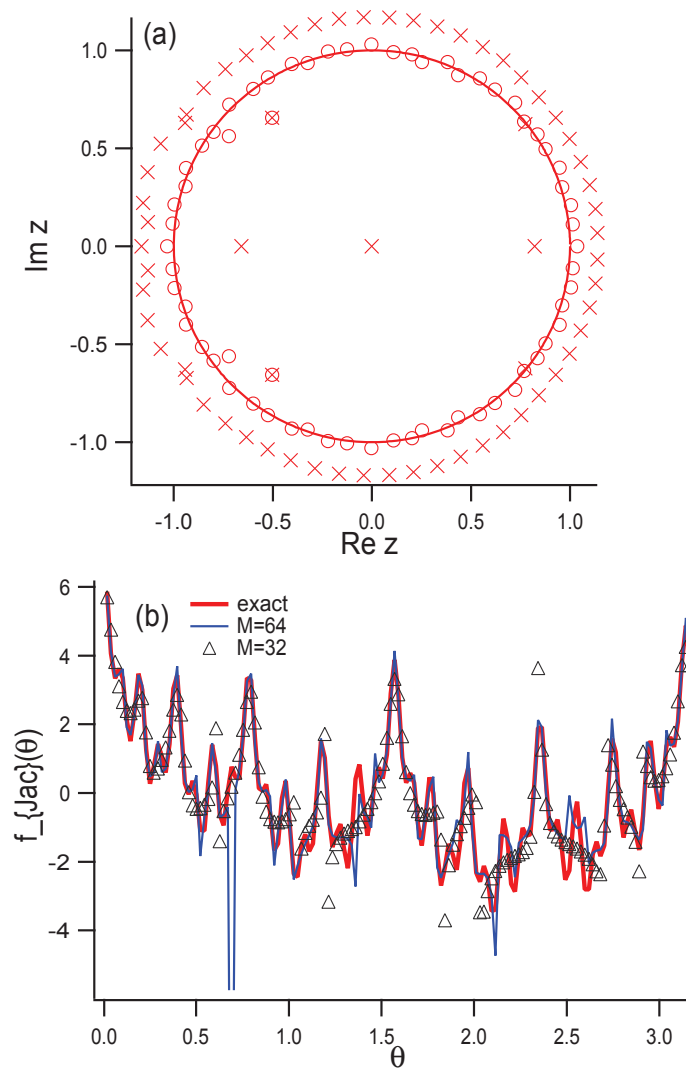


図 7: (Color online) (a) テスト関数 $f_{Jac}(z)$ の $[64|64]$ パデ近似の極 (○) と零点 (×) の分布。単位円 $|z| = 1$ に集積している。(b) θ -表示のパデ近似関数 $f_{Jac}^{[32|32]}(\theta)$, $f_{Jac}^{[64|64]}(\theta)$ とテスト関数 $f_{Jac}(\theta)$ ($r = 1.0$)。

従って、 $[\frac{F_N}{2} | \frac{F_N}{2}]$ パデ近似の極は代数方程式

$$1 + z^{F_N-4} - z^{F_N-2} = 0. \quad (45)$$

の根として与えられる。この場合も $f_{Jac}(z)$ の場合同様、空隙 (スプース) 多項式 $f_{Fib}^{[F_N]}(z)$ に対応する $f_{Fib}^{[\frac{F_N}{2} | \frac{F_N}{2}]}(z)$ の分母もまた空隙多項式となり、それぞれの零点の分布は同じ性質を持つと予想される。

図 8 に、 $f_{Fib}(\theta)$ の $[56|56]$ パデ近似の極と零点の分布を示した。極は $|z| = 1$ 周辺に集積している。 $|z| = 1$ の内側に極は存在せず、零点のみが分布している。 $|z| = 1$ の上でいくつかの spurious pole と零点のキャンセルがある。図 8(b) には、パデ近似の $f_{Fib}^{[34|34]}(\theta)$, $f_{Fib}^{[56|56]}(\theta)$ を表示してある。少なくとも、この範囲ではパデ近似のオーダーが高いほど関数の特異性をよくあらわしている¹⁹。

6 自然境界: ランダム級数展開

前節で調べたような空隙級数の場合と異なり、 a_n が有界の無限級数の場合でも、 a_n の満たす条件によっては自然境界が存在する。典型的な例としては、展開係数がランダムに変動する場合が自然境界をもつ。この節では、ランダム級数展開に関するいくつかの定理の紹介とランダム級数展開に対してパデ近似を適用した結果を示す。また、特異性の知られている関数に対して展開係数にノイズのが混入した場合のパデ近似の有効性についても議論する。

6.1 ランダム級数展開の自然境界に関する定理

一般に係数が有界なランダム変数なら冪級数展開は確率 1 で $|z| = 1$ で自然境界をもつ。これに関して、基本的な Steinhaus の定理を挙げておく。

Steinhaus の定理 (1929) : 収束半径 1 の冪級数

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n, \quad (46)$$

を考える。 X_0, X_1, \dots, X_n を $X_i \in [0, 1]$ の値をとり、独立同分布に従う確率変数とするとき、ランダム位相 $w_k = e^{i2\pi X_k}$ を持つ次の関数は確率 1 で、 $|z| = 1$ を自然境界に持つ。

$$f_{Steinhaus}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{i2\pi X_n} z^n. \quad (47)$$

これに関しても、Hadamard の空隙定理を変形することで証明できる。この定理が真であ

¹⁹ $f_{Wei}(\theta)$ や $f_{Fib}(\theta)$ のパデ近似で、元々の関数にない peak が出現することがある。これは空隙級数、つまり係数が sparse にしか存在しない級数に対して生じている可能性がある。ランダム級数に対するパデ近似では生じない。

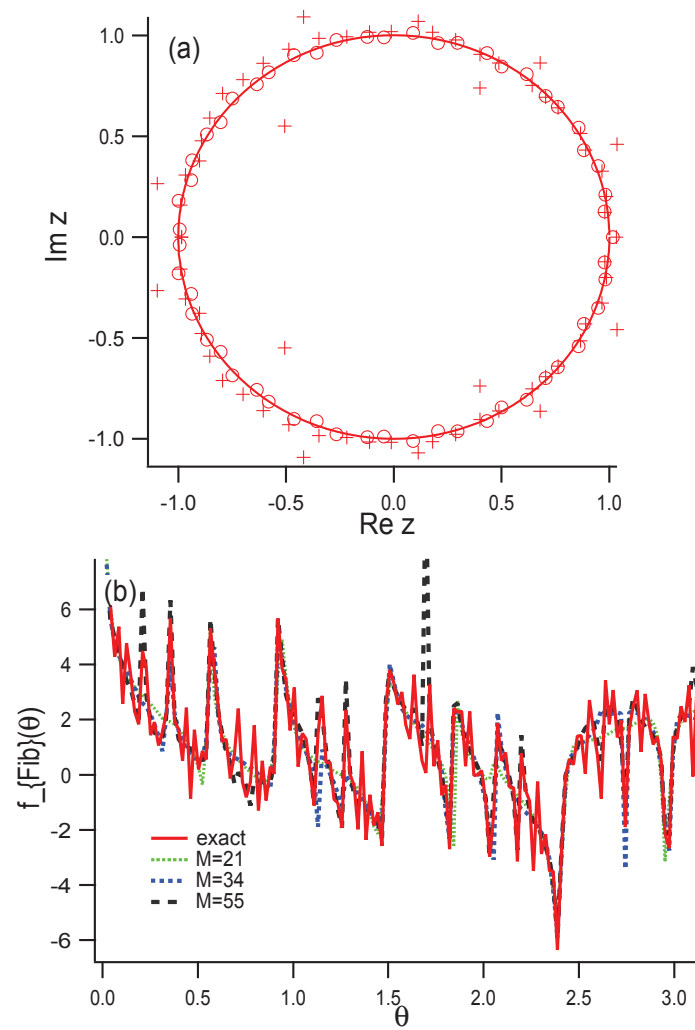


図 8: (Color online) (a) テスト関数 $f_{Fib}(z)$ の [56|56] パデ近似の極 (○) と零点 (×) の分布。単位円 $|z| = 1$ に集積している。(b) θ -表示のパデ近似関数 $f_{Fib}^{[56|56]}(\theta)$ とテスト関数 $f_{Fib}(\theta)$ ($r = 1.0$)。

ることを初めて気づいたのは Borel(1896)である。Kolomogorov の 0-1 法則 (Borel-Cantell のレンマ)²⁰を使った証明の概略を記す。詳細な証明は文献 [19] を参照せよ。

証明概要:手順として、初めに、式 (47) の収束半径が 1 であることを示す。次に、収束円の円周上の点を中心にした半径 r の微小領域で解析関数 $f_{r,N}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \omega_n z^n$ ($z \in \Delta(r, N), |z| < 1$) が存在するという事象を $E(r, N)$ とする。ここで、 $\Delta(r, N) = \{z \in C : |z - \exp(i2\pi r/N)| \leq 1/N\}$ とする。この事象に対し Kolomogorov の 0-1 法則を用いて、 $Prob(E(r, N)) = 0$ を示すことができる。背理法により、 $Prob(E(r, N)) = 1$ だと矛盾することがわかる。すなわち、このような解析関数は存在しない。

Steinhaus の定理をより simple に表現すれば次のようになる。

Steinhaus の定理 2 : ベキ級数展開 (46) において、係数 a_n が有界なランダム列ならば確率 1 で、 $|z| = 1$ を自然境界に持つ。

ランダム係数を持つ冪級数に関する定理のいくつかは付録 G にまとめてある。

注意:一見、ランダム冪級数なら自然境界を持つことが直観的には当然のようにも思えるが、数学的には「確率的」であるにしても a_n の取り得る値が有限個なのか無限個なのかや、無限大の値をとるのかどうか、などにより証明の困難さが異なると思われる。例えば、係数 a_n が、(i) 2 値 $-1, 1$ を等確率で取る場合 (ベルヌーイ分布)、(ii) $[-1, 1]$ の値を等確率で取る場合 (一様分布)、(iii) $G(0,1)$ のガウス分布の場合、(iv) ローレンツ分布の場合、などの違いである。突然話題が飛ぶが、係数のランダムさがいかに現象を支配するかという観点からすると一次元ランダム系のアンダーソン局在発生条件問題と非常に類似したものがある。この話題は次稿 (その式) で議論する。また、一次元ランダム系のアンダーソン局在の問題において、局在が発生するポテンシャルに関する条件が研究の進展と共に弱められていったように、冪級数展開の自然境界発生条件に関しても展開係数 a_n に課せられる条件は弱められていった。展開係数 a_n が 0 に収束する事がなく任意の n に対し、 $m > n$ の a_m の上限が正で有界なる級数、一言で言えば、収束半径 1 の無限級数が単位円上に自然境界を持つ事は一般的である。これに関する極めつけともいえる定理は次のものである。

²⁰ 末尾事象 (tail event) A と呼ばれる特別な事象は、ほとんど確実に起きるか、あるいはほとんど確実に起きないかのどちらかである。すなわち、 $Prob(A) = 0$ or $Prob(A) = 1$ 。これは、定常確率場のエルゴード性に基づく。類似のことは、ランダム系のスペクトルの性質が、確率 1 で点スペクトルか否かなどの証明をする場合にも使われる。また、確率変数の無限列を $X_i (i = 1, 2, 3, \dots)$ として、その事象が起きるか起きないかはこれらの確率変数の値によって決まるが、tail event は、この確率変数列の各有限部分列とは独立な事象のことである。例えば、 $\sum_{i=1}^{\infty} X_i$ が収束するか否かは tail event である。

Szego の定理 (1930) : 収束半径 1 の冪級数 (46) において、 a_n は有限集合 (集合の要素数が有限であるということ) 上にある場合、関数

$$f_{Szego}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n. \quad (48)$$

は $|z| = 1$ を自然境界に持つ、そうでなければ、 a_n が周期的であり、 $f_{Szego}(z)$ は $|z| = 1$ 上に極をもつ有理関数である。

証明は文献 [20] をみよ。ここでは、係数 a_n のランダム性をあからさまに仮定されていない。

6.2 ランダム級数展開に対するパデ近似

ランダムな係数は、その強度を調整すれば、展開係数に入ったノイズとみなすこともできる。以下では、次のノイズの入った級数を考える。

$$f_{noise}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon r_n z^n. \quad (49)$$

ここで、ランダム列 r_n は n に関し独立に $[0, 1]$ の一様分布に従う確率変数で、 ϵ はその強度を表す。また、ランダム列を $[-1, 1]$ の一様分布とした場合の正負に変動するノイズを $f_{noise2}(z)$ として、いくつかの場合に使用することにする。一般に、このランダム級数展開は前節や付録 G の定理により $|z| = 1$ に確率 1 で自然境界をもつことが保障される。図 9 は、あるサンプル係数列 $\{c_n\} = \{\epsilon r_n\}$ に対して、[50|50] パデ近似を行って得られた分子、分母の係数列 $\{a_n\}$ と $\{b_n\}$ を示している。極を決めるパデ近似の係数 $\{b_n\}$ の変動は零点を決める係数 $\{a_n\}$ の変動より小さい。この例の他に、数十通りのサンプルで試したが同様の傾向がみられた。図 10 は、式 (49) に対する [50|50] パデ近似の極と零点の分布を示す。 $|z| = 1$ の内側になる極は零点とキャンセルし、 $|z| = 1$ 周辺の極は零点とキャンセルせず、零点とペアを作って $|z| = 1$ 周辺に集積してくる傾向がある。これが Froissart doublets である。これらは、ノイズ時系列の自然境界 $|z| = 1$ によく対応している。これに関しては、7 節でさらに議論する。

注意: ランダム級数は、項数が有限の場合ランダム多項式であるといえる。項数を増やした場合のランダム多項式の根の分布が単位円周辺に収束することが知られている。例えば、Peres-Virag の定理などを参照せよ [37, 38, 39, 40, 41]。だとすれば、パデ近似において得られる分子・分母の多項式もランダム多項式の係数のランダム性をが反映してパデ近似の極や零点の分布が単位円周辺に分布すると理解することもできる。さらに、ランダム多項式を行列の固有値方程式と対応させてとらえれば、ランダム行列の固有値分布の普遍性に通じる問題でもある²¹。

²¹ 同じように、空隙多項式の極や零点の分布をスパース行列の固有値分布と対応させて理解する方法もあるかもしれない。

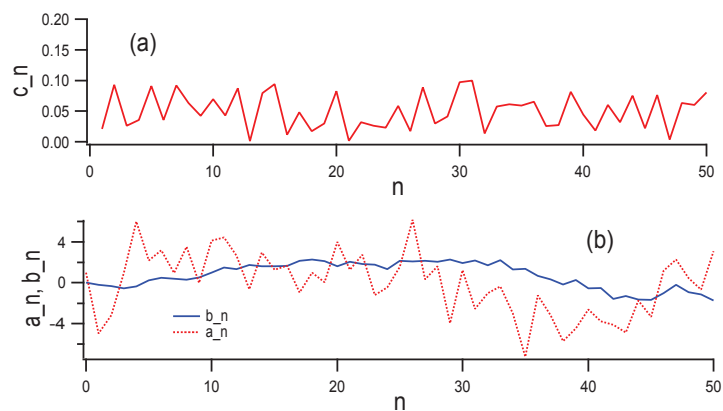


図 9: (Color online) (a) ランダム級数展開 $f_{noise}^{[100]}(z)$ の係数列 $\{c_n\} = \{\epsilon r_n\}$ ($\epsilon = 0.1$) の一例. (b) $f_{noise}^{[100]}(z)$ に対するパデ近似 $f_{noise}^{[50|50]}(z)$ の分子・分母の係数列 $\{a_n\}$ と $\{b_n\}$ 。

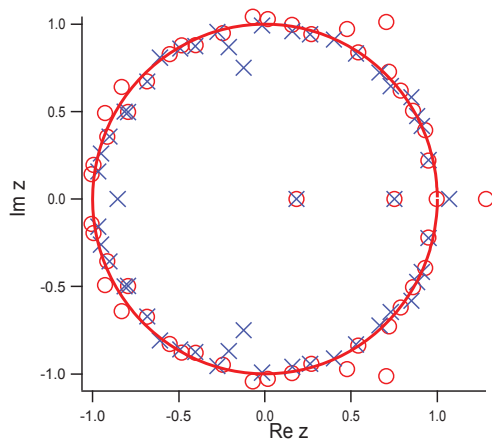


図 10: (Color online) ランダム級数 $f_{noise}(z)$ ($\epsilon = 1$) に対するパデ近似 $f_{noise}^{[50|50]}(z)$ の極 (○) と零点 (×) の分布。単位円を実線で示す。

6.3 極を持つ場合に対するノイズの効果

以下では、 $f_{test}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n$ とベキ級数で表されるものをテスト関数として、ランダム係数列 $\{r_n\}$ が加わった次の関数に対するパデ近似の結果を示す。

$$f_{test+noise2}(z) = f_{test}(z) + f_{noise2}(z), \quad (50)$$

まず、 $f_{test}(z)$ として単純極を持つ関数 $f_{pole2}(z)$ を考えよう。

$$f_{pole2}(z) = \frac{1}{2-z} = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{z}{2}\right)^n. \quad (51)$$

$f_{pole2}(z)$ は、ノイズによる極の位置のズレをわかりやすくするために $z=2$ に真の単純極をもつように設定してある。このとき、 $f_{pole+noise2}(z)$ に $[M|M]$ パデ近似を使った場合、分母 $Q_M(z) = 0$ の根は $f_{pole2}^{[N]}(z)$ の真の極と単位円 $|z|=1$ の周りに分布するランダム係数による極と零点のペアに分けられると予想できる。

具体的に様子を見てみよう。図 11 は式 $f_{pole2+noise}(z)$ に対する $[10|10]$ パデ近似の極と零点の分布を示す²²。まず、ノイズなし ($\epsilon = 0$) でパデ近似を行うと、真の極の位置 $z=2$ にパデ近似の極が現れ、それ以外の極は全て零点とキャンセルしていることがわかる。次に、強度 $\epsilon = 0.01$ のノイズを混入した場合、パデ近似の極の多くは、 $|z|=1$ の周りに移行するが、真の極 $z=2$ の近傍に出るパデ近似の極の shift は小さく、比較的安定であることがわかる。ここでは表示していないがノイズの強度を $\epsilon = 0.1$ まで上昇させると、真の極の検出自体が不可能になる。

Baker の本では、極を持つ関数へのノイズの効果は次のようにまとめられている [15]。

一般に、真の極は安定でそのエラーはノイズ強度のオーダー $O(\epsilon)$ である。原点からオーダー ϵ^{-1} のところに不安定な零点を持つ。一方、Froissart doublets の位置は、近似のオーダーに対して不安定である。不安定極なに対する Cauchy 留数は、真の極に対するものよりもはるかに小さい。

6.4 分岐点を持つ場合に対するノイズの効果

特異性として分岐点を持つ関数にノイズが入った場合も、極をを持つ関数にノイズが入った場合と類似の結果を与える。例えば、

$$f_{branch1}(z) = \sqrt{\frac{3+z}{1+z}} \quad (52)$$

と、 $x = -1$ と $x = -3$ に代数的分岐点を持ち $[-3, -1]$ にブランチカットがある関数を考えよう。これにノイズを入れた $f_{branch1+noise2}(z)$ に対して、 $[10|10]$ パデ近似の極と零点の分布を図 12 に示す。 $\epsilon = 0.01$ の場合、パデ近似の極のいくつかはブランチカット上に並

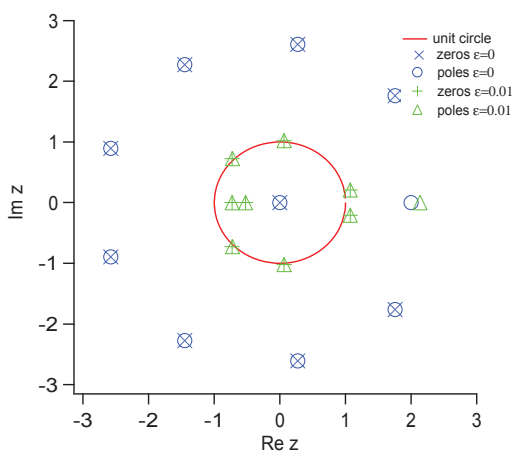


図 11: (Color online) $f_{pole2}(z)$ にノイズが印加された場合、すなわち $f_{pole2+noise2}^{[10|10]}(z)$ に対するパデ近似 $f_{noise2}^{[10|10]}(z)$ の極 (○, △) と零点 (×, +) の分布。単位円を実線で示す。

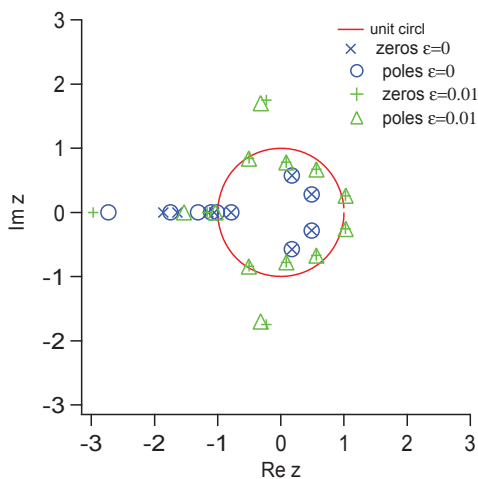


図 12: (Color online) $f_{branch}(z)$ にノイズが印加された場合、すなわち $f_{branch+noise2}^{[10|10]}(z)$ に対するパデ近似 $f_{noise2}^{[10|10]}(z)$ の極 (○, △) と零点 (×, +) の分布。単位円を実線で示す。

び、いくつかは $|z| = 1$ の周りに移行する。ノイズ強度が $\epsilon = 0.1$ の場合パデ近似による $f_{branch1}(z)$ のブランチカットの検出はできなくなる。

次に、対数的分岐点を持つ関数を考える。

$$f_{branch2}(z) = \log\left(\frac{6}{5} - z\right), \quad (53)$$

これは、 $x = 6/5$ に対数的分岐点を持ち $[6/5, \infty]$ にブランチカットがある。これにノイズを入れた $f_{branch2+noise2}(z)$ に対して、 $[10|10]$ パデ近似の極 (○) と零点 (×) の分布を図 13 に示す。ノイズ無しの場合、分岐線 $[6/5, \infty]$ 上に交互に並んでいた極と零点がノイズを強度を増し $\epsilon = 0.01$ とした場合には、 $|z| = 1$ の周辺に移動していることがわかる。

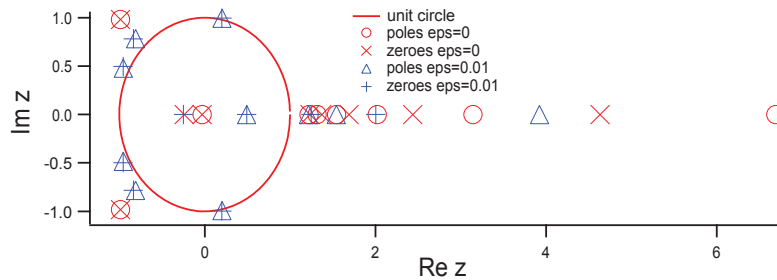


図 13: (Color online) $f_{branch2}(z)$ にノイズが印加された場合 ($\epsilon = 0$, $\epsilon = 0.01$)、すなわち $f_{branch2+noise2}^{[10|10]}(z)$ に対するパデ近似の極 (○, △) と零点 (×, +) の分布。単位円を実線で示す。

6.5 自然境界をもつ関数に対するノイズの効果

次に、テスト関数 $f_{test}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n$ として $|z| = 1$ を自然境界として持つ $f_{Jac}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} z^{2^n}$ に対して、ノイズ列 $\{\epsilon r_n\}$ が加わった次の関数を考える。

$$f_{Jac+noise2}(z) = f_{Jac}(z) + f_{noise2}(z), \quad (54)$$

図 14 は、ノイズの強度を $\epsilon = 0, 0.001, 0.01$ と変えた場合の $f_{Jac+noise2}(z)$ に対する $[50|50]$ パデ近似の極と零点の分布を示す。いずれの場合も $|z| = 1$ の内側になる極は零点と完全にキャンセルし $|z| = 1$ 周辺の極は零点とキャンセルせず、零点とともに $|z| = 1$ 周辺か外側に集積している。極の位置に関し、ノイズ強度が $\epsilon = 0.001$ の場合でもノイズ無しの場合 $\epsilon = 0$ との違いは少ない。ノイズ強度を $\epsilon = 0.01$ にすると零点の位置が大きく shift し、収束円上に近づくことがわかる。このことは、6.2 節でみたランダム級数展開に対するパデ近似において、分子の多項式の係数列が分母の係数列の変動よりも起伏がおおきいことと関係していそうであるが、詳細は不明である。自然境界を持つ関数の場合は、前節で見た極や代数的分岐点のような特異性の場合よりもノイズの存在に敏感である可能性がある。

²² 近似の次数は小さいが、説明に必要な状況をよく表現している。

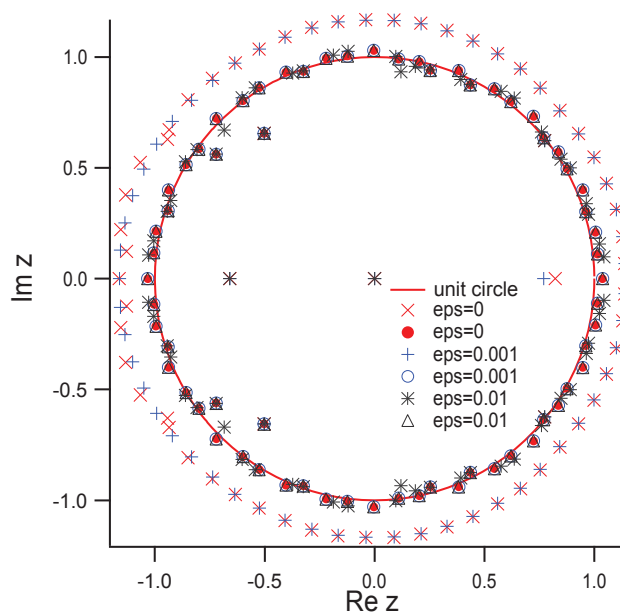


図 14: (Color online) $|z| = 1$ に自然境界を持つ $f_{Jac+noise2}^{[100]}$ に対するパデ近似 $f_{Jac+noise2}^{[50|50]}$ の極 ($\bullet, \circ, \triangle$) と零点 ($\times, +, *$) の分布。ノイズ強度は $\epsilon = 0$ (*red*), $\epsilon = 0.001$ (*blue*), $\epsilon = 0.01$ (*black*) と対応する。極の位置はどの場合でもあまり変わっていない。それがわかるように $\epsilon = 0$ (*red*) の場合の極のみ closed circle で表示した。単位円を実線で示す。

$f_{Jac}(z)$ に対するパデ近似から来る $|z| = 1$ 周りの特異性と $f_{noise2}(z)$ から来る $|z| = 1$ 周りの特異性を効果的に区別するにはどうすればいいだろうか。この節でみたようにノイズを制御できる場合は、ノイズの強度を変えてノイズに起因する極かどうか check することが考えられる。しかし、数値計算による丸め誤差などがノイズとして展開係数に混入する場合もあるため、未知の解析性をもつ関数に対してパデ近似を適用し、極の分布によりその特異性を探る場合、多項式展開の係数 c_n を精度よく決めることが求められる。これはパデ近似の弱点とも言える。

6.6 計算誤差と spurious poles

既にいくつかの例で散見したように、パデ近似の次数を上げていくと、計算機の精度限界や丸め誤差の蓄積もノイズ効果として働き、パデ近似の極や零点は単位円 $|z| = 1$ の周辺に分布していく。この極が spurious poles であり、対になる零点を伴って現れ、近似のオーダーに対して不安定なことが特徴である。積極的にノイズ級数により生成されたものを Froissart doublets と呼ぶことにする。(次節でも議論する。) そのため、留数を計算することで関数の特異性を近似する安定な極とのおおよその判別を行うことができる。これを、留数解析と呼ぶことにする。

対角型 $[M|M]$ パデ近似の場合に話を限れば、同次有理式の留数展開が次のように一義的に決まる事は容易に分かる。パデ近似の多項式を改めて、重複度まで込めた極 z_k と対応する留数 μ_k を用いて

$$\frac{Q_M(z)}{P_M(z)} = \sum_k^M \frac{A_k}{z - z_k}, \quad (55)$$

と表す。このとき留数は

$$A_k = \frac{Q_M(z_k)}{\prod_{j(\neq k)} (z_k - z_j)}, \quad (56)$$

となる。そこで留数をその大きさ $|A_k|$ の順に並べ、 k に対しその収束性を調べることができる。

例として、図 15 に、ノイズを印加していない式 (32) のテスト関数 $f_5(z)$ の次数 $M = 50$, $M = 75$ のパデ近似の場合における留数を計算しその大きさの順にソートしたものを示す。オーダー $O(10^{-3})$ までの留数は 8 方向に放射状にの伸びた線上に分布するパデ近似の極に対応するものである。 $M = 50$ ではこのタイプの留数のみである。これに対し、 $M = 75$ の場合は、spurious poles が現れ単位円 $|z| = 1$ の周辺に分布する。この spurious poles に対応する留数は桁違いに小さいことがわかる²³。

また、テスト関数 $f_{branch2}(z)$ に対するパデ近似のオーダーを上げた場合の結果を図 16 に与えた。 $M = 20$ の場合、安定な分岐線 $[6/5, \infty]$ 上に分布する極や零点のほかに、単位

²³文献 [49] において、同じテスト関数 $f_5(z)$ に対し、安定パデ近似 (付録 A.3) を適用している。それと比べてもこれらの桁違いに小さな留数に対応する極は、パデ近似の「欠陥」による丸め誤差に起因すると推測できる。さらに、4 倍精度の数値解析により極やその留数の安定性を調べ確認することもできる。

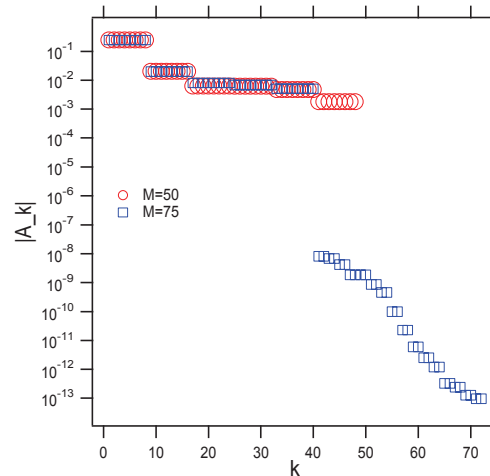


図 15: (Color online) テスト関数 $f_5(z)$ のパデ近似 [50|50] と [75|75] を行い、その極に対する留数を絶対値の大きい順に並べたもの。人工的なノイズは入っていない。

円 $|z| = 1$ の周辺に分布する spurious poles が現れる。この場合も、この spurious poles に対する留数は安定な極に対するものと比べて桁違いに小さいことがわかる。

図 17 に $|z| = 1$ に自然境界をもつ関数 $f_{Jac}(z)$ に対するパデ近似の留数の大きさを示す。図 17(a) は、[50|50] パデ近似でノイズを $\epsilon = 0, 0.01, 0.1$ と増やした場合の結果である。(図 14 の極・零点分布に対応している。)

ノイズ強度が弱い場合 ($\epsilon = 0.01$) には、ノイズ無しの場合と区別できず、ノイズ強度を $\epsilon = 0.1$ とした場合は、留数全体の値が大きくなっている。さらに、図 17(b) では、ノイズ無しでパデ近似の次数を変えた場合の留数の大きさを示している。この範囲で明確な spurious poles は殆ど確認できない。すなわち、ノイズの効果や近似のオーダーを上げることによる誤差の混入効果を除去しながら、近似の精度をあげることが困難であるとわかる。 $f_{Jac}(z)$ は z^{2^n} の係数のみが 1 で他は 0 の空隙級数ゆえ、 M をどのように設定するかにより近似の様子が異なる可能性もあり、単純にはいかないであろう。これまで、同じ次数のパデ近似で、アルゴリズムによる安定性の違いなどを示すために留数が使われているが、パデ近似で積極的に留数の情報を利用した研究は現在でも少ないようである。

7 Froissart doublets

信号解析において、ランダム級数展開に対するパデ近似を利用しノイズを除去し正規の信号を抽出する研究がある [28, 42, 43, 29]。この節では、その研究の紹介を通して、再び関数の解析性についてコメントする。

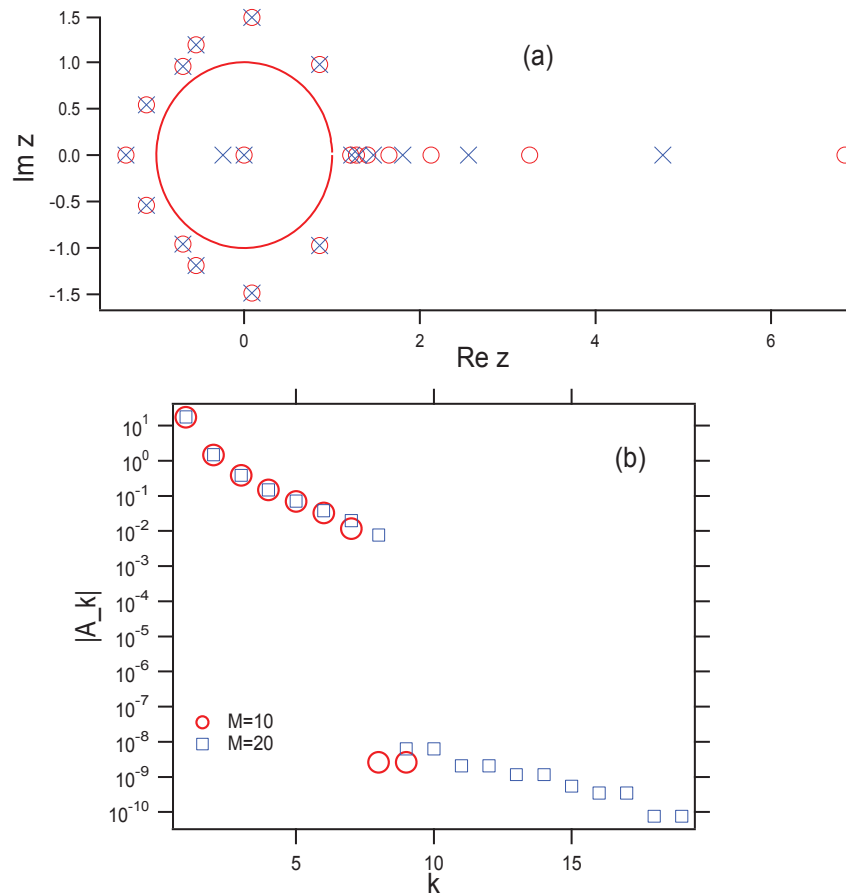


図 16: (Color online) テスト関数 $f_{branch2}(z)$ のパデ近似 (a)[20|20] パデ近似の極 (○) と零点 (×) の分布。(b)[10|10] パデ近似と [20|20] パデ近似に対する留数の絶対値の大きい順に並べたもの。人工的なノイズは入っていない。

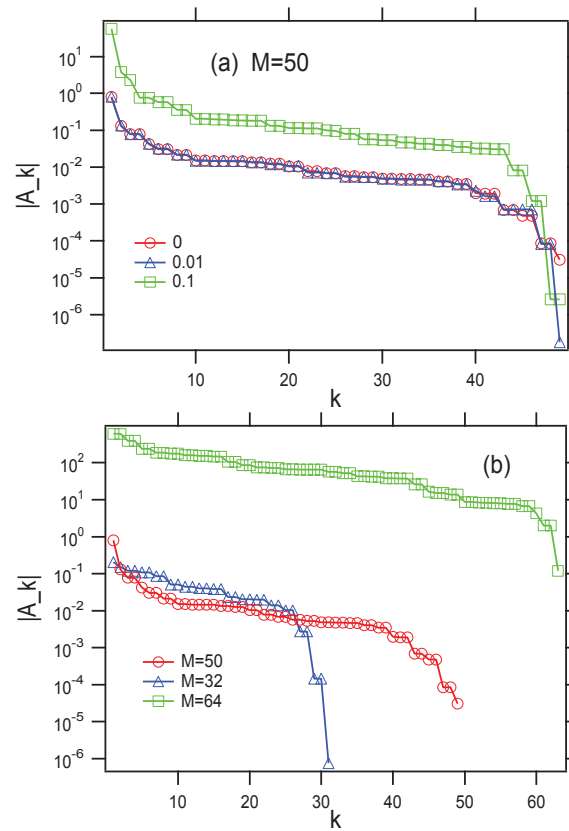


図 17: (Color online) テスト関数 $f_{Jac}(z)$ のパデ近似に対する留数の絶対値を大きい順に並べたもの。(a)[50|50]パデ近似でノイズを $\epsilon = 0, 0.01, 0.1$ と増やした場合の結果、(b) ノイズ無しでパデ近似の次数 M を変えた場合の結果。

7.1 ノイズアトラクター

Z 変換や離散フーリエ変換を通して、パデ近似の極と零点が単位円 $|z| = 1$ の周辺に分布するという性質を利用し、ノイズが入った有限な時系列からノイズを除去する技術が信号処理に利用されている。これを説明する。

まず、ノイズの無い信号列 $s_0, s_1, \dots, s_n, \dots$ の Z 変換

$$Z(z) = \sum_{n=0}^N s_n z^n, \quad (57)$$

を定義する。これは信号が有限個なら $|z| = 1$ の内側において解析的である²⁴。具体的に、次のような時間 $t \in [0, T]$ 内の N 個の時点における信号列が減衰振動の重ね合わせによる場合を考える。

$$s_k = \sum_{\ell} A_{\ell} e^{i\omega_{\ell} \frac{k}{N} T}, \quad k = 0, 1, \dots, N-1, \quad (58)$$

とする。ここで、 A_{ℓ} を ℓ -番目の振動子の振幅、 $\omega_{\ell} = 2\pi f_{\ell} + i\alpha_{\ell}$ で、 f_{ℓ}, α_{ℓ} はそれぞれ ℓ -番目の振動子の振動数、減衰因子を示す。このとき Z 変換は、

$$\begin{aligned} Z(z) &= \sum_{n=0}^{\infty} s_n z^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\ell} A_{\ell} e^{i\omega_{\ell} \frac{n}{N} T} z^n \\ &= \sum_{\ell} \frac{A_{\ell}}{1 - z e^{i\omega_{\ell} \frac{T}{N}}}, \end{aligned} \quad (59)$$

となる。ここで、 T/N を一定にし $n \rightarrow \infty$ とした。従って、 $Z(z)$ の特異性は、極 $z = z_{\ell} \equiv e^{-i\omega_{\ell} \frac{T}{N}}$ に現れる。減衰の場合、 $\text{Im}\omega_{\ell} > 0$ ゆえに、この極は単位円 $|z| = 1$ の外側に位置し、対応する留数は $\text{Res}(z_{\ell}) = z_{\ell} A_{\ell}$ となる。

一方、ノイズの混入した時系列 (信号列) $s_0, s_1, \dots, s_n, \dots$ の Z 変換を考えると、前節でも見たように、確率1で $|z| = 1$ に自然境界をもち、これに対するパデ近似の極は $|z| = 1$ 周辺に分布する²⁵。ランダム級数に対するパデ近似によるこの極と零点のペアを Froissart doublet と呼ぶ、また、極や零点が集まってくるという意味で $|z| = 1$ をノイズアトラクターと呼ぶ。従って、 Z 変換の線形性から、信号にノイズが入った時系列に対する Z 変換関数 (母関数) は、指数関数的減衰モードに対応する極とノイズによる自然境界からなる。実際のノイズが入った有限信号列から、パデ近似により $|z| = 1$ 周辺のノイズによる極と零点を取り除いて、 $|z| > 1$ に位置する有意な信号のデータを取り出すことができる。

²⁴ここでは、我々が用いてきた表示に合わせているが、変数 z に関する展開ではなく z^{-1} に関する展開として Z 変換を定義することもできる。その場合は、解析的領域が $|z| = 1$ の外側になり、減衰振動の極は単位円の内側 $|z| < 1$ に現れる。信号解析でノイズを除去し信号を取り出すような場合には、 z^{-1} に関する展開の方が便利である。 Z 変換の特別なものが離散フーリエ変換である。

²⁵また、 Z 変換の関数 $Z(z)$ に対する準対角型 $[M-1|M]$ パデ近似を通して、スペクトル理論と関連する。付録Cを参照のこと。

Froissart は未知のデータに対角型パデ近似を適用した場合上記の2種類の極からなることを指摘し、それを数値的に示した。つまり、実際の信号による $|z| > 1$ にある安定な極とノイズによる自然境界を近似する $|z| = 1$ 周辺に位置する不安定な極である。

7.2 準解析関数

Weierstrass のいう解析性、つまり直接解析接続して伸ばして行ける関数のみを解析関数とよぶなら、自然境界を越えて解析関数を構成してゆく事は不可能である。Borel は Weierstrass の解析関数の概念が狭すぎるとして、自然境界は存在するものの、自然境界の内側と外側でともに一義的に決まるより広い解析関数の概念を定義した。これをボレルの準解析関数とよぶ [44, 45]。(自然境界上のみで定義できない。)

前節のランダム級数展開やノイズ印加の関数の場合に示したような、極が単位円上に稠密に分布する場合、その関数は準解析関数の Borel class に属するという Gammel による予想がある [46, 28]。

Gammel 予想 (1973) : Froissart のノイズ関数 $f_{noise}(z)$ は準解析関数の Borel class に属する、つまり、

$$f_{noise}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{B_k}{1 - w_k z}, \quad (60)$$

と表される。ここで $w_k = e^{i2\pi X_k}$ また、 X_k は $[0, 1]$ で稠密な実数で B_k は非常に急速に減衰する。

極が単位円上に稠密に分布するこの関数は自然境界のもっとも素朴な例を与える。ここで重要な因子は数列 B_k の収束性である。最初 Borel は準解析関数であるためには、 $\sum_{k \geq 1} |B_k|$ が収束すればよいとしたが、その後 Poincare や Painleve に欠陥を指摘され、後に「非常に急速な収束 (指数関数に指数関数がのる $B_k \sim e^{-e^{k^2}}$ のような収束) をする数列」に改めたという。

Borel 以降準解析関数の概念は複素変数から後退し、実関数に対して行われているようである。Carleman は区間 $[a, b]$ の部分区間での関数値が $[a, b]$ 全域での値を一義的に決めるとき、関数は $[a, b]$ で準解析的であるとして (60) 式のクラスの関数が彼の意味で準解析的になる条件が

$$|B_k| < C e^{-k^{1+c}}, c > 0, \quad (61)$$

であることを証明している。ここで、

$$f_{Carleman}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{e^{-k}}{1 - w_k z}, \quad (62)$$

として、これを Carleman class の準解析関数ということにする。(詳細は Gammel の論文 [46] を見よ。) さらに、Gammel らはこの準解析関数が厳密にパデ近似可能である事を証

明している [46]。つまり、 B_k が条件 (61) を満たし $|\alpha_k| = 1$ のとき、

$$f(z) = \sum_k \frac{B_k}{1 - \alpha_k z}, \quad (63)$$

の有限和での打ち切り近似に対する $[N + J|N]$ パデ近似は、複素面の任意の閉領域で $f(z)$ に収束する。ここで、 J は N 以下の任意の自然数である (Gammel-Nuttal の定理 (1973))。

上記の z 変換で表示した関数の場合、 X_k が乱数で k を無限個とれば、 $z = e^{i2\pi X_k}$ は単位円上に並び集積することは明らかである。この場合、実軸上で単位円の内側から単位円を超えた外側に解析接続はできないが、単位円の外側も解析的領域があり解析関数が定義できる。

Gammel が予想したように Froissart のノイズ関数 $f_{noise}(z)$ が準解析関数であるなら、そして Froissart の雑音が特別なものでないならば、乱数の z 変換 (母関数) は一般に準解析関数になるだろう。準解析関数が実によりふれて登場する事になる。これは甚だ大胆な予想と言わざるを得ない。そこで、パデ近似に対し前節で提案した留数解析²⁶ を使って乱数母関数 $f_{noise}(z)$ に対する Gammel の予想と、それに関係して Gammel-Nuttal の定理の主張が現実かどうか数値実験してみよう。誰もそんな事はやっていないので、我々はランダムな時系列の $f_{noise}(z)$ に対して留数解析を行った。つまり、パデ近似の留数をその大きさ $|A_k|$ の順に並べ、 k に対しその収束性を調べることができる。図 18 は、ノイズ関数 $f_{noise}(z)$ ($\epsilon = 1$) に対するパデ近似の留数 $|A_k|$ の大きさ順に並べた結果である。3つのサンプルについて示してあるが、留数すなわち Gammel-Nuttal の定理の分子に対応する項は指数関数的ないしそれ以上に速く落ちてゆくように見える。これだけを見ればランダム級数展開は Carlman の意味での (実軸上の) 準解析関数に見える。しかし、この例が全

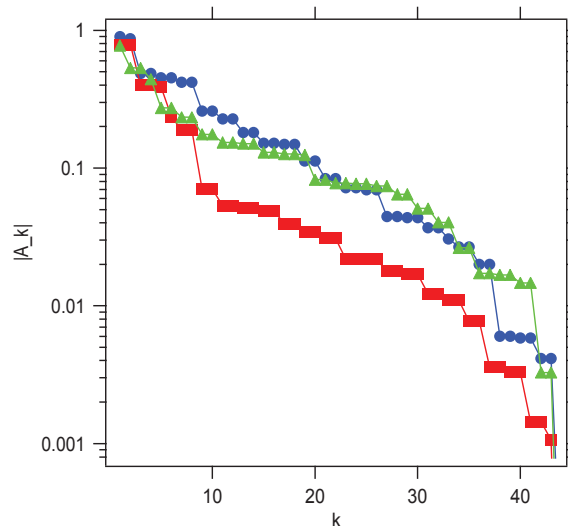


図 18: (Color online) いくつかのサンプルランダム列 r_n によるノイズ関数 $f_{noise}(z)$ ($\epsilon = 1$) に対し、パデ近似の留数 $|A_k|$ を大きさ順に並べたもの。

²⁶前節ではパデ近似のオーダーを上げることによる丸め誤差の集積に対する留数の安定性をみた。

複素平面上で(むろん自然境界を除いて)準解析的な関数を与えるとは考えにくい。例えば、 $-1, 1$ の二値乱数 a_n をもつ母関数 $\sum_n a_n z^n$ を考えるとそれは $|z| > 1$ で各項指数関数発散しそのままではこの級数に意味がない。(付録 G 参照。) さらに、このような発散が再和 (resummation) されて図 18 のような A_k をもつ (60) 式型の関数になるとはとても信じ難い。図 18 の(超)指数関数減衰が意味をもつには、少なくともパデ近似の次数 M の変化に対するパデ解析が(超)指数型減衰スペクトルを安定にもつ事を確認する必要がある。そこで、パデ近似の次数を変えて調べた留数解析の結果を図 19 に示す。パデ近似そのものは元の関数を再現する事は確認している。この結果を見ると、留数は次数と共に増大し収束の兆候は殆ど見られない。留数が式 (60) に対応すると仮定して結果から、 $|A_k| \sim \exp(-\beta k)$ として、指数減衰係数 β を強引に決定すればそれは次第に 0 に漸近するように見える。この事はノイズ母関数 $f_{noise}(z)$ の自然境界をパデ解析すると Borel どころか Carleman クラスの準解析関数とはとても言いがたい事を示唆している。

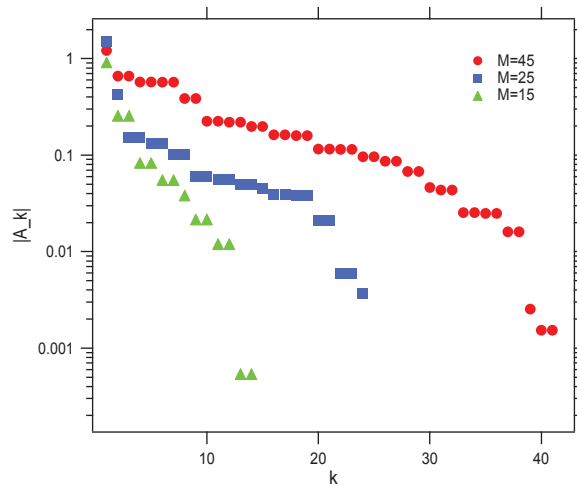


図 19: (Color online) サンプルランダム級数 $f_{noise}(z)$ ($\epsilon = 1$) に対し、パデ近似の次数 M を変えての留数解析の結果。 $M = 15, 25, 45$ の場合を示している。

比較の為、人工的に構成した Carleman クラスの準解析関数 $f_{Carleman}(z)$ に対してのパデ留数解析の結果を図 20 に示す。この場合には、パデ近似の次数を上げていっても、留数は同じような指数を持ち指数関数的減衰を示し、結果は Gammael-Nuttal の定理に従うように見える

ランダム級数も有限項数の場合は解析的関数になるので、この有限ランダム級数に対してパデ近似を行えば、解析的あるいは準解析的な関数と誤解されるようなきわめて小さな留数をもつ結果がでることが当然である。そして、パデ近似の項数(次数)を増やすとともにランダム級数の本質的性質である非解析性が現れてくる結果、上記の挙動が観察されたものと解釈できる。いずれにせよ Gammel 予想は楽観を許さないものと思われる。

Froissart doublets に類する現象はパデ近似の世界では非常によく見られる現象である。解析的な関数を無理やりパデ近似すれば極と零点は完全にキャンセルする。また、完全解析関数の Taylor 級数にもし誤差が入ればそのノイズは極と零点の組を単位円上に引き込

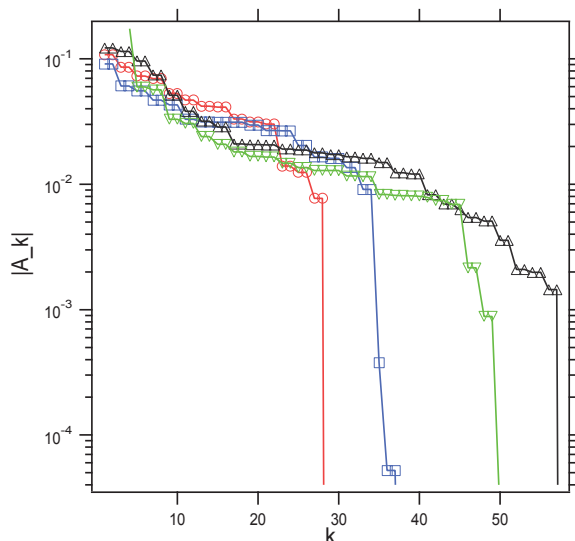


図 20: (Color online) $f_{\text{Carleman}}(z)$ に対し、パデ近似の次数 M を変えての留数解析の結果。留数 z_k を単位円状に適当に分布させている。 $M = 15, 25, 45$ の場合を示している。

み、二重項にする。この二重項に対する留数があたかも指数関数的に小さくなるように見えるのは、それにノイズが同居し、それよりはるかに大きい解析関数成分がある場合に限られる可能性が高い。

未知の関数の解析性や準解析性などの評価に対して、このような留数評価の数値計算がどの程度有効かどうかは、非常に興味深い今後の課題である²⁷。

8 まとめ

量子論に登場する波動関数の複雑さや特異性を評価する事を目的にして、特異性解析の一般的な方法として知られるパデ解析の有用性を、数学的に知られているいくつかの事実とあわせて、さまざまな具体例を使って検討した。

一般に、未知の関数が特異点をもつ場合には、テイラー展開よりもパデ展開のほうがよりよく関数を近似できる。この小論では、収束性の良い対角型パデ近似の数値計算を用いてテスト関数の特異性がどのように表されるかを確認した。特に、関数の特異性の中でもっともきわだった存在である「自然境界」をパデ近似の極の分布がどのように表現できるのか、単位円 $|z| = 1$ 上に自然境界を持つ関数を用いてテストしてみた。単位円内でのパデ近似の極は零点は全てキャンセルし (zero-pole ghost pairs)、極と零点は単位円 $|z| = 1$ 周辺に集積する傾向がある。パデ近似の位数を上げるとこの傾向はより鮮明になる。

さらに、ランダム級数に対するパデ解析と自然境界との関係を調べた。ランダム級数に

²⁷非可積分量子系のトンネル効果では近可積分古典力学系の KAM トーラスが準解析関数か否かが直接トンネル確率として観測にかかる可能性がある。

対するパデ近似の極は収束円 $|z| = 1$ の近傍に分布する。また、この性質を利用し、時系列データからノイズを除去することができる。さらに、パデ近似の留数解析を通してランダム級数が準解析関数になっている可能性について議論した。これを明確にするには、さらに多くの研究が必要である。

本稿のタイトルは、「パデ解析による波動関数の特異性診断」であった。ここまでで具体的な波動関数の診断に入る前の準備を行った。次稿において、力学系の不変曲線の解析性の例に加えて、量子状態を表現する波動関数に対してパデ解析を用いて、その解析性を調べるためのアイデアと結果を示す。具体的には、一次元強結合モデルの、不純物状態、Anderson 局在状態、Harper モデルの固有関数の特異性を考察し、単純な量子系の固有関数が自然境界をもつ可能性が決して特別ではなく極めてありふれている可能性がある事、さらに自然境界の存在が量子系を潜在的に非可逆性を導入する可能性を論ずる。この問題に密接に関係して、最近数学者によって発見された、スペクトルの特異性とポテンシャル母関数の自然境界の存在に関する parallelism も議論する。なを、本稿及び次稿の内容に関連する論文は現在準備中である [55, 56]。

A パデ近似の数値計算における注意

パデ近似に関する数値計算の方法と注意点を記しておく [47, 48, 49]。

A.1 計算法

本文におけるパデ近似の係数を求める連立方程式 (11) と (12) を行列形式で書けば次のようになる。

$$\begin{pmatrix} c_L & c_{L-1} & \cdots & \cdots & c_{L+1-M} \\ c_{L+1} & c_L & \cdots & \cdots & c_{L+2-M} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ c_{L+M-1} & c_{L+M-2} & \cdots & \cdots & c_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdots \\ \cdots \\ b_M \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} c_{L+1} \\ c_{L+2} \\ \cdots \\ \cdots \\ c_{L+M} \end{pmatrix}, \quad (64)$$

$$\begin{pmatrix} c_0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ c_1 & c_0 & 0 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ c_L & c_{L-1} & \cdots & \cdots & c_{L-M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ b_1 \\ \cdots \\ \cdots \\ b_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \cdots \\ \cdots \\ a_L \end{pmatrix}. \quad (65)$$

解くべき連立方程式は (64) である。この連立方程式の正方行列 C (M 行 M 列) は、 $(2M-1)$ 個の係数 c_n を右上から並べたものである。式 (11) を解く問題は線形 Teoplitze 問題であり、Teoplitze 行列²⁸ がしばしば特異になることがあるため、一般に ill-conditioned であ

²⁸Hankel 行列はちょうど Teoplitze 行列をひっくり返した関係になる。

る²⁹。この場合、丸め誤差の集積を最小にし、特異になることを防ぐために LU 分解の反復法を利用して解くべきである [47]。

$$C = L \cdot U, \quad (66)$$

ここで L と U は下三角行列、上三角行列を示す。このとき、解くべき連立方程式 (64) $C \cdot x = c$, は、二つの連立方程式の組になる。すなわち、

$$L \cdot y = c, \quad U \cdot x = y, \quad (67)$$

ここで、 x と c は M 列ベクトルである。

A.2 反復法

Padé 近似のなかで使用しているのは、 LU 分解と反復法である。ベクトル x を連立方程式 $A \cdot x = b$ の厳密解とする。数値的に得られた解を $x + \delta x$ とする。ここで、 δx は未知の誤差である。 A を乗じると、

$$A \cdot (x + \delta x) = b + \delta b \quad (68)$$

となる。つまり、

$$A \cdot \delta x = \delta b. \quad (69)$$

である。この式に、(68) を代入する。

$$A \cdot \delta x = A \cdot (x + \delta x) - b \quad (70)$$

右辺の $x + \delta x$ は数値的に得ているので、この式から誤差である未知量 δx を求める。そして、はじめの数値解 $x + \delta x$ から差っぴくと解が改良される。もちろん、 A は LU 分解したものをを用いると良い。引き算による桁落ちも減らせる。

また、そのためには展開係数に c_n 大きな値のものがないようにあらかじめスケールしておくことも重要である。系統的に小さな値の係数が現れるような場合もスケールして係数を $O(1)$ にするなどの工夫が必要なこともある。

A.3 特異値診断

さらに、特異な行列を扱う場合の方法として、特異値分解 (SVD) を利用し、行列 C の特異性を診断しながら式 (64) の数値解 b を求めていく方法も研究されている [48, 49]。

²⁹教育者でもある Toeplitz(1881-1940) いわく「クラスの半分は何を言ってもわからない、5 パーセントは何を言っても理解する、45 パーセントがわかるようにすれば良い。」

簡単のため、対角型パデ近似 ($M = L$) のみを考える。パデ近似の分子の多項式に対応する係数ベクトル $(a_0, a_1, a_2, \dots, a_M)^t$ を拡張し

$$\tilde{a} \equiv (a_0, a_1, a_2, \dots, a_M, a_{M+1}, \dots, a_{2M+1})^t, \quad (71)$$

とする。条件として、

$$a_{M+1} = a_{M+2} = \dots = a_{2M+1} = 0, \quad (72)$$

となるように、係数列 $\{b_i, i = 1, 2, \dots, M\}$ を設定する線形問題になる。すなわち、ベクトル b は、次の $(M+1) \times (M+1)$ 行列 \tilde{C} の右側 null ベクトルにならなければならない。すなわち、

$$\tilde{C} = \begin{pmatrix} c_M & c_{M-1} & \dots & \dots & c_1 & c_0 \\ c_{M+1} & c_M & \dots & \dots & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \dots & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \dots & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \dots & \cdot & \cdot \\ c_{2M} & \cdot & \dots & \dots & c_{M+1} & c_M \end{pmatrix} \quad (73)$$

として、

$$0 = \tilde{C}b. \quad (74)$$

従って、行列 \tilde{C} の特異値で零もしくは非常に小さなもの（典型的には 10^{-14} 以下）は、丸目誤差を通してパデ近似の係数 $\{b_i\}$, $\{a_i\}$ に影響し、spurious poles を生じる原因のひとつになる。そのため、パデ近似の実行前にテーラー展開などの級数の次数に応じて、行列 \tilde{C} の特異値の大きさを調べ危険な次数がどれほどかの目安を付けておくことは、パデ近似を行った後の留数を調べて spurious poles の判別をすることと並んで有効であろう。ここではこの小論で用いた対角型パデ近似 ($L = M$) の場合に則して記したが、一般のパデ近似（ロバストパデ近似）について文献[49]にソースコードを含めて詳しいアルゴリズムが与えられている。

B パデ近似と連分数展開

対角型パデ近似は連分数展開と関連している [51]。次の形の連分数

$$\begin{aligned} g_N(z) &= c_0 + \frac{\alpha_1 z}{1 + \frac{\alpha_2 z}{1 + \dots \frac{\alpha_N z}{\dots 1 + \dots}}} \\ &\equiv \frac{c_0}{1+} \frac{\alpha_1 z}{1+} \frac{\alpha_2 z}{1+} \dots \frac{\alpha_N z}{1+} \dots, \end{aligned} \quad (75)$$

を考える。途中を打ち切って近似したものを

$$\frac{P_m(z)}{Q_m(z)} = \frac{c_0}{1+} \frac{\alpha_1 z}{1+} \frac{\alpha_2 z}{1+} \cdots \frac{\alpha_m z}{1} \quad (76)$$

とする。このとき次の性質が成立する。 $P_1 = 1, P_0 = c_0, Q_1 = 0, Q_0 = 1$ として、漸化式

$$P_m(z) = P_{m-1}(z) + \alpha_m z P_{m-2}(z), \quad (77)$$

$$Q_m(z) = Q_{m-1}(z) + \alpha_m z Q_{m-2}(z), \quad (78)$$

が成立するので、順次、有理関数型に変換できる。 $P_{2m}(z), Q_{2m}(z)$ の次数は m , $P_{2m+1}(z), Q_{2m+1}(z)$ の次数は $(m+1)$ なので、 $\frac{P_{2m}(z)}{Q_{2m}(z)}$ が対角型の $[m|m]$ パデ近似に、 $\frac{P_m(z)}{Q_m(z)}$ が準対角型の $[m|m-1]$ パデ近似に対応する。

また、多項式の比で与えられる有理関数型から連分数型への変換は Viscovatov の方法で与えられる [17]。対角型または準対角型パデ近似はこの連分数展開を通して、または直接、直交多項式へも対応する [50]。

C パデ近似とヤコビ行列

Z 変換の関数 $Z(z)$ に対する準対角型 $[M-1|M]$ パデ近似を通して、スペクトル理論と関連するので、それを示しておく。

$$[M-1|M]_Z(z) = \frac{P_{M-1}(z)}{Q_M(z)} \quad (79)$$

とする。このとき分母の多項式 $Q_M(z)$ は、 $Q_{-1}(z) = 1, Q_0(z) = 1$ として、次の三項間漸化式を満たす。

$$Q_{n+1}(z) = (z - A_n)Q_n(z) - R_n Q_{n-1}(z), \quad (80)$$

ここで、

$$A_n = -(\alpha_{2n} + \alpha_{2n+1}), R_n = \alpha_{2n-1} \alpha_{2n}, n \geq 1, \quad (81)$$

であり、 $\{\alpha_n\} (a_0 = 0)$ は連分数展開の係数である。一般に、三項間漸化式はヤコビ行列の固有値問題に変換される。今の場合、 $D_{N+1}(z) = 0$ のとき、 $(N+1)$ 行 $(N+1)$ 列のヤコビ行列 J_N 、を

$$J_N = \begin{pmatrix} A_0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ R_1 & A_1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & R_2 & A_2 & 1 & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & R_{N-1} & A_{N-1} & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & R_N & A_N \end{pmatrix} \quad (82)$$

と定義する。このとき漸化式は固有値問題 $J_N U = zU$ に変換される。 $U = (D_0, D_1, \dots, D_N)^t$ は固有ベクトルである。 $D_{N+1}(z) = 0$ の根が固有値 z になる。このとき、次の定理が成立する³⁰。

Bessis – Perotti の定理 (2008) : $N \rightarrow \infty$ の Jacobian matrix において、確率 1 で、ヤコビ行列のスペクトルは連続スペクトルと点スペクトルにわかれる。単位円上に台を持つ連続スペクトルはノイズに関係しており、対応する固有関数は規格化不可能である。有限オーダーに Jacobi matrix が truncate されたとき、そのスペクトルは Froissart doublets の極に分解される。一方、離散点スペクトルは、単位円の内部に有限個の極をもちこれらは信号の減衰モードと対応する、対応する固有関数は有限ノルムをもつ。

最近、Breuer と Simon の論文 [52] では、 $|z| = 1$ が自然境界であることとヤコビ行列の連続スペクトルを厳密に結びつけている。次稿で議論する。

D フィボナッチ母関数の一般化

べき級数展開

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n, \quad (83)$$

が次の形でポール型の特異性を持つとする。

$$\frac{dz^2 + ez + f}{az^2 + bz + c} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n, \quad (84)$$

ここで、 a, b, c, d, e, f は実数だが、簡単のため $c \neq 0$ とする。この式は次のように整理できる。

$$dz^2 + ez + f = (ba_0 z + ca_0 + ca_1 z) + \sum_{n=2}^{\infty} (aa_{n-2} + ba_{n-1} + ca_n) z^n. \quad (85)$$

ここで、 z のそれぞれのべきでの係数を比較する。べき級数の係数が、初項 $ca_0 = f$, $ba_0 + ca_1 = e$, $aa_0 + ba_1 + ca_2 = d$ で、漸化式

$$a_k = -\frac{b}{c} a_{k-1} - \frac{a}{c} a_{k-2}, \quad k \geq 2, \quad (86)$$

で与えられる数列であれば、二つの共役な極が特異性を与えることがわかる。特に、 $a = b = -1, c = e = 1, d = f = 0$ の場合、 $a_0 = 0, a_1 = 1, a_k = a_{k-1} + a_{k-2}$ と Fibonacci 列になる。

³⁰ここでのヤコビ行列は多変数関数の変数変換に出てくるヤコビアンとは異なる。一般に固有値問題に登場するヤコビ行列は、対角項が実数で、非対角項が正の数である三重対角行列を言う。この場合は適当な相似変換により対称な三重対角行列に変換できる。ただし、上記の J_N は必ずしも $R_i > 0$ とは限らない。

E $|z| = 1$ を自然境界とする関数と空隙定理

以下に $f_{Wei}(z)$ についての物理的に理解し易い証明を記すが、 $f_{Wei}(z)$ や $f_{Kro}(z)$ に対しても同様である³¹。

証明の概略：これは $z = 1$ で発散するとともに $z^{n!} = 1$ を満たす全ての点 z で発散する。このような点は原点を中心とした単位円周上で稠密に存在する。したがって単位円内にどのような点をとっても単位円の外に解析接続することはできない。このような境界を自然境界という。

証明:明らかに、 $f_{Wie}(z)$ の収束半径 1 である。また、 $|z| < 1$ に対して、

$$\left| \frac{z^{(n+1)!}}{z^{n!}} \right| = |z|^{(n+1)!} \rightarrow 0 (n \rightarrow \infty). \quad (87)$$

従って、この級数は絶対収束し、 $f(z)$ は $|z| < 1$ で解析的である。さて、

$$z = r \exp\left(2\pi i \frac{p}{q}\right), \quad (p, q \in \mathbb{N}, r > 0), \quad (88)$$

とすれば、 $n \geq q$ に対して、

$$z^{n!} = r^{n!} \left(\exp 2\pi i \frac{p}{q}\right)^{n!} = r^{n!}. \quad (89)$$

となる。そして、冪級数は $r \rightarrow 1$ に対して次のように発散する。

$$f(z) = z + \dots + z^{(q-1)!} + \sum_{n=q}^{\infty} r^{n!} \rightarrow \infty, \quad (90)$$

p, q は任意の自然数なので、 $z_0 = \exp 2\pi i \frac{p}{q}$ は、単位円 $|z| = 1$ の任意の近傍で特異点になる。従って、単位円 $|z| = 1$ が自然境界であることが言えたことになる。

別証明: また、 $f_{Jac}(z)$ 型の関数は次のような見方もできる。関数方程式 $f_{Jac}(z) = z^2 + f_{Jac}(z^2)$ を満たすことから、 $z \rightarrow 1^-$ で $f_{Jac}(z) \rightarrow \infty$ となり、 $z^2 = 1$ を満たす点は特異点である。

同様に、 $f_{Jac}(z) = z^2 + z^4 + f_{Jac}(z^4)$ より、 $z^4 = 1$ を満たす点は特異点である。これを繰り返して、 $z^{2^k} = 1 (k = 1, 2, 3, \dots)$ を満たす点は全て特異点になる。

これらの点は $|z| = 1$ 上に集密に分布しているので、 $|z| = 1$ は自然境界である。

本文で触れなかった空隙冪級数に関する Hadamard の定理などを挙げておく。

³¹ こういう原始的な見方が数値計算などで関数の特異性を探し出す場合に役立つこともある。

Hadamard の空隙定理 (1892) : 収束半径が 1 であるべき級数

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^{\lambda_n}, \quad (91)$$

において、ある一定値 θ が存在し、次の条件を満たせば収束円 $|z| = 1$ が関数 $f(z)$ の自然境界となる。

$$1 < \theta \leq \frac{\lambda_{n+1}}{\lambda_n}. \quad (92)$$

これは、十分条件を与えているわけだが、後にこの条件は Fabry の空隙定理のように弱められていった。

注意: Hadamard の空隙定理において、 $z = e^{ix}$ とおくと、その実部、または虚部は空隙三角級数関数となる。これを一般に、

$$W(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cos(2\pi b_n x), \quad (93)$$

とすれば、条件 $b_{n+1}/b_n > q > 1$ が満たされるとき、係数の二乗和 ($\sum_{n=0}^{\infty} a_n^2$) の収束 (発散) が級数 $W(x)$ の収束 (発散) を決める [53]。すなわち、 $\sum_{n=0}^{\infty} a_n^2 \rightarrow \infty$ の場合、 $W(x)$ は列 a_n のフーリエ変換ではない。また、すぐわかるように、 $a_n \rightarrow a^n$, $b_n \rightarrow b^n$, $0 < a < 1$, b は正の奇数とし、条件 $ab > 1 + \frac{3}{2}\pi$ すれば、 $W(x)$ はよく知られた、「いたるところで微分不可能な連続関数 (Weierstrass 関数)」になる。後に、Hardy により、この b に関する条件は、 $ab > 1$ を満たす正の数と弱められ、そのとき、 $W(x)$ は「いたるところで有限な微分係数を持たない関数」と修正された。

F $f_{Wei}(z)$ と $f_{Fib}(z)$ のパデ近似における分子の多項式

自然境界を特異性としてもつ空隙級数型のテスト関数 $f_{Wei}(z)$ と $f_{Fib}(z)$ に対する対角型のパデ近似を行った場合に得られる分子の多項式の一般形を記しておく。 $f_{Wei}(z)$ に対して $N = 2^n$ 、 $f_{Fib}(z)$ に対して $N = F_n$ など特定なものに対しての結果である。いずれも多くの係数が零ゆえ、パデ近似も欠陥がある。

$$A_{Wei}^N(z) = x + 2z^2 + 2 \sum_{n=2}^{N-1} z^{H_n} (z + z^2 + \sum_{k=1}^{n-2} z^{H_{k+2}}), \quad (94)$$

ここで $H_n = 2^{n-1}$ である。

$$A_{Fib}^N(z) = S_{N-4}(z) + [S_{N-8}(z) + z](f_{N-4}(z) - f_{N-2}(z)) + [2f_{N-3}(z) + 2f_{N-2}(z) + f_{N-3}(z)f_{N-6}(z)] \quad (95)$$

ここで $S_L(z) = \sum_{k=0}^L f_k(z)$, $f_k(z) = z^{F_k}$ である。 F_N は N 番目の Fibonacci 数を表すが、 $F_{-1} = F_{-2} = \dots = 0$ とする。

これらは、いずれも MATHEMATICA で得られる 10 段階くらいのパデ近似の結果を基に帰納的に一般項を推測して表現したものであり、厳密に証明したわけではない。

より一般的で鮮やかな証明があればご教示願いたい。

G ランダム級数の自然境界に関する定理

ここでは、Steinhaus の定理に続くランダムな係数を持つべき級数展開（係数にノイズが入ったともみなせる）場合の自然境界に関するいくつかの定理を挙げておく。

Paley – Zygmund の定理 (1932) : 収束半径 1 の冪級数 $\sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n$ (46) において、 $-1, 1$ を等確率でとる適当な数列を $\epsilon_0, \epsilon_1, \dots, \epsilon_n, \dots$ とするとき、関数

$$f_{P-Z}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n a_n z^n. \quad (96)$$

は確率 1 で $|z| = 1$ を自然境界に持つ。

証明などは文献 [20] を参照のこと。この定理は、Kahane により様々なタイプの確率変数の場合に拡張されている [54]。さらに、Breuer と Simon により非常に一般化した形で次の定理が与えられている。

Breuer – Simon の定理 (2011) : 列 $a_n(\omega)$ は定常、エルゴード的で、有界な非決定的過程とする。 $(\omega$ はサンプルを表す) このとき、殆ど全ての ω に対して、べき級数関数 $f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n$ は強い自然境界をもつ。

この定理に関しては、次稿で詳しく議論する。

謝辞

本稿は、思いがけず早逝された田崎氏への追悼論文として物性研究「非平衡統計物理学の展望-田崎秀一さんを偲んで-」に掲載していただく事を志して起稿されたものであるが残念ながら時間的に間に合わなかった。改めて本稿を田崎氏の霊前にささげたい³²。

この原稿の一部は、2005年に立命館大学で開かれた国際会議“International Symposium of Complexified Dynamics, Tunnelling and Chaos”の際に準備したものである。

この研究には、部分的に日本の税金が使われています。納税者である日本国民に感謝します。また、この研究の一部は、河原屋辻亭と、越後小池記念館を利用し遂行されました。関係者に深謝します。

³²田崎氏への物性研究の追悼特集号は既に出版されている [57]。

参考文献

- [1] Martin C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, (Interdisciplinary Applied Mathematics, Springer 1991).
- [2] I. Prigogine, *From Being to Becoming: Time and Complexity in the Physical Sciences* (W H Freeman, San Francisco, 1981).
- [3] たとえば、伊藤秀一, 「常微分方程式と解析力学」(共立出版、1998).
- [4] 松井文宏 「少数自由度量子カオス系におけるコヒーレンスの自発的喪失」(立命館大学 修士論文 2012); 松井文宏, 山田弘明, 池田研介 「少数自由度量子カオス系における Von-Neumann エントロピーと非可逆相転移」日本物理学会第 67 回年次大会, 関西学院大学 (2012 年 3 月).
- [5] H.S. Yamada and K.S. Ikeda, Phys. Rev. E **82**, 060102(R)(2010); Eur. Phys. J. B **85**, 41(2012); Eur. Phys. J. B **85**, 195(2012).
- [6] H.S. Yamada and K.S. Ikeda, Bussei Kenkyu, **97**, 560-581(2011).
- [7] P Leboeuf and A Voros, J. Phys. A **23**, 1765(1990).
- [8] M. Toda, Physica D **59**, 121-141(1992).
- [9] K.S. Ikeda, Ann. Phys. **227**, 1(1993).
- [10] H.Yamada and K.S. Ikeda, Phys. Rev. E **59**, 5214-5230(1999).
- [11] H. Yamada and K.S.Ikeda, Phys. Rev. E **65**, 046211-1-17(2002).
- [12] A. Shudo and K.S. Ikeda, Phys. Rev. Lett. **109**, 154102(2012).
- [13] *Dynamical Tunneling: Theory and Experiment*, Ed. by S. Keshavamurthy and P. Schlagheck, (CRC Press, 2011).
- [14] G.A. Baker and J.L. Gammel, *The Padé Approximation in Theoretical Physics*, (Academic Press: New York, 1970).
- [15] George A. Baker Jr, *Essentials of Padé Approximants* (Academic Press, 1975).
- [16] George A. Jr Baker and Peter Graves-Morris, *Padé Approximants 2nd Edition*, (Cambridge University Press, 1996).
- [17] J.Kallrath, On Rational Function Techniques and Padé Approximants:An Overview, Note(2002).
- [18] L.V. Ahlfors, *Complex analysis*, (McGraw-Hill, New York, 1966).

- [19] T.W. Korner, *Fourier analysis*, (Cambridge University Press 1988); *Exercises for Fourier Analysis*, (Cambridge University Press 1993).
- [20] R. Remmert, *Classical Topics in Complex Function Theory*, (Springer New York, 2010).
- [21] Jan-Christoph Schlage-Puchta, Arch. Math. (Brno) **38**, 307-309(2002): arXiv:1105.1624v1 [math.CV].
- [22] 笹川辰弥, 「散乱理論」(裳華房, 1991).
- [23] H. Stanly, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Clarendon Press, Oxford, 1971).
- [24] C.N. Yang and T.D. Lee, Phys. Rev. **87** (1952) 404.
- [25] B. Nickel, J. Phys.A **32** 3889(1999):
- [26] R. Kubo, M. Toda, N. Hashizume, and N. Saito, *Statistical Physics I, II* (Springer-Verlag, Berlin, 1983, 1985).
- [27] B.M.McCoy, arXiv:cond-mat/0103556v1.
- [28] D. Bessis, J. Comput. Appl. Math. **66** 85-88(1996).
- [29] D. Bessis and L. Perotti, J. Phys. A **42**, 365202(2009).
- [30] A. Berretti and L. Chierchia, Nonlinearity **3**, 39(1990).
- [31] A. Berretti and C. Falcolini, and G. Gentile, Phs. Rev. E **64**, 015202-1(2001).
- [32] O. Costin and M. Huang, Advances in Mathematics **222**, 1370-1404(2009).
- [33] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, (Spring-Verlag, Berlin, 1983).
- [34] G.A. Baker, Acta Appl. Math., **61**,37-52(2000).
- [35] H. Stahl, J. Comput. Appl. Math. **86** 287-296(1997).
- [36] D.S. Lubinsky, Ann. Math., **157**, 847-889(2003).
- [37] M. Kac, Bull. Amer. Math. Soc. **49**, 314-320(1943).
- [38] P. Erdos and P. Turan, Ann. of Math. **51**, 105-119(1950).
- [39] Y. Peres and B. Virag, Acta Math. **194**, 1-35(2005).

- [40] E. Bogomolny, O. Bohigas and P. Leboeuf, Phys. Rev. Lett. **68**, 2726(1992); J. Stat. Phys. **85**, 639(1996) .
- [41] P. Leboeuf, J.Stat.Phys. **95**, 651-664(1999).
- [42] J. Gilewicz, M. Pindor, J. Comput. Appl. Math. **87**, 199-214(1997).
- [43] J. Gilewicz, M. Pindor, J. Comput. Appl. Math. **89**, 155-165(1999).
- [44] Abe Shenitzer, N. Luzin, "Function: Part I", The American Mathematical Monthly, **105**, 59-67(1998).
- [45] N. Luzin, "Function: Part II", The American Mathematical Monthly, **105**, 263-270(Mar., 1998).
- [46] J.L. Gammel and J. Nuttal, J. Math. Anal. Appl. **43**, 694-696(1973).
- [47] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W.T. Vetterling and B.P. Flannery, *Numerical Recipes in C* (Cambridge University Press, 1988); W. H. Press, S. A. Teukolsky, Computers in Physics, **6**, 82(1992).
- [48] P. Gonnet, R. Pachon, and L. N. Trefethen, Electronic Transactions on Numerical Analysis **38**, 146-167(2011).
- [49] P. Gonnet, S. Guttel, and L. N. Trefethen, *Robust Padé Approximation via SVD*, SIAM Review **55**, 101-117(2013).
- [50] 上野 健爾, 青本 和彦, 砂田 利一「現代数学の広がり 1」(岩波書店、2005).
- [51] C. Brezinski, *History of Continued Fractions and Padé Approximants*, (Springer-Verlag, 1991) .
- [52] J. Breuer and B. Simon, Advances in Mathematics, **226**, 4902-4920(2011). arXiv:1002.0823v2.
- [53] A. Zygmund, *Trigonometric series, Vols. I, II*, 2nd Edition, (Cambridge University Press, Cambridge, 1959).
- [54] J.-P. Kahane, *Some Random Series of Functions, 2nd edition*, Cambridge Studies in Advanced Mathematics, 5, (Cambridge University Press, Cambridge, 1985).
- [55] H.S. Yamada and K.S. Ikeda, "Analyticity of Quantum States in One-Dimensional Tight-Binding Model", preprint.
- [56] H.S. Yamada and K.S. Ikeda, "A Numerical Test of Pade Approximation for Some Functions with singularity", preprint.

- [57] 物性研究 **97**, no.3, 2011/12 特集「非平衡統計物理学の展望-田崎秀一さんを偲んで-」 Perspectives of Nonequilibrium Statistical Physics -The Memory of Professor Shuichi Tasaki-.