多項式時間決定的サンプラーの頂点誤差解析

白髪 丈晴[1]　山内 由紀子[1]　来嶋 秀治[1]　山下 雅史[1]

概要：マルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC 法) とは, マルコフ連鎖をシミュレートすることで所望の分布からサンプリングを行う手法である. 本稿ではロータールーターモデル (Propp 機械) など「ランダムウォークの脱乱択化」に関する研究を応用し, マルコフ連鎖を模倣する決定的サンプリングアルゴリズムを提案する. そして, 決定的サンプリングアルゴリズムと対応するマルコフ連鎖の分布の頂点誤差 (L_∞ 距離) の解析を行い, マルコフ連鎖の混交時間に関する上界を与える. この上界を用いて, 0-1 ナップサック解, 線形順序拡大, マッチングなどの一様分布に急速混交するマルコフ連鎖が知られるいくつかの#P 完全問題に対し, 決定的サンプリングアルゴリズムが所望の分布と頂点誤差が ε 以下の分布を, 入力と ε^{-1} の多項式時間で出力する事を示す.

1.　はじめに

乱択アルゴリズムに対する脱乱択化の汎用手法構築のため, 本稿ではサンプルを決定的に出力する決定的サンプリングアルゴリズムを提案する. 本稿のアプローチはマルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC 法) の模倣であり, 「ランダムウォークの脱乱択化」のアイデアを用いる.

1.1　サンプリングと近似数え上げ

組合せ論において数え上げは基本的な話題であり, 同じく確率論の基本的な話題であるサンプリングと深く関連している. #P とは数え上げ困難な計算量クラスであり, 計算複雑性理論における重要なクラスである. いくつかの数え上げ問題が#P 完全になることが知られている.

0-1 ナップサック解 [13], 線形順序拡大 [3], マッチング [10, 11] など, 多くの#P 完全問題に対し MCMC 法に基づく乱択近似数え上げアルゴリズム (FPRAS[*1]) が構築されている. MCMC 法のアイデアはシンプルである (詳細は 2 章参照). 目標となる分布が極限分布となるマルコフ連鎖を設計し, 連鎖を走らせ極限分布からサンプリングを行う. 目標分布を極限分布としてもつマルコフ連鎖の設計は可逆性を用いれば比較的容易であるため, 「何回遷移させれば極限分布からサンプルが出来るか」という, 連鎖の混交時間 (mixing time) が問題となる. 連鎖の収束の指標は総変動距離 (total variation distance), 頂点距離 (point-wise distance) などを用いて定義される.

#P 完全問題に対する決定的近似数え上げアルゴリズムに関しては, まだ多くのことが知られていない. 近年, 0-1 ナップサック解の数え上げに対する動的計画法に基づく決定的近似アルゴリズムが構築されている [8].

1.2　ランダムウォークの脱乱択化

ロータールーターモデル (Propp 機械) とはグラフ上のランダムウォークを模倣する決定的過程である [6,12]. トークンをランダムに隣接点にばらまく代わりに, ロータールーターモデルではあらかじめ各頂点に定められている順番 (ロータールーター) に従って順番にトークンをばらまく. Doerr ら [5,7] はロータールーターモデルを脱乱択化されたランダムウォークという意味で *deterministic random walk* と呼んだ. ロータールーターモデルに関する最初の重要な成果は Cooper と Spencer の成果 [6] である. 彼らは $\mathbb{Z}^n$ 上で複数トークンを用いたロータールーターモデルに対し各頂点における誤差の解析を行い, $|\chi_v^{(t)} - \mu_v^{(t)}| \leq c_n$ を示した. ここで $\chi_v^{(t)}$ ($\mu_v^{(t)}$) は頂点 $v \in \mathbb{Z}^n$, 時刻 t でのロータールーターモデル (ランダムウォーク) のトークン数 (トークン数の期待値) を表し ($\mu_v^{(0)} = \chi_v^{(0)}$), c_n は n のみに依存する (総トークン数には依存しない) パラメータである. Cooper ら [5] は $c_1 \simeq 2.29$ を, そして Doerr ら [7] がロータールーターの順番により c_2 が 7.29, もしくは 7.83 になることを示している.

一方で, Cooper ら [4] は (無限の)k 正則木上で $|\chi_v^{(t)} -$

1　九州大学
Kyushu University

*1　任意の $\varepsilon \in (0,1)$ と $\delta \in (0,1)$ に対し, 確率 $\Pr(|Z - A|/A \leq \varepsilon) \geq 1 - \delta$ で解 $Z \in \mathbb{R}$ を入力サイズ, ε^{-1} と $\log(\delta^{-1})$ の多項式時間で出力するアルゴリズムを FPRAS(*fully polynomial-time approximation scheme*) と呼ぶ. ただし $A \in \mathbb{Z}$ を問題の正しい解とする.

$\mu_v^{(t)}| = \Omega(\sqrt{kt})$ となる例を与えている. この例は時刻 t が大きくなるにしたがって誤差が無限に大きくなる例が存在することを示唆している.

マルコフ連鎖を脱乱択化することを目指し, Kijima ら [12] は一般の (有限) 有向多重グラフ $(V, \mathcal{A})$ 上で解析を行い, マルコフ連鎖がエルゴード的, 可逆かつ lazy な場合に $|\chi_v^{(t)} - \mu_v^{(t)}| = \mathrm{O}(|V||\mathcal{A}|)$ が成り立つことを示した. また, 彼らは $|\chi_v^{(t)} - \mu_v^{(t)}| = \Omega(|\mathcal{A}|)$ となる例も与えている.

負荷分散の分野において, Rabani ら [14] はローターループーターモデルと関連する決定的アルゴリズムに対し解析を行っている. 彼らはマルコフ連鎖がエルゴード的かつ対称行列の場合に $|\chi_v^{(t)} - \mu_v^{(t)}| = \mathrm{O}(\Delta \log(|V|)/(1-\lambda_*))$ を示している. ここで Δ は状態遷移図の最大次数を, λ_* は遷移確率行列の第二固有値を表している.

また, 超立方体, トーラスなどのある特定のグラフ構造に対しては状態数の対数サイズの上界が与えられている [1, 12]. 例えば, Akbari ら [1] は n 次元超立方体に対し $|\chi_v^{(t)} - \mu_v^{(t)}| = \mathrm{O}(n^{1.5})$ を示している.

これらの解析は特定のグラフ構造に深く依存しており, 他の組合せ構造へ拡張する事が非常に難しくなっている. Kijima ら [12] は 0-1 ナップサック多面体, 2 部グラフのマッチングなどの組合せ構造 (#P 完全問題) に対し $|\chi_v^{(t)} - \mu_v^{(t)}|$ を入力の多項式サイズで抑えることが出来るかどうかを今後の課題として挙げた.

ランダムウォークの脱乱択化に関連する他の話題としては到達時間の解析がある. Holroyd と Propp [9] は 1 つのトークンをローターループーターモデルで遷移させたときの到達時間に関する解析を行っている. 彼らは任意の頂点 v, 時刻 t に対して $|\nu^{(t)}(v) - \pi_v| = \mathrm{O}(|V||\mathcal{A}|)$ であることを示した. ただし, $\nu^{(t)}(v)$ は時刻 t までに頂点 v をトークンが訪問した回数を, π は対応するランダムウォークの定常分布を表す. Holroyd と Propp [9] はローターループーターモデルを一般化した *stack walk* と呼ぶ無理数の遷移確率を扱えるモデルも提案しており, Angel ら [2] が具体的に *stack walk* を構成するアルゴリズムを提案している.

1.3 本稿の成果

本稿では, ある有限集合 $V = \{1, \ldots, N\}$ からサンプリングを決定的に行うアルゴリズム提案する. このアルゴリズムは, マルコフ連鎖の遷移確率行列 P を模倣する *deterministic random walk* の研究 (ローターループーターモデル等) に基づく. このアルゴリズムは, V 上の M 個のトークン配置の更新を決定的に繰り返す. 今, $\chi^{(t)} = (\chi_1^{(t)}, \ldots, \chi_N^{(t)}) \in \mathbb{Z}_{\geq 0}^N$ を時刻 $t = 0, 1, 2, \ldots$ でのトークン配置とする. ($\chi_v^{(t)}$ は頂点 $v \in V$, 時刻 t のトークン数を表す. また $\sum_{v \in V} \chi_v^{(t)} = M$ が成り立つ.) また $\mu^{(0)} = \chi^{(0)}$, $\mu^{(t)} = \mu^{(0)} P^t$ とする. $\mu^{(t)} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^N$ は M 個のトークンが P に従って独立に t ステップ遷移した時のトークンの期待配置を表す. 本稿では P がエルゴード的かつ可逆ならば, 任意の $v \in V$, t に対し $|\chi_v^{(t)} - \mu_v^{(t)}| \leq 3(\pi_{\max}/\pi_{\min}) t^* \Delta$ が成り立つことを示す. ここで $\pi_{\max}(\pi_{\min})$ は π の最大値 (最小値), t^* はマルコフ連鎖の混交度 (mixing rate), Δ は状態遷移図の最大次数を表す.

この結果から, 0-1 ナップサック解, 線形順序拡大, マッチングなど, 急速混交するマルコフ連鎖が設計されているいくつかの組合せ構造 (#P 完全問題) の一様サンプリングに対する多項式時間 (多項式スペース) の決定的サンプリングアルゴリズムを設計できる. 任意の ε $(0 < \varepsilon < 1)$ に対し, 総トークン数 $M \geq 6\varepsilon^{-1} t^* \Delta$ とすると, 決定的サンプリングアルゴリズムは $\|\widetilde{\chi}^{(t)} - \pi\|_\infty < \varepsilon$ を満たす $\widetilde{\chi}^{(t)}$ を出力する. ここで $\widetilde{\chi}^{(t)} := \chi^{(t)}/M$, π は問題の集合上の一様分布である. 具体的には, 決定的サンプリングアルゴリズムは n 次元 0-1 ナップサック解に対して $\mathrm{O}^*(n^{11.1}\varepsilon^{-1})$ 時間で, n 要素の半順序集合の線形順序拡大に対して $\mathrm{O}^*(n^8\varepsilon^{-1})$ 時間で, 頂点数 n, 枝数 m のグラフ上のマッチングに対して $\mathrm{O}^*(m^4 n^4 \varepsilon^{-1})$ で解を出力する. ここで O^* は $\mathrm{poly}(\log(\varepsilon^{-1}), \log m, \log n)$ の項を無視する上界を表す. なお, トークン数に関する整数性ギャップのため ε^{-1} は任意の決定的サンプリングアルゴリズムで改善できない項である. ランダムウォークの脱乱択化との関連は [15] を参照されたい.

2. マルコフ連鎖モンテカルロ法

決定的サンプリングアルゴリズムの準備として, この章ではマルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC 法) について簡単に説明する.

$V \stackrel{\text{def.}}{=} \{1, \ldots, N\}$ を有限の状態集合とし, ある与えられた V 上の正のベクトル $f = (f_1, \ldots, f_N) \in \mathbb{R}_{\geq 0}^N$ に比例したサンプリングを行いたいとする. 例えば, 0-1 ナップサック解 (5.1 章参照) 上の一様サンプリングを行いたい場合, V を 0-1 ナップサック解の集合とし, 任意の $v \in V$ に対し $f_v = 1$ とする. マルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC 法) のアイデアは, 目標となる分布 $f/\|f\|_1$ が極限分布となるマルコフ連鎖を設計し, 極限分布からサンプリングを行うというものである ($\|f\|_1 = \sum_{v \in V} f_v$ は正規化定数を表す). $P \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{N \times N}$ を V 上のマルコフ連鎖の遷移確率行列とする. $P_{u,v}$ は u から v への遷移確率を表す $(u, v \in V)$. P が既約であるとは $P_{u,v}^t > 0$ を満たすような t が任意の $u, v \in V$ に対して存在することであり, P が非周期であるとは任意の $v \in V$ に対して $\mathrm{GCD}\{t \in \mathbb{Z}_{>0} \mid P_{v,v}^t > 0\} = 1$ を満たすことである. 特に, P が既約かつ非周期であるときに P はエルゴード的であるという. P がエルゴード的ならば唯一の定常分布 $\pi \in \mathbb{R}_{\geq 0}^N$ ($\pi P = \pi$ を満たす確率分布) が存在し, 極限分布が π になる (V 上の任意の確率分布 $\xi \in \mathbb{R}_{\geq 0}^N$ に対し $\xi P^\infty = \pi$ が成り立つ) ことが知られている. ここで, ある $P \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{N \times N}$ に対し, 任意の $u, v \in V$ で

$$f_u P_{u,v} = f_v P_{v,u} \tag{1}$$

を満たすような $f \in \mathbb{R}^N_{\geq 0}$ が存在するとき P は可逆であるという. P が (1) 式 (詳細つり合い式) を満たすならば, $fP = f$ が成り立つことが容易に示せる. 即ち $f/\|f\|_1$ が P の定常分布となる.

今, ξ, ζ を V 上の確率分布とする. このとき ξ と ζ の総変動距離 (*total variation distance*) $\mathcal{D}_{\rm tv}$ を

$$\mathcal{D}_{\rm tv}(\xi,\zeta) \stackrel{\rm def.}{=} \max_{A\subseteq V} \sum_{v\in A}(\xi_v - \zeta_v) = \frac{1}{2}\|\xi-\zeta\|_1. \tag{2}$$

と定義する. ここで $\|\xi\|_1$ と $\|\zeta\|_1$ は共に 1 であるため, $\mathcal{D}_{\rm tv}(\xi,\zeta) \leq 1$ であることに注意する. そして, マルコフ連鎖の混交時間 (*mixing time*) を $\varepsilon > 0$ に対し

$$\tau(\varepsilon) \stackrel{\rm def.}{=} \max_{v\in V} \min\left\{t \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \mid \mathcal{D}_{\rm tv}(P^t_{v,\cdot}, \pi) \leq \varepsilon\right\} \tag{3}$$

と定義する. ここで $P^t_{v,\cdot}$ は P^t の v 行ベクトルを表す. 即ち $P^t_{v,\cdot}$ は初期状態 $v \in V$ から出発し, t 回遷移を繰り返した後のマルコフ連鎖の確率分布を表す. 混交時間の定義 (3) より, $\tau(\varepsilon)$ 回遷移した後の確率分布 $P^t_{v,\cdot}$ は $\mathcal{D}_{\rm tv}(P^t_{v,\cdot},\pi) \leq \varepsilon$ を満たす. 即ち, 目標の分布の近似サンプリングを得ることが出来る.

簡単のため, $t \geq 0$ に対し $h(t) \stackrel{\rm def.}{=} \max_{w\in V} \mathcal{D}_{\rm tv}\left(P^t_{w,\cdot},\pi\right)$ とおく. 分布 h は劣乗法性を持つことが知られている. 以下の命題は 4.2 章の解析で用いる. 証明は [15] を参照されたい.

命題 2.1. 任意の ℓ ($\ell \geq 1$), k ($0 \leq k < \tau(\gamma)$), γ ($0 < \gamma < 1/2$) に対し

$$h(\ell\cdot\tau(\gamma) + k) \leq \frac{1}{2}(2\gamma)^{\ell}$$

が成り立つ. ■

P の混交度 (*mixing rate*) を $t^* \stackrel{\rm def.}{=} \tau(1/4)$ と定義する.

3. 決定的サンプリングアルゴリズム

3.1 章で決定的サンプリングアルゴリズムを説明し, 3.2 章で主定理の概要を紹介する. このアルゴリズムはローター ルーターモデル ([6,12] 参照) や stack walk [2,9] のアイデアに基づいている. これらのモデルとの大きな違いは無記憶性である. ローター ルーターモデルや stack walk は各時刻におけるトークン配置と各頂点におけるルーターの状態を記憶しておく必要があるが, 我々のアルゴリズムはトークン配置のみを記憶する. この性質が既存のモデルに比べアルゴリズムをより単純にしている.

5 章において 0-1 ナップサック解, 線形順序拡大, マッチングなど, 具体的な問題に対する決定的サンプリングアルゴリズムを紹介し, 計算複雑性に関し議論を行う. ローター ルーターモデル [6,12], stack walk [2,9] との関連はフルペーパー [15] を参照されたい.

3.1 アルゴリズム

$P \in \mathbb{R}^{N\times N}_{\geq 0}$ を V 上のエルゴード的なマルコフ連鎖の遷移確率行列とする. 今, $\mu^{(0)} = (\mu^{(0)}_1, \ldots, \mu^{(0)}_N) \in \mathbb{Z}^N_{\geq 0}$ を V 上の M 個のトークンの初期配置とし, 各トークンが独立に P に従って $t \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ ステップ遷移した時のトークンの期待配置を $\mu^{(t)} \in \mathbb{R}^N_{\geq 0}$ とする. 即ち, $\|\mu^{(t)}\|_1 = M$ であり, また $\mu^{(t)} = \mu^{(0)}P^t$ である. ここで, 簡単のため $\widetilde{\mu}^{(t)} = \mu^{(t)}/M$ とおくと, P はエルゴード的であるため $\widetilde{\mu}^{(\infty)} = \pi$ が成り立つ (2 章参照).

決定的サンプリングアルゴリズムのアイデアは $\mu^{(t)}$ を決定的な手法で模倣することである. $\mathcal{G} = (V, \mathcal{E})$ を P の状態遷移図とする. 即ち, $\mathcal{E} = \{(u,v) \in V^2 \mid P_{u,v} > 0\}$ である. $\mathcal{E}$ は自己ループ辺 (v,v) を含みうることに注意されたい. $\mathcal{N}^+(v)(\mathcal{N}^-(v))$ を $v \in V$ の隣接頂点集合 ($\mathcal{N}^+(v) = \{u \in V \mid P_{v,u} > 0\}, \mathcal{N}^-(v) = \{u \in V \mid P_{u,v} > 0\}$) とする. 簡単のため, $\delta^+(v) = |\mathcal{N}^+(v)|, \delta^-(v) = |\mathcal{N}^-(v)|$ とする. P が可逆ならば, $\mathcal{N}^+(v) = \mathcal{N}^-(v)$ が成り立つため両方を $\mathcal{N}(v)$ と書くこととし, また $\delta(v) = |\mathcal{N}(v)|$ とする.

今, $\chi^{(0)} = \mu^{(0)}$ とし, $\chi^{(t)} \in \mathbb{Z}^N_{\geq 0}$ を決定的サンプリングアルゴリズムの時刻 $t \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ でのトークン配置とする. トークン配置 $\chi^{(t)}$ は $P_{v,u}$ を模倣するよう, 以下のように各時刻で更新される. まず, 一般性を失うことなく各 $v \in V$ の各 $u \in \mathcal{N}^+(v)$ に対し順番 $u_1, \ldots, u_{\delta^+(v)}$ を定める. そして, 時刻 t から $t+1$ の間に頂点 v から u へ遷移するトークン数 $Z^{(t)}_{v,u}$ を以下のように定義する.

$$Z^{(t)}_{v,u_i} = \begin{cases} \left\lfloor \chi^{(t)}_v P_{v,u_i} \right\rfloor + 1 & (i \leq i^*) \\ \left\lfloor \chi^{(t)}_v P_{v,u_i} \right\rfloor & (\text{otherwise}) \end{cases} \tag{4}$$

ここで,

$$i^* = \chi^{(t)}_v - \textstyle\sum_{i=1}^{\delta^+(v)} \left\lfloor \chi^{(t)}_v P_{v,u_i} \right\rfloor$$

とする (“余り” を表す). そして, 各 $u \in V$ に対し $\chi^{(t+1)}$ を

$$\chi^{(t+1)}_u \stackrel{\rm def.}{=} \textstyle\sum_{v\in V} Z^{(t)}_{v,u} \tag{5}$$

と定める.

複数トークン型のランダムウォークにおいて, 各 $u \in V$, $t \geq 0$ で $\mu^{(t+1)}_u = \sum_{v\in V} \mu^{(t)}_v P_{v,u}$ が成り立つことに注意すると, もし $\chi^{(t)}$ が $\mu^{(t)}$ をよく模倣しているならば $Z^{(t)}_{v,u}$ は “トークンのフローの期待値”$\mu^{(t)}_v P_{v,u}$ をよく模倣しており, 従って $\chi^{(t+1)}$ は $\mu^{(t+1)}$ をよく模倣するはずである.

実際, 簡単に以下の観察を得ることが出来る. この観察は 4.2 章の解析で用いる.

観察 3.1. 上記のアルゴリズムにおいて任意の $u, v \in V$, $t \geq 0$ に対し

$$\left| Z^{(t)}_{v,u} - \chi^{(t)}_v P_{v,u} \right| \leq 1$$

が成り立つ.

3.2 主定理

定義より, $\tau(\varepsilon)$ を P の混交時間とすると $\mathcal{D}_{\rm tv}(\widetilde{\mu}^{(\tau(\varepsilon))}, \pi) \leq \varepsilon$ が成り立つ. これは $\widetilde{\mu}$ が目標の分布 π をよく模倣することを意味する. 従って, 私たちは決定的サンプリングアルゴリズムの分布 $\widetilde{\chi}^{(T)} \stackrel{\rm def.}{=} \chi^{(T)}/M$ が目標の分布 π をよく模倣することを示したい. 今, $\|\xi\|_1 = \|\zeta\|_1 = 1$ を満たす $\xi \in \mathbb{R}^N_{\geq 0}$, $\zeta \in \mathbb{R}^N_{\geq 0}$ に対し, 頂点距離 (*point-wise distance*) $\mathcal{D}_{\rm pw}(\xi, \zeta)$ を

$$\mathcal{D}_{\rm pw}(\xi,\zeta) \stackrel{\rm def.}{=} \max_{v \in V} |\xi_v - \zeta_v| = \|\xi - \zeta\|_\infty. \tag{6}$$

と定義する.

定理 3.2. $P \in \mathbb{R}^{N \times N}_{\geq 0}$ をエルゴード的かつ可逆な遷移確率行列とし, π を P の定常分布とする. このとき任意の $T \geq 0$ に対し

$$\mathcal{D}_{\rm pw}\left(\widetilde{\chi}^{(T)}, \widetilde{\mu}^{(T)}\right) \leq \frac{\pi_{\max}}{\pi_{\min}} \cdot \frac{3t^*\Delta}{M}$$

が成り立つ. ここで $\pi_{\max} = \max\{\pi_v \mid v \in V\}$, $\pi_{\min} = \min\{\pi_v \mid v \in V\}$ とする.

特に, 定常分布が一様分布の場合, 以下の系を得る.

系 3.3. $P \in \mathbb{R}^{N \times N}_{\geq 0}$ をエルゴード的かつ可逆な遷移確率行列とし, P の定常分布 π は一様分布とする. このとき, $M \geq 6\varepsilon^{-1}t^*\Delta$, $T \geq \tau(\varepsilon/2)$ ならば決定的サンプラーの分布 $\widetilde{\chi}^{(T)}$ は $\mathcal{D}_{\rm pw}\left(\widetilde{\chi}^{(T)}, \pi\right) \leq \varepsilon$ を満たす.

4. 頂点誤差の解析

本章では定理 3.2 を証明する. 証明に用いるいくつかの手法は既存研究 [6, 12, 14] に基づいている.

4.1 証明の大枠

まず, 以下の補題を示す.

補題 4.1. $P \in \mathbb{R}^{N \times N}_{\geq 0}$ を状態空間 V 上のエルゴード的な遷移確率行列とし, π を P の定常分布とする. このとき, 任意の $w \in V$ と任意の $T \geq 0$ に対し

$$\begin{aligned}
&\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)} \\
&= \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{u \in V} \sum_{v \in \mathcal{N}^-(u)} \left(Z_{v,u}^{(t)} - \chi_v^{(t)} P_{v,u}\right) \left(P_{u,w}^{T-t-1} - \pi_w\right)
\end{aligned}$$

が成り立つ.

証明. まず, 仮定の $\chi^{(0)} = \mu^{(0)}$ より

$$\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)} = \left(\chi^{(T)}P^0 - \chi^{(0)}P^T\right)_w \tag{7}$$

が成り立つ. そして

$$\begin{aligned}
&\chi^{(T)}P^0 - \chi^{(0)}P^T \\
&= \left(\chi^{(T)}P^0 - \chi^{(T-1)}P^1\right) + \left(\chi^{(T-1)}P^1 - \chi^{(T-2)}P^2\right) + \\
&\quad \cdots + \left(\chi^{(2)}P^{T-2} - \chi^{(1)}P^{T-1}\right) + \left(\chi^{(1)}P^{T-1} - \chi^{(0)}P^T\right) \\
&= \sum_{t=0}^{T-1} \left(\chi^{(t+1)}P^{T-t-1} - \chi^{(t)}P^{T-t}\right)
\end{aligned}$$

が成り立ち, 以下の式を得る.

$$\begin{aligned}
(7) &= \sum_{t=0}^{T-1} \left(\left(\chi^{(t+1)}P^{T-t-1}\right)_w - \left(\chi^{(t)}P^{T-t}\right)_w\right) \\
&= \sum_{t=0}^{T-1} \left(\sum_{u \in V} \chi_u^{(t+1)} P_{u,w}^{T-t-1} - \sum_{u \in V} (\chi^{(t)}P)_u P_{u,w}^{T-t-1}\right) \\
&= \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{u \in V} \left(\chi_u^{(t+1)} - (\chi^{(t)}P)_u\right) P_{u,w}^{T-t-1}. \qquad (8)
\end{aligned}$$

ここで (8) 中の $\sum_{u \in V} \left(\chi_u^{(t+1)} - (\chi^{(t)}P)_u\right) P_{u,w}^{T-t-1}$ の項は通常 0 にならないが,

$$\begin{aligned}
\sum_{u \in V} \left(\chi_u^{(t+1)} - (\chi^{(t)}P)_u\right) &= \sum_{u \in V} \chi_u^{(t+1)} - \sum_{u \in V} \sum_{v \in V} \chi_v^{(t)} P_{v,u} \\
&= \sum_{u \in V} \chi_u^{(t+1)} - \sum_{v \in V} \chi_v^{(t)} \sum_{u \in V} P_{v,u} \\
&= M - M = 0
\end{aligned}$$

が任意の $t \geq 0$ に対し成り立つことに注意する. 従って

$$\begin{aligned}
(8) &= \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{u \in V} \left(\chi_u^{(t+1)} - (\chi^{(t)}P)_u\right) P_{u,w}^{T-t-1} \\
&\quad - \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{u \in V} \left(\chi_u^{(t+1)} - (\chi^{(t)}P)_u\right) \pi_w \\
&= \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{u \in V} \left(\chi_u^{(t+1)} - (\chi^{(t)}P)_u\right) \left(P_{u,w}^{T-t-1} - \pi_w\right) \qquad (9)
\end{aligned}$$

が成り立つ. ここで定義 (5) より $\chi_u^{(t+1)} = \sum_{v \in V} Z_{v,u}^{(t)} = \sum_{v \in \mathcal{N}^-(u)} Z_{v,u}^{(t)}$ であるため (最後の等号は任意の $v \notin N^-(u)$ に対し $Z_{v,u}^{(t)} = 0$ が成り立つため) ,

$$\begin{aligned}
&(9) \\
&= \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{u \in V} \left(\sum_{v \in \mathcal{N}^-(u)} Z_{v,u}^{(t)} - \sum_{v \in \mathcal{N}^-(u)} \chi_v^{(t)} P_{v,u}\right) \left(P_{u,w}^{T-t-1} - \pi_w\right) \\
&= \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{u \in V} \sum_{v \in \mathcal{N}^-(u)} \left(Z_{v,u}^{(t)} - \chi_v^{(t)} P_{v,u}\right) \left(P_{u,w}^{T-t-1} - \pi_w\right)
\end{aligned}$$

が成り立ち, 題意が示された. □

4.2 可逆なマルコフ連鎖に対する解析

本章では可逆なマルコフ連鎖に対し解析を進める. まず, 以下の定理を示す.

定理 4.2. $P \in \mathbb{R}^{N \times N}_{\geq 0}$ をエルゴード的かつ可逆な遷移確率行列とし, π を P の定常分布とする. このとき任意の $w \in V$, $T \geq 0$ と γ $(0 < \gamma < 1/2)$ に対し

$$\left|\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)}\right| \leq \frac{2(1-\gamma)}{1-2\gamma} \tau(\gamma) \frac{\pi_w}{\pi_{\min}} \Delta \tag{10}$$

が成り立つ.

定理 4.2 に $\gamma = 1/4$ を代入し, 総トークン数 M で両辺を割ることで定理 3.2 が直ちに得られる.

証明. 補題 4.1 と観察 3.1 より,

$$
\begin{aligned}
&\left|\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)}\right| \\
&\leq \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{u \in V} \sum_{v \in \mathcal{N}(u)} \left|Z_{v,u}^{(t)} - \chi_v^{(t)} P_{v,u}\right| \left|P_{u,w}^{T-t-1} - \pi_w\right| \\
&\leq \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{u \in V} \sum_{v \in \mathcal{N}(u)} \left|P_{u,w}^{T-t-1} - \pi_w\right| \\
&= \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{u \in V} \delta(u) \left|P_{u,w}^{t} - \pi_w\right| \qquad (11)
\end{aligned}
$$

が成り立つ. さらに P は可逆であるため, 任意の $w, u \in V$ に対し $P_{u,w}^t = \frac{\pi_w}{\pi_u} P_{w,u}^t$ が成り立つ. 従って

$$
\begin{aligned}
(11) &= \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{u \in V} \delta(u) \left|\frac{\pi_w}{\pi_u}\left(P_{w,u}^t - \pi_u\right)\right| \\
&\leq \Delta \frac{\pi_w}{\pi_{\min}} \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{u \in V} \left|P_{w,u}^t - \pi_u\right| \\
&= 2\Delta \frac{\pi_w}{\pi_{\min}} \sum_{t=0}^{T-1} \mathcal{D}_{\mathrm{tv}}\left(P_{w,\cdot}^t, \pi\right) \qquad (12)
\end{aligned}
$$

が成り立つ. 最後の等式は総変動距離の定義 $\sum_{u \in V} |P_{w,u}^t - \pi_u| = 2\mathcal{D}_{\mathrm{tv}}\left(P_{w,\cdot}^t, \pi\right)$ から成り立つ. ここで命題 2.1 より, 以下の補題を得る.

補題 4.3. 任意の $v \in V, T > 0$ と $\gamma\ (0 < \gamma < 1/2)$ に対し,

$$
\sum_{t=0}^{T-1} \mathcal{D}_{\mathrm{tv}}\left(P_{v,\cdot}^t, \pi\right) \leq \frac{1-\gamma}{1-2\gamma}\tau(\gamma)
$$

が成り立つ.

証明. 簡単のため $h(t) = \mathcal{D}_{\mathrm{tv}}\left(P_{w,\cdot}^t, \pi\right)$ とおく. このとき任意の $t \geq 0$ に対し $h(t) \leq 1$ が定義 (2) より成り立つことに注意する. 命題 2.1 より,

$$
\begin{aligned}
&\sum_{t=0}^{T-1} \mathcal{D}_{\mathrm{tv}}\left(P_{w,\cdot}^t, \pi\right) = \sum_{t=0}^{T-1} h(t) \ \leq \ \sum_{t=0}^{\infty} h(t) \\
&= \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\tau(\gamma)-1} h(\ell \cdot \tau(\gamma) + k) \\
&= \sum_{k=0}^{\tau(\gamma)-1} h(k) + \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\tau(\gamma)-1} h(\ell \cdot \tau(\gamma) + k) \\
&\leq \sum_{k=0}^{\tau(\gamma)-1} 1 + \sum_{\ell=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\tau(\gamma)-1} \frac{1}{2}(2\gamma)^\ell = \tau(\gamma) + \sum_{\ell=1}^{\infty} \tau(\gamma)\frac{1}{2}(2\gamma)^\ell \\
&= \tau(\gamma) + \frac{\gamma}{1-2\gamma}\tau(\gamma) \ = \ \frac{1-\gamma}{1-2\gamma}\tau(\gamma)
\end{aligned}
$$

が成り立ち, 題意を得る. □

従って (12) と補題 4.3 より定理 4.2 を得る. □

5. 高速混交する連鎖に対する応用

本章ではいくつかの組合せ構造 (#P 完全問題) の一様サンプリングに対する多項式時間決定的サンプラーの例を紹介する.

5.1 0-1 ナップサック問題の解集合

0-1 ナップサック問題の解集合は入力 $a \in \mathbb{R}_{>0}^n$ と $b \in \mathbb{R}_{>0}$ に対し, $\Omega_{\mathrm{Kna}} = \{x \in \{0,1\}^n \mid \sum_{i=1}^n a_i x_i \leq b\}$ で定義される. 今, Ω_{Kna} 上の遷移確率行列 $P_{\mathrm{Kna}} \in \mathbb{R}^{|\Omega_{\mathrm{Kna}}| \times |\Omega_{\mathrm{Kna}}|}$ を任意の $x, y \in \Omega_{\mathrm{Kna}}$ に対し

$$
P_{\mathrm{Kna}}(x,y) = \begin{cases} 1/2n & (\text{if } y \in \mathcal{N}_{\mathrm{Kna}}(x)) \\ 1 - |\mathcal{N}_{\mathrm{Kna}}(x)|/2n & (\text{if } y = x) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}
$$

と定義する. ここで $\mathcal{N}_{\mathrm{Kna}}(x) = \{y \in \Omega_{\mathrm{Kna}} \mid \|x-y\|_1 = 1\}$ とする. P_{Kna} は対称行列であるため, P_{Kna} の定常分布は Ω_{Kna} 上の一様分布になることに注意する. Morris と Sinclair [13] は P_{Kna} に対し以下の定理を示した.

定理 5.1. *[13]* P_{Kna} の混交時間 $\tau(\gamma)$ は任意の $\alpha > 0, \gamma > 0$ に対し $\tau(\gamma) = \mathrm{O}(n^{\frac{9}{2}+\alpha} \log \gamma^{-1})$ を満たす.

P_{Kna} で定義されるマルコフ連鎖に対し, 決定的サンプラーは以下のように設計される.

アルゴリズム 1.

Step 0. 各トークン $i = 1, \ldots, M$ に対し $W^0[i] := \mathbf{0}$ とおく.

/* $W^t[i]$ は Ω_{Kna} 上で時刻 t にトークン i のいる場所を保持している. */

Step 1. **For** ($t = 0$ to $T-1$){

(a). リスト $S_x^{(t)} := \{i \in \{1,\ldots,M\} \mid W^t[i] = x\}$ を, $S_x^{(t)} \neq \emptyset$ である各 $x \in \Omega_{\mathrm{Kna}}$ に対し作成する.

(b). $S_x^{(t)} \neq \emptyset$ である各 $x \in \Omega_{\mathrm{Kna}}$ に対し $S_x^{(t)}$ 中のトークンを (4) に従い隣接点に遷移させ, $W^{t+1}[i]$ を更新する.

}

Step 2. 各 $i = 1, \ldots, M$ に対し $W^T[i]$ を出力する.

定理 5.2. 任意の $\varepsilon\ (0 < \varepsilon < 1)$ に対し, 適切な定数 c_1, c_2 と α を用い $M := c_1\, n^{\frac{11}{2}+\alpha}\varepsilon^{-1}$, $T := c_2\, n^{\frac{9}{2}+\alpha} \log \varepsilon^{-1}$ とする. このとき, アルゴリズム *1* は

$$
\mathcal{D}_{\mathrm{pw}}\left(\widetilde{\chi}^{(T)}, \pi\right) \leq \varepsilon \qquad (13)
$$

を満たす Ω_{Kna} 上の M 個のトークン配置を出力する. ここで π は Ω_{Kna} の一様分布を表す. また, アルゴリズム *1* の計算時間は

$$
\mathrm{O}(TM \log(M)\, n \,\mathrm{poly}(\log a, \log b)) = \mathrm{O}^*(n^{11+2\alpha}\varepsilon^{-1})
$$

である. ここで O^* は poly log の項を無視する上界を表す.

証明. アルゴリズム 1 の各ステップでの計算時間を確認する. Step 0 では M 個のトークンを $\mathbf{0} \in \Omega_{\mathrm{Kna}}$ にセット

するため, $\mathrm{O}(Mn)$ 時間を要する. Step 1(a) では Ω_{Kna} 上の M 個のトークン配置 $\chi^{(t)}$ を構成する. 具体的には少なくとも 1 つはトークンが存在している $v \in \Omega_{\mathrm{Kna}}$ に対しリストを構成するが, ここでトークン数は M であるため, $W^t[i]$ $(i = 1, \ldots, M)$ を Ω_{Kna} の辞書順にヒープすれば $\mathrm{O}(M \log(M)\, n)$ 時間で Step 1(a) を実行できる. Step 1(b) では 3.1 章で記述したアルゴリズムに従ってトークンの再配置を行う. これには x の隣接点を判定しトークンを遷移させるのに $\mathrm{O}(n\, \mathrm{poly}(\log a, \log b))$ 時間を要する. なお, アルゴリズム中で一度 x の隣接点を判定し終えたら, ロータールーターのようにトークンを遷移させれば $\mathrm{O}(n\, \chi_x^{(t)})$ で計算が可能である. アルゴリズムでは Step 1 を T 回繰り返し行うため, 計算時間の合計は $\mathrm{O}(TM \log(M)\, n\ \mathrm{poly}(\log a, \log b))$ となり, (13) は系 3.3 より明らかである. 従って題意が示された. □

5.2 半順序集合の線形順序拡大

$S = \{1, 2, \ldots, n\}$ とし, $Q = (S, \preceq)$ を S 上の半順序関係とする. Q の線形順序拡大とは, Q を満たす全順序関係 $X = (S, \sqsubseteq)$ である. 即ち, 全ての $i \preceq j$ である $i, j \in S$ は $i \sqsubseteq j$ を満たす. Ω_{Lin} を Q の全ての線形順序拡大の集合とする. 今, ある線形順序拡大のペア $X,\, X' \in \Omega_{\mathrm{Lin}}$ に対し, $x_p = x'_{p+1}, x_{p+1} = x'_p$, かつ任意の $i \neq p, p+1$ に対し $x_i = x'_i$ ならば $X \sim_p X'$ $(p \in \{1, \ldots, n\})$ と書くこととする. 即ち, $X \sim_p X'$ ならば

$$\begin{aligned} X &= (x_1, x_2, \ldots, x_{p-1}, x_p, x_{p+1}, x_{p+2}, \ldots, x_n) \\ X' &= (x_1, x_2, \ldots, x_{p-1}, x_{p+1}, x_p, x_{p+2}, \ldots, x_n) \end{aligned}$$

である. ここで任意の $X, X' \in \Omega_{\mathrm{Lin}}$ に対し $P_{\mathrm{Lin}} \in \mathbb{R}^{|\Omega_{\mathrm{Lin}}| \times |\Omega_{\mathrm{Lin}}|}$ を

$$P_{\mathrm{Lin}}(X, X') = \begin{cases} F(p)/2 & (\text{if } X' \sim_p X) \\ 1 - \sum_{I \in \mathcal{N}_{\mathrm{Lin}}(X)} P_{\mathrm{Lin}}(X, I) & (\text{if } X' = X) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

と定義する. ここで $\mathcal{N}_{\mathrm{Lin}}(X) = \{Y \in \Omega_{\mathrm{Lin}} \mid X \sim_p Y (p \in \{1, \ldots, n-1\})\}$ であり, また $F(p) = \frac{p(n-p)}{\frac{1}{6}(n^3 - n)}$ とする. P_{Lin} はエルゴード的かつ可逆であり, 定常分布は Ω_{Lin} 上の一様分布となる [3]. また, Bubley and Dyer [3] は以下の定理を示した.

定理 5.3. *[3]* P_{Lin} の混交時間 $\tau(\gamma)$ は任意の $\gamma > 0$ に対し $\tau(\gamma) = \mathrm{O}\left(n^3 \log n \gamma^{-1}\right)$ を満たす.

P_{Lin} に対し, 5.1 章の 0-1 ナップサック解と同様に決定的サンプリングアルゴリズムを構築することが出来, 計算時間は $\mathrm{O}^*(n^8 \varepsilon^{-1})$ となる. 詳細は [15] は参照されたい.

5.3 グラフ中のマッチング

グラフ中のマッチングを数え上げる問題は#P 完全であることが知られている. また, Jerrum と Sinclair [10] により高速混交するマルコフ連鎖が設計されている. 本章ではグラフ中の全てのマッチングからのサンプリングを扱う. なお, 2 部グラフの完全マッチングの数え上げはパーマネントと関係しており, これもまた#P 完全であることが知られ, Jerrum, Sinclair, Vigoda [11] がアニーリングを用いた MCMC 法に基づく FPRAS を設計している. 我々のアルゴリズムを 2 部グラフの完全マッチングに適用するにはいくつかの入力グラフに対する仮定が必要となる ([10, 11] 参照).

$H = (U, F)$ を任意の無向グラフ, $|U| = n$, $|F| = m$ とする. H のマッチング $\mathcal{M}$ とは, $\mathcal{M} \subseteq F$ であり, $\mathcal{M}$ のどの相異なる 2 辺も頂点を共有しないものをいう. ここで,

$$\Omega_{\mathrm{Mat}} \stackrel{\text{def.}}{=} \{\mathcal{M} \subseteq E \mid \mathcal{M} \text{ は } H \text{ のマッチング }\} \tag{14}$$

と定義する. $|\Omega_{\mathrm{Mat}}|$ の計算は#P 完全であることが示されている. Ω_{Mat} 上のマルコフ連鎖を以下のように定義する. まず, $\mathcal{E}(\mathcal{M}) = \{e = \{u, v\} \mid e \notin \mathcal{M}$ かつ u, v は共に $\mathcal{M}$ の辺に接する $\}$ を定義する. このとき, 任意の $e = \{u, v\} \notin \mathcal{E}(\mathcal{M})$ に対し,

$$\mathcal{M}(e) = \begin{cases} \mathcal{M} - e & (\text{if } e \in \mathcal{M}) \\ \mathcal{M} + e & (\text{if } u, v \text{ がどちらも } \mathcal{M} \text{ の辺と接していない}) \\ \mathcal{M} + e - e' & (\text{if } u, v \text{ のどちらかが } e' \in \mathcal{M} \text{ と接している}). \end{cases}$$

と定義し, $\mathcal{N}(\mathcal{M}) = \{\mathcal{M}(e) \mid e \notin \mathcal{E}(\mathcal{M})\}$ とする. このとき, 任意の $\mathcal{M}, \mathcal{M}' \in \Omega_{\mathrm{Mat}}$ に対して,

$$P_{\mathcal{M}, \mathcal{M}'} = \begin{cases} 1/2m & (\text{if } \mathcal{M}' \in \mathcal{N}(\mathcal{M})) \\ 1 - \sum_{X \in \mathcal{N}(\mathcal{M})} P_{\mathcal{M}, X} & (\text{if } \mathcal{M}' = \mathcal{M}) \\ 0 & (\text{その他}) \end{cases} \tag{15}$$

と定義する. Jerrum と Sinclar [10] によって, 以下の定理が示されている.

定理 5.4. [10] (15) で定義される P は Ω_{Mat} 上で既約かつ一様分布に収束する. そして, $\tau(\gamma) \leq 4mn(n \ln n + \ln \gamma^{-1})$ が任意の $\gamma > 0$ に対して成り立つ.

P_{Mat} に対し, 5.1 章の 0-1 ナップサック解と同様に決定的サンプリングアルゴリズムを構築することが出来, 計算時間は $\mathrm{O}^*(m^4 n^4 \varepsilon^{-1})$ となる. 詳細は [15] は参照されたい.

6. まとめ

本稿では決定的サンプリングアルゴリズムの提案を行い, 頂点誤差の上界 $\mathcal{D}_{\mathrm{pw}}(\widetilde{\chi}^{(t)}, \widetilde{\mu}^{(t)})$ を与えた. またこの上界を用い, 0-1 ナップサック解、線形順序拡大, マッチングなどいくつかの組合せ構造 (#P 完全問題) 上の一様サンプリングに対する 多項式時間決定的サンプリングアルゴリズムを設計した. 上界の $\pi_{\max}/\pi_{\min}$ の項の改善, また決定的サンプラーに基づく#P 完全問題に対する多項式時間近似数え上げアルゴリズムの設計が今後の課題となる.

参考文献

[1] H. Akbari and P. Berenbrink, Parallel rotor walks on finite graphs and applications in discrete load balancing, Proc. SPAA 2013, 186–195.
[2] O. Angel, A.E. Holroyd, J. Martin, and J. Propp, Discrete low discrepancy sequences, arXiv:0910.1077.
[3] R. Bubley and M. Dyer, Faster random generation of linear extensions, Discrete Mathematics, **201** (1999), 81–88.
[4] J. Cooper, B. Doerr, T. Friedrich, and J. Spencer, Deterministic random walks on regular trees, Random Structures & Algorithms, **37** (2010), 353–366.
[5] J. Cooper, B. Doerr, J. Spencer, and G. Tardos, Deterministic random walks on the integers, European Journal of Combinatorics, **28** (2007), 2072–2090.
[6] J. Cooper and J. Spencer, Simulating a random walk with constant error, Combinatorics, Probability and Computing, **15** (2006), 815–822.
[7] B. Doerr and T. Friedrich, Deterministic random walks on the two-dimensional grid, Combinatorics, Probability and Computing, **18** (2009), 123–144.
[8] P. Gopalan, A. Klivans, R. Meka, D. Stefankovic, S. Vempala, and E. Vigoda, An FPTAS for #knapsack and related counting problems, Proc. FOCS 2011, 817–826.
[9] A.E. Holroyd and J. Propp, Rotor walks and Markov chains, M. Lladser, R.S. Maier, M. Mishna, A. Rechnitzer, (eds.), Algorithmic Probability and Combinatorics, The American Mathematical Society, 2010, 105–126.
[10] M. Jerrum and A. Sinclair, Approximation algorithms for NP-hard problems, D.S. Hochbaum ed., The Markov chain Monte Carlo method: an approach to approximate counting and integration, PWS Publishing, 1996.
[11] 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.
[12] S. Kijima, K. Koga, and K. Makino, Deterministic random walks on finite graphs, Proc. ANALCO 2012, 16–25.
[13] B. Morris and A. Sinclair, Random walks on truncated cubes and sampling 0-1 knapsack solutions, SIAM Journal on Computing, **34** (2004), 195–226.
[14] Y. Rabani, A. Sinclair, and R. Wanka, Local divergence of Markov chains and analysis of iterative load balancing schemes, Proc. FOCS 1998, 694–705.
[15] T. Shiraga, Y. Yamauchi, S. Kijima, and M. Yamashita, Deterministic random walks for rapidly mixing chains, arXiv:1311.3749.