

Deterministic Random Walk — 確率と計算の視点から

九州大学 大学院システム情報科学研究所 来嶋 秀治

Shuji Kijima

Graduate School of Information Science and Electrical Engineering,
Kyushu University

概要

Deterministic random walk とは、ランダムウォークという確率過程を決定性過程で模倣する試みである。2000 年ごろに James Propp の考案したロータールーターモデル (rotor-router) をはじめとし、同様の概念が様々な文脈で研究されている。本稿では、有限グラフ上の deterministic random walk に関する筆者らの最近の研究を紹介する。特に確率的アルゴリズムの脱乱択化の視点から、deterministic random walk と対応するマルコフ連鎖の分布の誤差について、マルコフ連鎖の混交時間 (mixing time) を用いた頂点誤差解析を与える。

1 はじめに

ロータールーターモデル (rotor-router) は、2000 年ごろ James Propp によって提案された決定性過程で、Propp 機械 (Propp machine) とも呼ばれる。トークンがグラフ上の頂点を確率的に遷移していくランダムウォークに対し、ロータールーターモデルでは、各頂点に配備されたルーターが決定的にトークンを移送する。Doerr らは [10, 13] ランダムウォークとの類比から “deterministic random walk” と呼ぶことを提唱している¹。同様のモデルは、負荷分散、セルオートマトン、自己組織化などの文脈で発展している [30, 12, 31]。

単一頂点誤差の解析 Cooper と Spencer [11] は、(無限グラフである) \mathbb{Z}^n 上の複数トークン (並列ウォーク; *multiple-walk*) モデルを解析し、単一頂点誤差について $|\chi_v^{(t)} - \mu_v^{(t)}| \leq c_n$ という上界を与えている。ここで、 $\chi_v^{(t)}$ (同様に $\mu_v^{(t)}$) は、ロータールーターモデル (同、ランダムウォーク) の時刻 t における頂点 $v \in \mathbb{Z}^n$ 上のトークンの数を表し、任意の $v \in V$ に対して $\mu_v^{(0)} = \chi_v^{(0)}$ が成り立つものとする。このとき、 c_n は次元 n のみに依存する定数で、トークンの総数に依存しない。Cooper ら [10] は $c_1 \simeq 2.29$ (すなわち整数直線上のロータールーターモデル) を Doerr と Friedrich [13] は c_2 がルーターの順序に依存して、およそ 7.29 (上下左右) または 7.83 (上右下左) であることを示している。一方、Cooper ら [9] は単一頂点誤差が大きくなる場合として、(無限の) k 正則木上で $|\chi_v^{(t)} - \mu_v^{(t)}| = \Omega(\sqrt{kt})$ となるトークンとルーターの配置を与えている。

マルコフ連鎖の脱乱択化を動機として、来嶋ら [22] は有限グラフに対する解析を行っている。有限の多重有向グラフ (V, \mathcal{A}) 上の複数トークン型のロータールーターモデルの解析を行い、対応する推移行列が既約で非周期的 (すなわちエルゴード的) で可逆かつ lazy の場合について $|\chi_v^{(t)} - \mu_v^{(t)}| = O(|V||\mathcal{A}|)$ の上界を与えている。また下界として、 $|\chi_v^{(t)} - \mu_v^{(t)}| = \Omega(|\mathcal{A}|)$ となる例も与えている。梶野ら [21] は [22] の手法を洗練し、既約な推移行列一般 (すなわち、非周期、可逆、lazy を仮定しない) に対して、

¹のちには deterministic walk と呼ぶことを提唱している。

第二固有値を用いた上界を与えている。[22, 21] が多重辺を用いて有理数の推移確率だけを模倣し得るのに対し、Holroyd と Propp[19] ならびに Angel ら [3] は最小残余時間を用いたモデルを、白髪ら [32] は van der Corput 列を用いたモデルをそれぞれ提案し、無理数の推移確率をも扱えるようにしている。白髪ら [32] はロータールーターモデルを含むこれらのモデルを拡張した関数ルーターモデル (functional router model) を提唱し、関数ルーターモデルにおける単一頂点誤差の解析を与え、推移確率量列がエルゴード的かつ可逆の場合について混交時間を用いた上界を与えている。この上界は、特にマルコフ連鎖が急速混交 (rapidly mixing) する場合は状態推移グラフの頂点数に関して対数多項式となる。

超立方体、トーラス、Johnson グラフなどの特殊な有限グラフに対しては、個別の研究があり頂点数の対数多項式の上界が知られている。 d 次元超立方体に対しては、来嶋ら [22] が $O(d^3)$ の上界を与え、これを梶野ら [21] は $O(d^2)$ に改善している。最近、Akbari と Berenbrink [1] は Friedrich ら [16] の結果を用いて、 $O(d^{1.5})$ の上界を与えている。Akbari と Berenbrink [1] は定数次元のトーラスに対して、無限の整数格子点の場合と同様に $O(1)$ の上界を与えている。

関連研究 ロータールーターモデルの研究は、頂点誤差の解析に限らない。Holroyd と Propp[19] は、トークンが一つの場合 (単一ウォーク) のロータールーターモデルの有限グラフ上の訪問頻度に関する解析を行い、これを用いて $|\nu_v^{(t)} - t\pi_v| = O(|V||A|)$ を示している。ただし、 $\nu_v^{(t)}$ は t ステップの推移の間にトークンが頂点 v を訪問した回数であり、 π は対応するランダムウォークの定常分布を表す。Friedrich と Sauerwald [17] は、木、スター、トーラス、超立方体などのグラフに対して単一ウォークの全訪問時間 (cover time) を解析している。[5] と [8] はロータールーターモデルの周期について解析している。この他、ロータールーターモデルの aggregation に関する研究 ([23, 25] など) や、これを応用した情報拡散に関する研究 ([4, 14, 20] など) の多くの研究がある。

本稿のもう一つのテーマである確率と計算に関して、近年、乱択アルゴリズム (randomized algorithm) の脱乱択化 (derandomization) の研究が精力的に行われている。Gopalan ら [18] と Stefankovic ら [35] は 0-1 ナップサック解の個数の計算に関する決定性の多項式時間近似計算スキーム (FPTAS) を与えている。この問題に対しては、MCMC 法に基づく乱択多項式時間近似計算スキーム (FPRAS) [28] や、動的法を組み合わせた棄却サンプリング法に基づく FPRAS [15] などが知られていた。最近、0-1 ナップサック多面体の体積計算に対して、安藤と来嶋 [2] は畳み込み積分の近似計算を利用した FPTAS を与えている。Weitz [38] は correlation decay の技法を開発し、最大次数が 5 以上のグラフの独立集合の数え上げに対する FPTAS を与えている。同様の技法が独立に Bandyopadhyay と Gamarnik [6] によって開発され、correlation decay を用いた [7, 27] などの多くの成果が得られている。

本稿の構成 本稿では、有限マルコフ連鎖の脱乱択化を動機とする deterministic random walk の単一頂点誤差に関する筆者らの最近の研究を紹介する。準備として、第 2 章で本研究の動機となる MCMC 法について簡単に説明し、第 3 章でロータールーターモデルを説明する。第 4 章ではロータールーターの拡張にあたる関数ルーターモデルを説明し、単一頂点誤差の上界に関する白髪ら [32] の結果を紹介する。第 5 章では具体的な関数ルーターモデルを紹介する。第 6 章で 0-1 ナップサック解に対する決定性のサンプリング法について議論する。

2 マルコフ連鎖モンテカルロ法

Deterministic random walk の紹介の準備として、本章ではマルコフ連鎖モンテカルロ (MCMC) 法を紹介する。MCMC 法の詳細は [34, 26] 等を参照されたい。

有限集合 $V \stackrel{\text{def}}{=} \{1, \dots, N\}$ の要素を $f = (f_1, \dots, f_N) \in \mathbb{R}_{\geq 0}^N$ に比例する確率で標本抽出したいものとする。たとえば、6章では0-1ナップサック解の一様サンプリングを扱うが、その際、 V は0-1ナップサック解の全体集合を表し、各 $v \in V$ に対して $f_v = 1$ となる。マルコフ連鎖モンテカルロ法のアイデアは、 $f/\|f\|_1$ を極限分布にもつマルコフ連鎖を設計し、そのマルコフ連鎖を推移させて極限分布から標本抽出を行うというものである。ここで $\|f\|_1 = \sum_{v \in V} f_v$ は正規化定数を表す。

いま、状態空間 V のマルコフ連鎖の推移確率行列を $P \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{N \times N}$ とする。すなわち、 $P_{u,v}$ は状態 u から v への推移確率を表す ($u, v \in V$)。推移確率行列 P が既約 (irreducible) であるとは、 V の任意の状態 u と v に対して、ある $t \in \mathbb{Z}_{>0}$ が存在して $P_{u,v}^t > 0$ を満たすことを言う。ただし、 $P_{u,v}^t$ は行列 P^t (P の t 乗) の (u, v) 成分を表す。また、 P が非周期的 (aperiodic) であるとは、任意の状態 $v \in V$ に対して $\text{GCD}\{t \in \mathbb{Z}_{>0} \mid P_{v,v}^t > 0\} = 1$ を満たすことを言う。既約で非周期的な推移確率行列をエルゴード的 (ergodic) と言う。エルゴード的な推移確率行列 P は一意な定常分布 (stationary distribution), すなわち $\pi P = \pi$ を満たす $\pi \in \mathbb{R}_{\geq 0}^N$, を有することがよく知られている。さらに V 上の任意の初期分布 $\xi \in \mathbb{R}_{\geq 0}^N$ からの極限分布はこの定常分布に一致する、すなわち $\xi P^\infty = \pi$ が成り立つ。

エルゴード的な推移確率行列 $P \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{N \times N}$ が可逆 (reversible) であるとは、詳細釣合いの式 (detailed balance equation)

$$f_u P_{u,v} = f_v P_{v,u} \quad \forall u, v \in V \quad (1)$$

を満たすことを言う。推移確率行列 P が詳細釣合いの式を満たすとき、 $fP = f$ が成り立つことが容易に示され、すなわち $f/\|f\|_1$ が P に対する極限分布となる (例えば [26] 参照)。集合 V 上の二つの分布 ξ と ζ の総変動距離 (total variation distance) を

$$D_{\text{tv}}(\xi, \zeta) \stackrel{\text{def}}{=} \max_{A \subseteq V} \sum_{v \in A} (\xi_v - \zeta_v) = \frac{1}{2} \|\xi - \zeta\|_1 \quad (2)$$

で定める。このとき、それぞれ $\|\xi\|_1 = 1$ および $\|\zeta\|_1 = 1$ より、 $D_{\text{tv}}(\xi, \zeta) \leq 1$ が成り立つ。任意の $\varepsilon > 0$ に対し、推移確率行列 P の混交時間 (mixing time) を

$$\tau(\varepsilon) \stackrel{\text{def}}{=} \max_{v \in V} \min \{t \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \mid D_{\text{tv}}(P_{v,\cdot}^t, \pi) \leq \varepsilon\} \quad (3)$$

で定める。ただし、 $P_{v,\cdot}^t$ は P^t の v 行目の行ベクトルを表し、すなわち $P_{v,\cdot}^t$ は初期状態 $v \in V$ のマルコフ連鎖の時刻 t における分布を表す。言い換えると、 $\tau(\varepsilon)$ 回の推移後のマルコフ連鎖の分布 $P_{v,\cdot}^t$ は $D_{\text{tv}}(P_{v,\cdot}^t, \pi) \leq \varepsilon$ を満たし、目標分布の近似サンプリングと言える。便宜のため、 $t^* \stackrel{\text{def}}{=} \tau(1/4)$ とし、混交率 (mixing rate) と呼ぶことにする²。

3 ロータールーターモデル

本章ではグラフ上の単純ランダムウォークの類比であるロータールーターモデルを紹介する。

²しばしば $\tau(1/e)$ を混交率という。ここでは便宜的に $\tau(1/4)$ を用いる。往々にして、 $\tau(1/e)$ と $\tau(1/4)$ はオーダー評価においては等しいと考えられる [26]。

集合 $V = \{1, \dots, N\}$ に対して, $\mathcal{G} = (V, \mathcal{E})$ は単純有向グラフ³とする. 頂点 $v \in V$ の隣接点集合を $\mathcal{N}(v)$ で表す. 簡便のため, $\delta(v) = |\mathcal{N}(v)|$ とする. 集合 V 上のロータールーターモデルにおけるトークン初期配置を $\chi^{(0)} \in \mathbb{Z}_{\geq 0}^N$ で表し, 時刻 t におけるトークン配置を $\chi^{(t)} \in \mathbb{Z}_{\geq 0}^N$ で表す. トークン配置 $\chi^{(t)}$ は頂点上に配置されたロータールーター (rotor-routers) によって, 次のように更新される. まず, 一般性を失うことなく, 各頂点 $v \in V$ の隣接頂点集合 $\mathcal{N}(v)$ 上には順番 $u_0, \dots, u_{\delta(v)-1}$ が定められているものとする. 頂点 $v \in V$ 上のロータールーター $\sigma_v: \mathbb{Z}_{\geq 0} \rightarrow \mathcal{N}(v)$ は

$$\sigma_v(j) \stackrel{\text{def.}}{=} u_{i \bmod \delta(v)} \quad (j \in \mathbb{Z}_{\geq 0}) \quad (4)$$

と定義される. いま, $v, u \in V$ に対して

$$Z_{v,u}^{(t)} \stackrel{\text{def.}}{=} \left| \left\{ j \in \{0, \dots, \chi_v^{(t)} - 1\} \mid \sigma_v \left(j + \sum_{s=0}^{t-1} \chi_v^{(s)} \right) = u \right\} \right|$$

とする. すなわち, $Z_{v,u}^{(t)}$ は時刻 t における更新で v から u に移動するトークンの個数を表す. このとき, $\chi^{(t+1)}$ は

$$\chi_u^{(t+1)} \stackrel{\text{def.}}{=} \sum_{v \in V} Z_{v,u}^{(t)} \quad (u \in V)$$

と定められる.

定義より,

$$\frac{|\{j \in \{0, \dots, z-1\} \mid \sigma_v(j) = u\}|}{z} \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \frac{1}{\delta(v)}$$

が成り立つことがわかる. すなわち, 頂点 v から出ていくトークンの内, u に向かうものの割合は $\sum_{s=0}^t Z_{v,u}^{(s)} / \sum_{s=0}^t \chi_v^{(s)}$ とあらわされ, 時刻が進むにつれ v から出ていくトークン数が増加すると $1/\delta(v)$ に漸近する. したがって, (決定性過程の) ロータールーターが (確率過程の) 単純ランダムウォークのトークン配置を模倣するものと期待される.

4 関数ルーターモデル

4.1 モデル

状態空間 $V \stackrel{\text{def.}}{=} \{1, \dots, N\}$ と推移確率行列 $P \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{N \times N}$ で定められるマルコフ連鎖を考える. このとき, 状態 u から v への推移確率は一般に有理数とは限らないものとする⁴. 以下, P はエルゴード的で可逆と仮定する (2章参照). いま, $\mu^{(0)} = (\mu_1^{(0)}, \dots, \mu_N^{(0)}) \in \mathbb{Z}_{\geq 0}^N$ は V 上にある M 個のトークンの初期配置を表すものとし, $\mu^{(t)} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^N$ は P による独立な推移を行った後の時刻 t における期待配置を表すものとする. すなわち, $\|\mu^{(t)}\|_1 = M$ とし, $\mu^{(t)} = \mu^{(0)} P^t$ が成り立つ.

推移確率行列 P の状態遷移図を $\mathcal{G} = (V, \mathcal{E})$ とする. すなわち, $\mathcal{E} = \{(u, v) \in V^2 \mid P_{u,v} > 0\}$ であり, \mathcal{E} は自己ループを含んでよいものとする. このとき, $|\mathcal{E}| \leq N^2$ が成り立つことに注意されたい. いま $\mathcal{N}(v)$ は頂点 $v \in V$ の (出向) 隣接頂点⁵を表す, すなわち $\mathcal{N}(v) = \{u \in V \mid P_{v,u} > 0\}$ とする. また $\delta(v) = |\mathcal{N}(v)|$ とする. もし $P_{v,v} > 0$ であれば $v \in \mathcal{N}(v)$ となることに注意されたい.

³5.1章で多重有向グラフ上のモデルを扱う.

⁴すなわち, $P_{u,v} = \sqrt{5}/10, \exp(-10), \sin(\pi/6)$ などでもよい.

⁵いま P は可逆と仮定しているため, $u \in \mathcal{N}(v)$ ならば $v \in \mathcal{N}(u)$ が成り立つ. これを踏まえて $\mathcal{N}(v)$ で同時に $v \in V$ の入向隣接頂点集合も表すことにする.

いま, $\chi^{(0)} = \mu^{(0)}$ とし, $\chi^{(t)} \in \mathbb{Z}_{\geq 0}^N$ で関数ルーターモデルの時刻 t におけるトークン配置を表すものとする. トークン配置 $\chi^{(t)}$ は, $P_{v,u}$ になぞらえ, 各頂点 $v \in V$ に配備された関数ルーター $\sigma_v: \mathbb{Z}_{\geq 0} \rightarrow \mathcal{N}(v)$ によって更新される. 便宜のため, 各 $v, u \in V$ と任意の $z, z' \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ ($z < z'$) に対して

$$\mathcal{I}_{v,u}[z, z'] \stackrel{\text{def.}}{=} |\{j \in \{z, \dots, z' - 1\} \mid \sigma_v(j) = u\}| \quad (5)$$

を定める. このとき, σ_v は各 $z \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ について

$$\left| \frac{\mathcal{I}_{v,u}[0, z]}{z} - P_{v,u} \right| \quad (6)$$

を小さくするように設計する. 具体的な設計法については後の 5.2, 5.1, 5.3 章で述べる. いま,

$$Z_{v,u}^{(t)} = \mathcal{I}_{v,u} \left[\sum_{s=0}^{t-1} \chi_v^{(s)}, \sum_{s=0}^t \chi_v^{(s)} \right] \quad (v, u \in V) \quad (7)$$

とし, 時刻 t の更新において頂点 v から u へ移動したトークン数を表す. こうして, $\chi^{(t+1)}$ は

$$\chi_u^{(t+1)} \stackrel{\text{def.}}{=} \sum_{v \in V} Z_{v,u}^{(t)} \quad (u \in V) \quad (8)$$

と定められる.

第 5 章では関数ルーターの例を与え, v から u への推移割合 $\sum_{s=0}^t Z_{v,u}^{(s)} / \sum_{s=0}^t \chi_v^{(s)}$ がトークン移動数の増加に伴い $P_{v,u}$ に漸近する, すなわち関数ルーターがランダムウォークをよく模倣する例を紹介する.

4.2 単一頂点誤差の上界解析

関数ルーターとランダムウォークの差異として, ひとつの興味はトークン分布の違いであろう. 白髪ら [32] は関数ルーターの頂点 $w \in V$, 時間 $T \geq 0$ における単一頂点誤差 $|\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)}|$ について, 次の定理を与えている.

定理 4.1 ([32]) 推移確率行列 $P \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{N \times N}$ は可逆でエルゴード的とし, π は P の (一意な) 定常分布とする. このとき, 任意の $w \in V$, $T \geq 0$ および γ ($0 < \gamma < 1/2$) に対して

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

が成り立つ. ただし, Δ は状態遷移図 $\mathcal{G} = (V, \mathcal{E})$ の最大次数を表し, また,

$$\Psi_\sigma \stackrel{\text{def.}}{=} \max_{v \in V, u \in \mathcal{N}(v), t \geq 0} \left| Z_{v,u}^{(t)} - \chi_v^{(t)} P_{v,u} \right| \quad (9)$$

とする.

5 様々なルーターモデル

前章では関数ルーターの概念を与えた. 本節では具体的な関数ルーター $\sigma_v: \mathbb{Z}_{\geq 0} \rightarrow \mathcal{N}(v)$ の設計法を紹介する.

5.1 多重グラフ上のロータールーターモデル

第4章で、グラフ上の単純ランダムウォークに相当するロータールーターモデルについて説明した。本節では、一般の（有理数の推移確率をもつ）マルコフ連鎖を扱うために、来嶋ら [22] の導入した有限多重有向グラフ上のロータールーターモデルについて説明する。

推移確率行列 P はエルゴード的で可逆とし、有理数のみからなるものとする。各 $v \in V$ に対して、 $\bar{\delta}(v) \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ は $P_{v,u}$ をすべての $u \in \mathcal{N}(v)$ に対して通分した分母とする。すなわち、各 $u \in \mathcal{N}(v)$ に対して $\bar{\delta}(v) \cdot P_{v,u}$ は整数となる。ロータールーター $\sigma_v(0), \sigma_v(1), \dots, \sigma_v(\bar{\delta}(v) - 1)$ を、任意の $v \in V$ と $u \in \mathcal{N}(v)$ に対して

$$|\{j \in [0, \dots, \bar{\delta}(v)) \mid \sigma_v(j) = u\}| = \bar{\delta}(v) \cdot P_{v,u}$$

を満たすように随意に定め、 $i \geq \bar{\delta}(v)$ に対しても

$$\sigma_v(i) = \sigma_v(i \bmod \bar{\delta}(v)) \left(\equiv \sigma_v \left(i - \bar{\delta}(v) \cdot \left\lfloor \frac{i}{\bar{\delta}(v)} \right\rfloor \right) \right) \quad (10)$$

と定める。このとき、以下の観察を得る。

観察 5.1 多重有向グラフ上のロータールーターモデルにおいて、 $\Psi_\sigma \leq \max_v \bar{\delta}(v)$ が成り立つ。

すなわち、定理 4.1 と観察 5.1 から、混交率 $t^* \stackrel{\text{def}}{=} \tau(1/4)$ を用いて次を得る。

定理 5.2 ([32]) 状態空間 V 上の推移確率行列 $P \in \mathbb{Q}_{\geq 0}^{N \times N}$ はエルゴード的で可逆とし、 π は P の一意な定常分布とする。このとき、任意の $w \in V$ と $T \geq 0$ に対して

$$\left| \chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)} \right| \leq \frac{3\pi_w}{\pi_{\min}} \max_v \bar{\delta}(v) \cdot t^* \Delta$$

が成り立つ。

5.2 SRT ルーター

本節では最小残余時間優先 (*shortest remaining time; SRT*) ルーターを与える。このルーターは、Angel et al. [3] によって与えられたものである。頂点 $v \in V$ 上の関数ルーター $\sigma_v(i)$ ($i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$) は次のように定義される。頂点 $v \in V$ 、 $u \in \mathcal{N}(v)$ と非負整数 $i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ に対して、

$$L_i(v, u) = (i + 1)P_{v,u} - \mathcal{I}_{v,u}[0, i]$$

とし、

$$T_i(v) = \{u \in \mathcal{N}(v) \mid L_i(v, u) > 0\}$$

とする。このとき、 $\sigma_v(i) \in T_i(v)$

$$\frac{1 - L_i(v, u)}{P_{v,u}}$$

を $u \in T_i(v)$ に関して最小にするものとする。複数の $u \in T_v(i)$ が最小値を達成する場合には、(事前に定めた) 順序で一番小さいものを $\sigma_v(i)$ とする。SRT ルーターは、与えられた推移確率行列が有理数の場合には、前節で紹介した多重グラフ上のロータールーターモデルとして記述される。

次の定理は Angel ら [3] と Tijdeman [36] による。

定理 5.3 ([36, 3]) 推移確率行列 P は任意とする。任意の $v, u \in V$ と $z \in \mathbb{Z}_{>0}$ に対して,

$$|\mathcal{I}_{v,u}[0, z) - z \cdot P_{v,u}| \leq 1$$

が成り立つ。

Angel ら [3] と Tijdeman[36] は SRT が (6) を最小にすることを示している。さらに定理 5.3 から

$$\Psi_\sigma \leq 2 \quad (11)$$

を示すことができ、これと定理 4.1 から、混交率 $t^* \stackrel{\text{def.}}{=} \tau(1/4)$ を用いて次を得る。

定理 5.4 ([32]) 状態空間 V 上の推移確率行列 $P \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{N \times N}$ はエルゴード的で可逆とし、 π はその定常分布とする。このとき、SRT ルーターモデルにおいて、任意の $w \in V$ および $T \geq 0$ に対して

$$\left| \chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)} \right| \leq \frac{6\pi_w}{\pi_{\min}} t^* \Delta$$

が成り立つ。

5.3 van der Corput 列ルーター

有理数とは限らない推移確率行列を扱うことのできる SRT 以外の関数ルーターの例として、準乱数 (quasi-random) ⁶ を用いたルーターを紹介する。

代表的な準乱数である *van der Corput* 列 $\psi: \mathbb{Z}_{\geq 0} \rightarrow [0, 1)$ は次のように定められる [37, 29]。いま、 $i \in \mathbb{Z}_{>0}$ は適切な $\beta_j(i) \in \{0, 1\}$ ($j \in \{0, 1, \dots, \lfloor \lg i \rfloor\}$) を用いて $i = \sum_{j=0}^{\lfloor \lg i \rfloor} \beta_j(i) \cdot 2^j$ と 2 進表記されるものとする。このとき、 $\psi(0) \stackrel{\text{def.}}{=} 0$ とし、

$$\psi(i) \stackrel{\text{def.}}{=} \sum_{j=0}^{\lfloor \lg i \rfloor} \beta_j(i) \cdot 2^{-(j+1)} \quad (12)$$

と定義する。具体的には

$$\begin{aligned} \psi(1) &= 1 \times 1/2 && = 1/2, \\ \psi(2) &= 0 \times 1/2 + 1 \times 1/4 && = 1/4, \\ \psi(3) &= 1 \times 1/2 + 1 \times 1/4 && = 3/4, \\ \psi(4) &= 0 \times 1/2 + 0 \times 1/4 + 1 \times 1/8 && = 1/8, \\ \psi(5) &= 1 \times 1/2 + 0 \times 1/4 + 1 \times 1/8 && = 5/8, \\ \psi(6) &= 0 \times 1/2 + 1 \times 1/4 + 1 \times 1/8 && = 3/8, \\ \psi(7) &= 1 \times 1/2 + 1 \times 1/4 + 1 \times 1/8 && = 7/8, \\ \psi(8) &= 0 \times 1/2 + 0 \times 1/4 + 0 \times 1/8 + 1 \times 1/16 && = 1/16, \\ \psi(9) &= 1 \times 1/2 + 0 \times 1/4 + 0 \times 1/8 + 1 \times 1/16 && = 9/16, \end{aligned}$$

と続く。あきらかに、任意の (有限の) $i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ に対して $\psi(i) \in [0, 1)$ が成り立つ。

⁶超一様分布列 (low discrepancy sequence) とも呼ぶ。疑似乱数 (pseudo-random) とは趣旨が大きく異なる。

与えられた $i \in \mathbb{Z}_{>0}$ に対して $\sigma_v(i)$ を以下のように定める。一般性を失うことなく、各頂点 $v \in V$ の隣接点集合 $\mathcal{N}(v)$ 上には順番 $u_1, \dots, u_{\delta(v)}$ が定められているものとする。このとき $v \in V$ 上のルーター $\sigma_v: \mathbb{Z}_{\geq 0} \rightarrow \mathcal{N}(v)$ を $\sigma_v(i) = u_k \in \mathcal{N}(v)$ が

$$\sum_{j=1}^{k-1} P_{v,u_j} \leq \psi(i) < \sum_{j=0}^k P_{v,u_j}$$

を満たすように定める。

van der Corput 列に対して次の定理が成り立つ。

定理 5.5 ([37]) 随意の推移確率行列 P において、任意の $v, u \in V$ および $z \in \mathbb{Z}_{>0}$ に対して

$$|\mathcal{I}_{v,u}[0, z] - z \cdot P_{v,u}| \leq \lg(z+1)$$

が成り立つ。

定理 5.5 を用いて次の補題が示される。

補題 5.6 van der Corput 列ルーターモデルに対して $\Psi_\sigma \leq 2 \lg(M+1)$ が成り立つ。ただし M はトークンの総数を表す。

定理 4.1 と 5.6 から次を得る。

定理 5.7 ([32]) 状態空間 V 上の推移確率行列 $P \in \mathbb{Q}_{\geq 0}^{N \times N}$ はエルゴード的で可逆とし、 π は P の一意な定常分布とする。このとき、任意の $w \in V$ と $T \geq 0$ に対して

$$\left| \chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)} \right| \leq \frac{6\pi_w}{\pi_{\min}} \lg(M+1) \cdot t^* \Delta$$

が成り立つ。

定理 5.7 の示唆する上界 $\log M$ はトークンの総数に対して定数ではないものの、 $|\chi_v^{(t)}/M - \mu_v^{(t)}/M| = O(\log(M)/M)$ が成り立ち、すなわち、総トークン数の増加に伴い分布の誤差は相対的に小さくなることが保証される。

6 0-1 ナップサック解の決定性サンプリング法

本章では数え上げ問題が #P 完全である組合せ構造の一様サンプリングを行うための決定性のサンプリングアルゴリズムを紹介する。詳細は [33] を参照いただきたい。

正整数ベクトル $\mathbf{a} \in \mathbb{Z}_{>0}^n$ と正整数 $b \in \mathbb{Z}_{>0}$ が与えられたとき、0-1 ナップサック解の集合は $\Omega_{\text{Kna}} = \{\mathbf{x} \in \{0, 1\}^n \mid \sum_{i=1}^n a_i x_i \leq b\}$ で定義される。集合 Ω_{Kna} 上の推移確率行列 $P_{\text{Kna}} \in \mathbb{R}^{|\Omega_{\text{Kna}}| \times |\Omega_{\text{Kna}}|}$ を、

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

$(\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Omega_{\text{Kna}})$ で定める。ただし $\mathcal{N}_{\text{Kna}}(\mathbf{x}) = \{\mathbf{y} \in \Omega_{\text{Kna}} \mid \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_1 = 1\}$ とする。推移確率行列 P_{Kna} はエルゴード的でさらに対称なので、定常分布は Ω_{Kna} 上の一様分布となる。次の定理は Morris と Sinclair [28] による。

定理 6.1 ([28]) 任意の $\gamma > 0$ に対して, 推移確率行列 P_{Kna} の混交時間 $\tau(\gamma)$ は $O(n^{\frac{9}{2}+\alpha} \log \gamma^{-1})$ を満たす. ただし $\alpha > 0$ は任意とする.

マルコフ連鎖 P_{Kna} に対して, 決定性サンプリングアルゴリズムは以下のように記述される. なお, 記述の簡便のため, 下記の疑似コードは領域計算量, 時間計算量とも最適なものではない.

アルゴリズム 1

Step 0. 各 $i = 1, \dots, M$ に対して $W^0[i] := \mathbf{0}$ とする.

/* $W^t[i]$ は Ω_{Kna} 上でトークン i のいる解を記憶する. */

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

(a). $S_{\mathbf{x}}^{(t)} \neq \emptyset$ を満たす各 $\mathbf{x} \in \Omega_{Kna}$ について,
リスト $S_{\mathbf{x}}^{(t)} := \{i \in \{1, \dots, M\} \mid W^t[i] = \mathbf{x}\}$ を作成する.

(b). $S_{\mathbf{x}}^{(t)} \neq \emptyset$ を満たす各 $\mathbf{x} \in \Omega_{Kna}$ について,
リスト $S_{\mathbf{x}}^{(t)}$ のトークンを関数ルーターに従って隣接頂点に順に移動させる.
各トークン i について $W^{t+1}[i]$ を記憶する.

}

Step 2. 各トークン i について $W^T[i]$ を出力する.

定理 6.2 ([32]) 任意の ε ($0 < \varepsilon < 1$) に対して, 適当な定数 c_1, c_2, α を用いて $M := c_1 n^{\frac{11}{2}+\alpha} \varepsilon^{-1}$ とし, $T := c_2 n^{\frac{9}{2}+\alpha} \log \varepsilon^{-1}$ とする. アルゴリズム 1 は Ω_{Kna} から M 個の標本を生成し,

$$\|\tilde{\chi}^{(T)} - \pi\|_{\infty} \leq \varepsilon \quad (13)$$

を満たす. ただし π は Ω_{Kna} 上の一様分布とする. アルゴリズム 1 の計算時間は

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

である. ただし O^* は poly log 項を無視したものである.

不等式 (13) は L^{∞} ノルムにおける上界であることを注記する. L^1 ノルムにおける上界は未解決である.

7 単一頂点誤差の下界解析

本章では単一頂点誤差の下界の例を与える. 頂点数 n の完全グラフ K_n の各頂点に自己ループを付与したグラフ上の単純ランダムウォークを考える. 推移確率行列は次のように与えられる.

$$P = \frac{1}{n} \mathbb{1}^{n \times n} \equiv \begin{pmatrix} \frac{1}{n} & \frac{1}{n} & \dots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n} & \dots & \frac{1}{n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n} & \dots & \frac{1}{n} \end{pmatrix}. \quad (14)$$

便宜のため K_n の頂点を $\{0, 1, \dots, n-1\}$ とする. 明らかに定常分布は $\{0, 1, \dots, n-1\}$ 上の一様分布である.

各頂点のロータールーターを $\sigma_v(i) \stackrel{\text{def}}{=} i \bmod n$ で定め、初期状態 $\chi^{(0)}$ は $\chi_0^{(0)} = n$ ならびに $\chi_v^{(0)} = 0$ ($v \in \{1, \dots, n-1\}$) としたロータールーターモデル⁷を考えよう。独立な並列ランダムウォークによる期待トークン配置は、任意の時刻 $T > 1$ において、すべての頂点 $w \in V$ で $\mu_w^{(T)} = 1$ であることが容易にわかる。このとき、奇数時刻 $T = 2k + 1$ ($k \in \mathbb{Z}_+$) においては、ロータールーターモデルによるトークン配置は、任意の頂点 $w \in V$ において $\chi_w^{(2k)} = 1$ が成り立つ。一方、偶数時刻 $T = 2k$ においては頂点 $w = k \bmod n$ で $\chi_w^{(2k)} = n$ 、その他の頂点 w' ($w' \neq w$) で $\chi_{w'}^{(2k)} = 0$ が成り立つ。すなわち、任意の偶数時刻において、 $\chi_{(k \bmod n)+1}^{(2k)} - \mu_{(k \bmod n)+1}^{(2k)} = n - 1$ を得る。

定理 7.1 ([22]) エルゴード的で可逆な推移確率行列 P に対して、ロータールーター（同様に、SRT ルーター、準乱数ルーター）が存在して、無数の時刻 T において $|\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)}| = \Omega(n)$ が成り立つ例が存在する。

8 まとめ

本稿では deterministic random walk の単一頂点誤差の解析について議論した。MCMC 法を用いた乱択アルゴリズムの脱乱択化は今後の大きな課題である。

謝辞

共同研究者の牧野和久氏、古賀健太郎氏、梶野洸氏、白髪丈晴氏、山内由紀子氏、山下雅史氏に感謝する。本研究は科研費 (23650007, 25700002) の助成を受けている。

参考文献

- [1] H. Akbari and Petra Berenbrink, Parallel rotor walks on finite graphs and applications in discrete load balancing, Proceedings of the 25th ACM symposium on Parallelism in algorithms and architectures (SPAA 2013), 186–195.
- [2] E. Ando and S. Kijima, An FPTAS for the volume computation of 0-1 knapsack polytopes based on approximate convolution integral, Proceedings of the 25th International Symposium on Algorithms and Computation (ISAAC 2014), *to appear*.
- [3] O. Angel, A.E. Holroyd, J. Martin, and J. Propp, Discrete low discrepancy sequences, arXiv:0910.1077.
- [4] S. Angelopoulos, B. Doerr, A. Huber, and K. Panagiotou, Tight bounds for quasirandom rumor spreading, The Electronic Journal of Combinatorics, **16** (2009), #R102.
- [5] E. Bampas, L. Gasieniec, N. Hanusse, D. Ilcinkas, R. Klasing, A. Kosowski, Euler tour lock-in problem in the rotor-router model, Proceedings of the 23rd International Symposium on Distributed Computing (DISC 2009), 423–435.
- [6] A. Bandyopadhyay and D. Gamarnik, Counting without sampling: asymptotics of the log-partition function for certain statistical physics models, Random Structures and Algorithms, **33** (2008), 452–479.

⁷この例は SRT ルーターや準乱数ルーターでもある。

- [7] M. Bayati, D. Gamarnik, D. Katz, C. Nair, and P. Tetali, Simple deterministic approximation algorithms for counting matchings, *Proceedings of the thirty-ninth annual ACM symposium on Theory of computing (STOC 2007)*, 122–127.
- [8] J. Chalopin, S. Das, P. Gawrychowski, A. Kosowski, A. Labourel, P. Uznanski, Lock-in problem for parallel rotor-router walks, *arXiv:1407.3200* (2014).
- [9] J. Cooper, B. Doerr, T. Friedrich, and J. Spencer, Deterministic random walks on regular trees, *Random Structures & Algorithms*, **37** (2010), 353–366.
- [10] J. Cooper, B. Doerr, J. Spencer, and G. Tardos, Deterministic random walks on the integers, *European Journal of Combinatorics*, **28** (2007), 2072–2090.
- [11] J. Cooper and J. Spencer, Simulating a random walk with constant error, *Combinatorics, Probability and Computing*, **15** (2006), 815–822.
- [12] D. Dhar, Self-organized critical state of sandpile automaton models, *Phys. Rev. Lett.*, **64** (1990), 1613; Erratum: *Phys. Rev. Lett.*, **64** (1990), 2837.
- [13] B. Doerr and T. Friedrich, Deterministic random walks on the two-dimensional grid, *Combinatorics, Probability and Computing*, **18** (2009), 123–144.
- [14] B. Doerr, T. Friedrich, and T. Sauerwald, Quasirandom rumor spreading on expanders, *Electronic Notes in Discrete Mathematics*, **34** (2009), 243–247.
- [15] M. Dyer, Approximate counting by dynamic programming, *Proceedings of the 35th Annual ACM Symposium on Theory of Computing (STOC 2003)*, 693–699.
- [16] T. Friedrich, M. Gairing, and T. Sauerwald, Quasirandom load balancing, *SIAM Journal on Computing*, **41** (2012), 747–771.
- [17] T. Friedrich and T. Sauerwald, The cover time of deterministic random walks, *The Electronic Journal of Combinatorics*, **17** (2010), R167.
- [18] P. Gopalan, A. Klivans, and R. Meka, Polynomial-time approximation schemes for knapsack and related counting problems using branching programs, *arXiv:1008.3187v1*, 2010.
- [19] 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.
- [20] A. Huber and N. Fountoulakis, Quasirandom broadcasting on the complete graph is as fast as randomized broadcasting, *Electronic Notes in Discrete Mathematics*, **34** (2009), 553–559.
- [21] H. Kajino, S. Kijima, and K. Makino, Discrepancy analysis of deterministic random walks on finite irreducible graphs, discussion paper, 2013.
- [22] S. Kijima, K. Koga, and K. Makino, Deterministic random walks on finite graphs, *Random Structures and Algorithms*, to appear.
- [23] M. Kleber, Goldbug variations, *The Mathematical Intelligencer*, **27** (2005), 55–63.
- [24] G.F. Lawler, M. Bramson, and D. Griffeath, Internal diffusion limited aggregation, *The Annals of Probability*, **20** (1992), 2117–2140.
- [25] L. Levine and Y. Peres, Strong spherical asymptotics for rotor-router aggregation and the divisible sandpile, *Potential Analysis*, **30** (2009), 1–27.
- [26] D.A. Levine, Y. Peres, and E.L. Wilmer, *Markov Chain and Mixing Times*, American Mathematical Society, 2008.

- [27] C. Lin, J. Liu, P. Lu, A simple FPTAS for counting edge covers, Proceedings of the 25th Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms (SODA 2014), *to appear*, arXiv:1309.6115.
- [28] B. Morris and A. Sinclair, Random walks on truncated cubes and sampling 0-1 knapsack solutions, *SIAM Journal on Computing*, **34** (2004), 195–226.
- [29] H. Niederreiter, Quasi-Monte Carlo methods and pseudo-random numbers, *Bull. Amer. Math. Soc.*, **84**(1978), 957–1042
- [30] V. Priezzhev, D. Dhar, A. Dhar, and S. Krishnamurthy, Eulerian walkers as a model of self-organized criticality, *Physical Review Letters*, **77** (1996), 5079–5082.
- [31] Y. Rabani, A. Sinclair, and R. Wanka, Local divergence of Markov chains and analysis of iterative load balancing schemes, *Proc. FOCS 1998*, 694–705.
- [32] T. Shiraga, Y. Yamauchi, S. Kijima, and M. Yamashita, Deterministic random Walks for rapidly mixing chains, arXiv:1311.3749 (2013).
- [33] T. Shiraga, Y. Yamauchi, S. Kijima, and M. Yamashita, L_∞ -discrepancy analysis of polynomial-time deterministic samplers emulating rapidly mixing chains, *Lecture Notes in Computer Science*, **8591** (COCOON 2014), 25–36.
- [34] A. Sinclair, *Algorithms for Random Generation & Counting, A Markov chain approach*, Birkhäuser, 1993.
- [35] D. Stefankovic, S. Vempala, and E. Vigoda, A deterministic polynomial-time approximation scheme for counting knapsack solutions, *SIAM Journal on Computing*, **41** (2012), 356–366.
- [36] R. Tijdeman, The chairman assignment problem, *Discrete Math.* **32** (1980), 323–330.
- [37] J. G. van der Corput, Verteilungsfunktionen, *Proc. Akad. Amsterdam*, **38** (1935), 813–821, 1058–1066.
- [38] D. Weitz, Counting independent sets up to the tree threshold, *Proc. STOC 2006*, 140–149, 2006.