Recursive Logit と PURC

ランダム効用理論と摂動効用理論の双対性

小西将真

2026/4/23

Recursive Logit を数式で理解する

経路を列挙せずに経路選択を表す

1. 何をモデル化したいか

経路全体を一気に選ぶのではなく
各リンクで「次にどこへ進むか」を順に選ぶ
その逐次選択の積み重ねとして経路を表す

なぜ Recursive Logit を使うか:

- 候補経路を先に全部列挙するのが大規模ネットワークでは難しい
- 経路全体より次の一手の選択として書いた方が行動として自然
- リンク属性を直接使って経路選択を表現しやすい(経路全体を先に考える必要がない)

有向ネットワークを

$$G = (A, N)$$

とする。

- A: リンク集合
- N: ノード集合

2. 経路選択確率の式

経路

$$\sigma = [a_1, \ldots, a_J]$$

の選択確率は、各リンク遷移確率の積で書く。

$$P(\sigma = [a_1, \ldots, a_J]) = \prod_{j=1}^{J-1} p(a_{j+1} \mid a_j)$$

意味:
経路全体の確率 = 各ステップの選択確率の掛け算
ここでマルコフ性を仮定している
→次の選択は今いるリンクに依存するうえ、過去の行動に依存しない

3. Bellman 方程式

リンク k にいるとき、次リンク $a \in A(k)$ を選ぶ。
価値関数 $V^d(k)$ は

$$V^d(k) = \mathbb{E}\left[\max_{a \in A(k)} \left\{v(a \mid k; \theta) + V^d(a) + \mu\varepsilon(a)\right\}\right]$$

で与えられる。
ここで

- $v(a \mid k; \theta)$: いま(次)の遷移の効用
- $V^d(a)$: 将来価値
- $\mu\varepsilon(a)$: ランダム誤差項($\muは誤差項の分散を調整するパラメータ)
- d: 目的地リンク

目的地では

$$V^d(d) = 0$$

4. 遷移効用の形

遷移効用の確定項を

$$v(a \mid k; \theta) = \theta^\top x_{a|k}$$

と置く。

- $x_{a|k}$: リンク対 (k, a) の属性(kにいる時の選択肢aの属性)
- θ: 推定パラメータ

例えば $x_{a|k}$ に入るもの:

- 所要時間
- 距離
- 料金
- 右左折ダミー($x_{a|k}$と書く理由)

つまり、いまの一手の良さを説明変数で表し、
その先の価値 $V^d(a)$ を足して判断する。

5. Logit 型の遷移確率

誤差項 $\varepsilon(a)$ を i.i.d. ガンベル分布とすると、
遷移確率はいつも通りの形

$$p(a \mid k)=\frac{\exp \left(\frac{1}{\mu}\left\{v(a \mid k ; \theta)+V^{d}(a)\right\}\right)}{\sum_{a^{\prime} \in A(k)} \exp \left(\frac{1}{\mu}\left\{v\left(a^{\prime} \mid k ; \theta\right)+V^{d}\left(a^{\prime}\right)\right\}\right)}$$

解釈:

- 分子: 選んだ遷移の魅力度
- 分母: 接続リンク全体の魅力度の合計
- 今の効用と将来価値の両方が入っている
- NLモデルと相似(?)な構造を持っている

6. 価値関数のログサム表現

ガンベル分布の性質から、Bellman 方程式は
ログサム関数に書き換えられる。(末尾ににログサムの導出をしたスライドを示した)

$$V^d(k) = \begin{cases} \mu \ln \sum_{a \in A(k)} \exp\left(\frac{1}{\mu}\left\{v(a \mid k; \theta) + V^d(a)\right\}\right), & k \neq d \\ 0, & k = d \end{cases}$$

解釈の仕方:

- 選択肢集合 $A(k)$ の魅力度を 1 つの値に集約している
- しかもその中に将来の価値が再帰的に入っている
- 選択肢数が増えると価値関数も大きくなるというのは(二つの意味で)直感的にも正しい
  - 最大値の期待値が分布上、右にずれていく
  - NLモデルと同様、選択肢が増えると少なからず効用が上がる

7. 行列表現

$$z_k = e^{V^d(k)/\mu}$$

と置くと、価値関数は線形に近い形へ変換できる。

$$z = Mz + b$$

Mは
ここで各要素は

$$M_{ka} = \delta(a \mid k) \exp\left(\frac{1}{\mu} v(a \mid k; \theta)\right)$$

で、

$$\delta(a \mid k) = \begin{cases} 1 & \text{if } a \in A(k) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

- b: 目的地に対応するベクトル(境界条件のようなイメージ)

故に

- 連立方程式を解くだけ
- 目的地側から逆算すれば反復計算で価値関数が求まる
- $(I - M)z = B$をnumpyで解いていた

8. 遷移確率の考察

$$p(a \mid k) = \frac{\exp\left(\frac{1}{\mu}\left\{v(a \mid k;\theta) + V^d(a)\right\}\right)}{\sum_{a' \in A(k)} \exp\left(\frac{1}{\mu}\left\{v(a' \mid k;\theta) + V^d(a')\right\}\right)}$$

はプレトリップ型のMNLと選択確率が一致する
確かに、気持ちはいいけれど
構造的な問題から抜け出せていないのではないか
(先の方で繋がっているだけのNLモデル？)
また、将来効用を完璧に理解していることなどあり得るのか
習慣的なドライバーの行動しか説明できないのではないか
さらに
ネットワークにサイクリック構造があると計算が発散し得る。$n \to \infty$で$M \to 0$になることが前提
(スペクトル半径が１未満であることが必要)

9. 一般化 Recursive Logit

標準 RL は将来価値をそのまま足していた。
これを割引率 β で一般化すると

$$V^d(k) = \mathbb{E}\left[\max_{a \in A(k)} \left\{v(a \mid k; \theta) + \beta V^d(a) + \mu\varepsilon(a)\right\}\right]$$

となる。

- $\beta = 1$: 標準 RL
- $\beta = 0$: 将来を見ない近視眼的選択
- $0 < \beta < 1$: その中間

つまり β は
どれだけ先読みするかを表す。

10. 時間構造化ネットワーク

時間付き状態 $s_t = (t, a)$ を導入する。
時間制約 T のもとで、時点 t の価値関数は

$$V_t(a) = \mathbb{E}\left[\max_{a' \in A_t(a)} \{v_t(a' \mid a) + \beta V_{t+1}(a') + \mu\varepsilon_{t+1}(a')\}\right]$$

となる。
ここで

$$A_t(a) = \{a' \in A \mid \Delta_t(a' \mid a) = 1\}$$

は、時点 t にリンク a にいるときに選べる
「実行可能な次リンク」の集合である。
利点:

- 時間制約を自然に入れられる
- 活動スケジュールや時間依存行動を扱える

なぜ時間制約を作るのか:

- 実際の行動は「何時までに着くか」「その時刻にその場所へ行けるか」で制約される
- 標準 RL ではループや将来時点の扱いが難しく、計算も重くなりやすい
- 時間軸を入れると現実的な制約と計算可能性(発散しない)を同時に確保できる

11. 実行可能性指標 $I_t(a)$ と遷移条件 $\Delta_t(a' \mid a)$

まず、リンク a が時点 t で実行可能かを表す指標を

$$I_t(a) = \begin{cases} 1, & \text{if } D^o(a) \le t \text{ かつ } D^d(a) \le T - t \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases}$$

と定義する。
ここで

- $D^o(a)$: 起点 o からリンク a まで到達するのに必要な最短時間
- $D^d(a)$: リンク a から終点 d まで到達するのに必要な最短時間
- T: 全体の時間制約

つまり

- $D^o(a) \le t$: 時点 t までにリンク a に到達可能
- $D^d(a) \le T - t$: 残り時間 $T - t$ で終点まで帰着可能

の両方を満たすときだけ $I_t(a) = 1$ になる。

12. $\Delta_t(a' \mid a)$ が何を表しているか

状態 $s_t = a$ から $s_{t+1} = a'$ への遷移条件は

$$\Delta_t(a' \mid a) = I_t(a) \cdot \delta(a' \mid a) \cdot I_{t+1}(a')$$

で与えられる。
ここで

$$\delta(a' \mid a) = \begin{cases} 1 & \text{ネットワーク上で } a \text{ から } a' \text{ へ接続している} \\ 0 & \text{接続していない} \end{cases}$$

したがって

- $I_t(a) = 1$: いまの状態 a 自体が時間制約のもとで実行可能
- $\delta(a' \mid a) = 1$: 次リンク a' へ移動できる
- $I_{t+1}(a') = 1$: 移動後の状態 a' も次時点で実行可能

の 3 条件がそろったときだけ

$$\Delta_t(a' \mid a) = 1$$

となる。

13. 時間構造化された遷移確率

同様に、時点 t の遷移確率は

$$p_t(a' \mid a) = \frac{\exp\left(\frac{1}{\mu}\left\{v_t(a' \mid a) + \beta V_{t+1}(a')\right\}\right)}{\sum_{a'' \in A_t(a)} \exp\left(\frac{1}{\mu}\left\{v_t(a'' \mid a) + \beta V_{t+1}(a'')\right\}\right)}$$

活動経路

$$\psi = [s_0, \ldots, s_T]$$

の確率は

$$p(\psi) = \prod_{t=0}^{T-1} p_t(a_{t+1} \mid a_t)$$

で与えられる。

14. 時間構造化のログサム

価値関数はさらに

$$V_t(a) = \begin{cases} \mu \ln \sum_{a' \in A} \Delta_t(a' \mid a) \exp\left(\frac{1}{\mu}\left\{v_t(a' \mid a) + \beta V_{t+1}(a')\right\}\right), & t \neq T \text{ and } a \neq d \\ 0, & t = T \text{ or } a = d \end{cases}$$

と書ける。

この形の利点:

- 後ろ向き計算で順に解ける
- 時間導入によりネットワークが有効非巡回となっている
  → ループ問題を避けられる

15. どう解くか

時間構造化 RL では動的計画法で解ける。

1. 初期化: $V_T(a) = 0$
2. 後ろ向き計算: $t = T-1, T-2, \ldots, 0$
3. 各時点で $V_t(a)$ を計算
4. その後で $p_t(a' \mid a)$ を計算

時間構造を導入する意味:

- サイクルを許容しながらも、有効非巡回なので求解が保証される
- 反復計算や逆行列が不要で、帰納法で解ける
- $I_t(a)$ はの設定だけでさまざまな現実制約を導入できる
- 遷移効用を時間に依存させることで時間帯による行動変化を表現できる
- 時間制約は単なる拡張ではなく、標準 RL の計算上の弱点を避ける工夫でもある
- その結果、活動スケジュールや到着可能性まで含むモデルにしやすい

PURC を詳しくみる

Perturbed Utility Route Choice

16. PURC の意義

PURC では

- 経路の選択確率を直接書かないでネットワーク全体のリンクフロー x を直接求める
- 経路空間ではなくリンク空間で最適化する

であるから思想がRLと違う

- RL→逐次選択の確率モデル
- PURC→フロー配分の最適化モデル

PURC を考える意義

- 個人の経路がなくても、リンクフローの情報から扱える
- 経路の重複や相関を、確率の列挙ではなく最適化の形で表しやすい
- 「行動モデル」と「配分モデル」の接続できる

17. PURC の定式化

有向ネットワーク $G = (N, A)$ 上で、
リンクフローベクトル

$$x = (x_a)_{a \in A}$$

を決定変数として、次を解く。

$$\max_{x \geq 0} \left\{ \sum_{a \in A} v_a x_a + G^{\bullet}(x) \right\} \quad \text{s.t. } Ax = b$$

ここで

v_a: リンク a の効用
$G^{\bullet}(x)$: 摂動項
A: ノード・リンク接続行列
b: 起終点需要を表すベクトル

18. フロー保存制約の意味

制約

$$Ax = b$$

は各ノードでのフロー保存を表す。

起点 o: $+1$

終点 d: -1

その他ノード: 0

として（流出を正として）
起点では 1 単位流出
終点では 1 単位流入
中間ノードでは流入 = 流出
の保存そくとなる。

19. Shannon entropy 型の摂動

ロジットモデルと対応する摂動項は

$$G^{\bullet}(x) = -\mu \sum_{a \in A} (x_a \ln x_a - x_a)$$

である。
この項の役割:

- Logit 型と整合的な構造を作る
- フローをエントロピーで分散させる
- (角ばった解を避ける)

ここで μ は分散の強さを調整するパラメータ。

20. ラグランジアン

フロー保存制約に対する双対変数を

$$\lambda = (\lambda_n)_{n \in N}$$

とすると、ラグランジアンは

$$L(x, \lambda) = \sum_{a \in A} v_a x_a + G^{\bullet}(x) + \lambda^{\top}(b - Ax)$$

となる。

21. KKT 条件

内点解 $x_a > 0$ では

$$v_a + \frac{\partial G^\bullet(x)}{\partial x_a} - (A^\top \lambda)_a = 0$$

が成り立つ。
Shannon entropy 型では

$$\frac{\partial G^\bullet(x)}{\partial x_a} = -\mu \ln x_a$$

なので、

$$x_a^* = \exp\left(\frac{v_a - (A^\top \lambda)_a}{\mu}\right)$$

を得る。
線形計画法ではλはshadow praiceとされる

この λ は

- ノードポテンシャル

として解釈できる。

22. PURC の見え方

式

$$x_a^* = \exp\left(\frac{v_a - (A^\top \lambda)_a}{\mu}\right)$$

から分かること:
リンクフローは指数型で表される
効用 v_a が高いほど流れやすい
ノードポテンシャル差 $(A^\top \lambda)_a$ が流れを調整する
RL における価値関数と似た役割を、
PURC では λ が担っている。

23. RL と PURC の違い

RL は

$$p(a \mid k) \propto \exp\left(\frac{v(a \mid k;\theta) + V^d(a)}{\mu}\right)$$

という逐次選択の確率モデル。
一方 PURC は

$$x_a^* = \exp\left(\frac{v_a - (A^\top \lambda)_a}{\mu}\right)$$

というフロー配分の最適化モデル。
違い:

- RL は人がどう順に選ぶかを書く
- PURC は全体としてどう流れるかを書く

したがって PURC を使うメリットは:

- 行動の逐次過程より、観測されるネットワークフローを直接説明したい場面に合う
- RL では表しにくい非IIA(選択肢間の誤差項に相関がある)的なパターンを入れやすい
  (とはいえ、RLもMNLよりは将来の経路を共有しているので多少の相関を許容はしているのでは？)
- 配分問題として解けるので、計算的に整理しやすそう（軽い？）

24. PURC の利点

- 経路を列挙しなくてよい
- 経路確率ではなくリンクフローを直接求められる
- ネットワーク規模が大きくても扱いやすい
- 非IIA的な代替パターンを表しやすい

特にフローデータがあり、個人の完全な経路がないときに有用になり得る。
ただ、途中過程がなく結果だけが出力されるという裏返し

25. RLとPURCの比較

共通点:

- どちらも経路集合の列挙を避けたい
- どちらも指数型の構造を持つ

違い:

- RL は Bellman 方程式で将来価値を再帰的に計算する確率モデル
- PURC は摂動付き最適化と双対変数で全体フローを決めるモデル

見方を変えると

- RL は行動表現のモデル
- PURC は配分表現のモデル

ミニ研究：摂動関数の形状がフローパターンに与える影響

ランダム効用理論とエントロピー最大化の双対性

(RLとPURCの双対性まで)

26. 天下り的に与えられたshannon entopy型の摂動関数はどこから来たのか

宮城(1984)より

本研究の目的は、エントロピータイプの交通統合モデルがランダム効用理論を基礎として誘導される期待最大効用関数とエントロピー最大化の目的関数のの最適値関数は交通余剰という同一概念の異なる表現形式であり、それらの関数から誘導される交通選択公式は同一のものであることを明らかにすることである。

選択肢集合を

$$J = \{1, \ldots, n\}$$

とし、各選択肢の効用を

$$\tilde{u}_j = v_j + \tilde{\varepsilon}_j$$

と書く。
ベクトル記法として

$$V = (v_1, \ldots, v_J) \in \mathbb{R}^J$$

を用いる。

- v_j: 観測可能な確定効用
- $\tilde{\varepsilon}_j$: 観測できないランダム項

本稿が示したいことは、次の2つが同じ構造だという点

1. ランダム効用理論の期待最大効用関数
2. エントロピー最大化の最適値関数

つまり「個人の選択行動」と「集計的な最適配分モデル」が
双対な表現でつながることを示す。

27. Gumbel 仮定を置く

誤差項 $\tilde{\varepsilon}_j$ は独立同分布の Gumbel 分布に従うとする。

$$g(\varepsilon) = \Pr(\tilde{\varepsilon}_j \leq x) = \exp\left[-\exp\{-\alpha(x-\beta)\}\right]$$

ここで

- $\alpha > 0$: スケール
- β: 位置母数

である。

gumbel分布を仮定することは後々非常に大事

- 最大値の分布が閉じた形で計算できる
- 期待最大効用がlogsumになる
- 選択確率がLogit modelの形になる

28. 効用最大値の分布を計算する

各選択肢の効用を

$$M_j := v_j + \tilde{\varepsilon}_j$$

とおく。確率分布関数は

$$F(\boldsymbol{x}) = Pr(\tilde{\boldsymbol{x}} \leq \boldsymbol{x}) = Pr(\tilde{x_1} \leq x_1, \tilde{x_2} \leq x_2, \ldots, \tilde{x_n} \leq x_n)$$

(それぞれの$\tilde{x}$がそれぞれのx_iより小さい確率分布を表す。)

ここで極値の分布について考えると、
任意の$\boldsymbol{x}$(全て同じ値xをとるベクトル)に対して

$$\Pr\left(\max_j M_j \leq x\right) = \Pr(v_j + \tilde{\varepsilon}_j \leq x,\ \forall j) = \prod_j \Pr(\tilde{\varepsilon}_j \leq x - v_j) = F(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{v})$$

が成立する

29. 整理する

Gumbel の CDF を代入すると

$$\Pr(\max_j M_j \leq x) = \prod_j \exp\left[-\exp\{-\alpha(x - v_j - \beta)\}\right]$$

したがって

$$\Pr(\max_j M_j \leq x) = \exp\left[-\sum_j \exp\{-\alpha x + \alpha v_j + \alpha\beta\}\right]$$

さらに

$$\omega(V) := \sum_j e^{\alpha v_j}$$

とおけば

$$\Pr(\max_j M_j \leq x) = \exp\left[-\exp\{-\alpha x + \alpha\beta + \ln \omega(V)\}\right]$$

となる。

30. 最大値の分布も Gumbel 分布になる

前式は

$$\Pr(\max_j M_j \le x) = \exp\left[-\exp\left\{-\alpha\left(x - \frac{\beta}{\alpha} - \frac{1}{\alpha}\ln\omega(V)\right)\right\}\right]$$

と書ける。
これは Gumbel 分布そのものであり、
位置母数だけが

$$\beta^* = \frac{\beta}{\alpha} + \frac{1}{\alpha}\ln\omega(V) = \frac{\beta}{\alpha} + \frac{1}{\alpha}\ln\sum_j e^{\alpha v_j}$$

にずれた形になっている。

- $\max_j(v_j + \tilde{\varepsilon}_j)$ は再び Gumbel分布に従う
- その位置母数に logsum が入る

直感的に正しそう

- 選択肢の効用が高いほど、最大効用も高くなる
- 選択肢が増えるほど、最大効用も高くなる

31. 効用の最大値の期待値

Gumbel 分布の期待値は

$$E[M] = \beta^* + \frac{\gamma}{\alpha}$$

である。ここで γ は Euler 定数。

したがって

$$E\left[\max_j (v_j + \tilde{\varepsilon}_j)\right] = \frac{\beta}{\alpha} + \frac{\gamma}{\alpha} + \frac{1}{\alpha} \ln \sum_j e^{\alpha v_j}$$

である。

よって、定数項を除けば

$$S(V) := E\left[\max_j \tilde{u}_j\right] = \frac{1}{\alpha} \ln \sum_j e^{\alpha v_j} + \mathrm{const}$$

となる。

これで選択確率が変わらないことは先ほどの性質よりわかっている

これを満足度関数と定義する。

32. 満足度関数の性質

$$S(V) = \frac{1}{\alpha} \ln \sum_j e^{\alpha v_j}$$

は以下の性質を持つ。

1. 期待紅葉一定増分に対する不変性

$$S(V + a) = S(V) + a$$

証明

$$\mathbb{E}\left[\max_j(v_j + a + \varepsilon_j)\right] = \mathbb{E}\left[\max_j(v_j + \varepsilon_j)\right] + a$$

2. 勾配が選択確率になる

$$\frac{\partial S(V)}{\partial v_j} = \frac{e^{\alpha v_j}}{\sum_k e^{\alpha v_k}} = p_j$$

3. 凸関数である

$S(V)$はVに関して凸関数

この 2 番目が特に重要で、
満足度関数を微分するだけでLogitの選択確率が出る。

33. なぜ勾配が選択確率になるのか

最適反応した後の効用の期待値
満足度関数を

$$S(V) = \mathbb{E}[M]$$

と定義しているので、
確率分布の積分表示を用いれば

$$S(V) = \int_{-\infty}^{\infty} x \, dF(x - V)$$

と期待値の形で書ける。
よって

$$P_j = Pr(u_j > u_k, \forall k \neq j) = \int_{-\infty}^{\infty} F_j(x - V)dx = \frac{\partial S(V)}{\partial v_j}$$

($F_j(x) = \frac{\partial F(x)}{\partial x_j}$と定義する。これは$x_j$方向への確率密度関数そのもの)

34. $\partial S/\partial v_j = P_j$ の解釈

$$\frac{\partial S(V)}{\partial v_j} = P_j$$

は、選択肢の効用を少し上げたとき、全体の満足度がどれだけ増えるか
が、ちょうど選択確率 P_j に一致することを意味する。
感覚的な説明だと
最大値の期待値は、v_jが最大だった時δだけ増やすと最大値がそのままδだけ増える

- よく選ばれる選択肢の効用を上げれば、満足度は大きく増える
- ほとんど選ばれない選択肢の効用を上げても、満足度への影響は小さい

35. なぜ勾配が選択確率になるのか

$$S(V) = \frac{1}{\alpha}\ln\omega(V), \qquad \omega(V) = \sum_j e^{\alpha v_j}$$

だから、

$$\frac{\partial S(V)}{\partial v_j} = \frac{1}{\alpha}\frac{1}{\omega(V)}\frac{\partial \omega(V)}{\partial v_j}$$

であり、

$$\frac{\partial \omega(V)}{\partial v_j} = \alpha e^{\alpha v_j}$$

なので

$$\frac{\partial S(V)}{\partial v_j} = \frac{e^{\alpha v_j}}{\sum_k e^{\alpha v_k}}$$

となる。
右辺はそのまま Logit 確率である。

36. 共役関数とエントロピー最大化

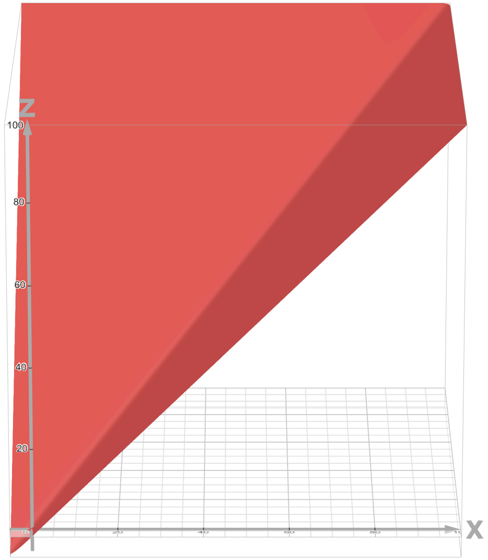
ようやく下準備が終わり、証明を進めていく。
ロジットモデルにおける満足度関数

$$S(V) = \frac{1}{\alpha} \log \sum_{j=1}^{J} e^{\alpha v_j}$$

が、双対側では

$$S^*(p) = \frac{1}{\alpha} \sum_{j=1}^{J} p_j \log p_j$$

という負の Shannon エントロピーになることを、凸解析で整理する



以下証明

今回は統合ロジットではなくロジットについて考える。

$S(v)$ のエピグラフ $\langle S, V \rangle$ を次のように定義する。

$$\langle S, V \rangle = \{(z, u) \mid u \in V,\ S(u) \leq z\}$$

つまり

$u \in V,\ S(u) \leq z$ を満たす (z, u)の集合を$\langle S, V \rangle$とかく

共役関数を導くには

$$S(v) = \frac{1}{\alpha} \ln \sum_j \exp(\alpha v_j)$$

は閉真凸関数でなければならない。

真凸関数：

$$\exists x,\ f(x) < +\infty \quad \cap \quad \forall x,\ f(x) > -\infty$$

閉である：

$$\forall \alpha \in \mathbb{R},\ \{x \in \mathrm{dom} f \mid f(x) \leq \alpha\}$$

が閉集合であること、つまり端っこも含んでいる

ここで共役集合は

$$V' = \{v' \mid \sup(v' \cdot v - S(v)) < \infty\}$$

つまり
$\langle v', v\rangle - S(v)$が有界となる$v'$の集合
共役関数の定義は

$$S'(V') = \sup_v \left(\langle v', v\rangle - S(v)\right)$$

なので、$\operatorname{dom} S' = \{u' \mid S'(u') < \infty\}$として、共役関数の切片が$\infty$に飛ばない範囲を定義域にしているということ。
このとき $\langle S', V'\rangle$ を共役双対と呼び、

$$\langle S', V'\rangle = D\langle S, V\rangle$$

と表記する。
このとき、

$$S'(V') \geq \langle v', v\rangle - S(V)$$

が直ちに成り立ち、

$$S(V) \geq \langle v', v\rangle - S'(V')$$

が全てのxで成り立ち、等号も成立。つまり、多次元関数$S(V)$に接する平面があるということ。
接する時を考えると、v'_jは

$$v'_j = \frac{\partial}{\partial v_j} S(V) = \frac{\partial}{\partial v_j} \int_{-\infty}^{\infty} x \, dF(x - V)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} x \, d\left(\frac{\partial F}{\partial v_j}\right)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} x \, d\left(\frac{\partial F(x-V)}{\partial (x-v_j)} \cdot \frac{\partial (x-v_j)}{\partial v_j}\right)$$

$$= -\int_{-\infty}^{\infty} x \, dF_j(x-v)$$

部分積分：

$\int u \, dr = ur - \int r \, du$より、

$$= -\left([xF_j(x-V)]_{-\infty}^{\infty} - \int F_j(x-V)_{-\infty}^{\infty} \, dx\right)$$

（ここで$F_j(x-V) = \frac{\partial F(x-V)}{\partial (x-v_j)}$なので、$f_j(x-V)$みたいなものという認識。）

$$= C_j + P_j(v)$$

（C_j は定数）

今、$S(V+\alpha)$ を V 周りでテイラー展開：

$$S(V+\alpha) = S(V) + \frac{\partial S(V)}{\partial V}\alpha$$

一方で

$$S(V+\alpha) = S(V) + C$$

より、

$$\frac{\partial S(V)}{\partial V} = 1$$

したがって

$$\sum_j \frac{\partial S(V)}{\partial v_j} = 1$$

であることがわかる。

今、

$$v'_j = P_j(v) + C_j$$

で、v'$_j$とは$\frac{\partial S(V)}{\partial v_j}$であったので、

$$\frac{\partial S(V)}{\partial v_j} = P_j(V) + C_j$$

故に、

$$\sum_j \frac{\partial S(V)}{\partial v_j} = \sum_j P_j(V) + \sum_j C_j$$

よって

$$C_j = 0$$

同一性の仮定を使っている。
（確率密度がガンベル分布なので$x \to \infty$ で $xF_j(x-v) \to 0$、したがって $C_j = 0$。という求め方もできそう。）

このとき

$$S'(v') = \langle v', v \rangle - S(v)$$

となる。

さて

$$S(v) = \frac{1}{\alpha} \ln W(v)$$

(これは確かに閉真凸関数である)より

$$S'(v') = \sup \left(< v' \cdot v > - \frac{1}{\alpha} \ln W(v) \right)$$

先ほどと同様にv'_jをv_jの極値解と解釈できるので、

$$v'_j = P_j(v) = \frac{\exp(\alpha v_j)}{\sum_i \exp(\alpha v_i)}$$

したがって

$$\begin{aligned} S'(V') &= \sum_j \frac{\exp(\alpha v_j)}{\sum_i \exp(\alpha v_i)} v_j - \frac{1}{\alpha} \ln \sum_i \exp(\alpha v_i) \\ &= \sum_j P_j v_j - \frac{1}{\alpha} \ln \left(\sum_i \exp(\alpha v_i) \right) \end{aligned}$$

ここで

$$\frac{e^{\alpha v_j}}{\sum_i e^{\alpha v_i}} = P_j \quad \text{より} \quad e^{\alpha v_j} = P_j \sum_i e^{\alpha v_i}$$

natural log をとって

$$\begin{aligned} \alpha v_j &= \ln P_j + \ln \sum_i e^{\alpha v_i} \\ v_j &= \frac{1}{\alpha} \ln P_j + \frac{1}{\alpha} \ln \sum_i e^{\alpha v_i} \end{aligned}$$

を用いると

$$
\begin{aligned}
&= \sum_j P_j \left(\frac{1}{\alpha} \ln P_j + \frac{1}{\alpha} \ln \sum_i e^{\alpha v_i} \right) - \frac{1}{\alpha} \ln \sum_j \exp(\alpha v_j) \\
&= \frac{1}{\alpha} \sum_j P_j \ln P_j + \frac{1}{\alpha} \left(\sum_j P_j \right) \ln \sum_i e^{\alpha v_i} - \frac{1}{\alpha} \ln \sum_j \exp(\alpha v_j) \\
&= \frac{1}{\alpha} \sum_j P_j \ln P_j
\end{aligned}
$$

$$
\left(\sum_j P_j = 1 \text{を用いた。} \right)
$$

よって

$$
S'(p) = S'(V') = \frac{1}{\alpha} \sum_j P_j \ln P_j
$$

であることがわかる。

Fenchel の定理：

$\langle S, V \rangle$ が閉じた凸集合ならば、

$$\langle S', V' \rangle = D\langle S, V \rangle$$

も閉凸集合となり、

$$D\langle S', V' \rangle = \langle S, V \rangle$$

が成立する。

これを用いて

$$
\begin{aligned}
S(V) &= \sup\{v \cdot v' - S(v')\} \\
&= \sup\left[v \cdot v' - \frac{1}{\alpha}\sum_j P_j \ln P_j\right]
\end{aligned}
$$

したがって

$$
S(v) = \max_p \left[\sum_j P_j v_j - \frac{1}{\alpha}\sum_j P_j \ln P_j \;\middle|\; \sum_j P_j = 1\right]
$$

エントロピー最大化の問題が出てくることが証明できた。

厳密には、

$$
\begin{aligned}
S(P') &= \sup\left(\langle P, P'\rangle - S'(P)\right) \\
&= \max\left(\sum_j P_j P'_j - \frac{1}{\alpha}\sum_j P_j \ln P_j \,\middle|\, \sum_j P_j = 1\right)
\end{aligned}
$$

ここでv'_jをv_jの極値解と解釈したのと同じように$P'_j = v_j$となるので

$$
S(v) = \max\left(\sum_j P_j v_j - \frac{1}{\alpha}\sum_j P_j \ln P_j \,\middle|\, \sum_j P_j = 1\right)
$$

(Q.E.D)

37. 補足：α の役割

$$S(V) = \frac{1}{\alpha} \log \sum_j e^{\alpha v_j}$$

において α は鋭さのパラメータである。
双対側では

$$\frac{1}{\alpha} H(p)$$

の係数として現れる。

- α が大きい
  →エントロピー項の重みが小さいので、効用に従う決定的な選択が多くなる
- α が小さい
  →エントロピー項の重みが大きいので、選択がよりランダムになる

したがって α はノイズの逆数と解釈できる。(つまり分散の逆数ということ)

38. 補足：満足度関数の解釈

政策・交通モデル的な解釈

例えば交通手段や経路選択の文脈では、v_j は

- 所要時間
- 金銭費用
- 快適性
- 混雑度

などで決まる。
このとき
$S(V) = E\left[\max_j \tilde{u}_j\right] = \frac{1}{\alpha} \ln \sum_j e^{\alpha v_j} + \text{const}$
は
利用者が実際に選んだ結果として得られる最大効用の期待値
である。
これは単に 1 本の経路の効用を上げるのではなく、選択集合全体の設計を改善するということになる。
この量は
個々の選択肢をすべて含んだ総合価値を表している。

特に代替肢が増えたり、複数の有力な選択肢が現れたりすると、$\max_j v_j$ が変わらなくても $S(V)$ は増加しうる。
この意味で $S(V)$ は選択肢の数と人間の柔軟性も評価できているように感じる。

39. 結論

以上より、ロジットモデルは単なる確率効用モデルではなく、

期待効用最大化と Shannon エントロピー最大化の双対性

の上に成り立つモデルであることが分かる。元の側では $S(V)$ は期待最大効用であり、双対側ではその共役はエントロピーであり、勾配は選択確率に一致し、最終的にロジット確率はエントロピー正則化された最適化問題の解となる。
この構造が、ランダム効用理論とエントロピー最大化理論の双対性と呼ばれる所以である。

Fosgreau(2022)では、以上の議論をRLとPURCの双対性として改めて展開することで、リンクフローから簡単に（フロー配分を直接に）経路選択を説明できることを示している。
リンクフローとRecurisive logitが繋がっているのは、
リンクフロー ⇆ 逐次選択
という各リンクについて考えているという点で納得いく気がしてくる。

40. これ以外の摂動項の形は許されないのか

任意のRUMモデルはあるGEM(一般化エントロピーモデル)として得ることができる。らしい
たとえば、Nested logitの場合、

$$G^*(q) = -\sum_{j \in J} q_j \ln\left(q_j^{\mu} Q_{g(j)}^{1-\mu}\right), \qquad Q_g := \sum_{i \in g} q_i$$

- q_j：選択肢 j の確率
- $g(j)$：j が属するネスト
- Q_g：ネスト g の総確率
- $\mu \in (0, 1]$：ネスト内の独立性パラメータ

とかけ、$\ln\left(q_j^{\mu} Q_{g(j)}^{1-\mu}\right) = \mu \ln q_j + (1-\mu) \ln Q_{g(j)}$ なので

$$G^*(q) = -\mu \sum_j q_j \ln q_j - (1-\mu) \sum_j q_j \ln Q_{g(j)}$$

$\sum_j q_j \ln Q_{g(j)} = \sum_g Q_g \ln Q_g$　なので

$$G^*(q) = -\mu \sum_j q_j \ln q_j - (1-\mu) \sum_g Q_g \ln Q_g$$

40. これ以外の摂動項の形は許されないのか

確率が分解されて

$$q_j = Q_{g(j)} \cdot q_{j|g(j)}$$

- $Q_{g(j)}$：ネスト選択でjが所属するネストgが選ばれる確率($= Q_g$)
- $q_{j|g(j)}$：ネスト内選択でjが選ばれる確率

$$G^*(q) = -\mu \sum_j q_j \ln q_j - (1-\mu) \sum_g Q_g \ln Q_g$$

第1項：**選択肢レベルのエントロピー**
第2項：**ネストレベルのエントロピー**

$\mu = 1$
→ 通常の logit（Shannon エントロピー）

$\mu < 1$
→ ネスト構造が効く（相関あり）
同じネスト内だと強く置き換わり、異なるネストだと弱く置き換わるということ

個別のばらつきとグループのばらつきを同時に評価するエントロピー
→ 非IIA(相関あり)の選択モデルを最適化（フロー配分）で表現できる

40. これ以外の摂動項の形は許されないのか

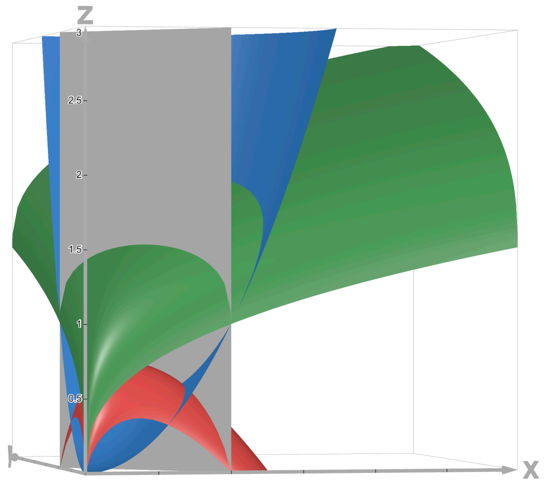
摂動項$G^\bullet(x) = \sum_j p^2$を考えてみる。$\sum_j p_j = 1$のもとで

$\sum_j -p_j \ln p_j$が $p = \frac{1}{n}$で最大値を取るのと違って、$\sum_j p_j^2$は$p = 0, 1$で最大値を取るので、
選択肢の確率が集中する(p=0,1に偏るのを助長する)ような効果が強く働く。これはつまりPURCだと、効用が最大のリンクにばかり人が流れ込む（RLの誤差項がない）ような状態になっていくということである。

一方、$\sum_j p_j^a$（$a < 1$）を考えるとラグランジュ乗数法で解くと、最大値を与えるpは$p = \frac{1}{n}$であることがわかる。

摂動項$G^\bullet(x) = \sum_j -p^2$を考えても$p = \frac{1}{n}$で最大値を取る。

では分布も同じなのか？というとそんなことはない。
角度の急峻さでどれくらい真ん中に寄ったほうが最大化されるかは異なってくる。



21. $-x^2$を摂動項にしてみる

内点解 $x_a > 0$ では

$$v_a + \frac{\partial G^\bullet(x)}{\partial x_a} - (A^\top \lambda)_a = 0$$

が成り立つ。
Shannon entropy 型では

$$\frac{\partial G^\bullet(x)}{\partial x_a} = -2x$$

なので、

$$x_a^* = \frac{1}{2}\left(\frac{v_a - (A^\top \lambda)_a}{\mu}\right)$$

を得る。
効用差が2倍ならフローの差も大体2倍になる。
2回微分（曲率）を考えるとわかるように、shannon entropyだとxが大きいほど曲率が平らになっていく、$F''(x) = \frac{1}{1+x}$。故に小さい流量にも意味を持たせやすくなっている。対して$-x^2$だとxの値によらず曲率が一定。故になだらかな分散となって非常に平均的な挙動を示しがちになる。

41. PURCモデルのリンク有向性について考える

有向リンク：$a = (i \to j)$ と $\bar{a} = (j \to i)$ を別リンクとして扱う

ODが1つのときは、流れの向きがほぼ一方向なので、無向でも大きな問題が見えにくい。ただし複数ODになると、同じ物理区間を逆方向に使う需要が生じる。すると、リンクフローのみを扱うPURCモデルでは問題が生じる。

$$x = \sum_{r \in \mathcal{OD}} x^{(r)}$$

について、有向なら各ODのフローがどちら向きかを保持したまま足し合わせられるが、無向だと逆方向フローが同じ変数に混ざってしまうからである。
混雑、（坂道などによる）上下の所要時間の差、一方通行などを考えるには、リンクを有向にすることが不可欠である。

これを考えると、ODを増やすことがPURCの精度向上につながることは直感的で、ODを増やすことで様々な向きや流れに対する複数の方向へのパラメータを識別することができるからである。

42. IIA性の検証

IIA性を検証するときに見たいのは、誤差項どうしの相関が低く、代替関係が全体に一様に広がっているかどうかである。ここで対比したい(非IIA性)のが**強い代替性**であり、これはある選択肢の効用が上がったときに、他のすべての選択肢から均等に需要を奪うのではなく、**特定の選択肢から主に需要を奪う**という性質を指す。例えば交通でいえば、同じ分岐点から出る 2 本の経路や、ほぼ同じ役割を果たすリンクの間では、片方の魅力が上がるともう片方の利用が大きく減る。このような局所的で偏った置き換わり方が、強い代替性である。

43. ロジットではなぜIIA性が強いのか

多項ロジットでは選択確率は

$$P_i = \frac{e^{v_i}}{\sum_j e^{v_j}}$$

であり、交差効果は

$$\frac{\partial P_i}{\partial v_j} = -P_i P_j \qquad (i \neq j)$$

となる。

この式では、代替の強さは **確率の大きさだけ** で決まり、「この 2 つは特に似ている」とか「この 2 つは同じ枝で競合している」といった**局所的な競争関係**は入っていない。したがって、ある選択肢の魅力が上がったときの影響は、基本的には全体へ一様な形で広がる。これがロジットで IIA 性が強く現れる理由である。

44. PURC の基本問題

PURC ではリンクフロー $x = (x_a)_a$ を

$$\max_{x \geq 0,\ Ax = b} \left\{ \sum_a v_a x_a - \sum_a F(x_a) \right\}$$

で決める。
PURC の本質は、**各リンクのフローが独立に決まらない**ことである。その理由は、非負制約だけでなく

$$Ax = b$$

というフロー保存制約があるからである。つまり、あるリンクの流量を増やすと、同じノードから出る他リンクや、同じ OD の到達に関わる別リンクにも必ず影響が及ぶ。リンクごとの選択はネットワーク全体の整合条件の中で決まるため、1 本だけを独立に増減させることはできない。
リンクの魅力が上がれば、そのリンクにはより多く流れようとする。しかし同時に、ネットワーク保存制約を満たさなければならないので、他リンクとの整合をとるように λ が調整される。結果として各リンクフローは互いに結びつき、あるリンク j の効用 u_j を上げると、そのリンクのフローは増えようとする一方で、保存制約 $Ax = b$ を守るために関係する他リンクのフローが減らされる、という構造になる。

48. 摂動関数 F の役割

強い代替性の**根本原因**は制約 $Ax = b$ にある。
ただし、摂動関数 F は、反応がどれだけ滑らかか、フローがどれだけ分散・集中するか、代替性がどれだけ状態依存になるかを決める。
したがって、代替性の「存在」そのものは制約が生み出しており、代替性の「形」や現れ方は F が決めている、と整理できる。

49.今後の展望

- 非IIA性を表現するためのRL→NRLへの拡張を追えていない。
- ガンベル分布の期待値の証明を追えていない。
- 統合ロジットモデルへの拡張を追えていない。
- 具体的な計算からアプローチすることができていない。
- 共役関数が真閉凸関数でなくてはならない理由に芯から納得していない。

50.所感

- RLの方が計算が重いのは直感的
- Fossgreauという名前はどの文献にあたっても出てくる

ご清聴ありがとうございました。

付録

ログサム分布の証明

(先ほども載せていますが、単体で見たい人のために再掲します)

49. 最大効用の分布関数を計算する

任意の x に対して

$$\Pr(M \leq x) = \Pr(v_j + \tilde{\varepsilon}_j \leq x,\ \forall j)$$

独立性より

$$\Pr(M \leq x) = \prod_j \Pr(\tilde{\varepsilon}_j \leq x - v_j) = \prod_j F_j(x - v_j)$$

ここへ Gumbel の CDF を代入すると

$$\begin{aligned} \Pr(M \leq x) &= \prod_j \exp\left[-\exp\{-\alpha(x - v_j - \beta)\}\right] \\ &= \exp\left[-\sum_j \exp\{-\alpha x + \alpha v_j + \alpha\beta\}\right] \end{aligned}$$

さらに

$$\omega(V) := \sum_j e^{\alpha v_j}$$

とおけば

$$\Pr(M \leq x) = \exp\left[-\exp\{-\alpha x + \alpha\beta + \ln\omega(V)\}\right]$$

となる。

50. 位置母数に logsum が入る

前式は

$$\Pr(M \leq x) = \exp\left[-\exp\left\{-\alpha\left(x - \beta - \frac{1}{\alpha}\ln\omega(V)\right)\right\}\right]$$

と書ける。

したがって M は再び Gumbel 分布で、
位置母数は

$$\beta^* = \beta + \frac{1}{\alpha}\ln\omega(V) = \beta + \frac{1}{\alpha}\ln\sum_j e^{\alpha v_j}$$

になる。
つまり logsum は
最大効用の分布を決める位置母数として現れる。

51. 期待値を取ると logsum になる

Gumbel 分布

$$\exp\left[-\exp\{-\alpha(x-\beta^*)\}\right]$$

の期待値は

$$E[M] = \beta^* + \frac{\gamma}{\alpha}$$

である。ここで γ は Euler 定数。
よって

$$E\left[\max_j(v_j+\tilde{\varepsilon}_j)\right] = \beta + \frac{\gamma}{\alpha} + \frac{1}{\alpha}\ln\sum_j e^{\alpha v_j}$$

を得る。

付録

双対性(手書き)

（上スライドよりベクトル表記などは正確だと思われる）

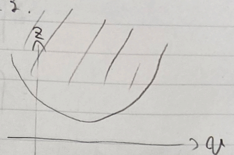
Date 4.16

今回は統合ロジットではなくロジットについて考える。

$S(v)$のエピグラフ$\langle S,V\rangle$を次のように定義する

$$\langle S,V\rangle = \{(z,u) \mid u\in V,\ S(u)\leq z\}$$

つまり



$u\in V,\ S(u)\leq z$を満たす(z,u)の集合を$\langle S,V\rangle$とかく。

$S(v) = \frac{1}{\alpha}\ln\sum_j \exp(\alpha v_j)$ は閉真凸関数でなくてはならない

真凸関数 → 「$\exists x,\ f(x)<+\infty$」∩「$\forall x,\ f(x)>-\infty$」

閉である → 各$\alpha\in\mathbb{R}$に対して$\{x\in \mathrm{dom}\, f \mid f(x)\leq\alpha\}$が閉集合であること。

共役集合は

$V' = \{u'\in V' \mid \sup(u'\cdot u - S(v)) < \infty\}$ ← 接線が∞にならないような集合 切片

つまり$\langle u',u\rangle - S(u)$が有限となるような$u'$の集合を$V'$とする。

これは共役関数の定義

$S'(v') = \sup_u(\langle u',u\rangle - S(v))$ をもとに。

何が嬉しい?

$\mathrm{dom}\,S' = \{u' \mid S'(u')<\infty\}$ とし、共役関数が∞にとばない範囲を定義域としているということ(なのか…?)

このとき、$\langle S',V'\rangle$を共役双対と呼び、$\langle S',V'\rangle = D(S,V)$と表記する。

このとき、

$S'(v) \geq \langle u',u\rangle - S(v)$ が直ちに成り立ち。

$S(v) \geq \langle u',u\rangle - S'(v')$

が全てのxで成り立ち、等号も成立。多次元関数$S(v)$に接する平面がある。

接するときを考えると、u'_jは

$$u'_j = \frac{\partial}{\partial v_j}S(v) = \frac{\partial}{\partial v_j}\int_{-\infty}^{\infty} x\, dF(x-v)$$

次ページ

$$= \int_{-\infty}^{\infty} x\, d\frac{\partial F}{\partial v_j}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} x\, d\frac{\partial F(x-v)}{\partial(x-v_j)}\cdot\frac{\partial(x-v_j)}{\partial v_j}$$

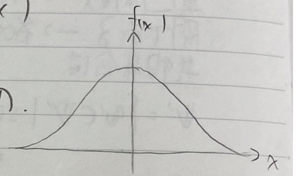
$$= -\int_{-\infty}^{\infty} x\, dF_j(x-v)$$

$F(x-v)$は最大効用がx以下の確率であった。

部分積分 $\int u\,dv = uv - \int v\,du$ より。

$$= -\left([xF_j(x-v)]_{-\infty}^{\infty} - \int F_j(x-v)\,dx\right)$$

今、$F_j(x-v)$は$\frac{\partial F(x-v)}{\partial(x-v_j)}$なので$f_j(x-v)$みたいなもの。



$$= C_j + P_j(v) \quad (C_j\text{は定数})$$

今、$S(v+a)$をv周りでテイラー展開して　$(f(x)=f(a)+f'(a)(x-a))$ ← 誤差の原因?

$$S(v+a) = S(v) + \frac{\partial S(v)}{\partial v}(v+a-v)$$
$$= S(v) + \frac{\partial S(v)}{\partial v}\cdot a$$

$S(v+a) = S(v)+a$ なので、$S'(v)\,a = a$ $\therefore \frac{\partial S(v)}{\partial v} = 1$

つまり $\sum_j \frac{\partial S(v)}{\partial v_j} = 1$ が導ける。

今、

$u'_j = P_j(v) + C_j$ で、u'_jとは$\frac{\partial S(v)}{\partial v_j}$であったので。

$$\frac{\partial S(v)}{\partial v_j} = P_j(v) + C_j$$

$$\sum\frac{\partial S(v)}{\partial v_j} = \sum P_j(v) + \sum C_j$$

よって $C_j = 0$

Date 4.17

(密度関数ががンベル分布なので $x \to \infty$ で $x f_j(x-v) \to 0$ で)
$C_j = 0$.

この時. $S'(v') = \langle v', u \rangle - S(v)$ となる.

さて、今. $S(v) = \frac{1}{\alpha} \ln W(v)$ であったので

$S'(v') = \sup[u' \cdot u - \frac{1}{\alpha} \ln W(v)]$ を考えてみよう (閉真凸関数)

先程と同様に v_j' を v_j の極値解と解釈できる.

$$v_j' = P_j(v) = \frac{\exp(\alpha v_j)}{\sum \exp(\alpha v_i)}$$

よって.

$$S'(v') = S'(P) = \left\langle \frac{\exp(\alpha v_j)}{\sum \exp(\alpha v_i)}, v \right\rangle - \frac{1}{\alpha} \ln \sum \exp(\alpha v_i)$$

$$= \sum \frac{\exp(\alpha v_j)}{\sum \exp(\alpha v_i)} v_j - \frac{1}{\alpha} \ln \sum \exp(\alpha v_i)$$

$$\cancel{= \sum P_j v_j - \frac{1}{\alpha} \ln \left(\frac{\sum \exp(\alpha v_i)}{\exp(\alpha v_j)} \exp(\alpha v_j) \right)}$$

$$\cancel{= \sum P_j v_j - \frac{1}{\alpha} \ln \left(\frac{\exp(\alpha v_j)}{P_j} \right)}$$

$$\cancel{= \sum P_j v_j + \frac{1}{\alpha} \ln P_j - \frac{1}{\alpha} \alpha v_j}$$

$$= \sum P_j v_j - \frac{1}{\alpha} \ln \sum \exp(\alpha v_j)$$

$\frac{e^{\alpha v_j}}{\sum e^{\alpha v_i}} = P_j$ より $e^{\alpha v_j} = P_j \cdot \sum e^{\alpha v_i}$

natural logをとって $\alpha v_j = \ln P_j + \ln \sum e^{\alpha v_i}$

$$v_j = \frac{1}{\alpha} \ln P_j + \frac{1}{\alpha} \ln \sum e^{\alpha v_i}$$

$$= \sum P_j \left(\frac{1}{\alpha} \ln P_j + \frac{1}{\alpha} \ln \sum e^{\alpha v_i} \right) - \frac{1}{\alpha} \ln \sum \exp(\alpha v_j)$$

$$= \frac{1}{\alpha} \sum P_j \ln P_j + \frac{1}{\alpha} \Big(\underbrace{\sum P_j}_{=1} \ln \sum e^{\alpha v_i} \Big) - \frac{1}{\alpha} \ln \sum \exp(\alpha v_j)$$

$$= \frac{1}{\alpha} \sum P_j \ln P_j$$

よって. $\underset{S'(P)}{S'(v')} = \frac{1}{\alpha} \sum P_j \ln P_j$ であることがわかる.

Fenchelの定理

$\langle S, v \rangle$ が閉じた凸集合ならば
そのとき共役双対 $\langle S', v' \rangle = D\langle S, v \rangle$ は $v' \neq \emptyset$ を持ち、
閉じた凸集合を構成する。さらに、$D\langle S', v' \rangle = \langle S, v \rangle$ が成立する

これを用いて、$D\langle S', v' \rangle = \langle S, v \rangle$ より

$$S(v) = \sup[u \cdot u' - S(v')]$$

$$= \sup[u' u - \frac{1}{\alpha} \sum P_j \ln P_j]$$

よって. $S(v) = \max_p \Big[\sum P_j v_j - \underbrace{\frac{1}{\alpha} \sum P_j \ln P_j}_{エントロピー最大化} \Big]$

$D\langle S', P \rangle = \langle S, P' \rangle$

$S(P) = \sup(\langle P', P \rangle - S'(P))$

$$= \max_p \left(\sum_j P_j P_j' - \frac{1}{\alpha} \sum P_j \ln P_j \;\middle|\; \sum P_j = 1 \right)$$

v_j' を v_j の極値解と解釈したのと同じように $P_j' = v_j$ となるので

$$S(v) = \max_p \left(\sum_j P_j v_j - \frac{1}{\alpha} \sum P_j \ln P_j \;\middle|\; \sum P_j = 1 \right)$$

エントロピー最大化 ■