数理解析研究所講究録
第 1849 巻 2013 年 96-99

無理数の遷移確率を許すランダムウォークの脱乱択化
Deterministic Random Walks for Irrational Transition Probabilities

白髪文晴 Takeharu Shiraga　山内由紀子 Yukiko Yamauchi　来嶋秀治 Shuji Kijima　山下雅史 Masafumi Yamashita

九州大学
Kyushu University

1 はじめに

マルコフ連鎖とは, 次の状態への遷移確率が現在の状態にのみ依存する確率過程である. マルコフ連鎖を用いた乱択アルゴリズムは多く研究されており, いくつかの数え上げ困難な問題に対して, 多項式時間乱択近似アルゴリズムが設計されている. これらの乱択アルゴリズムを脱乱択化し, 決定的アルゴリズムを設計出来るかどうかは重要な研究課題である.

ランダムウォークの脱乱択化とは, 決定的過程によって, ランダムウォークを模倣する試みである. 2000年ごろ James Propp によってロータールーターモデルと呼ばれるモデルが提案された.

Cooper と Spencer[1] は, James Propp によって 2000 年ごろ提案された複数トークン型のローター ルーターモデルについて研究し, 各頂点におけるローター ルーターモデルとランダムウォークのトークン数の誤差の期待値 (単一頂点誤差) の解析を行った. 彼らは d 次元の整数格子点 Z^d に対して, 偶奇性条件を満たす任意の初期トークン配置, 任意のローター ルーター, 任意の頂点, 任意の時間について, 単一頂点誤差は次元 d のみに依存し, 総トークン数には依存しない定数 c_d で押さえられることを示した.

ローター ルーターモデルに対し, 来嶋, 古賀, 牧野 [3] は頂点数 n, 枝数 $m^{\#}$ の有向多重グラフの解析を行い, 対応するマルコフ連鎖の遷移確率行列が非負の固有値のみを持つ場合に単一頂点誤差が $O(m^{\#}n)$ で押さえられることを示した. また, 梶野, 来嶋, 牧野 [2] は一般の既約な有限グラフに対して $O\left(\frac{\alpha^* n m^{\#}}{1-\lambda^*}\right)$ の上界を与えている. 但し α^*, λ^* は遷移確率行列で定まるパラメータである.

本稿では, ローター ルーターモデルでは扱うことのできない無理数の遷移確率を模倣できる関数ルーターモデルを提案する. このモデルに対し, 頂点数 n, 枝数 m の有向グラフ上で, 遷移確率行列 P が既約, 非周期かつ可逆な場合, 総トークン数 M に対し単一頂点誤差が $O\left(\frac{\sqrt{\pi(w)}\cdot n\cdot m\cdot \log M}{\min_{u\in V}\sqrt{\pi(u)}\cdot(1-\lambda^*)}\right)$ で押さえられることを示す. 但し, π は P の定常分布, λ^* は P の第二固有値とする.

2 モデル

有限の状態空間 $V \stackrel{\text{def.}}{=} \{1,\ldots,n\}$ をもち, 遷移確率行列 $P\in\mathbb{R}_{\geq 0}^{n\times n}$ で定義されるランダムウォークを考える. 以下, P は既約で非周期的と仮定する. ここで, $\mu^{(0)}=(\mu_1^{(0)},\ldots,\mu_n^{(0)})\in\mathbb{Z}_{\geq 0}^{n}$ を V 上のトークンの初期配置とし, 各トークンが推移行列 P に従うランダムウォークを考える. 時刻 $t\in\mathbb{Z}_{\geq 0}$ でのトークンの期待配置を $\mu^{(t)}=(\mu_1^{(t)},\ldots,\mu_n^{(t)})\in\mathbb{R}_{\geq 0}^{n}$ とする. すなわち, $\mu^{(t)}=\mu^{(0)}P^t$ である.

関数ルーターモデルは, $\mu^{(t)}$ を模倣するための決定的な過程である. $\mathcal{G}=(V,\mathcal{E})$ を P の状態遷移図とする. すなわち, $\mathcal{G}=(V,\mathcal{E})$ は頂点集合 V と, 枝集合 $\mathcal{E}=\{(u,v)\in V^2 \mid P(u,v)>0\}$ からなる単純有向グラフである. ここで $m=|\mathcal{E}|$ と定義する. 定義より, $m\le n^2$ をみたすことに注意されたい. $N(v)$ を v から出る枝の終端点の集合とし, $\delta(v)=|N(v)|$, $n=|V|$ とする. $\chi^{(0)}(=\mu^{(0)})$ を V 上のトークンの初期配置とし, $\chi^{(t)}$ で関数ルーターモデルでの時刻 t のトークンの配置を表す. $[t,t+1)$ の間に各 $v\in V$ 上の各トークン $j\in\{0,1,\dots,\chi_v^{(t)}-1\}$ は, v の隣接頂点

$$\sigma_v\left(\sum_{s=0}^{t-1}\chi_v^{(s)}+j\right)$$

へ発射される. ただし, σ_v は $\sigma_v\colon\mathbb{Z}_{\ge0}\to N(v)$ となる関数で, 以下のように定義する.

まず, $i\in\mathbb{Z}_{>0}$ を $i=\sum_{j=0}^{\lfloor\lg i\rfloor}\beta_j(i)\cdot 2^j$ と表す. 但し, $\beta_j(i)\in\{0,1\}$ $(j\in\{0,1,\dots,\lfloor\lg i\rfloor\})$ は i の二進数表記 $\beta^i_{\lfloor\lg i\rfloor}\beta^i_{\lfloor\lg i\rfloor-1}\cdots\beta^i_1\beta^i_0$ の各位の値である. このとき, 関数 $\psi\colon\mathbb{Z}_{\ge0}\to[0,1)$ を,

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

と定義する. 但し, $\psi(0)\stackrel{\text{def.}}{=}0$ とする.

一般性を失うことなく, v の隣接頂点 $N(v)$ 上に順番 $u_1,\dots,u_{\delta(v)}$ を仮定する. このとき,

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

ならば $\sigma_v(i)=u_k\in N(v)$ と定義する. 但し, $\sum_{j=1}^{0}P(v,u_j)=0$ とする.

関数 ψ は Van der Corput sequence と呼ばれる関数であり, 関数ルーターモデルは $[0,1)$ 実数乱数の代わりに $\psi(i)$ を用いたモデルと言える. 今, 乱数と $\psi(i)$ の差について, $v,u\in V$ に対し, 集合 $\mathcal{I}_{v,u}[z,z')\subseteq\mathbb{Z}_{\ge0}$ を

$$\mathcal{I}_{v,u}[z,z')\stackrel{\text{def.}}{=}\{j\in\{z,\dots,z'-1\}\mid\sigma_v(j)=u\}. \tag{2}$$

と定義する. $|\mathcal{I}_{v,u}[z,z')|$ は頂点 v を訪れた z 番目から $z'-1$ 番目の $z'-z$ 個のトークンのうち, 頂点 u へ発射されたトークン数を表す. このとき, 以下の定理が成り立つ.

定理 2.1. 任意の遷移確率行列 P と $v,u\in V$ に関して,

$$\left|\frac{|\mathcal{I}_{v,u}[0,z)|}{z}-P(v,u)\right|<\frac{2(\lfloor\lg z\rfloor+1)}{z}=\mathrm{O}\left(\frac{\log z}{z}\right)$$

が任意の $z\in\mathbb{Z}_{>0}$ に成り立つ.

定理 2.1 は, 関数ルーターモデルで頂点 v が頂点 u へ発射したトークン数の割合と遷移確率の差が頂点 v が今までに発射した総トークン数 z に対して $\mathrm{O}\left(\frac{\log z}{z}\right)$ であることを表す. また, 以下の下界が存在する.

命題 2.2. ある遷移確率行列 P と $v,u\in V$ が存在し, 多数の $z\in\mathbb{Z}_{>0}$ に対して.

$$\left|\frac{|\mathcal{I}_{v,u}[0,z)|}{z}-P(v,u)\right|>\frac{1}{3z}\lg\left(\frac{3}{4}z+1\right)=\Omega\left(\frac{\log z}{z}\right)$$

が成り立つ.

命題 2.2 から, 単一頂点誤差 $\left|\chi_w^{(T)}-\mu_w^{(T)}\right|$ に関して以下の下界が得られることが分かる.

命題 2.3. ある遷移確率行列 P が存在し, ある $v_0\in V$, $T^*>0$ と多数の M に対して,

$$\left|\chi_{v_0}^{(T^*)}-\mu_{v_0}^{(T^*)}\right|=\Omega(\log M)$$

が成り立つ.

3 単一頂点誤差の上界

本稿では関数ルーターモデルにおいて, 以下の定理が成り立つことを示す.

定理 3.1. $P\in\mathbb{R}^{n\times n}$ を既約, 非周期かつ可逆な遷移確率行列とする. P の定常分布を $\boldsymbol{\pi}$, λ_i を P の固有値とし, $\lambda^*\stackrel{\text{def.}}{=}\max_i\{|\lambda_i|\mid|\lambda_i|\ne1\}$ とする. 今, $\chi^{(T)}$ を総トークン数 M, 時刻 $T\in\mathbb{Z}_{\ge0}$ でのトークン配置とすると,

$$\left|\chi_w^{(T)}-\mu_w^{(T)}\right|\le\frac{2\sqrt{\pi(w)}\cdot(n-1)\cdot m\cdot(\lg M+1)}{\min_{u\in V}\sqrt{\pi(u)}(1-\lambda^*)}$$

が任意の $w \in V$ と $T \geq 0$ に対して成り立つ.

以下では定理 3.1 の証明のアイデアを述べる. 詳細は full paper [4] を参照されたい.

$P \in \mathbb{R}^{n\times n}$ を既約, 非周期かつ可逆な遷移確率行列, $\boldsymbol{\pi}$ を P の定常分布とする. P の固有値 $\lambda_i \in \mathbb{R}(i = 0, 1, \ldots, n-1)$ に対し, 一般性を失うことなく $|\lambda_0| = 1, 1 > |\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_{n-1}|$ と出来る. 今, $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ を $A(x,y) = \sqrt{\frac{\pi(x)}{\pi(y)}}P(x,y)$ で定義される行列とする. このとき, P の可逆性より $\pi(x)P(x,y) = \pi(y)P(y,x)$ が成り立つことを利用すると, 容易に A が対称行列であることを確認できる. よって, A は正規直交行列 B によって対角化することが出来る. このとき, $\boldsymbol{b}_j$ を B の j 番目の列ベクトルをとすると,

$$P^z(v,u) = \sqrt{\frac{\pi(u)}{\pi(v)}}\sum_{j=0}^{n-1}(\lambda_j)^z\,\boldsymbol{b}_j(v)\boldsymbol{b}_j(u) \qquad (3)$$

と書くことが出来る.

いま, $X_v^{(t)} = \sum_{s=0}^{t}\chi_v^{(s)}$ とすると, 以下の補題が成り立つ.

補題 3.2. 任意の $w \in V$, $T \geq 0$ に対し,

$$\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)} = \sum_{t=0}^{T-1}\sum_{v\in V}\sum_{u\in N(v)}\left(\left|\mathcal{I}_{v,u}[X_v^{(t-1)}, X_v^{(t)})\right| - \chi_v^{(t)}P(v,u)\right)P^{T-t-1}(u,w)$$

が成り立つ.

証明. 頂点 $u \in V$ に対し, $\boldsymbol{e}_u \in \{0,1\}^V$ を u 番目の単位ベクトルとすると, $\chi^{(t)}$ の定義から $\chi_w^{(t)} = \chi^{(t)}\boldsymbol{e}_w$, また $\mu^{(t)}$ の定義から $\mu_w^{(t)} = \mu^{(t)}\boldsymbol{e}_w = \mu^{(0)}P^t\boldsymbol{e}_w$ と書ける. 定義より $\chi^{(0)} = \mu^{(0)}$ であることに注意すると,

$$\begin{aligned}\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)} &= \chi^{(T)}\boldsymbol{e}_w - \mu^{(T)}\boldsymbol{e}_w\\ &= \chi^{(T)}\boldsymbol{e}_w - \mu^{(0)}P^T\boldsymbol{e}_w = \chi^{(T)}\boldsymbol{e}_w - \chi^{(0)}P^T\boldsymbol{e}_w\end{aligned}$$

が成り立つ. ここで, P^0 を $n\times n$ 単位行列とすると, $\chi^{(T)}\boldsymbol{e}_w = \chi^{(T)}P^0\boldsymbol{e}_w$ であり, 以下の式が成り立つことが分かる.

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

定義より $\left|\mathcal{I}_{v,u}[X_v^{(t-1)}, X_v^{(t)})\right|$ は時刻 t で頂点 v が頂点 u に発射したトークンの総数を表すことに注意すると,

$$\chi^{(t+1)} = \sum_{v\in V}\sum_{u\in N(v)}\left|\mathcal{I}_{v,u}[X_v^{(t-1)}, X_v^{(t)})\right|\boldsymbol{e}_u^\top$$

が成り立つことが分かる. また $\chi^{(t)} = \sum_{v\in V}\chi_v^{(t)}\boldsymbol{e}_v^\top$ であるため,

$$\begin{aligned}&\sum_{t=0}^{T-1}\left(\chi^{(t+1)}P^{T-t-1}\boldsymbol{e}_w - \chi^{(t)}P^{T-t}\boldsymbol{e}_w\right)\\ &\quad= \sum_{t=0}^{T-1}\left(\sum_{v\in V}\sum_{u\in N(v)}\left|\mathcal{I}_{v,u}[X_v^{(t-1)}, X_v^{(t)})\right|\boldsymbol{e}_u^\top\right.\\ &\qquad\left.\cdot P^{T-t-1}\boldsymbol{e}_w - \sum_{v\in V}\chi_v^{(t)}\boldsymbol{e}_v^\top P^{T-t}\boldsymbol{e}_w\right)\end{aligned}$$

が成り立ち, $\boldsymbol{e}_u^\top P^{T-t-1}\boldsymbol{e}_w = P^{T-t-1}(u,w)$, また $P^{T-t}(v,w) = \sum_{u\in N(v)}P(v,u)P^{T-t-1}(u,w)$ であることに注意すると,

$$\begin{aligned}\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)} &= \sum_{t=0}^{T-1}\left(\sum_{v\in V}\sum_{u\in N(v)}\left|\mathcal{I}_{v,u}[X_v^{(t-1)}, X_v^{(t)})\right|\right.\\ &\qquad\left.\cdot P^{T-t-1}(u,w) - \sum_{v\in V}\chi_v^{(t)}P^{T-t}(v,w)\right)\\ &= \sum_{t=0}^{T-1}\sum_{v\in V}\\ &\qquad\left(\sum_{u\in N(v)}\left|\mathcal{I}_{v,u}[X_v^{(t-1)}, X_v^{(t)})\right|P^{T-t-1}(u,w)\right.\\ &\qquad\left.-\chi_v^{(t)}\sum_{u\in N(v)}P(v,u)P^{T-t-1}(u,w)\right)\\ &= \sum_{t=0}^{T-1}\sum_{v\in V}\sum_{u\in N(v)}\end{aligned}$$

$$\left(\left|\mathcal{I}_{v,u}[X_v^{(t-1)}, X_v^{(t)})\right| - \chi_v^{(t)} P(v,u)\right) P^{T-t-1}(u,w)$$

であり，題意が示された． □

補題 3.3. 任意の $v, w \in V$ と $t \geq 0$ に対し，

$$\sum_{u \in N(v)} \left(|\mathcal{I}_{v,u}[X_v^{(t-1)}, X_v^{(t)})| - \chi_v^{(t)} P(v,u)\right) \cdot \sqrt{\frac{\pi(w)}{\pi(u)}} \boldsymbol{b}_0(u) \boldsymbol{b}_0(w) = 0$$

が成り立つ．

補題 3.2, 3.3, 式 (3) から，

$$\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)} = \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{v \in V} \sum_{u \in N(v)} \sum_{j=1}^{n-1} \left(|\mathcal{I}_{v,u}[X_v^{(t-1)}, X_v^{(t)})| - \chi_v^{(t)} P(v,u)\right) \sqrt{\frac{\pi(w)}{\pi(u)}} (\lambda_j)^{T-t-1} \boldsymbol{b}_j(u) \boldsymbol{b}_j(w)$$

が成り立つ．定理 2.1 から

$$\left| |\mathcal{I}_{v,u}[X_v^{(t-1)}, X_v^{(t)})| - \chi_v^{(t)} P(v,u) \right| < 2(\lg M + 1)$$

が成り立つこと，また $|\lambda_j| < 1$ ならば

$$\sum_{t=0}^{T-1} |\lambda_j|^{T-t-1} < \frac{1}{1-\lambda^*}$$

が成り立つことに注意すると，定理 3.1 を得る．

4 従来モデルの模倣

先行研究の来嶋，古賀，牧野 [3] や梶野，来嶋，牧野 [2] では，有理数の遷移確率をもつランダムウォークに対し，多重辺を用いて $O(nm)$ の上界，すなわちトークンの個数に依らない上界を与えていた．本章では，提案モデルを少し変形することで従来モデルが模倣出来ることを示す．

補題 4.1. 任意の $i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ に関して，ある k と $\ell \in \{0, 1, ..., 2^{k-1}\}$ に対して，$\frac{\ell}{2^k} \leq \psi(i) < \frac{\ell+1}{2^k}$ が成り立つならば，$\frac{\ell}{2^k} \leq \psi(i + 2^k) < \frac{\ell+1}{2^k}$ が成り立つ．

補題 4.1 より，従来モデルの頂点 v から出る多重辺 $e_i (i = 0, 1, ..., \delta(v) - 1$ をそれぞれ区間 $[\frac{i}{2^k}, \frac{i+1}{2^k})$ $(\delta(v) \leq 2^k)$ に対応させ，区間 $[\frac{\delta(v)}{2^k}, 1)$ を無視することによって，任意の従来モデルを模倣することが出来る．

5 おわりに

本稿では関数ルーターモデルに関して，遷移確率行列 P が既約，非周期かつ可逆のとき，P の定常分布 $\boldsymbol{\pi}$ と第二固有値 λ^*，頂点数 n，枝数 m，総トークン数 M を用いて単一頂点誤差が $O\left(\frac{\sqrt{\pi(w)} \cdot n \cdot m \cdot \log M}{\min_{u \in V} \sqrt{\pi(u)} \cdot (1-\lambda^*)}\right)$ で押さえられることを示した．今後の課題としては，ハイパーキューブ上での単一頂点誤差の対数サイズの上界の導出，また，ほかの指標を用いた誤差の算定などがある．

参考文献

[1] J. N. Cooper and J. Spencer, Simulating a random walk with constant error, Combinatorics, Probability and Computing, 15(2006), 815–822.

[2] H. Kajino, S. Kijima, and K. Makino, Discrepancy analysis of deterministic random walks on finite irreducible graphs, discussion paper, 2012, 46pages.

[3] S. Kijima, K. Koga and K. Makino, Deterministic random walks on finite graphs, Proceedings of ANALCO 2012, 16–25.

[4] T. Shiraga, Y. Yamauchi, S. Kijima, M. Yamashita, Deterministic random walks for irrational transition probabilities, discussion paper, 24pages.