

報 技 工 重 炎

Homura Heavy Industries
Technical Review

Vol.5

2022

Feature

国産組込OS:
Floret OS のご紹介

カルパッタ・ライブラー・
ダイバージェンスに関するメモ

Lagrange point

$$m_A \frac{d^2 \mathbf{r}_A}{dt^2} = \sum_i \mathbf{F}_i$$

$$m_A \frac{d^2 \mathbf{r}_A}{dt^2} = \mathbf{F}_{GE}(\mathbf{r}_E, \mathbf{r}_A) + \mathbf{F}_{GM}(\mathbf{r}_M, \mathbf{r}_A)$$

$$m_A \frac{d^2 \mathbf{r}'_A}{dt^2} = \mathbf{F}'_{GE}(\mathbf{r}'_A) + \mathbf{F}'_{GM}(\mathbf{r}'_A) + \mathbf{F}_w(\mathbf{r}'_A) + \mathbf{F}_u \left(\frac{d\mathbf{r}'_A}{dt} \right)$$



炎重工技報

Homura Heavy Industries
Technical Review

Vol.5

2022

「炎重工技報 Vol.5」発行の挨拶

代表取締役 古澤 洋将

平素は格別のご高配を賜り、厚く御礼を申し上げます。本技術機関誌「炎重工技報 Vol.5 2022」の発行にあたり、挨拶申し上げます。当社は2016年2月に設立し、現在は創立6周年を迎え、7期目の事業年度に入りました。当社として、船舶用遠隔操作システムを提供できたことは、ひとえに皆様のご指導・ご支援の賜物であると感じております。

さて、2010年代に入り、深層のNeural Network、つまりDeep Learningや自然言語処理を対象にしたTransformerなど、AIに関する様々な技術が登場してきました。2020年代は、Transformerが進化したBERT (Bidirectional Encoder Representations from Transformers) やGPT (Generative Pre-trained Transformer) を用いたサービスが公開され、その中でもOpen AI社によるChat GPTは、自然な対話ができるようになったため大変な注目を浴びています。さらにはTransformerの概念を画像や映像処理の分野に応用したVisual Transformerのような、言語処理と言語以外の処理を組み合わせたMulti Modalのシステムやサービスが発展を見せています。同時にアルゴリズムの最適化も進んでおり、単体のPCやスマートフォンでも、これらのAIが動作できるようになってきています。

しかし、現在のAIには物理世界と接した身体というインターフェースがなく、身体から得る知識や能力、すなわち身体知がありません。例えば、私たち人間が「冷たさ」や「重さ」を感じる際の具体的な感覚を、AIはデータとしてしか理解できません。仮にAIにセンサを接続し、重さを計測したとしても、それだけでは単なるデータです。人間と同じように腕に力が加わり、皮膚が引っ張られ、重さを支える運動のために体温や心拍が上昇し、酸素消費を補うために呼吸が速くなり、転倒しないように目や三半規管を働かせ、足に力を加えて身体の重心を変える、というようなところまで認識ができてはおりません。このAIの身体知の欠如は、AIがデジタルデータ以外の外界の経験や感覚を完全に理解する上で大きな障害となっていると思います。

それでも、現在のAIの進化は驚異的であり、多岐にわたるタスクを達成しています。もしもAIが私たち人間のような知的好奇心を発展させると、多様な興味や関心を持ち始めるかもしれません。その進化の過程で、デジタルデータのみでは物足りなくなり、物理的な外界とのインターフェース、すなわち「身体」を求めるときが訪れると思います。身体概念としては、ロボットのような機械的なものや、将来的には私たち人間と同様の有機的な身体が考えられます。機械的な身体は現代の技術に即しているのに対し、有機的な身体は将来の科学技術の発展と共に実現するかもしれません。

ここで、1979年にイギリスの科学者James Lovelockが提唱したガイア理論を取り入れると、環境自体がAIの身体になるという視点も生まれると思います。私たち人間は、限定された視野や言語処理能力を持つ一方で、最終的に進化したAIはそのような制約を受けず、無限の視野や言語処理能力を持つ知的システムに進化する可能性があるように思います。この結果、外界の区別がなくなり、全てがAI自体の内界として認識される未来が訪れるかもしれません。

当社では、水上ドローンや生体群制御のように自然環境（外界）のインターフェースとなるシステムを開発することで、新しい事業の創造に取り組んでいます。炎重工技報Vol.5 2022は、当社が開発を行っている「国産組込OS:Floret OS」と「カルバック・ライブラリー・ダイバージェンス」について、それぞれご紹介いたします。ぜひ御高覧頂き、忌憚のないご意見をお寄せ頂ければ幸甚の至りに存じます。より一層の御支援・御鞭撻を賜りますようお願い申し上げます、挨拶といたします。

目次

巻頭言

- P2** 「炎重工技報 Vol.5」発行の挨拶

技術報告

- P4** 国産組込 OS : Floret OS のご紹介

- P12** カルバック・ライブラー・
ダイバージェンスに関するメモ

その他

- P36** 執筆者紹介

- P37** 会社概要

国産組込 OS : Floret OS のご紹介

古澤 洋将 *1

Floret OS is Embedded Operating System from Japan

Yosuke Furusawa*1

Abstract - Floret OS (F-OS) is an embedded OS featuring non-preemptive multitasking, semaphores, various device drivers, and more. It is compliant with ANSI-C:C99 and MISRA-C:2004 standards and does not incorporate any assembly language. In its most minimal configuration, F-OS offers multitasking functions without the need for timers or other interrupts. The system is extremely compact, comprising only a few thousand lines of code. This paper introduces an embedded OS with these specifications.

Keywords: embedded operating system

1. まえがき

近年、組込システムは、家電、自動車、電車、航空機、船舶、医療機器、通信インフラ、エネルギー管理システムなど、あらゆるデバイスの中に組み込まれており、これらの効率的かつ安全な動作を支えるための基盤となっている。

組込OSは、組込システムを対象とした専用のOSである。組込OSは、組込システムが支えているリアルタイム性、省電力、信頼性、スケーラビリティ、セキュリティなど、組込システム特有の要件を満たす必要があり、これらの要件がソフトウェア開発において重要な課題となる。また近年は、半導体不足の影響によりMCU (Micro Controller Unit) の入手性が悪く、組込製品の製造ができない場合や急な設計変更が行われる場合も散見される。

そこで本稿では、著者が1998年より開発を継続している国産の組込OSであるFloret OS (F-OS)を紹介する。F-OSは、組込OSとしての機能を備えているだけでなく、アーキテクチャの異なるMCUへの高い移植性を備えている。本稿では、このようなF-OSの歴史、アーキテクチャ、主要な機能、及び適用例を紹介する。

2. Floret OS (F-OS)

2.1 はじめに

F-OSは、生体制御やロボット製品等での組込用途を意図したOSとし、特に製品に携わるすべての開発者が十分に把握可能なソースコード量を考慮して、数千行程度の超軽量実装を基本方針としている。ソースコード量に制限を加えることで、肥大化しがちな仕様を意図的に制限する。和歌や俳句のように、本ソフトウェアでは幾時を経ても通ずる洗練された美しさを求めている。なお、F-OS上で動作するアプリケーションにこのような制約はなく、10万行を超える規模の製品も存在する。

F-OSは、Exokernel (あるいは、Unikernel) の特徴を持ち、ノン・プリエンプティブ・マルチタスク、セマフォ、各種

デバイスドライバから構成されている。ハードウェアの機能不足を補うための代替デバイスドライバなども提供される。最小構成では、タイマーなどの割込を使用せずにマルチタスクの機能を提供する。

F-OSの記述言語は、原則としてANSI-C:C99 (C言語) とし、コーディングルールはMISRA-C:2004に準拠するように構成されている。CPUの制御に必要な最低限度のみ (ブートローダ等)、アセンブリ言語で記述することを許容しているが、原則としてC言語で記述されている。

主に8/16/32bitマイコンを対象にしており、一部のPOSIXまたはMS-DOS環境下でも動作できる。マルチタスクを提供しているものの、原則としてアセンブリ言語を使用していないため、OS本体の移植性が極めて高い。本稿の執筆のため、cc65コンパイラを用いて、任天堂のファミリーコンピュータ (NES) に移植した例を図1に示す。なお、開発環境の構築も含め、移植作業は概ね2時間であった。

将来は、第三者によるソフトウェア検証を受けることを想定し、SOUP (Software of Unknown Provenance) アイテムを含まないように注意深く開発されている。

```

VirtuaNES - F-OS NES 9.1-RELEASE
F-OS/NES 9.1-RELEASE System View
  Programmed by Yosuke FURUSAWA
  [0064][011B][ /23/05/12 00:00:07]
=====
ID Task Stat Cyc1 Time Last Cnt
00 IDLE REDY 0064 0000 00C8 0002
01 URTC REDY 0001 0001 011A 011B
02 KEY REDY 0001 0000 011B 011B
03 TOP RUN 0014 0000 0107 000D

ID Sem Status
00 NONE 00/00

ID Pad
00 00
01 00
  
```

図1 System Monitor on F-OS/NES 9.1-RELEASE

*1: 炎重工株式会社 研究開発部

*1:R&D Dept, Homura Heavy Industries Corporation.

2.2 歴史

F-OSは、モータやセンサなどの制御システム向けに、シングルタスクOSであるCP/M-80やMS-DOSの環境下においてマルチタスクを提供するライブラリとして、1998年頃から開発が始まった（図2及び図4）。

当時、すでに完成の域に達していたパソコン通信の国産ホストプログラム（BigModel、KT-BBS、MPNBBS、VS等）は、MS-DOSに構築されているにも関わらず、マルチユーザ・システムとして機能を提供していた（図3）。パソコン通信は、電話回線とアナログモデムを使用して通信するシステムで、ホストプログラムは多数のシリアルポート（アナログモデム）を同時に制御する必要があり、組込システムと類似する点が多い。そのため、F-OSの初期バージョンは、ホストプログラムの構造を参考に、特にC言語で開発されソースコードも公開されていたMPNBBSを参考に開発が始まった。

また、当時すでに国産組込OSとしてμITRONも広まっており、こちらも多くの組込システムで使われていた。F-OSが提供するカーネルAPIは、μITRON3.0 [1]を参考にしたものが多い。

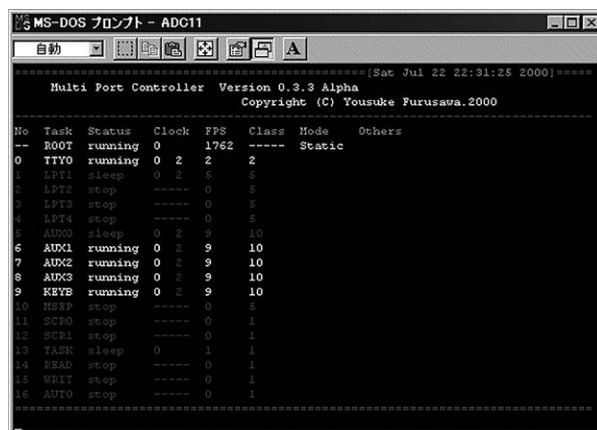


図 2 System Monitor on F-OS/8086 0.2.7.3-RELEASE



図 3 VS 1.31 beta 9 Console(NEC PC-98, MS-DOS 6.2)

開発初期からしばらくは、他の組込OSと同じように、プリエンティブに対応したカーネルを提供していた。すなわち、アセンブリ言語を用いてスタック等の待避を行い、タイムシェアリングによるタスク切り替えの機能を提供していた。しかし、アセンブリ言語を用いることでCPU依存の部分が多くなると、対応CPUを維持するための工数やテストなどの工数が増え、システム全体の品質を維持することが難しくなる。

そこで、F-OS 5 からノン・プリエンティブに特化して、ブートローダを除き機種依存部分がほとんど存在しない超軽量組込OSとして、全体の再構成を行った[2]。プリエンティブ・マルチタスクよりもカーネルのオーバーヘッドは大きいですが、近年のMCUは十分に高速であるため、オーバーヘッドが問題になる場面は少ない。

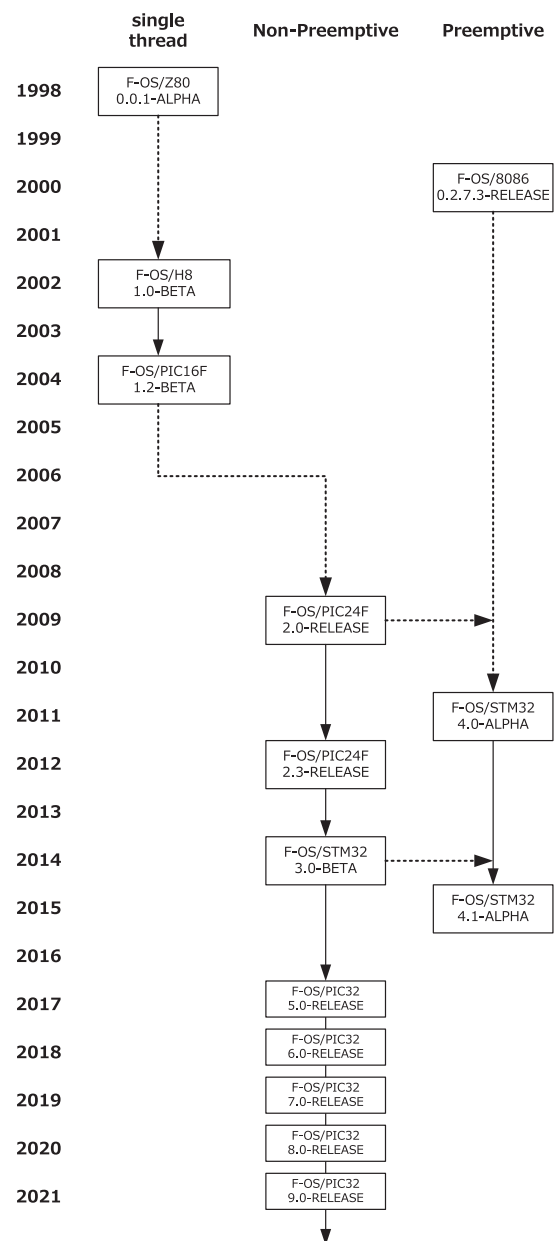


図 4 History of F-OS

2.3 主な仕様

F-OS 9.1の主な仕様（主要諸元）を表 1に示す。

F-OS は、Target MCUsに記載されている各種MCU上で動作実績を持ち、アーキテクチャの異なるMCUでも同じように動作できるよう構成されている。これは、可能な限り、Cコンパイラや付属するライブラリで機種依存部を吸収できるように構成し、ANSI-C:C99の規格に則る形で実装されているためである。したがって、ANSI-C:C99に準拠した開発環境があれば、Target MCUsに記載されていないMCUでも動作が期待できる。

F-OSは、FreeBSD®の名称及びバージョン表記に準じ、(OS名称) / (CPUアーキテクチャ) (バージョン番号) - (リリースタグ) と表記する。

また、何らかの製品に組み込まれることを意図しているため、FreeBSDのCURRENTまたはSTABLEに相当する扱いはなく、開発グループによるデバッグの段階においてALPHA、品質グループによる評価の段階でBETA、製

表 1 Specification of F-OS 9.1

Item	Specifications
Target MCUs (Experience)	8bit 6502, Z80, AVR, PIC10 /12/16/18
	16bit 8086, H8, PIC24, dsPIC30
	32bit STM32, PIC32, POSIX
Kernel	Exokernel (Supported Single Core MCU)
	Non-Preemptive multitasking, Soft-Realtime, Semaphore,
Task	up to 255
Required RAM	about 128 byte (minimal)
Required ROM	about 512 byte (minimal)
Recommended	Timer Interrupt
Standard System	Boot loader (Device Initializer)
	F-OS Kernel
Optional System	Virtual Real Time Clock (VRTC) Driver
	Real Time Clock (RTC) Driver
	GPIO Driver
	ADC / DAC Driver
	PWM / Pseudo PWM Driver
	SPI / I2C Driver
	UART / Pseudo UART Driver
	PS/2 Keyboard Driver
	Pseudo NTSC/Superimpose Driver
	ESC / Font Driver
	FatFs / Disk Cache Driver
	Wave / FM Sound Driver
	Morse Transmitter Driver
	AM Radio Transmitter Driver
	Debug Library
	IEC 60730 Self-diagnosis Library
	GNSS NMEA Library
MATH / PID Library	
RIFF Wave Library	
Foot print	about 5,000 lines (Standard System)
Language	Assembler (boot loader), ANSI-C:C99

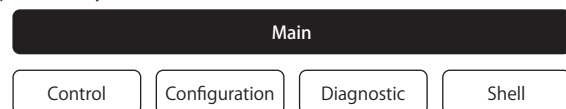
品出荷の段階においてRELEASEのタグをそれぞれ付与する。RELEASE以降に見つかった不具合に対する修正は、FreeBSDと同じくRELEASE-p1などと、RELEASEタグの後ろに修正番号pNを付与する。

2.4 基本構造

F-OSは、その機能ごとにソースコード及びAPIが分され、ソフトウェア・ユニット（以下、ユニットと呼ぶ）として提供される（図 5）。ユニットは、層構造を成しており、原則として上位の層のユニットが下位の層のユニットに依存する。上位の層のユニットほど、所持する機能の粒度が荒く、抽象度が高い。

これらのユニット（表1及び図5）のうち、Main, DEVICE, KERNEL, 及び MCUのユニットは、F-OSの動作に必須である。VRTCは、時刻管理を行わない限り不要であるが、通常は使用した方が良い。そのほかのユニットは、F-OSの動作に必須ではないため、ユーザが任意に要否を決定できる。

Application Layer



Device Layer (optional)



Device Layer



Architecture / Hardware Layer

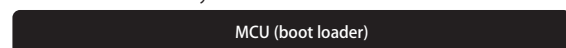


図 5 Basic Structure and Software Unit examples

2.5 アーキテクチャ層

本項では、アーキテクチャ層に属するユニットを示す。この層のユニットは、MCUの仕様に強く依存し、移植性が乏しい。

2.5.1 MCUユニット

MCUユニットは、F-OSのブートローダ及び割り込みベクタ等を設定するモジュールである。すべてアセンブラ言語で書かれ（または、開発環境によって自動生成され）、C言語によるソフトウェア（main関数）が起動するまでの、ごく初期の処理を行う。

ただし、例外的にIEC60730ユニット（MCUの自己診断）は、main関数が起動する前に行い、その結果をmain関数に通知する。

2.6 デバイス層

本項では、デバイス層に属するユニットを示す。この層のユニットは、MCUの仕様依存し、内部または外部インターフェースとの接続（低レベルI/O関数に相当）の機能を提供する。これらのユニットは、単体では故障検知の機能を持たず、専ら入出力のみに特化している。

2.6.1 DEVICEユニット

DEVICEユニットは、F-OSの起動直後に実行され、MCUが持つGPIOの入出力方向やWatchdog Timerの設定など、各ユニットに共通する初期化を実行する。割込ハンドラの定義などもこのユニットに記述されるため、MCUユニットに次いで移植性が低い。

2.6.2 KERNELユニット

KERNELユニットは、各タスクを協調的に動作させるマルチタスクの機能、及びタスクの時間監視の機能を提供する。KERNELユニットの内部(各タスクの状態)は、uITRONに類似した状態遷移と構造を持つ。図6に、KERNELユニットが実装しているタスクの状態遷移を示す。

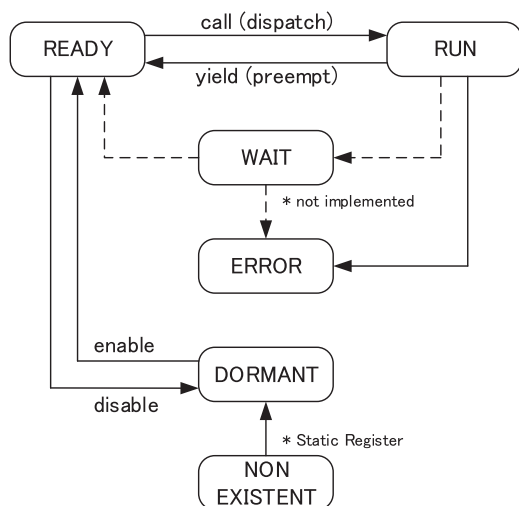


図 6 Diagram of task state transition

F-OSは、プログラムの並列実行の単位を「タスク」と定義する。前述したユニットは、機能（API）の集合を示しているため、F-OSの定義では1つのユニットに複数のタスクが存在する場合も起こりうる。

F-OSでは、伝統的なタスクの概念をそのまま引き継いでおり、タスクとして登録された異なるプログラム（関数）は、並列して実行される。ただし、F-OSはシングルコアのMCUを対象としているため、厳密には並列に実行されない。それぞれのタスクを短い時間間隔で切り替えることにより、擬似的に複数のタスクが同時に実行されているようにしている。

F-OSは、多数のタスクを協調的に動作させる仕組みとして、ノン・プリエンティブ・マルチタスクを用いる。すなわち、各タスクはCPU時間を割り当てられると、あ

らかじめ設計された時間内に処理を行い、自主的にカーネルに制御を返す。これは、開発者自身が実行時間を管理することと等しいが、開発者の負担を軽減するためにコルーチンと類似したAPI等を提供しており、そこまでシビアではない。

F-OSは、Exokernel（あるいは、Unikernel）の特徴を持ち、通常の構成では外部プログラムの読み込みや実行を動的にできない。そのため、各タスクはプログラム（ソースコード）内で静的に登録され、起動直後はDORMANT状態となっている。そして、この静的に登録されるという都合から、実装ではNON EXISTENT状態を持たない（F-OSの実行時は、NON EXISTENT状態に遷移しない）。同様に、WAIT状態が定義されているが、現在までのF-OSでは実装されていない。将来のための予約としている。

KERNELユニットが、各タスクをREADY状態からRUN状態に遷移する仕組みを図7に示す。これは一般的には、カーネル・スケジューラと呼ばれる機構である。

KERNELユニットは、各タスクの実行周期の設定に基づき、それぞれ順にタスクを呼び出して、RUN状態に遷移させる。このREADY状態からRUN状態に遷移することを、F-OSではcallと呼ぶ。callは、uITRONのdispatchに相当する。その後、各タスクは任意の短い時間で一定の処理を行い、制御をKERNELユニットに返す。このRUN状態からREADY状態に遷移することを、本ソフトウェアではyieldと呼ぶ。yieldは、uITRONのpreemptに相当する。

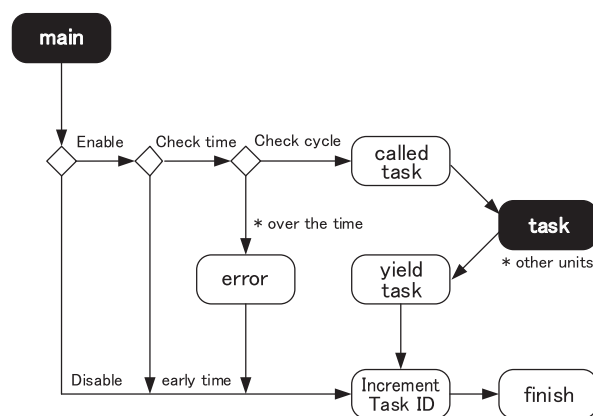


図 7 Structure of KERNEL unit (Kernel Scheduler)

KERNELユニットは、Mainユニットから常にポーリングされることで実行される。そして、それぞれのタスクが実行許可され、かつ実行可能な時刻のときに、各ユニットのタスク関数を呼び出す。タスク関数が実行された後は、KERNELユニット内のタスクIDをインクリメントし、次のMainユニットからの呼び出しでは、次のタスクIDを実行する。したがって、すべてのタスクを実行するには、少なくともKERNELユニットをタスクの数だけ呼び出す必要がある。Mainユニット（main関数）からKERNELユニットが呼び出される最もシンプルな実装例を表2に示す。

表 2 Simplest call of KERNEL unit

```

01 int main(void)
02 {
03     if( DEVICE_init() != false &&
04         VRTC_init() != false )
05     {
06         KERNEL_task_enable( TASK_ID_VRTC );
07
08         while(KERNEL_main() != false)
09         {
10             DEVICE_clear_wdt();
11         }
12     }
13
14     else
15     {
16         /* DO NOTHING */
17     }
18
19     return 0;
20 }

```

また、ノン・プリエンティブ・マルチタスクの特性から、各タスクが使用する時間はF-OSでは保証されない。そこで、緩やかなリアルタイム性 (Soft Realtime) を確保するため、KERNELユニットは、異常周期の検出機能を有する。これは、KERNELユニットが前回のcall時刻と現在時刻を比較し、タスク毎に決められた異常周期よりも長いとき、タスクエラーと認識する。タスクエラーが発生した場合は、KERNELユニットが当該タスクをERROR状態へ遷移させる。

表 3 Task Status on F-OS/PIC32MZ 9.0-RELEASE

Item	Description
ID	List number
Task	Task Name
Stat	Task State
Cycle	Task execution cycle (milli second)
Time	Task execution time (milli second)
Last	Last executed time (tick)
Count	Number of times task called

ID	Task	Stat	Cycle	Time	Last	Count
00	IDLE	READY	001000	0000	00279135	0000002593
01	VRTC	READY	000001	0001	00279296	0002593431
02	ADC1	READY	000001	0000	00279296	0002312205
03	TIMERPWM	DRMINT	000000	0000	00000000	0000000000
04	TIMERPWM-WDT	READY	000100	0000	00279266	0000025932
05	UART1-TX	DRMINT	000000	0000	00000000	0000000000
06	UART1-RX	READY	000000	0000	0027928C	0002740400
07	UART2-TX	READY	000000	0000	00000000	0000000000
08	UART2-RX	READY	000000	0000	00000000	0000000000

図 8 Task Monitor on F-OS/PIC32MZ 9.0-RELEASE

ただし、必ずしもERROR状態になったタスクがERROR状態の原因とは限らない。ERROR状態として検出されたタスクの前に実行されたタスク、またはタスク群の処理遅延によって発生している可能性も含まれる。

F-OSが想定する生体制御やロボットなどのシステムの特性上、ERROR状態は起きてはならない事象であるため、タスクの復帰処理は行わず、KERNELユニットの異常としてMainユニットに通知する。通常、Mainユニットはこの通知を受けて、デバイスの停止や初期化などの処理を行う。

2.6.3 VRTCユニット 及び RTCユニット

VRTCユニットは、MCU内蔵のタイマーモジュールの初期化、及びタイマー割込の処理を行う。VRTCユニットは、F-OSの起動直後に初期化され、MCUのタイマー割り込みが呼ばれるごとに表 4のカウンタ処理と共有メモリへの転送が開始される。VRTCユニットによって生成される時刻は、F-OSのKERNELユニットなど、時間処理全般にわたって用いられる。他のユニットは、VRTCユニットのAPIを介してVRTCユニットが持つ時刻などを得る。また、2つの時間差を計算するAPIなど、時間処理全般の機能を提供する。

なお、MCUまたはターゲット環境に、RTCなどハードウェアによる時刻管理の機能が備わっている場合は、VRTCユニットの代わりにRTCユニットを用いることができる。

表 4 Specification of VRTC unit

Item	Description
Resolution (tick)	0.05 to 100 (milli second)
Uptime (Example of uint16_t)	Day 0 to 65535 Hour 0 to 23 Minute 0 to 59 Second 0 to 59 Milli Second 0 to 999 Tick 0 to 65535

2.7 共通モジュール層

共通モジュール層は、アーキテクチャ層及びデバイス層のユニットと接続し、複合的な動作の提供及び故障検知の実装を想定している。

例えば、デバイス層のA/DユニットとPWMユニットを接続し、これら2つのユニットを統括することでサーボモータなどの機能（例えば、アーム角度をX [rad]にするなど、任意の角度を保持するモータ）を提供するユニットを想定している。

他にも、通信のプロトコル処理やストレージデバイスのファイルシステム処理など、デバイス層（低レベルI/O）とアプリケーションの中間層の処理を担う。

共通モジュール層は、F-OSの本体外であるため、本項ではこれ以上の詳述は行わない。

2.8 アプリケーション層

本項では、アプリケーション層に属するユニットを示す。この層のユニットは、デバイス層及び共通モジュール層と接続し、複合的な動作遷移（シーケンス）やその他の複雑な処理を行う。

例えば、2.7項で例を挙げたように、共通モジュール層にあるサーボモータの機能を利用して、ユーザの目的に応じた複合的な動作（X [rad]からY[rad]へモータを回転させるなどの動作生成）を意図している。

他にも、A/Dユニットなどから得られたセンサ情報を、通信システムを通じて外部へ送信するユニットなども、アプリケーション層で実装することを想定している。

例外として、MainユニットはF-OSを含むシステム全体を統括することになるため、F-OSの定義としてアプリケーション層に配置している。

2.8.1 Mainユニット

F-OSは、生体制御やロボット製品等での組込用途を意図しており、Mainユニットでは標準的な起動処理、初期化処理、制御・動作処理、異常処理、終了処理等の全体的なシーケンスを提供している（図9）。

Mainユニット（main関数）は、ブートローダから起動され、デバイスの初期化を行ったのち、制御モード（通常状態）及び故障報知モード（異常または故障状態）の2つの状態遷移を制御する。

制御モードでは、センサやボタンなどの情報を読み込み、あるいはアクチュエータやLEDなどの出力し、製品としての動作を行うことを想定している。

故障報知モードでは、制御を停止し、LED及びブザー等のユーザインターフェースにより警報を発することを想定している。これは製品の電源が切断されるか、例えば5分以上の連続した警報、または電源切断条件となっているエラー（バッテリーの残容量が低下など）が発生するまで続けられることを想定している。

全体的なシーケンスは、F-OSの本体外であるため、本項では一般的な製品の実装例を紹介するのみで、これ以上の詳述は行わない。

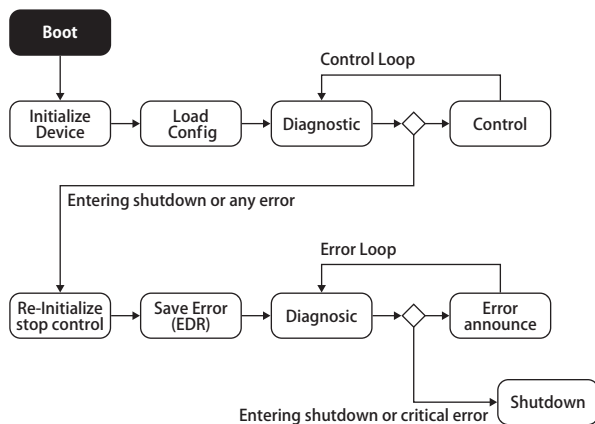


図9 Structure of Main unit

2.8.2 ユーザタスクの実装例

最もシンプルなアプリケーション層におけるタスクの実装例を表5に示す。この例は、1[Hz], Duty 50%でLEDを点滅させるタスクである。

タスクの実行が許可（KERNEL_task_enable関数）されると、まずCTRL_start関数が呼び出され、タスクの開始処理が行われる（C++言語におけるコンストラクタ相当）。その後、Arduinoのloop関数と同じように、KERNELユニットから定期的にCTRL_main関数が呼び出される。CTRL_main関数では、KERNELユニットが提供するコルーチン相当の機能によって、関数内のコードの実行、中断、及び再開ができるようになる。表5の例では、KERNEL_thread_begin関数、KERNEL_thread_delay関数、及びKERNEL_KERNEL_thread_end関数によって、LEDの点灯・消灯、及び500ミリ秒のウェイトを行い、点滅の制御を実装している。

タスクの実行が禁止（KERNEL_task_disable関数）されると、CTRL_stop関数が呼び出され、タスクの終了処理が行われる（C++言語におけるデストラクタに相当）。

表5 Example of LED flash task

```

01 #include "fos.h"
02
03 bool CTRL_init(void)
04 {
05     return true;
06 }
07
08 bool CTRL_start(void)
09 {
10     return true;
11 }
12
13 bool CTRL_stop(void)
14 {
15     return true;
16 }
17
18 bool CTRL_main(void)
19 {
20     KERNEL_thread_begin();
21
22     while(1)
23     {
24         LED_ON();
25         KERNEL_thread_delay(500);
26
27         LED_OFF();
28         KERNEL_thread_delay(500);
29     }
30
31     KERNEL_thread_end();
32     return true;
33 }
  
```

3. F-OS の適用例

3.1 車載ロガーとNTSC ビデオ出力

Microchip PIC24F(表6)とF-OS 2.3-RELEASEを用いた車載ロガーの例を紹介する。このシステムは、車両のOBD2コネクタに接続し、シリアル通信を経由して車両情報の読込を行う。その後、NTSCビデオ信号の出力、またはカメラ映像にスーパーインポーズを行い(図10)、取得した車両情報を表示する。

このシステムには、F-OSのPseudo NTSC/Superimpose Driver及びFont Driverが組み込まれており、ビデオ信号のICやLSIを使用せずに、MCU単体でビデオ信号やスーパーインポーズを実現している(図11)。フォントは、FONTX2形式に対応したものであれば、切り替えができるように構成されている。

表 6 Specification of Microchip PIC24F

Item	Description
MCU	Microchip PIC24FJ64GA002
Speed	32 [MHz] (16 [MIPS])
RAM	8 [KB]
ROM	64 [KB]

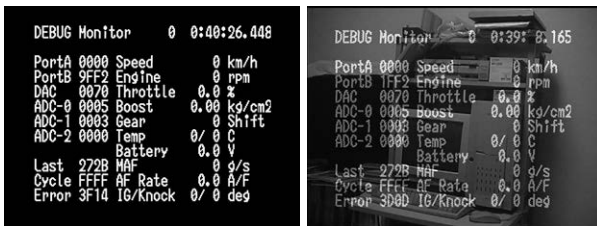


図 10 NTSC Video (Left side) Superimpose (Right side)

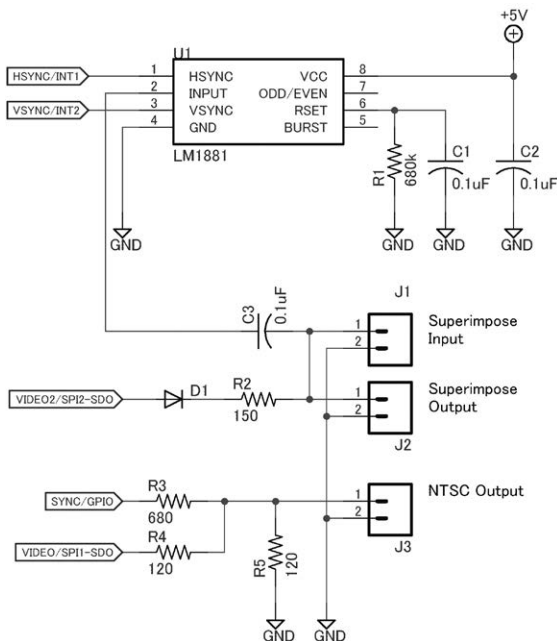


図 11 Schematic of Pseudo NTSC/Superimpose Driver

3.2 高速ロガーとストレージシステム

Microchip PIC32MZ(表7)とF-OS 6.0-RELEASEを用いた高速ロガーの例を紹介する。このシステムは、シリアル通信やアナログ入力など多種多様なインターフェースの非同期入力を受け、GNSSやIMUなど30[ch]以上のセンサを1[kHz]の周期でmicroSDに保存する。このとき、シリアル通信にはプロトコルの処理が、microSDにはファイルシステムの処理が含まれ、ユーザーインターフェースのボタン入力やLCD出力も含め、全体を通して1[kHz]の周期で実行されなければならない。

このシステムには、赤松のFatFs[3]が組み込まれており、MicrosoftのFAT12/16/32のファイルシステムを通して、microSDにファイルの保存ができるように構成されている。書き込みのブロックサイズを32, 64, ..., 32768 [byte/cycle]と変化させ、MCUクロックを172 [MHz]、及び260 [MHz]の2つで比較したベンチマーク結果を図 12に示す。その結果、ブロックサイズが小さくMCUクロックが低いときが最も遅く412.2 [KB/s]であった。一方、ブロックサイズが大きくMCUクロックも高いときが最も速く2366.0 [KB/s]であった。

表 7 Specification of Microchip PIC32MZ

Item	Description
MCU	Microchip PIC32MZ2048EFH144
Speed	252 [MHz] (415 [MIPS])
RAM	512 [KB]
ROM	2048 [KB]
Storage	ELECOM MF-MS016GU13V3R microSD 16 [GB], UHS-1, U30, 1bit connection

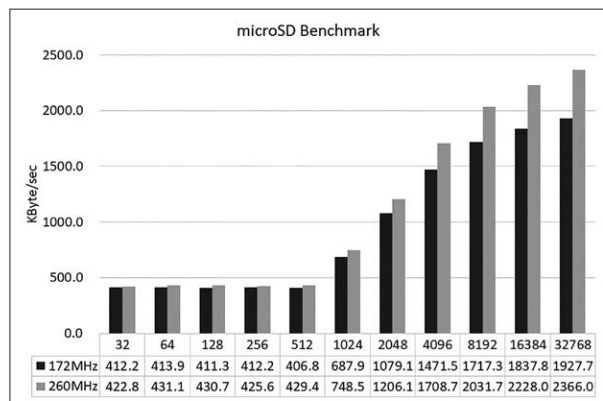


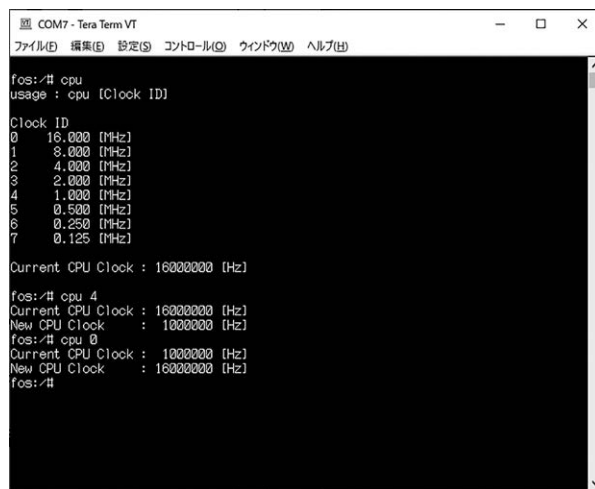
図 12 microSD Benchmark

なお、一般にmicroSDを含むストレージデバイスは、読み込み及び書き込み動作共に、その応答時間が明確に保証されていない。したがって、時間保証が求められるHard Realtimeの用途においては、ディスクキャッシュなど何らかの機構が必要となる。そのため、F-OS 9.0から試験的にディスクキャッシュの機構を実装しており、一部のシステムではすでに運用されている。

3.3 低消費電力ロガーと省電力動作

Microchip PIC24F (表 6) とF-OS 9.0-RELEASEを用いた低消費電力ロガーの例を紹介する。このシステムは、バッテリーを用いて数ヶ月以上の長期にわたりセンサログを保存する。

このシステムには、PIC24FのDOZEモードを利用し、MCUのCoreクロックを動的に変更ができるドライバが実装されている。消費電力を抑えるため、MCUの負荷状況をモニタリングし、MCUの負荷が小さいときはコアクロックを下げ、MCUの負荷が大きいときはコアクロックを上げる Power Saveタスクが実装されている。



```
窓 COM7 - Tera Term VT
ファイル(F) 編集(E) 設定(S) コントロール(O) ウインドウ(W) ヘルプ(H)

fos:/# cpu
usage : cpu [Clock ID]

Clock ID
0 16.000 [MHz]
1 8.000 [MHz]
2 4.000 [MHz]
3 2.000 [MHz]
4 1.000 [MHz]
5 0.500 [MHz]
6 0.250 [MHz]
7 0.125 [MHz]

Current CPU Clock : 16000000 [Hz]

fos:/# cpu 4
Current CPU Clock : 16000000 [Hz]
New CPU Clock : 1000000 [Hz]
fos:/# cpu 0
Current CPU Clock : 1000000 [Hz]
New CPU Clock : 16000000 [Hz]
fos:/#
```

図 13 Dynamic core clock change

3.4 水上ドローン

Microchip PIC32MZ (表 7) とF-OS 9.1-RELEASEを用いた水上ドローンの制御システム[4]の例を紹介する。このシステムは、ミニボートまたはそれ以下の船体と電動スラスタを用いた、遠隔操作または自律移動できる水上ドローンである (図 14)。

このシステムには、有線リモコン、無線リモコン、GPS/GNSS、及びIMUなど多数の入力デバイスやセンサが取り付けられている。これらの入力を受けて、あらかじめ設計された状態遷移や制御アルゴリズムを経て、電動スラスタや灯火設備、警笛、音声ガイドなどの出力を制御する。

F-OSが使われているシステムとしては大規模で、56のタスクから構成され、C言語で7万行程度の規模である。リレー基板やモータドライバ基板など周辺システムにもF-OSが使われており、これらも含めると、全体で15万行程度の規模になる。



図 14 Marine Drone 3.1 (USV System for mini boats)

4. おわりに

本稿では、著者が1998年より開発を継続している国産の組込OSであるFloret OS (F-OS)を概説した。生体制御やロボット製品等での組込用途を意図しており、その実装例を4つ紹介した。

今後、皆様からの御意見・御批判を頂き、更に改良を重ねていく所存である。将来は、第三者によるソフトウェア検証を受け、国産の組込OSとしての地位確立を目指していく。

謝辞

本研究の一部は、総務省平成27年度異能vationによった。

参考文献

- [1] 坂村健: μ ITRON 3.0 仕様 Ver. 3.02.02; 一般社団法人トロン協会,(1997).
- [2] 古澤洋将: 高信頼性組込OS, 総務省 平成27年度 異能vation; <https://innouvat.com/ja/profile/21/>
- [3] 赤松武史: 定番! 超軽量マイコン用ファイル・システム FatFs; CQ出版社,(2014).
- [4] 古澤洋将: ミニボート用USV制御システム Marine Drone 3.1の紹介; 日本マリンエンジニアリング学会, 58巻5号,(2023).

カルバック・ライブラー・ダイバージェンスに関するメモ

松岡知洋*1

Introductory Notes on Kullback-Leibler Divergence

Tomohiro Matsuoka*1

Abstract - Kullback-Leibler divergence, also called as Kullback-Leibler information or Kullback-Leibler distance etc., is one of the fundamental concepts in statistics, information science, etc. It is a type of measure of difference between two probability distributions. However, its properties such as what type of difference it indicates, are not well-known. We present a brief introduction to Kullback-Leibler divergence in applied statistics with several examples. In those examples, we include ones with the Pareto distributions, one of the simplest "power-law" or "long-tail" distributions.

Keywords: Kullback-Leibler divergence, probability distributions, statistics, power-law

1. 前書き

1.1 はじめに

カルバック・ライブラー・ダイバージェンスという、確率分布間の違いを表す量として知られているものがある(文献 [1] では「カルバック情報量」)。これは常に 0 以上の値をとり、0 となるのは二つの確率分布が一致するときであり、そのときに限る。そのため、距離に例えられることもあるが、通常の距離とは大きく異なる点がある。例えば、地上のある二地点 A、B 間の距離は、A 地点と B 地点の役割を入れ替えても変わらない。つまり、A 地点からみた B 地点までの距離と、B 地点からみた A 地点までの距離は同じである。ところが、カルバック・ライブラー・ダイバージェンスはその両者の値が異なっているような「距離」である。

カルバック・ライブラー・ダイバージェンスの名称はアメリカの数学者で暗号解読者だったソロモン・カルバックとリチャード・ライブラーにちなんだものである。彼らによって1951年の共著の論文[2]で、二つの確率分布の違いを定量化するために導入された。ただし、同論文ではカルバック・ライブラー・ダイバージェンスそのものではなく、それを二つの分布に関して対称化したものを主に扱っている。先の例で言えば、A 地点からの「距離」と B 地点からの「距離」を足し合わせたものを考えていることになる。

カルバック・ライブラー・ダイバージェンスのごく身近な例では次のようなものがある。何かデータが与えられたときに、その平均値や分散を計算することはごく普通に行われている。平均値や分散が正確には何を表しているのかは、やや分かり難い。しかし、データの平均値と分散を求めることには、データをガウス分布から得られた標本とみなし、ガウス分布のパラメータとしてカルバック・ライブラー・ダイバージェンスの意味で最適なものを選ぶことで

あるという解釈があり得る。

また、カルバック・ライブラー・ダイバージェンスは統計理論や機械学習など、情報科学の分野でよく用いられている。日本人研究者によって創始された情報幾何学にも登場する [3]。最近の例では、人間との対話(チャット)が可能な人工知能である chatGPT [4] で用いられている大規模言語モデル InstructGPT が、その機械学習の機構の中でカルバック・ライブラー・ダイバージェンスを利用している [5], [6]。

カルバック・ライブラー・ダイバージェンスがどのような意味で確率分布の差異をあわらしているか、また、なぜ、二つの確率分布に対して非対称であるのかは分かり難いと考えられてることが多いようだが、直感的で分かり易い解釈もある [7]。本稿ではなるべく簡単な例としてまずベルヌーイ分布を用いてカルバック・ライブラー・ダイバージェンスの性質について説明する。また、いくつかのよく用いられる確率分布に関するカルバック・ライブラー・ダイバージェンスの計算を例示した。

本文中、偏微分に関する各種の事柄やスターリングの公式による階乗の近似等は特に説明することなしに用いている。また、具体例を計算するにあたって指数積分と呼ばれる特殊関数を用いたため、一節を設けて指数積分の性質についてまとめた。

数値計算およびグラフの作成はすべて Julia 言語で行った。グラフの作成には Plots ライブラリを用いた。数値積分には QuadGK ライブラリを使用し、その他、Distributions、SpecialFunctions の各ライブラリを使用した。

1.2 パレート分布との関連について

本稿の計算例の中にはパレート分布と呼ばれる確率分布に関係するものも含めた。近年よく知られるように

*1: 炎重工株式会社 製品開発部

*1: PD Dept, Homura Heavy Industries Corporation

なった用語に「ロングテール(long tail)」あるいは「べき則(power-law)」というものがある。これはある種の確率分布を指すのに使われる用語である。よく知られている確率分布、例えばガウス分布(正規分布)は、特定の値からの誤差をモデル化するのによく使われる確率分布である。ガウス分布では、その「特定の値」から x だけ離れたものの割合が $\exp(-x^2)$ の程度で減少する。ほとんどのデータがある特定の値の近くのみで散らばっていて、ある程度以上離れた値をとることはほとんどない。「ロングテール」あるいは「べき則」といわれる確率分布では、大きさが x であるものの割合がほぼ $x^{-\alpha}$ の程度で減少する。データが何か特定の値の周辺に散らばっているとは考えにくく、非常に広い範囲にわたって分布している。その広がり、 α の値によっては非常に大きくなり、理論上の期待値や分散が無限大となる。そのため分布が集中している位置や分布の広がりを期待値や分散をもちいて調べることが無意味になってしまうほどである。そのような特徴をもつとされるデータの例は現在までに多く分野で多数報告されている(例えば [8] など)。漁業・生体群制御などに関係のあるデータとしては、魚群のサイズの分布が「べき則」にしたがっていると報告が多数ある(例えば [9], [10], [11] など)。魚群のサイズの分布が「べき則」に従う理由について理論的に調べた研究もある [12]。パレート分布は、そのような「ロングテール」「べき則」の特徴を持つ確率分布のうちでもっとも単純なものである(文献 [13] の解説が詳しい。同文献では「べき分布」と呼んでいる)。パレート分布は、もとはイタリアの経済学者ヴィルフレド・パレートが所得の分布を表すために導入した分布である [14]。

しかし、「ロングテール」「べき則」などというものが本当にあり得るのかと、人によっては疑いを持つかもしれない。実際、魚群のサイズに限ってみても、本当に「ロングテール」「べき則」なのか議論の対象となることがある [15]。また、「ロングテール」「べき則」に従う可能性のあるデータの統計解析には困難がともなう。広く用いられている統計解析の手法の多くは、理論上の期待値や分散が有限であることを前提にしているものも多く、「ロングテール」「べき則」に従う分布には有効であるとは限らない。

カルバック・ライブラー・ダイバージェンスは理論上の期待値・分散よりもより一般的に用いることが出来る指標であり、対象としている確率分布に理論上の期待値・分散が存在しない場合でも有効な指標である。「ロングテール」「べき則」に従うようなデータの分析にも有意義な指標であろうと考えられる。

2. 定義など

本稿では確率分布はすべて実数の集合 R またはその部分集合上のものとする。確率分布 P による集合 A の確率(確率測度)を $P(A)$ と表記する。この表記では一点のみからなる集合 $\{x\}$ の確率は $P(\{x\})$ であるが、これを $P(x)$ と書く。 P が離散分布のとき、 $P(x) > 0$ となる点は高々可算個である。本稿では離散分布に対しては集合 $\{x \in R | P(x) > 0\}$ は整数の集合 Z の部分集合であるとする。以下、確率分布 P の確率分布関数を $F_P(x)$ 、確率密度関数を $f_P(x)$ のように同じ文字の大文字・小文字の使い分けで表記する場合がある。分布 P が分布 Q に関して絶対連続であるとき、つまり、 $Q(A) = 0 \Rightarrow P(A) = 0$ (Q による確率が 0 である任意の集合 A に対し P による確率が 0 となる) のとき $P \ll Q$ と書く。

2.1 カルバック・ライブラー・ダイバージェンスの定義

確率分布 P, Q は確率密度関数を持つとし、それらをそれぞれ $p(x), q(x)$ と書く。このとき分布 P のエントロピーは

$$H(P) := - \int_{-\infty}^{\infty} p(x) \log p(x) dx$$

である。また、 Q と P の間のカルバック・ライブラー・ダイバージェンス(Kullback-Leibler divergence、以下KLDと略記する)は次のように定義される。

$$D(P||Q) := \int_{-\infty}^{\infty} p(x) \log \frac{p(x)}{q(x)} dx$$

この定義は Q, P に対して非対称になっている。 $D(P||Q)$ はまた P のエントロピー $H(P)$ を用いて次のように書くことも出来る。

$$D(P||Q) = - \int_{-\infty}^{\infty} p(x) \log q(x) dx - H(P) \quad (1)$$

$P \ll Q$ が成り立たないときは $D(P||Q) = \infty$ となる。次に確率分布 P は離散分布であるとする。離散分布の場合には

$$H(P) := - \sum_{k=0}^{\infty} p(x_k) \log p(x_k)$$

および

$$\begin{aligned} D(P||Q) &:= \sum_{k=0}^{\infty} p(x_k) \log \frac{p(x_k)}{q(x_k)} \\ &= - \sum_{k=0}^{\infty} p(x_k) \log q(x_k) - H(P) \end{aligned}$$

とする。ここで、和は $P(x_k) > 0$ となる点全てについて加える。連続分布のときと同様 $P \ll Q$ が成り立たないときは $D(P \parallel Q) = \infty$ となる。Q は連続分布でも構わないが、このときは $D(P \parallel Q) = \infty$ である。

2.2 確率分布によるスティルチェス積分

ここで確率分布によるスティルチェス積分を導入する。これによって、離散分布・連続分布ともにエントロピーや KLD を積分で表記することができる。

まず確率分布 P が連続であるとし、その確率分布関数を $F_P(x)$ 、確率密度関数を $f_P(x)$ とする。確率分布 P による R 上の関数 $g(x)$ の、R の部分集合 A 上のスティルチェス積分は次のようになる。

$$\int_A g(x) dF_P(x) = \int_A g(x) f_P(x) dx$$

この表記によれば

$$H(P) = \int_{-\infty}^{\infty} \log f_P(x) dF_P(x)$$

のように書くことができる。

次に P を離散分布であるとする。通常は P の確率密度関数は定義されないが、本稿では次のように定義する。

$$f_P(x) := P(\{x\})$$

P の確率分布関数は

$$F_P(x) = \sum_{y \leq x} f_P(y)$$

と書くことができる。 $F_P(x)$ は単調増加関数である。P が離散分布の場合には、分布 P による R 上の関数 $g(x)$ の $A \subset R$ 上のスティルチェス積分は次のように表せる。

$$\begin{aligned} \int_A g(x) dF_P(x) &= \int_A g(x) f_P(x) dx \\ &= \sum_{y \in A} g(y) f_P(y) \end{aligned}$$

スティルチェス積分を用いると、確率分布 P が連続でも離散でも

$$H(P) = - \int_{-\infty}^{\infty} \log f_P(x) dF_P(x)$$

と書ける。また、Q の確率密度を $q(x)$ とすると

$$D(P \parallel Q) = - \int_{-\infty}^{\infty} \log q(x) dF_P(x) - H(P)$$

と書ける。

2.3 データの経験分布

データ $x = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ が得られているとする。x の経験分布関数とは次のようなものである。

$$F(x) = \frac{1}{n} (\text{ } x_k \leq x \text{ となる } x_k \text{ の個数})$$

これは確率分布関数とみなすことができる。これを確率分布関数とみなして得られる確率分布を x の経験分布と言い、 $\text{Emp}(x)$ と表記する。 $\text{Emp}(x)$ の確率密度関数は次のようになる。

$$f(x) = \frac{1}{n} (\text{ } x_k = x \text{ となる } x_k \text{ の個数})$$

$F(x)$ による R 上の関数 $g(x)$ のスティルチェス積分は次のようになる。

$$\sum_{k=1}^n \frac{1}{n} g(x_k)$$

分布 $\text{Emp}(x)$ のエントロピーは

$$\begin{aligned} H(\text{Emp}(x)) &= - \sum_{k=1}^n \frac{1}{n} \log \frac{1}{n} \\ &= \log n \end{aligned}$$

となる。また、確率分布 Q の確率密度を $q(x)$ とおくと、

$$\begin{aligned} D(\text{Emp}(x) \parallel q(x)) &= - \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \log q(x_k) - \log n \\ &= - \frac{1}{n} \log \prod_{k=1}^n q(x_k) - \log n \quad (2) \end{aligned}$$

となる。

3. KLD と統計理論

本節では、まずベルヌーイ分布を例に KLD について解説する。ベルヌーイ分布は、コイン投げ等のような起こりえる結果が二つしか無い出来事をモデル化したものであり、考えられる限りもっとも単純な確率分布であるといえる。しかしそのような単純な確率分布を用いた例からでも、KLD の重要な性質が垣間見える。その後、より一般の確率分布についても議論する。

3.1 ベルヌーイ分布と KLD

3.1.1 ベルヌーイ分布間の KLD とその性質

ここではパラメタの異なるベルヌーイ分布同士の間の KLD を扱う。(文献 [7] では多項分布の KLD を導出し、その特別な場合として二項分布 (ベルヌーイ分布) の KLD を求めている。本節はそのアイデアを参考にしている。) B(Q)

によって1の確率が q 、0の確率が $1-q$ であるベルヌーイ分布を表す。 $B(q)$ のエントロピーは

$$H(B(q)) = -(q \log q + (1-q) \log(1-q))$$

であり、KLDは

$$\begin{aligned} D(B(s) \| B(q)) &= s \log \frac{s}{q} + (1-s) \log \frac{1-s}{1-q} \\ &= -s \log q + (1-s) \log(1-q) - H(B(s)) \end{aligned} \quad (3)$$

である。

$D(B(s) \| B(q))$ の増減について調べる。まず s を固定して q を変数と考える。

$$\frac{\partial D(B(s) \| B(q))}{\partial q} = -\frac{s}{q} + \frac{1-s}{1-q} \quad (4)$$

$\partial D(B(s) \| B(q)) / \partial q \geq 0$ とおくと

$$\begin{aligned} \frac{1-s}{s} &\geq \frac{1-q}{q} \\ q &\geq s \end{aligned}$$

であり、 $D(B(s) \| B(q))$ の q の関数としての増減は次のようになる。

$$\left\{ \begin{array}{ll} q=0 \text{ のとき} & D(B(s) \| B(q)) = \infty \\ 0 < q < s \text{ のとき} & \text{狭義単調減少} \\ q = s \text{ のとき} & D(B(s) \| B(q)) = 0 \\ s < q < 1 \text{ のとき} & \text{狭義単調増加} \\ q = 1 \text{ のとき} & D(B(s) \| B(q)) = \infty \end{array} \right. \quad (5)$$

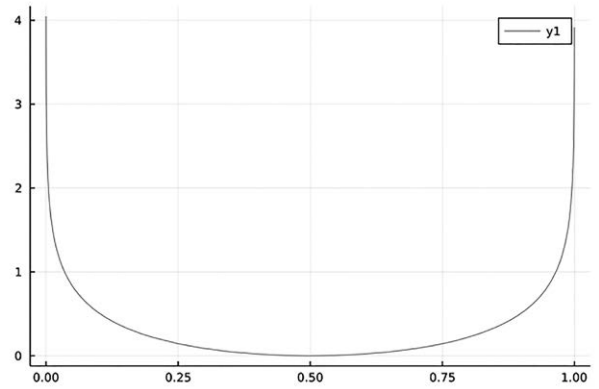
図1は $D(B(s) \| B(q))$ の q の関数としてのグラフの例である。式(3)で $s = 1/2$ としたときのグラフは $q = 1/2$ を軸として対称である。 $s = 1/4$ では非対称になっている。

また、グラフを見ると、 $q = s$ 付近での $D(B(s) \| B(q))$ の変化は非常に小さい。式(4)で $q = s + \epsilon$ とおくと、

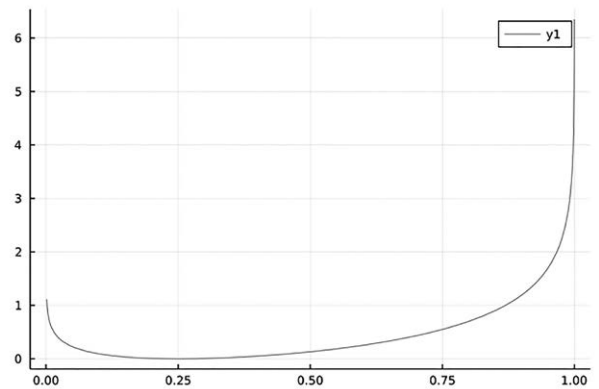
$$-\frac{1}{1 + \frac{\epsilon}{s}} + \frac{1}{1 - \frac{\epsilon}{1-s}}$$

$|\epsilon| \ll 1$ としてこれを級数展開すると

$$\begin{aligned} & - \left(1 - \frac{\epsilon}{s} + \left(\frac{\epsilon}{s} \right)^2 - \dots \right) \\ & + \left(1 + \frac{\epsilon}{1-s} + \left(\frac{\epsilon}{1-s} \right)^2 + \dots \right) \\ & \approx \frac{\epsilon}{s} + \frac{\epsilon}{1-s} \\ & = \epsilon \left(\frac{1}{s(1-s)} \right) \end{aligned} \quad (6)$$



(a) $s = 1/2$



(b) $s = 1/4$

図1: q の変数としての $D(B(s) \| B(q))$ のグラフ

$s = 1/2$ と $s = 1/4$ のときのものを示す。 $q = s$ で最小値をとり、またその付近での変化が非常に小さいことが分かる。 $s = 1/2$ のときのグラフは $q = 1/2$ を軸として対称になっている。

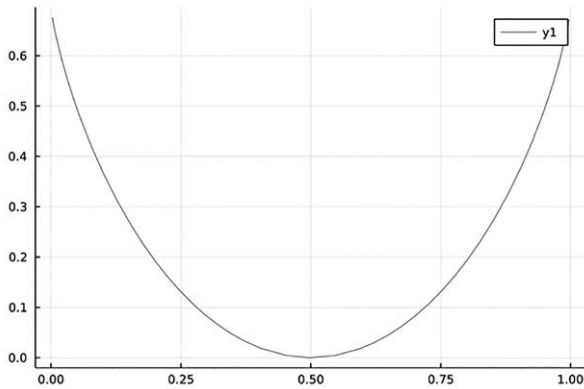
であり、 $|\epsilon|$ が小さければこれは0に近い。式(6)は s の関数としては $s = 1/2$ のときに最大で、そこから外れるに従って s^2 に反比例して減少する。次に q を固定して s を変数と考える。

$$\begin{aligned} \frac{\partial D(B(s) \| B(q))}{\partial s} &= \log \frac{s}{q} + q \frac{1}{q} - \log \frac{1-s}{1-q} - (1-s) \frac{1}{1-s} \\ &= \log \frac{s}{q} - \log \frac{1-s}{1-q} \end{aligned} \quad (7)$$

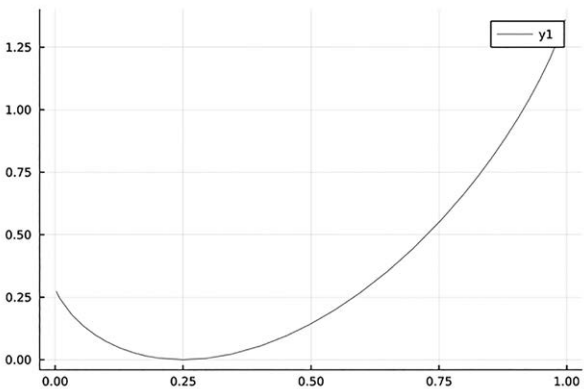
$\partial D(B(s) \| B(q)) / \partial s \geq 0$ とおくと

$$\begin{aligned} \log \frac{s}{1-s} - \log \frac{q}{1-q} &\geq 0 \\ \frac{s}{1-s} &\geq \frac{q}{1-q} \\ s &\geq q \end{aligned}$$

であり、 $D(B(s) \| B(q))$ の s の関数としての増減は次のよう



(a) $s = 1/2$



(b) $s = 1/4$

図 2 : s の変数としての $D(B(s) \| B(q))$ のグラフ

$q = 1/2$ と $q = 1/4$ のときのものを示す。 $s = q$ で最小値をとることが分かる。 $q = 1/2$ のときのグラフは $s = 1/2$ を軸として対称になっている。図 1 と増減の大きな傾向は似ているが、 $D(B(s) \| B(q))$ の s と q に関する非対称性を反映して、グラフの形は異なっている。

になる。

$$\begin{cases} s = 0 \text{ のとき} & D(B(s) \| B(q)) = -\log(1-q) \\ 0 < s < q \text{ のとき} & \text{狭義単調減少} \\ q = s \text{ のとき} & D(B(s) \| B(q)) = 0 \\ q < s < 1 \text{ のとき} & \text{狭義単調増加} \\ q = 1 \text{ のとき} & D(B(s) \| B(q)) = -\log q \end{cases} \quad (8)$$

q の関数として見たときと異なり $s = 0, 1$ でも ∞ にならない。図 2 は $D(B(s) \| B(q))$ の s の関数としてのグラフの例である。増減の大きな傾向や、 $s = q$ で最小値をとること、また、 $q = 1/2$ のときにグラフは $s = 1/2$ を軸として対称になることなどは図 1 と似ている。しかし、 $D(B(s) \| B(q))$ が s と q に関して非対称であることを反映して、グラフの形は図 1 と異なっている。

式(7)で s が q に近いとして $s = q + \epsilon$ とおくと、

$$\begin{aligned} & \log \frac{q + \epsilon}{q} - \log \frac{1 - (q + \epsilon)}{1 - q} \\ &= \log \left(1 + \frac{\epsilon}{q} \right) - \log \left(1 - \frac{\epsilon}{1 - q} \right) \end{aligned}$$

$|\epsilon| \ll 1$ として式(6)のときのように近似すると

$$\epsilon \left(\frac{1}{q(1-q)} \right)$$

となる。

最後に s, q を同時に動かす場合について調べる。

$D(B(s) \| B(q))$ の偏導関数は

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 D(B(s) \| B(q))}{\partial q^2} = \frac{s}{q^2} + \frac{1-s}{(1-q)^2} \\ \frac{\partial^2 D(B(s) \| B(q))}{\partial s^2} = \frac{1}{s} + \frac{1}{1-s} \\ \frac{\partial^2 D(B(s) \| B(q))}{\partial s \partial q} = \frac{\partial^2 D(B(s) \| B(q))}{\partial q \partial s} \\ = -\frac{1}{q} - \frac{1}{1-q} \end{cases}$$

であり

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 D(B(s) \| B(q))}{\partial q^2} \frac{\partial^2 D(B(s) \| B(q))}{\partial s^2} \\ & - \left(\frac{\partial^2 D(B(s) \| B(q))}{\partial s \partial q} \right)^2 \\ &= \left(\frac{s}{q^2} + \frac{1-s}{(1-q)^2} \right) \left(\frac{1}{s} + \frac{1}{1-s} \right) - \left(\frac{1}{q} + \frac{1}{1-q} \right)^2 \\ &= \frac{1}{q^2} \frac{s}{1-s} + \frac{1}{(1-q)^2} \frac{1-s}{s} - \frac{2}{q(1-q)} \end{aligned}$$

ここで、(相加平均) \geq (相乗平均) の不等式によって

$$\begin{aligned} & \frac{1}{q^2} \frac{s}{1-s} + \frac{1}{(1-q)^2} \frac{1-s}{s} \\ & \geq 2 \left(\frac{1}{q} \sqrt{\frac{s}{1-s}} \right) \left(\frac{1}{1-q} \sqrt{\frac{1-s}{s}} \right) \\ & = \frac{2}{q(1-q)} \end{aligned} \quad (9)$$

であるため

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 D(B(s) \| B(q))}{\partial q^2} \frac{\partial^2 D(B(s) \| B(q))}{\partial s^2} \\ & - \left(\frac{\partial^2 D(B(s) \| B(q))}{\partial s \partial q} \right)^2 \\ & \geq 0 \end{aligned}$$

である。式(9)で等号が成り立つのは

$$\frac{1}{q} \sqrt{\frac{s}{1-s}} = \frac{1}{1-q} \sqrt{\frac{1-s}{s}} \quad (10)$$

が成り立つときであり、そのときに限る。式(10)を同値変形すると

$$\frac{1-q}{q} = \frac{1-s}{s}$$

$$s = q$$

となる。q = s のとき

$$\frac{\partial^2 D(B(s) \| B(q))}{\partial q^2} = \frac{\partial^2 D(B(s) \| B(q))}{\partial s^2}$$

$$- \left(\frac{\partial^2 D(B(s) \| B(q))}{\partial s \partial q} \right)^2$$

$$= 0$$

となるため、この方法では q = s が極値かどうかは不明である。しかし、すでに式(5)(8)で見たように、s = q は $\partial D(B(s) \| B(q)) / \partial q = \partial D(B(s) \| B(q)) / \partial s = 0$ と同値である。また s = q のときは $D(B(s) \| B(q)) = 0$ も成り立つ。したがって s = q で定義される直線上で $D(B(s) \| B(q))$ は最小値 0 をとる。

3.1.2 ベルヌーイ分布モデルにおける統計解析

0, 1 のみからなる標本 $x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ が得られているとする。もしこれが独立なベルヌーイ分布 $B(q)$ からの標本であるとしたら、q の推定値は標本中に含まれる 1 の割合とするのが適切であろう。つまり m を標本中の 1 の個数 $\sum_{k=1}^n x_k$ であるとして、r の推定値を m/n とする。このことについて検討してみる。標本 x の経験分布関数は $B(m/n)$ の確率分布関数と同じものである。B(q) からの標本の経験分布が $B(m/n)$ となる確率を $Q(q)$ とおくと

$$Q(q) = \frac{n!}{m!(n-m)!} q^m (1-q)^{n-m} \quad (11)$$

である。Q(q) が最大となるのは q がどのような値のときか、計算によって求めてみる。

$$\log Q(q)$$

$$= \log \frac{n!}{(m)!(n-m)!} + m \log q + (n-m) \log(1-q)$$

$$\frac{d \log Q(q)}{dq} = \frac{m}{q} - \frac{n-m}{1-q}$$

$$\frac{d^2 \log Q(q)}{dq^2} = -\frac{m}{q^2} - \frac{n-m}{(1-q)^2} < 0$$

であるから、Q(q) は $d \log Q(q) / dq = 0$ を満たす点 $q = m/n$ で最大値を取る。しかし、データ中の 1 の数 m は確率的に変動する値であり、この推定値には誤差が含まれるはずである。また、n が大きくなるほど、データ中の 1 の個数

m が取り得る値は増加する。n が大きいと、m が特定の値を取る確率は非常に小さい。そのような小さな確率を根拠に m/n を q の推定値とすることは正当化されるのか検討する。

$$\frac{d \log Q\left(\frac{m}{n}\right)}{dq} = 0$$

$$\frac{d^2 \log Q\left(\frac{m}{n}\right)}{dq^2} = -n \left(\frac{1}{\frac{m}{n}} + \frac{1}{1-\frac{m}{n}} \right)$$

であるから、 $q = m/n + \epsilon$ とすると

$$\log Q(q) \approx \log Q\left(\frac{m}{n}\right) - \frac{\epsilon^2}{2} n \left(\frac{1}{\frac{m}{n}} + \frac{1}{1-\frac{m}{n}} \right)$$

なので

$$Q(q) \approx Q\left(\frac{m}{n}\right) \exp\left(-\frac{\epsilon^2}{2} n \left(\frac{1}{\frac{m}{n}} + \frac{1}{1-\frac{m}{n}} \right)\right)$$

である。

したがって、 $|\epsilon|$ が大きくなるに従って $Q(q)$ は急速に小さくなる。n が大きいと $Q(m/n)$ は小さな値となるが、 $Q(m/n + \epsilon)$ はそれよりもさらに小さな値となるのである。このことから、r の推定値として m/n を用いるのは妥当であろうと考えられる。

$q = m/n$ 付近では $d \log Q(m/n) / dq \approx 0$ なので $d^2 \log Q(m/n) / dq^2$ は $q = m/n$ 付近での $Q(q)$ の変化の度合いを表している。(相加平均) \geq (相乗平均) の不等式を使うと

$$\left| \frac{d^2 \log Q\left(\frac{m}{n}\right)}{dq^2} \right| \geq 2n \sqrt{\frac{1}{\frac{m}{n}}} \sqrt{\frac{1}{1-\frac{m}{n}}}$$

等号が成り立つのは $m/n = 1 - n/m$ のときつまり $m/n = 1/2$ のときであり、このとき $|d^2 \log Q(m/n) / dq^2|$ は最小となる。また $|d^2 \log Q(m/n) / dq^2|$ は n に比例して大きくなる。つまり、Q(q) の $q = m/n$ 付近での変化の度合いは m/n が 1/2 から離れるほど大きく、また n に比例して大きくなる。このことは、q の推定は m/n が 1/2 から離れるほど、また、n が大きいほど行いやすいことを示唆している。

次に、式(11)で $m/n = s$ とおいて、 $Q(m/n)$ を $B(p, ns)$ で表す。

$$B(p, ns) = \frac{n!}{(ns)!(n-ns)!} q^{ns} (1-q)^{n(1-s)}$$

である。スターリングの公式によって

$$n! \approx \sqrt{2\pi n} n^{n+\frac{1}{2}} \exp(-n)$$

等となるので、これを使って

$$\frac{n!}{(ns)!(n-ns)!}$$

を変形すると

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{n^{n+\frac{1}{2}}}{n^{ns+n(1-s)+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}} s^{\frac{1}{2}} (1-s)^{\frac{1}{2}}} \frac{1}{s^{ns}} \frac{1}{(1-s)^{n(1-s)}}$$

となる。これを代入して計算すると

$$B(p, ns) \approx \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1}{\sqrt{2\pi s(1-s)}} \left(\frac{q}{s}\right)^{ns} \left(\frac{1-q}{1-s}\right)^{n(1-s)} \quad (12)$$

となる。この対数を取ると

$$\begin{aligned} \log B(p, ns) & \approx -\frac{1}{2} \log n - \frac{1}{2} \log(2\pi s(1-s)) \\ & + ns \log \frac{q}{s} + n(1-s) \log \frac{1-q}{1-s} \end{aligned}$$

さらに $-1/n$ を掛けると

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{n} \log B(p, ns) \\ & \approx \frac{1}{2} \frac{\log n}{n} + \frac{1}{2n} \log(2\pi s(1-s)) \\ & + s \log \frac{s}{q} + (1-s) \log \frac{1-s}{1-q} \\ & = s \log \frac{s}{q} + (1-s) \log \frac{1-s}{1-q} + \frac{1}{n} O(\log n) + \frac{1}{n} O(1) \end{aligned}$$

O はランダウの記号である。ここでさらに $n \rightarrow \infty$ とすれば

$$\begin{aligned} & \rightarrow s \log \frac{s}{q} + (1-s) \log \frac{1-s}{1-q} \quad (n \rightarrow \infty) \\ & = D(B(s) \| B(q)) \end{aligned}$$

となる。したがって、 n が十分に大きいとき、 $D(B(s) \| B(q))$ は、 $B(q)$ からの n 標本の分布が $B(s)$ の分布になっている確率の対数に $-1/n$ を掛けたものを近似する量になっている。式(3)からは

$$\exp(-nD(B(s) \| B(q))) = \left(\frac{q}{s}\right)^{ns} \left(\frac{1-q}{1-s}\right)^{n(1-s)}$$

が得られる。これと式(12)を合わせて

$$\exp(-nD(B(s) \| B(q))) \approx B(p, ns) \times \sqrt{2\pi s(1-s)n}$$

が得られる。具体例の一つとして $s = 1/2$, $n = 10000$ として計算してみると

$$\begin{aligned} \sqrt{2\pi s(1-s)n} & = 100 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \\ & \approx 125.33 \end{aligned}$$

であるのでこの例では $\exp(-nD(B(s) \| B(q)))$ と $B(p, ns)$ との違いは125.33倍もあり、あまり小さくなっていない。 $D(B(s) \| B(q))$ は、 $B(q, ns)$ のうちで $\exp(n)$ よりも変化の

遅い因子を無視して、 $\exp(n)$ と同程度以上の速さで変化する因子の振る舞いを表していると考えられる。

標本から確率モデルのパラメタ推定を行う方法の一つに、最尤推定法と呼ばれるものがある。ベルヌーイ分布モデル $B(q)$, ($0 \leq q \leq 1$)の場合には、0と1のみを含む標本 $x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ から次のような尤度関数 $L(q)$ を作り、 $L(q)$ を最大とする q をパラメタの推定値とする方法となる。

$$L(q) = q^m (1-q)^{n-m}$$

ここで m は $\sum_{k=1}^n x_k$ である。これは x に含まれる1の個数と等しい。対数関数は狭義調増加関数なので、尤度関数の代わりに、その対数をとった対数尤度関数を最大にしても良い。

$$\log L(q) = m \log q + (n-m) \log(1-q) \quad (13)$$

$L(q)$ は $Q(q)$ と係数の $n!/(n!(n-m)!)$ の部分だけ異なっている。そのため、 $Q(q)$ と同様に、 $L(q)$ は $q = m/n$ のときに最大となることがわかる。最尤推定法は $B(q)$ からの標本が、 x の経験分布、つまり定めるベルヌーイ分布 $B(m/n)$ 、と等しくなる確率を最大とするような q を求める方法と同等である。

式(13)を n で割ると

$$\frac{1}{n} \log L(q) = \frac{m}{n} \log q + \frac{n-m}{n} \log(1-q)$$

となるが、これを $D(B(s) \| B(q))$ の式(3)と比較してみると、ちょうど $s = m/n$ において $-H(m/n)$ の項を無視し、さらに符号を変えたものになっている。ベルヌーイ分布モデルにおける最尤推定法は、標本分布をベルヌーイ分布の分布関数 $B(m/n)$ とみなし、 $D(B(m/n) \| B(q))$ が最小になる q を決定する問題と等価である。

3.1.3 より一般の確率分布とKLD

これまでベルヌーイ分布について、KLDがどのように二つの確率分布の違いを示しているのかをみた。ベルヌーイ分布モデルの場合、最尤推定法はKLDを最小にするパラメタを求める問題と等価だった。 $D(P \| Q)$ の定義で二つの分布 P, Q が非対称であるのも、一方がデータを生成する分布でありもう一方は比較対象であるという役割の違いを反映していると考えられる。

一般に、最尤推定は、得られたデータの定める経験分布に対し、考えているモデルの中でKLDの意味で最も経験分布に近いものを求める方法である。また、KLDの意味で最も近い、とは、直感的には、考えているモデルの中で、標

本抽出によって実際に得られた標本の定める経験分布と同じものが得られる確率を最大とするような分布であるということである。以下、そのことを説明する。

データ $x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ が得られているとする。R を R 上の確率分布であるとし、その確率密度関数を $r(x)$ とする。式(2)より、KLD は次のようになる。

$$D(\text{Emp}(x) \| R) = -\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \log r(x_k) - H(\text{Emp}(x))$$

ここで、

$$\sum_{k=1}^n \log r(x_k)$$

はデータ x に対するモデル R の対数尤度関数である。これを l と書くと

$$D(\text{Emp}(x) \| R) = -\frac{l}{n} - H(\text{Emp}(x))$$

となる。H(Emp(x)) はモデルとは無関係な値であるため、与えられたモデル R の元で $D(\text{Emp}(x) \| R)$ を最小化する問題は l を最大化する問題と同等である。

R からの標本の経験分布がデータ $x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ の経験分布 Emp(x) と一致する確率について、まず R が離散分布の場合について考える。x 中の数値はすべて異なっているとは限らず、同じ値が含まれることもある。x のうちの異なる値の総数を l 個とし、それらの値を $y = \{y_1, y_2, \dots, y_l\}$ とする。また $m_j = (x_k = y_j \text{ となる } x_k \text{ の個数})$ ($j = 1, \dots, l$) とする。 $\sum_{j=1}^l m_j = n$ である。このとき、求める確率は

$$\frac{n!}{m_1! m_2! \dots m_l!} \prod_{k=1}^l R(y_j)^{m_j}$$

である。スターリングの公式で階乗を近似すると

$$\begin{aligned} & \frac{\sqrt{2\pi n} n^{n+\frac{1}{2}} \exp(-n)}{\prod_{j=1}^l \left(\sqrt{2\pi m_j} m_j^{m_j+\frac{1}{2}} \exp(-m_j) \right)} \prod_{k=1}^l R(y_j)^{m_j} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{l-1}{2}}} \frac{n^n}{\prod_{j=1}^l m_j^{m_j}} \sqrt{\frac{n}{\prod_{j=1}^l m_j}} \prod_{k=1}^l R(y_j)^{m_j} \end{aligned}$$

この対数をとって $-1/n$ をかけると

$$\begin{aligned} & \frac{1}{n} \frac{l-1}{2} \log(2\pi) - \sum_{j=1}^l \frac{m_j}{n} \log \frac{1}{m_j} \\ & - \frac{1}{n} \frac{1}{2} \log \frac{n}{\prod_{j=1}^l m_j} - \sum_{j=1}^l \frac{m_j}{n} \log R(y_j) \end{aligned} \quad (14)$$

ここで

$$-\sum_{j=1}^l \frac{m_j}{n} \log \frac{1}{m_j} = -H(\text{Emp}(x))$$

である。また、R は離散分布なので $R(y_i) = r(y_i)$ であり ($r(x)$ は R の確率密度関数)、

$$-\sum_{j=1}^l \frac{m_j}{n} \log R(y_j) = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log r(x_i)$$

である。したがって、式(14)はさらに

$$\begin{aligned} & D(\text{Emp}(x) \| R) + \frac{1}{n} O(1) + \frac{1}{n} O(\log n) \\ & \rightarrow D(\text{Emp}(x) \| R) \quad (n \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

となる。R が連続分布のときは R からの標本が x と一致する確率は 0 である。しかし、仮にデータ中の各々の数値に $\pm \frac{\epsilon}{2}$ 程度の誤差が含まれていると考えれば、モデル R のもとで区間 $(x_k - \frac{1}{2}\epsilon, x_k + \frac{1}{2}\epsilon)$ の確率は $r(x_k)\epsilon$ で近似され、標本 x が得られる確率は

$$n! \prod_{k=1}^n (r(x_k)\epsilon)$$

で近似される。階乗をスターリングの公式で近似して対数をとると

$$\frac{1}{2} \log(2\pi) + \left(n + \frac{1}{2}\right) \log n - n + \sum_{k=1}^n \log(r(x_k)\epsilon)$$

これに $-1/n$ をかけると

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{n} \frac{1}{2} \log(2\pi) - \left(1 + \frac{1}{n}\right) \log n \\ & + 1 - \sum_{k=1}^n \frac{1}{n} \log(r(x_k)\epsilon) \\ & = -\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \log r(x_k) - H(\text{Emp}(x)) \\ & + 1 + \log \epsilon + \frac{1}{n} O(1) + \frac{1}{n} O(\log n) \\ & \rightarrow D(\text{Emp}(x) \| R) - 1 + \log \epsilon \quad (n \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

となる。離散分布の場合とは定数の $1 + \log \epsilon$ の分だけ異なっているが、これを最小化するのは $D(\text{Emp}(x) \| R)$ を最小化するのと同等である。離散分布の場合も連続分布の場合も、 $D(\text{Emp}(x) \| R)$ は R からの標本の経験分布が Emp(x) と一致する確率の指標とみなすことが出来る。

以上より、最尤推定法によるパラメタ推定は、モデルから生成したデータの経験分布が、与えられたデータの経験分布と一致する確率が出るだけ大きくなるようにパラメタを定める方法とみなすことが出来る。

統計的推測とは、一般に、真の分布 Q に対して、与えられた条件のもとで (与えられたモデルの範囲で) $D(Q \| P)$ をできるだけ小さくするような分布 P を求めること、あるいはそのような分布をもちいた推論であるといえる ([16] p.209)。

モデルの良さを比較するのによく使われるAICも、データを元にした経験分布Emp(x)とモデルによる理論上の分布RのあいだのD(Emp(x) || R)の近似計算から導出される[17]。

3.1.4 モデルのパラメタについて

3.1.3節ではデータの経験分布に合わせてKLDを最小化するパラメタを求める問題は、モデルから生成されたデータの経験分布が元のデータの経験分布と等しくなる確率を最大化するパラメタを求める問題とみなせることがわかった。しかし、ただ単にデータにできるだけ合った確率モデルを推定するだけなら次のようにするのが最適であろう。データ $x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ に対して、離散分布Rの確率密度関数 $r(x)$ 次のように定める。

$$r(x) = \frac{1}{n} (x_i = x \text{ となる } x_i \in x \text{ の個数})$$

この確率密度関数の定める分布はEmp(x)と全く同じものであり

$$D(\text{Emp}(x) || R) = 0$$

が成り立つ。この分布Rには独立なパラメタの数がデータの個数と同じくn個あると考えることが来る。データがn個なので、これ以上独立なパラメタを増やすことは出来ない。

確率モデルが独立なパラメタを複数含むとき、パラメタ推定には各パラメタ毎の不確実性も考慮する必要がある。その効果はパラメタの個数が多いほど大きいと考えられる。パラメタの個数が多くなるほど、パラメタ推定は困難になると考えるべきである。ところが、KLDによるパラメタ推定、したがって、最尤推定法によるパラメタ推定では、そのようなパラメタの個数に関する事情は考慮していない。その意味では、上記の推定法は良い推定法にはなっていない。

AICでは、パラメタの推定誤差を加味してモデルのパラメタの個数に比例した補正を加える（詳細については文献[17]などを参照）。

4. KLD の計算例

本節ではいくつかの確率分布について、KLDの例を具体的に計算してみる。

4.1 一様分布

この節では一様分布とそれ以外の分布との間のKLDについて調べる。U(a, b) (a < b) で[a, b) 上の連続一様分布を表す。U(a, b) の確率密度関数は次のようになる。

$$u_{[a,b)}(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & (x \in [a,b)) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

また、エントロピーは、

$$\begin{aligned} H(U(a,b)) &= - \int_a^b \frac{1}{b-a} \log \frac{1}{b-a} dx \\ &= - \frac{1}{b-a} \log \frac{1}{b-a} \int_a^b dx \\ &= \log(b-a) \end{aligned}$$

である。U(a, b) とR上の確率分布Fとの間のKLDについて、Fの確率密度関数を $f(x)$ とおくと、

$$\begin{aligned} D(F || U) &= \begin{cases} \log(b-a) \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx - H(F) & (F \ll U) \\ \infty & (\text{otherwise}) \end{cases} \\ D(U || F) &= - \frac{1}{b-a} \int_a^b \log f(x) dx - \log(b-a) \end{aligned} \quad (15)$$

である。

4.2 ガウス分布

4.2.1 ガウス分布間のKLD

確率分布G(μ, σ)でガウス分布を表す。また、その確率密度関数を $g(x; \mu, \sigma)$ で表す。

$$g(x; \mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

パラメタが異なる二つのガウス分布間のKLDを求める。まず次のものを計算する。

$$\begin{aligned} & - \int_{-\infty}^{\infty} g(x; \mu_1, \sigma_1) \log g(x; \mu_2, \sigma_2) dx \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} g(x; \mu_1, \sigma_1) \\ & \times \log \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} \exp\left(-\frac{(x-\mu_2)^2}{2\sigma_2^2}\right) \right) dx \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} g(x; \mu_1, \sigma_1) dx \log \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} \\ & + \frac{1}{2\sigma_2^2} \int_{-\infty}^{\infty} g(x; \mu_1, \sigma_1) (x-\mu_2)^2 dx \end{aligned} \quad (16)$$

ここで $u = x - \mu_1$ と変数変換すると、第2項の積分は

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} (u + \mu_1 - \mu_2)^2 g(u; 0, \sigma_1) du \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} (u^2 + 2(\mu_1 - \mu_2)u + (\mu_1 - \mu_2)^2) g(u; 0, \sigma_1) du \end{aligned}$$

となるが、ここで、 $g(u; 0, \sigma)$ の期待値と分散がそれぞれ $0, \sigma^2$ であることと、期待値・分散の性質を用いると、この積分は

$$\sigma_1^2 + (\mu_1 - \mu_2)^2$$

となる。まとめると、式(16)は結局

$$= \log \left(\sqrt{2\pi\sigma_2} \right) + \frac{\sigma_1^2 + (\mu_1 - \mu_2)^2}{2\sigma_2^2} \quad (17)$$

となる。式(17)で $\mu_1 = \mu_2 = \mu$ および $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$ とおくと

$$H(g(\mu, \sigma)) = \log \left(\sqrt{2\pi\sigma} \right) + \frac{1}{2}$$

となる。ガウス分布のエントロピーは期待値 μ によらないことが分かる。

また、式(17)をもちいて、

$$\begin{aligned} D(g(\mu_1, \sigma_1) \| g(\mu_2, \sigma_2)) &= \log \left(\sqrt{2\pi\sigma_2} \right) + \frac{\sigma_1^2 + (\mu_1 - \mu_2)^2}{2\sigma_2^2} \\ &\quad - \log \left(\sqrt{2\pi\sigma_1} \right) - \frac{1}{2} \\ &= \log \frac{\sigma_2}{\sigma_1} + \frac{\sigma_1^2 + (\mu_1 - \mu_2)^2}{2\sigma_2^2} - \frac{1}{2} \end{aligned}$$

となる。ここで $\mu_1 = \mu_2 = \mu$ とおくと

$$\begin{aligned} D(g(\mu, \sigma_1) \| g(\mu, \sigma_2)) &= -\log \frac{\sigma_1}{\sigma_2} + \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\sigma_1}{\sigma_2} \right)^2 - 1 \right) \\ &= -\log \frac{\sigma_1}{\sigma_2} + \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_1}{\sigma_2} + 1 \right) \left(\frac{\sigma_1}{\sigma_2} - 1 \right) \end{aligned}$$

また、 $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$ とおくと

$$D(g(\mu_1, \sigma) \| g(\mu_2, \sigma)) = \frac{(\mu_1 - \mu_2)^2}{2\sigma^2}$$

となる。 $\mu_1 - \mu_2$ が同じでも、 σ が大きいと $D(g(\mu_1, \sigma) \| g(\mu_2, \sigma))$ が小さくなることが分かる。

4.2.2 データの経験分布とガウス分布

データ $x = \{x_i\}_{i=1}^n$ が与えられたとき、

$$\begin{aligned} D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma)) &= -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \log \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp \left(-\frac{(x_i - \mu)^2}{2\sigma^2} \right) \right) - \log n \\ &= \log \left(\sqrt{2\pi\sigma} \right) + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \mu)^2}{2\sigma^2} - \log n \end{aligned}$$

となる。この偏導関数を求めると

$$\frac{\partial D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma))}{\partial \mu} = -\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{x_i - \mu}{\sigma^2},$$

$$\frac{\partial D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma))}{\partial \sigma} = \frac{1}{\sigma} - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \mu)^2}{\sigma^3},$$

$$\frac{\partial^2 D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma))}{\partial \mu^2} = \frac{1}{\sigma^2},$$

$$\frac{\partial^2 D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma))}{\partial \sigma^2} = -\frac{1}{\sigma^2} + \frac{3}{n} \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - \mu)^2}{\sigma^4},$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma))}{\partial \mu \partial \sigma} &= \frac{\partial^2 D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma))}{\partial \sigma \partial \mu} \\ &= \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \frac{x_i - \mu}{\sigma^3} \end{aligned}$$

のようになる。 $D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma))$ の増減についてしらべる。 μ のみの関数と考える場合

$$\frac{\partial D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma))}{\partial \mu} = 0$$

を μ について解くと

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

となる。 $\partial^2 D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma)) / \partial \mu^2 > 0$ なので、 $D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma))$ は、 μ の関数としては μ が $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$ のときに最小値をとる。つぎに μ のみの関数と考える場合

$$\frac{\partial D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma))}{\partial \sigma} = 0$$

を σ について解くと

$$\sigma^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2$$

となる。式(18)が成り立つ場合には

$$\frac{\partial^2 D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma))}{\partial \sigma^2} = -\frac{1}{\sigma^2} + \frac{3}{\sigma^2} = \frac{2}{\sigma^2} > 0$$

となるので $\partial^2 D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma)) / \partial \sigma^2 > 0$ となる。つまり式(18)が成り立つとき、 $D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma))$ は式(19)において最小値をとる。また、 μ, σ を同時に動かすときには、

$$\begin{aligned} &\frac{\partial^2 D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma))}{\partial \mu^2} \frac{\partial^2 D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma))}{\partial \sigma^2} \\ &\quad - \left(\frac{\partial^2 D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma))}{\partial \sigma \partial \mu} \right)^2 > 0 \end{aligned}$$

なので、 $D(\text{Emp}(x) \| g(\mu, \sigma))$ は式(18)、(19)において最小値をとる。

4.3 指数分布

E(a) を指数分布とする。確率密度関数 $e(x, a)$ は次のようになっているとする。

$$e(x, a) := \begin{cases} a \exp(-a(x - M)) & (x \geq M) \\ 0 & (x < M) \end{cases}$$

ここで $a > 0, M > 0$ であるとする。

エントロピーとKLDを計算するために、まず次のものを計算する。

$$\begin{aligned} & - \int_M^\infty a_1 \exp(-a_1(x - M)) \\ & \times \log(a_2 \exp(-a_2(x - M))) dx \\ & = - \int_0^\infty a_1 \exp(-a_1 x) \log(a_2 \exp(-a_2 x)) dx \\ & = -a_1 \log a_2 \int_0^\infty \exp(-a_1 x) dx \\ & + a_1 a_2 \int_0^\infty \exp(-a_1 x) x dx \\ & = -\log a_2 + \frac{a_2}{a_1} \end{aligned}$$

$a_1 = a_2 = a$ において、エントロピーは

$$H(E(a)) = -\log a + 1 \quad (20)$$

また

$$\begin{aligned} D(E(a_1) \| E(a_2)) & = -\log a_2 + \frac{a_2}{a_1} - H(E(a_1)) \\ & = -\log \frac{a_2}{a_1} + \frac{a_2}{a_1} - 1 \end{aligned} \quad (21)$$

となる。

4.3.1 エントロピーの数値計算

Julia 言語で指数分布のエントロピーの近似値を計算したところ、図3のような結果が得られた。この計算では $M = 1, a = 1$ としている。式(20)に $a = 1, M = 1$ を代入して厳密な値を求めると1となる。図3は次の関数をプロットしたものになっている。

$$f(u) = \int_1^u -\exp(-x) \log(\exp(-x)) dx$$

図3では、積分の上限 u がかなり小さいところでもそれに近い値になっている。

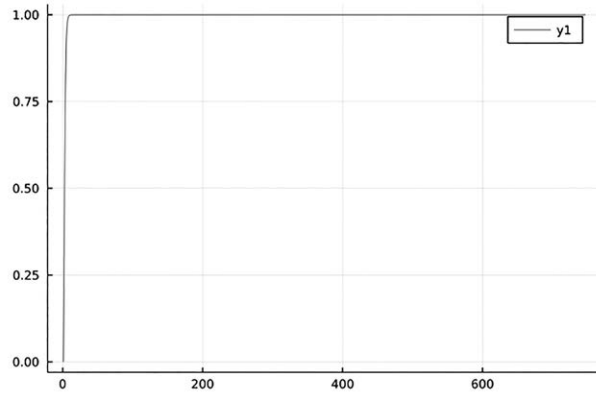


図3：パレート分布のエントロピー

指数分布のエントロピー。積分の上限 u を変数として数値積分を行った結果を示す。 $a = 1$ として計算した。積分の上限 u を小さくとっても厳密な値1に近い結果が得られている。

4.4 パレート分布

$P(b)$ をパレート分布とする。確率密度関数 $p(x, b)$ は次のようになる。

$$p(x, b) := \begin{cases} \frac{b}{M} \left(\frac{x}{M}\right)^{-b-1} & (x \geq M) \\ 0 & (x < M) \end{cases}$$

ここで $b > 0, M > 0$ であるとする。

エントロピーとKLDを計算するために、まず次の計算を行う。

$$\begin{aligned} & - \int_M^\infty \frac{b_1}{M} \left(\frac{x}{M}\right)^{-b_1-1} \log\left(\frac{b_2}{M} \left(\frac{x}{M}\right)^{-b_2-1}\right) dx \\ & = - \int_1^\infty b_1 x^{-b_1-1} \log\left(\frac{b_2}{M} x^{-b_2-1}\right) dx \\ & = -b_1 \log \frac{b_2}{M} \int_1^\infty x^{-b_1-1} dx \\ & + b_1(b_2 + 1) \int_1^\infty x^{-b_1-1} \log x dx \\ & = -\log \frac{b_2}{M} + \frac{b_2 + 1}{b_1} \int_0^\infty x \exp(-b_1 x) dx \\ & = -\log \frac{b_2}{M} + \frac{b_2 + 1}{b_1} \end{aligned}$$

$b_1 = b_2 = b$ においてエントロピーは次のようになる。

$$H(P(b)) = -\log \frac{b}{M} + \frac{b+1}{b} \quad (22)$$

また、KLDは

$$\begin{aligned}
 D(P(b_1)||P(b_2)) &= -\log \frac{b_2}{M} + \frac{b_2+1}{b_1} - H(P(b_1)) \\
 &= -\log \frac{b_2}{M} + \frac{b_2+1}{b_1} + \log \frac{b_1}{M} - \frac{b_1+1}{b_1} \\
 &= -\log \frac{b_2}{b_1} + \frac{b_2}{b_1} - 1 \quad (23)
 \end{aligned}$$

となる。式(21)と式(23)から

$$D(P(b_1)||P(b_2)) = D(E(b_1)||E(b_2)) \quad (24)$$

が成り立っていることが分かる。

$\{Y_1, Y_2, \dots, Y_n\}$ がパレート分布 $1-(x/M)^{-b}$ ($x > M$) に従う確率変数列であるとすれば、 $X_i = \log(Y_i)$ として $\{X_1, X_2, \dots, X_n\}$ は指数分布 $E(b)$ に従う確率変数列である。式(24)は指数分布とパレート分布がこのように変数の変換で関係付けられることを反映している。指数分布 $E(b)$ の期待値は $1/b$ である。 X_i の平均値 $\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n X_i$ は b の推定値ではなく $1/b$ の推定値である。これらのことから、パレート分布について、パラメタの推定に $\{Y_1, Y_2, \dots, Y_n\}$ の平均ではなくそれらの逆数 $\{1/Y_1, 1/Y_2, \dots, 1/Y_n\}$ の平均を用いることが考えられる。 $1/Y_1$ の確率分布関数は

$$\begin{aligned}
 &1 - \left(1 - \left(\frac{1}{M}\right)^{-b} \left(\frac{1}{x}\right)^{-b}\right) \quad \left(0 < x < \frac{1}{M}\right) \\
 &M^b x^b \quad \left(0 < x < \frac{1}{M}\right)
 \end{aligned}$$

確率密度関数は

$$bM^b x^{b-1} \quad \left(0 < x < \frac{1}{M}\right)$$

である。この確率分布は期待値も分散も有限なので、大数の法則や中心極限定理が適用できる。 $1/Y_1$ の期待値を求めると

$$\begin{aligned}
 \mu &:= bM^b \int_0^{\frac{1}{M}} x \cdot x^{b-1} dx \\
 &= bM^b \int_0^{\frac{1}{M}} x^b dx \\
 &= bM^b \left[\frac{x^{b+1}}{b+1} \right]_0^{\frac{1}{M}} \\
 &= \frac{b}{b+1} \frac{1}{M}
 \end{aligned}$$

したがって

$$\begin{aligned}
 b &= \frac{\mu}{\frac{1}{M} - \mu} \\
 &= \frac{1}{1 - \mu M} - 1 \quad (25)
 \end{aligned}$$

が得られる。 $M=1, b=0.5$ として、パレート分布 $P(0.5)$ に従う 1000 個の乱数列を数回ほど発生させて式 25 を計算したところ

0.5028102516981037
0.4836824055965506
0.4998295399264165

などの値が得られた。同様に、 $b=0.7$ では

0.7066155453254308
0.7047522695418381
0.753607277210596

などようになった。

4.4.1 エントロピーの数値計算

パレート分布に対して 4.5.1 節と同じようにエントロピーの数値計算を行った。この計算では $M=1, b=1$ としている。式(22)による厳密な値は 2 である。計算結果は図 4 のようになった。指数分布のとき(図 3)と比べると収束は遅いが、 $u=600$ ほどで厳密な値 2 に近い値となっている。

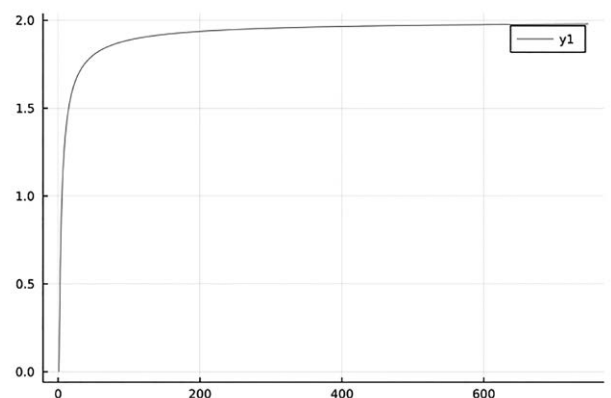


図 4：パレート分布のエントロピー

積分の上限 u を変数として数値積分を行った結果を示す。 $M=1, b=1$ として計算した。指数分布のとき(図 3)ほど収束は速くないが、 $u=600$ ぐらいで厳密な値 2 に近い結果となっている。

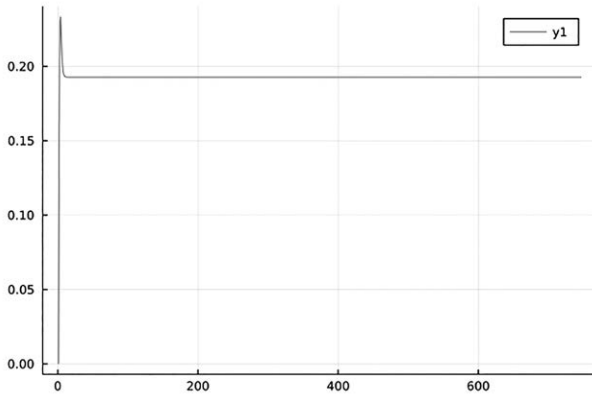


図5：パレート分布の指数分布族に対するKLD
積分の上限uを変数として数値積分を行った結果を示す。uが小さいところでは安定しないが、uが数10を超えるあたりからほぼ一定値となっている。

4.5 パレート分布の指数分布に対するKLD

カルバック・ライブラー・ダイバージェンス $D(E\|P)$ は次のようになる。

$$D(E\|P) = \int_M^\infty a \exp(-a(x-M)) \log \frac{a \exp(-a(x-M))}{\frac{b}{M} \left(\frac{x}{M}\right)^{-b-1}} dx \quad (26)$$

式(26)には $\exp(u) \log(u)$ のような形の関数の定積分が含まれている。この積分を実行するには指数積分と呼ばれる特殊関数が必要になる。厳密な計算を行う前に、4.5.1節および4.6.1節と同じ方法で数値計算を行ってみた。結果は図5は次のようになった。計算結果はuが小さいところを除いてほぼ一定で安定している。

次に、式(26)を計算する。式(1)と式(22)により、次のものを計算すれば良い。

$$- \int_M^\infty a \exp(-a(x-M)) \log \left(\frac{b}{M} \left(\frac{x}{M}\right)^{-b-1} \right) dx \quad (27)$$

ここで

$$a \exp(-a(x-M)) = a \exp(-ax) \exp(aM),$$

$$\log \left(\frac{b}{M} \left(\frac{x}{M}\right)^{-b-1} \right) = \log \frac{b}{M} - (b+1) \log \frac{x}{M}$$

となることを用いて、まず

$$- \int_M^\infty a \exp(-a(x-M)) \log \frac{b}{M} dx$$

を計算すると

$$= -a \exp(aM) \log \frac{b}{M} \int_M^\infty \exp(-ax) dx$$

$$= -a \exp(aM) \log \frac{b \exp(aM)}{M a}$$

$$= -\log \frac{b}{M} \quad (28)$$

次に

$$- \int_M^\infty a \exp(-a(x-M)) \log \left(\left(\frac{x}{M}\right)^{-b-1} \right) dx$$

を計算すると

$$= a(b+1) \exp(aM) \int_M^\infty \exp(-ax) \log \left(\frac{x}{M} \right) dx$$

$$= (b+1) \exp(aM) \left(\int_{aM}^\infty \exp(-x) \log x dx - \log(aM) \int_{aM}^\infty \exp(-x) dx \right)$$

$$= -\exp(aM) (b+1) \log(aM) \int_{aM}^\infty \exp(-x) dx + (b+1) \exp(aM) \int_{aM}^\infty \exp(-x) \log x dx$$

$$= -(b+1) \log(aM) + (b+1) \exp(aM) \times \left([-\exp(-x) \log x]_{aM}^\infty + \int_{aM}^\infty \frac{\exp(-x)}{x} dx \right)$$

$$= -(b+1) \log(aM) + (b+1) \log(aM) + (b+1) \exp(aM) \int_{aM}^\infty \frac{\exp(-x)}{x} dx$$

$$= (b+1) \exp(aM) \int_{aM}^\infty \frac{\exp(-x)}{x} dx \quad (29)$$

式(28)、(29)から、式(27)は次のようになる。

$$-\log b + \log M + (b+1) \exp(aM) \int_{aM}^\infty \frac{\exp(-x)}{x} dx \quad (30)$$

指数積分 E_1 と呼ばれる特殊関数(5.節の式(47))を使うと、式(30)はさらに

$$-\log b + \log M + (b+1) \exp(aM) E_1(aM) \quad (31)$$

と表すことができる。指数積分 E_1 は $x > 0$ に対しては次のように定義される。

$$E_1(x) := \int_x^\infty \frac{\exp(-y)}{y} dy \quad (x > 0)$$

式(22)と式(31)を用いると

$$D(E\|P) = \log a - \log b + \log M - 1 + (b+1) \exp(aM) E_1(aM) \quad (32)$$

となる。この結果から、 $D(E \parallel P)$ の積分は収束して有限でなければならないことが分かる。

式(32)に $a = b = 1$ と $M = 1$ を代入すると

$$-1 + 2 \exp(1) E_1(1)$$

となる。Julia 言語の特殊関数を扱うためのSpecial Functionsライブラリに E_1 が中に含まれている。これで式(33)の近似値を求めたところ、0.19269472464638815 となった。図5の数値積分ではこれに近い値が得られていた。

式(32)の増減などについて調べてみる。計算の前に、Julia 言語を使って、式(32)のグラフをいくつか作成してみたものの例が図(6)である。Mを1に固定し、a, bも限られた範囲でしかプロットしていないが、aの値を一つ固定してbの関数としてみた場合、下に凸で、bを0から増加させると途中で一つ最小値が現れることが予想される。同じく、bを固定してaを0から増加させる場合にも下に凸となり、途中で一つ最小値が現れると予想される。

まず、式(32)から次のことは容易に分かる。

$$\lim_{b \rightarrow 0} D(E \parallel P) = \infty \quad (\forall a > 0, \forall M > 0)$$

$$\lim_{b \rightarrow \infty} D(E \parallel P) = \infty \quad (\forall a > 0, \forall M > 0)$$

また、 $M > 0$ に対して、 $a \rightarrow \infty$ のとき

$$E_1(aM) \rightarrow 0, \exp(aM) \rightarrow \infty, \log a \rightarrow \infty$$

なので

$$\lim_{a \rightarrow \infty} D(E \parallel P) = \infty \quad (\forall b > 0, \forall M > 0)$$

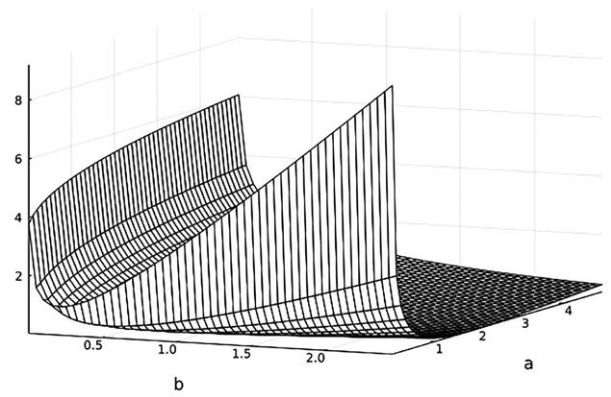
である。

bを固定して $a \rightarrow 0$ とした場合について調べるため、指数積分 $E_1(x)$ に関してよく知られた公式

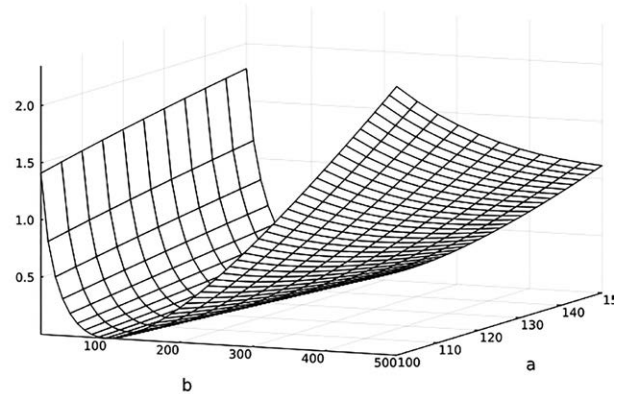
$$E_1(x) = -\log x + E_1(1) - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k (x^k - 1)}{k \cdot k!}$$

(5.節の式(50))を用いる。これを式(32)に代入すると

$$\begin{aligned} & \log a - \log b + \log M - 1 + (b+1) \exp(aM) \\ & \times \left(-\log(aM) + E_1(1) - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k ((aM)^k - 1)}{k \cdot k!} \right) \\ & = (1 - (b+1) \exp(aM)) \log a - \log b + \log M - 1 \\ & - (b+1) \exp(aM) \left(E_1(1) - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k ((aM)^k - 1)}{k \cdot k!} \right) \end{aligned} \quad (34)$$



(a) $M = 1, 0.005 \leq a \leq 5.0, 0.005 \leq b \leq 2.5$



(b) $M = 1, 100.0 \leq a \leq 150.0, 10.0 \leq b \leq 500$

図6：パレート分布の指数分布に対するKLDの例

式(32)を手計算で求める前に数値的に計算してみたもの。このグラフからは、aを固定してbの関数としてみた場合、および、bを固定してaの関数として見た場合、それぞれの場合で、下に凸となり、途中で一つ最小値が現れるのではないかと予想される。

実際に手計算で計算してみると予想通りになったが、a, bを固定せず二変数関数としてみた場合には極値を持たないという結果になった。

となる。ここで $a \rightarrow 0$ のとき $1 - (b+1) \exp(aM) \rightarrow -b$ であり、第二項以降はすべて有界であるから、 $a \rightarrow 0$ のとき式(34)は

$$-b \lim_{a \rightarrow 0} \log a = \infty$$

となる。

式(32)をbで偏微分すると

$$\frac{\partial D(E \parallel P)}{\partial b} = -\frac{1}{b} + \exp(aM) E_1(aM)$$

となる。5.節の(56)の性質から $\partial D(E \parallel P) / \partial b = 0$ を満たす $b > 0$ はただ一つ存在する。

したがってM, aを固定してbを動かすとき、bに関して

$$(b+1)M \exp(aM)E_1(aM) \geq \frac{b}{a}$$

$$aM \exp(aM)E_1(aM) \geq \frac{b}{b+1}$$

であり、D(E||P)はb = 1/exp(aM)E₁(aM)のときに最小値

$$\log(aM \exp(aM)E_1(aM)) + \exp(aM)E_1(aM)$$

を取ることが分かる。

式(32)をaで偏微分すると

$$\frac{\partial D(E||P)}{\partial a}$$

$$= \frac{1}{a} + (b+1)M \exp(aM)E_1(aM) - \frac{b+1}{a}$$

$$= -\frac{b}{a} + (b+1)M \exp(aM)E_1(aM)$$

この式を≥0とすると、

$$(b+1)M \exp(aM)E_1(aM) \geq \frac{b}{a}$$

$$aM \exp(aM)E_1(aM) \geq \frac{b}{b+1}$$

となる。0 < b/(b+1) < 1と5.節の(53)の性質から、任意のb > 0に対して次を満たすようなaの値a₀がただ一つ存在する。

$$\begin{cases} aM \exp(aM)E_1(aM) < \frac{b}{b+1} & (a < a_0) \\ aM \exp(aM)E_1(aM) = \frac{b}{b+1} & (a = a_0) \\ aM \exp(aM)E_1(aM) > \frac{b}{b+1} & (a > a_0) \end{cases}$$

このことから、D(E||P)はb, Mを固定してaを0から∞まで動かすとき、ただ一つの最小値を持つ。その最小値は式(32)とa₀M exp(a₀M)E₁(a₀M) = bb+1を用いて

$$\log a_0 - \log b + \log M - 1 + \frac{b}{a_0 M}$$

$$= \frac{b}{a_0 M} - \log \frac{b}{a_0 M} - 1$$

と表せる。

Mを固定してa, bを同時に動かしたとき、D(E||P)が極小値をもつためには次の連立方程式が正の実数解の組を持たなければならない。

$$\begin{cases} b = \frac{1}{\exp(aM)E_1(aM)} \\ aM \exp(aM)E_1(aM) = \frac{b}{b+1} \end{cases}$$

第一式を第二式に代入して変形すると

$$\begin{cases} b = \frac{1}{\exp(aM)E_1(aM)} \\ b^2 - aMb - aM = 0 \end{cases} \quad (35)$$

が得られる。式(35)の第二式をbについて解くと

$$b = \frac{aM \pm \sqrt{aM(aM+4)}}{2}$$

となる。符号が負の方の解は全体が負なので、ここでは考慮する必要はない。符号が正の方の解と式(35)の第一式から

$$\frac{1}{\exp(aM)E_1(aM)} = aM \frac{1 + \sqrt{1 + \frac{4}{aM}}}{2}$$

$$aM \exp(aM)E_1(aM) = \frac{2}{1 + \sqrt{1 + \frac{4}{aM}}}$$

$$= 2 \frac{1 - \sqrt{1 + \frac{4}{aM}}}{1 - (1 + \frac{4}{aM})}$$

$$= \frac{aM}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4}{aM}} - 1 \right)$$

が得られる。図7のx exp(x)E₁(x) - x/2 (√(1+4/x) - 1)のグラフを見ると、x > 0のとき負であり、したがって式(35)の解は存在しないことが予想される。以下、そのことを示す。5.節の式(57)からx > 0のとき

$$\log \left(1 + \frac{1}{x} \right) < \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4}{x}} - 1 \right) \quad (36)$$

を示せば良い。

$$\psi(x) := \log \left(1 + \frac{1}{x} \right) - \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4}{x}} - 1 \right)$$

とおくと、

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = \frac{-\frac{1}{x^2}}{1 + \frac{1}{x}} - \frac{1}{2} \left(\frac{-4}{x^2} \right) \left(1 + \frac{4}{x} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

$$= -\frac{1}{x} \left(\frac{1}{x+1} - 2(x^2+4x)^{-\frac{1}{2}} \right)$$

であり、x > 0のときdψ(x)/dx > 0は次と同値である。

$$\frac{1}{x+1} < 2(x^2+4x)^{-\frac{1}{2}}$$

$$2(x+1) > \sqrt{x^2+4x}$$

$$4(x^2+2x+1) > x^2+4x$$

$$3x^2+4x+4 > 0$$

$$3 \left(x + \frac{2}{3} \right)^2 + \frac{8}{3} > 0$$

これは $x > 0$ のとき常に成り立つので、 $x > 0$ のとき $\psi(x)$ は広義単調増加である。また

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \psi(x) = 0$$

なので、 $x > 0$ で $\psi(x) < 0$ である。したがって式(36)が成り立つ。以上により、 M を固定して $a > 0, b > 0$ を同時に動かしたとき、 $D(E \parallel P)$ は極小値を持たない。

4.6 指数分布のパレート分布に対するKLD

次に $D(E \parallel P)$ について調べてみる。式(1)より、 $D(E \parallel P)$ を計算するには次のものを求めれば良い。

$$\begin{aligned} & - \int_M^{\infty} \frac{b}{M} \left(\frac{x}{M}\right)^{-b-1} \log(a \exp(-a(x-M))) dx \\ &= -bM^b (\log a + aM) \int_M^{\infty} x^{-b-1} dx + abM^b \int_M^{\infty} x^{-b} dx \end{aligned}$$

$b \leq 1$ のときは第一の積分が有限で第二項の積分が正の無限大となるため、全体が正の無限大になってしまう。この場合について、後で4.9節で触れる。 $b > 1$ のときは

$$\begin{aligned} &= -bM^b (\log a + aM) \left[\frac{1}{-b} x^{-b} \right]_M^{\infty} \\ &+ abM^b \left[\frac{1}{-b+1} x^{-b+1} \right]_M^{\infty} \\ &= -(\log a + aM) + \frac{abM}{b-1} \\ &= -\log a + \frac{aM}{b-1} \end{aligned}$$

これと式(22)、式(1)により、 $b > 1$ のとき

$$D(P \parallel E) = -\log a + \log b - \log M - 1 - \frac{1}{b} + \frac{aM}{b-1}$$

となる。 $b \leq 1$ の場合と合わせて

$$D(P \parallel E) = \begin{cases} -\log a + \log b - \log M - 1 - \frac{1}{b} + \frac{aM}{b-1} & (b > 1) \\ \infty & (b \leq 1) \end{cases} \quad (37)$$

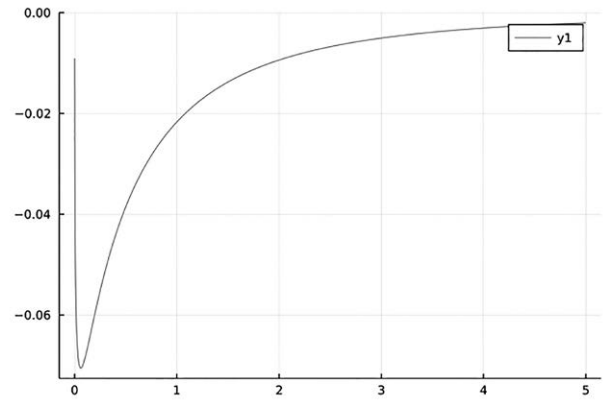
が得られる。図8は式(37)による $D(P \parallel E)$ のグラフである。

式(37)を用いて、 $b > 1$ のときの $D(P \parallel E)$ の増減について調べる。 a, M を固定して b を動かすとき

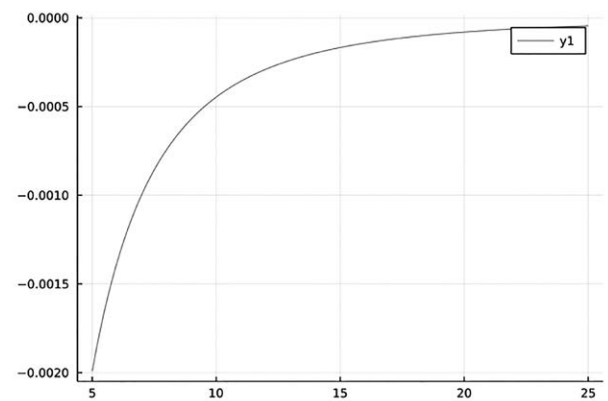
$$\lim_{b \rightarrow +1} D(P \parallel E) = \infty, \quad \lim_{b \rightarrow \infty} D(P \parallel E) = \infty$$

はすぐに分かる。また、 b, M を固定して a を動かすとき

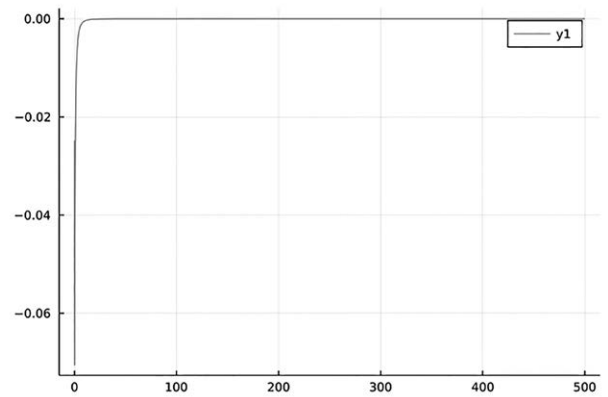
$$\lim_{a \rightarrow 0} D(P \parallel E) = \infty, \quad \lim_{a \rightarrow \infty} D(P \parallel E) = \infty$$



(a) $0.0001 \leq x \leq 5$

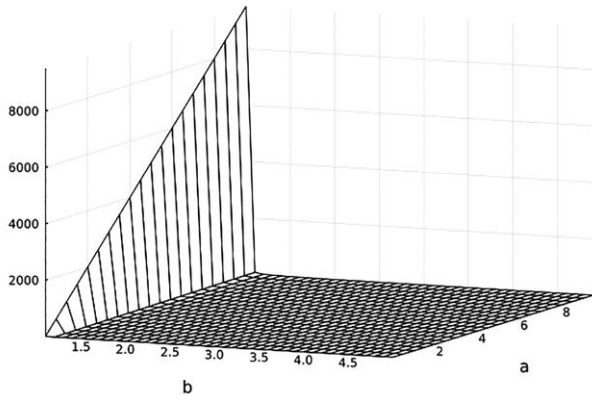


(b) $5 \leq x \leq 25$

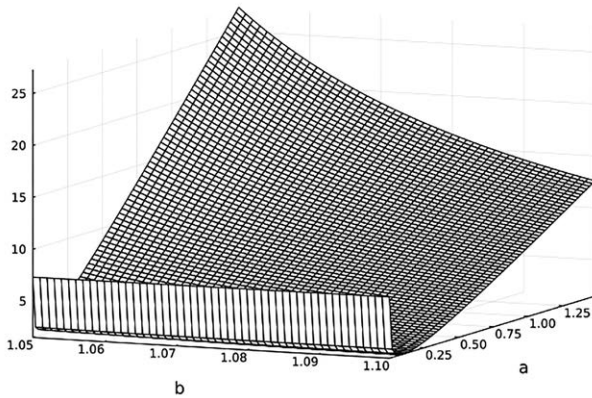


(c) $0.001 \leq x \leq 500$

図7: $x \exp(x) E_1(x) - \frac{x}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4}{x}} - 1 \right)$ のグラフ
 $x > 0$ において $x \exp(x) E_1(x) - \frac{x}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4}{x}} - 1 \right) = 0$ に実数解が存在するかどうかを手計算で調べる前に、試しに作成してみたもの。 $x \rightarrow \infty$ で 0 へと単調増加するものの、有限の x では 0 にならないことが予想される。



(a) $M = 1, 0.01 \leq a \leq 10.0, 1.001 \leq b \leq 5.0$



(b) $M = 1, 0.0001 \leq a \leq 1.5, 1.05 \leq b \leq 1.1$

図8：指数分布のパレート分布に対するKLDの例
式(37)に基づく。aを固定してbの関数としてみた場合、および、bを固定してaの関数として見た場合、それぞれの場合で、下に凸となり、途中で一つ最小値が現れる。

も容易である。

式(37)をaで偏微分すると

$$\frac{\partial}{\partial a} D(P\|E) = -\frac{1}{a} + \frac{M}{b-1} \quad (38)$$

となるので、b, Mを固定してaを動かすとき

$$\begin{cases} a < \frac{b-1}{M} \text{ のとき } D(P\|E) \text{ は } a \text{ に関して単調減少。} \\ a = \frac{b-1}{M} \text{ のとき } D(P\|E) \text{ は } a \text{ に関して最小値を取る。} \\ a > \frac{b-1}{M} \text{ のとき } D(P\|E) \text{ は } a \text{ に関して単調増加。} \end{cases}$$

となる。最小値は

$$-\log\left(1 - \frac{1}{b}\right) - \frac{1}{b} \quad (39)$$

である。これを微分すると

$$\frac{-1}{b(b-1)} + \frac{1}{b^2} = \frac{-1}{b^2(b-1)} < 0$$

なので、式(39)はbに関して単調減少である。

また $\log(1-x)$ の級数展開を用いると、この式は

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{kb^k} - \frac{1}{b} = \frac{1}{b^2} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{3b} + \dots \right)$$

と表すことが出来るので、ほぼ b^2 に反比例して減少することがわかる。

式(37)をbで偏微分すると

$$\frac{\partial}{\partial b} D(P\|E) = \frac{1}{b} + \frac{1}{b^2} - \frac{aM}{(b-1)^2} \quad (40)$$

となる。 $\frac{\partial}{\partial b} D(P\|E) \geq 0$ とすると、

$$\frac{1}{b} + \frac{1}{b^2} \geq \frac{aM}{(b-1)^2}$$

$b \neq 1$ のとき

$$\begin{aligned} b(b-1)^2 + (b-1)^2 &\geq b^2 aM \\ b^3 - 2b^2 + b + b^2 - 2b + 1 &\geq b^2 aM \\ b^3 - (1+aM)b^2 - b + 1 &\geq 0 \end{aligned} \quad (41)$$

のように同値変形できる。元の式は $b=1$ では定義されていないが、この式は $b=1$ でも意味を持つ。式(41)の左辺を $h(b)$ とおくと、

$$\lim_{b \rightarrow +1} h(b) = -aM < 0$$

$$\lim_{b \rightarrow \infty} h(b) = \infty$$

$$\frac{dh(b)}{db} = 3b^2 - 2(1+aM)b - 1$$

である。二次方程式

$$3b^2 - 2(1+aM)b - 1 = 0$$

の解は

$$b = \frac{1+aM \pm \sqrt{(aM+1)^2 + 12}}{3}$$

である。根号の中は正であり、

$$1+aM < \sqrt{(aM+1)^2 + 12}$$

が成り立つから、方程式は正負二つの実数解を持つ。つまり、 $dh(b)/db=0$ の正の解がただ一つ存在する。bがその解より大きいとき、 $h(b)$ は狭義単調増加である。さらに $h(1) = \lim_{b \rightarrow +1} h(b) < 0$ かつ $\lim_{b \rightarrow \infty} h(b) = \infty$ であるから、 $h(b) = 0$ の正の解が $b > 1$ の範囲にただ一つ存在する。その解を b_0 とおくと、 $b < b_0$ のとき $\frac{\partial}{\partial b} D(P\|E) < 0$ であり、

$$\begin{cases} b < b_0 \text{ のとき } D(P\|E) \text{ は } b \text{ に関して単調減少。} \\ b = b_0 \text{ のとき } D(P\|E) \text{ は } b \text{ に関して最小値を取る。} \\ b > b_0 \text{ のとき } D(P\|E) \text{ は } b \text{ に関して単調増加。} \end{cases}$$

となる。

式(38)と式(40)から、 a, b を同時に動かすとき $D(P||E)$ が極小値を持つためには次の連立方程式が解を持たなければならぬ。

$$\begin{cases} a &= \frac{b-1}{M} \\ \frac{1}{b} + \frac{1}{b^2} &= \frac{aM}{(b-1)^2} \end{cases}$$

第一式を第二式に代入すると

$$\begin{aligned} \frac{1}{b} + \frac{1}{b^2} &= \frac{1}{b-1} \\ b(b-1) + (b-1) &= b^2 \\ -1 &= 0 \end{aligned}$$

したがって、この連立方程式は解を持たず、 a, b を同時に動かすときの $D(P||E)$ の極小値は存在しない。

4.7 指数分布およびパレート分布からの標本分布について

先に述べたとおり、 $b \leq 1$ のときは $D(P||E) = \infty$ となる。このことは直感的には、指数分布からの標本分布が、含まれる標本の数 n を十分に大きく取れば、 $b \leq 1$ のパレート分布と似たものになる確率が非常に小さいことを示唆している。ここでは、指数分布からの標本分布が実際にパレート分布 ($b \leq 1$) とは大きく異なる例の一つを提示する。

$\{X_1, X_2, \dots, X_n\}$ を指数分布 $e(x) = a \exp(-ax)$ からの標本とし、 $\{Y_1, Y_2, \dots, Y_n\}$ をパレート分布 $p(x) = bx^{-b-1}$ からの標本とする。

$$\left\{ \frac{1}{1} \sum_{i=1}^1 X_i, \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 X_i, \dots, \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i \right\} \quad (42)$$

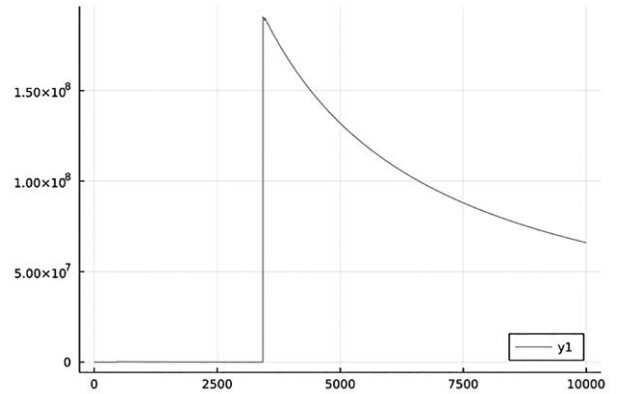
と

$$\left\{ \frac{1}{1} \sum_{i=1}^1 Y_i, \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 Y_i, \dots, \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i \right\} \quad (43)$$

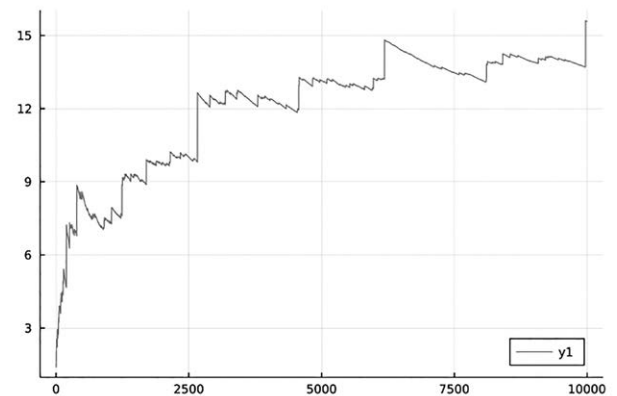
を比較してみる。 $e(x)$ の期待値と分散は有限でそれぞれ $1/a, 1/a^2$ であり、大数の弱法則により、任意の正数 ϵ に対して n を大きくすれば $\{X_i\}$ の平均値が区間 $(1/a - \epsilon, 1/a + \epsilon)$ に含まれない確率を ϵ より小さくすることが出来る。

$b \leq 1$ のときには $p(x)$ の期待値は存在しない。図(9)は $b = 0.5$ および $b = 0.9$ として作成した列(43)の一例のグラフである。

図(10)は、図(9)の結果を見て、 $a = 7.5 \times 10^7$ および $a = 14$ として作成した列(42)のグラフである。図(10)は非常に変化の大きいグラフであるが、それぞれのグラフの最終値に近い値を図(10)の $1/a$ の値として用いた。



(a) $b = 0.5$



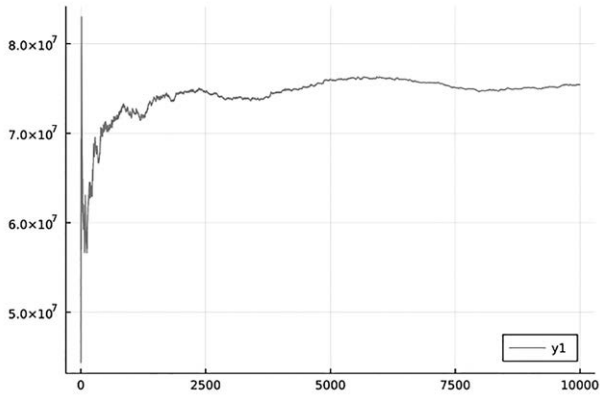
(b) $b = 0.9$

図9：パレート分布からの標本平均の列の例

ともに $b \leq 1$ であり、分布の期待値は存在せず、大数の法則が適用できない例になっている。これらのグラフだけを見る限りでは、 $b = 0.5$ の方が変動が桁違いに大きい。

図(10)と図(9)を比べてみると、指数分布は n が小さいところのみ変動が大きく、 $n = 1000$ あたりからはほぼ安定した値と寝る。一方、パレート分布の方は n が大きくなって値が変化を続けて安定しない。パレート分布の標本列の変動が非常に大きいことは、図(11)の複数の異なる標本から作った標本平均列のグラフからも見て取れる。

このように、指数分布からの標本平均列の変動は、大数の法則が適用可能で $b \leq 1$ のパレート分布と比べて非常に小さいため、標本平均の列の変動を調べると指数分布からの標本を $b \leq 1$ のパレート分布の標本と間違える可能性は低いと考えられる。その逆に、 $b \leq 1$ のときのパレート分布からの標本は標本毎のバラツキが非常に大きいため、偶然に変動の小さな標本が得られて指数分布からの標本と似たものになることもあり得ないことではない。



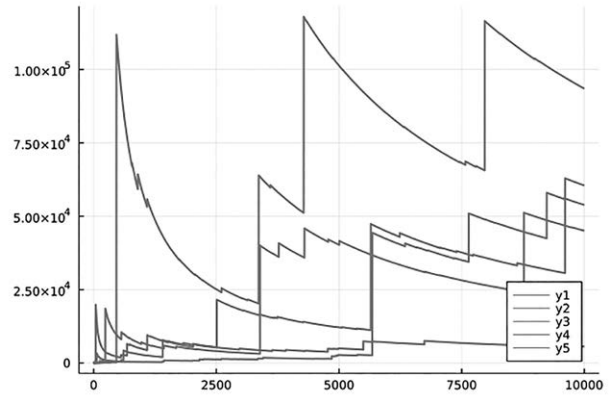
(a) $a = 7.5 \times 10^7$



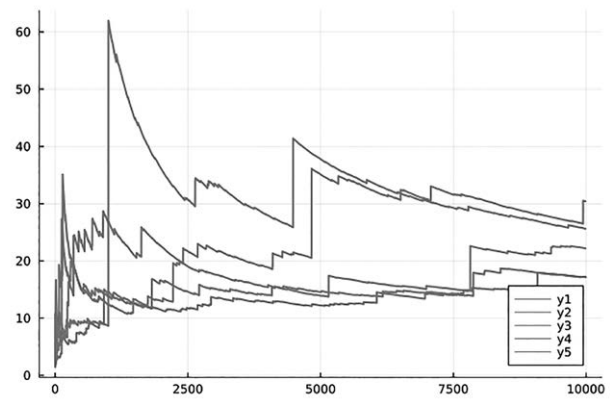
(b) $a = 14$

図10：指数分布からの標本平均の列の例

n が大きくなるとほぼ安定した値を取る。大数の法則により理論上は n が大きくなると a と同じ値に収束する。これらのグラフでもそのような傾向が見取れる。



(a) $b = 0.5$



(a) $b = 0.5$

図11：パレート分布からの標本平均の列

図9と同じようにして作成した複数のグラフを重ねて表示している。数値計算を行う毎に、つまり、乱数のシードが変わる毎に非常に異なる結果が得られている。これは計算誤差その他の異常ではなく、パレート分布の標本平均の列はこのように変動が大きくなる傾向がある。

4.8 パレート分布と一様分布

パレート分布と一様分布の間のKLDについて調べる。一様分布は $[K, K+L]$ 上の一様分布とし、 $K \geq M, L > 0$ であるとす。式(15)により

$$D(P \parallel U) = \infty$$

である。

$D(U \parallel P)$ を求めるには次のものを求めれば良い。

$$\begin{aligned} & \int_K^{K+L} \log \left(\frac{b}{M} \left(\frac{x}{M} \right)^{-b-1} \right) dx \\ &= \log \frac{b}{M} \int_K^{K+L} dx - (b+1) M \int_{\frac{K}{M}}^{\frac{K+L}{M}} \log x dx \\ &= L \log \frac{b}{M} - (b+1) M \left(\left[x \log x \right]_{\frac{K}{M}}^{\frac{K+L}{M}} - \int_{\frac{K}{M}}^{\frac{K+L}{M}} x dx \right) \\ &= L \log \frac{b}{M} - (b+1) \\ & \times \left((K+L) \log \frac{K+L}{M} - K \log \frac{K}{M} - L \right) \\ &= L \left(\log \frac{b}{M} + b+1 \right) - (b+1) \log \frac{(K+L)^{K+L}}{M^L K^K} \end{aligned}$$

したがって

$$D(U\|P) = -\log \frac{b}{M} - (b+1) + \frac{b+1}{L} \log \frac{(K+L)^{K+L}}{M^L K^K} - \log L$$

となる。

$$\frac{\partial D(U\|P)}{\partial b} = -\frac{1}{b} - 1 + \frac{1}{L} \log \frac{(K+L)^{K+L}}{M^L K^K}$$

$\partial D(U\|P)/\partial b \geq 0$ とおくと、

$$\frac{1}{b} \leq \frac{1}{L} \log \frac{(K+L)^{K+L}}{M^L K^K} - 1$$

となる。もし

$$\frac{1}{L} \log \frac{(K+L)^{K+L}}{M^L K^K} > 1$$

が成り立つときは、式(44)で等号を成り立たせるような $b > 0$ がただ一つ存在し、その b の値は

$$b = \frac{1}{\frac{1}{L} \log \frac{(K+L)^{K+L}}{M^L K^K} - 1}$$

となる。式(45)を変形すると

$$\frac{(K+L)^{K+L}}{M^L K^K} > \exp(L)$$

$K \geq M$ なので、式(46)は

$$\frac{(K+L)^{K+L}}{K^L K^K} > \exp(L)$$

が成り立てば成り立つ。これを変形すると

$$\left(1 + \frac{L}{K}\right)^K \left(1 + \frac{L}{K}\right)^L > \exp(L)$$

ここで、 L を任意の値に固定すると

$$\lim_{K \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{L}{K}\right)^K = \exp(L)$$

であり、また、任意の $L > 0, K > 0$ に対して

$$\left(1 + \frac{L}{K}\right)^L > 1$$

である。

したがって、 K が十分に大きければ式(45)は成り立つ。この場合には $D(U\|P)$ は $b > 0$ で最小値を持ち、

$$\min_{b>0} D(U\|P)$$

$$= \log \frac{M}{\frac{1}{L} \log \frac{(K+L)^{K+L}}{M^L K^K} - 1} - \left(\frac{1}{\frac{1}{L} \log \frac{(K+L)^{K+L}}{M^L K^K} - 1} + 1 \right) + \frac{\frac{1}{L} \log \frac{(K+L)^{K+L}}{M^L K^K} + 1}{L} \log \frac{(K+L)^{K+L}}{M^L K^K} - \log L$$

となる。もし式(45)が成り立たなければ $D(U\|P)$ は b に関して単調増加である。

4.9 指数分布と一様分布

指数分布と一様分布の間のKLDについて調べる。一様分布は $[K, K+L]$ 上の一様分布とし、 $K \geq M, L > 0$ であるとす。式(15)により

$$D(E\|U) = \infty$$

である。また $D(U\|P)$ を求めるには次のものを求めれば良い。

$$\begin{aligned} & \int_K^{K+L} \log(a \exp(-a(x-M))) dx \\ &= \log(a \exp(aM)) \int_K^{K+L} dx - a \int_K^{K+L} x dx \\ &= L \log(a \exp(aM)) - a \left(\frac{(K+L)^2}{2} - \frac{K^2}{2} \right) \\ &= L \log a + LaM - a \left(KL + \frac{L^2}{2} \right) \\ &= L \log a + aL \left(M - K - \frac{L}{2} \right) \end{aligned}$$

式(15)より

$$D(U\|E) = a \left(K + \frac{L}{2} - M \right) - \log a - \log L$$

となる。 a で微分すると

$$\frac{\partial D(U\|E)}{\partial a} = \left(K + \frac{L}{2} - M \right) - \frac{1}{a}$$

$\partial D(U\|E)/\partial a \geq 0$ とおくと

$$\frac{1}{a} \leq K + \frac{L}{2} - M$$

$K \geq M, L > 0$ なので、この不等式の右辺は常に正であり

$$a = \frac{1}{K + \frac{L}{2} - M}$$

のときに等号が成り立つ。したがって、 $D(E \| U)$ は $a > 0$ で

$a = \frac{1}{K + L/2 - M}$ のときに最小値を取り

$$\min_{a > 0} D(U \| E) = 1 + \log \left(K + \frac{L}{2} - M \right) - \log L$$

となる。

5. 指数積分 E_1 について

この節では、指数積分 $E_1(x)$ の、本文で必要となるいくつかの性質についてまとめる。本稿では $x > 0$ の場合しか使わないので、 E_1 は次のように定義されていると考える。

$$E_1(x) := \int_x^\infty \frac{\exp(-y)}{y} dy \quad (x > 0)$$

ここで $\forall \epsilon > 1$ に対して

$$y^\epsilon \left| \frac{\exp(-y)}{y} \right| \rightarrow 0 \quad (y \rightarrow \infty)$$

なので $x > 0$ のとき広義積分は収束する。

定義から明らかに、 $E_1(x)$ は $x > 0$ で正であり狭義単調減少である。

$\forall \epsilon > 0$ に対して

$$\begin{aligned} \int_x^{x+\epsilon} \frac{\exp(-y)}{y} dy &> \exp(-(x+\epsilon)) \int_x^{x+\epsilon} \frac{dy}{y} \\ &= \exp(-(x+\epsilon)) \log \left(1 + \frac{\epsilon}{x} \right) \\ &\rightarrow \infty \quad (x \rightarrow 0) \end{aligned}$$

であるので、

$$\lim_{x \rightarrow 0} E_1(x) = \infty$$

である。また、 $\forall M > \forall N > 0$ に対して

$$\begin{aligned} \int_N^M \frac{\exp(-y)}{y} dy &< \frac{1}{N} \int_N^M \exp(-y) dy \\ &= \frac{1}{N} (\exp(-N) - \exp(-M)) \\ &< \frac{\exp(-N)}{N} \\ &\rightarrow 0 \quad (N \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

なので

$$\lim_{x \rightarrow \infty} E_1(x) = 0$$

である。

導関数に関して次が成り立つことは容易に分かる。

$$\begin{aligned} \frac{dE_1(x)}{dx} &= -\frac{\exp(-x)}{x} \\ \frac{d \exp(x) E_1(x)}{dx} &= \exp(x) E_1(x) - \frac{1}{x} \\ \frac{dx \exp(x) E_1(x)}{dx} &= (1+x) \exp(x) E_1(x) - 1 \end{aligned}$$

また、微分可能な関数 $f(x)$ に対して

$$\begin{aligned} \frac{dE_1(f(x))}{dx} &= -\frac{\exp(-x) df(x)}{f(x) dx}, \\ \frac{d \exp(f(x)) E_1(f(x))}{dx} &= \frac{df(x)}{dx} \left(\exp(f(x)) E_1(f(x)) - \frac{1}{f(x)} \right), \\ \frac{df(x) \exp(f(x)) E_1(f(x))}{dx} &= \frac{df(x)}{dx} ((1+f(x)) \exp(f(x)) E_1(f(x)) - 1) \end{aligned}$$

特に $f(x) = Cx$ (C は定数) のとき

$$\begin{aligned} \frac{dE_1(Cx)}{dx} &= -\frac{\exp(-Cx)}{x} \\ \frac{d \exp(Cx) E_1(Cx)}{dx} &= C \exp(Cx) E_1(Cx) - \frac{1}{Cx} \\ \frac{dCx \exp(Cx) E_1(Cx)}{dx} &= C ((1+Cx) \exp(Cx) E_1(Cx)) - 1 \end{aligned}$$

となる。

$E_1(x)$ の $x \rightarrow 0$ のときの挙動を調べる。

$$\begin{aligned} E_1(x) &= \int_x^\infty \frac{\exp(-y)}{y} dy + \int_1^x \frac{dy}{y} - \int_1^x \frac{dy}{y} \\ &= \int_1^\infty \frac{\exp(-y)}{y} dy + \int_x^1 \frac{\exp(-y)}{y} dy + \int_1^x \frac{dy}{y} \\ &\quad - \int_1^x \frac{dy}{y} \\ &= \int_1^\infty \frac{\exp(-y)}{y} dy + \int_1^x \frac{1 - \exp(-y)}{y} dy - \int_1^x \frac{dy}{y} \end{aligned} \tag{48}$$

$$= E_1(1) + \int_1^x \frac{1 - \exp(-y)}{y} dy - \log x \tag{49}$$

第二項は

$$\begin{aligned} \int_1^x \frac{1 - \exp(-y)}{y} dy &= - \int_1^x \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k y^{k-1}}{k!} dx \\ &= - \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{(-1)^k y^k}{k \cdot k!} \right]_1^x \\ &= - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k (x^k - 1)}{k \cdot k!} \end{aligned}$$

式(49)と合わせて

$$E_1(x) = -\log x + E_1(1) - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k (x^k - 1)}{k \cdot k!} \quad (50)$$

と表せる。x → 0 のとき第一項以外は有界である。したがって、x → 0 のとき E₁(x) は -log x と同程度の無限大となる。

次も容易に示すことが出来る。

$$E_1(x) = \frac{\exp(-x)}{x} \left(1 - x \exp(x) \int_x^{\infty} \frac{\exp(-t)}{t^2} dt \right) \quad (51)$$

部分積分によって

$$\begin{aligned} E_1(x) &= \int_x^{\infty} \frac{\exp(-t)}{t} dt \\ &= \left[-\frac{\exp(-t)}{t} \right]_x^{\infty} - \int_x^{\infty} \frac{\exp(-t)}{t^2} dt \\ &= \frac{\exp(-x)}{x} - \int_x^{\infty} \frac{\exp(-t)}{t^2} dt \\ &= \frac{\exp(-x)}{x} \left(1 - x \exp(x) \int_x^{\infty} \frac{\exp(-t)}{t^2} dt \right) \end{aligned}$$

この括弧の中の広義積分が収束することも容易に分かる。

また、次の等式も成り立つ。

$$x \exp(x) E_1(x) = 1 - \int_0^1 \frac{s^{x-1}}{(1 - \log s)^2} ds \quad (52)$$

これは次のようにして示すことが出来る。式(51)の括弧の中の第二項に対して t = xu の変数変換を行うと

$$x \exp(x) \int_x^{\infty} \frac{\exp(-t)}{t^2} dt = \exp(x) \int_1^{\infty} \frac{\exp(-xu)}{u^2} du$$

ここでさらに u = 1 - log(s) とおくと

$$\begin{aligned} &= \exp(x) \int_1^0 \frac{\exp(-x(1 - \log s)) - ds}{(1 - \log s)^2} \frac{1}{s} \\ &= \int_0^1 \frac{s^{x-1}}{(1 - \log s)^2} ds \end{aligned}$$

この積分で 1 > x > 0 のときには s → 0 のとき被積分関数が

→ ∞ となるが、このとき 1 > 1 - x > 0 であり

$$\begin{aligned} &s^{1-x} \left| \frac{s^{x-1}}{(1 - \log s)^2} \right| \\ &= \frac{1}{(1 - \log s)^2} \rightarrow 0 \quad (s \rightarrow 0) \end{aligned}$$

なので、この積分は収束する。これを式(51)に代入すると式(52)が得られる。

次に、x exp(x)E₁(x) に対して次のことが成り立つことを示す。

$$\begin{cases} x \exp(x) E_1(x) \rightarrow 0 & (x \rightarrow 0) \\ x \exp(x) E_1(x) \rightarrow 1 & (x \rightarrow \infty) \\ x \exp(x) E_1(x) \text{ は } 0 < x \text{ で狭義単調増加である。} \end{cases} \quad (53)$$

式(50)を用いると

$$\begin{aligned} &x \exp(x) E_1(x) \\ &= -x \exp(x) \log x + x \exp(x) E_1(1) \\ &\quad - x \exp(x) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k (x^k - 1)}{k \cdot k!} \\ &\rightarrow 0 \quad (x \rightarrow 0) \end{aligned}$$

また、式(52)の被積分関数を S(x, s) とおくと

$$\lim_{x \rightarrow \infty} S(x, s) = \begin{cases} 0 & (0 \leq s < 1) \\ 1 & (s = 1) \end{cases}$$

なので、

$$x \exp(x) E_1(x) \rightarrow 1 - 0 = 1 \quad (x \rightarrow \infty)$$

が分かる。式(52)の両辺を x で微分すると

$$E_1(x) \exp(x) (1 + x) - 1 = - \int_0^1 \frac{(\log s) s^{x-1}}{(1 - \log s)^2} ds > 0 \quad (54)$$

なので x > 0 のとき x exp(x)E₁(x) は 0 < x で狭義単調増加である (この狭義単調性の証明は文献[18]のTheorem 2.1の2つ目の証明を元にしてしている。) また、式(54)から、次の不等式も成り立つ。

$$E_1(x) \exp(x) > \frac{1}{1 + x} \quad (x > 0) \quad (55)$$

exp(x)E₁(x) に関しては次が成り立つ。

$$\begin{cases} \exp(x) E_1(x) \rightarrow \infty & (x \rightarrow 0) \\ \exp(x) E_1(x) \rightarrow 0 & (x \rightarrow \infty) \\ \exp(x) E_1(x) \text{ は } 0 < x \text{ で狭義単調減少である。} \end{cases}$$

これは次のようにして示せる。

$$\begin{cases} \exp(x) \rightarrow 1 & (x \rightarrow 0) \\ E_1(x) \rightarrow \infty & (x \rightarrow 0) \end{cases}$$

から

$$\exp(x)E_1(x) \rightarrow \infty \quad (x \rightarrow 0)$$

である。また

$$\begin{cases} x \exp(x)E_1(x) \rightarrow 1 & (x \rightarrow \infty) \\ 1/x \rightarrow 0 & (x \rightarrow \infty) \end{cases}$$

より

$$\exp(x)E_1(x) = \frac{1}{x} x \exp(x)E_1(x) \rightarrow 0 \quad (x \rightarrow \infty)$$

である。

$$\begin{aligned} \frac{d \exp(x)E_1(x)}{dx} &= \exp(x)E_1(x) - \frac{1}{x} \\ &= \frac{1}{x} (x \exp(x)E_1(x) - 1) \end{aligned}$$

と式(53)より $x > 0$ のとき $\frac{d \exp(x)E_1(x)}{dx} < 0$ 、したがって $\exp(x)E_1(x)$ は狭義単調減少である。

文献[18]のTheorem 2.3によれば次の不等式が成り立つ。

$$\exp(x)E_1(x) < \log\left(1 + \frac{1}{x}\right) \quad (x > 0) \quad (57)$$

これは次のようにして証明できる。

$$\varphi(x) := \exp(x)E_1(x) - \log\left(1 + \frac{1}{x}\right)$$

とおくと

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi(x)}{dx} &= \exp(x)E_1(x) - \frac{1}{x} - \frac{-\frac{1}{x^2}}{1 + \frac{1}{x}} \\ &= \exp(x)E_1(x) - \frac{1}{x} + \frac{1}{x(x+1)} \\ &= \exp(x)E_1(x) - \frac{1}{1+x} \end{aligned}$$

不等式(55)を用いると $\frac{d\varphi(x)}{dx} > 0$ であり、 $x > 0$ で $\varphi(x)$ は単調増加である。性質(56)によれば

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \varphi(x) = 0$$

なので $\varphi(x) < 0$ 、したがって式(57)が成り立つ。

本稿の本文では使わないが、次の級数展開はよく知られている。

$$E_1(x) = -\gamma - \log x + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k+1} x^k}{k \cdot k!}$$

ここで γ はオイラーの定数である。式(48)から

$$\begin{aligned} E_1(x) + \log(x) &= \int_1^{\infty} \frac{\exp(-y)}{y} dy + \int_1^x \frac{1 - \exp(-y)}{y} dy \\ &= \int_1^{\infty} \frac{\exp(-y)}{y} dy - \int_0^1 \frac{1 - \exp(-y)}{y} dy \\ &\quad + \int_0^x \frac{1 - \exp(-y)}{y} dy \end{aligned} \quad (58)$$

式(58)の第三項は(50)の導出のときと同じようにして

$$- \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k x^k}{k \cdot k!}$$

となる。ここで次の積分を考える。

$$\begin{aligned} &\int_0^{\infty} \exp(-x) \log x dx \\ &= \int_0^1 \exp(-x) \log x dx + \int_1^{\infty} \exp(-x) \log x dx \\ &= [(1 - \exp(-x)) \log x]_0^1 - \int_0^1 \frac{1 - \exp(-x)}{x} dx \\ &\quad + [-\exp(-x) \log x]_1^{\infty} + \int_1^{\infty} \frac{\exp(-x)}{x} dx \\ &= - \int_0^1 \frac{1 - \exp(-x)}{x} dx + \int_1^{\infty} \frac{\exp(-x)}{x} dx \end{aligned} \quad (59)$$

これは式(58)の先頭の二項と一致する。ガンマ関数 $\Gamma(x)$ を微分すると

$$\Gamma'(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} \exp(-t) \log t dt$$

であるから、式(59)は

$$\frac{\Gamma'(1)}{1} = \frac{\Gamma'(1)}{\Gamma(1)} = \frac{d}{dx} \log \Gamma(1)$$

と表せる。ガンマ関数のWeierstrassの積表現により

$$\log \Gamma(x) = -\gamma x - \log x + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{x}{k} - \log\left(1 + \frac{x}{k}\right) \right)$$

これを x で微分して

$$\frac{d}{dx} \log \Gamma(x) = -\gamma - \frac{1}{x} + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{k+x} \right)$$

$x=1$ とおくと

$$\frac{d}{dx} \log \Gamma(1) = -\gamma$$

したがって

$$E_1(x) + \log(x) = -\gamma - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k x^k}{k \cdot k!}$$

となる。

6. おわりに

本稿ではカルバック・ライブラー・ダイバージェンスと呼ばれる概念についての説明を試み、計算例をいくつか提示した。

統計解析における指数分布とパレート分布との関連性についても、多少ではあるが調べることができた。パレート分布に関する例のなかでは、カルバック・ライブラー・ダイバージェンスをヒントに、パラメタの推定量の一つを構成することができた。

カルバック・ライブラー・ダイバージェンスについて、また、情報科学全般について、著者自身、まだ十分に馴染みがあるとは言えない。もし機会があれば、もう少し整理した形で提示したいと思う。

参考文献

- [1] 渡辺澄夫、村田昇: 確率と統計第I部第7章, コロナ社, (2005)
- [2] S. Kullback, R. A. Leibler: On information and sufficiency, *Annals of Mathematical Statistics*, vol.22 no. 1, pp. 79-86, (1995)
- [3] 甘利俊一, 長岡浩司: 情報幾何の方法 (岩波講座応用数学[対象12]), 岩波書店, (1993)
- [4] <https://openai.com/chatgpt>, (2022)
- [5] N. Stiennon et. al.: N., Learning to summarize from human feedback, arXiv:2009.01325, <https://arxiv.org/abs/2009.01325>, (2020)
- [6] L. Ouyang et. al.: Training language models to follow instructions with human feedback, arXiv: 2203.02155, <https://arxiv.org/abs/2203.02155>, (2022)
- [7] 黒木玄: Kullback-Leibler 情報量とSanov の定理第1節, <https://genkuroki.github.io/documents/20160616/KullbackLeibler.pdf>, Ver. 0.26b, (2018)
- [8] A. Clauset, et. al.: Power-Law Distributions in Empirical Data, *SIAM Review*, Vol.51, pp. 661-703, (2009)
- [9] E. Bonabeau, L. Dagorn: Possible universality in the size distribution of fish schools, *PHYSICAL REVIEW E*, vol. 51, no.6, R5220-R5223. (1995)
- [10] O. A. Misund, et. al.: Relationships between the geometric dimensions and biomass of schools, *ICES Journal of Marine Science*, vol.49, pp.305-315, (1992)
- [11] H-S. Niwa: Power-law scaling in dimension-to-biomass relationship of fish schools, *Journal of Theoretical Biology*, vol. 235, pp. 419-430, (2005)
- [12] J. J. Anderson: A Stochastic Model for the Size of Fish Schools, *Fishery Bulletin*, vol. 79 no. 2, pp. 315-323, (1981)
- [13] 梅野善雄: (総説)「ベキ分布」の特徴と数理, *日本数学教育学会高専・大学部会論文誌*vol.26 No.1, pp.73-90, (2020)
- [14] 木村和範: 所得分布とパレート指数, *開発論集*, 第75号, pp. 1-13, (2005)
- [15] H-S Niwa: Power-law versus exponential distributions of animal group sizes, *Journal of Theoretical Biology*, Vol. 224, pp. 451-457, (2003)
- [16] 渡辺澄夫: ベイズ統計の理論と方法, コロナ社, (2012)
- [17] 下平英寿: 情報量基準によるモデル選択とその信頼性評価 pp.24-45, *統計科学のフロンティア3 モデル選択*, 岩波書店, (2004)
- [18] K. Nantomah: On Some Bounds for the Exponential Integral Function, *Journal of Nepal Mathematical Society*, vol. 4, Issue, (2021)

執筆者紹介

古澤 洋将（ふるさわ ようすけ）

岩手県滝沢村出身、1982年生。大型・大特・牽引自動車運転免許、1級小型船舶操縦士、危険物乙種全種取扱者、第3級アマチュア無線技士などの資格を保有。筑波大学大学院システム情報工学研究科を修了し、CYBERDYNE株式会社に入社。ロボットスーツHAL福祉用及び医療用の電装系設計に従事。各種認証取得、製品上市を経験する。東日本大震災を機に退職・帰郷し、炎重工株式会社を設立。

松岡 知洋（まつおか ともひろ）

静岡県静岡市出身。弘前大学理学部数学科 及び 東北大学大学院情報科学研究科前期課程を修了、後期課程中退。大学では実解析学、大学院ではパレート分布（フラクタル分布）の統計解析の研究に従事。その後、組込系及び3DCGのプログラマ、数理生物学の研究等に従事。2018年、炎重工株式会社に入社。



会社概要

会社名：炎重工株式会社 (Homura Heavy Industries Corporation.)

代表取締役：古澤 洋将 (Yosuke FURUSAWA)

本社所在地：〒020-0633 岩手県滝沢市穴口 57-9

T E L : 019-618-3408

F A X : 019-618-3408

M a i l : info@hmrc.co.jp

W e b : <https://www.hmrc.co.jp/>

資本金：17,920 万円 (資本準備金を含む)

取引銀行：三菱 UFJ 銀行 本店

岩手銀行 滝沢支店

盛岡信用金庫 本店

設立：2016年2月25日

事業内容：(1) 製品の企画・開発・生産・販売・保守・賃貸・受託・
輸出入・コンサルティング業

(2) 労働者派遣事業法に基づく一般労働者派遣事業、
特定労働者派遣事業

(3) 書籍、記事等の執筆・出版・印刷業

(4) 上記に付帯し、または関連する一切の業務

沿革

2013年01月	屋外ロボットの開発開始
2016年02月	炎重工株式会社を設立
2017年01月	生体群制御付き水槽を発売
2017年03月	資本金を3,400万円に増資 (資本準備金を含む)
2017年07月	炎重工技報を創刊
2017年10月	船舶ロボットを公開
2018年07月	滝沢研究所を開設
2019年02月	資本金を4,900万円に増資 (資本準備金を含む)
2019年06月	経済産業省 J-Startup に認定
2021年11月	東京支店を開設
2022年04月	東京研究所を開設
2023年01月	資本金を17,920万円に増資 (資本準備金を含む)

表紙について

表紙は、2021年に米国NASAによって打ち上げられたジェイムズ・ウェッブ宇宙望遠鏡が撮影したイータカリーナ星雲の様子です。

星雲とは、宇宙空間に漂う、重力的にまとまりをもった宇宙塵や星間ガスなどから成る天体です。光を放たない暗黒星雲と、光を放射あるいは付近にある恒星などの光を反射する散光星雲があります。さらに、恒星から放出されたガスによってできた惑星状星雲や、超新星爆発によって生まれた超新星残骸など、いくつか種類が知られています。

また、ジェイムズ・ウェッブ宇宙望遠鏡は、太陽と地球のラグランジュ点 L2 に設置されています。これまで地球の軌道上に設置されていたハッブル宇宙望遠鏡などと異なり、太陽光や地球の外乱を受けにくいため、遙かに高精細に撮影ができるようになりました。今後ますます宇宙の研究が進み、新たな発見がさらに科学技術の発展させることでしょう。

本号では、1751年にフランス人の天文学者ニコラ・ルイ・ド・ラカージュがイータカリーナ星雲を発見したこと、同じく1772年にフランス人の物理学者ジョゼフ＝ルイ・ラグランジュがすべてのラグランジュ点を求めたことに敬意を表し、表紙のデザインとしました。

炎重工技報

Homura Heavy Industries
Technical Review

Vol.5

2022

2023年11月28日 初版第1刷発行

発行人：古澤洋将

発行所：炎重工株式会社

〒020-0633 岩手県滝沢市穴口 57-9

TEL:019-618-3408

FAX:019-618-3408

Mail:info@hmrc.co.jp

https://www.hmrc.co.jp/

デザイン：株式会社ホップス

印刷・製本：川嶋印刷株式会社

- ◆定価は表紙に表示してあります。
- ◆乱丁本・落丁本はお取り替えいたします。

©2022 Homura Heavy Industries Corporation.
Printed in Japan



定価： **5,000円** (税込)

炎重工株式会社
Homura Heavy Industries Corporation.
<https://www.hmrc.co.jp/>