9. コンダクタンス

来嶋 秀治

滋賀大学 データサイエンス学部

Conductance

$P=(p_{ij})$の定常分布を$\boldsymbol{\pi}$とする.

- $\pi(S)=\sum_{i\in S}\pi_i$
- $Q(S)=\sum_{i\in S,j\notin S}p_{ij}\pi_i$
- $\Phi(S)=\frac{Q(S)}{\pi(S)}$
- $\Phi=\min\left\{\Phi(S)\middle|\, S\notin\{\emptyset,\Omega\},\pi(S)\le\frac{1}{2}\right\}$ ← "Conductance"

定理 9.1.
Pがエルゴード的でreversibleのとき
$$\frac{\Phi^2}{2}\le 1-\lambda_2\le 2\Phi$$

補題 9.2.
Pがエルゴード的でreversibleのとき
$$\lambda_2\le 1-\frac{\Phi^2}{2}$$

補題 9.3.
Pがエルゴード的でreversibleのとき
$$\lambda_2\ge 1-2\Phi$$

証明

補題 9.2
エルゴード的、reversibleに対して
$$\lambda_2 \le 1 - \frac{\Phi^2}{2}$$

- $\pi(S) = \sum_{i\in S} \pi_i$
- $Q(S) = \sum_{i\in S, j\notin S} p_{ij}\pi_i$
- $\Phi(S) = \frac{Q(S)}{\pi(S)}$
- $\Phi = \min\left\{\Phi(S) \middle| S \notin \{\emptyset, \Omega\}, \pi(S) \le \frac{1}{2}\right\}$

証明 1/4

- $\boldsymbol{e} = (e_1, \dots, e_N)$を固有値 $\lambda < 1$の固有ベクトルとする.
- $L = I - P$: Laplacian
  - $\boldsymbol{e}L = (1 - \lambda)\boldsymbol{e}$
- $S = \{i \mid e_i > 0\}$ とする. $\pi(S) = \sum_{i\in S} \pi_i \le 1/2$を仮定する.
  - ✓ $\sum_i e_i = 0$ (固有値1の固有ベクトル$\mathbf{1}$と直交してるから)
- $\hat{\boldsymbol{e}}$を以下で定義:

$$\hat{e}_i = \begin{cases} \frac{e_i}{\pi_i} & \text{for } i \in S \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

- 便宜のため、以下、$\hat{e}_1 \ge \hat{e}_2 \ge \cdots \ge \hat{e}_N$となるよう（行列$L$を）並べ替える.
  - 適当な r に対して$S = \{1, \dots, r\}$と仮定できる($\pi_i > 0$より)

証明 2/4

- 内積をとって、$\boldsymbol{e}^\top L \hat{\boldsymbol{e}} = (1-\lambda)\boldsymbol{e}^\top \hat{\boldsymbol{e}}$
- 右辺は$(1-\lambda)\sum_{i\in S}\pi_i \hat{e}_i^2$
- 左辺は

$$
\begin{aligned}
\sum_{i\in S}\sum_{j=1}^{N}\hat{e}_i l_{ji} e_j &\geq \sum_{i\in S}\sum_{j\in S}\hat{e}_i l_{ji} e_j \\
&= \sum_{i\in S}\sum_{j\in S, j\neq i} l_{ji}\hat{e}_i e_j + \sum_{i\in S} l_{ii}\hat{e}_i e_i \\
&= -\sum_{i\in S}\sum_{j\in S, j\neq i} p_{ji}\hat{e}_i e_j + \sum_{i\in S}\hat{e}_i e_i \sum_{j\neq i} p_{ij} \\
&= -\sum_{i\in S}\sum_{j\in S, j\neq i} w_{ij}\hat{e}_i \hat{e}_j + \sum_{i\in S}\sum_{j\neq i} w_{ij}\hat{e}_i^2 \\
&= -2\sum_{i<j} w_{ij}\hat{e}_i\hat{e}_j + \sum_{i<j} w_{ij}\left(\hat{e}_i^2 + \hat{e}_j^2\right) \\
&= \sum_{i<j} w_{ij}\left(\hat{e}_i - \hat{e}_j\right)^2
\end{aligned}
$$

- よって、$1-\lambda \geq \dfrac{\sum_{i<j} w_{ij}\left(\hat{e}_i - \hat{e}_j\right)^2}{\sum_{i\in S}\pi_i \hat{e}_i^2}$

- $l_{ij} = -p_{ij}$
- $l_{ii} = 1 - p_{ii} = \sum_{j\neq i} p_{ij}$
- $\hat{e}_i = \dfrac{e_i}{\pi_i}$
- $\pi_j p_{ji} = w_{ji} = w_{ij} = \pi_i p_{ij}$

$w_{ji} = w_{ij}$

	1	2	3
1		$w_{12}\hat{e}_1^2$	$w_{13}\hat{e}_1^2$
2	$w_{21}\hat{e}_2^2$		$w_{23}\hat{e}_2^2$
3	$w_{31}\hat{e}_3^2$	$w_{32}\hat{e}_3^2$	

証明 3/4

$\sum_{i<j} w_{ij}(\hat{e}_i + \hat{e}_j)^2 \le 2\sum_{i<j} w_{ij}(\hat{e}_i^2 + \hat{e}_j^2) \le 2\sum_{i\in S} \pi_i \hat{e}_i^2$ より

$$\frac{\sum_{i<j} w_{ij}(\hat{e}_i + \hat{e}_j)^2}{2\sum_{i\in S} \pi_i \hat{e}_i^2} \le 1$$

$$1-\lambda \ge \frac{\sum_{i<j} w_{ij}\,(\hat{e}_i - \hat{e}_j)^2}{\sum_{i\in S} \pi_i \hat{e}_i^2}$$

$$\ge \frac{\sum_{i<j} w_{ij}(\hat{e}_i - \hat{e}_j)^2}{\sum_{i\in S} \pi_i \hat{e}_i^2} \frac{\sum_{i<j} w_{ij}(\hat{e}_i + \hat{e}_j)^2}{2\sum_{i\in S} \pi_i \hat{e}_i^2}$$

$$\ge \frac{1}{2} \frac{\sum_{i<j} w_{ij}^2(\hat{e}_i^2 - \hat{e}_j^2)^2}{\left(\sum_{i\in S} \pi_i \hat{e}_i^2\right)^2}$$

$$\ge \frac{1}{2} \frac{\left(\sum_{i<j} w_{ij}(\hat{e}_i^2 - \hat{e}_j^2)\right)^2}{\left(\sum_{i\in S} \pi_i \hat{e}_i^2\right)^2}$$

Cauchy-Schwartz

- 右辺$= \frac{\Phi^2}{2}$を示す.

証明4/4

	1	2	3	4	5
1		ϕ_1	$\phi_1+\phi_2$	$\phi_1+\phi_2+\phi_3$	$\phi_1+\phi_2+\phi_3+\phi_4$
2			ϕ_2	$\phi_2+\phi_3$	$\phi_2+\phi_3+\phi_4$
3				ϕ_3	$\phi_3+\phi_4$
4					ϕ_4

□ $\frac{1}{2}\frac{\left(\sum_{i<j} w_{ij}\left(\hat{e}_i^2-\hat{e}_j^2\right)\right)^2}{\left(\sum_{i\in S}\pi_i\hat{e}_i^2\right)^2} = \frac{\Phi^2}{2}$を示す．

$$
\begin{aligned}
\sum_{i<j} w_{ij}\left(\hat{e}_i^2-\hat{e}_j^2\right) &= \sum_{i<j} w_{ij}\sum_{k=i}^{j-1}\left(\hat{e}_k^2-\hat{e}_{k+1}^2\right) \\
&= \sum_{k=1}^{r}\left(\hat{e}_k^2-\hat{e}_{k+1}^2\right)\sum_{i\in S_k, j\notin S_k} w_{ij} \\
&= \sum_{k=1}^{r}\left(\hat{e}_k^2-\hat{e}_{k+1}^2\right)Q(S_k) \\
&\geq \Phi\sum_{k=1}^{r}\left(\hat{e}_k^2-\hat{e}_{k+1}^2\right)\pi(S_k) \\
&= \Phi\sum_{k=1}^{r}\left(\hat{e}_k^2-\hat{e}_{k+1}^2\right)\sum_{i=1}^{k}\pi_i \\
&= \Phi\sum_{i=1}^{r}\pi_i\sum_{k=i}^{r}\left(\hat{e}_k^2-\hat{e}_{k+1}^2\right) \\
&= \Phi\sum_{i\in S}\pi_i\hat{e}_i^2
\end{aligned}
$$

$Q(S_k)\geq\Phi\pi(S_k)$ (recall $\Phi=\min_S\frac{Q(S)}{\pi(S)}$)

よって

$$
\frac{1}{2}\frac{\left(\sum_{i<j} w_{ij}\left(\hat{e}_i^2-\hat{e}_j^2\right)\right)^2}{\left(\sum_{i\in S}\pi_i\hat{e}_i^2\right)^2} = \frac{1}{2}\frac{\left(\Phi\sum_{i\in S}\pi_i\hat{e}_i^2\right)^2}{\left(\sum_{i\in S}\pi_i\hat{e}_i^2\right)^2} = \frac{\Phi^2}{2}
$$

□

補題 9.3.
任意のエルゴードreversibleに対して

$$\lambda_2 \geq 1 - 2\Phi$$

証明

縦ベクトル$\boldsymbol{f}$を

$$f_i = \begin{cases} \frac{\pi_i}{\pi(S)} & i \in S \\ \frac{-\pi_i}{1-\pi(S)} & i \notin S \end{cases}$$

とする． $\hat{\boldsymbol{f}} = \Pi^{-1}\boldsymbol{f} = \left(\frac{f_i}{\pi_i}\right)$とする．

Claim 1. $(1-\lambda_2)\boldsymbol{f}^\top\hat{\boldsymbol{f}} \leq \boldsymbol{f}^\top L\boldsymbol{f}$

Claim 2. $\frac{\boldsymbol{f}^\top L\boldsymbol{f}}{\boldsymbol{f}^\top\hat{\boldsymbol{f}}} \leq 2\Phi$

$$\Pi := \mathrm{diag}(\pi_1, \dots, \pi_N) = \begin{pmatrix} \pi_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \pi_N \end{pmatrix}$$

- $\Pi^{-1} = \mathrm{diag}(\pi_1, \dots, \pi_N)$

$$\Pi^{1/2} := \mathrm{diag}(\sqrt{\pi_1}, \dots, \sqrt{\pi_N})$$
$$\Pi^{-1/2} := \mathrm{diag}(1/\sqrt{\pi_1}, \dots, 1/\sqrt{\pi_N})$$

- $\left(\Pi^{1/2}\right)^{-1} = \Pi^{-1/2}$
- $\left(\Pi^{1/2}\right)^2 = \Pi$

Claim 1

証明

- $L = I - P$
  - Lの固有値は$1 - \lambda\ (0 \leq 1 - \lambda \leq 2)$
  - Lの固有ベクトルはPと共通
- $A = \Pi^{1/2} L \Pi^{-1/2}$とする.
  - Aの固有値は$1 - \lambda\ (0 \leq 1 - \lambda \leq 2)$
  - Aの固有値0の左固有ベクトル $\boldsymbol{e}^\top = (\pi_1^{1/2}, \dots, \pi_N^{1/2})$
  - Aは対称
- Subclaim

  $\boldsymbol{g}$は$\boldsymbol{e}$の直交ベクトルとすると

$$(1 - \lambda_2)\boldsymbol{g}^\top \boldsymbol{g} \leq \boldsymbol{g}^\top A \boldsymbol{g}$$

  ∵すべての固有値は$1 - \lambda_2$以上．Aは対称.

Cf. レイリー商
(Rayleigh quotient)

Claim 1

- $\boldsymbol{g} = \Pi^{-1/2}\boldsymbol{f}$とする.
  - $\boldsymbol{f} = \Pi^{1/2}\boldsymbol{g}$
  - $\hat{\boldsymbol{f}} = \Pi^{-1}\boldsymbol{f} = \Pi^{-1/2}\boldsymbol{g}$
- $\boldsymbol{f}^\top\hat{\boldsymbol{f}} = \boldsymbol{g}^\top\Pi^{1/2}\Pi^{-1/2}\boldsymbol{g} = \boldsymbol{g}^\top\boldsymbol{g}$
- $\boldsymbol{f}^\top L\hat{\boldsymbol{f}} = \boldsymbol{g}\Pi^{1/2}L\Pi^{-1/2}\boldsymbol{g} = \boldsymbol{g}^\top A\boldsymbol{g}$
- $\boldsymbol{e}^\top\boldsymbol{g} = \boldsymbol{e}^\top\Pi^{-1/2}\boldsymbol{f} = \mathbf{1}^\top\boldsymbol{f} = 0$よりsubclaimが使えて

$$(1-\lambda_2)\boldsymbol{g}^\top\boldsymbol{g} \le \boldsymbol{g}^\top A\boldsymbol{g}$$

すなわち

$$(1-\lambda_2)\boldsymbol{f}^\top\hat{\boldsymbol{f}} \le \boldsymbol{f}^\top L\boldsymbol{f}$$

Claim 2

$$\boldsymbol{f}^\top \hat{\boldsymbol{f}} = \sum_{i\in[N]} \frac{f_i^2}{\pi_i} = \sum_{i\in S} \frac{\pi_i}{\pi(S)^2} + \sum_{i\notin S} \frac{\pi_i}{\left(1-\pi(S)\right)^2} = \frac{1}{\pi(S)} + \frac{1}{1-\pi(S)}$$

$$\boldsymbol{f}^\top L \hat{\boldsymbol{f}} = \sum_{i<j} w_{ij}\left(\hat{f}_i - \hat{f}_j\right)^2$$ （上界の式変形参照）

$$= \sum_{i\in S, j\notin S} w_{ij} \left(\frac{1}{\pi(S)} + \frac{1}{1-\pi(S)}\right)^2$$

$$= Q(S)\left(\frac{1}{\pi(S)} + \frac{1}{1-\pi(S)}\right)^2$$

$$1-\lambda_2 \le \frac{\boldsymbol{f}^\top L \hat{\boldsymbol{f}}}{\boldsymbol{f}^\top \hat{\boldsymbol{f}}} = Q(S)\left(\frac{1}{\pi(S)} + \frac{1}{1-\pi(S)}\right) \le Q(S)\frac{2}{\pi(S)} = 2\frac{Q(S)}{\pi(S)} = 2\Phi$$

$\pi(S) \le \frac{1}{2}$

参考文献

- Alistair Sinclair, Algorithms for Random Generation and Counting: A Markov Chain Approach, Springer, 1993
- David A. Levin and Yuval Peres, Markov Chains and Mixing Times, second edition, Amer. Mathematical Societ., 2017.

https://pages.uoregon.edu/dlevin/MARKOV/

おわり