第19 回　沼津研究会

（2012年3月5日　於　沼津高等専門学校）

－－－　幾何，数理物理，そして量子論　－－－

行列固有値流とそのルジャンドル双対

(Matrix eigenflows and its Legendre dualities)

吉澤 真太郎

(Shintaro Yoshizawa)

yzw2000 アットマーク netscape.net

御殿場基礎科学研究会

(Gotemba Theoretical Science Research)

内容

1. 背景と準備：ラフスケッチ

可積分系
(Lax形式,戸田方程式)

作用素代数
(作用素ゼータ,作用素行列式)

統計物理
(エントロピ)

幾何学的量子化
(Souriau,Berezin)

統計数理
(確率分布特定化,確率過程,ベイズ統計)

非線形力学系
（自励系システム）

実代数幾何
(非可換,特異点,凸)

【テーマ】行列の不変部分空間（固有空間）と‘行列力学系’
【課題】行列の固有値と関連する行列変数勾配流の性質を調べたい
【手段】最適化の双対幾何、相対エントロピ、作用素ベキ理論 etc

ニューラルネット
(学習方程式)

最適化双対理論
(Bregmanダイバージェンス)

Lie代数的数値解析
(Magnus方程式,積積分)

情報理論
（Kullback・Leibler情報量）

情報幾何

シンプレクティック幾何

機械学習
(カーネル法,再生核ヒルベルト空間,
Fredholm理論)

アファイン微分幾何

ケーラー幾何

1. 背景と準備：ターゲットは実カテゴリ

$A \in R^{n \times n}$ 時定数、$B \in R^{k \times k}$ 時定数
$X \in R^{n \times k}$ 時変、$X=X(t),\ 0 \leqq t$

例

① $dX/dt = AX \in R^{n \times k}$

② $dZ/dt = AZ + ZA - 2Z^2 \in R^{n \times n}$

$Z=XX^T$

③ $dX/dt = AX - XX^TX \in R^{n \times k}$

ギャップ

③' $dX/dt = AXB - XX^TX \in R^{n \times k}$

1. 背景と準備：基本的な言葉の定義

実対称行列$A \in R^{n \times n}$に対する
行列方程式$dX/dt = F(X)$, $X \in R^{n \times k}$が

PCF = Principal Component Flow（主成分流）
MCF = Minor Component Flow（マイナ成分流）

PSF = Principal Subspace Flow（主部分空間流）
MSF = Minor Subspace Flow（マイナ部分空間流）

とは、

PCF = ∀フルランクのX_0, ∃X_∞ s.t. X_∞はAのk個の最大固有値の固有行列
PSF = ∀フルランクのX_0, ∃X_∞ s.t. X_∞はAのk個の主要な固有ベクトルの生成空間に収束

※ MCF, MSFも同様に定義

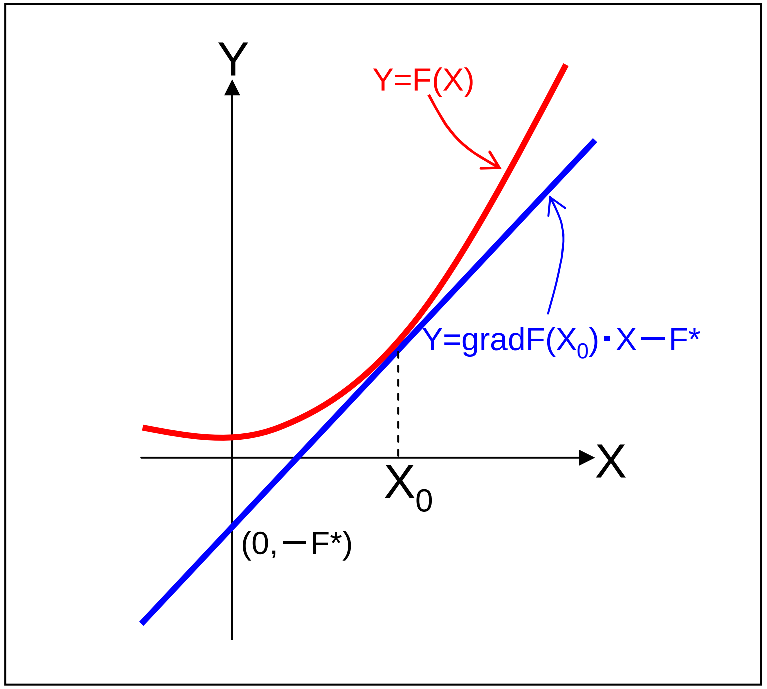
主部分空間流⊂主成分流
マイナ空間流⊂マイナ成分流

1. 背景と準備：目標

【目標】勾配流としてPCF,MCFを定義する実解析関数Fのルジャンドル双対を考察したい（途上）

【勾配流】

$$\delta F = F(X+\Delta) - F(X)$$
$$= \langle \mathrm{grad}F(x), \Delta \rangle + O(2)$$
$$\Rightarrow dX/dt = -\mathrm{grad}\, F(X)$$



【Fのルジャンドル変換】

$$F^*(P) = \sup_{X}[\langle P,X \rangle - F(X)]$$

⇒ 具体的に、どんなポテンシャル関数族{F}を対象とするか

1. 背景と準備: PCFの標準モデル

【PCF : Brockett flow1988】

Aは時定数 n×n 実対称行列,
Bは時定数、固有値が相異なるk×k対角行列。
$F(X) = tr(AXBX^T)$, $X \in SO(n)=\{ X \in R^{n\times n} : X^TX=I \}$
Von Neuman行列固有値問題。
計量はSO(n)のキリング形式で定義。

$$\boxed{dX/dt = AXB - XBX^TAX, \quad X \in SO(n)}$$

性質

①$H=X^TAX \ \Rightarrow \ dH/dt = [[B,H],H]$ 等スペクトル流

②$B=diag(b_1,b_2,\ldots,b_n)$, $b_i \neq b_j$,
$H \rightarrow diag(a_1,\ldots,a_n)$ as $t \rightarrow \infty$, $a_i \in Eig(H)$ 対角化流

③ $B=diag(b_1,\ldots,b_n)$, $b_1 > \cdots > b_n$
$H \rightarrow diag(a_1,\ldots,a_n)$ as $t \rightarrow \infty$, $a_1 > \cdots > a_n$ ソーティング流

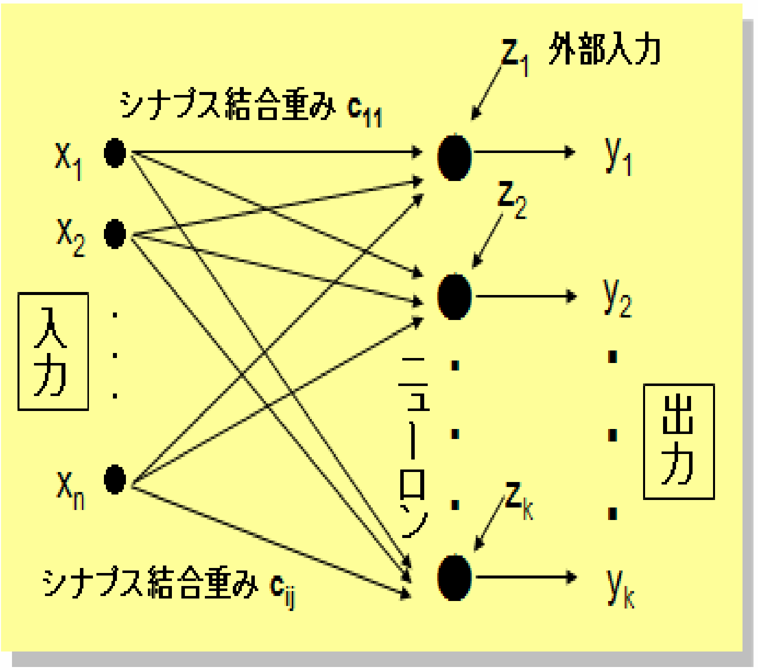
1. 背景と準備：PSAの標準モデル

【PSA：Oja flow1982,1983,1985,1989】

$$\frac{dX}{dt} = AX - XX^TAX,\quad X \in R^{n\times k}$$

ここで, Aは時定数 $n\times n$ 実正定値対称行列

1つのレイヤからなるHebb学習則



$$y=C^Tx+z,\quad C=(c_{ij})\in R^{n\times k}$$

【学習則】

コスト関数Fを最小化するよう重みCを変える：

$F=E[\|x-Cy\|^2]$

$\quad = tr(R) - 2tr(RCC^T) + tr(RCC^TCC^T)$

ここで, $z=0$を仮定. $R = E[xx^T]$.

$$\frac{dC}{dt} = -1/2\cdot \partial F/\partial C$$

$$= RC - CC^TRC + \overbrace{\underbrace{RC(I-C^TC)}_{\downarrow t\to\infty \quad 0}}^{\text{省略項}}$$

【記号変更】$R\rightarrow A$, $C\rightarrow X$

Oja-Brockett flow は勾配流か？

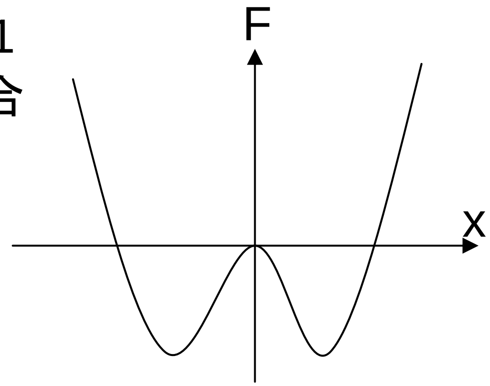
$$dX/dt = AXB - XBX^TAX, \quad X \in R^{n\times k}$$

$\boxed{\text{Yes}}$ $F(X)=1/2\ \mathrm{tr}(A^2XB^2X^T) - 1/4\ \mathrm{tr}(AXBX^T)^2$

ここで、$0<A=A^T \in R^{n\times n}$, $0<B=B^T \in R^{k\times k}$

リーマン計量: $\langle \Omega_1, \Omega_2 \rangle = \mathrm{tr}(A\Omega_1 B\Omega_2^T)$, $\Omega_i \in R^{n\times k}$

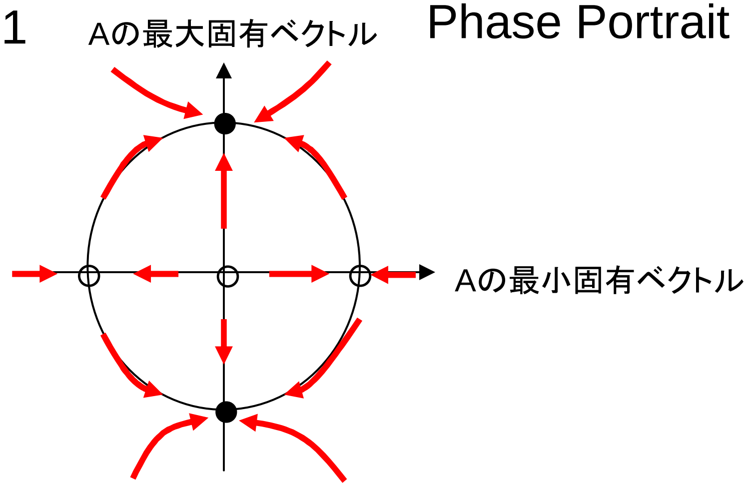
n=k=1
の場合



2重井戸型ポテンシャル

n=2, k=1
の場合

Phase Portrait



※2重井戸型ポテンシャルはいろんな所で出現:
位相的場の理論、力学系(Conley index)、ニューラルネット、統計物理(ファンデルワールス)、最適化(非凸双対理論)

1. 背景と準備: Oja-Brockett flowの固定点

We now derive an explicit description of the equilibrium points of (4) in terms of the eigenspace decomposition of A, D. For simplicity, we assume that D is in diagonal form, i.e.,

$$B = D = \mathrm{diag}(\mu_1, \ldots, \mu_1, \ldots, \mu_s, \ldots, \mu_s) \tag{9}$$

with $\mu_1 > \cdots > \mu_s > 0$ and μ_i occuring with multiplicity k_i, $k_1 + \cdots + k_s = k$.

Theorem 2. *Let $\Phi_0 \in \mathrm{SO}(n)$ be a basis matrix of eigenvectors of $A = A^\top > 0$ and let D be a diagonal form (9). Then $X_\infty \in \mathbb{R}^{n\times k}$ is an equilibrium point of the Oja-Brockett flow (4) if and only if*

Rank(X_∞)=r とすると

$$\boxed{X_\infty = \Phi_0 \pi \begin{bmatrix} I_r & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} PS,} \tag{10}$$

【固定点】

where $0 \le r \le k \le n$, P and π are $k \times k$ and $n \times n$ permutation matrices, respectively, and $S \in \mathrm{O}(k)$ with $S = \mathrm{diag}(S_1, \ldots, S_s)$, $S_i \in \mathrm{O}(k_i)$.

In particular, the asymptotically stable equilibria are precisely those of the form

$$\boxed{X_\infty = \Phi_0 \begin{bmatrix} I_k \\ 0 \end{bmatrix} S}$$

【漸近安定点】

連続群に離散群が張り付いている！

with $S = \mathrm{diag}(\epsilon_1, \ldots, \epsilon_k)$, $\epsilon_i \in \{-1, 1\}$.

1. 背景と準備: 大域的収束性と実解析勾配流

ポテンシャル関数Fが下に有界な
コンパクトサブレベル集合を持てば、
ネガティブ勾配流は$0 \leqq t$で解を持つ。
※Fのサブレベル集合 $:= \{X \mid F(X) \leqq X_0\}$

【Łojasiewiczの定理1983】
(Łojasiewicz不等式から導出される)
実解析的勾配流は
シングル(孤立した)固定点X_∞に収束する。

証明はKurdykaら,Ann.Math.
152,2000,pp763-792にもある。

1. 背景と準備：ランク保存行列力学系

Helmke-Shayman1995

$M(r,n\times k):=\{X\in R^{n\times k}: \mathrm{rank}(X)=r\},\ 1\leqq r\leqq \min\{n,k\}$

とすると$M(r,n\times k)$の点Xにおける接空間は

$T_XM(r,n\times k)=\{\Delta_1X+X\Delta_2:\ \Delta_1\in R^{n\times n},\Delta_2\in R^{k\times k}\}$

Helmke-Moore1994

ランク保存力学系(Rank(X(t))=Rank(X(0)),0≦t)の形式：

$$dX/dt = PX+XQ,\ 0\leqq t$$

ここで、$X=X(t)$, $P=P(t)$, $Q=Q(t)$

☆Oja flowはランク保存力学系、Oja-Brockett flowはランク保存力学系とは限らないがリーマン計量を変更すれば、ランク保存力学系に出来る。

☆Oja flowは初期値X_0がフルランクならコンパクト不変多様体＝Stiefel manifoldとなる。

1. 背景と準備: MCFの標準モデル

Manton-Helmke-Mareels流

"In general, the task of designing an MCA flow is regarded as being more complicated than that for a PCA flow. Although the trick of changing C into -C does not work for the Oja-Brockett flow, it works perfectly well for the proposed flow" : Cはn×n実対称行列、Bはk×k実正定値対称行列 μはCの固有値より大きい正数

【MCF】

$$dY/dt = -CYB + \mu Y(B - Y^TY),\quad Y \in R^{n\times k}$$

（対称行列Cに関するマイナ成分流）

また、$X \in R^{n\times k}$から$Y \in R^{n\times k}$への線形変換:

$\boxed{Y = \mu^{-1/2}A^{1/2}XB^{1/2}}$ 及び $\boxed{C = \mu I - A}$ によって、正定値対称行列Aに関するOja-Brockett方程式は、対称行列Cに関するマイナ成分流に変換できる.

2. 主関数の構成: ポテンシャル関数とリーマン計量

【PCF】 Oja-Brockett like flow:

・ポテンシャル関数 $F_1(W) = \frac{1}{2}\,\mathrm{tr}(AWBW^T) - 1/4\,\mathrm{tr}\{(WW^T)^2\}$

・ユークリッド計量 $\langle \Omega_1, \Omega_2 \rangle = \mathrm{tr}(\Omega_1 \Omega_2^T)$

・$dW/dt = AWB - WW^TW$

※Oja-Brockett flowとの関係: $W = A^{1/2}XB^{1/2}$

【PSF】 Oja flow:

・ポテンシャル関数 $F_2(X) = \frac{1}{2}\,\mathrm{tr}(XX^T) - 1/2\,\mathrm{logdet}(X^TAX)$

・リーマン計量 $\langle \Omega_1, \Omega_2 \rangle = \mathrm{tr}[\Omega_1 (X^TAX)^{-1} \Omega_2^T]$

・$dX/dt = AX - XX^TAX$

【MCF】 Manton-Helmke-Mareels flow:

・ポテンシャル関数 $F_3(Y) = \frac{1}{2}\,\mathrm{tr}(AYBY^T) + \mu/4\,\mathrm{tr}\{(B - Y^TY)^2\}$

・ユークリッド計量 $\langle \Omega_1, \Omega_2 \rangle = \mathrm{tr}(\Omega_1 \Omega_2^T)$

・ $dY/dt = -CYB + \mu Y(B - Y^TY),\ \ Y \in R^{n \times k}$

⇒ ポテンシャル関数F_1～F_3を繋ぐ関数族を構成したい

2. 主関数の構成: 着想

【観察】

2次関数 ＋ 多項式

2次関数 ＋ logdet関数

↓

【汎化】

2次関数 ＋ 作用素ゼータ

2. 主関数の構成

$A=A^T \in R^{n\times n}$, $0 < B=B^T \in R^{k\times k}$, $0 < C=C^T \in R^{k\times k}$,
$0 < \alpha$, $\mu \in R$ を固定し、
$X, Y \in R^{n\times k}$ s.t. $0 < \det(C + X^TY)$ に対し、

$$F_{\alpha,\mu}(X,Y) := \frac{1}{2}\mathrm{tr}(AXBY^T) + \underbrace{\frac{\mu}{2\alpha}\mathrm{tr}(C + X^TY)^{\alpha} - \frac{\mu k}{2\alpha}}$$

を考える。

【公式】 $$\left.\frac{d}{d\alpha}\mathrm{tr}(D^{-\alpha})\right|_{\alpha=0} = -\log(\det D)$$

【変数偶数次元化：X,Yの動機】

①半ユークリッド空間(R^{n+1},不定値計量)内の擬双曲空間×擬球の部分集合間のIzumiya duality

②【公式：重要かつ美しい】 (曼荼羅)

- $x,y \in R^n$, $\det(I + xy^T) = 1 + \langle x,y\rangle$
- $x_i \in R^n$ $(i=1,2,3,4)$,
  $\det(I + x_1x_2^T + x_3x_4^T) = (1+\langle x_1,x_2\rangle)(1+\langle x_3,x_4\rangle) - \langle x_1,x_4\rangle\langle x_2,x_3\rangle$

③機械学習のカーネル法(再生核ヒルベルト空間)

④Berezin量子化の具体例：**球及び擬球上の量子化計算**

2. 参考:Berezin Quantization

AMS Translations,
Topics in Statistical Physics, Vol.177

Berezin quantization and unitary representation of Lie groups,
Bar-Moshe and Marinov

$\boxed{\alpha \downarrow 0\text{の例}}$ $(A=0,\ C=I_k,\ \mu=2)$

【主関数】 $F(X,Y) = \log\det(I_k + X^T Y),\ X,Y \in R^{n\times k}$

リーマン計量 $\langle \Omega_1, \Omega_2 \rangle := \mathrm{tr}\left[(\Omega_{11}{}^T \Omega_{12}{}^T) \begin{pmatrix} (I_k+Y^TX)^{-1/2} & 0 \\ 0 & (I_k+X^TY)^{-1/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Omega_{21} \\ \Omega_{22} \end{pmatrix} \right],\ \Omega_{ij} \in R^{n\times k}$

$$\begin{cases} \partial F/\partial X = Y(I_k + Y^T X)^{-1/2} =: Z \in R^{n\times k} \\ \partial F/\partial Y = X(I_k + X^T Y)^{-1/2} =: W \in R^{n\times k} \end{cases}$$

【事実1】 $I_k + X^T Y = (I_k - W^T Z)^{-1}$

【事実2】 $\begin{cases} X = W(I_k - W^T Z)^{-1/2} \in R^{n\times k} \\ Y = Z(I_k - Z^T W)^{-1/2} \in R^{n\times k} \end{cases}$

3. 双対関数の具体例：相対エントロピ

【双対関数】

$$F^*(Z,W) = 2\,\mathrm{tr}(Z^TW) + \log\det(I_k - Z^TW)$$

【相対エントロピ（ダイバージェンス）】

$\Sigma := (X,Y),\ \ \Lambda := (Z,W)$

$$D(\Sigma,\Lambda) := F(\Sigma) + F^*(\Lambda) - \langle \Sigma, \Lambda \rangle$$
$$= \log\det(I_k + X^TY) + \log\det(I_k - Z^TW) \geqq 0$$

4. 相対エントロピとマクマホンマスタ公式：等号で関連

$X, Y \in R^{n\times k}$ s.t. $0 < \det(I + X^T Y)$,及び,
$Z, W \in R^{n\times k}$ s.t. $0 < \det(I - Z^T W)$ に対し、

（主変数$\Sigma \in \mathcal{D}$（主定義閾），　双対変数$\Lambda \in \mathcal{D}^*$（双対定義閾）に対し、）

相対エントロピから

$$\det(I_k + X^T Y) \cdot \det(I_k - Z^T W) \geqq 1$$

$$\begin{cases} X = W(I_k - W^T Z)^{-1/2} & \in R^{n\times k} \\ Y = Z(I_k - Z^T W)^{-1/2} & \in R^{n\times k} \end{cases}$$

$$\begin{cases} Z = Y(I_k + Y^T X)^{-1/2} & \in R^{n\times k} \\ W = X(I_k + X^T Y)^{-1/2} & \in R^{n\times k} \end{cases}$$

のとき等号成立。

4. 相対エントロピとマクマホンマスタ公式：MMTとは

MacMahon's Master Theorem

可換環R上の行列$A=(a_{ij})_{n\times n}$ 及び R上の可換な不定元$x_1,\ldots,x_n$ が与えられたとする。多重指数$(m_1,\ldots,m_n)\in Z^n_{\geqq 0}$ に対して、
下記式内の$x_1^{m1}x_2^{m2}\cdots x_n^{mn}$のR係数は

$$\left(\sum_{j=1}^{n} a_{1j}x_j\right)^{m_1}\left(\sum_{j=1}^{n} a_{2j}x_j\right)^{m_2}\cdots\left(\sum_{j=1}^{n} a_{nj}x_j\right)^{m_n}$$

下記式内の対応する係数と同じになる。

$$\det\left(1_{n\times n} - A\begin{pmatrix} x_1 & & \\ & \ddots & \\ & & x_n\end{pmatrix}\right)^{-1}$$

4. 相対エントロピとマクマホンマスタ公式：α変形との関連？

非可換微分幾何、非可換代数幾何の1つの背景

Andrews' Problem:

(from George E. Andrews, *Problems and prospects for basic hypergeometric functions*, In: Theory and application of special functions, Academic Press, New York, 1975, pp. 191–224.)

5. MacMahon's Master Theorem and the Dyson Conjecture.

PROBLEM 5. Are there q-analogs of MacMahon's Master Theorem and the Dyson Conjecture?

First let us recall:

MacMahon's Master Theorem (MacMahon (1894), (1915)). The coefficient of $X_1^{P_1} X_2^{P_2} \ldots X_n^{P_n}$ in

From M. Lorenz
Koszul algebras and MacMahon's Master Theorem
'Noncommutative Algebraic Geometry' Shanghai 09/20/2006

4. 参考：MMT及びDyson conjectureの検討

Irving.J.Good
1916-2009

「経験ベイズ法」提唱者(1965)

☆A short proof of MacMahon's ‘Master Theorem’
Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society
(1962), 58: pp160-160

☆Short proof of a conjecture of Dyson, J. Math. Phys. 11 (1970) 1884

5. Cayley変換とOja flow

【Oja flow】

$$\frac{dX}{dt} = AX - XX^TAX, \quad X \in R^{n \times k}$$

ここで, Aは時定数 $n \times n$ 実正定値対称行列

$Z := XX^T \in R^{n \times n}$

$$\frac{dZ}{dt} = AZ + ZA - 2ZAZ$$

リッカチ方程式

【Cayley trans.】

$$U = (I - Z)(I + Z)^{-1} \Leftrightarrow Z = (I + U)^{-1}(I - U)$$

線形化

$$\frac{dU}{dt} = -2A + AU + UA$$

容易に求解できるので、Cayley逆変換してリッカチ方程式解を得る

6．行列Schwarz方程式とOja like flow

【Oja like flow】 軽いお話程度に留めます

$$\boxed{dX/dt = AX - XX^TX,\ X \in R^{n\times k}}$$

ここで, Aは時定数 n×n 実正定値対称行列

$Z:=2XX^T \in R^{n\times n}$

リッカチ方程式　$dZ/dt = AZ + ZA - Z^2$

$R(t) := -1/2(V')^{-1}V'' + A \in R^{n\times n}$, ここで、 $V' := dV/dt$

$$dR/dt + R^2 - AR - RA = -2S(V) + A^2$$

同値

行列シュワルツ方程式　$S(V) = ½ A^2$

ここで、$S(V) = [(V')^{-1}V'']' - 1/2\,[(V')^{-1}V'']^2$

※ **Matrix Schwarz derivative** についてはB.Schwarz(1980) やM.I.Zelikinを参照

7. まとめと今後の課題、構想

【まとめ】

☆PCFやMCFを生成するポテンシャル関数の状態変数と
　係数変数によって、成分流の特性がガラリと変わる。

☆４次までの多項式関数でも行列解析の話題が豊富に作れる。

☆成分流を生成するポテンシャル関数とそのルジャンドル双対
　関数とから相対エントロピを構成し、MMTを一般化した。

【課題】

☆Oja-Brockett flowの収束域の特徴付

☆α変形ポテンシャル族と成分流との対応関係の明確化

☆Einstein空間の幾何との関係（今回お話していません）

7. まとめと今後の課題、構想の一部

列ベクトル場

dx/dt = F(x) ∈

- ・秩序方程式（Haken)
- ・反応拡散方程式（Gray-Scott方程式, Brusselator方程式 etc）
- ・Lorentz方程式, Lotka-Volterra方程式
- ・Painlevé方程式,戸田方程式,Schwarz方程式　etc

正方形行列場

dX/dt = F(X) ∈

- ・Brockett方程式
- ・行列Riccati方程式
- ・Lie環値Euler方程式（Fomenko,Mishchenko）
- ・Euler-Poincare方程式 / Lie-Poisson方程式（Bloch, Krishnaprasad, Marsden, Ratiu）　etc

長方形行列場

dX/dt = F(X) ∈

- ・Oja方程式
- ・Xu方程式(=Oja-Brockett方程式）etc

構想
①長方形行列変数化（時空間モデル化の一つの方法）
②係数パラメータと状態パラメータとの関係を方程式で特徴付
③双対方程式の構成とその応用
④方程式の離散化（差分化）＋計算機実行　　⑤行列変数の積分と応用

【参考文献】

●**E.Oja**
NEURAL NETWORKS, PRINCIPAL COMPONENTS, AND SUBSPACES
International Journal of Neural Systems, Vol.1 (1989) pp.61-68

●**R.Brockett**
DYNAMICAL SYSTEMS THAT SORT LISTS, DIAGONALIZE MATRICES AND SOLVE LINEAR PROGRAMMING PROBLEMS
Decision and Control, Austin, Texas, 1988

●**U.Helmke and J.Moore**
Optimization and Dynamical Systems,
Springer-Verlag, London, 1996.

●**A. P. Veselov and I. A. Dynnikov**
INTEGRABLE GRADIEND FLOWS AND MORSE THEORY
St. Petersburg Mathematical Journal, 1997, 8:3, pp.429–446

●**M. I. Zelikin**
GEOMETRY OF CROSS RATIO
arXiv:math/0701500

●**J.Manton, U.Helmke, and I.Mareels**
A DUAL PURPOSE PRINCIPAL AND MINOR COMPONENT FLOW
Systems & Control Letters 54 (2005) pp.759 – 769

●**S.Yoshizawa, U.Helmke, and K. Starkov**
CONVERGENCE ANALYSIS FOR PRINCIPAL COMPONENT FLOWS
Int. J. Appl. Math. Comput. Sci., 11 (1), (2001) pp.223-236.
Corrections, ibid., 12 (2002), 229