

a-シャッフル

i) まず、カードを大きさがそれぞれ k_1, k_2, \dots, k_a 枚の a 個の山に分ける (ただし $k_1 + \dots + k_a = d$)。ここで k_1, k_2, \dots, k_a は以下のような多項分布に従うとする：

$$P(\text{山の大きさがそれぞれ } k_1, k_2, \dots, k_a) = \frac{d!}{k_1!k_2!\dots k_a!} a^{-d}.$$

ii) 次に、これら a 個の山のカードをパラパラと混ぜて行く (カードをきる人が a 本の手を持っていて、器用にカードをパラパラ混ぜる様子を思い描いてみよう)。 $a = 2$ の場合と同様、**「 a 個の山の混ざり方」がすべて等確率で起こる** ように混ぜる。

「 a 個の山の混ざり方」の場合の数は、 d 個の箱に a 種類の (各々の個数が k_1, \dots, k_a 個の) ボールを入れる入れ方の総数に等しいので $d!/(k_1!k_2!\dots k_a!)$ となる。従って、各々の混ざり方が実現する確率は

$$\frac{k_1!k_2!\dots k_a!}{d!}$$

である。以上が a -シャッフルである。(注) $a > d$ でもこのシャッフルは意味を持つ。

iii) 結局混ざったカードの並び方はどういう確率分布をもつ？

今、 $\pi(i) > \pi(i+1)$ となる i が丁度 s 個あるような置換の全体を

$$\mathcal{R}_s := \{ \pi \in \mathcal{S} : 1 \leq j_1 < j_2 < \cdots < j_s \leq d-1 \text{ があって、} \pi(1) < \cdots < \pi(j_1) > \pi(j_1+1), \\ \pi(j_1+1) < \cdots < \pi(j_2) > \pi(j_2+1), \cdots, \pi(j_s+1) < \cdots < \pi(d) \}$$

と置き、 $r = s+1$, $\pi \in \mathcal{R}_s$ とする。(例1.5の \mathcal{R} はここでの \mathcal{R}_1 に当たる。)

すると、 a -シャッフルの結果は $\pi \in \mathcal{R}_s$ で $a \geq r$ なる置換となる。

iii)-1) **$a = r$ の場合** : シャッフルの結果が π であるには、初めの a 個の山の大きさがそれぞれ $j_1, (j_2 - j_1), \cdots, (j_s - j_{s-1}), d - j_s$ でなくてはいけないので、求める確率は

$$P\left(\text{山の大きさが } j_1, j_2 - j_1, \cdots, j_s - j_{s-1}, d - j_s\right) P\left(\pi \mid \text{山の大きさが } j_1, j_2 - j_1, \cdots, j_s - j_{s-1}, d - j_s\right) \\ = \frac{d! a^{-d}}{j_1!(j_2 - j_1)! \cdots (j_s - j_{s-1})!(d - j_s)!} \cdot \frac{j_1!(j_2 - j_1)! \cdots (j_s - j_{s-1})!(d - j_s)!}{d!} = \frac{1}{a^d}. \quad (11)$$

iii)-2) $a > r$ の場合 : シャッフルの結果が \mathcal{R}_{r-1} の元になるには、まず a 個の山に分け、そのうち $(a - r)$ 個の山についてはシャッフルの際にカードの相対的順序が変わらないようにシャッフルされなければならない。そこでその $(a - r)$ 個の山については最初から“山をくっつける”ことにすると、シャッフルの結果が π になるにはくっつけた結果山の大きさがそれぞれ $j_1, (j_2 - j_1), \dots, (j_s - j_{s-1}), d - j_s$ でないといけない。

くっつけた結果がこのようになる a 個の山の分け方は、(d 個のボールの間に $(a - r)$ 個の敷居を入れる入れ方の数に等しいから) ${}_{d+(a-r)}C_d$ 通りある。一旦 $j_1, (j_2 - j_1), \dots, (j_s - j_{s-1}), d - j_s$ 個の山が出来たら、その山をシャッフルした結果 π になる確率は (11) に等しいから、結局シャッフルの結果が π である確率は

$${}_{d+(a-r)}C_d a^{-d}. \quad (12)$$

(注) (5) は、 $a = 2, r = 1$ の場合 に当たる。また、 $a = r$ とすると (11) と一致 する。

以上で、 a -シャッフルとその確率分布が分かった。

鍵となる命題（証明は行わない）。

命題 3.1 a, b を自然数とする。このとき、 a -シャッフルの後 b -シャッフルを行うと、全体として ab -シャッフルを行ったと同じことになる（同じ確率分布を与える）。

証明に興味がある人は、以下を参照して下さい。

[5] B. Mann, *How many times should you shuffle a deck of cards?*

この命題から、独立なりフル・シャッフルを n 回行うことは、 2^n -シャッフルを行うことと同じ事になる（同じ確率分布を与える）。また、 $\pi \in \mathcal{R}_{r-1}$ のとき、(12)より

$$P^n(\delta_{id}, \pi) = {}_{d+2^n-r}C_d \cdot 2^{-nd}.$$

従って(10)より、

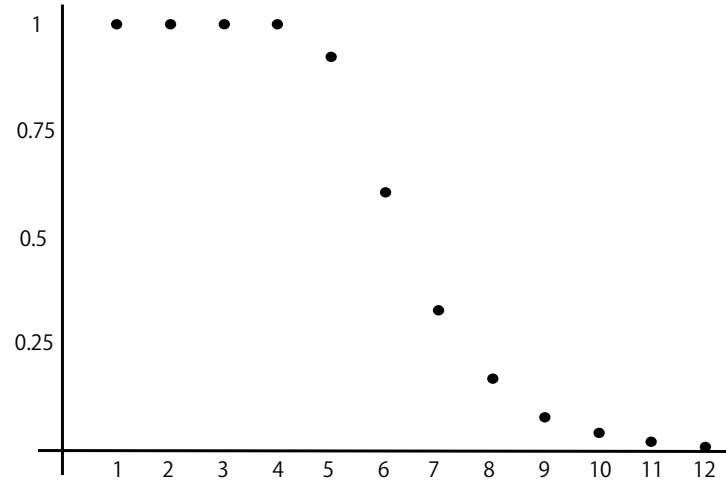
$$\|P^n(\delta_{id}, \cdot) - U\|_{TV} = \frac{1}{2} \sum_{r=1}^d A_{d,r} \left| d+2^{n-r} C_d \cdot 2^{-nd} - \frac{1}{d!} \right|. \quad (13)$$

ただし \mathcal{R}_{r-1} の元の数 $A_{d,r}$ と書いた。これは組合せ論で Eulerian number と呼ばれる数で、例えば次のような帰納的な関係式を満たす。

$$A_{d,1} = 1, \quad A_{d,r} = r^d - \sum_{j=1}^{r-1} d+r-j C_d \cdot A_{d,j}.$$

ここまで来ると、コンピュータを使って計算ができる。 $d = 52$ のトランプの場合に(13)の左辺を計算すると以下のようになる。この図表を見ると、7回前後で急に「よく混ざった」状態になると分かってもらえるだろう。

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.9237	0.6135	0.3341	0.1672	0.0854	0.0429	0.0215	0.0108



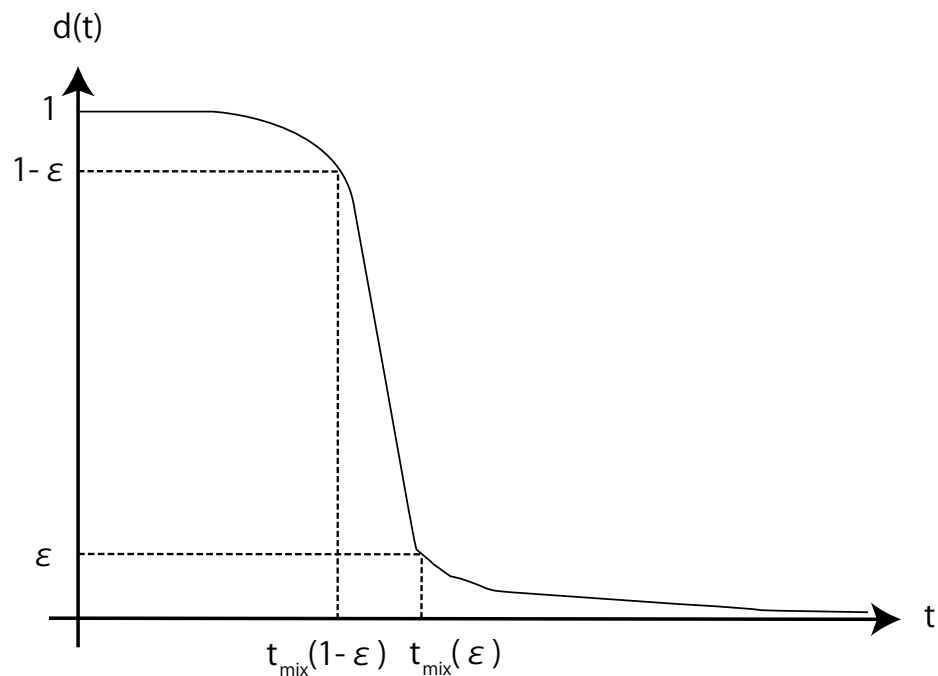
カット・オフ現象 上の図のように、急激に混ざり合う現象をカット・オフ現象と呼ぶ。数学的な定式化のためには、一つの固定した d を見るのでは不十分である。

定義 3.2 n 個の元からなる有限集合 $S(n)$ 上に、それぞれマルコフ連鎖が与えられているとし、その混合時間を $t_{mix}^{(n)}(\varepsilon)$ と書くことにする。このとき、このマルコフ連鎖の列が カット・オフ を持つとは、任意の $\varepsilon > 0$ に対して以下が成り立つことである。

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{t_{mix}^{(n)}(\varepsilon)}{t_{mix}^{(n)}(1 - \varepsilon)} = 1. \quad (14)$$

(14)のような現象をカット・オフ現象という。このように、数学的には、カット・オフ現象とはマルコフ連鎖の列に関する性質なのである。

以下の図で分かるように、カット・オフ現象は (n が大きいとき) 混合時間の周辺で、急激に $d(t)$ が小さくなる (つまり「良く混ざる」) 現象のことなのである。 n が十分大きいという点に注意して欲しい。



最後に Diaconis 達の定理を紹介する。

定理 3.3 ([1] D. Bayer and P. Diaconis (1992)) \mathcal{S}_n 上の独立なりフル・シャッフルを

$m = \frac{3}{2} \log_2 n + \theta$ 回繰り返すと、 n が大きいとき以下が成り立つ。

$$\left\| P^m(\sigma, \cdot) - U \right\|_{TV} = 1 - 2\Phi\left(\frac{-1}{4\sqrt{3} \cdot 2^\theta}\right) + O\left(n^{-1/4}\right), \quad \sigma \in \mathcal{S}_n. \quad (15)$$

ここで $\Phi(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^z \exp(-t^2/2) dt$ で、 U は \mathcal{S}_n 上の一様分布とする。

(15) は $\theta \rightarrow -\infty$ のとき 1 で $\theta \rightarrow \infty$ のとき 0 になることから任意の $\varepsilon > 0$ について (14)

が成り立つことがわかり、**リフル・シャッフルについてカット・オフ現象が証明さ**

れた ところになる。 n が十分大きいとき、**混合時間は $\frac{3}{2} \log_2 n$** である。($n = 52$ の場合、

$\frac{3}{2} \log_2(52) = 8.55 \dots$ なので先程の 7 回とは少しずれるが、これは 52 という数がまだ

“十分大きくない” ために生じるずれである。)

4 カット・オフ現象はいつ起きるか？

(答え) 「一般には分からない」。。。。

いくつかの例でカット・オフ現象が起こるかどうかに具体的にみる。

以下、 U は \mathcal{S}_n 上の一様分布とする。

定理 4.1 (例 1.3 (ランダム to トップ) の場合)

i) $\theta > 0$, $m = n(\log n + \theta)$ のとき、以下が成り立つ。

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \left\| P^m(\sigma, \cdot) - U \right\|_{TV} \leq \frac{1}{2} \exp(-2\theta), \quad \sigma \in \mathcal{S}_n.$$

ii) $\theta > 0$, $m = n(\log n - \theta)$ のとき、以下が成り立つ。

$$\lim_{n, \theta \rightarrow \infty} \left\| P^m(\sigma, \cdot) - U \right\|_{TV} = 1, \quad \sigma \in \mathcal{S}_n.$$

ランダム to トップを繰り返すシャッフルは、 $n \log n$ でカット・オフ現象を起こす。

証明: i) 方針 うまくマルコビアン・カップリングを取り、命題2.9を適用!

$$\tilde{P}((\sigma, \sigma'), (\tau, \tau')) = \begin{cases} 1/n & \text{if } \tau\sigma^{-1} = \tau'\sigma'^{-1} \in \mathcal{U}_1 \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

ただし $\mathcal{U}_1 := \{\hat{\tau}_k : 1 \leq k \leq n\}$ 。(9)から

$$d(n) \leq \max_{x,y \in S} \tilde{P}_{(x,y)}(\tau_{\text{couple}} > n)$$

ポイント i, j のどちらかが選ばれトップに移動すれば、その時点で \tilde{X}, \tilde{Y} における i と j の相対的な位置は同じになる。よって、 i, j の全ペアについてペアのどちらかが選ばれトップに移動した時点 ($\hat{\sigma}$ と書く) までには、 \tilde{X}, \tilde{Y} はカップルする。

m 回のシャッフリングのまでに i, j のペアが選ばれない確率は $(1 - 2/n)^m$ 故

$$\max_{x,y \in S} \tilde{P}_{(x,y)}(\tau_{\text{couple}} > n) \leq P(\hat{\sigma} > n) \leq \sum_{i < j} (1 - 2/n)^m = \frac{n(n-1)}{2} (1 - 2/n)^{n \log n + n\theta}$$

(右辺) $\xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \exp(-2\theta)$ 故、結論を得る。

ii) $A_j := \{\pi \in \mathcal{S}_n : \text{初期分布から } \pi \text{ にシャッフルされて行く際、} 1, 2, \dots, n \text{ のうち選ばれていないカードが } j \text{ 枚以上ある}\}$ と置く。 $\#A_j$ は、相異なる n 個の中から $n - j$ 個を並べる並べ方の数に等しいので、 $U(A_j) = n(n - 1) \cdots (j + 1)/n! = 1/j!$ となる。

よって $\|P^m(\sigma, \cdot) - U\|_{TV} \geq \max_j |P^m(\sigma, A_j) - U(A_j)| = \max_j |P^m(\sigma, A_j) - 1/j!|$

従って、示すべきは $m = n(\log n - \theta)$ として任意の σ, j について $\lim_{\theta \rightarrow \infty} P^m(\sigma, A_j) = 1$ 。

T_l : n 種類のカードのうち l 種類目のカードが初めて選ばれた時刻 ($1 \leq l \leq n$)。

$$\text{すると } P^m(\sigma, A_j) \geq P(T_{n-j} > m) = 1 - P(T_{n-j} \leq m)$$

なので、示すべきは $\lim_{\theta \rightarrow \infty} P(T_{n-j} \leq m) = 0$ 。

クーポンコレクターの問題

(T_n は、 n 種類のクーポンをそろえるために買わなければならないクーポンの枚数)

- 明らかに $T_1 = 1$ 。

- $T_{l+1} - T_l$: l 種類目のクーポンを入手してから $l+1$ 種類目入手するまでの時間
これらは l について独立。

引いたカードが既に持っている l 種類のどれかである確率は l/n だから、

$$P(T_{l+1} - T_l = s) = (l/n)^{s-1}(1 - l/n), \quad s = 1, 2, \dots \quad (16)$$

(パラメータ $(1 - l/n)$ の幾何分布という)。 (16) を用いて計算すると、

$$E[T_{l+1} - T_l] = \frac{n}{n-l}, \quad \text{Var}[T_{l+1} - T_l] := E\left[(T_{l+1} - T_l - E[T_{l+1} - T_l])^2\right] = \left(\frac{n}{n-l}\right)^2 \left(1 - \frac{n-l}{n}\right).$$

$\{T_{l+1} - T_l\}$ の l に関する独立性を用いると、

$$E[T_{n-j}] = \sum_{l=0}^{n-j-1} \frac{n}{n-l} = n \log n + O(n),$$

$$\text{Var}[T_{n-j}] = \sum_{l=0}^{n-j-1} \left(\frac{n}{n-l}\right)^2 \left(1 - \frac{n-l}{n}\right) = O(n^2).$$

α を十分大きく取り、 $\theta > \alpha$ と取ると、

$$\begin{aligned} P\left(\frac{1}{n}|T_{n-j} - E[T_{n-j}]| \geq \theta - \alpha\right) &= P\left(\left|\frac{1}{n}(T_{n-j} - n \log n) - O(1)\right| \geq \theta - \alpha\right) \\ &\geq P\left(\frac{1}{n}(T_{n-j} - n \log n) \leq -\theta\right) = P(T_{n-j} \leq n \log n - \theta n) = P(T_{n-j} \leq m). \end{aligned} \quad (17)$$

- (チェビシェフの不等式) $\beta > 0$ のとき $P(|X| \geq \beta) \leq E[X^2]/\beta^2$

(\odot) $\beta^2 P(|X| \geq \beta) \leq E[X^2]$ だから。 これを用いると

$$P\left(\frac{1}{n}|T_{n-j} - E[T_{n-j}]| \geq \theta - \alpha\right) \leq \frac{\text{Var}[T_{n-j}]}{n^2(\theta - \alpha)^2} \leq \frac{M}{(\theta - \alpha)^2}. \quad (18)$$

(17), (18)をまとめると

$$P(T_{n-j} \leq m) \leq \frac{M}{(\theta - \alpha)^2} \xrightarrow{\theta \rightarrow \infty} 0$$

なので、 $\lim_{\theta \rightarrow \infty} P(T_{n-j} \leq m) = 0$ が示された。 □

定理 4.2 (例1.4 (ランダム・トランスポジション) の場合)

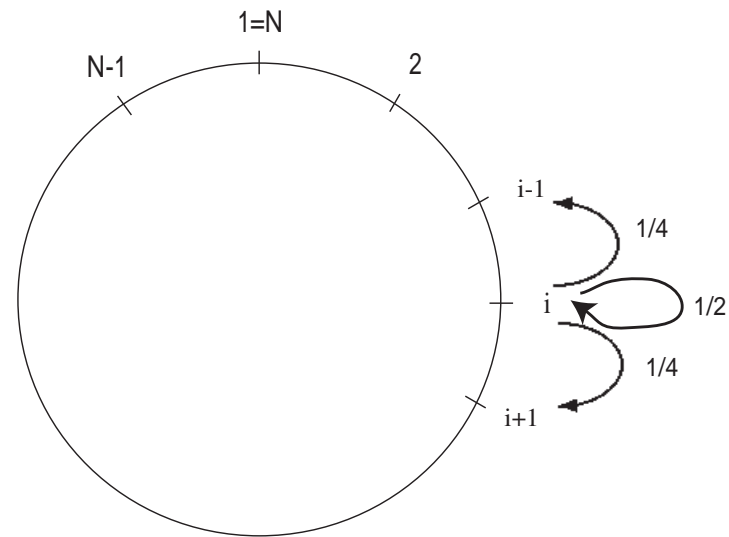
i) $\theta > 0$, $m = \frac{n}{2}(\log n + \theta)$ のとき、ある $A > 0$ が存在して以下を満たす。

$$\left\| P^m(\sigma, \cdot) - U \right\|_{TV} \leq A \exp(-\theta/2), \quad \sigma \in \mathcal{S}_n.$$

ii) $\theta > 0$, $m = \frac{n}{2}(\log n - \theta)$ のとき、以下が成り立つ。

$$\lim_{n, \theta \rightarrow \infty} \left\| P^m(\sigma, \cdot) - U \right\|_{TV} = 1, \quad \sigma \in \mathcal{S}_n.$$

ランダム・トランスポジションを繰り返すシャッフルは、 $\frac{n}{2} \log n$ でカット・オフ現象を起こす。



カット・オフ現象を**起こさない**マルコフ連鎖の例

例 4.3 (サイクル上のランダムウォーク) $S(n) = \{1, 2, \dots, n\}$ 、推移確率：

$$P(i, i-1) = 1/4, \quad P(i, i) = 1/2, \quad P(i, i+1) = 1/4, \quad i \in S(n).$$

* **レイジー・ランダムウォーク** (lazy random walk) と言う。

* $S(n)$ 上の一様分布を可逆分布として持つ、可逆マルコフ連鎖である。

定理 4.4 (例 4.3 (サイクル上のランダムウォーク) の場合)

単調減少する連続関数 $f > 0$ で、 $\lim_{\theta \rightarrow 0} f(\theta) = 1, \lim_{\theta \rightarrow \infty} f(\theta) = 0$ なるものが存在し、

$$\left\| P^m(\sigma, \cdot) - U \right\|_{TV} \sim f\left(\frac{m}{n^2}\right), \quad \sigma \in S(n).$$

* n 大のとき、 $S(n)$ 上のこのマルコフ連鎖は $d(tn^2)$ が t を 0 付近から無限大に動かすに連れ、1 から 0 に動く。従ってカット・オフ現象を起こさない。

(Q) カット・オフ現象が起こるメカニズムは？

可逆マルコフ連鎖に限って、カット・オフ現象が起こる一つの要因を探る。

$S(n)$: 元の数が n 個である有限集合、 P : 既約な可逆マルコフ連鎖の推移確率。

$\{\beta_i\}_{i=1}^n$ ($1 = \beta_1 > \beta_2 \geq \dots \geq \beta_n \geq -1$) : P の固有値

V_i : β_i の直交固有関数 ($PV_i = \beta_i V_i$) で $\sum_{x \in S(n)} V_i(x)^2 \cdot \frac{1}{n} = 1$ なるもの。

⇒ カット・オフ現象が起こる一つの要因は「第二固有値が高い重複度を持つ」こと。

補題 4.5 上の仮定のもと、以下が成り立つ。

$$4 \left\| P^m(x, \cdot) - U \right\|_{TV}^2 \leq \sum_{i=2}^n \beta_i^{2m} V_i(x)^2, \quad x \in S(n). \quad (19)$$

さまざまな例で、 $\beta_2^{2m} \sum_{j=2}^{l+1} V_j(x)^2$ が (19) の左辺の主要項となる。

そこで、(とりあえず補題 4.5 を認めて) いくつかの例で $\beta_2^{2m} \sum_{j=2}^{l+1} V_j(x)^2$ の挙動を

見る。(以下の例では、 $\beta_2^{2m} \sum_{j=2}^{l+1} V_j(x)^2$ が主要項である。)

例4.3 (サイクル上のランダムウォーク) の場合 : 固有値は

$$\beta_j = 1/3 + (2/3) \cdot \cos(2\pi(j-1)/n) \sim 1 - \frac{4\pi^2(j-1)^2}{3n^2}, \quad j = 1, 2, \dots$$

従って $\beta_2 \sim 1 - 4\pi^2/(3n^2)$ (重複度は1)。固有関数は有界ゆえ、 $m = \theta n^2$ とすると

$$\beta_2^{2m} V_2^2(x) \asymp C \left(1 - \frac{4\pi^2}{3n^2}\right)^{2m} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} C \exp(-4\pi^2\theta/3)$$

* 確かに θn^2 で θ が0から ∞ に動く間に **ゆっくりと0** になっている。

例1.4 (ランダム・トランスポジション) の場合 :

第二固有値は $(1 - 2/n)$ 、重複度は $(n-1)^2$ 、対応する固有関数はすべて有界。

従って $m = \frac{n}{2}(\log n + \theta)$ とすると

$$\beta_2^{2m} \sum_{j=2}^{(n-1)^2+1} V_j^2(x) \asymp (n-1)^2 (1 - 2/n)^{2m} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \exp(-c\theta)$$

* 確かに時刻 $\frac{n}{2} \log n$ で **急激に減少** している。

補題4.5の証明 : 以下の二つの事実を使う。

- (シュワルツの不等式) 任意の実数 a_i, b_i , ($i = 1, 2, \dots, n$) について

$$\left(\sum_{i=1}^n a_i b_i\right)^2 \leq \left(\sum_{i=1}^n a_i^2\right) \left(\sum_{i=1}^n b_i^2\right). \quad (20)$$

☺ $f(t) := \sum_{i=1}^n (a_i t + b_i)^2 = (\sum_i a_i^2) t^2 + 2(\sum_i a_i b_i) t + (\sum_i b_i^2) \geq 0$ なので
(判別式) ≤ 0 、つまり (20) を得る。 □

- (パーセバルの等式) (\cdot, \cdot) を内積とする n 次元ベクトル空間で、 $\{\phi_k(\cdot)\}_{k=1}^n$ を正規直交系 (任意の $1 \leq i, j \leq n$ について $(\phi_i, \phi_j) = \delta_{ij}$ となるベクトルの列) とすると、

$$\text{任意のベクトル } u \text{ について} \quad (u, u) = \sum_{k=1}^n (u, \phi_k)^2.$$

☺ $a_{k,u} = (u, \phi_k)$ とおくと $u(x) = \sum_{k=1}^n a_{k,u} \phi_k(x)$ なので、

$$(u, u) = \left(\sum_{k=1}^n a_{k,u} \phi_k, \sum_{k=1}^n a_{k,u} \phi_k\right) = \sum_{k=1}^n a_{k,u}^2 = \sum_{k=1}^n (u, \phi_k)^2 \quad \square$$

補題4.5の証明: 既約で可逆なマルコフ連鎖の場合、可逆分布は一様分布である (つまり、(19)の U は、任意の $x \in S(n)$ について $U(x) = 1/n$ である) ことに注意。

命題2.5とシュワルツの不等式から

$$4 \left\| P^m(x, \cdot) - U \right\|_{TV}^2 = \left(\sum_{y \in S(n)} |P^m(x, y) - 1/n| \right)^2 \leq n \left(\sum_{y \in S(n)} |P^m(x, y) - 1/n|^2 \right). \quad (21)$$

• $(u, v) = \sum_{x \in S(n)} u(x)v(x) \cdot \frac{1}{n}$ という内積について $(V_i, V_j) = \delta_{ij}$

• 線形代数の計算 (行列 P の対角化) より $P^m(x, y) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \beta_i^m V_i(x)V_i(y)$

$u(y) := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \beta_i^m V_i(x)V_i(y) - 1/n = \frac{1}{n} \sum_{i=2}^n \beta_i^m V_i(x)V_i(y)$ ($\odot \beta_1 = 1, V_1 \equiv 1$) に

パーセバルの等式を用いると

$$\frac{1}{n} \sum_{y \in S(n)} |P^m(x, y) - 1/n|^2 = \sum_{k=1}^n (u, V_k)^2 = \frac{1}{n^2} \sum_{k=2}^n \beta_k^{2m} V_k(x)^2$$

となり、(21)と合わせて結論を得る。

□