

# 行列スケーリングの数理

平井広志

東京大学工学部 計数工学科 数理情報工学コース  
 東京大学大学院 情報理工学系研究科 数理情報学専攻

hirai@mist.i.u-tokyo.ac.jp

協力：池田基樹，坂部圭哉

## 1 行列スケーリング

$A = (A_{ij})$  を  $n \times n$  非負行列とする． $A$  は，ゼロ行，ゼロ列を含まないとする．正の対角要素を持つ対角行列  $X, Y$  を  $A$  の右と左からかけることを「 $A$  をスケーリングする」という．得られる行列  $A' = XAY$  を  $A$  のスケーリングと呼ぶことにする． $X, Y$  の対角要素  $X_{ii}, Y_{ii}$  を  $x_i, y_i$  とかくことにする． $x = (x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_n)^\top$ ,  $y = (y_1 \ y_2 \ \cdots \ y_n)^\top$  をスケーリングベクトルと呼ぶことにする．行列  $A' = XAY$  は，要素でかくと，

$$A'_{ij} = A_{ij}x_iy_j \quad (i, j = 1, 2, \dots, n)$$

とかける．

$n$  次元正ベクトル  $r, c$  に対して， $A$  の  $(r, c)$ -スケーリング  $A'$  とは， $A$  のスケーリング  $A' = XAY = (A_{ij}x_iy_j)$  であって，その行和ベクトルが  $r$ ，列和ベクトルが  $c$  となるものである．すなわち，

$$r = A'\mathbf{1}, \quad c = (A')^\top \mathbf{1}.$$

$\mathbf{1}$  はすべての要素が 1 のベクトルである．要素ごとにかくと

$$r_i = \sum_k A_{ik}x_iy_k, \quad c_j = \sum_k A_{kj}x_ky_j,$$

となる  $A$  のスケーリング  $A' = (A_{ij}x_iy_j)$  のことである．ここでは，次の問題を考える：

[( $r, c$ )-スケーリング問題] 与えられた  $A, r, c$  に対して， $A$  の  $(r, c)$ -スケーリング  $A'$  を求めたい．

$(r, c) = (\mathbf{1}, \mathbf{1})$  の場合が基本的である． $(\mathbf{1}, \mathbf{1})$ -スケーリング  $A'$  は，2重確率行列に他ならない．すなわち， $(\mathbf{1}, \mathbf{1})$ -スケーリング問題とは， $A$  の行と列を適当にスケーリングして 2重確率行列にできるか，という問題である．

例 1.  $n$  個の状態  $\{1, 2, \dots, n\}$  をもつマルコフ連鎖を考える．状態  $i$  から  $j$  への推移確率  $p_{ij}$  とし，推移確率行列を  $P = (p_{ij})$  とする． $P$  は確率行列であるが，ここでは，さらに 2重確率行列であるとしよう．

いま， $P$  は未知として，このマルコフ連鎖にしたがって，状態遷移を繰り返したとき，状態  $i$  から  $j$  への遷移が  $A_{ij}$  回起こったとする．この頻度行列  $A = (A_{ij})$  から， $P = (p_{ij})$  を推定するにはどうしたらよいか？

推移確率  $p_{ij}$  は，状態  $i$  からみると， $A_{ij}$  を  $i$  からの遷移の総数  $\sum_k A_{ik}$  で割ったものとして推定したくなる．状態  $j$  からみると， $p_{ij}$  は， $A_{ij}$  を  $j$  への遷移の総数  $\sum_k A_{kj}$  で割ったものにしたくなる．前者は，

行をスケールリングして行和ベクトルを  $\mathbf{1}$  にすることに対応し、後者は、列をスケールリングして列和ベクトルを  $\mathbf{1}$  にすることに対応する。ならば、この操作を交互に繰り返して 2 重確率行列になったら、それを推定値とするのがリーズナブルではないだろうか。特に、そのときはスケールリングベクトル  $x, y$  を用いて、 $(A_{ij}x_iy_j)$  が 2 重確率行列とできるということである。

**問題\* 1.** 行列スケールリングの他の応用を調べてまとめよ。統計分野だけでなく、オペレーションズ・リサーチや数値解析にも応用があるそうである。また、これから述べる Sinkhorn アルゴリズムは機械学習分野にもあらわれるそうである。

行列スケールリング問題は、 $((r, c) = (\mathbf{1}, \mathbf{1})$  の場合に) Sinkhorn [14] によって導入されたが、自然な問題であるのでそれ以前にも考えられてきたそうである (サーベイ [11] 参照)。Sinkhorn の論文では、 $A$  が正行列 (すべての要素が正) であれば、 $(\mathbf{1}, \mathbf{1})$ -スケールリング可能であることが示されている。

**定理 1.1** ([14]).  $A$  が正行列なら  $(\mathbf{1}, \mathbf{1})$ -スケールリング可能である。

では、いつもスケールリングできるのか、というと、そうでないことがすぐわかる。

**例 2.** 次の  $3 \times 3$  行列を考える :

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix}.$$

この行列は、 $(\mathbf{1}, \mathbf{1})$ -スケールリング不可能である。もしもできたとすると

$$A' = \begin{pmatrix} 1 & 1 & * \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

となっているはずだが、\* にどんな非負の値をいれても 1 行目の行和が 1 になることはない。3 列目の列和で考えても同様である。

スケールリングできなくとも「近似的にはできる」という状況もある。

**例 3.** 次の  $2 \times 2$  行列を考える :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

うえの例と同じ理由で  $(\mathbf{1}, \mathbf{1})$ -スケールリング不可能である。しかし、 $a > 0$  を正の値として次のようにスケールリングできる

$$A' = \begin{pmatrix} a^{-1} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2a^{-1} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

したがって、 $a$  を大きくとることで、いくらでも 2 重確率行列に近い  $A$  のスケールリングが得られる。なお、例 2 では、このように「いくらでも 2 重確率行列に近いスケールリングが存在する」という性質はもたないことに注意する。

これらを踏まえて、あらためてスケールリング可能性について定義をする。非負行列  $A$  が (厳密に)  $(r, c)$ -スケールリング可能であるとは、 $A$  の  $(r, c)$ -スケールリング  $A'$  が存在することである。すなわち、ある正対角行列  $X, Y$  が存在して、

$$r = (XAY)\mathbf{1}, \quad c = (XAY)^\top \mathbf{1} \tag{1.1}$$

とできることである。非負行列  $A$  が近似的に  $(r, c)$ -スケールリング可能であるとは、任意の  $\epsilon > 0$  に対して、ある正対角行列  $X, Y$  が存在して、

$$\|XAY\mathbf{1} - r\| < \epsilon, \quad \|(XAY)^\top \mathbf{1} - c\| < \epsilon \tag{1.2}$$

となることと定義する。ノルムは（なんでもよいが）ユークリッドノルムとする。

近似的に  $(r, c)$ -スケーリング可能であるための自明な必要条件として、 $r$  と  $c$  の総和が等しい、すなわち、

$$r^T \mathbf{1} = c^T \mathbf{1}$$

があることに注意する。(1.2) において  $\mathbf{1}^T X A Y \mathbf{1}$  が  $r^T \mathbf{1}$  にも  $c^T \mathbf{1}$  にも任意に近く出来るからである。

## 2 Sinkhorn のアルゴリズム

$A, r, c$  を行列スケーリング問題のインスタンスとする。総和条件

$$r^T \mathbf{1} = c^T \mathbf{1} := R \quad (2.1)$$

を仮定する。 $(r, c)$ -スケーリングは、(存在するとして) どのようにして求めればよいだろうか。すでに例 1 の中で示唆されているが、そのためのシンプルなアルゴリズムとして Sinkhorn のアルゴリズム [14] を紹介する。

行列スケーリング問題は、原理的には式 (1.1) を解けばよいのであるが、これは 2 次の非線形方程式であって、そのまま解くのは容易でない。しかし、 $Y$  を固定したとき、(1.1) の 1 つ目の式は、 $X$  について、容易に解くことができる：

$$r_i = x_i \sum_j A_{ij} y_j \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

なので、

$$x_i = r_i / \sum_j A_{ij} y_j \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (2.2)$$

である。同様に、(1.1) の 2 つ目の式において、 $X$  を固定すると、 $Y$  については、

$$y_j = c_j / \sum_i A_{ij} x_i \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (2.3)$$

と解ける。Sinkhorn のアルゴリズムは、 $Y$  を固定して、 $X$  を (2.2) のように決める。そして、今度は  $X$  を固定して、 $Y$  を (2.3) のように決める。これを繰り返すアルゴリズムである。

Sinkhorn のアルゴリズム ( $X, Y$  を更新)

- 0:  $x = y := \mathbf{1}$ .
- 1:  $x_i \leftarrow r_i / \sum_k A_{ik} y_k \quad (i = 1, 2, \dots, n)$ .
- 2:  $y_j \leftarrow c_j / \sum_k A_{kj} x_k \quad (j = 1, 2, \dots, n)$ .
- 3: ステップ 1 に戻る。

スケーリングベクトル  $x, y$  を更新するかわりに  $A$  を直接更新することにすれば次のようになる。

Sinkhorn のアルゴリズム ( $A$  を更新)

- 1:  $A_{ij} \leftarrow A_{ij} r_i / \sum_k A_{ik} \quad (i, j = 1, 2, \dots, n)$
- 2:  $A_{ij} \leftarrow A_{ij} c_j / \sum_k A_{kj} \quad (i, j = 1, 2, \dots, n)$
- 3: ステップ 1 に戻る。

つまり、行和ベクトルが目的の  $r$  になるように行をスケーリング—行正規化—と列和ベクトルが目的の  $c$  になるように列をスケーリング—列正規化—を繰り返すだけのアルゴリズムである。実際には、適当な精度パラメータ  $\epsilon > 0$  を考えて、ステップ 3 で十分  $(r, c)$ -スケーリングに (1.2) の意味で近づいたら終了する。ここ <https://hiyoko3m.github.io/matrix-scaling/> に Sinkhorn アルゴリズムの demo があるので試してみられたい。

問題\* 2. ソースコードは <https://github.com/hiyoko3m/matrix-scaling> からダウンロードできるので、このプログラムをいろいろと改良せよ。例：一般の  $(r, c)$  に対応させる、もっと見やすくする、等。

実は、Sinkhorn アルゴリズムは、 $A$  が近似的にスケール可能であれば  $(r, c)$ -スケールに収束する。この事実の背景にある数理を理解することが本演習の目標である。

## 2.1 凸最適化としての行列スケール問題

あまくだりではあるが、次の（非凸）最適化問題 P1 を考える。

$$\text{P1: Minimize } \frac{\left(\sum_{i,j} A_{ij}x_iy_j\right)^R}{x_1^{r_1}x_2^{r_2}\cdots x_n^{r_n}y_1^{c_1}y_2^{c_2}\cdots y_n^{c_n}} \quad \text{subject to } x_i > 0, y_i > 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n).$$

$R := c^\top \mathbf{1} = r^\top \mathbf{1}$  である。この問題の最適値は、 $A$  のキャパシティ (capacity) と呼ばれる量である。<sup>\*1</sup> 最適解が存在するとしたら、そこは停留点、すなわち、勾配がゼロになってなくてはならない。そこで目的関数  $F(x, y)$  の勾配を計算してみよう。補助的に  $g(x, y) := x_1^{r_1}x_2^{r_2}\cdots x_n^{r_n}y_1^{c_1}y_2^{c_2}\cdots y_n^{c_n}$ ,  $h(x, y) := \left(\sum_{i,j} A_{ij}x_iy_j\right)^R$  とおくと、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} g(x, y) &= \frac{r_i}{x_i} g(x, y), \\ \frac{\partial}{\partial x_i} h(x, y) &= \frac{R \sum_j A_{ij}y_j}{\sum_{i,j} A_{ij}x_iy_j} h(x, y) \end{aligned}$$

である。したがって、 $F = h/g$  なので

$$\frac{\partial}{\partial x_i} F(x, y) = \frac{g\partial_i h - h\partial_i g}{g^2} = F(x, y) \left( \frac{R \sum_j A_{ij}y_j}{\sum_{i,j} A_{ij}x_iy_j} - \frac{r_i}{x_i} \right).$$

同様に

$$\frac{\partial}{\partial y_j} F(x, y) = F(x, y) \left( \frac{R \sum_i A_{ij}x_i}{\sum_{i,j} A_{ij}x_iy_j} - \frac{c_j}{y_j} \right).$$

常に  $F(x, y) > 0$  が成り立つことに注意すると、 $F$  の勾配がゼロになる点  $(x, y)$  は、

$$\frac{R}{\sum_{i,j} A_{ij}x_iy_j} \sum_j A_{ij}x_iy_j = r_i \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (2.4)$$

$$\frac{R}{\sum_{i,j} A_{ij}x_iy_j} \sum_i A_{ij}x_iy_j = c_j \quad (j = 1, 2, \dots, n) \quad (2.5)$$

を満たす点に他ならない。今、 $(x, y)$  が  $A$  の  $(r, c)$ -スケールを与えるスケールベクトルなら、 $\sum_{i,j} A_{ij}x_iy_j = R$  に注意すれば、上の式 (2.4), (2.5) をみたら、すなわち、 $(x, y)$  は、P1 の停留点 (勾配がゼロの点) である。逆に、上の式を満たす  $(x, y)$  に対して、 $\tilde{x}, \tilde{y}$  を  $\tilde{x} := x\sqrt{R/\sum_{i,j} A_{ij}x_iy_j}$ ,  $\tilde{y} := y\sqrt{R/\sum_{i,j} A_{ij}x_iy_j}$  と定義すれば、 $(\tilde{x}, \tilde{y})$  は、 $A$  の  $(r, c)$ -スケールを与えるスケールベクトルとなる。<sup>\*2</sup> したがって、(厳密な)  $(r, c)$ -スケールを求めるには、P1 の停留点を求めればよいことになる。

実は、問題 P1 は凸最適化問題にすることができる。  $s, t \in \mathbb{R}^n$  に対して、

$$x_i = e^{s_i}, \quad y_i = e^{t_i} \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

<sup>\*1</sup> 厳密には対称キャパシティ (symmetric capacity) と呼ばれる。

<sup>\*2</sup> 問題 P1 の目的関数は、 $(x, y) \mapsto t(x, y)$  ( $t > 0$ ) の変換で不変であることに注意する。

と置き換える。さらに目的関数の  $\log$  をとる。すると問題 P1 は、次の問題と等価である。

$$\text{P2: Minimize } R \log \sum_{i,j} A_{ij} e^{s_i+t_j} - \sum_i r_i s_i - \sum_j c_j t_j \quad \text{subject to } s, t \in \mathbb{R}^n.$$

**補題 2.1.** 問題 P2 の目的関数は凸である。

**問題 3.** この補題を示せ。以下を示すことで見通しよく出来ると思う。

- 関数  $x \mapsto \log \sum_i e^{x_i}$  は凸である。
- 凸関数  $f: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$  とアフィン変換  $x \mapsto Bx + b \in \mathbb{R}^m$  に対して、 $x \mapsto f(Bx + b)$  も凸である。

特に、次がわかった。<sup>\*3</sup>

**命題 2.2.**  $A$  の  $(r, c)$ -スケーリング  $A' = (A_{ij} x_i y_j)$  に対して、スケーリングベクトル  $(x, y)$  は、問題 P1 の最適解である。逆に、問題 P1 の最適解  $(x, y)$  に対して、 $(\tilde{x}, \tilde{y}) = (x, y) \sqrt{R / \sum_{i,j} A_{ij} x_i y_j}$  は、 $A$  の  $(r, c)$ -スケーリングを与えるスケーリングベクトルとなる。

特に、以下は同値である。

- $A$  は、(厳密に)  $(r, c)$ -スケーリング可能である。
- 問題 P1 (または P2) に最適解が存在する。

近似的にスケーリング可能な場合の特徴付けは、3 節で扱う。

■**交互最適化としての Sinkhorn アルゴリズム** 行列スケーリング問題を P1 あるいは P2 を解く最適化問題とみなすとき、Sinkhorn アルゴリズムは、どのように解釈されるだろうか。次のようなアルゴリズムを考えよう。ここで  $F$  は、P1 の目的関数とする。

Sinkhorn のアルゴリズム (キャパシティ交互最適化)

- 0:  $(x, y) := (\mathbf{1}, \mathbf{1})$ .
- 1:  $y$  を固定したまま、 $x$  で  $F(x, y)$  を最小化する。
- 2:  $x$  を固定したまま、 $y$  で  $F(x, y)$  を最小化する。
- 3: 1 に戻る。

このように変数を 2 つの組に分けて交互に最適化を行う手法を交互最適化という。

**定理 2.3.** Sinkhorn アルゴリズムは上のアルゴリズムに一致する。

**証明.** なぜなら、 $y$  を固定したときの最小点は、 $x$  に関する偏微分がゼロとなる点で、それは (2.4) で決まる。 $x_i = r_i / \sum_j A_{ij} y_j$  とおいてやれば (2.4) を満たす。 $y$  に関しても同様である。□

■**エントロピー解釈** 興味深いことに Sinkhorn アルゴリズムは、P1 (または P2) とは異なる最適化問題に対する交互最適化ともみなすことができる。その説明のために、まずは KL ダイバージェンスを復習する。非負ベクトル  $p, q \in \mathbb{R}^m$  に対して、KL ダイバージェンス  $D_{\text{KL}}(p||q)$  を

$$D_{\text{KL}}(p||q) := \sum_{i=1}^n p_i \log p_i / q_i$$

と定義する。便宜上、 $0 \log 0 / x := 0$  ( $x \geq 0$ )、 $x \log x / 0 := \infty$  ( $x > 0$ ) と約束する。

<sup>\*3</sup> P1 の停留点は、上の変換で P2 の停留点 (最適解) になることに注意する。それは  $\frac{d}{dt} \log f(e^t) = f'(e^t) e^t / f(e^t)$  からわかる。

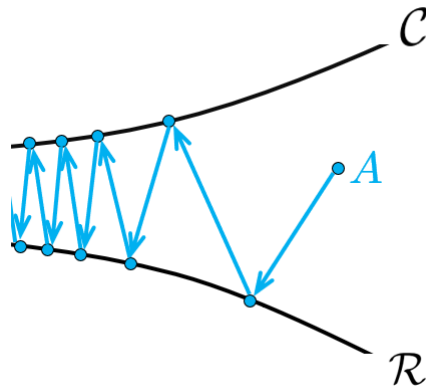


図 1: KL ダイバージェンス交互最適化

問題 4. 総和が等しい非ゼロな非負ベクトル  $p, q \in \mathbb{R}^m$  に対して以下を示せ :

- (1)  $D_{\text{KL}}(p||q) \geq 0$ .
- (2)  $D_{\text{KL}}(p||q) = 0 \Leftrightarrow p = q$ .

KL ダイバージェンスは距離関数に似ているが, 対称ではなく 3 角不等式も満たさない.  $l_1$  距離に対しては, Pinsker の不等式と呼ばれる次の関係式が成り立つ :

Pinsker の不等式:  $p, q \in \mathbb{R}^m$  は総和が等しいゼロでない非負ベクトルとすると

$$D_{\text{KL}}(p||q) \geq \frac{1}{2 \sum_i p_i} \|p - q\|_1^2$$

が成り立つ.

問題 5. Pinsker の不等式を示せ.

$A, r, c$  を  $(r, c)$ -スケーリング問題のインスタンスとする. 行列の空間  $\mathcal{M}, \mathcal{R}, \mathcal{C}$  を次のように定義する :

$$\begin{aligned} \mathcal{M} &:= \{M \in \mathbb{R}^{n \times n} \mid M_{ij} = 0 \ (i, j : A_{ij} = 0), M_{ij} \geq 0 \ (i, j : A_{ij} > 0)\}, \\ \mathcal{R} &:= \{M \in \mathcal{M} \mid M\mathbf{1} = r\}, \\ \mathcal{C} &:= \{M \in \mathcal{M} \mid M^T\mathbf{1} = c\}. \end{aligned}$$

$\mathcal{M}$  は, 非ゼロサポートが  $A$  の非ゼロサポートの部分集合となる行列の集合である.  $\mathcal{R}$  は,  $\mathcal{M}$  のなかで行和ベクトルが  $r$  に一致する行列の集合で,  $\mathcal{C}$  は,  $\mathcal{M}$  のなかで列和ベクトルが  $c$  に一致する行列の集合である.

$\mathcal{R}$  と  $\mathcal{C}$  の間で, もっとも KL ダイバージェンスが小さくなる点対  $(M^*, N^*)$  を求める問題を考えよう.

$$\text{P3: Minimize } D_{\text{KL}}(M||N) \text{ subject to } M \in \mathcal{R}, N \in \mathcal{C}.$$

ここで,

$$D_{\text{KL}}(M||N) := \sum_{i,j} M_{ij} \log \frac{M_{ij}}{N_{ij}}$$

である. もしも,  $A$  が  $(r, c)$ -スケーリング可能であるとすると  $\mathcal{R} \cap \mathcal{C} \neq \emptyset$  なので最適値はゼロである.  $\mathcal{R} \cap \mathcal{C} \neq \emptyset$  と近似的スケーリング可能性は同値であることを後で見る.

$A$  を初期点として次の交互最適化アルゴリズムを考える (図 1).

Sinkhorn のアルゴリズム (KL ダイバージェンス交互最適化)

- 0:  $N \leftarrow A$
- 1:  $N$  を固定したまま  $D_{\text{KL}}(M\|N)$  を  $M \in \mathcal{R}$  で最小化する.
- 2:  $M$  を固定したまま  $D_{\text{KL}}(M\|N)$  を  $N \in \mathcal{C}$  で最小化する.
- 3: ステップ 1 に戻る.

定理 2.4. Sinkhorn アルゴリズムはうえのアルゴリズムに一致する.

実際, ステップ 1,2 で,  $N$  と  $M$  は次のように更新される.

$$M_{ij} \leftarrow N_{ij} r_i / \sum_j N_{ij},$$

$$N_{ij} \leftarrow M_{ij} c_j / \sum_i M_{ij}.$$

問題 6. これを示せ.

定理 2.5 ([3]). うえのアルゴリズムで  $(N, M)$  は,  $\mathcal{R}$  と  $\mathcal{C}$  の間の KL ダイバージェンスの最小値を達成する点対  $(M^*, N^*)$  に収束する.

系 2.6. Sinkhorn アルゴリズムが収束しないときは, 極限において  $A$  は  $M^*$  と  $N^*$  の間を振動する.

収束先  $(M^*, N^*)$  は, ブロック対角行列になり, それは行列の DM 分解 (の一般化) を用いて記述される [8].

定理 2.7 ([2]).  $\mathcal{R} \cap \mathcal{C} \neq \emptyset$  のとき, Sinkhorn アルゴリズムによって  $A$  は  $A^* := M^* = N^* \in \mathcal{R} \cap \mathcal{C}$  に収束する. 収束先  $A^*$  は,  $\mathcal{R} \cap \mathcal{C}$  のなかで  $A$  との KL ダイバージェンス  $D_{\text{KL}}(\cdot\|A)$  を最小化する.

定理 2.5, 2.7 は, 情報幾何学創成期の重要な結果と位置付けられるようである.

問題\* 7. 行列スケーリング・Sinkhorn アルゴリズムの情報幾何学的解釈・背景について調べよ.

特に,  $\mathcal{R} \cap \mathcal{C} \neq \emptyset$  のときは, Sinkhorn アルゴリズムは,

$$\text{P4: Minimize } D_{\text{KL}}(M\|A) \text{ subject to } M \in \mathcal{R} \cap \mathcal{C}.$$

を解いている. 問題 P4 は P1 の双対問題とみなせる.

定理 2.8. P4 の最適値  $= -\log(\text{P1 の最適値}) + R \log R$ .

問題 8. この定理を以下にしたがって示せ.

- P4 のラグランジュ双対問題は,

$$\text{Maximize } - \sum_{i,j} A_{ij} e^{u_i + v_j} + \sum_i r_i u_i + \sum_j c_j v_j + R \text{ subject to } u, v \in \mathbb{R}^n$$

となることを示す.

- この問題において,  $x_i = e^{u_i}$ ,  $y_i = e^{v_i}$  と変数をおきかえ, さらに  $x, y$  を  $tx, ty$  ( $t > 0$ ) とおきかえ,  $t > 0$  に関して最大化する.

### 3 近似的スケーリング可能性の特徴付け

定理 3.1 ([13, 15]). 以下は同値である.

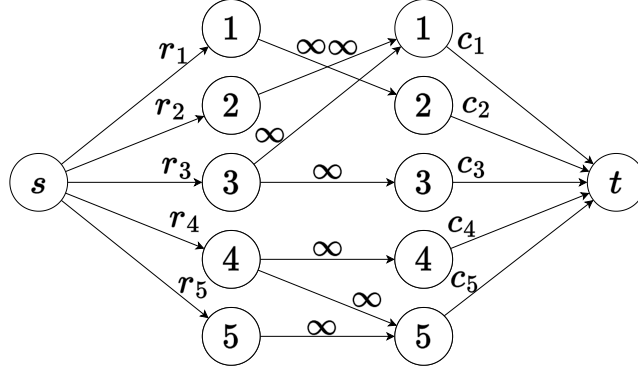


図 2: 有向ネットワーク  $\vec{G}_A$  の構成

(a)  $A$  は近似的に  $(r, c)$ -スケーリング可能である.

(b) 
$$\inf_{x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n > 0} \frac{\left(\sum_{i,j} A_{ij} x_i y_j\right)^R}{x_1^{r_1} \cdots x_n^{r_n} y_1^{c_1} \cdots y_n^{c_n}} > 0.$$

(c)  $A_{ij} = 0$  ( $\forall i \in X, \forall j \in Y$ ) となる任意の部分集合  $X, Y \subseteq \{1, 2, \dots, n\}$  に対して,

$$\sum_{i \in X} r_i + \sum_{j \in Y} c_j \leq R$$

が成り立つ.

(d) Sinkhorn アルゴリズムによって  $A$  は収束する.

(a), (b), (c) の同値性を一般的に与えたのは, Rothblum, Schneider [13] で, Sinkhorn アルゴリズムの収束性との関係は, 実質的に Sinkhorn, Knopp [15] にある. 証明は次節以降で行う.

条件 (b) は, 最適化問題 P2 の観点からは,

(b') 最適化問題 P2 は有界である. すなわち,

$$\inf_{s, t \in \mathbb{R}^n} R \log \sum_{i,j} A_{ij} e^{s_i + t_j} - \sum_i r_i s_i - \sum_j c_j t_j > -\infty.$$

とかける. つまり, この特徴付けから, 厳密スケーリング可能と近似的スケーリング可能の差は, 最適化問題 P2 において, 最適解が存在する, と (最適解は存在しないかもしれないが) いくらでも  $\inf$  に近い解が存在するの差であることがわかる.

条件 (c) によって近似的  $(r, c)$ -スケーリング可能性は,  $A$  の非ゼロパターンの情報と  $r, c$  のみによって決まることがわかる. さらに, 条件 (c) はネットワークフローによって効率的に判定することができる.  $A$  の非ゼロパターンを表す 2 部グラフ  $G_A = (U \sqcup V, E_A)$  を  $U = V := \{1, 2, \dots, n\}$ ,  $E_A := \{ij \mid i \in U, j \in V : A_{ij} > 0\}$  と定義する.  $G_A$  から有向ネットワーク  $\vec{G}_A$  を以下のように構成する: ソース  $s$  を追加して,  $U$  の各頂点  $i$  へ容量  $r_i$  の有向枝  $(s, i)$  を与える. シンク  $t$  を追加して,  $V$  の各頂点  $j$  からの容量  $c_j$  の有向枝  $(j, t)$  を与える. 枝  $ij (i \in U, j \in V)$  を  $i$  から  $j$  への有向枝  $(i, j)$  におきかえ, 容量を  $\infty$  と定義する (図 2). そのネットワーク  $\vec{G}_A$  において最大  $(s, t)$  フロー問題を考える. すると条件 (c) は以下の条件と同値となる:

(c') ネットワーク  $\vec{G}_A$  において, 最大フローの流量は  $R$  (以上) である.

また, 前節の  $\mathcal{R}, \mathcal{C}$  を用いて,



(c'')  $\mathcal{R} \cap \mathcal{C} \neq \emptyset$ .

と書くこともできる.

**問題 9.** 最大フロー最小カット定理を用いて (c), (c'), (c'') の同値性を示せ.

近似的な  $(r, c)$ -スケーリングを求めたいときは, まずネットワークフローで近似的スケーリング可能性を判定したのち, 最適化問題 P1 あるいは P2 を解くことになる.

**注意 3.2.** 最大フロー, あるいは,  $\mathcal{R} \cap \mathcal{C}$  の点を求めたからといってスケーリングベクトルがもとまるわけではない.

(1, 1)-スケーリングのときは, 条件 (c) は,

(c<sub>1,1</sub>) すべての  $X \subseteq U$  に対して,  $|X| \leq |\{j \in V \mid ij \in E\}|$  が成り立つ.

とかける. Hall の結婚定理より, この条件は  $G_A$  に完全マッチングが存在することと同値である:

**定理 3.3.** 以下は同値である.

- $A$  は近似的に (1, 1)-スケーリング可能である
- $G_A$  に完全マッチングが存在する.
- Sinkhorn アルゴリズムによって  $A$  は収束する.

収束性という「解析的性質」が完全マッチングという「組合せ的性質」によって特徴付けられるのは興味深い.

### 3.1 定理 3.1 (b) $\Rightarrow$ (d) $\Rightarrow$ (a) の証明

$(x, y)$  を, Sinkhorn アルゴリズムのある反復の最初の時点のスケーリングベクトルとする.  $x'$  をステップ 1 で更新されたベクトル,  $y'$  をステップ 2 で更新されたベクトルとする.  $p$  を反復の最初の時点での  $(A_{ij}x_iy_j)$  の行和ベクトルとする:

$$p_i = \sum_j A_{ij}x_iy_j.$$

$q$  をステップ 1 後の  $(A_{ij}x'_iy_j)$  の列和ベクトル

$$q_j = \sum_i A_{ij}x'_iy_j.$$

とすると,

$$x'_i = \frac{r_i}{p_i}x_i, \quad y'_j = \frac{c_j}{q_j}y_j$$

が成り立つ.

Sinkhorn アルゴリズムによって,  $(x, y)$  が収束, あるいは,  $A$  が収束したとする. それは,  $r_i/p_i$  と  $c_j/q_j$  が 1 に収束した, ということである. すなわち,  $(A_{ij}x_iy_j)$  の行和ベクトルが  $r$  に, 列和ベクトルが  $c$  に収束するという他に他ならない. つまり, 行和ベクトルが  $r$ , 列和ベクトルが  $c$  にいくらかでも近い  $A$  のスケーリングの存在をいっていることになる. よって, (d)  $\Rightarrow$  (a) が言えた.

次に, (b)  $\Rightarrow$  (d) を示す. 2 反復目以降の最初の時点の  $(x, y)$  は, 列正規化されていることに注意する:

$$\sum_i A_{ij}x_iy_j = c_j$$

したがって,

$$\sum_{i,j} A_{ij} x_i y_j = R$$

が成り立つ.

それを踏まえて, 2 反復目以降, うえの記法で  $(x, y) \rightarrow (x', y) \rightarrow (x', y')$  と更新されるとき P1 の目的関数  $F$  の変化量を調べる.

$$\begin{aligned} F(x', y) &= \frac{\left(\sum_{i,j} A_{ij} (r_i x_i / p_i) y_j\right)^R}{(r_1 x_1 / p_1)^{r_1} (r_2 x_2 / p_2)^{r_2} \dots (r_n x_n / p_n)^{r_n} y_1^{c_1} \dots y_n^{c_n}} \\ &= \frac{1}{(r_1 / p_1)^{r_1} \dots (r_n / p_n)^{r_n}} \frac{\left(\sum_i r_i\right)^R}{x_1^{r_1} \dots x_n^{r_n} y_1^{c_1} \dots y_n^{c_n}} \\ &= \frac{F(x, y)}{(r_1 / p_1)^{r_1} \dots (r_n / p_n)^{r_n}}. \end{aligned}$$

ここで,  $\sum_i r_i = \sum_i c_i = R$  に注意する. 同様な計算で,

$$F(x', y') = \frac{F(x', y)}{(c_1 / q_1)^{c_1} \dots (c_n / q_n)^{c_n}}.$$

である (2 反復目以降は  $F$  の分子は常に一定  $R^R$  である). ここで,  $\log(r_1 / p_1)^{r_1} \dots (r_n / p_n)^{r_n} = \sum_i r_i \log r_i / p_i$  に注意すると, 1 反復における目的関数の変化は, KL ダイバージェンス  $D_{\text{KL}}$  を用いて,

$$F(x', y') = e^{-D_{\text{KL}}(r \| p) - D_{\text{KL}}(c \| q)} F(x, y)$$

とかける. したがって,  $k+1$  反復開始時の  $(x, y)$  を  $(x^k, y^k)$ , その反復での  $(p, q)$  を  $(p^k, q^k)$  と書くと,

$$F(x^N, y^N) = e^{-\sum_{k=1}^{N-1} D_{\text{KL}}(r \| p^k) + D_{\text{KL}}(c \| q^k)} F(x^1, y^1) \quad (N \geq 2).$$

が成り立つ. もしも,  $\inf_{x, y > 0} F(x, y) > 0$  だとすると, 指数の肩の項

$$\sum_{k=1}^{N-1} D_{\text{KL}}(r \| p^k) + D_{\text{KL}}(c \| q^k)$$

は,  $N \rightarrow \infty$  で定数に収束しなければならない. つまり,  $D_{\text{KL}}(r \| p^k)$ ,  $D_{\text{KL}}(c \| q^k)$  はともにゼロに収束する. Pinsker の不等式より,  $p^k$  は  $r$  に,  $q^k$  は  $c$  に収束する. よって,  $(x^k, y^k)$  は収束する. これで (b)  $\Rightarrow$  (d) が言えた.

### 3.2 定理 3.1 (a) $\Leftrightarrow$ (b) $\Leftrightarrow$ (c) の証明: 凸解析の視点から

(a), (b), (c) の同値性は, 凸解析の立場から見ると見通しがよいと思う.  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$  を凸関数とする.  $f$  の Legendre-Fenchel 共役関数  $f^*: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$  は,

$$f^*(p) := \sup\{\langle p, x \rangle - f(x) \mid x \in \mathbb{R}^n\} \quad (p \in \mathbb{R}^n) \quad (3.1)$$

と定義される. P2 の最適値は  $(s, t) \mapsto R \log \sum_{i,j} A_{ij} e^{s_i + t_j}$  の共役関数の  $(r, c)$  での値にマイナスをかけたものである. 特に, 条件 (b) は「 $(r, c)$  において共役関数が有限値をとる」と読める. そこで, 共役関数  $f^*$  が有限値をとる領域 ( $f^*$  のドメイン)

$$\text{dom } f^* := \{p \in \mathbb{R}^n \mid f^*(p) < \infty\}.$$

を調べる. そのために関数  $f^\infty: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$  を

$$f^\infty(u) := \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{f(x + ut) - f(x)}{t} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{f(x + ut)}{t} \quad (u \in \mathbb{R}^n). \quad (3.2)$$

と定義する.  $f^\infty(u)$  は  $u$  方向へ進むときの  $f$  の傾きの極限を表していて,  $f^\infty$  は  $f$  の後退関数と呼ばれるものである. 後退関数  $f^\infty$  は, 正斉次であること

$$f^\infty(\lambda u) = \lambda f^\infty(u) \quad (\lambda \geq 0, u \in \mathbb{R}^n)$$

に注意する.

**補題 3.4.** (1)  $f^\infty$  は  $x$  によらない.

$$(2) f^\infty(u) = \sup_{t>0} \frac{f(x+ut)-f(x)}{t}.$$

(3)  $f$  が下半連続なら  $f^\infty$  も下半連続である.

(4)  $f^\infty$  は正斉次な凸関数, すなわち,

$$f^\infty(u) + f^\infty(v) \geq f^\infty(u+v) \quad (u, v \in \mathbb{R}^n)$$

である.

(2) によって, (3.2) は確かに有限値か無限大に収束することがわかる.

**証明.** (1).  $x$  とは異なる  $y \in \mathbb{R}^n$  を考える. 以下を示せば十分である:

$$\frac{f(y+ut) - f(y)}{t} \leq f^\infty(u) \quad (t > 0). \quad (3.3)$$

正斉次性から,  $\|u\| = 1$  の場合を考えればよい.

$t > 0$  を任意に固定する.  $s > 0$  に対して,  $x_s := x + su$  とおく. このとき,  $z_t^s := y + t(x_s - y)/\|x_s - y\|$  ( $y$  と  $x_s$  を結ぶ直線上で  $y$  から距離  $t$  の点) は,  $s \rightarrow \infty$  の極限で,  $y + tu$  に収束する. 実際,

$$z_t^s = y + t \frac{u + (x - y)/s}{\|u + (x - y)/s\|} \rightarrow y + tu$$

である. したがって, 任意の  $\epsilon > 0$  に対して, 十分大きな任意の  $s$  では,

$$f(y + ut) < f(z_t^s) + \epsilon$$

がなりたつ. さらに,  $t \leq \|x_s - y\|$  となるとしてよく, 直線  $[y, x_s](\ni z_t^s)$  にそって  $f$  の凸性を考えると

$$f(z_t^s) - f(y) \leq \frac{t}{\|x_s - y\|} (f(x_s) - f(y)).$$

うえの2つの式を組み合わせると

$$f(y + ut) - f(y) < f(z_t^s) - f(y) + \epsilon \leq \frac{t}{\|x_s - y\|} (f(x_s) - f(y)) + \epsilon$$

3角不等式  $\|y - x_s\| \geq s - \|x - y\|$  をつかって, 全体を  $t$  で割ると

$$\frac{f(y + ut) - f(y)}{t} < \frac{s}{s - \|x - y\|} \frac{f(x + su) - f(y)}{s} + \frac{\epsilon}{t}$$

$s \rightarrow \infty$  とすると

$$\frac{f(y + ut) - f(y)}{t} < f^\infty(u) + \frac{\epsilon}{t}$$

$\epsilon > 0$  は任意であったので所望の式 (3.3) を得る. □

**問題 10.** 残りの (2), (3), (4) を証明せよ.

後退関数  $f^\infty$  に対して, 部分集合  $B(f^\infty) \subseteq \mathbb{R}^n$  を

$$B(f^\infty) := \{p \in \mathbb{R}^n \mid \langle u, p \rangle \leq f^\infty(u) \ (\forall u \in \mathbb{R}^n)\}$$

と定義する.  $B(f^\infty)$  は  $f^\infty$  の共役関数と実質的に等価である.

**問題 11.** 正斉次凸関数  $h$  に対して,  $B(h)$  を

$$B(h) := \{p \in \mathbb{R}^n \mid \langle u, p \rangle \leq h(u) \ (\forall u \in \mathbb{R}^n)\}$$

と定義する. このとき,  $h$  の共役関数  $h^*$  は,

$$h^*(p) = \begin{cases} 0 & \text{if } p \in B(h), \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.4)$$

となることを示せ.

ここから,  $f$  を全域  $\mathbb{R}^n$  で定義された滑らかな凸関数とする.  $f$  の勾配をとる操作  $x \mapsto \nabla f(x)$  を写像  $\nabla f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  とみる (勾配写像と呼ばれる). 我々にとって重要なのは, 以下の3つの集合

- $f$  の勾配写像の像  $\nabla f(\mathbb{R}^n)$ ,
- $f$  の共役関数  $f^*$  のドメイン  $\text{dom } f^*$ ,
- $f$  の後退関数  $f^\infty$  の共役関数のドメイン  $B(f^\infty)$

の関係である.

**補題 3.5.**  $\nabla f(\mathbb{R}^n) \subseteq \text{dom } f^* \subseteq B(f^\infty)$ .

**証明.** ( $\nabla f(\mathbb{R}^n) \subseteq \text{dom } f^*$  の証明)  $p = \nabla f(y) \in \nabla f(\mathbb{R}^n)$  だとすると,  $\nabla(\langle p, y \rangle - f(y)) = 0$ . つまり,  $y$  は,  $\sup_x \langle p, x \rangle - f(x)$  の最大値を与える点である. したがって,  $f^*(p) = \langle p, y \rangle - f(y) < \infty$ . つまり,  $p \in \text{dom } f^*$ .

( $\text{dom } f^* \subseteq B(f^\infty)$  の証明)  $p \notin B(f^\infty)$  とする. すると, ある非ゼロベクトル  $u \in \mathbb{R}^n$  があって,

$$f^\infty(u) < \langle u, p \rangle$$

したがって, 補題 3.4 (2) より,

$$\frac{f(x+tu) - f(x)}{t} \leq f^\infty(u) = \langle u, p \rangle - (\langle u, p \rangle - f^\infty(u)) \quad (\forall t > 0).$$

整理すると

$$f(x+tu) - \langle p, x+tu \rangle \leq -(\langle u, p \rangle - f^\infty(u))t + f(x) - \langle p, x \rangle.$$

$t \rightarrow \infty$  とすると両辺は  $-\infty$ . よって  $\inf_x f(x) - \langle p, x \rangle = -\infty$ . これは,  $p \notin \text{dom } f^*$  を意味する.  $\square$

3つの集合は, ほとんど等しい. すなわち, 閉包  $\overline{(\cdot)}$  をとると等しい.

**定理 3.6.**  $\overline{\nabla f(\mathbb{R}^n)} = \overline{\text{dom } f^*} = B(f^\infty)$ .

$B(f^\infty)$  は閉集合であることに注意する (閉半空間の交わりだから). 証明は後にまわして, この定理を用いて, 定理 3.1 の (a), (b), (c) の同値性を示す. まず,  $f_A: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  を

$$f_A(s, t) := R \log \sum_{i,j} A_{ij} e^{s_i + t_j} \quad (s, t \in \mathbb{R}^n)$$

と定義する. すると 2.1 節でやったような計算によって,  $f_A$  の  $(s, t)$  における勾配は,  $x_i = e^{s_i}, y_j = e^{t_j}$  とおいて

$$\nabla f_A(s, t) = \frac{R}{\sum_{i,j} A_{ij} x_i y_j} ((A_{ij} x_i y_j) \text{ の行和ベクトル, 列和ベクトルを並べたもの})$$

となる。このことから、近似的  $(r, c)$ -スケーリング可能性は、勾配ベクトル  $\nabla f_A(s, t)$  がいくらかでも  $(r, c)$  に近いものが存在することと同値となる：

$$(a) \Leftrightarrow (r, c) \in \overline{\nabla f_A(\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n)}.$$

うえに述べたように、条件 (b) は、共役関数  $f_A^*$  の  $(r, c)$  における有界性に対応している：

$$(b) \Leftrightarrow (r, c) \in \text{dom } f_A^*.$$

そして、条件 (c) は、 $(r, c) \in B(f_A^\infty)$  に対応しているのであるが<sup>5</sup>、それを見るため、後退関数  $f_A^\infty$  を計算してみよう。

### 補題 3.7.

$$\begin{aligned} f_A^\infty(u, v) &= R \max\{u_i + v_j \mid i, j : A_{ij} > 0\} \quad ((u, v) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n), \\ B(f_A^\infty) &= \text{conv}\{R(e_i, e_j) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \mid i, j : A_{ij} > 0\}. \end{aligned}$$

ここで、 $e_i$  は、 $i$  番目の単位ベクトルである。

証明.  $\alpha := \max\{u_i + v_j \mid i, j : A_{ij} > 0\}$  とおくと、

$$\begin{aligned} f_A^\infty(u, v) &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{R}{t} \log \sum_{i,j} A_{ij} e^{t(u_i + v_j)} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{R}{t} \log e^{t\alpha} \sum_{i,j:A_{ij}>0} A_{ij} e^{-t(\alpha - u_i + v_j)} \\ &= R\alpha + \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{R}{t} \log \sum_{i,j:A_{ij}>0} A_{ij} e^{-t(\alpha - u_i + v_j)} = R\alpha. \end{aligned}$$

最後の等号は、指数の肩は非正になることからわかる。

2 つ目の式を示す.  $(p, q) \in \text{conv}\{R(e_i, e_j) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \mid i, j : A_{ij} > 0\}$  なら、 $(p, q) = \sum_{i,j:A_{ij}>0} \lambda_{ij} R(e_i, e_j)$  とかける.  $\lambda_{ij}$  たちは凸結合係数 ( $\sum_{i,j:A_{ij}>0} \lambda_{ij} = 1, \lambda_{ij} \geq 0$ ) である. すると、

$$\begin{aligned} \langle (u, v), (p, q) \rangle &= \langle (u, v), \sum_{i,j:A_{ij}>0} \lambda_{ij} R(e_i, e_j) \rangle = R \sum_{i,j:A_{ij}>0} \lambda_{ij} (u_i + v_j) \\ &\leq R \max\{u_i + v_j \mid i, j : A_{ij} > 0\} = f_A^\infty(u, v) \end{aligned}$$

である. したがって、 $(\supseteq)$  がわかった.

逆方向を示すため、 $(p, q) \notin \text{conv}\{R(e_i, e_j) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \mid i, j : A_{ij} > 0\}$  とする. 凸集合の分離定理より、ある超平面によって、 $(p, q)$  と  $\text{conv}\{R(e_i, e_j) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \mid i, j : A_{ij} > 0\}$  は分離される. すなわち、ある非ゼロベクトル  $(u, v)$  と実数  $\alpha$  が存在して、

$$\begin{aligned} \langle (u, v), (p, q) \rangle &> \alpha > \langle (u, v), (p', q') \rangle \\ (\forall (p', q') \in \text{conv}\{R(e_i, e_j) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \mid i, j : A_{ij} > 0\}) \end{aligned}$$

となる. 2 つ目の不等式は、 $\alpha > R \max\{u_i + v_j \mid i, j : A_{ij} > 0\} = f_A^\infty(u, v)$  と同値である. これより、 $\langle (u, v), (p, q) \rangle > f_A^\infty$  が導かれ、 $(p, q) \notin B(f_A^\infty)$  となる. よって、 $(\subseteq)$  が言えた.  $\square$

$(r, c) \in B(f_A^\infty)$  に入っているということは、ある  $M = (M_{ij}) \in \mathcal{M}$  があって、 $(r, c) = \sum_{i,j} M_{ij} R(e_i, e_j) = (M\mathbf{1}, M^\top \mathbf{1})$  となるということである. これは、 $\mathcal{R} \cap \mathcal{C} \neq \emptyset$  と同値である. したがって、

$$(c) \Leftrightarrow (r, c) \in B(f_A^\infty)$$

がわかる. 最後に以下を示せば証明は完成する.

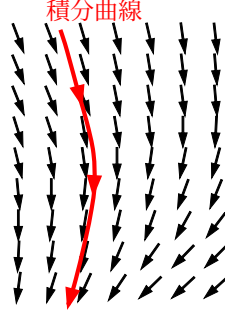


図 3: 勾配流と積分曲線

補題 3.8.  $\text{dom } f_A^*$  は閉集合である. つまり,  $\overline{\text{dom } f_A^*} = \text{dom } f_A^*$ .

証明.  $B(f_A^\infty) \subseteq \text{dom } f_A^*$  を示せばよい.  $(p, q) \in B(f_A^\infty)$  をとる. すると凸結合係数  $\lambda_{ij}$  をもちいて  $(p, q) = \sum_{i,j:A_{ij}>0} \lambda_{ij} R(e_i, e_j)$  とできる. 正数  $\alpha > 0$  を  $\alpha \lambda_{ij} \leq A_{ij}$  ( $\forall i, j: A_{ij} > 0$ ) となるようにとる.

$$\begin{aligned} f_A(s, t) &= R \log \sum_{i,j:A_{ij}>0} A_{ij} e^{s_i+t_j} \geq R \log \sum_{i,j:A_{ij}>0} \alpha \lambda_{ij} e^{s_i+t_j} \\ &\geq R \log \alpha + R \log e^{\sum \lambda_{ij}(s_i+t_j)} = R \log \alpha + R \log e^{\frac{1}{R} \langle (s,t), (p,q) \rangle} \\ &= R \log \alpha + \langle (s,t), (p,q) \rangle. \end{aligned}$$

2 つ目の不等式は,  $x \mapsto e^x$  の凸性を用いている. ここで,  $(s, t)$  は任意であるので,  $-f_A^*(p, q) = \inf_{s,t} f_A(s, t) - \langle (s,t), (p,q) \rangle \geq R \log \alpha > -\infty$ . つまり, 目標の  $(p, q) \in \text{dom } f_A^*$  が得られた.  $\square$

■勾配流を用いた定理 3.6 の証明:  $\overline{\nabla f(\mathbb{R}^n)} \supseteq B(f^\infty)$  を示せばよい. つまり,  $p \notin \overline{\nabla f(\mathbb{R}^n)} \Rightarrow p \notin B(f^\infty)$  を示せばよいのだが,  $f_p(x) := f(x) - \langle p, x \rangle$  と定義すると  $\nabla f_p(x) = \nabla f(x) - p$ ,  $f_p^\infty(u) = f^\infty(u) - \langle u, p \rangle$  となり,  $f$  を  $f_p$  におきかえることで,  $0 \notin \overline{\nabla f(\mathbb{R}^n)} \Rightarrow 0 \notin B(f^\infty)$  を示せば十分である.

問題 12. この事実を確認せよ.

いま,  $0 \notin \overline{\nabla f(\mathbb{R}^n)}$  としよう. すると,  $0$  を含む開球がとれて, それは  $\nabla f(\mathbb{R}^n)$  と交わらない. すなわち, ある正数  $\epsilon > 0$  が存在して

$$\|\nabla f(x)\| \geq \epsilon \quad (\forall x \in \mathbb{R}^n) \quad (3.5)$$

となる.  $\mathbb{R}^n$  の各点  $x$  に対して, 正規化された勾配ベクトル  $-\nabla f(x)/\|\nabla f(x)\|$  を対応させる正規化勾配ベクトル場

$$x \mapsto -\frac{\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|} \quad (x \in \mathbb{R}^n)$$

を考えることができる (分母がつねに非ゼロなので). そして, 対応する積分曲線  $t \mapsto x(t) \in \mathbb{R}^n$  を考える. それは, 微分方程式

$$\frac{dx(t)}{dt} = -\frac{\nabla f(x(t))}{\|\nabla f(x(t))\|}$$

のある点  $x$  を初期点  $x(0)$  とする解のことである. いま,  $f$  は滑らかなので, 常微分方程式論の一般論より, ある区間  $(-T, T)$  ( $T > 0$ ) で定義される滑らかな解  $x(t)$  が唯一に存在する. いま,  $T = \infty$  にとれることを示そう. すなわち, このベクトル場は完備 (complete) である. 曲線  $x(t)$  の長さ  $L$  を考える. 正規化  $\|\frac{dx(t)}{dt}\| = 1$  したので,

$$L = \int_{-T}^T \left\| \frac{dx(s)}{dt} \right\| dt = 2T$$

である。もしも  $T$  が有限だとすると、長さ  $L$  も有限なので、曲線  $x(t)$  は有界な閉集合に属している。すると  $x^* := \lim_{t \rightarrow T} x(t)$  が定義できて、 $x(t)$  は、 $x^*$  を初期点とする解に接続できることになる。  $t \rightarrow -T$  のときも同様である。よって、 $T$  を極大にとるなら、それは  $\infty$  でなければならない。

**問題\* 13.** 常微分方程式の理論を勉強して、ここの議論を精密化せよ。

記号の簡単化のために、原点  $0$  を初期点  $x(0)$  とする解  $x : (-\infty, \infty) \rightarrow \mathbb{R}^n$  を考える。つまり

$$x(0) = 0.$$

これから示すことは、

$$f^\infty(u^*) < 0 \quad (= \langle u^*, 0 \rangle) \quad (3.6)$$

を満たす  $u^*$  を「ベクトル  $x(t)/\|x(t)\|$  の  $t \rightarrow \infty$  の極限」から構成することである。うえの式は、 $0 \notin B(f^\infty)$  を意味している。

まず、 $f$  は  $x(t)$  にそって一定以上のスピードで減少していくことをみる。勾配法の連続極限である。最初の仮定 (3.5) を思い出すと、

$$\begin{aligned} \frac{df(x(t))}{dt} &= \langle \nabla f(x(t)), \frac{dx(t)}{dt} \rangle = -\langle \nabla f(x(t)), \frac{\nabla f(x(t))}{\|\nabla f(x(t))\|} \rangle \\ &= -\|\nabla f(x(t))\| \leq -\epsilon. \end{aligned}$$

これを積分  $f(x(t)) = f(x(0)) + \int_0^t \frac{df(x(s))}{ds} ds \leq f(x(0)) - \int_0^t \epsilon dt$  して、

$$f(x(t)) \leq f(0) - \epsilon t \quad (3.7)$$

を得る。点列  $\{x(k)\}_{k=0,1,\dots}$  を考える。うえの性質から

$$\lim_{k \rightarrow \infty} f(x(k)) = -\infty \quad (3.8)$$

である。よって、

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} \|x(k)\| = \infty,$$

つまり、任意の  $k > 0$  と  $M > 0$  に対して、ある  $m > k$  が存在して、 $\|x(m)\| > M$  が成り立つ。実際、そうでないとすると、ある  $k, M$  が存在して、任意の  $m > k$  に対して  $\|x(m)\| \leq M$ 。つまり、 $\{x(m)\}_{m>k}$  は半径  $M$  の球  $B$  に属しているので、 $B$  上での  $f$  の最小値以上 ( $B$  のコンパクト性より存在) ということになるが、それは、(3.8) に矛盾する。

その性質から、 $\{x(k)\}_{k=1,2,\dots}$  の部分列  $\{x(k(i))\}_{i=1,2,\dots}$  で

$$\|x(k(i))\| < \|x(k(i+1))\| \quad (i = 0, 1, 2, \dots), \quad \lim_{i \rightarrow \infty} \|x(k(i))\| = \infty$$

となるものをとることができる。さらなる部分列をとることで、

$$u_i := \frac{x(k(i))}{\|x(k(i))\|} \quad (i = 1, 2, \dots)$$

が収束するようにする。それは、 $u_i$  が球面 (コンパクト集合) にのっているから可能である。その収束先を  $u^*$  とする:

$$u^* := \lim_{i \rightarrow \infty} u_i.$$

この  $u^*$  が (3.6) を満たすことを示す。  $t > 0$  を任意に固定する。  $i$  を増やしていくとあるとき  $t < \|x(k(i))\|$  となり以降は常にそうなる。すなわち、十分大きな任意の  $i$  で、 $tu_i$  は、区間  $[0, x(k(i))]$  上に存在する。

$k(i)$  は,  $t = 0$  から  $k(i)$  までの曲線  $x(t)$  の長さなので,  $\|x(k(i)) - x(0)\| = \|x(k(i))\|$  以上である. さらに, (3.7) と区間  $[0, x(k(i))]$  上で  $f$  の凸性を考えると

$$f(tu_i) - f(0) \leq \frac{t}{\|x(k(i))\|} (f(x(k(i))) - f(0)) \leq -\frac{t\epsilon k(i)}{\|x(k(i))\|} \leq -\epsilon t.$$

よって,

$$\frac{f(tu_i) - f(0)}{t} \leq -\epsilon$$

よって,  $i \rightarrow \infty$  とすると,  $f$  の連続性から

$$\frac{f(tu^*) - f(0)}{t} \leq -\epsilon$$

である. これが任意の  $t > 0$  でなりたつので, 目標の

$$f^\infty(u^*) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{f(tu^*) - f(0)}{t} \leq -\epsilon < 0$$

を得る.

## 4 最近の話題から

行列スケールリングは古典的な話題であるが, 最適化・アルゴリズム・計算量の観点から研究され始めたのは, 1990 年代になってからである. 最近になって興味深い展開を見せている.

**問題\* 14.** 本節の内容に関して, 各自で問題を設定して解け.

■Sinkhorn アルゴリズムによる完全マッチング存在判定 定理 3.3 は,  $A$  の非ゼロパターンを表す 2 部グラフの完全マッチングの存在性と Sinkhorn アルゴリズムの収束性が同値であることをいっている. ならば, Sinkhorn アルゴリズムによって完全マッチングの存在が判定できるのではないか, というアイデアが得られる. 実際, Linial, Samorodnitsky, Wigderson [12] は, Sinkhorn アルゴリズムの多項式回反復によって, 完全マッチングの存在を判定することができることを示している.

$G = (U \sqcup V, E)$  を  $U, V$  を頂点分割とする 2 部グラフとする. ここで  $U = V := \{1, 2, \dots, n\}$  とする.

Sinkhorn アルゴリズムによる完全マッチング判定

0: 行列  $A$  を

$$A_{ij} := \begin{cases} 1 & \text{if } ij \in E, \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (i, j = 1, 2, \dots, n)$$

と定義する.

1:  $A_{ij} \leftarrow A_{ij} / \sum_k A_{ik}$  ( $i, j = 1, 2, \dots, n$ ).

2:  $A_{ij} \leftarrow A_{ij} / \sum_k A_{kj}$  ( $i, j = 1, 2, \dots, n$ ).

3: もしも,

$$\|A\mathbf{1} - \mathbf{1}\|^2 < \frac{1}{n} \tag{4.1}$$

なら終了. そうでないならステップ 1 に戻る.

**定理 4.1** ([12]). (1)  $G$  に完全マッチングが存在しないとき, 不等式 (4.1) が満たされることはない.

(2)  $G$  に完全マッチングが存在するとき, うえのアルゴリズムは,  $n^2 \log n$  回以内の反復で終了する.

証明は, 第 2.1 で述べた Sinkhorn アルゴリズムをキャパシティ交互最小化とみたときの収束解析に基づいている.



もちろん、完全マッチングの存在は、増加道アルゴリズムによってもっと速く確かめることができる。うえのアルゴリズムが興味深いのは、そのような標準的な方法と根本的に異なるアイデアに基づいている点である。しかも、非常にシンプルである。また、この研究は次に述べる作用素スケーリングの発展につながっている。

うえのアルゴリズムは、完全マッチングの存在判定のみに答えるもので、完全マッチングもその非存在の証拠である Hall blocker (条件  $(c_{1,1})$  をやぶる頂点部分集合  $X$ ) も出力しない。[8] では、 $O(n^7 \log n)$  の反復後、完全マッチングが存在しないときは、行和ベクトル  $\mathbf{A1}$  をソーティングすることで、Hall blocker が特定できることを示している。その証明は、第 2.1 節で述べた KL ダイバージェンス交互最小化の収束解析に基づいている。

■作用素スケーリングと作用素 Sinkhorn アルゴリズム 非負行列を線形写像 (作用素) とみると、それは、非負ベクトルを非負ベクトルに写像する、という性質で特徴付けられる。その一般化として、半正定値行列を半正定値行列に写像する線形写像を正值作用素という。さらに、正值写像の重要なクラスとして、完全正作用素というものがある。Gurvits [7] は、行列スケーリング・Sinkhorn アルゴリズムの枠組みを完全正值作用素に対して拡張した。この拡張は量子情報科学に動機付けられているようである。

$n \times n$  複素行列の空間  $\mathbb{C}^{n \times n}$  上の完全正写像  $T: \mathbb{C}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{C}^{n \times n}$  は、ある  $n \times n$  行列  $A_1, A_2, \dots, A_m \in \mathbb{C}^{n \times n}$  を用いて、

$$T(X) = \sum_{k=1}^m A_k X A_k^\dagger \quad (X \in \mathbb{C}^{n \times n})$$

とかけることによって特徴付けられる。ここで  $\dagger$  は共役転置を表す。 $T$  の転置写像  $T^*$  は、

$$T^*(X) := \sum_{k=1}^m A_k^\dagger X A_k \quad (X \in \mathbb{C}^{n \times n})$$

と定義される。

$T$  が「2重確率である」ということを「単位行列が単位行列に移る」という性質

$$T(I) = I, \quad T^*(I) = I$$

で定義する。この条件は

$$\sum_{k=1}^m A_k A_k^\dagger = I, \quad \sum_{k=1}^m A_k^\dagger A_k = I$$

ともかける。 $n$  次正則行列  $g, h \in GL(n, \mathbb{C}^n)$  による  $T$  のスケーリング  $T_{g,h}$  を

$$T_{g,h}(X) = \sum_{k=1}^m g A_k h^\dagger X h A_k^\dagger g^\dagger$$

と定義する。

**2重確率作用素スケーリング問題**  $A_1, A_2, \dots, A_m \in \mathbb{C}^{n \times n}$  が与えられたとき、対応する完全正作用素  $T$  は、2重確率作用素にスケーリングできるか？

いいかえると、

$$\sum_{k=1}^m g A_k h^\dagger h A_k^\dagger g^\dagger = I, \quad \sum_{k=1}^m h A_k^\dagger g^\dagger g A_k h^\dagger = I \quad (4.2)$$

となる正則行列  $g, h \in GL(n, \mathbb{C}^n)$  を見つけよ、という問題である。

行列スケーリングのときと同様に、厳密に2重確率作用素にスケーリングできる場合と近似的に2重確率作用素にスケーリングができる場合の差がある。任意の  $\epsilon > 0$  に対して、ある正則行列  $g, h \in GL(n, \mathbb{C}^n)$  が存在して、

$$\|T_{g,h}(I) - I\| < \epsilon, \quad \|T_{g,h}^*(I) - I\| < \epsilon$$

となるとき、 $T$  は近似的2重確率スケール可能という。ここで、ノルムはフロベニウスノルムである。

行列スケールングのときと同様に、(4.2) の一番目の式からは、 $h$  を固定すると  $g$  はコレスキー分解で簡単にもとまる。同様に2番目の式から  $g$  を固定すると  $h$  が求まる。すると、Sinkhorn アルゴリズムのアナロジーとして、次のアルゴリズムが考えられる。

作用素 Sinkhorn アルゴリズム (Gurvits のアルゴリズム)

- 0:  $g = h := I$
- 1:  $h$  を固定して、 $g$  を  $g^\dagger g = (\sum_{k=1}^m A_k h^\dagger h A_k^\dagger)^{-1}$  で決める。
- 2:  $g$  を固定して、 $h$  を  $h^\dagger h = (\sum_{k=1}^m A_k^\dagger g^\dagger g A_k)^{-1}$  で決める。
- 3: ステップ1に戻る。

このアルゴリズムは、統計学の分野では flip-flop アルゴリズムとして Gurvits 以前より知られていた。これは、行列正規モデルと呼ばれる確率分布の最尤推定量を求めるアルゴリズムとして使われてきた [4]。

そして、定理 3.1 のアナロジーが成立する。

定理 4.2 ([7]).  $T$  を  $A_1, A_2, \dots, A_m \in \mathbb{C}^{n \times n}$  に対応する完全正作用素とする。以下は同値である。

- (a)  $T$  は近似的2重確率スケール可能である。
- (b)  $\inf \left\{ \frac{(\sum_{k=1}^m \text{tr} X A_k Y A_k^\dagger)^n}{\det X \det Y} \mid X, Y : \text{正定値エルミート行列} \right\} > 0$ .
- (c)  $u^\dagger A_k v = 0$  ( $u \in U, v \in V$ ) となる任意のベクトル空間  $U, V$  に対して、

$$\dim U + \dim V \leq n$$

が成り立つ。

- (d) 作用素 Sinkhorn アルゴリズムが収束する。

条件 (b) に対応する最適化問題は、

$$\text{P5: Minimize } n \log \sum_{k=1}^m \text{tr} X A_k Y A_k^\dagger - \log \det X - \log \det Y \quad \text{subject to } X, Y : \text{正定値エルミート}$$

であるが、この問題の最適値  $X, Y$  を  $X = gg^\dagger, Y = hh^\dagger$  とコレスキー分解すると、 $g, h$  が求めるスケールング行列となる。さらに、作用素 Sinkhorn アルゴリズムは、P5 の交互最適化 ( $Y$  を固定して  $X$  で解く、 $X$  を固定して  $Y$  を解く) とみなすことができる。収束性の証明 (b)  $\Rightarrow$  (d) なども行列スケールングのときと同様にすすむ。

Garg, Gurvits, Oliveira, Wigderson [5] は、作用素 Sinkhorn アルゴリズムの多項式回反復によって、定理 4.2 の (同値な) 条件が判定できることを示した。この結果は、うえに述べた行列スケールングによる完全マッチング判定の一般化とみなせる。

作用素スケールング問題は、シンボリック行列の正則性判定に関連が深い。  $A_1, A_2, \dots, A_m \in \mathbb{C}^{n \times n}$  に対して、変数  $x_1, x_2, \dots, x_n$  の付いた行列

$$A = A_1 x_1 + A_2 x_2 + \dots + A_m x_m$$

を対応させる。このような行列  $A$  のランクを計算することは、いろいろな分野において基本的な問題となっていて、Edmonds 問題と呼ばれることもある。例えば、フレームワークの剛性の判定問題や、あるクラスの組合せ最適化問題は、Edmonds 問題として定式化することができる。また、理論計算機科学においては、シンボリック行列のランクの多項式時間アルゴリズムの存在性は、重要な未解決問題となっている。条件

(c) がみたされないときというのは、基底をとりかえることで  $A_i$  たちが同じ位置にサイズ  $n$  (行と列の和) を超えるゼロブロックをもつ、という状況である。すると、 $A$  もサイズ  $n$  を超えるゼロブロックがあるように基底変換できて、 $A$  は正則にはなりえない。したがって、条件 (c) は、正則性の必要条件であるが、実は、変数  $x_i$  たちが非可換  $x_i x_j \neq x_j x_i$  としたときの正則性と同値であり、[5] の結果によって、シンボリック行列の非可換の意味での正則性やランクは、多項式時間で計算できることが明らかになったのである。そのほかにも、[5] の結果はいろいろな方面に影響を与えている。[6] や [9] も参照。

問題 P5 は、通常の意味での凸最適化問題ではない「リーマン多様体上の測地的凸最適化」と呼ばれる新しいタイプの凸最適化問題である。実際、P5 の目的関数は通常の意味で凸ではない。しかし、実行可能領域をリーマン多様体とみると、その測地線にそって目的関数は凸になるのである。まず、正定値エルミート行列のなす集合  $P_n$  は、 $\mathbb{R}^{n^2}$  内の開集合なので多様体であることに注意する。各点  $X$  の接空間  $T_X$  は、エルミート行列のなす空間  $S_n$  と同一視できて、そこに内積を  $\langle S, T \rangle_X := \text{tr } X^{-1} S X^{-1} T$  ( $S, T \in T_X$ ) と導入する。すると  $P_n$  はリーマン多様体になり、レビ・チビタ接続のもとでの  $X$  から出る測地線 (最短パス) は、 $t \rightarrow X^{1/2} e^{tX^{-1/2} H X^{-1/2}} X^{1/2}$  ( $H \in S_n$ ) のようになる。これは  $P_n$  をユークリッド空間の部分空間とみたときの直線とは異なるものである。  $P_n$  の関数  $f$  が測地的凸であるとは、 $f$  が任意の測地線にそって (1次元) 凸であると定義される。この定義のもとで、問題 P5 の目的関数は、 $P_n \times P_n$  上の測地的凸関数となるのである。したがって、作用素 Sinkhorn アルゴリズムは、測地的凸最適化問題に対する交互最適化といえる。測地的凸最適化に関する研究は、まだ始まったばかりであるが、作用素スケージングの展開をみるに、かなり有望な方向性だと思う。

■群軌道上のノルム最小化問題 作用素スケージングで現れた P5 のような問題は、さまざまな分野に現れることがわかってきた。Bürgisser たち [1] は、それらを「群軌道上のノルム最小化問題」として定式化し、群作用化特有の最適化理論を展開している。

$G$  を群、 $\pi : G \rightarrow GL(N, \mathbb{C})$  を表現とする。非ゼロベクトル  $v \in \mathbb{C}^N$ 、軌道  $\pi(G)v := \{\pi(g)v \mid g \in G\}$  上でノルムを最小化する問題を考える。log をとって

$$\text{P6: } \text{Minimize } \log \|\pi(g)v\| \quad \text{subject to } g \in G$$

を考える。作用素スケージングのときは、 $G = SL(n, \mathbb{C}) \times SL(n, \mathbb{C})$  とし、表現空間を  $\mathbb{C}^{n \times n \times m} = \{(A_1, A_2, \dots, A_m) \mid A_i \in \mathbb{C}^{n \times n}\}$ 、表現  $\pi : G \rightarrow \mathbb{C}^{n \times n \times m}$  を

$$\pi(g, h) := (gA_1h^\dagger, gA_2h^\dagger, \dots, gA_mh^\dagger)$$

と定義する。  $SL(n, \mathbb{C})$  は、 $\det$  が 1 になる  $n$  次正方行列のなす群である。表現空間  $\mathbb{C}^{n \times n \times m}$  のノルムを  $l_2$  ノルムとすると

$$\|\pi(g, h)(A_1, A_2, \dots, A_m)\|^2 = \sum_{i=1}^m \|gA_ih^\dagger\|^2 = \sum_{i=1}^m \text{tr } gA_ih^\dagger hA_i^\dagger g^\dagger = \sum_{i=1}^m \text{tr } g^\dagger gA_ih^\dagger hA_i^\dagger.$$

$X = g^\dagger g, Y = h^\dagger h$  とおくと、P6 は P5 になる。なぜなら、P5 は、変数の非ゼロ定数倍に対して不変なので  $\det X = \det Y = 1$  の領域で考えてよいからである。

特に、[1] では、群  $G$  が、 $\mathbb{C}$  上の簡約代数群と呼ばれるリー群であるときに深く研究されている。  $GL, SL$  などが簡約代数群の例である。そのときは、 $G$  の極大コンパクト部分群  $K$  をとって、表現空間の内積・ノルムとして  $K$  不変  $\|\pi(k)v\| = \|v\| (\forall k \in K)$  なものを考える。すると、P6 は、目的関数が  $K$  上不変なので、等質空間  $G/K$  上の最適化問題となる。このような等質空間は対称空間 (symmetric space) と呼ばれるもので、アダマール多様体 (非正な断面曲率をもつ完備単連結リーマン多様体) になる。そして、P6 はその上の測地的凸最適化問題となる。[10] では、アダマール空間上で、(第 3.2 節でやったような) 後退関数の理論や関連する凸解析理論を展開して測地的凸最適化問題の有界性条件 (条件 (c) にあたるもの) を一般的に導いている。

## 参考文献

- [1] P. Bürgisser, C. Franks, A. Garg, R. Oliveira, M. Walter, and A. Wigderson, Towards a theory of non-commutative optimization: geodesic first and second order methods for moment maps and polytopes. preprint, 2019.
- [2] I. Csiszár, I-divergence geometry of probability distributions and minimization problems. *The Annals of Probability* **3** (1975) 146–158.
- [3] I. Csiszár and G. Tusnády, Information geometry and alternating minimization procedures. *Statistics & Decisions*, Supplement Issue No.1, (1984), 205–237.
- [4] P. Dutilleul. The MLE algorithm for the matrix normal distribution. *Journal of Statistical Computation and Simulation* **64**(1999) 105–123.
- [5] A. Garg, L. Gurvits, R. Oliveira, and A. Wigderson, Operator scaling: theory and applications. *Foundations of Computational Mathematics* (2019).
- [6] A. Garg and R. Oliveira, Recent progress on scaling algorithms and applications. preprint, (2018).
- [7] L. Gurvits, Classical complexity and quantum entanglement. *Journal of Computer and System Sciences* **69** (2004), 448–484.
- [8] K. Hayashi and H. Hirai, Finding Hall blockers by matrix scaling, preprint, 2022.
- [9] 平井広志 : 「代数的組合せ最適化—Edmonds 問題の最近の発展について」, 組合せ最適化セミナー, 京都, 2019 年 8 月. <http://www.misojiro.t.u-tokyo.ac.jp/~hirai/j-writings.html> から資料がダウンロード可
- [10] H. Hirai, Convex analysis on Hadamard spaces and scaling problems, preprint, 2022.
- [11] M. Idel, A review of matrix scaling and Sinkhorn’s normal form for matrices and positive maps, preprint, (2016), arXiv:1609.06349.
- [12] N. Linial, A. Samorodnitsky, and A. Wigderson, A deterministic strongly polynomial algorithm for matrix scaling and approximate permanents. *Combinatorica* **20** (2000), 545–568.
- [13] U. G. Rothblum and H. Schneider, Scalings of matrices which have prespecified row sums and column sums via optimization. *Linear Algebra and Its Applications* **114/115** (1989), 737–764.
- [14] R. Sinkhorn, A relationship between arbitrary positive matrices and doubly stochastic matrices. *Annal of Mathematics Statistics* **35** (1964), 876–879.
- [15] R. Sinkhorn and P. Knopp, Concerning nonnegative matrices and doubly stochastic matrices. *Pacific Journal of Mathematics* **21** (1967), 343–348.