情報処理学会研究報告
IPSJ SIG Technical Report

Vol.2009-AL-127 No.1
2009/11/27

# 対数優モジュラ分布からのサンプリング

来　嶋　秀　治[†1]

本稿では，有限分配束上の対数優モジュラ分布に対して，マルコフ連鎖モンテカルロ（MCMC: Markov chain Monte Carlo）法に基づくランダムサンプリングアルゴリズムを議論する．1996 年 Propp, Wilson の提案した**過去からのカップリング**（CFTP: coupling from the past）法は，マルコフ連鎖のシミュレーションを工夫することで，定常分布に厳密に従う**完璧サンプリング**を実現する．過去からのカップリング法を効率的に実行するには，**単調な更新関数**の設計が重要な課題である．本稿では有限束上の可逆的酔歩が単調な更新関数を持つための必要十分条件は定常分布が対数優モジュラであることを示す．また，対数優モジュラ分布の応用として，Tutte 多項式の値の計算に対する多項式時間乱択近似計算法についても議論する．

# Sampling from Log-supermodular Distribution

Shuji Kijima[†1]

This paper is concerned with an algorithm, based on the Markov chain Monte Carlo (MCMC), for sampling from a log-supermodular distribution on a finite distributive lattice. Propp and Wilson, in 1996, devised the *coupling from the past* (CFTP) algorithm, that is an ingenious simulation of a Markov chain, and that realizes *perfect sampling* according to the stationary distribution exactly. They also introduced an idea of a *monotone update function* which allows the CFTP algorithm to work efficiently. This paper shows that a reversible random walk on a a finite distributive lattice has a monotone update function if and only if the stationary distribution is log-supermodular. We also show an application of the log-supermodular distribution to a fully polynomial time randomized approximation scheme (FPRAS) for the Tutte polynomial.

†1 京都大学, Kyoto University

## 1. はじめに

組合せ的対象のランダム生成は，乱択近似アルゴリズムの効率性の重要なカギとなる．しかし，例えば，与えられたグラフ中の森の一様ランダム生成（[17] 参照），有限半順序集合のイデアル[⋆1]の一様ランダム生成（[30] 参照）など，基礎的な離散構造についても，多項式時間のサンプリングアルゴリズムの存在が未解決なものは多い．

本稿では，有限分配束上の対数優モジュラ分布に対して，マルコフ連鎖モンテカルロ（MCMC）法に基づくサンプリング法を議論する．このサンプリング法を用い，グラフ中の森のランダム生成とも関連の深い Tutte 多項式について，多項式時間乱択近似計算可能な領域を与える．

## 2. 準　　備

### 2.1 対数優モジュラ分布

本稿では，有限集合 $E$ の部分集合族がなす分配束 $\mathcal{D} \subseteq 2^E$ を扱う．有限分配束 $\mathcal{D}$ 上の分布 $\pi$ が**対数優モジュラ**（*log-supermodular*）であるとは，任意の $X, Y \in \mathcal{D}$ に対して，

$$\pi(X)\cdot \pi(Y) \leq \pi(X \cup Y)\cdot \pi(X \cap Y)$$

を満たすことである[⋆2]．以下，$\pi(X) > 0$ $(\forall X \in \mathcal{D})$ を仮定する．

一般に，有限状態空間 $\Omega$ 上の分布 $\pi$ は，関数 $H\colon \Omega \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$; $x \mapsto -\ln(\pi(x))$ を用いて，

$$\pi(x) = \frac{\mathrm{e}^{-H(x)}}{\sum_{x\in\Omega} \mathrm{e}^{-H(x)}} \qquad (x \in \Omega)$$

と記述できる．特に，分布 $\pi$ が $\mathcal{D}$ 上の対数優モジュラの場合は，関数 $H$ が，任意の $X, Y \in \mathcal{D}$ に対して劣モジュラ不等式

$$H(X) + H(Y) \geq H(X \cup Y) + H(X \cap Y)$$

を満たすことと等価である．

### 2.2 可逆的ハッセ歩

有限状態空間 $\Omega$ と推移確率行列 $P$ をもつマルコフ連鎖が，関数 $g\colon \Omega \to \mathbb{R}_+$ に対して，任意の対 $\{x, y\} \in \binom{\Omega}{2}$ について詳細均衡方程式

⋆1 有限半順序集合のイデアル全体は分配束をなす．一方，任意の有限分配束は有限半順序集合のイデアルとして記述できる（Birkhoff の表現定理.[10] 参照）．

⋆2 例えば $\mathcal{D}$ 上の一様分布は対数優モジュラである．

Vol.2009-AL-127 No.1
2009/11/27

$g(x) \cdot P(x,y) = g(y) \cdot P(y,x)$

を満たすとき，**可逆的**（*reversible*）であるという．可逆的な（エルゴード的）マルコフ連鎖の定常分布 $\pi$ は $g$ に比例する$^{\star 1}$．

いま，状態空間 $\Omega$ は半順序集合とし，$\Omega$ の（無向）ハッセ図の枝の集合を $C(\Omega) \subseteq \binom{\Omega}{2}$ で表わす．マルコフ連鎖の推移確率行列 $P$ が

$$P(x,y) > 0 \ \text{ iff } \begin{cases} x = y, & \text{or} \\ \{x,y\} \in C(\Omega), \end{cases}$$

を満たすものを**ハッセ歩**（*Hasse walk*）という$^{\star 2}$．

### 2.3 単調更新関数

推移確率行列 $P$ に対して，(決定的) 関数 $\phi \colon \Omega \times [0,1) \to \Omega$ が一様乱数 $\Lambda \in [0,1)$ に対して

$P(x,y) = \Pr(\phi(x,\Lambda) = y)$

を満たすとき，$\phi$ を**更新関数**という．一般に，マルコフ連鎖に対して更新関数は唯一ではない．

半順序集合 $\Omega$ 上の半順序 $\succeq$ に関して，更新関数 $\phi$ が任意の実数 $\lambda \in [0,1)$ に対して

$x \succeq y \Rightarrow \phi(x,\lambda) \succeq \phi(y,\lambda)$

を満たすとき $\phi$ は**単調**であるという．

マルコフ連鎖に対して単調な更新関数が設計できた時，単調 CFTP (coupling from the past) に基づき，効率的な完璧サンプリングアルゴリズムが設計できることが知られている ([28] 参照)．

## 3. 単調更新関数をもつための条件

次の定理は本稿の主結果のひとつである．

**定理 1** 有限分配束 $\mathcal{D}$ 上の可逆的ハッセ歩が，単調な更新関数をもつための必要十分条件は，定常分布 $\pi$ が $\mathcal{D}$ 上の対数優モジュラであることである．

**証明の方針**：（十分条件） マルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ を次のように定める：
現在の状態 $X \in \mathcal{D}$ に対して，

Step 1. $e \in E$ を一様ランダムに選択する．
Step 2. 一様乱数 $\Lambda \in [0,1)$ を生成し，(仮の) 状態 $T \subseteq E$ を

$$T = \begin{cases} X \setminus \{e\} & \left(\text{if } \Lambda < \frac{\pi(X\setminus\{e\})}{\pi(X\setminus\{e\}) + \pi(X\cup\{e\})}\right), \\ X \cup \{e\} & (\text{otherwise}), \end{cases}$$

とする$^{\star 3}$．
Step 3. 次の時刻の状態 $X' = \phi(X; e, \Lambda)$ を

$$X' = \phi(X; e, \Lambda) \overset{\text{def.}}{=} \begin{cases} T & (\text{if } T \in \mathcal{D}), \\ X & (\text{otherwise}), \end{cases}$$

とする$^{\star 4}$．

**命題 2** マルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ は状態空間 $\mathcal{D}$ 上の可逆的ハッセ歩であり，$\pi$ を唯一の定常分布にもつ． ■

**命題 3** 分布 $\pi$ が $\mathcal{D}$ 上の対数優モジュラの時，更新関数 $\phi$ は単調である． ■

（必要条件） 次の命題を用いる．

**命題 4** 任意の可逆的マルコフ連鎖において，推移確率 $P(x,y)$ と $P(y,x)$ は，共通の非負実数 $p(\{x,y\})$ を用いて，

$$P(x,y) = p(\{x,y\}) \cdot \frac{\pi(y)}{\pi(x) + \pi(y)},$$
$$P(y,x) = p(\{x,y\}) \cdot \frac{\pi(x)}{\pi(x) + \pi(y)},$$

と記述できる． ■

可逆的ハッセ歩が単調な更新関数を持つには，単調性の定義から，$X = Y \cup \{f\}$ かつ $f \notin Y$ を満たす任意の対 $X, Y \in \mathcal{D}$ と，任意の $e \in E$ に対して

$$p_X(e) \cdot \frac{\pi(X\cup\{e\})}{\pi(X\cup\{e\}) + \pi(X\setminus\{e\})} \geq p_Y(e) \cdot \frac{\pi(Y\cup\{e\})}{\pi(Y\cup\{e\}) + \pi(Y\setminus\{e\})}$$
$$p_X(e) \cdot \frac{\pi(X\setminus\{e\})}{\pi(X\cup\{e\}) + \pi(X\setminus\{e\})} \leq p_Y(e) \cdot \frac{\pi(Y\setminus\{e\})}{\pi(Y\cup\{e\}) + \pi(Y\setminus\{e\})}$$

の両式が必要である．ただし，$p_X(e)$ は命題 4 における $p(\{X\cup\{e\}, X\setminus\{e\}\})$ を表わし，同様に $p_Y(e)$ は $p(\{Y\cup\{e\}, Y\setminus\{e\}\})$ を表わす．両式を変形すると，$H(Z) \overset{\text{def.}}{=} -\ln(\pi(Z))$

---

$\star$1 すなわち $\pi(x) = g(x)/\sum_{x\in\Omega} g(x) \ \ (x \in \Omega)$.
$\star$2 ハッセ歩は "lattice walk" と呼ばれることもある．
$\star$3 $X \in \{X\setminus\{e\},\ X\cup\{e\}\}$ に注意．
$\star$4 したがって $X' \in \mathcal{D}$.

$(Z \in \mathcal{D})$ として，

$$H(X\setminus\{e\})+H(Y\cup\{e\})-H(X\cup\{e\})-H(Y\setminus\{e\}) \geq \begin{cases} \ln(p_X(e))-\ln(p_Y(e)), & \text{かつ} \\ \ln(p_Y(e))-\ln(p_X(e)), & \end{cases}$$

が必要条件として得られ，すなわち $H$ の劣モジュラ性が，単調な更新関数をもつための必要条件となる． □

## 4. 応用 — Tutte 多項式の計算

グラフ $G=(V,E)$ の Tutte 多項式は

$$T(G;x,y) \stackrel{\text{def.}}{=} \sum_{A\subseteq E}(x-1)^{r(E)-r(A)}(y-1)^{|A|-r(A)}$$

で与えられる．ただし $r(A)$ は $G$ の部分グラフ $(V,A)$ のランク（最大の森の枝数）を表わす．

いま，グラフ $G$ に対して $2^E$ 上の分布 $\pi_{\mathrm{T}}$ を

$$\pi_{\mathrm{T}}(A) \stackrel{\text{def.}}{=} \frac{(x-1)^{r(E)-r(A)}(y-1)^{|A|-r(A)}}{T(G;(x,y))} \quad (A\subseteq E)$$

と定義する．このとき，$x>1$ かつ $(x-1)(y-1)\geq 1$ ならば，分布 $\pi_{\mathrm{T}}(A)$ はブール束 $2^E$ 上の対数優モジュラとなる．さらに，マルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ の混交時間（[27] 参照）に関して，次の定理を示すことができる．

**定理 5** $(x,y)\in\mathbb{R}^2$ が $1<x\leq 1+1/|E|$ かつ $(x-1)(y-1)\geq 1$ の時，$2^E$ 上の分布 $\pi_{\mathrm{T}}$ に対するマルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ は多項式時間で混交する． ■

定理 5 から，グラフ $G$ の自己帰着性（[27] 参照）を利用して，該当する $(x,y)\in\mathbb{R}^2$ 領域における Tutte 多項式の値に対する FPRAS が設計できる．

## 5. まとめと今後の課題

本稿では，有限束上の可逆的ハッセ歩が単調な更新関数をもつための必要十分条件が定常分布が対数優モジュラであることを示した．マルコフ連鎖をハッセ歩に限定しない場合，対数優モジュラでない分布に対しても単調な更新関数の設計された例がわずかに存在する[31]．非対数優モジュラ分布に対して，単調な更新関数を設計する汎用的な手法については今後の課題である．

Tutte 多項式に対して，$x\geq 1$ かつ $y\geq 1$ を満たす領域について，わずかな領域を除いて多項式時間乱択近似計算可能性が未解決である[17]．この領域には，グラフ中の森の個数，$q$ 状態 Potts モデルの正規化定数などの重要な未解決問題も含まれる．一般のマトロイドへ拡張した Tutte 多項式においては，この領域はマトロイド基の個数も領域に含み，多項式時間乱択近似計算可能性は未解決である．また，有限半順序集合が与えられた時，そのイデアルの個数に対する多項式時間乱択近似計算可能性も未解決である．

## 参 考 文 献

1) R. Ahlswede and D.E. Daykin, An inequality for the weights of two families of sets, their unions and intersections, Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und verwandte Gebiete, **43** (1978), 183–185.
2) D. Aldous, Random walks on finite groups and rapidly mixing Markov chains, in Seminaire de Probabilites XVII, Lecture Notes in Mathematics, **986** (1983), 243–297.
3) N. Alon, A. Frieze, and D.J.A. Welsh, Polynomial time randomized approximation schemes for Tutte-Grothendieck invariants: The dense case, Random Structures and Algorithms **6** (1995), 459–478.
4) N. Alon and J.H. Spencer, The probabilistic method, third edition, John Wiley & Sons, 2008.
5) J.D. Annan, A randomized approximation algorithm for counting the number of forests in dense graphs, Combinatorics, Probability and Computing, **3** (1994), 273–283.
6) R. Bubley, Randomized Algorithms: Approximation, Generation, and Counting, Springer, 2001.
7) R. Bubley and M. Dyer, Path coupling: a technique for proving rapid mixing in Markov chains, Proceedings of the 38th Annual Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS 1997), 223–231.
8) N. Bhatnagar, S. Greenberg, and D. Randall, Sampling stable marriages: why the spouse-swapping won't work, Proceedings of the nineteenth annual ACM-SIAM symposium on Discrete algorithms (SODA 2008), 1223–1232.
9) J.N. Corcoran and R.L. Tweedie, Perfect sampling from independent Metropolis-Hastings chains, Journal of Statistical Planning and Inference, **104** (2002), 297–314.
10) B.A. Davey and H.A. Priestley, Introduction to Lattices and Order, Second Edition, Cambridge University Press, 2002.
11) M. Dyer, L.A. Goldberg, C. Greenhill, and M. Jerrum, The relative complexity of approximate counting problems, Algorithmica, **38** (2003), 471–500.
12) M. Dyer and C. Greenhill, On Markov chains for independent sets, Journal of Algorithms, **35** (2000), 17–49.

13) S. Felsner, L. Wernisch Markov chains for linear extensions, the two-dimensional case, Proceedings of the eighth annual ACM-SIAM symposium on Discrete algorithms (SODA 1997), 239–247.
14) J.A. Fill, An interruptible algorithm for perfect sampling via Markov chains, The Annals of Applied Probability, **8** (1998), 131–162.
15) C.M. Fortuin P.W.Kasteleyn, and J. Ginibre, Correlation inequalities on some partially ordered sets, Communications in Mathematical Physics, **22** (1971), 89–103.
16) S. Fujishige, Submodular Functions and Optimization, Second Edition, Elsevier, 2005.
17) L.A. Goldberg and M. Jerrum, Inapproximability of the Tutte polynomial, Information and Computation, **206** (2008), 908–929.
18) V.K. Gore and M. Jerrum, The Swendsen-Wang process does not always mix rapidly, Journal of Statistical Physics, **97** (1999), 67–86.
19) G. Grätzer, General Lattice Theory, Second edition, Birkhäuser.
20) O. Häggström and K. Nelander, Exact sampling from anti-monotone systems, Statistica Neerlandica, **52** (1998), 360–380.
21) R. Holley, Remarks on the FKG inequalities, Communications in Mathematical Physics, **36** (1974), 227–231.
22) M. Jerrum, Mathematical foundations of the Markov chain Monte Carlo method, in M.Habib, C.McDiarmid, J.Ramirez-Alfonsin, and B.Reed (eds.), Probabilistic Methods for Algorithmic Discrete Mathematics, Springer, 1998, pp. 116–165.
23) M.Jerrum, *Counting, Sampling and Integrating: Algorithms and Complexity*, ETH Zürich, Birkhauser, Basel, 2003.
24) M. Jerrum and A. Sinclair, Polynomial-time approximation algorithms for the Ising model, SIAM Journal on Computing, **22** (1993), 1087–1116.
25) M. Jerrum, A. Sinclair, and E. Vigoda, A polynomial-time approximation algorithm for the permanent of a matrix with nonnegative entries, Journal of the ACM, **51** (2004), 671–697.
26) W.S. Kendall and Møller, Perfect simulation using dominating processes on ordered spaces, with application to locally stable point processes, Advances in Applied Probability, **32** (2000), 844–865.
27) 来嶋秀治, MCMC 法と近似精度保証, 第 19 回 RAMP シンポジウム, pp. 1–15.
28) 来嶋秀治, 松井知己, 完璧にサンプリングしよう！, オペレーションズ・リサーチ, **50** (2005), pp. 169–174, pp. 264–269, pp. 329–334.
29) S. Kijima and T. Matsui, Rapidly mixing chain and perfect sampler for logarithmic separable concave distributions on simplex, DMTCS Proceedings Series, *AD* (2005), 371–382.
30) S. Kijima and T. Nemoto, Finding a level ideal of a poset, Proceedings of 15th International Computing and Combinatorics Conference (COCOON 2009), Lecture Notes in Computer Science, **5609** (2009), 317–327.
31) T. Matsui and S. Kijima, Polynomial time perfect sampler for discretized Dirichlet distribution, in H.Tsubaki, K.Nishina, and S.Yamada (eds.), The Grammar of Technology Development, Springer, 2007, pp. 179–199.
32) K. Murota, Matrices and Matroids for Systems Analysis, Springer, 2000.
33) A. Müller and D. Stoyan, Comparison Methods for Stochastic Models and Risks, John Wiley & Sons, 2002.
34) J. Oxley, Matroid Theory, Oxford University Press, 1992.
35) J.G. Propp, Generating random elements of a finite distributive lattice, Electronic Journal of Combinatorics, **4** (1997), R15.
36) J.G. Propp and D.B. Wilson, Exact sampling with coupled Markov chains and applications to statistical mechanics, Random Structures and Algorithms, **9** (1996), 223–252.
37) J.G. Propp and D.B. Wilson, Coupling from the past: a user's guide, in D.Aldous and J.Propp (eds.), Microsurveys in Discrete Probability, volume 41 of DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science, American Mathematical Society, 1998, pp. 181–192.
38) J.G. Propp and D.B. Wilson, How to get a perfectly random sample from a generic Markov chain and generate a random spanning tree of a directed graph, Journal of Algorithms, **27** (1998), 170–217.
39) A. Sokal, The multivariate Tutte polynomial (alias Potts model) for graphs and matroids, in the proceedings of the 2005 British Combinatorial Conference, Cambridge University Press, 2005. available from
`http://arxiv.org/abs/math.CO/0503607`
40) D.J.A. Welsh, Percolation and random cluster model: combinatorial and algorithmic problems, in M.Habib, C.McDiarmid, J.Ramirez-Alfonsin, and B.Reed (eds.), Probabilistic Methods for Algorithmic Discrete Mathematics, Springer, 1998, pp. 166–196.
41) D.J.A. Welsh and C. Merino, The Potts model and the Tutte polynomial, Journal of Mathematical Physics, **41** (2000), 1127–1152.
42) D.B. Wilson, How to couple from the past using a read-once source of randomness, Random Structures and Algorithms **16** (2000), 85–113.
43) D.B. Wilson, Mixing times of lozenge tiling and card shuffling Markov chains, The Annals of Applied Probability, **14** (2004), 274–325.

Vol.2009-AL-127 No.1
2009/11/27

# 付　　録

## A.1 過去からのカップリング法

有限半順序集合 $\langle \Omega, \succeq \rangle$ に対し，$x_{\max}, x_{\min} \in \Omega$ を（唯一の）最大元および最小元とする．エルゴード的なマルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ は状態空間 $\mathcal{M}$ を持ち，単調な更新関数 $\phi : \Omega \times [0,1) \to \Omega$ で定義されているとする．単調性を利用した標準的な**過去からのカップリング法**（*monotone CFTP*）は次のように記述される．

**アルゴリズム 1** （単調 CFTP[36]）

Step 1. シミュレーションの開始時刻を $T := -1$ とする．空列 $\boldsymbol{\lambda}$ を用意する．

Step 2. 乱数 $\lambda[T], \lambda[T+1], \ldots, \lambda[\lfloor T/2 \rfloor - 1]$ を生成し，数列 $\boldsymbol{\lambda}$ の先頭に挿入する．すなわち，$\boldsymbol{\lambda} := (\lambda[T], \lambda[T+1], \ldots, \lambda[-1])$ とする．

Step 3. $\Omega$ の 2 つの状態 $x_{\max}$ と $x_{\min}$ について，乱数列 $\boldsymbol{\lambda}$ を用いて時刻 $T$ から時刻 0 までマルコフ連鎖を推移させる．

Step 4. 以下の合流確認を行う．

(a) もし $\exists y \in \Omega,\ y = \Phi_T^0(x_{\max}, \boldsymbol{\lambda}) = \Phi_T^0(x_{\min}, \boldsymbol{\lambda})$ ならば $y$ を返し，停止する．

(b) そうでなければ，シミュレーションの開始時刻を $T := 2T$ としてステップ 2 に戻る．

単調 CFTP アルゴリズム（アルゴリズム 1）に対して，次の定理が成り立つ．

**定理 6** （単調 CFTP[36]）エルゴードマルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ は有限の状態空間 $\Omega$ をもち，単調な更新関数 $\phi : \Omega \times [0,1) \to \Omega$ で定義されているとする．この時，単調 CFTP アルゴリズム（アルゴリズム 1）は確率 1 で有限時間停止し，得られる値は $\mathcal{M}$ の定常分布に厳密に従う確率変数の実現値である．

単調な更新関数 $\phi$ で定義されるマルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ に対して，アルゴリズム 1 の Step 4 (a) における，確率的事象 $\exists y \in \Omega,\ y = \Phi_T^0(x_{\max}, \boldsymbol{\lambda}) = \Phi_T^0(x_{\min}, \boldsymbol{\lambda})$ を**合流**（*coalescence*）と呼ぶ．また，更新関数 $\phi$ を持つマルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ の**合流時間**（*coalescence time*）$T_*$ を

$$T_* \stackrel{\text{def.}}{=} \min\left\{ t > 0 \mid \exists y \in \Omega,\ \forall x \in \Omega,\ y = \Phi_{-t}^0(x, \boldsymbol{\lambda}^t) \right\}$$

と定義する．ただし $\boldsymbol{\lambda}^t = (\lambda[-t], \lambda[-t+1], \ldots, \lambda[-1])$ は $[0,1)$ 上の一様実数乱数列である．ここで $T_*$ は確率変数である．また，アルゴリズム 1 の中ではシミュレーションの開始時刻を $T := 2T$ と更新しているため，合流時間は陽に求まらないことに注意を要する．このとき，アルゴリズム 1 の期待計算時間はマルコフ連鎖の 1 回の推移にかかる計算量を $\gamma$ とすると $O(\gamma \cdot T_*)$ である．

## A.2 完璧サンプリング法の計算時間について

**定理 7** 状態空間 $2^E$ と $2^E$ 上の分布 $\pi(X) \propto \mathrm{e}^{g(X)}$ に対して，マルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ は定理 1 の証明中で定義されたものとする．関数 $g$ が優モジュラかつ，$X = Y \cup \{f\}$ $(f \not\in Y)$ を満たす任意の $X, Y \in 2^E$ に対して，次の条件

$$\frac{1 - \mathrm{e}^{g(X\setminus\{e\}) + g(Y\cup\{e\}) - g(Y\setminus\{e\}) - g(X\cup\{e\})}}{(1 + \mathrm{e}^{g(Y\cup\{e\}) - g(Y\setminus\{e\})}) \cdot (1 + \mathrm{e}^{g(X\setminus\{e\}) - g(X\cup\{e\})})} \le \frac{1}{|E|} \tag{1}$$

を満たす時，期待合流時間 $\mathrm{E}[T^*]$ は $\mathrm{E}[T^*] \le 2|E|^2(1 + \ln|E|)$ を満たす．

**証明** いま $X, Y \in 2^E$ は $X = Y \cup \{f\}$ かつ $f \not\in Y$ を満たすとする．(共通の) 乱数 $e \in E$ と $\lambda \in [0,1)$ に対して，簡便のため $X' = \phi(X; e, \lambda)$ および $Y' = \phi(Y; e, \lambda)$ とあらわす．このとき $g$ は優モジュラより，命題 3 から $X' \supseteq Y'$ が成り立つ．以下，$e \in E$ が選ばれた条件の下での $|X' \setminus Y'|$ の条件付き期待値が $\mathrm{E}[|X' \setminus Y'|] \le 1 - 1/|E|$ を満たすことを示す．

1. もし $e = f$ の場合，マルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ の定義から $X' = Y'$ が成り立ち，$\mathrm{E}_e\left[|X' \setminus Y'|\right] = 0$ を得る．

2. もし $e \neq f$ の場合，

$$\begin{aligned}
&\mathrm{E}_e\left[|X' \setminus Y'|\right] - 1 \\
&= \left( \frac{\pi(Y\setminus\{e\})}{\pi(Y\cup\{e\}) + \pi(Y\setminus\{e\})} - \frac{\pi(X\setminus\{e\})}{\pi(X\cup\{e\}) + \pi(X\setminus\{e\})} \right) \\
&= \frac{\mathrm{e}^{g(Y\setminus\{e\})}}{\mathrm{e}^{g(Y\cup\{e\})} + \mathrm{e}^{g(Y\setminus\{e\})}} - \frac{\mathrm{e}^{g(X\setminus\{e\})}}{\mathrm{e}^{g(X\cup\{e\})} + \mathrm{e}^{g(X\setminus\{e\})}} \\
&= \frac{\mathrm{e}^{g(Y\setminus\{e\})}\left(\mathrm{e}^{g(X\cup\{e\})} + \mathrm{e}^{g(X\setminus\{e\})}\right) - \mathrm{e}^{g(X\setminus\{e\})}\left(\mathrm{e}^{g(Y\cup\{e\})} + \mathrm{e}^{g(Y\setminus\{e\})}\right)}{\left(\mathrm{e}^{g(Y\cup\{e\})} + \mathrm{e}^{g(Y\setminus\{e\})}\right)\left(\mathrm{e}^{g(X\cup\{e\})} + \mathrm{e}^{g(X\setminus\{e\})}\right)} \\
&= \frac{\mathrm{e}^{g(Y\setminus\{e\})}\mathrm{e}^{g(X\cup\{e\})} - \mathrm{e}^{g(X\setminus\{e\})}\mathrm{e}^{g(Y\cup\{e\})}}{\left(\mathrm{e}^{g(Y\cup\{e\})} + \mathrm{e}^{g(Y\setminus\{e\})}\right)\left(\mathrm{e}^{g(X\cup\{e\})} + \mathrm{e}^{g(X\setminus\{e\})}\right)} \\
&= \frac{\mathrm{e}^{g(Y\setminus\{e\})} \cdot \mathrm{e}^{g(X\cup\{e\})} \cdot \left(1 - \mathrm{e}^{g(X\setminus\{e\}) + g(Y\cup\{e\}) - g(Y\setminus\{e\}) - g(X\cup\{e\})}\right)}{\mathrm{e}^{g(Y\setminus\{e\})} \cdot \left(\mathrm{e}^{g(Y\cup\{e\}) - g(Y\setminus\{e\})} + 1\right) \cdot \mathrm{e}^{g(X\cup\{e\})} \cdot \left(1 + \mathrm{e}^{g(X\setminus\{e\}) - g(X\cup\{e\})}\right)} \\
&= \frac{1 - \mathrm{e}^{g(X\setminus\{e\}) + g(Y\cup\{e\}) - g(Y\setminus\{e\}) - g(X\cup\{e\})}}{(1 + \mathrm{e}^{g(Y\cup\{e\}) - g(Y\setminus\{e\})}) \cdot (1 + \mathrm{e}^{g(X\setminus\{e\}) - g(X\cup\{e\})})} \;\le\; \frac{1}{|E|},
\end{aligned}$$

を得る．ただし，最後の不等式は定理の仮定 (1) を用いた．

以上の議論から $X = Y \cup \{f\}$ $(f \not\in Y)$ を満たす任意の対 $X, Y$ に対して，

$$\mathrm{E}\left[|X' \setminus Y'|\right] \;\le\; \frac{1}{|E|} \cdot 0 + \frac{|E| - 1}{|E|} \cdot \left(1 + \frac{1}{|E|}\right) \;=\; 1 - \frac{1}{|E|^2}$$

を得る．

次に以上の議論を逐次的に用いて，$X \supseteq Y$ を満たすと任意の $X, Y \in 2^E$ に対して，$\mathrm{E}\left[|X' \setminus Y'|\right] \leq \left(1 - \frac{1}{|E|^2}\right) \cdot |X \setminus Y|$ が成り立つことを示す．いま $Z_0, \ldots, Z_{|X \setminus Y|}$ は $Z_0 = X$, $Z_{|X \setminus Y|} = Y$ および $Z_i \supset Z_{i+1}$ $(i \in \{0, \ldots, |X \setminus Y| - 1\})$ を満たすとする．命題 3 から $Z_i \supseteq Z_{i+1}$ $(i \in \{0, \ldots, |X \setminus Y| - 1\})$ が成り立ち，期待値の線形性から

$$
\begin{aligned}
\mathrm{E}[X' \setminus Y'] &= \mathrm{E}[|Z'_1 \setminus Z'_{|X \setminus Y|}|] \\
&= \mathrm{E}\left[\sum_{i=1}^{|X \setminus Y|} |Z'_1 \setminus Z'_{|X \setminus Y|}|\right] \\
&= \sum_{i=1}^{|X \setminus Y|} \mathrm{E}[|Z'_i \setminus Z'_{i+1}|]
\end{aligned}
$$

を得る．すなわち，$X \supseteq Y$ を満たす任意の $X, Y \in 2^E$ に対して，$\mathrm{E}\left[|X' \setminus Y'|\right] \leq \left(1 - \frac{1}{|E|^2}\right) \cdot |X \setminus Y|$ が成り立つ．

次に $T^*$ の期待値を見積もる．いま $\tau \overset{\text{def.}}{=} |E|^2(1 + \ln |E|)$ とすると，

$$
\begin{aligned}
\Pr[T^* > \tau] &= \Pr[\Phi_0^\tau(E; \boldsymbol{e}, \boldsymbol{\lambda}) \neq \Phi_0^\tau(\emptyset; \boldsymbol{e}, \boldsymbol{\lambda})] \\
&\leq \sum_{X \supset Y} |X \setminus Y| \cdot \Pr\left[X = \Phi_0^\tau(E; \boldsymbol{e}, \boldsymbol{\lambda}),\ Y = \Phi_0^\tau(\emptyset; \boldsymbol{e}, \boldsymbol{\lambda})\right] \\
&= \mathrm{E}\left[|X \setminus Y| \mid X = \Phi_0^\tau(E; \boldsymbol{e}, \boldsymbol{\lambda}),\ Y = \Phi_0^\tau(\emptyset; \boldsymbol{e}, \boldsymbol{\lambda})\right] \\
&= (1 - 1/|E|^2)^\tau |E \setminus \emptyset| \\
&= (1 - 1/|E|^2)^{|E|^2(1 + \ln |E|)} |E| \\
&\leq \mathrm{e}^{-1} \mathrm{e}^{-\ln |E|} |E| \\
&\leq 1/\mathrm{e}
\end{aligned}
$$

を得る．合流時間 $T^*$ が劣乗法的であることを鑑みると $\Pr[T^* > k \cdot \tau_0] \leq (\Pr[T^* > k \cdot \tau_0])^k \leq (1/\mathrm{e})^k$ が成り立ち，

$$
\begin{aligned}
\mathrm{E}[T^*] &= \sum_{t=0}^{+\infty} t \cdot \Pr[T^* = t] \\
&\leq \tau + \tau \cdot \Pr[T^* > \tau] + \tau \cdot \Pr[T^* > 2\tau] + \tau \cdot \Pr[T^* > 3\tau] + \cdots \\
&\leq \tau + \tau/\mathrm{e} + \tau/\mathrm{e}^2 + \tau/\mathrm{e}^3 + \cdots \\
&= \frac{\tau}{1 - 1/\mathrm{e}} \\
&\leq 2\tau
\end{aligned}
$$

を得る． □

### A.3 Tutte 多項式に対する完璧サンプリング法の計算時間について

本章では定理 5 に関して，次の命題を示す．

**命題 8** もし $x > 1$, $y > 1$, $(x-1)(y-1) \geq 1$ および $1/x + 1/y \geq 1 - 1/|E|$ が成り立つ時，マルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ の期待合流時間 $\mathrm{E}[T^*]$ は $\mathrm{E}[T^*] \leq 2|E|^2(1 + \ln |E|)$ を満たす．

**証明** いま $X = Y \cup \{f\}$ $(f \notin Y)$ とし，また $e \neq f$ とする．このとき $r(X \cup \{e\}) - r(X \setminus \{e\}) \leq r(Y \cup \{e\}) - r(Y \setminus \{e\})$ であり，また任意の $Z \in 2^E$ に対して $r(Z \cup \{e\}) = r(Z \setminus \{e\}) + 1$ または $r(Z \setminus \{e\})$ が成り立つことに注意されたい．

1. もし $r(Y \cup \{e\}) = r(Y \setminus \{e\})$ のとき，$r(X \cup \{e\}) = r(X \setminus \{e\})$ が成り立ち，すなわち

$$
\begin{aligned}
&\frac{1 - \mathrm{e}^{g(X \setminus \{e\}) + g(Y \cup \{e\}) - g(Y \setminus \{e\}) - g(X \cup \{e\})}}{\left(1 + \mathrm{e}^{g(Y \cup \{e\}) - g(Y \setminus \{e\})}\right) \cdot \left(1 + \mathrm{e}^{g(X \setminus \{e\}) - g(X \cup \{e\})}\right)} \\
&= \frac{1 - \mathrm{e}^0}{\left(1 + \mathrm{e}^{\ln(y-1)}\right) \cdot \left(1 + \mathrm{e}^{-\ln(y-1)}\right)} \;=\; 0
\end{aligned}
$$

を得る．

2. もし $r(Y \cup \{e\}) = r(Y \setminus \{e\}) + 1$ かつ $r(X \cup \{e\}) = r(X \setminus \{e\}) + 1$ のとき，

$$
\begin{aligned}
&\frac{1 - \mathrm{e}^{g(X \setminus \{e\}) + g(Y \cup \{e\}) - g(Y \setminus \{e\}) - g(X \cup \{e\})}}{\left(1 + \mathrm{e}^{g(Y \cup \{e\}) - g(Y \setminus \{e\})}\right) \cdot \left(1 + \mathrm{e}^{g(X \setminus \{e\}) - g(X \cup \{e\})}\right)} \\
&= \frac{1 - \mathrm{e}^0}{\left(1 + \mathrm{e}^{-\ln(x-1)(y-1) + \ln(y-1)}\right)\left(1 + \mathrm{e}^{\ln(x-1)(y-1) - \ln(y-1)}\right)} \;=\; 0
\end{aligned}
$$

を得る．

3. もし $r(Y \cup \{e\}) = r(Y \setminus \{e\}) + 1$ かつ $r(X \cup \{e\}) = r(X \setminus \{e\})$ のとき，

$$
\begin{aligned}
&\frac{1 - \mathrm{e}^{g(X \setminus \{e\}) + g(Y \cup \{e\}) - g(Y \setminus \{e\}) - g(X \cup \{e\})}}{\left(1 + \mathrm{e}^{g(Y \cup \{e\}) - g(Y \setminus \{e\})}\right) \cdot \left(1 + \mathrm{e}^{g(X \setminus \{e\}) - g(X \cup \{e\})}\right)} \\
&= \frac{1 - \mathrm{e}^{-\ln(x-1)(y-1)}}{\left(1 + \mathrm{e}^{-\ln(x-1)(y-1) + \ln(y-1)}\right)\left(1 + \mathrm{e}^{-\ln(y-1)}\right)} \\
&= \frac{1 - \frac{1}{(x-1)(y-1)}}{\left(1 + \frac{1}{x-1}\right) \cdot \left(1 + \frac{1}{y-1}\right)} \;=\; \frac{(x-1)(y-1) - 1}{yx} \;=\; \frac{xy - x - y}{xy} \\
&= 1 - \left(\frac{1}{x} + \frac{1}{y}\right) \;\leq\; \frac{1}{|E|}
\end{aligned}
$$

を得る．従って，定理 7 から題意を得る． □