数理解析研究所講究録
第 889 巻 1994 年 1-18



# アルゴリズム・情報幾何・非線形可積分系

同志社大学工学部　中村佳正 (Yoshimasa Nakamura)

本稿では，「可積分系による応用解析」のねらいを明らかにするため，まず，行列の固有値問題と数列の加速法を取り上げ，すぐれたアルゴリズムと可積分系のかかわりについて解説する．さらに，Lyapunov方程式や代数Riccati方程式など定常Kalmanフィルターに現れる代数方程式を解くアルゴリズムとその加速を提案する．また，代数方程式の正定値解や $\tau$ 関数の正定値性を通じて，アルゴリズムの収束性の背後に情報幾何の双対構造があることを述べる．

## §1　行列の固有値問題と可積分系

「可積分系による応用解析」，すなわち，可積分系の応用数理的な側面の探求は1982年のSymes[1]による有限非周期戸田（有限戸田分子）方程式と行列の固有値の $QR$ アルゴリズムの関係の指摘に端を発するとみられる．この1982年とは非線形可積分系が「ソリトン方程式の理論」として一応の完成をみた年でもある．[1]で明らかにされたのは，戸田方程式の時刻 $t=0$ から $t=1$ への時間発展は，戸田方程式のLax表示に現れる３重対角行列 $L$ の指数関数に対する $QR$ アルゴリズムの１ステップに他ならないことである．言い換えれば，戸田方程式の初期値問題は行列の $QR$ 分解によって具体的に解かれることになる．これを少し詳しくみてみよう．

$n\times n$ 行列の固有値は固有方程式とよばれる $n$ 次代数方程式の解であたえられるが，$n$ が５以上では代数方程式を一般に解く公式は存在せず，固有値計算はアルゴリズムによる近似的な手法に頼らざるをえない．その中でも，$QR$ アルゴリズム(Francis, 1961)は“champion algorithm”と形容されるように，収束が速く、中規模の問題に対する最も効率のよいアルゴリズムとして知られている．それは，相異なる固有値をもつ実対称行列の場合，前処理としてHouseholder法などにより３重対角に相似変形してアルゴリズムを適用すれば，３重対角性を保ちつつ固有値からなる対角行列に収束することからも理解されよう．３重対角に相似変形できない場合も，上Hessenbergに変形して適用すれば，今度は上Hessenberg性を保存して上３角行列に近づき，やはり計算すべき非零の要素が少ない利点がある．$QR$ アルゴリズムの手順はつぎの通り．

$M$ を相異なる固有値をもつ与えられた実対称行列とする（$M$ は３重対角とは限らないが，必要なら前処理を施しておく）．まず，Gram-Schmidtの直交化（$QR$ 分解）により $M$ を

$$M = QR$$

と分解する．ここに，$Q$は直交行列，$R$は上3角行列．なお，$M$が正則ならば常に分解可能，$R$の対角成分を正とすれば分解は一意的である．つぎに$Q$と$R$の積の順序を入れ替えて，$M'$を

$$M' := RQ$$

と定める．$M' = Q^\top MQ$であるから$M \to M'$のもとで固有値は不変．同様にGram-Schmidtの直交化と因子の入れ替えにより，

$$M' = Q'R', \qquad M'' := R'Q'$$

を定める．$M'' = (QQ')^\top MQQ'$に注意する．このような直交行列$Q$の列による相似変形の繰り返しに対して，列$M \to M' \to M'' \to \cdots$は

$$M^{(\infty)} = \begin{pmatrix} \nu_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \nu_n \end{pmatrix}$$

という$M$の固有値からなる対角行列に収束する．証明は数値解析の教科書を参照されたい．

ここで行列の指数関数$\exp L_0$の固有値計算を考えよう，ただし，$L_0$は3重対角行列

$$L_0 = \begin{pmatrix} b_{01} & a_{01} & & 0 \\ a_{01} & b_{02} & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & a_{0n-1} \\ 0 & & a_{0n-1} & b_{0n} \end{pmatrix},$$

各$a_{0j}$は正であるものとする．このとき，$\exp L_0$は正則で相異なる正の固有値をもつ．$t$を実パラメータとして，上で述べたGram-Schmidtの直交化により

$$\exp(tL_0) = Q(t)R(t), \qquad R(0) = I$$

と分解する．ここで，

$$L(t) = Q^\top(t)L_0Q(t)$$

とおくと，$L(t)$は3重対角でつぎのLax型微分方程式と初期条件$L(0) = L_0$をみたすことがわかる，すなわち，

$$L(t) = \begin{pmatrix} b_1 & a_1 & & 0 \\ a_1 & b_2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & a_{n-1} \\ 0 & & a_{n-1} & b_n \end{pmatrix}, \qquad \frac{dL}{dt} = \left[L, Q^\top \frac{dQ}{dt}\right].$$

ここに，$[L,B]=LB-BL$．一方，$\exp(tL_0)=QR$を微分して

$$Q^\top L_0 Q = Q^\top \frac{dQ}{dt} + \frac{dR}{dt}R^{-1}$$

を得るから，$Q^\top dQ/dt$は$L$の歪対称部をとって，

$$Q^\top \frac{dQ}{dt} = (L_+)^\top - L_+ = \begin{pmatrix} 0 & -a_1 & & \text{\huge 0} \\ a_1 & 0 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -a_{n-1} \\ \text{\huge 0} & & a_{n-1} & 0 \end{pmatrix}$$

と表される．$L_+$は$L$の強上３角部を示す．以上により３重対角行列$L$の各要素は力学系

$$\begin{aligned} \frac{da_k}{dt} &= a_k(b_{k+1}-b_k), \quad k=1,\cdots,n-1, \\ \frac{db_k}{dt} &= 2({a_k}^2 - {a_{k-1}}^2), \quad k=1,\cdots,n, \end{aligned}$$

を満足することがわかる，ただし，$a_0=0,\ a_n=0$．これはMoser[2]が考察した有限非周期戸田（有限戸田分子）方程式に他ならない．すなわち，この場合の戸田方程式は初期値$L_0$の指数関数$\exp(tL_0)$のGram-Schmidtの直交化により積分できることがわかる．興味深いことに，この力学系を用いると$t\to\infty$で

$$L(\infty) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & \text{\huge 0} \\ & \ddots & \\ \text{\huge 0} & & \lambda_n \end{pmatrix}, \qquad \lambda_1 > \cdots > \lambda_n$$

となり，初期値$L_0$の固有値$\lambda_j$が大小順に並ぶことがわかっている（ソーティング機能）．

さて，$t=1$として，

$$\exp L_0 = Q(1)R(1).$$

また，

$$\exp L(1) = \exp\left(Q^\top(1)L_0Q(1)\right) = R(1)Q(1)$$

だから，結局，戸田方程式の$t=0$から$t=1$への離散的な時間発展$L_0\to L(1)$は$QR$アルゴリズムの１－ステップに一致することがわかる[1]．$L(1)$をあらためて初期値にとり以上の手順を繰り返せば，$M_k=\exp L(k)$について漸化式

$$M_{k+1} = Q_k(1)^\top M_k Q_k(1), \qquad M_k = Q_k(1)R_k(1)$$

を得る，ただし，$\exp(tL(k)) = Q_k(t)R_k(t)$. この事実はすぐれたアルゴリズムが非線形可積分系の時間差分として実現されうることを示し，逆に，可積分系を用いてアルゴリズムを開発できるかとの問題を提起している．なお，本稿では「離散」と「差分」をほぼ同じ意味で用いるが慣例に従って使い分けるものとする．

事実，[1]の後，行列のCholesky分解アルゴリズム[3]や特異値分解法[4]などと戸田方程式を拡張した連続時間Lax型可積分系のかかわりについての研究が続いた．さらに，戸田方程式の発見以前の1954年，Rutishauserによって固有方程式の解を求める商差法（QDアルゴリズム）の連続時間極限によりある非線形力学系が導かれていたが，この力学系はQDアルゴリズムと$LR$分解アルゴリズムとの同等性を通じて，$LR$分解に関連する戸田型方程式に変形されることが報告された[5]. この意味で[1]で扱った本来の戸田方程式を$QR$戸田方程式とよぶことがある．最近，$QR$戸田方程式の$\tau$関数の意味での可積分構造に注目した差分化により離散時間戸田分子方程式が導かれたが，それは$QR$ではなくむしろ$LR$アルゴリズムに一致するようである[6]. $QR$戸田方程式の初期値問題に基づく離散Lax表示と考えられる$M_{t+1} = {Q_t}^\top M_t Q_t$との相互関係はよくわかっていない．

$QR$アルゴリズムや$LR$アルゴリズムはいずれも行列の分解とそれにより得られた行列の順序の取り替えを交互に繰り返すという線形代数の操作である．この操作は，やはり1982年頃（ソリトン方程式のクラスに入らない可積分系として）盛んに研究された自己相対Yang-Mills方程式や定常軸対称Einstein方程式の解の空間に作用するいわゆるRiemann-Hilbert変換の特別な場合であり，可積分系とのかかわりは今となっては当然にみえる．なお，Riemann-Hilbert変換は確率過程の線形予測問題[7]に応用され「可積分系による応用解析」のさきがけとなっている．

一方，戸田方程式とは異なるタイプのLax表示をもつ非線形可積分系で行列の固有値問題を解くものとしては，以下で解説する2重括弧のLax型方程式[8]がある．この力学系は行列の非対角成分の2乗和に対する一種の勾配系である． 初期値として$L_0 \in u(n)$が与えられたとし，$L_0$を通る$U(n)$の随伴軌道

$$L(t) = (\ell_{ij}) = g^*(t)L_0 g(t)$$

を考察する．$t$は実パラメータ．$J$を行列をその対角成分からなる対角行列へうつす写像とする．ここでは，

$$J(L) = \mathrm{diag}(\ell_{11}, \ell_{22}, \cdots, \ell_{nn}).$$

を考える．$J(L)$はトーラス群の作用のもとで不変だから，$J$は一種の“moment map”とみなされよう．さらに$u(n)$における内積を

$$\mu(X, Y) = \mathrm{trace}(XY^*), \qquad X, Y \in u(n)$$

で定義し，この計量のもとでポテンシャル

$$U(L) = \mu(L - J(L), L - J(L)) = \sum_{i \neq j} |\ell_{ij}|^2$$

に対する勾配系を導入しよう．結果は2重括弧のLax型方程式

$$\frac{dL}{dt} = \Big[L, [J(L), L]\Big]$$

となる[8]．戸田方程式のLax表示$dL/dt = [L, (L_+)^\top - L_+]$と比較されたい．

$$\frac{dU(L)}{dt} = -\mu([L, J(L)], [L, J(L)]) \leq 0$$

に注意すると，$U(n)$のコンパクト性より$L(\infty) = \lim_{t \to \infty} L(t)$が存在し，$[L(\infty), J(L(\infty))] = 0$を通じて$L(t)$はgenericに

$$L(\infty) = \begin{pmatrix} \ell_{11}(\infty) & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \ell_{nn}(\infty) \end{pmatrix}$$

に収束することがわかる．$t$は$L$のスペクトル保存変形パラメータだから，$\ell_{jj}(\infty)$達は初期値$L_0$の固有値のいずれかである．$QR$戸田方程式の場合，安定な平衡点はただひとつで，$L(\infty)$では固有値が大小順に並ぶというソーティング機能があったのに対して，この勾配系では多くの安定な平衡点が存在する．$L$の実部をとれば，歪対称行列Re$L_0$，虚部をとれば対称行列Im$L_0$の固有値を計算することができる．なお，ポテンシャル$U(L)$はJacobiアルゴリズムにも評価関数として登場するので，アルゴリズムとしてはむしろJacobi法に関連するかもしれないが，可積分な差分化や一般的な求積の問題は未解決である．

行列の固有値問題とは関係ないが，これもすぐれたアルゴリズムとして知られる線形計画問題のKarmarkarの内点アルゴリズムの連続極限（Karmarkarの力学系）

$$\frac{dr_j}{dt} = -c_j {r_j}^2 + r_j \sum_{k=1}^{n} c_k {r_k}^2, \qquad r_j > 0, \quad c_j : \text{定数}, \quad j = 1, \cdots, n$$

について簡単にふれておく．上の2重括弧のLax型方程式において$L_0 = \mathrm{diag}(1, 0, \cdots, 0)$，$g(t) \in O(n)$ととる．$C = \frac{1}{2}\mathrm{diag}(c_1, \cdots, c_n)$ について

$$\frac{dL}{dt} = \Big[L, [J(CL), L]\Big]$$

はKarmarkarの力学系に同値であり，これを利用して解の表示や平衡点の個数と安定性が調べられている[9]．Karmarkarアルゴリズムに限らず多くの内点アルゴリズムは可積分な力学系にかかわりが深いことがわかってきている．

## §2　数列の加速法と可積分系

Symes[1]による有限戸田分子方程式と行列の固有値の$QR$アルゴリズムの関係の発見とならんで，すぐれたアルゴリズムと可積分系とのかかわりを指摘したものに亀高氏の解説[10]がある．論文としては[11]を参照されたい．そこでは，一般の数列に対するAitken(1926)の加速法とその一般化である$\varepsilon$-アルゴリズム(Wynn, 1956)にソリトン方程式の理論に現れるPlücker座標の類似が登場することが述べられている．その後，最近になって，Papageorigiou等[12]により，$\varepsilon$-アルゴリズムは時間変数をも差分化した離散KdV方程式（lattice KdV）そのものであることが指摘されている．なお，Aitkenの加速法は関孝和(1674)によって既に考案されており，関孝和はこの業界では“the greatest Japanese mathematician”と形容されているようである(Brezinski)．

まず数列の加速とはどのようなものであろうか．簡単な例として，漸化式

$$8a_n - 6a_{n-1} + a_{n-2} = 0$$

で定義される数列$\{a_n\}$を考えよう．差分方程式でよく知られているように，特性多項式$8t^2-6t+1=0$の解$t=\frac{1}{2}$，$\frac{1}{4}$を用いて一般項は

$$a_n = c_1\left(\frac{1}{2}\right)^n + c_2\left(\frac{1}{4}\right)^n$$

と表せるから，この数列$\{a_n\}$は$(\frac{1}{2})^n$のオーダーで収束することがわかる．$c_1$と$c_2$は初期値$a_1$，$a_2$より定まる定数．ところが，$b_n = a_n - \frac{1}{2}a_{n-1}$とおくと，漸化式は

$$b_n = \frac{1}{4}b_{n-1}$$

と変形され，新しい数列$\{b_n\}$は$(\frac{1}{4})^n$のオーダーで収束することになる．一般に，$n\to\infty$で

$$a_n = a + c_1{\mu_1}^n + c_2{\mu_2}^n + \cdots, \qquad 1 > |\mu_1| > |\mu_2| > \cdots$$

と漸近的に表される数列に対しては

$$b_n = \frac{a_n - \mu_1 a_{n-1}}{1-\mu_1}$$

で定義される数列$\{b_n\}$は${\mu_2}^n$のオーダーで収束する．この手順を繰り返すことで，収束をさらに速くすることができる．これをRomberg-Richardson加速といい定積分の計算などに用いられるが，$|\mu_k|$達の大小が既知でなければ使えない．

これに対してAitken加速とは，$\mu_k$達がわかっていなくても，その推定値で置き換えて加速する方法である．例えば，

$$
\begin{aligned}
a_n &= a + c_1{\mu_1}^n + c_2{\mu_2}^n + \cdots, \\
a_{n-1} &= a + c_1{\mu_1}^{n-1} + c_2{\mu_2}^{n-1} + \cdots
\end{aligned}
$$

なる数列があったとする．これより $a_n - a_{n-1} = \mu_1(a_{n-1} - a_{n-2}) + \cdots$ だから，$\mu_1$の推定値

$$
\tilde{\mu}_1 = \frac{a_n - a_{n-1}}{a_{n-1} - a_{n-2}}
$$

を得る．もとの数列$\{a_n\}$が1次収束すれば，Romberg-Richardson加速と同様にして定まる数列

$$
\begin{aligned}
b_n &= \frac{a_n - \tilde{\mu}_1 a_{n-1}}{1 - \tilde{\mu}_1} \\
&= \frac{a_n a_{n-2} - {a_{n-1}}^2}{a_n - 2a_{n-1} + a_{n-2}}
\end{aligned}
$$

は加速されることがわかっている[13]．Romberg-Richardson加速と異なり$\{b_n\}$は$\{a_n\}$の有理変換である．後退差分$\Delta a_n = a_n - a_{n-1}$を用いると

$$
b_n = \frac{\begin{vmatrix} a_n & \Delta a_n \\ \Delta a_n & \Delta^2 a_n \end{vmatrix}}{\Delta^2 a_n}
$$

と表されることに注意する．

つぎに$\varepsilon$-アルゴリズムについて[13]を要約する．$n \to \infty$で

$$
a_n = a + c_1{\mu_1}^n + c_2{\mu_2}^n + \cdots
$$

と漸近的に表される数列について考えよう．ここに，$c_j$は$n$の多項式であってもよい．$a_n$を有限個の和で打ち切った

$$
\tilde{a}_n = a + c_1{\mu_1}^n + c_2{\mu_2}^n + \cdots + c_k{\mu_k}^n
$$

はつぎの形の漸化式（差分方程式）

$$
\tilde{c}_0\tilde{a}_n + \tilde{c}_1\tilde{a}_{n-1} + \cdots + \tilde{c}_k\tilde{a}_{n-k} = \sum_{j=0}^{k} \tilde{c}_j b_n^{(k)}
$$

を満足するはずである．この補外式の右辺の$b_n^{(k)}$は有限個の和での打ち切り$\{\tilde{a}_n\}$に基づく数列$\{a_n\}$の極限$a=\lim_{n\to\infty}a_n$の推定値である．与えられた数値を$\tilde{a}_n,\cdots,\tilde{a}_{n-2k}$として，連立方程式

$$\tilde{c}_0\tilde{a}_n+\tilde{c}_1\tilde{a}_{n-1}+\cdots+\tilde{c}_k\tilde{a}_{n-k}=\sum_{j=0}^{k}\tilde{c}_j b_n^{(k)},$$
$$\vdots$$
$$\tilde{c}_0\tilde{a}_{n-k}+\tilde{c}_1\tilde{a}_{n-k-1}+\cdots+\tilde{c}_k\tilde{a}_{n-2k}=\sum_{j=0}^{k}\tilde{c}_j b_n^{(k)}$$

を考えよう．これが零でない解$\tilde{c}_j$をもつためには，係数行列が正則でないことが必要十分だから，

$$\begin{vmatrix} \tilde{a}_n-b_n^{(k)} & \tilde{a}_{n-1}-b_n^{(k)} & \cdots & \tilde{a}_{n-k}-b_n^{(k)} \\ \tilde{a}_{n-1}-b_n^{(k)} & \tilde{a}_{n-2}-b_n^{(k)} & \cdots & \tilde{a}_{n-k-1}-b_n^{(k)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \tilde{a}_{n-k}-b_n^{(k)} & \tilde{a}_{n-k-1}-b_n^{(k)} & \cdots & \tilde{a}_{n-2k}-b_n^{(k)} \end{vmatrix}=0$$

でなければならない．これを$b_n^{(k)}$について解くと，Hankel行列の行列式を用いて

$$b_n^{(k)}=\frac{\tau_{k+1}^{(n)}(0)}{\tau_k^{(n)}(2)},\qquad \tau_k^{(n)}(m)=\begin{vmatrix} \Delta^m\tilde{a}_n & \Delta^{m+1}\tilde{a}_n & \cdots & \Delta^{m+k-1}\tilde{a}_n \\ \Delta^{m+1}\tilde{a}_n & \Delta^{m+2}\tilde{a}_n & \cdots & \Delta^{m+k}\tilde{a}_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \Delta^{m+k-1}\tilde{a}_n & \Delta^{m+k}\tilde{a}_n & \cdots & \Delta^{m+2k-2}\tilde{a}_n \end{vmatrix}$$

と表され，推定値$b_n^{(k)}$を得る．$k=1$とすれば，$b_n^{(1)}$は$\{\tilde{a}_n\}$のAitken加速に一致する．この$k$次の加速法はけた落ちの影響を受けやすく，その欠点を回避する目的で導入された行列式の比

$$\varepsilon_{2k}^{(n)}=\frac{\tau_{k+1}^{(n)}(0)}{\tau_k^{(n)}(2)},\qquad \varepsilon_{2k+1}^{(n)}=\frac{\tau_k^{(n)}(3)}{\tau_{k+1}^{(n)}(1)}$$

の満たすべき偏差分方程式

$$\varepsilon_k^{(n)}-\varepsilon_{k-2}^{(n-1)}=\frac{1}{\varepsilon_{k-1}^{(n)}-\varepsilon_{k-1}^{(n-1)}}$$

を$\varepsilon$-アルゴリズムという．この導出には可積分系の常套手段であるSylvester (Jacobi)の恒等式とPlücker関係式，それぞれ，

$$\tau_k^{(n)}(m+2)\tau_k^{(n-1)}(m)-\tau_k^{(n)}(m+1)\tau_k^{(n-1)}(m+1)-\tau_{k+1}^{(n)}(m)\tau_{k-1}^{(n-1)}(m+2)=0,$$
$$\tau_k^{(n)}(m+2)\tau_{k+1}^{(n+1)}(m)-\tau_{k+1}^{(n+1)}(m+1)\tau_k^{(n-1)}(m+1)-\tau_k^{(n+1)}(m+2)\tau_{k+1}^{(n)}(m)=0,$$

が用いられる[13]．初期値$\varepsilon_{-1}^{(n)}=0$，$\varepsilon_0^{(n)}=\tilde{a}_n$，$n=0,1,\cdots$，について偏差分方程式を順に解けば，ある場合には，$\varepsilon_{2k}^{(n)}=b_n^{(k)}$は，$n\to\infty$で，もとの数列$\{a_n\}$の極限値$a$に加速されて収束する．

上の偏差分方程式は離散可積分系のひとつ，離散（ポテンシャル）KdV方程式と呼ばれるものに他ならない[12]．すなわち，離散変数$k$と$n$の適当な極限では（ポテンシャル）KdV方程式に移行する．また，$\tau_k^{(n)}(m)$は広田・佐藤の$\tau$関数で，ソリトン解そのものではなく，いわゆる分子型の解を記述する．$\varepsilon$-アルゴリズムがなぜ数列の収束を加速するのかは，$\tau$関数の立場からは明解で，研究会では梶原氏により$\varepsilon_{2k}^{(n)}=\tau_{k+1}^{(n)}(0)/\tau_k^{(n)}(2)$の分母と分子の行列式の次数が，それぞれ，$k$と$k+1$であり，この次数のずれに起因するとの説明がなされた．

一歩進んで，$\tau$関数や離散可積分系の視点から新しい加速法の開発が考えられる．また，$\theta$-アルゴリズムや$\rho$-アルゴリズムなどその他の加速法（降旗氏の講演）の離散可積分系とのかかわりも興味あるテーマであろう．次節では，加速法と可積分系について新しい視点を交えて解説する．

## §3　定常Kalmanフィルターと可積分系

亀高氏の数列の加速法と可積分系の意外な関係の指摘[10]のなかで，もう一つ忘れてならないのが，現代制御理論の中核をなす定常Kalmanフィルターの設計において重要なダブリング（倍化）アルゴリズムについての言及であろう．本節では，筆者の最近の研究の中から関連する話題を紹介する．

ダブリングアルゴリズムとは最適なフィルターへの収束のスピードを倍に加速する（ようにみえる）ことから命名されたアルゴリズムである．実際には計算量の増大を考慮しなけらばならないだろう．Lyapunov方程式とよばれる線形代数方程式系の正定値解についてのアルゴリズム[14]とそれを特別な場合として含む行列Riccati方程式の定常解を計算するアルゴリズム[15]が代表的である．以下，順にLyapunov方程式と行列Riccati方程式を考察するが，線形システムや定常Kalmanフィルターに関する用語については[16]を参照されたい．

まず，離散時間定常線形システム

$$\mathbf{x}_{t+1}=F\mathbf{x}_t+G\mathbf{w}_t,\qquad y_t=H\mathbf{x}_t+\mathbf{v}_t$$

を取り上げよう，ここで定常とは係数行列$F$，$G$，$H$が時刻$t$に依らないことをいう．$\mathbf{x}_t$は$n$次元状態ベクトル，$y_t$は観測ベクトル，$\mathbf{w}_t$と$\mathbf{v}_t$は平均０のGauss白色雑音でその共分散行列は既知であるものとする．例えば，$\mathrm{E}[\mathbf{w}_t\mathbf{w}_s^\top]=Q\delta_{ts}$．さらに，初期時刻0での状態ベクトル$\mathbf{x}_0$はGauss分布に従い，その平均$\bar{\mathbf{x}}_0$および共分散行列$\mathrm{E}[(\mathbf{x}_0-\bar{\mathbf{x}}_0)(\mathbf{x}_0-\bar{\mathbf{x}}_0)^\top]=P_{0,0}$が与えられているものとする．問題は任意時刻での状態ベクトルの平均$\bar{\mathbf{x}}_t$および共分散行列$\mathrm{E}[(\mathbf{x}_t-\bar{\mathbf{x}}_t)(\mathbf{x}_s-\bar{\mathbf{x}}_s)^\top]=P_{t,s}$を

求めることである．$\bar{\mathbf{x}}_t = F^t \bar{\mathbf{x}}_0$，および，

$$P_{t+1,t+1} = FP_{t,t}F^\top + GQG^\top$$

が知られている．さらに，$F$が漸近安定（すべての固有値の絶対値が1未満）であれば，初期時刻を無限の過去とすることができ，考えている問題の解は$\bar{\mathbf{x}}_t = 0$かつ$P_{t,s} = F^{t-s}P$, ただし，$t \geq s, = P(F^\top)^{s-t}$, ただし，$t < s$で与えられる．ここに，$P$はLyapunov方程式

$$P = FPF^\top + GQG^\top$$

の解．従って$F$が漸近安定である場合，問題は$P_t = P_{t,t}$についての線形差分方程式の定める数列

$$P_0 = 0 \to P_1 \to P_2 \to P_3 \to P_4 \to \cdots \to P$$

の極限$P$求めることに帰着される[16]．$F$と$\sqrt{GQG^\top}$が可到達の関係にあるとき，$F$の漸近安定性と正定値な極限$P$への収束性は同値である．これは情報幾何における双対構造の存在に関係している[17]．

さて，極限$P$へ収束する数列$\{P_t\}$の加速法として

$$N_k = M_{k-1}N_{k-1}{M_{k-1}}^\top + N_{k-1}, \qquad N_0 = GQG^\top,$$
$$M_k = {M_{k-1}}^2, \qquad M_0 = F, \quad k = 1, 2, \cdots$$

なるダブリングアルゴリズムが知られている[16]．実際，$N_k = P_{2^k}$であるから，このアルゴリズムにより

$$P_0 = 0 \to P_1 \to P_2 \to P_4 \to P_8 \to \cdots \to P$$

なる数列が得られたことになる．ダブリングアルゴリズムを書き直して

$$P_{2^{k+1}} = F^{2^k}P_{2^k}(F^\top)^{2^k} + P_{2^k}.$$

これは$P_{2^k}$の固有値保存変形ではないが，固有値の変動は比較的単純で，連続系の拡張されたLax表示[18]，例えば，$dL/dt = [L, B] + L$，に対応する離散可積分系のLax表示と考えられる．また，ダブリングアルゴリズムをさらに加速することも可能で，例えば，漸化式

$$P_{3^{k+1}} = F^{2\cdot 3^k}P_{3^k}(F^\top)^{2\cdot 3^k} + F^{3^k}P_{3^k}(F^\top)^{3^k} + P_{3^k}.$$

は，3倍化アルゴリズムとでも呼ぶべきであろうか．これにより，

$$P_0 = 0 \to P_1 \to P_3 \to P_9 \to P_{27} \to \cdots \to P$$

なる数列が得られる．

つぎに定常Kalmanフィルターを考察する．上と同じ離散時間定常線形システムについて，雑音の共分散行列が$\mathrm{E}[\mathbf{w}_t\mathbf{w}_s^\top] = I\delta_{ts}$，$\mathrm{E}[\mathbf{w}_t\mathbf{v}_s^\top] = 0$，$\mathrm{E}[\mathbf{v}_t\mathbf{v}_s^\top] = R\delta_{ts}$で与えられ，さらに，状態ベクトル$\mathbf{x}_t$は$t+1$以降における雑音と無相関と仮定する．時刻0から$t$までの観測ベクトルの$\sigma$-集合体に基づいて時刻$t+1$における状態$\mathbf{x}_{t+1}$を推定する際，その最小分散推定値$\hat{\mathbf{x}}_{t+1/t}$はKalmanフィルター

$$\begin{aligned}
&\hat{\mathbf{x}}_{t+1/t} = F\left(I - P_tH^\top(HP_tH^\top + R)^{-1}H\right)\hat{\mathbf{x}}_{t/t-1} + FP_tH^\top(HP_tH^\top + R)^{-1}y_t,\\
&\hat{\mathbf{x}}_{0/-1} = \bar{\mathbf{x}}_0
\end{aligned}$$

により実現される．ここに，$P_t$は離散Riccati方程式

$$P_{t+1} = F\left(P_t - P_tH^\top(HP_tH^\top + R)^{-1}HP_t\right)F^\top + GG^\top, \qquad P_0 = P_0$$

の解である．十分時間の経過ののち$P_t$が代数Riccati方程式

$$P = F\left(P - PH^\top(HPH^\top + R)^{-1}HP\right)F^\top + GG^\top$$

の解$P$に収束する場合，$P_t$を$P$で置き換えた$\hat{\mathbf{x}}_{t+1/t}$を定常Kalmanフィルターという．形式的に$H=0$とすれば代数Riccati方程式はLyapunov方程式に帰着する．組$(F,G)$が可到達，$(H,F)$が可検出のとき代数Riccati方程式の正定値解$P$が一意に存在する[16].

離散Riccati方程式は1次分数変換により

$$\begin{aligned}
&P_{t+1} = (C + DP_t)(A + BP_t)^{-1},\\
&\quad A = F^\top, \quad B = (F^\top)^{-1}H^\top R^{-1}H,\\
&\quad C = GG^\top(F^\top)^{-1}, \quad D = F + GG^\top(F^\top)^{-1}H^\top R^{-1}H
\end{aligned}$$

と表される．明らかに，線形方程式

$$\begin{pmatrix} X_{t+1} \\ Y_{t+1} \end{pmatrix} = \Phi \begin{pmatrix} X_t \\ Y_t \end{pmatrix}, \qquad \Phi = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \qquad X_0 = I, \quad Y_0 = P_0$$

の解$X_t$，$Y_t$は，$X_t$が正則であれば，離散Riccati方程式の解を$P_t = Y_t {X_t}^{-1}$により与える．漸化式を繰り返し用いると$(X_{t+k}\ Y_{t+k})^{\top} = \Phi^k (X_t\ Y_t)^{\top}$だから，$P = Y_{\infty} {X_{\infty}}^{-1}$を求める問題は数列$\{\Phi^k\}$の極限の計算に焼き直される．これについてもダブリングアルゴリズムが知られている[15].

さて，行列$\Phi$は適当なユニタリ行列$U$により

$$U^* \Phi U = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & * \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_{2n} \end{pmatrix}, \qquad \lambda_j \neq 0$$

と上３角行列に変換できる．このとき，代数Riccati方程式の解は$U$の$(1,1)$ブロックと$(2,1)$ブロックを用いて

$$P = U_{21} {U_{11}}^{-1}$$

と表される[16]．従って，定常Kalmanフィルターの構成は行列$\Phi$の上３角化の問題に書き直される．このようなユニタリ行列$U$の存在は$\Phi$がシンプレクティックであること，$U_{11}$の正則性は代数Riccati方程式の正定値解の存在によりそれぞれ保証されている．

ここでは，行列の$QR$分解を利用して$U$を計算するアルゴリズムを提案する．まず，$\Phi_0 = \Phi$とかき

$$ {\Phi_0}^t = Q(t)R(t).$$

なる$QR$分解（ここでは$Q$はユニタリ行列）を行う．つぎに，

$$\Phi(t) = Q^*(t)\Phi_0 Q(t)$$

を導入する．明らかに，$\Phi_0 = Q(t)R(1)$，$\Phi(1) = R(1)Q(1)$．この$QR$アルゴリズムの手順を繰り返すことで数列

$$\begin{aligned} &\Phi_0 = \Phi \to \Phi(1) \to \Phi(2) \to \cdots \\ &\qquad \to \Phi(\infty) = (QQ'Q''\cdots)^* \Phi(0) QQ'Q'' \cdots = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & * \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_{2n} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

を得る．従って，$\Phi$を上３角化するユニタリ行列は$U = QQ'Q''\cdots$で与えられる． このアルゴリズムの連続極限はLax型方程式

$$\frac{d\Phi}{dt} = [\Phi, (\log \Phi_+)^* - \log \Phi_+], \qquad \Phi(0) = \Phi_0$$

である．

数列$\{\Phi(k)\}$の収束をつぎのように加速することができる．例えば，$QR$分解

$$\Phi_0{}^{3^t} = Q(t)R(t).$$

を考えよう．上と同様にして

$$\Phi_3(t) = Q^*(t)\Phi_0 Q(t)$$

とおけば，分解と因子$Q$と$R$の入れかえにより上3角行列に収束する数列 $\Phi_0 = \Phi \to \Phi_3(1) \to \Phi_3(2) \to \cdots$ を得る．連続極限が

$$\frac{d\Phi_3}{dt} = 3\left[\Phi_3, (\log\Phi_{3+})^* - \log\Phi_{3+}\right], \qquad \Phi_3(0) = \Phi_0$$

であることからも新しい数列の加速性は明らかであろう．

なお，連続時間定常線形システムも可積分系に基づいて様々な角度から研究されている．例えば，可制御可観測な定常線形システムの伝達関数空間の幾何学的な性質が完全積分可能な力学系の相空間として考察されている[19].

## §4　情報幾何と可積分系

情報幾何[20]とすぐれたアルゴリズムの関係を最初に指摘したのは田辺土谷両氏の解説[21]と思われる．そこでは，線形計画問題の内点アルゴリズムで用いられる中心平坦化変換が情報幾何における双対平坦な座標系へのLegendre変換の一例であることが述べられている．§1でKarmarkarの内点アルゴリズムと可積分系の関係に簡単に触れたが，一方では，情報幾何の典型的な対象である確率分布族のパラメータ空間上のある種の勾配系が完全積分可能なHamilton系となることが[22]で示されている．このように，アルゴリズムの設計と情報幾何，そして可積分系による応用解析は不可分な関係にあるといってよい．

ここではまず§3に登場したLyapunov方程式と情報幾何のかかわりを解説する．Lyapunov方程式

$$P = FPF^\top + GQG^\top$$

について，可到達な線形システムでは係数行列$F$の漸近安定性と正定値解$P$の存在は等価であった．そして，これは$P$を求めるアルゴリズム(§3)の収束性を意味する．変数変換$F = (I-A)^{-1}(I+A)$，$\sqrt{GQG^\top} = \sqrt{2}(I-A)^{-1}C$によりLyapunov方程式は

$$AP + PA^\top + CC^\top = 0$$

となる．正定値解の全体

$$\mathrm{PD}(n)=\{P|P:n\times n\text{正定値対称}\}$$

は小原[17]により双対接続をもつRiemann多様体となることが示されている．実際，$n\times n$対称行列の空間$\mathrm{Sym}(n)$の基底行列$E_i$を用いて$P=\sum_{i=1}^{N}\theta^i E_i$，$N=n(n+1)/2$と表したとき，$\theta=\{\theta^i\}$の双対座標$\eta=\{\eta_j\}$は単に$P$の逆行列をとることで$P^{-1}=\sum_{j=1}^{N}\eta_j E^j$により与えられる．また，$\mathrm{PD}(n)$のRiemann計量は$G_{ij}(P)=\mathrm{trace}(P^{-1}E_iP^{-1}E_j)$である．なお，この形のLyapunov方程式は，特別な場合，$n$段Runge-Kuttaスキームがシンプレクティックであるための十分条件となっている．

さて，Lyapunov方程式の正定値解$P$に対応して，$n\times n$歪対称行列$S$で

$$A=-\frac{1}{2}CC^\top P^{-1}+SP^{-1}$$

なるものが存在する．このような$S$の全体を$\mathrm{skew}(n)$とかくとき，[17]では漸近安定行列の全体$\mathrm{AS}(n)=\{A|A:n\times n\text{漸近安定}\}$は$\mathrm{PD}(n)\times\mathrm{skew}(n)$に微分同相であることが示されている．最近，Lyapunovの不等式

$$AP+PA^\top+CC^\top>0$$

などの線形行列不等式問題を解く内点アルゴリズム[23]の情報幾何による解釈もすすんでおり（小原氏の講演や[24]），すぐれたアルゴリズムの背後に双対構造があることが確かめられている．

本節の後半は，戸田分子型可積分系の$\tau$関数が

$$\mathrm{PD}(n)=\{P|P:n\times n\text{正定値対称}\}$$

の部分空間をなし，従って，双対構造をもつ$(2n-1)$-次元Riemann多様体とみなせることを示そう[25]．戸田分子型可積分系の$\tau$関数[25,26]は

$$\tau_n=\det M_n\qquad M_n=\begin{pmatrix} g & g_1 & \cdots & g_{n-1}\\ g_1 & g_2 & \cdots & g_n\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ g_{n-1} & g_n & \cdots & g_{2n-2}\end{pmatrix},\qquad \frac{dg_k}{dt}=g_{k+1}$$

と書かれる．$n\times n$Hankel行列の全体$\mathrm{Hank}(n)=\{M_n\}$は$\mathrm{PD}(n)$と対称行列の空間 $\mathrm{Sym}(n)$の交わりだから$\mathrm{Hank}(n)$に双対構造を導入することができる．まず，双対座標は$M_n$と$-{M_n}^{-1}$そ

のものだから，戸田分子方程式は座標系$M_n = \{g_k\}$（正確には$\nabla$-アフィン座標）により線形化されたことになる．Hank($n$)の双対ポテンシャルは

$$\psi(M_n) = -\log \det M_n, \qquad \phi(-M_n^{-1}) = -\log \det(M_n^{-1})$$

で与えられ，その$\{g_k\}$についてのHessianはHank($n$)のRiemann計量を定める．興味深いことに可積分系の計算に頻出する$\tau$関数の対数は双対ポテンシャルのひとつに一致している．また，ふたつのHankel行列$M_A$と$M_B$の擬距離を定める$\nabla$-ダイバージェンスは

$$D(M_A, M_B) = -\log \det M_A + \log \det M_B + \mathrm{trace}({M_A}^{-1} M_B) - n.$$

と表される．Hank($n$)は平均0共分散$M_n$なるある種の指数分布族のパラメータ空間と同一視できるが，この事実は，戸田分子方程式の$\tau$関数がmatrix modelsやlevel dynamicsなどに登場することと対応していると考えられる．

## §5　おわりに

なぜすぐれたアルゴリズムの背景に可積分系があるのであろうか．差分系の数学的理論が未整備なこともあって，実は，まだはっきりしたことはわかっていない．状況証拠や断片的な事実からの想像に過ぎないのだが，つぎのようなポイントがある．

1) 可積分構造を保つ差分化で得られたアルゴリズムは，離散力学系として十分な数の保存量をもち，解すなわちアルゴリズムの高い数値的安定性を保証しているのではないか．§1の離散Lax表示$M_{t+1} = {Q_t}^\top M_t Q_t$ではtrace$(M_t)^j$が保存されていることがわかる．
2) 可積分なHamilton系とは適当な正準変換で線形化可能な力学系で，非コンパクトな相空間をもつ場合，解は指数関数で表示される．これは平衡点への収束性が良いことを意味する．よいアルゴリズムも非コンパクト型であり，線形差分系に変換可能でその解は等比級数の和で書かれると考えられる．
3) 離散可積分系では，解に発散などが現れても特異点は有限領域に閉じ込められており，特異性は伝播せず，初期値の情報は失われないと考えられている（離散Painleve性）．これはアルゴリズムとしても良い性質ではないか．
4) 可積分な勾配系は一般に2重括弧のLax表示（§1）をもち，その差分化は種々の最適化問題の組み合せ論的な困難を回避したアルゴリズムとなりうる．さらに，勾配系のもつ漸近安定性もまたアルゴリズムの数値的安定性を保証している．

実際，$\varepsilon$-アルゴリズム（§2）だけでなく，Karmarkarアルゴリズムにおける射影変換や中心平坦化変換，情報幾何における双対平坦構造（§4）は背後にGrassmann多様体の存在を示唆

し，可積分系の登場する舞台設定と共通している．これは可積分系をなんらかの意味で線形構造のあるまがった空間の上での１−パラメータ変形の方程式とみればわかり易い．また，離散可積分系は正定値な行列あるいは行列式についての漸化式の形をとることが多い．これはアルゴリズムについても同様で，$\varepsilon$-アルゴリズム（§２）のように行列式の次数の差が加速の推進力になっていることもあれば，ダブリングアルゴリズム（§３）や種々の内点アルゴリズムのように，正定値性が収束性を保証することもある．要するに，従来よいアルゴリズムの設計の際には「可積分性」が意識されないながらも上手に使われてきたのではないか．

以上みてきたように，「可積分系による応用解析」は有効な方法論としてアルゴリズムの最前線に踊り出る一歩手前にいるとみなしてよい．今後は，それそれの分野の実際家との交流や共同研究活動がより重要になると思われる．SymesやKarmarkarの先駆的な研究を知って以来，何度も欧米の大学を訪ね「可積分系による応用解析」の視点について議論を挑んだが，可積分系の研究者は戸田分子方程式などの特殊性と片付け，$\tau$関数と差分可積分系について注意を払う人は少なかった．まして，情報幾何に関心をもつ人はまれであった．応用数学者は可積分系を知ろうとせず，日本以上に数学と応用数学の距離を感じたものである．$\tau$関数と情報幾何というお家芸に支えられて，この方法論は当分の間“made only in Japan”であり続けるだろう．

最近，Hankel行列の行列式で表される$\tau$関数（§４）の正定値性は対応するHamburgerのモーメント問題の解として単調非減少関数（Stieltjes測度）の存在を保証し，その結果，Stieltjes測度の変形を記述するMoser型可積分系はソーティング機能をもつことが明らかにされた[27]．これはさらに一般的な事実として認められ，２重括弧のLax型方程式や無分散可積分系による応用解析が可能になると予想される．また，Goppaによる符号化は互いに素な多項式のなす有理関数の部分分数展開として実現されるが，これも可積分系のLax表示と有理関数空間にかかわりが深い．このように，本来力学系とは無関係な問題に可積分系の方法論を持ち込むことも今後の有望な研究方向であろう．この意味で非線形力学系全般のinnovationをめざした「可積分系の応用解析」なる標語[26]ももはや窮屈になってしまった観がある．それに代るものとしてexact, explicit and closed formでの計算可能性を共通項に“*Integrable Sciences*”を提案したい．諸兄のご批判を仰ぎたい．

数列の加速法とその可積分系とのかかわり（§２）について梶原健司氏（同志社大）から多くの示唆を受けた．また，研究の進展にあたって，文部省科研費重点領域「無限可積分系」および同志社大学学術奨励研究費の援助を受けたことを付記する．

参考文献


[1] W.W. Symes; Physica 4D(1982), 275-280.

[2] J. Moser; Finitely many mass points on the line under the influence of an exponential potential – An integrable system, in: Dynamical Systems, Theory and Applications, Ed. J. Moser, Springer, Berlin, 1975, pp. 467-497.

[3] D.S. Watkins; SIAM Review 26(1984), 379-391.

[4] P. Deift, J. Demmel, L.-C. Li and C. Tomei; SIAM J. Numer. Anal. 28(1991), 1463-1516.

[5] D.S. Watkin and L. Elsner; SIAM J. Matrix Anal. Appl. 11(1990), 301-311.

[6] R. Hirota, S. Tsujimoto and T. Imai; Difference scheme of soliton equations, in: Future Directions of Nonlinear Dynamics in Physics and Biological Systems, Ed. P.I. Christiansen et al, Plenum, New York, 1993, pp. 7-15.

[7] Y. Nakamura; IMA J. Math. Control Inform. 6(1989), 347-358.

[8] Y. Nakamura; Japan. J. Indust. Appl. Math. 9(1992), 133-139.

[9] Y. Nakamura; Japan. J. Indust. Appl. Math. 11(1994), 1-9.

[10] 亀高惟倫; 数学セミナー 25(1986), no 1, 79-83; no 2, 58-62; no 3, 44-46; no 4, 45-48; no 5, 86-89.

[11] M. Arai, K. Okamoto and Y. Kametaka; Proc. Japan Acad., Ser. A 62(1986), 5-7; An additional formula for $\cot(x)$, Aitken-Steffensen acceleration and Cauchy matrix, J-Tokyo-Math 87-14, 1987.

[12] V. Papageorgiou, B. Grammaticos and A. Ramani; Phys. Lett A179(1993), 11-115.

[13] 伊理正夫; 数値計算ー方程式の解法, 朝倉書店, 1981.

[14] E.J. Davison and F.T. Man; IEEE Trans. Autom. Control 13(1968), 448-449.

[15] B.D.O. Anderson; Int. J. Control 28(1978), 295-306.

[16] 片山徹; 応用カルマンフィルタ, 朝倉書店, 1983.

[17] 小原敦美; 計測と制御, 32(1993), 486-494; Dual connections towards information geometry of stable state feedback systems, 数理解析研究所講究録, 822(1993), pp. 14-26.

[18] 例えば、O.I. Bogoyavlenskii, Russian Math. Surveys 45(1990), 1-86.

[19] Y. Nakamura; Trans. Amar. Math. Soc. 333(1992), 83-94.

[20] S. Amari; Differential-Geometrical Methods in Statistics, Lec. Notes in Statist. Vol. 28, Springer-Verlag, Berlin, 1985.

[21] 田辺国士, 土谷隆; 数理科学, No.303(1988), 32-37.

[22] Y. Nakamura; Japan. J. Indust. Appl. Math. 10(1993), 179-189; *ibid.* 11(1994), 21-30.

[23] S. Boyd and L.El Ghaoui; Lin. Alg. Appl. 188/189(1993), 63-111.

[24] 小原敦美; 数理科学, No.366(1993), 26-30.

[25] Y. Nakamura; A tau-function for the finite Toda molecule, and information spaces, to be published in: Symplectic Geometry and Quantization, Eds. Y. Maeda, H. Omori and A. Weinstein, Contemp. Math. Amar. Math. Soc., Providence.

[26] 中村佳正; 非線形可積分系の応用解析の新展開, 数理解析研究所講究録, 868(1994), pp. 223-242.
[27] Y. Nakamura and Y. Kodama; Moment problem of Hamburger, hierarchy of integrable systems, and the positivity of tau-functions, to be published in: Proceedings of KdV95, Kluwer Academic Publisher, Amsterdam.

（なかむら　よしまさ／〒610-03　京都府綴喜郡田辺町　同志社大学工学部）
e-mail: ynakamur@duaic.doshisha.ac.jp