

凸集合とエントロピー

塚田 真 (東邦大学・理)

1 序論

Euclid 空間 \mathbb{R}^m のベクトル a_1, \dots, a_n が与えられたとする。これ等には線形独立性も、また、 \mathbb{R}^m を生成することも仮定しない。勝手に $b \in \mathbb{R}^m$ が与えられたとき、

$$b \sim \sum_{i=1}^n x_i a_i$$

を満たす係数 $\{x_i\}_{i=1}^n$ を決定したい。ここで、 \sim は何らかの意味で最良であることを意味する。また、一般にこの係数は一意ではないが、そのうち何らかの意味で最適性を満たす唯一のものが欲しい。

\mathbb{R}^m のベクトルは列ベクトルであると考え、このとき、

$$A = [a_1 \ a_2 \ \dots \ a_n]$$

で与えられる (m, n) -型の行列 A を考えて、その Moore-Penrose の意味での一般化逆行列 ([5],[6]) を A^\dagger とする。

$$b' = AA^\dagger b$$

と定義すると、 b' は a_1, \dots, a_n が張る線形部分空間 V のベクトルで b の Euclid 距離に関する最良近似である。 b' を $\text{Proj}_V(b)$ で表す。即ち、

$$AA^\dagger b = \text{Proj}_V(b)$$

で、 Proj_V は V 上への直交射影に他ならない。 A^\dagger は (n, m) -型行列なので、列ベクトル $c_1, c_2, \dots, c_n \in \mathbb{R}^m$ を

$$A^\dagger = [c_1 \ c_2 \ \dots \ c_n]^\top$$

を満たすものとして、各 $i = 1, 2, \dots, n$ に対して

$$x_i = \langle c_i \mid b \rangle$$

とおく。 \cdot^\top は転置行列を意味し、 $\langle \cdot \mid \cdot \rangle$ は内積を表す。このようにして得られた x_1, x_2, \dots, x_n は、

$$U = \left\{ [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n]^\top \in \mathbb{R}^n \mid \text{Proj}_V(b) = \sum_{i=1}^n x_i a_i \right\}$$

の中で Euclid ノルム最小のものになっているという意味で、最適なものと言える。次の展開式が成立する。

$$\text{Proj}_V(b) = \sum_{i=1}^n \langle c_i \mid b \rangle a_i = \sum_{i=1}^n \langle a_i \mid b \rangle c_i$$

この展開は、Fourier 展開の一般化 (a_1, \dots, a_n が正規直交基底のとき) であり、また、 a_1, \dots, a_n が Riesz 基底の場合は c_1, \dots, c_n が双対 Riesz 基底になっている。ウェーブレット理論では、フレームによるウェーブレット展開と呼ばれるものである ([4],[8])。

この論文では最初の問題に更に制約条件を加えて考えてみたい。即ち、係数がすべて非負で

$$\sum_{i=1}^n x_i = 1$$

であるもの (凸係数、あるいは確率といってもよい) を見つけたい。近似の最良性を保ち、解空間の中での何らかの意味での最適性を満たす唯一のものであって欲しいことには変わりはない。

2 二者択一定理

A を (m, n) -型行列とし、 $b \in \mathbb{R}^m$ とする。このとき、以下の (1) と (2) はいずれも、いずれか一方のみが必ず成立するという意味で二者択一である:

- Farkas

- (1) $\exists x \in \mathbb{R}^n, Ax = b, x \geq 0,$
- (2) $\exists y \in \mathbb{R}^m, A^T y \geq 0, \langle b | y \rangle < 0;$

- Gale

- (1) $\exists x \in \mathbb{R}^n, Ax \leq b, x \geq 0,$
- (2) $\exists y \in \mathbb{R}^m, A^T y \geq 0, y \geq 0, \langle b | y \rangle < 0;$

- Gordan

- (1) $\exists x \in \mathbb{R}^n, Ax = 0, x \geq 0,$
- (2) $\exists y \in \mathbb{R}^m, A^T y < 0.$

(注意: $v = [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n]^T$ であるとき、 $v \geq 0$ はすべての i について $v_i \geq 0$ であることを、 $v > 0$ はすべての i について $v_i > 0$ であることを、そして $v \geq 0$ は $v \geq 0$ であるが $v \neq 0$ でないことを表す。)

これらの定理は「二者択一定理」とよばれ、この3つ以外にも数多くの二者択一定理が知られている ([7])。これらの殆どすべてがいわゆる「分離定理」と密接に結びついていて、線形計画法や凸計画法などにおける双対定理に応用される ([1],[2],[3],[5],[7])。

Gordan の二者択一定理は、 $a_1, a_2, \dots, a_n \in \mathbb{R}^m$ に対して

- (1) $\exists x \in \mathbb{S}_n, \sum_{i=1}^n x_i a_i = 0,$
- (2) $\exists y \in \mathbb{R}^m, \forall i = 1, 2, \dots, n, \langle a_i | y \rangle < 0,$

が二者択一であることを主張している。ここで、

$$\mathbb{S}_n = \left\{ x = [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n]^T \in \mathbb{R}^n \mid x \geq 0 \text{ and } \sum_{i=1}^n x_i = 1 \right\}$$

である。これはまた、 $a_1, a_2, \dots, a_n, b \in \mathbb{R}^m$ に対して

- (1) $\exists x \in \mathbb{S}_n, \sum_{i=1}^n x_i a_i = b,$

$$(2) \exists \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m, \forall i = 1, 2, \dots, n, \langle \mathbf{a}_i | \mathbf{y} \rangle < \langle \mathbf{b} | \mathbf{y} \rangle.$$

が二者択一であることと同値でもある。これは分離定理の特別な場合 (凸集合が多面体のとき) に他ならないが、[2] にこの定理の興味深い証明がある。その鍵となる補題は、 $f: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ が Gâteaux 微分可能で下に有界であるとき、任意の $\varepsilon > 0$ に対して $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ が存在して

$$\|\text{grad} f(\mathbf{x})\| < \varepsilon$$

となるという事実である。

$$f(\mathbf{x}) = \log \sum_{i=1}^n \exp \langle \mathbf{a}_i | \mathbf{x} \rangle - \langle \mathbf{b} | \mathbf{x} \rangle$$

とすると、次の3つの条件は互いに同値である。(2)の否定命題を考えれば、それは(1)と二者択一となり、Gordanの定理に他ならない。

$$(1) \exists \mathbf{x} \in \mathbb{S}_n, \sum_{i=1}^n x_i \mathbf{a}_i = \mathbf{b},$$

$$(2) \forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m, \exists i = 1, 2, \dots, n, \langle \mathbf{a}_i | \mathbf{y} \rangle \geq \langle \mathbf{b} | \mathbf{y} \rangle,$$

(3) f は下に有界である。

証明の本質的な部分は、(3)ならば(1)であるということを示すところにある。 f を下に有界とすると、鍵となる補題によって、 $\|\text{grad} f(\mathbf{v}_k)\| \rightarrow 0 (k \rightarrow \infty)$ となるベクトル列 $\{\mathbf{v}_k\}_{k=1}^{\infty}$ を見つけることができる。

$$\text{grad} f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n \frac{\exp \langle \mathbf{a}_i | \mathbf{x} \rangle}{\sum_{j=1}^n \exp \langle \mathbf{a}_j | \mathbf{x} \rangle} \mathbf{a}_i - \mathbf{b}$$

なので、

$$\sum_{i=1}^n \frac{\exp \langle \mathbf{a}_i | \mathbf{v}_k \rangle}{\sum_{j=1}^n \exp \langle \mathbf{a}_j | \mathbf{v}_k \rangle} \mathbf{a}_i \rightarrow \mathbf{b} \quad (k \rightarrow \infty)$$

である。

$$x_i^{(k)} = \frac{\exp \langle \mathbf{a}_i | \mathbf{v}_k \rangle}{\sum_{j=1}^n \exp \langle \mathbf{a}_j | \mathbf{v}_k \rangle}, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

として、

$$\mathbf{x}^{(k)} = [x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}]^T$$

とおく。 \mathbb{S}_n はコンパクトなので、部分列 $\{\mathbf{x}^{(k_i)}\}_{i=1}^{\infty}$ が存在して、それはある $\bar{\mathbf{x}} = [\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n]^T \in \mathbb{S}_n$ に収束する。このとき、

$$\sum_{i=1}^n \bar{x}_i \mathbf{a}_i = \mathbf{b}$$

なので、望みの結果を得る。

我々は、この証明から考えている問題の解を見つけるアルゴリズム (手続き) を導き出す。その前に、これで得られた解が何者であるかを明らかにしたい。

3 主要な結果

前節で得られたベクトル $\bar{x} = [\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n]^T$ は、統計物理学でよく知られた Gibbs 状態と呼ばれるものであり、最大エントロピー原理で特徴付けられる。 $x = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T \in S_n$ を $\sum_{i=1}^n x_i a_i = b$ を満たす任意のベクトルとする。このとき、

$$\begin{aligned}
 -\sum_{i=1}^n \bar{x}_i \log \bar{x}_i &= -\lim_{l \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n x_i^{(k_l)} \log x_i^{(k_l)} \\
 &= -\lim_{l \rightarrow \infty} \left(\left\langle \sum_{i=1}^n x_i^{(k_l)} a_i \mid v_{k_l} \right\rangle - \log \sum_{j=1}^n \exp \langle a_j \mid v_{k_l} \rangle \right) \\
 &= -\lim_{l \rightarrow \infty} \left(\langle b \mid v_{k_l} \rangle - \log \sum_{j=1}^n \exp \langle a_j \mid v_{k_l} \rangle \right) \\
 &= -\lim_{l \rightarrow \infty} \left(\left\langle \sum_{i=1}^n x_i a_i \mid v_{k_l} \right\rangle - \log \sum_{j=1}^n \exp \langle a_j \mid v_{k_l} \rangle \right) \\
 &= -\lim_{l \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n x_i \log \frac{\exp \langle a_i \mid v_{k_l} \rangle}{\sum_{j=1}^n \exp \langle a_j \mid v_{k_l} \rangle} \\
 &= -\lim_{l \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n x_i \log x_i^{(k_l)} \\
 &\geq -\sum_{i=1}^n x_i \log x_i
 \end{aligned}$$

が言える。即ち、 \bar{x} は $\sum_{i=1}^n x_i a_i = b$ を満たすベクトル $x = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T \in S_n$ のうち、エントロピーが最大のものである。エントロピーは S_n 上で狭義凹関数であるので、エントロピーを最大にするベクトルは唯一である。同様の論法で、ベクトル列 $\{x^{(k)}\}_{k=1}^{\infty}$ の任意の部分列 $\{x^{(k_l)}\}_{l=1}^{\infty}$ から \bar{x} に収束する部分列を取り出すことができるので、 $\{x^{(k)}\}_{k=1}^{\infty}$ 自身も \bar{x} に収束しなければならない。

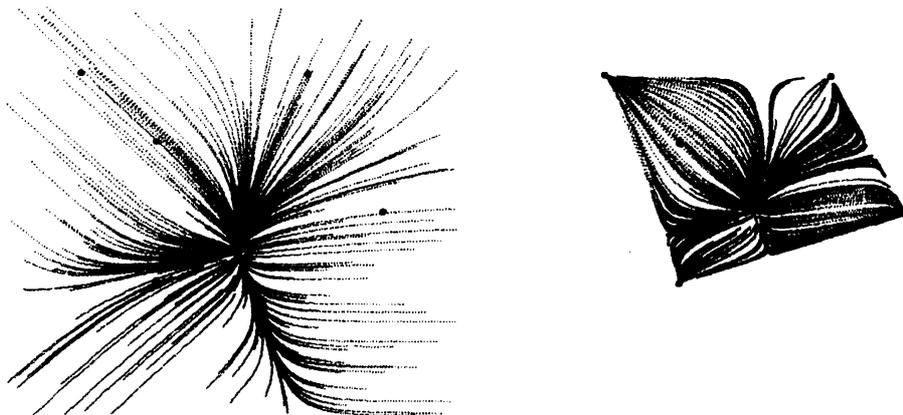


図 1: $v(t)$ の軌跡 (左図) と $w(t)$ の軌跡 (右図)

今、 $b \in \overline{\text{co}}\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ であるとして、任意の初期値 $v(0) = v_0 \in \mathbb{R}^m$ を定めて

$$\frac{d}{dt}v(t) = -\text{grad}f(v(t))$$

に従う力学系を考える。 $f(v(t))$ は t に関して非減少であり、前節の結果から下に有界であるので、 $\text{grad}f(v(t)) \rightarrow 0 (t \rightarrow \infty)$ でなければならない。従って、

$$w(t) = \sum_{i=1}^n \frac{\exp \langle a_i | v(t) \rangle a_i}{\sum_{j=1}^n \exp \langle a_j | v(t) \rangle} \rightarrow b \quad (t \rightarrow \infty)$$

であり、各 $i = 1, 2, \dots, n$ に対して

$$\frac{\exp \langle a_i | v(t) \rangle}{\sum_{j=1}^n \exp \langle a_j | v(t) \rangle} \rightarrow \bar{x}_i \quad (t \rightarrow \infty)$$

が言える。

$b \notin \overline{\text{co}}\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ の場合、上の力学系はどのような挙動を示すであろうか。

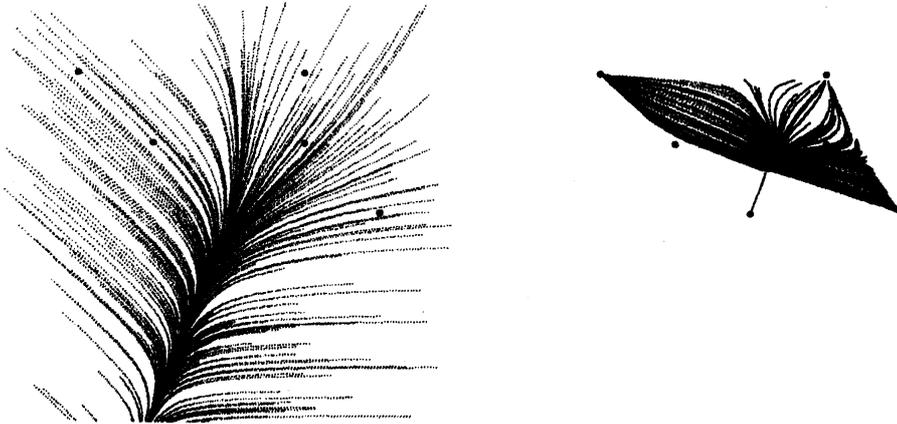


図 2: $v(t)$ の軌跡 (左図) と $w(t)$ の軌跡 (右図)

$b \in \mathbb{R}^m$ に対して、 $c \in C = \overline{\text{co}}\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ を、

$$\|b - c\| = \min_{a \in C} \|b - a\|.$$

を満たすベクトル c が唯一存在する。この c は、すべての $i = 1, 2, \dots, n$ に対して

$$\langle a_i - b | b - c \rangle \leq 0$$

を満たすベクトルとしても特徴付けられる。 c を $\text{Proj}_C(b)$ で表す。

定理 1 $w(t)$ は初期値によらず $\text{Proj}_C(b)$ に収束する。

証明 1 $\{a_{i_k}\}_k$ を、 $\langle a_{i_k} - c | b - c \rangle = 0$ を満たす a_{i_k} の全体とする。即ち、 $\{a_{i_k}\}_k$ は c における $b - c$ を法線ベクトルとする C の接平面上にあるものとする。

$$v(t) = u(t) + t(b - c)$$

とおく。このとき、

$$\frac{d}{dt}v(t) = \frac{d}{dt}u(t) + (b - c)$$

である。

$$\text{grad}f(v(t)) = \sum_{i=1}^n \frac{\exp\langle \mathbf{a}_i | v(t) \rangle}{\sum_{j=1}^n \exp\langle \mathbf{a}_j | v(t) \rangle} \mathbf{a}_i - c - (b - c),$$

なので

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}u(t) &= - \sum_{i=1}^n \frac{\exp\langle \mathbf{a}_i | v(t) \rangle}{\sum_{j=1}^n \exp\langle \mathbf{a}_j | v(t) \rangle} \mathbf{a}_i + c \\ &= - \sum_{i=1}^n \frac{\exp\langle \mathbf{a}_i | u(t) + t(b - c) \rangle}{\sum_{j=1}^n \exp\langle \mathbf{a}_j | u(t) + t(b - c) \rangle} \mathbf{a}_i + c \\ &= - \sum_{i=1}^n \frac{\exp\langle \mathbf{a}_i | u(t) \rangle \cdot \exp(t\langle \mathbf{a}_i - c | b - c \rangle)}{\sum_{j=1}^n \exp\langle \mathbf{a}_j | u(t) \rangle \cdot \exp(t\langle \mathbf{a}_j - c | b - c \rangle)} \mathbf{a}_i + c \end{aligned}$$

である。もし $\langle \mathbf{a}_i - c | b - c \rangle = 0$ であるならば、 $\exp(t\langle \mathbf{a}_i - c | b - c \rangle) = 1$ である。一方、 $\langle \mathbf{a}_i - c | b - c \rangle < 0$ であるならば、十分に大きな t に対して $\exp(t\langle \mathbf{a}_i - c | b - c \rangle)$ は殆ど 0 に等しい。従って、 $t \uparrow \infty$ において $u(t)$ は漸近的に

$$\frac{d}{dt}u(t) = - \sum_k \frac{\exp\langle \mathbf{a}_{i_k} | u(t) \rangle}{\sum_l \exp\langle \mathbf{a}_{i_l} | u(t) \rangle} \mathbf{a}_{i_k} + c$$

に従うであろう。 $c \in \overline{\text{co}}\{\mathbf{a}_{i_k}\}_k$ であつたのだから、この力学系は

$$\sum_k \frac{\exp\langle \mathbf{a}_{i_k} | u(t) \rangle}{\sum_l \exp\langle \mathbf{a}_{i_l} | u(t) \rangle} \mathbf{a}_{i_k} \rightarrow c \quad (t \uparrow \infty)$$

という振る舞いを示す。従って、

$$\sum_{i=1}^n \frac{\exp\langle \mathbf{a}_i | u(t) \rangle \cdot \exp(t\langle \mathbf{a}_i - c | b - c \rangle)}{\sum_{j=1}^n \exp\langle \mathbf{a}_j | u(t) \rangle \cdot \exp(t\langle \mathbf{a}_j - c | b - c \rangle)} \mathbf{a}_i \rightarrow c \quad (t \uparrow \infty)$$

であり、

$$\sum_{i=1}^n \frac{\exp\langle \mathbf{a}_i | v(t) \rangle}{\sum_{j=1}^n \exp\langle \mathbf{a}_j | v(t) \rangle} \mathbf{a}_i \rightarrow c \quad (t \uparrow \infty).$$

を得る。

上の定理は、 $Ax = b$ あるいは $\arg \min_{x \in C} \|Ax - b\|$ を満たす確率ベクトル x を見つけるための内点法ともとも言うべきアルゴリズム(手続き)を与えている。最後に、Euler法による微分方程式の数値的解法を用いた、このアルゴリズムの疑似 Numeric Python コードを挙げておく。

$$\begin{aligned} A &= [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n] \\ b &= b \end{aligned}$$

def X(v):

```
P = array([exp(innerproduct(a, v)) for a in A])
return P/sum(P)
```

```
def w(v) :  
    return sum ([x * a for (x, a) in zip(X(v), A)])  
  
def grad(v) :  
    return w(v) - b  
  
v = 0  
dt = small_positive_number  
  
while Stopping_Criterion :  
    v = v - grad(v) * dt
```

参考文献

- [1] L. D. Berkovitz, *Convexity and Optimization in \mathbb{R}^n* , Birkhäuser, 2002.
- [2] J. M. Borwein & A. S. Lewis, *Convex Analysis and Nonlinear Optimization*, Springer-Verlag, 2000.
- [3] S. Boyd & L. Vandenberghe, *Convex Optimization*, Cambridge, 2004.
- [4] L. Debnath, *Wavelet Transform & Thier Applications*, Willey-Interscience, 2002.
- [5] F. Deutsch, *Best Approximation in Inner Product Spaces*, Springer-Verlag, 2000.
- [6] A. Ben-Israel & T. N. E. Greville, *Generalized Inverse Theory and Applications*, Springer-Verlag, 2003.
- [7] W. H. Marlow, *Mathematics for Operations Research*, Dover, 1993.
- [8] D. F. Walnut, *Wavelet Analysis*, Birkhäuser, 2001.