

包除原理による和集合のサイズの評価について

On Evaluation of the Size of a Union by the Principle of Inclusion and Exclusion

神保 秀司 丸岡 章

Shuji JIMBO and Akira MARUOKA

東北大学 工学部 情報工学科

Department of Information Engineering, Faculty of Engineering, Tohoku University

31-Jan-92, 京都, LA シンポジウム

Abstract Given finite sets A_1, \dots, A_n , the size of their union $|\bigcup_{i=1}^n A_i|$ is given by the inclusion and exclusion formula, $\sum_{i=1}^n (-1)^{i-1} \sum_{|I|=i} |\bigcap_{j \in I} A_j|$. There are exponential number of intersections in the formula, hence the computation time for calculating the size of the union simply by using the formula becomes exponential in the number of subsets n . N. Linial and N. Nisan investigated the problem of approximating the size of the union by using only the size of j -wise intersections for $j \leq k$. As a parameter to show how well the approximation is, they took quantity $F(k, n) = \sup \frac{|\bigcup_{i=1}^n A_i|}{|\bigcup_{i=1}^n B_i|}$, where sup is taken over A_i 's and B_i 's such that $|\bigcap_{j \in I} A_j| = |\bigcap_{j \in I} B_j|$ for any $I \subseteq \{1, \dots, n\}$ with $|I| \leq k$. In the paper due to N. Linial and N. Nisan, it was shown that $F(k, n) = 1 + O(e^{-\frac{2k}{\sqrt{n}}})$ when $k = \Omega(\sqrt{n})$ and $F(k, n) = O\left(\frac{n}{k^2}\right)$ when $k = O(\sqrt{n})$. In this report, it is shown that $F(n-1, n) = 1 + \frac{1}{2^{n-1}-1}$, $F(n-2, n) = 1 + \frac{1}{\frac{1}{2}(\binom{n}{n/2})-1}$ and $F(n-3, n) = 1 + \Omega\left(\frac{n}{2^n}\right)$.

1 はじめに

包除原理によれば n 個の有限集合 A_1, \dots, A_n の和集合のサイズがそれらの共通部分のサイズによって

$$\left| \bigcup_{i=1}^n A_i \right| = \sum_{i=1}^n (-1)^{i-1} \sum_{|I|=i} \left| \bigcap_{j \in I} A_j \right|$$

と表わされる。

n 個の集合の和集合のサイズをこの原理を用いて正確に求める場合、共通部分の個数は 2^n 個あるので、計算時間は一般に膨大になる。一方、和集合のサイズを直接求めるよりも、共通部分のサイズを求める方が容易な場合にはこの公式の適用が有効となる場合があることが知られている。[LN90] では、そのような例として DNF 式を充足させる変数値の割当ての個数を求める問題と行列の permanent の計算が挙げられている。

ある程度の誤差を許容する事によって、一部の共通部分のサイズから和集合のサイズを近似することができれば、計算時間を減少できることになる。このような見地から N. Linial と N. Nisan [LN90] は包除原理を用いるために必要な全ての共通部分のサイズの内の一部しか知り得ない場合に和集合のサイズをどの程度良く評価できるかを研究した。

k, n を $k < n$ を満足する正整数とする。[LN90] では $k = \Omega(\sqrt{n})$ ならば

$$\sup \frac{|\bigcup_{i=1}^n A_i|}{|\bigcup_{i=1}^n B_i|} = 1 + O(e^{-\frac{2k}{\sqrt{n}}}), \quad (1)$$

$k = O(\sqrt{n})$ ならば

$$\sup \frac{|\bigcup_{i=1}^n A_i|}{|\bigcup_{i=1}^n B_i|} = \Theta\left(\frac{n}{k^2}\right), \quad (2)$$

が成立することを示した。ただし、有限集合 $A_1, \dots, A_n, B_1, \dots, B_n$ の動く範囲は、条件

$$(\forall i \in \{1, \dots, k\}) \left(\sum_{|I|=i, I \subseteq \{1, \dots, n\}} \left| \bigcap_{j \in I} A_j \right| = \sum_{|I|=i, I \subseteq \{1, \dots, n\}} \left| \bigcap_{j \in I} B_j \right| \right) \quad (3)$$

を満足するもの全体とする。上式は、 $|I| \leq k$ なる I に対して $|\bigcap_{j \in I} A_j|$ が与えられたときの、和集合 $\bigcup_{i=1}^n A_i$ のサイズとして取り得る値の間の比の上界を与えている。この意味で、 $|I| \leq k$ なる I に対する $|\bigcap_{j \in I} A_j|$ の値から和集合のサイズを求める際の近似の度合(良さ)を与えている。この $\sup |\bigcup_{i=1}^n A_i| / |\bigcup_{i=1}^n B_i|$ を $F(k, n)$ と表わすことにする。

この論文では、はっきりしていなかった $k = \omega(\sqrt{n})$ の場合の近似の度合の評価を行ない、 $k = n-1$ と $k = n-2$ の場合については定数まで含めて正確な値を決定した。具体的には

$$F(n-1, n) = 1 + \frac{1}{2^{n-1}-1}, \quad F(n-2, n) = 1 + \frac{1}{\frac{1}{2}(\binom{n}{n/2})-1} \quad (4)$$

となることを導いた。 $k < n-2$ の場合の $F(k, n)$ の評価は未だ不十分だが、その評価に貢献すると考えられる定理を示し、その定理を用いて $F(n-3, n) = 1 + \Omega\left(\frac{n}{2^n}\right)$ という下界を評価した。また、式(4)で表わされる上界に対応する和集合のサイズの近似値を容易に算出できることも示した。

2. では確率空間を中心とした基本的な概念の説明を与えた。3. では和集合のサイズを共通部分に関する部分的な情報から近似的に評価する方法について [LN90] の内容を中心に説明した。4.1. および 4.2. では $k = n-1$ と $k = n-2$ の場合に対する近似の度合の最悪値 ($F(n-1, n)$ および $F(n-2, n)$) を多項式近似の方法を使って評価した。4.3. では 4.1., 4.2. の方法をよ

り広い範囲の $k < n - 2$ に応用する上で有効と考えられる定理を示し、それを用いて $F(n - 3, n)$ の下界を評価した。

2 基本概念

Z で全ての整数からなる集合を、 R で全ての実数からなる集合を表わす。 $N = \{x \in Z \mid x \geq 1\}$, $Z^+ = \{x \in Z \mid x \geq 0\}$, $R^+ = \{x \in R \mid x \geq 0\}$ と表わす。 $n \in N$ に対して、 $[n] = \{1, \dots, n\}$ と表わす。 $[0] = \emptyset$ と定める。 集合 X に対して 2^X は X の部分集合全体からなる集合を表わす。 更に多項式 $f(x)$ に対してその次数を $\deg(f)$ または $\deg(f(x))$ と表わす。

定義 1 (原子) (Ω, \mathcal{F}, P) を確率空間、 $\mathcal{A} = \{A_1, \dots, A_n\} \subseteq \mathcal{F}$ をその事象の族とする。 $I \subseteq [n]$ に対して、

$$A_I = \bigcap_{j \in I} A_j, \quad \bar{A}_I = \left(\bigcap_{j \in I} A_j \right) \cap \left(\bigcap_{j \notin I} A_j^c \right)$$

と表わす。 \bar{A}_I の形の \mathcal{F} の要素を (\mathcal{A} の) 原子と呼ぶ。 ■

以下の命題 1, 命題 2 では $\mathcal{A} = \{A_1, \dots, A_n\}$ を確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, \Pr)$ の事象の族とする。

定義 2 $\mathcal{A} = \{A_1, \dots, A_n\}$ を確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, \Pr)$ の事象の族とする。 $j \in \{0\} \cup [n]$ に対して、

$$r_j^{\mathcal{A}} = \sum_{|I|=j} \Pr(A_I), \quad \alpha_j^{\mathcal{A}} = \Pr\left(\bigcup_{|I|=j} \bar{A}_I\right) = \sum_{|I|=j} \Pr(\bar{A}_I)$$

と表わす。 ■

以下の命題 1, 2 の証明はどちらも省略する。

命題 1 $\mathcal{A} = \{A_1, \dots, A_n\}$ を事象の族とする。

$$\Pr\left(\bigcup_{i=1}^n A_i\right) = \sum_{i=1}^n \alpha_i^{\mathcal{A}}.$$

命題 2 $\mathcal{A} = \{A_1, \dots, A_n\}$ を事象の族とする。 任意の $j \in \{0\} \cup [n]$ に対して、

$$r_j^{\mathcal{A}} = \sum_{i=j}^n \binom{i}{j} \alpha_i^{\mathcal{A}} \text{ かつ } \alpha_j^{\mathcal{A}} = \sum_{i=j}^n (-1)^{i+j} \binom{i}{j} r_i^{\mathcal{A}}.$$

定義 3 $n \in N, k \in N, k \leq n$ に対して、

$$E(k, n) = \sup \left\{ \Pr\left(\bigcup_{i=1}^n A_i\right) - \Pr\left(\bigcup_{i=1}^n B_i\right) \right\}$$

と定義する。 ただし、事象の族 $\mathcal{A} = \{A_1, \dots, A_n\}$ と $\mathcal{B} = \{B_1, \dots, B_n\}$ の動く範囲は

$$(\forall I \subseteq [n])(|I| \leq k \Rightarrow \Pr(A_I) = \Pr(B_I))$$

を満足するもの全体とする。 ■

ここでの $E(k, n)$ の定義は [LN90] のものと同じである。

3 和集合のサイズの評価方法

[LN90] では、有限集合 Ω の部分集合の族 $\mathcal{A} = \{A_1, \dots, A_n\}$ の共通部分のサイズの部分的な情報、 $r_1^{\mathcal{A}}, \dots, r_k^{\mathcal{A}}$ から和集合のサイズを近似的に評価する問題を、 $x \in [n]$ で恒等的に 1 の値を取る関数を定数項が 0 かつ次数が高々 k の多項式 $f(x)$ で近似しその誤差を求める問題に帰着させている。 この節ではその方法について簡単に紹介する。 以下では、特に確率空間を明示していない場合には、全事象を Ω , 全ての事象からなる集合を \mathcal{F} , 確率を \Pr と表わす。

命題 3 $n \in N, k \in [n], \alpha_1 \in R, \dots, \alpha_k \in R, \mathcal{A} = \{A_1, \dots, A_n\}$ を事象の族とする。 多項式 $f(x) = \sum_{j=1}^k \alpha_j \binom{x}{j}$ が $(\forall i \in [n])(1 - \delta \leq f(i) \leq 1)$ を満足するならば

$$(1 - \delta) \Pr\left(\bigcup_{i=1}^n A_i\right) \leq \sum_{j=1}^k \alpha_j r_j^{\mathcal{A}} \leq \Pr\left(\bigcup_{i=1}^n A_i\right).$$

従って $E(k, n) \leq \delta$.

(証明) 命題 1 より、

$$\begin{aligned} (1 - \delta) \Pr\left(\bigcup_{i=1}^n A_i\right) &= (1 - \delta) \sum_{i=1}^n \alpha_i^{\mathcal{A}} \\ &\leq \sum_{i=1}^n \alpha_i^{\mathcal{A}} f(i) \leq \sum_{i=1}^n \alpha_i^{\mathcal{A}} = \Pr\left(\bigcup_{i=1}^n A_i\right). \end{aligned}$$

一方、命題 2 より、

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i^{\mathcal{A}} f(i) = \sum_{i=1}^n \alpha_i^{\mathcal{A}} \sum_{j=1}^k \alpha_j \binom{i}{j} = \sum_{j=1}^k \alpha_j \sum_{i=1}^n \alpha_i^{\mathcal{A}} \binom{i}{j} = \sum_{j=1}^k \alpha_j r_j^{\mathcal{A}}.$$

■

命題 4 $k \in N$ とする。 $f(0) = 0, \deg(f) \leq k$ を満足する任意の多項式 $f(x)$ に対して $\alpha_1 \in R, \dots, \alpha_k \in R$ が存在して、

$$f(x) = \sum_{j=1}^k \alpha_j \binom{x}{j}.$$

(証明) M をその (i, j) 成分が $\binom{j}{i}$ となっている $k \times k$ 行列とすると、 M は対角成分が全て 1 の上半三角行列なので逆行列 M^{-1} が存在する。 実際、 (i, j) 成分が $(-1)^{i+j} \binom{j}{i}$ となっている行列は M の逆行列である。 多項式 $f(x)$ に対して、

$$v = (f(1), \dots, f(k)), (\alpha_1, \dots, \alpha_k) = v M^{-1}, g(x) = \sum_{j=1}^k \alpha_j \binom{x}{j}$$

と定めれば、

$$(g(1), \dots, g(k)) = (\alpha_1, \dots, \alpha_k) M = v M^{-1} M = v$$

より、 $f(0) = g(0) = 0, f(1) = g(1), \dots, f(k) = g(k)$. $f(x), g(x)$ はどちらも高々 k 次の多項式であり、しかも異なる $k + 1$ 個の点で関数値が一致しているので $f(x) \equiv g(x)$. ■

この証明は、 f に対する $\alpha_1, \dots, \alpha_k$ の存在を単に示しているだけでなく、その具体的な求め方をも示していることに注意されたい。

以上の二つの命題から $x \in [n]$ で 1 を近似する定数項が 0 かつ高々 k 次の多項式から、和集合のサイズの近似計算方法が導かれることがわかった。更に、2. の定義 3 で定義された $E(k, n)$ は 1 をこのように多項式近似する場合の Min-Max 解の誤差と一致することが、以下の命題からわかる。

命題 5 $n \in N, k \in [n]$ とする。 $E(k, n)$ は次の線形計画問題の解に等しい。

問題：

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n x_i &\leq 1, \quad \sum_{i=1}^n y_i \leq 1, \\ \sum_{i=1}^n \binom{i}{j} x_i - \sum_{i=1}^n \binom{i}{j} y_i &\leq 0 \quad (j = 1, \dots, k), \\ \sum_{i=1}^n \binom{i}{j} y_i - \sum_{i=1}^n \binom{i}{j} x_i &\leq 0 \quad (j = 1, \dots, k), \\ x_i &\geq 0 \quad (i = 1, \dots, n), \quad y_i \geq 0 \quad (i = 1, \dots, n) \end{aligned}$$

の条件の下で

$$\sum_{i=1}^n x_i - \sum_{i=1}^n y_i$$

を最大化する。

(証明) 上記の線形計画問題の解を $E'(k, n)$ とおく。

$$(\forall I \subseteq [n]) (|I| \leq k \Rightarrow \Pr(A_I) = \Pr(B_I))$$

を満足する二つの事象の族

$$A = \{A_1, \dots, A_n\}, B = \{B_1, \dots, B_n\}$$

に対して、

$$x_i = \alpha_i^A, y_i = \alpha_i^B \quad (i = 1, \dots, n)$$

とおくと、 $x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n$ は上記の線形計画問題の制約条件を満足するので、 $E(k, n) \leq E'(k, n)$ 。

一方、上記の線形計画問題の解を与える $x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n$ に対して、 $\Omega_A = \Omega_B = 2^{[n]}$ とおき、 $P_A : 2^{\Omega_A} \rightarrow R^+$ と $P_B : 2^{\Omega_B} \rightarrow R^+$ を

$$(\forall I \subseteq [n]) \left(P_A(\{I\}) = \binom{n}{|I|}^{-1} x_{|I|} \right), P_A(\emptyset) = 1 - \sum_{i=1}^n x_i,$$

$$(\forall S \subseteq 2^{\Omega_A}) \left(P_A(S) = \sum_{I \in S} P_A(\{I\}) \right),$$

$$(\forall I \subseteq [n]) \left(P_B(\{I\}) = \binom{n}{|I|}^{-1} y_{|I|} \right), P_B(\emptyset) = 1 - \sum_{i=1}^n y_i,$$

$$(\forall S \subseteq 2^{\Omega_B}) \left(P_B(S) = \sum_{I \in S} P_B(\{I\}) \right)$$

によって定めれば、 $(\Omega_A, 2^{\Omega_A}, P_A), (\Omega_B, 2^{\Omega_B}, P_B)$ はどちらも確率空間となる。それらの事象の族 $\mathcal{A} = \{A_1, \dots, A_n\} \subseteq 2^{\Omega_A}, B = \{B_1, \dots, B_n\} \subseteq 2^{\Omega_B}$ を $i \in [n]$ に対して

$$A_i = \{I \subseteq \Omega_A \mid i \in I\}, B_i = \{I \subseteq \Omega_B \mid i \in I\}$$

と定義すれば、任意の $I \subseteq [n]$ に対して、 $1 \leq |I| \leq k$ ならば、

$$\begin{aligned} P_A(A_I) &= \sum_{J \subseteq I} P_A(\{J\}) = \binom{n}{|I|}^{-1} \sum_{i=1}^n \binom{i}{|I|} x_i \\ &= \binom{n}{|I|}^{-1} \sum_{i=1}^n \binom{i}{|I|} y_i = \sum_{J \subseteq I} P_B(\{J\}) = P_B(B_I). \end{aligned}$$

更に

$$P_A\left(\bigcup_{i=1}^n A_i\right) - P_B\left(\bigcup_{i=1}^n B_i\right) = \sum_{i=1}^n x_i - \sum_{i=1}^n y_i = E'(k, n).$$

従って、 $E'(k, n) \leq E(k, n)$ 。 ■

命題 5 の中の線形計画問題に現われる定数がすべて有理数 (整数) であることから、次の命題が証明できる。

命題 6 任意の $n \in N$ および任意の $k \in [n]$ に対して、

$$E(k, n) = \sup \frac{|\bigcup_{i=1}^n A_i| - |\bigcup_{i=1}^n B_i|}{|\bigcup_{i=1}^n A_i|}.$$

ただし、有限集合 $A_1, \dots, A_n, B_1, \dots, B_n$ の動く範囲は条件 (3) および $\bigcup_{i=1}^n A_i \neq \emptyset$ を満足するもの全体とする。

この命題 6 より、

$$F(k, n) = \frac{1}{1 - E(k, n)}$$

が導かれる。

命題 5 の中の線形計画問題の双対問題は以下ようになる。

問題：

$$\begin{aligned} u_1 + \sum_{j=1}^k \binom{i}{j} v_j - \sum_{j=1}^k \binom{i}{j} w_j &\geq 1 \quad (i = 1, \dots, n), \\ u_2 + \sum_{j=1}^k \binom{i}{j} w_j - \sum_{j=1}^k \binom{i}{j} v_j &\geq -1 \quad (i = 1, \dots, n), \end{aligned}$$

$$u_1 \geq 0, u_2 \geq 0,$$

$$v_j \geq 0 \quad (j = 1, \dots, k), w_j \geq 0 \quad (j = 1, \dots, k)$$

の条件の下で

$$u_1 + u_2$$

を最小化する。

$v_1, \dots, v_k, w_1, \dots, w_k$ に対して、多項式 $f(x)$ を

$$f(x) = \sum_{j=1}^k \binom{x}{j} (v_j - w_j)$$

と定めれば、上記の制約条件は

$$u_1 \geq 1 - \min_{i \in [n]} f(i), u_2 \geq \max_{i \in [n]} f(i) - 1$$

となり、上記の問題は、多項式 $f(x)$ が $f(0) = 0, \deg(f) \leq k$ を満足するという条件の下で

$$\max \left\{ 1 - \min_{i \in [n]} f(i), 0 \right\} + \max \left\{ \max_{i \in [n]} f(i) - 1, 0 \right\}$$

を最小化する問題となる.

$$\max_{i \in [n]} f(i) = c > 1 \text{ ならば}$$

$$g(x) = \sum_{j=1}^k \binom{x}{j} \left(\frac{v_j}{c} - \frac{w_j}{c} \right)$$

とおけば $g(x) = f(x)/c$ より, $\min_{i \in [n]} g(i) \leq \max_{i \in [n]} g(i) = 1$.
従って.

$$\begin{aligned} \max_{i \in [n]} g(i) - \min_{i \in [n]} g(i) &= \frac{1}{c} \left(\max_{i \in [n]} f(i) - \min_{i \in [n]} f(i) \right) \\ &< \max \left\{ 1 - \min_{i \in [n]} f(i), 0 \right\} + \max \left\{ \max_{i \in [n]} f(i) - 1, 0 \right\} \end{aligned}$$

が成立する. 従って, 次の命題が成立する.

命題 7

$$E(k, n) = \inf_f \max_{i \in [n]} (1 - f(i)).$$

ただし, 多項式 f の動く範囲は $\max_{i \in [n]} f(i) \leq 1, f(0) = 0, \deg(f) \leq k$ を満足するもの全体とする.

定義 4

$$D(k, n) = \inf_q \max_{i \in [n]} |q(i) - 1|.$$

ただし, q の動く範囲は $q(0) = 0, \deg(q) \leq k$ を満足する多項式全体とする. ■

ここでの $D(k, n)$ の定義は [LN90] のものと同じである. $D(k, n)$ は, ある限られた範囲の関数で 1 を通常の意味で近似する場合の Min-Max 解の誤差を表わしている. $D(k, n)$ と $E(k, n)$ の関係を表わす次の命題は [LN90] で述べられている.

命題 8

$$E(k, n) = \frac{2D(k, n)}{1 + D(k, n)}.$$

命題 8 より

$$F(k, n) = \frac{1 + D(k, n)}{1 - D(k, n)}$$

が導かれる. 命題 6, 8 より, $D(k, n)$ は有限集合 A_1, \dots, A_n の和集合のサイズを $|I| \leq k$ なる $I \subseteq [n]$ に対する $|\bigcap_{j \in I} A_j|$ の値から予想する場合の相対誤差の最悪値を表わしていると考えられることができる.

命題 3, 4, 8 より, $E(k, n), D(k, n)$ の上界が $x \in [n]$ で 1 を近似する定数項が 0 かつ高々 k 次の多項式 $f(x)$ の具体的な形から得られるが, 特定の形をした多項式から下界を得ることができる場合がある. [LN90] は次の命題を使って $k = O(\sqrt{n})$ の場合の下界を求めている.

命題 9 $n \in \mathbb{N}, k \in [n]$ とする. $f(x)$ を $f(0) = 0, \deg(f) \leq k$ を満足する多項式とする. $1 \leq j_1 < \dots < j_{k+1} \leq n$ を満足する $k+1$ 個の整数 j_1, \dots, j_{k+1} と $\delta > 0$ が存在して,

$$(\forall i \in [k+1])((-1)^i (f(j_i) - 1) \geq \delta)$$

が成立するならば,

$$D(k, n) \geq \delta.$$

(証明) 命題の条件を満足する $f(x)$ と

$$(\forall i \in [n]) (|g(i) - 1| < \delta) \wedge g(0) = 0 \wedge \deg(g) \leq k$$

を満足する多項式 $g(x)$ が存在すると仮定する. 中間値の定理から, k 個の異なる実数

$$u_1 \in (j_1, j_2), \dots, u_k \in (j_k, j_{k+1})$$

が存在して, 任意の $x \in \{0, u_1, \dots, u_k\}$ に対して, $g(x) - f(x) = 0$ となる. $\deg(g(x) - f(x)) \leq k$ であるので, この式は $g(x) \equiv f(x)$ を表わしている. これは矛盾である. ■

命題 10 $n \in \mathbb{N}, k \in [n-1]$ とする.

$$D(k, n) = \inf_q \max_{i \in [n]} |q(i) - 1|$$

とおく. このとき, 多項式 f が

$$\max_{i \in [n]} |f(i) - 1| = D(k, n), f(0) = 0, \deg(f) \leq k$$

を満足するならば, $1 \leq j_1 < \dots < j_{k+1} \leq n$ を満足する $k+1$ 個の整数 j_1, \dots, j_{k+1} が存在して

$$f(j_i) = 1 + (-1)^i D(k, n) \quad (i = 1, \dots, k+1)$$

となる.

(証明) 省略. [Che66] を参照されたい. ■

4 k が n に近い場合の $D(k, n)$ の評価

[LN90] では, 1 を近似する多項式として Chebychev 多項式 $T_k(x)$ を変形した $q_{k,n}(x)$ を使っている. その具体的な形は

$$q_{k,n}(x) = 1 - \frac{T_k\left(\frac{2x-(n+1)}{n-1}\right)}{T_k\left(\frac{-(n+1)}{n-1}\right)},$$

$$T_k(x) = \frac{(x + i\sqrt{1-x^2})^k + (x - i\sqrt{1-x^2})^k}{2}$$

である. i は虚数単位を表わす. $q_{k,n}(x)$ は $x \in [1, n]$ の連続した区間で 1 を近似する場合には最良近似となっているが, k が比較的 n に近い大きさでかつ $x \in [n]$ の離散的な集合上で近似する場合には最良近似からかけ離れたものとなる.

この節では, $k = n-1$ と $k = n-2$ の場合に Lagrange の補間法で構成した多項式を使って, $D(k, n)$ の値を正確に評価できることを述べる.

定義 5 $k \in \mathbb{N}$ に対して, 多項式 $g_{k,i}(x)$ を

$$g_{k,i}(x) = (-1)^{k-i} \frac{x \cdots (x-k)}{(x-i)! (k-i)!}$$

と定義する. ■

この定義から次の補題は明らかである.

補題 11 $k \in \mathbb{N}, i \in [k]$ とする. 任意の $x \in [k]$ に対して, $\deg(g_{k,i}) \leq k$ かつ

$$x \neq i \Rightarrow g_{k,i}(x) = 0, x = i \Rightarrow g_{k,i}(x) = 1.$$

定義 6 $k \in \mathbb{N}$ と $d = (d_1, \dots, d_k) \in \mathbb{R}^k$ に対して, 多項式 $G_k[d](x)$ を

$$G_k[d](x) = \sum_{i=1}^k (1+d_i)g_{k,i}(x)$$

と定義する. ■

この定義と補題 11 から次の補題は明らかである.

補題 12 $(\forall i \in [k])(G_k[d](i) = 1 + d_i)$.

補題 13 $k \in \mathbb{N}, j \in \mathbb{N}, i \in [k]$ とする.

$$\binom{k+j}{i} \binom{k-i+j-1}{k-i} = \sum_{r=1}^j (-1)^{r-1} \binom{k+j}{j-r} \binom{k+r}{i}.$$

(証明) $1 \leq r \leq j$ ならば

$$\binom{k+j}{j-r} \binom{k+r}{i} = \frac{(k+j)!}{(j-r)! i! (k+r-i)!} = \binom{k+j}{i} \binom{k-i+j}{j-r} \quad (5)$$

が成立する. また

$$\binom{k-i+j-1}{k-i} = \binom{k-i+j-1}{j-1}. \quad (6)$$

次に

$$\sum_{r=1}^j (-1)^{r-1} \binom{m}{j-r} = (-1)^{j-1} \binom{m-1}{j-1}$$

を命題 $P(l)$ と表わす. 任意の $l \in [j]$ に対して $P(l)$ が真であることを数学的帰納法により証明する.

$P(j)$ は明らかに真である. $l \in [j-1]$ かつ $P(l+1)$ は真と仮定する. 帰納法の仮定より,

$$\begin{aligned} \sum_{r=1}^j (-1)^{r-1} \binom{m}{j-r} &= (-1)^{l-1} \binom{m}{j-l} + \sum_{r=l+1}^j (-1)^{r-1} \binom{m}{j-r} \\ &= (-1)^{l-1} \binom{m-1}{j-l} + (-1)^{l-1} \binom{m-1}{j-l-1} \\ &\quad - (-1)^{l-1} \binom{m-1}{j-l-1} \\ &= (-1)^{l-1} \binom{m-1}{j-l}. \end{aligned}$$

従って

$$\sum_{r=1}^j (-1)^{r-1} \binom{m}{j-r} = \binom{m-1}{j-1}. \quad (7)$$

式 (5), (6), (7) より補題は証明される. ■

次の補題 14 は補題 13 より明らか.

補題 14 $k \in \mathbb{N}, j \in \mathbb{N}, i \in [k]$ とする.

$$\begin{aligned} g_{k,i}(k+j) &= (-1)^{k-i} \binom{k+j}{i} \binom{k-i+j-1}{k-i} \\ &= (-1)^{k-i} \sum_{r=1}^j (-1)^{r-1} \binom{k+j}{j-r} \binom{k+r}{i}. \end{aligned}$$

補題 15 $k \in \mathbb{N}, j \in \mathbb{N}, d = (d_1, \dots, d_k) \in \mathbb{R}^k$ とする.

$$\begin{aligned} G_k[d](k+j) &= (-1)^k \sum_{i=1}^k (-1)^i \binom{k+j}{i} \binom{k-i+j-1}{k-i} (1+d_i) \\ &= (-1)^{k+1} \sum_{r=1}^j (-1)^r \binom{k+j}{j-r} \sum_{i=1}^k (-1)^i \binom{k+r}{i} (1+d_i). \end{aligned}$$

4.1 $k = n - 1$ の場合の $D(k, n)$ の評価

適当な $\delta > 0$ を選んで,

$$(\forall i \in [k+1])(f(i) = 1 + (-1)^i \delta), f(0) = 0, \deg(f) \leq k$$

を満足する多項式 $f(x)$ を構成することを考える. このような多項式が存在すれば命題 9 より $D(k, n) = \delta$ が言える. 一方このような多項式は, 補題 12 から

$$d_i = (-1)^i \delta \quad (i = 1, \dots, k), \quad d = (d_1, \dots, d_k)$$

とにおいて

$$f(x) \equiv G_k[d](x)$$

と表わされる. 従って,

$$G_k[d](k+1) = 1 - (-1)^k \delta \quad (8)$$

となる $\delta > 0$ を求めればよい.

補題 15 より,

$$G_k[d](k+1) = 1 - (-1)^k (1 - (2^{k+1} - 2)\delta)$$

を得る. この結果と式 (8) から, $\delta = \frac{1}{2^{k+1} - 1}$ を得る. 従って, 命題 8 より次の定理を得る.

定理 1 任意の $n \in \mathbb{Z}, n \geq 2$ に対して,

$$D(n-1, n) = \frac{1}{2^n - 1}, \quad E(n-1, n) = 2^{1-n},$$

$$F(n-1, n) = 1 + \frac{1}{2^{n-1} - 1}.$$

[LN90] では $k = n - 1$ の場合には $D(k, n)$ の値を評価できることが述べられているがその正確な値は明示されていない. 定理 1 はその正確な値を決定している.

4.2 $k = n - 2$ の場合の $D(k, n)$ の評価

$n \in \mathbb{N}, k \in [n-1]$ とする. 一般に,

$$\max_{i \in [n]} |f(i) - 1| = D(k, n), \quad f(0) = 0, \quad \deg(f) \leq k$$

を満足する多項式 $f(x)$ に対して, $1 \leq j_1 < \dots < j_{k+1} \leq n$ を満足する $k+1$ 個の整数 j_1, \dots, j_{k+1} が存在して,

$$f(j_i) = 1 + (-1)^i D(k, n) \quad (i = 1, \dots, k+1)$$

となることが知られている. 従って, $k = n - 2$ の場合は, $|f(j_0) - 1| \neq D(n-2, n)$ となる唯一の $j_0 \in [n]$ がわかれば, 原理的には $k = n - 1$ の場合と同様にして $D(n-2, n)$ を評価することができる. $j_0 = \lceil (n+1)/2 \rceil = \lceil (k+3)/2 \rceil$ と仮定して, $D(k, n)$ の上界と下界を評価してみる.

$\delta > 0$ を未知数として, $d = (d_1, \dots, d_k)$ を

$$d_i = \begin{cases} (-1)^i \delta & (1 \leq i < \frac{k+3}{2}) \\ 0 & (i = \frac{k+3}{2}) \\ -(-1)^i \delta & (\frac{k+3}{2} < i \leq k) \end{cases}$$

と定め、定数 $K > 0$ を

$$K = \binom{n}{\lfloor n/2 \rfloor} = \binom{k+2}{\lceil (k+1)/2 \rceil} = \binom{k+1}{\lfloor (k+1)/2 \rfloor} + \binom{k+1}{\lceil (k-1)/2 \rceil}$$

と定める。
定義から

$$G_k[d](k) = 1 - (-1)^k \delta. \tag{9}$$

また、二項定理より

$$\sum_{i=1}^k (-1)^i \binom{k+1}{i} = (-1)^k - 1. \tag{10}$$

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^k (-1)^i \binom{k+1}{i} d_i \\ &= \delta \left(\sum_{i=1}^{\lceil (k+1)/2 \rceil} \binom{k+1}{i} - \sum_{i=\lceil (k+4)/2 \rceil}^k \binom{k+1}{i} \right) \\ &= \delta \left(\binom{k+1}{\lfloor (k+1)/2 \rfloor} + \binom{k+1}{\lceil (k-1)/2 \rceil} \right) = \delta K. \end{aligned} \tag{11}$$

式 (10), (11) および補題 15 より

$$\begin{aligned} G_k[d](k+1) &= (-1)^k \sum_{i=1}^k (-1)^i \binom{k+1}{i} (1+d_i) \\ &= 1 - (-1)^k (1 - \delta K). \end{aligned} \tag{12}$$

また、補題 15 より

$$\begin{aligned} G_k[d](k+2) &= (-1)^k \left\{ (k+1) \sum_{i=1}^k (-1)^i \binom{k+1}{i} \right. \\ &\quad + (k+1) \sum_{i=1}^k (-1)^i \binom{k+1}{i} d_i \\ &\quad \left. - \sum_{i=1}^k (-1)^i \binom{k+1}{i-1} - \sum_{i=1}^k (-1)^i \binom{k+1}{i-1} d_i \right\}. \end{aligned} \tag{13}$$

二項定理より

$$\sum_{i=1}^k (-1)^i \binom{k+1}{i-1} = - \sum_{i=0}^{k-1} (-1)^i \binom{k+1}{i} = (-1)^k k. \tag{14}$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^k (-1)^i \binom{k+1}{i-1} d_i &= \delta \left\{ \left(\sum_{i=0}^{\lceil (k-1)/2 \rceil} \binom{k+1}{i} \right) \right. \\ &\quad \left. - \left(\sum_{i=\lceil (k+2)/2 \rceil}^{k-1} \binom{k+1}{i} \right) \right\} = (k+2)\delta. \end{aligned} \tag{15}$$

従って、式 (10), (11), (13), (14), (15) より

$$G_k[d](k+2) = 1 - (-1)^k \{ (k+1)(1 - \delta K) + (k+2)\delta \}. \tag{16}$$

補題 14 に従って計算すると

$$(-1)^{j_0} g_{k,j_0}(k+1) = (-1)^k \frac{2k+1 - (-1)^k}{4k+4(3+(-1)^k)} K, \tag{17}$$

$$(-1)^{j_0} g_{k,j_0}(k+2) = (-1)^k \frac{(k+3 - (-1)^k)(2k-3 - (-1)^k)}{4(k+4)} K \tag{18}$$

を得る。従って、もう一つの未知数 $0 \leq \rho \leq \delta$ を取り δ と ρ を未知数とする次の二元連立一次方程式を解くことにより、 δ の値を正確に求めることができる。

$$1 - G_k[d](k) = G_k[d](k+1) + (-1)^{j_0} g_{k,j_0}(k+1)\rho - 1 \tag{19}$$

$$= 1 - G_k[d](k+2) - (-1)^{j_0} g_{k,j_0}(k+2)\rho. \tag{20}$$

この連立方程式は $k \geq 1$ のとき常に唯一組の解 $\delta = \frac{1}{K-1}$, $\rho = 0$ を持つ。従って、

$$D(n-2, n) = \frac{1}{K-1} = \frac{1}{\binom{n}{\lfloor n/2 \rfloor} - 1}.$$

更に Wallis の公式を用いて次の定理が導かれる。十分大きな x に対して正の値を取る二つの関数 $f(x)$, $g(x)$ に対して $f(x) \sim g(x)$ は $\lim_{x \rightarrow \infty} f(x)/g(x) = 1$ を表わす。

定理 2

$$D(n-2, n) = \frac{1}{\binom{n}{\lfloor n/2 \rfloor} - 1} \sim \sqrt{\frac{\pi n}{2}} 2^{-n} = O(\sqrt{n} 2^{-n}),$$

$$E(n-2, n) = \frac{2}{\binom{n}{\lfloor n/2 \rfloor}} \sim \sqrt{2\pi n} 2^{-n} = O(\sqrt{n} 2^{-n}),$$

$$F(n-2, n) = 1 + \frac{1}{\frac{1}{2} \binom{n}{\lfloor n/2 \rfloor} - 1} = 1 + O(\sqrt{n} 2^{-n}).$$

4.3 $k \leq n-3$ の場合への拡張

今までに述べたようにして $k = n-1, k = n-2$ の場合には、ある連立一次方程式に帰着させて $D(k, n)$ を (従って、 $E(k, n)$ および $F(k, n)$ も) 正確に求めることが出来た。しかし、実際問題としては、ある広い範囲の $k < n$ に対する $D(k, n)$ の変化の解明が望ましい。 $k \geq \Omega(\sqrt{n})$ の場合の $D(k, n)$ の上界として、[LN90] では

$$D(k, n) = O(e^{-\frac{2k}{\sqrt{n}}})$$

という評価がなされているが、既に解明されている $k = n-1, k = n-2$ の場合には、この上界の評価はかなり悪い。しかし、今までのように、 k を固定して $D(k, n)$ を未知数とする正確な連立方程式を立ててそれを解いていくという方法では、広い範囲の k に対する $D(k, n)$ の評価を与えることは不可能と考えられる。以下では、このような目的にとって好ましいと考えられる新たな評価方法を紹介し、実際に、 $k = n-3$ の場合にその評価方法を適用してみる。残念ながら、現時点では、この方法を用いてある広い範囲の k に対する $D(k, n)$ の変化の様子を解明するまでには未だ至っていない。

$\max_{1 \leq x \leq n} |f(x)| = D(k, n)$ を満たす k 次多項式 f は $|f(n)| = D(k, n)$ を満たすと仮定する。 $k = n-m-1$ とする。補間多項式を $\hat{G}(x)$ とし、 $\delta = D(k, n)$, $\{i \in [n-1] : |1 - \hat{G}(i)| = \delta\} = [n-1] \setminus \{k_1, \dots, k_m\}$ と置く。更に、 $k_0 = 0, k_{m+1} = \infty$ と置く。 $0 < k_1 < k_2 < \dots < k_m < n$ とする。つまり、 $\max_{i \in [n]} |1 - \hat{G}(i)| = \delta$ であり、この $|1 - \hat{G}(i)|$ を最大にする $i \in [n]$ は $n-m$ 個存在する。一方、最大にしない $i \in [n]$ は m 個存在し、それが $\{k_1, \dots, k_m\}$ である。 $\hat{G}(x)$ を表わす数式は以下のようにして導くことが出来る。

$i \in [n-1] \setminus \{k_1, \dots, k_m\}$ に対して,

$$\hat{g}_i(x) = \binom{x}{i} \binom{n-1-x}{n-1-i} \cdot \prod_{j=1}^m \frac{i-k_j}{x-k_j}$$

と置く. \hat{g}_i は有理式の形になっているが, 約分して得られる $n-m-1$ 次多項式を表わすものとする. 更に, 便宜上, $i \in \{k_1, \dots, k_m\}$ に対しては, $\hat{g}_i(x) \equiv 0$ と定義する. 一般に, $i \in [n-1], j \in [n-1]$ に対して $\hat{g}_i(i) = 1, i \neq j$ ならば $\hat{g}_i(j) = 0$ が成り立つ. $i \in [n]$ に対して $j \in \{0\} \cup [m]$ を $k_j \leq i < k_{j+1}$ を満たすものとして, $s_i = (-1)^j$ と定義する. このように \hat{g}_i, s_i を定義した上で, $\hat{G}(x)$ を

$$\hat{G}(x) = \sum_{i=1}^{n-1} (1 + (-1)^i s_i \delta) \hat{g}_i(x)$$

と定義する.

$\delta = D(k, n)$ の定義と命題 9, 10 より

$$\hat{G}(n) = 1 + (-1)^{m+n} \delta \tag{21}$$

が成り立たなくてはならない.

$$\hat{g}_i(n) = (-1)^{n-1-i} \binom{n}{i} \prod_{j=1}^m \frac{i-k_j}{n-k_j} \text{ より,}$$

$$\begin{aligned} \hat{G}(n) &= 1 + (-1)^{m+n} \prod_{j=1}^m \frac{k_j}{n-k_j} \\ &\quad - (-1)^{m+n} \delta \sum_{i=1}^{n-1} \binom{n}{i} \left| \prod_{j=1}^m \frac{i-k_j}{n-k_j} \right| \end{aligned} \tag{22}$$

が導かれる. 式 (21) および (22) より,

$$\delta = \frac{1}{\left(\sum_{i=0}^n \binom{n}{i} \left| \prod_{j=1}^m \frac{i-k_j}{k_j} \right| \right) - 1} \tag{23}$$

が導かれる. 更に, 命題 9, 10 より

$$1 + \frac{1}{\delta} = \min_{\{k_1, \dots, k_m\} \subseteq [n-1]} \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} \left| \prod_{j=1}^m \frac{i-k_j}{k_j} \right| \tag{24}$$

が成り立つ. 以上の議論により以下の定理が成立する.

定理 3 $\{k_1, \dots, k_m\} \subseteq [n-1], k_1 < \dots < k_m$ とする.

$$\sum_{i=0}^{k_1} \binom{n}{i} \left| \prod_{j=1}^m \frac{i-k_j}{k_j} \right| \leq h(k, n), \quad \sum_{i=k_m}^n \binom{n}{i} \left| \prod_{j=1}^m \frac{i-k_j}{k_j} \right| \leq h(k, n)$$

$$\text{および } 2^n \left(\max_{k_1 \leq i \leq k_m} \left| \prod_{j=1}^m \frac{i-k_j}{k_j} \right| \right) \leq h(k, n)$$

が成り立てば

$$D(k, n) = \Omega \left(\frac{1}{h(k, n) - 1} \right)$$

ここでは述べないが, 定理 3 を導いた方法は $D(k, n)$ の上界の評価にも応用できる.

定理 3 を $k = n-3$, つまり $m = 2$ の場合に適用してみる. 以下では $f(x) = \prod_{j=1}^m ((x-k_j)/k_j) = \prod_{j=1}^m ((x/k_j) - 1)$ と置く.

$k_1 = w$ と置く. $0 < k_1 = w < k_2 = n-w$ かつ $n-2w = O(\sqrt{n})$ となるように k_1, k_2 を設定する. この条件と

$$\max_{w \leq i \leq n-w} |f(i)| = |f(n/2)| = \frac{(n-2w)^2}{4w(n-w)}$$

より

$$2^n \left(\max_{w \leq i \leq n-w} |f(i)| \right) = O \left(\frac{2^n}{n} \right) \tag{25}$$

が成り立つ. 一方, 任意の $i \in [n]$ に対して $|f(i)| = |f(n-i)|$ が成立する事を考慮して,

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^w \binom{n}{i} |f(i)| &= \sum_{i=n-w}^n \binom{n}{i} |f(i)| \\ &= \left| \sum_{i=1}^w \binom{n}{i} \frac{(i-w)(i-n+w)}{w(n-w)} \right| + 1 \\ &= \left| \left(\sum_{i=1}^w \binom{n}{i} \right) - \frac{n(n-1)}{w(n-w)} \sum_{i=1}^w \binom{n-2}{i-1} \right| + 1 \\ &\leq \left| \left(4 - \frac{n(n-1)}{w(n-w)} \right) \sum_{i=1}^w \binom{n-2}{i-1} \right| \\ &\quad + \left| \left(\sum_{i=1}^w \binom{n}{i} - 4 \sum_{i=1}^w \binom{n-2}{i-1} \right) \right| + 1. \end{aligned} \tag{26}$$

$(n/2) - w = \alpha = O(\sqrt{n})$ と置けば,

$$\left| 4 - \frac{n(n-1)}{w(n-w)} \right| = \left| \frac{16\alpha^2 - 4n}{n^2 - 4\alpha^2} \right| = O \left(\frac{2^n}{n} \right) \tag{27}$$

また,

$$\begin{aligned} &\left| \sum_{i=1}^w \binom{n}{i} - 4 \sum_{i=1}^w \binom{n-2}{i-1} \right| \\ &= \left| \frac{n-2w-1}{n-w-1} \binom{n-2}{w} - 1 \right| = O \left(\frac{2^n}{n} \right). \end{aligned} \tag{28}$$

従って, 式 (25), (26), (27), (28) および定理 3 より

$$D(n-3, n) = \Omega \left(\frac{n}{2^n} \right)$$

が成り立つ.

謝辞

数多くの有益な議論を戴いた, 東北大学工学部情報工学科丸岡研究室の皆様にご感謝致します.

参考文献

[Che66] E. W. Cheney. *Introduction to Approximation Theory*. McGraw-Hill, Inc., 1966. 邦訳: 一松信 / 新島耕一訳, 「近似理論入門」, 1977 年 共立出版 (株) 発行.

[LN90] Nathan Linial and Noam Nisan. Approximate inclusion-exclusion. In *Proceedings of the 22nd Annual ACM Symposium on Theory of Computing*, pp. 260-270, 1990.

[Lov79] László Lovász. *Combinatorial Problems and Exercises*. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1979. 邦訳: 成嶋弘, 土屋守正訳, 「組合せ論演習 1, 数え上げの手法」, 1988 年 東海大学出版会発行.