

対数優/劣モジュラ分布からのサンプリング

来嶋 秀治 (Shuji Kijima)

京都大学 数理解析研究所

Research Institute for Mathematical Sciences

Kyoto University

概要

本稿では、有限分配束上の対数優/劣モジュラ分布に対して、マルコフ連鎖モンテカルロ (MCMC: Markov chain Monte Carlo) 法に基づくランダムサンプリングアルゴリズムを議論する。1996 年 Propp & Wilson の提案した過去からのカップリング (CFTP: coupling from the past) 法は、マルコフ連鎖のシミュレーションを工夫することで、定常分布に厳密に従う完璧サンプリングを実現する。過去からのカップリング法を効率的に実行するには、*coalescence* の効率的な確認が鍵となる。本稿では「有限束上の可逆的酔歩が単調な更新関数を持つための必要十分条件は定常分布が対数優モジュラである」ことを示す。また、分配束上の対数劣モジュラ分布に対する、*anti-monotone* カップリングを紹介する。対数優/劣モジュラ分布の応用として、Tutte 多項式の値の計算に対する多項式時間乱択近似計算法についても議論する。

1 はじめに

組合せ的対象のランダム生成は、乱択近似アルゴリズムの効率性の重要なカギとなる。しかし例えば、グラフ中の森の一樣ランダム生成 ([2] 参照)、有限半順序集合のイデアル¹の一樣ランダム生成 ([7] 参照)、マトロイド基の一樣ランダム生成などの基礎的で重要な離散構造についても、多項式時間のサンプリングアルゴリズムの存在が未解決なものは多い。

本稿では、有限分配束上の対数優/劣モジュラ分布に対して、マルコフ連鎖モンテカルロ (MCMC) 法に基づくサンプリング法を議論する。このサンプリング法を用い、グラフ中の森の一樣ランダム生成、マトロイド基の一樣ランダム生成と関連の深い Tutte 多項式について、多項式時間乱択近似計算可能な領域を与える。

2 準備

2.1 対数優/劣モジュラ分布

本稿では、有限集合 E の部分集合族がなす分配束 $\mathcal{D} \subseteq 2^E$ を扱う。有限分配束 $\mathcal{D}$ 上の分布 π が対数優モジュラ (*log-supermodular*) であるとは、任意の $X, Y \in \mathcal{D}$ に対して、

$$\pi(X) \cdot \pi(Y) \leq \pi(X \cup Y) \cdot \pi(X \cap Y)$$

を満たすことである。同様に対数劣モジュラ (*log-submodular*) であるとは

$$\pi(X) \cdot \pi(Y) \geq \pi(X \cup Y) \cdot \pi(X \cap Y)$$

¹有限半順序集合のイデアル全体は分配束をなす。一方、任意の有限分配束は有限半順序集合のイデアルとして記述できる (Birkhoff の表現定理, [1] 参照)。

を満たすことである²。以下、 $\pi(X) > 0$ ($\forall X \in \mathcal{D}$) を仮定する。

一般に、有限状態空間 Ω 上の分布 π は、関数 $H: \Omega \rightarrow \mathbb{R} \cup \{-\infty\}; x \mapsto \ln(\pi(x))$ を用いて、

$$\pi(x) = \frac{e^{H(x)}}{\sum_{x \in \Omega} e^{H(x)}} \quad (x \in \Omega)$$

と記述できる。特に、分布 π が $\mathcal{D}$ 上の対数優モジュラの場合は、関数 H が任意の $X, Y \in \mathcal{D}$ に対して優モジュラ不等式

$$H(X) + H(Y) \leq H(X \cup Y) + H(X \cap Y)$$

を満たすことと、対数劣モジュラの場合は劣モジュラ不等式

$$H(X) + H(Y) \geq H(X \cup Y) + H(X \cap Y)$$

を満たすことと、それぞれ等価である。第5章で、対数優/劣モジュラ分布の例を与える。

2.2 可逆的ハッセ歩

有限状態空間 Ω と推移確率行列 P をもつマルコフ連鎖が、関数 $g: \Omega \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ に対して、任意の $\{x, y\} \in \binom{\Omega}{2}$ について詳細均衡方程式

$$g(x) \cdot P(x, y) = g(y) \cdot P(y, x) \quad (1)$$

を満たすとき、可逆的 (reversible) であるという。ギブスサンプラー、メトロポリスヘースティングスなど、MCMC 法で用いられるマルコフ連鎖の多くが可逆的である。

定理 1 ([4] 等参照) エルゴード的マルコフ連鎖が可逆的、すなわち式 (1) を満たす時、マルコフ連鎖の定常分布 π は g に比例し、

$$\pi(x) = \frac{g(x)}{\sum_{x \in \Omega} g(x)} \quad (x \in \Omega)$$

が成り立つ。 ■

いま、状態空間 Ω は半順序集合とし、 Ω の (無向) ハッセ図の枝の集合を $C(\Omega) \subseteq \binom{\Omega}{2}$ で表わす。マルコフ連鎖の推移確率行列 P が

$$P(x, y) > 0 \quad \text{iff} \quad \begin{cases} x = y, \text{ or} \\ \{x, y\} \in C(\Omega), \end{cases}$$

を満たすものをハッセ歩 (Hasse walk) という³。

²例えば $\mathcal{D}$ 上の一様分布は対数優モジュラかつ対数劣モジュラである。

³ハッセ歩は "lattice walk" と呼ばれることもある。

2.3 過去からのカップリング法

推移確率行列 P に対して, (決定的) 関数 $\phi: \Omega \times [0, 1) \rightarrow \Omega$ が一様乱数 $\lambda \in [0, 1)$ に対して

$$P(x, y) = \Pr(\phi(x, \Lambda) = y)$$

を満たすとき, ϕ を更新関数という. 一般に, マルコフ連鎖に対して更新関数は唯一ではない. 表記の簡便のため, $\Phi_s^{s+t}(x, \lambda^t)$ は状態 $x \in \Omega$ に対して, 時刻 s から $\lambda^t = (\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_{t-1}) \in [0, 1)^t$ を用いて, 帰納的に ϕ を計算した時刻 $s+t$ ($t > 0$) の状態を表すものとする. すなわち,

$$\Phi_s^{s+t}(x, \lambda^t) \stackrel{\text{def.}}{=} \phi(\Phi_s^{s+t-1}(x, \lambda^{t-1}), \lambda_{t-1})$$

とし, $\Phi_s^{s+1}(x, \lambda^1) \stackrel{\text{def.}}{=} \phi(x, \lambda_0)$ である.

エルゴード的なマルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ は状態空間 Ω を持ち, 更新関数 $\phi: \Omega \times [0, 1) \rightarrow \Omega$ で定義されているとする. このとき, 標準的な過去からのカップリング (CFTP: coupling from the past) アルゴリズムは次のように記述される ([6] 参照).

アルゴリズム 1 (CFTP[9])

Step 1. シミュレーションの開始時刻を $T := -1$ とする. 空列 λ を用意する.

Step 2. 乱数 $\lambda[T], \lambda[T+1], \dots, \lambda[\lfloor T/2 \rfloor - 1]$ を生成し, 数列 λ の先頭に挿入する.

すなわち, $\lambda := (\lambda[T], \lambda[T+1], \dots, \lambda[-1])$ とする.

Step 3. Ω のすべての状態 x について, 乱数列 λ を用いて時刻 T から時刻 0 までマルコフ連鎖を推移させる.

Step 4. 以下の合流確認を行う.

(a) もし $\exists y \in \Omega, \forall x \in \Omega, y = \Phi_T^0(x, \lambda)$ ならば y を返し, 停止する.

(b) そうでなければ, シミュレーションの開始時刻を $T := 2T$ としてステップ 2 に戻る.

CFTP アルゴリズム (アルゴリズム 1) に対して, 次の定理が成り立つ.

定理 2 (CFTP[9]) エルゴードマルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ は有限の状態空間 Ω をもち, 更新関数 $\phi: \Omega \times [0, 1) \rightarrow \Omega$ で定義されているとする. この時, CFTP アルゴリズム (アルゴリズム 1) が停止し値を返す時, 得られる値は $\mathcal{M}$ の定常分布に厳密に従う確率変数の実現値である.

更新関数 ϕ で定義されるマルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ に対して, アルゴリズム 1 の Step 4 (a) における, 確率的事象 $\exists y \in \Omega, \forall x \in \Omega, y = \Phi_T^0(x, \lambda)$ を合流 (coalescence) と呼ぶ.

2.4 単調更新関数

前節で述べた CFTP アルゴリズムにおいて, 合流の確認がアルゴリズムの正当性, 計算効率共に鍵となる. しかし, 素朴な CFTP アルゴリズムにおいては, 合流確認に $|\Omega|$ に比例する時間がかかってしまう. この点を克服する一つのアイデアが単調性である.

半順序集合 Ω 上の半順序 $\succeq$ に関して, 更新関数 ϕ が任意の実数 $\lambda \in [0, 1)$ に対して

$$x \succeq y \Rightarrow \phi(x, \lambda) \succeq \phi(y, \lambda) \quad (\forall x, y \in \Omega)$$

を満たすとき ϕ は単調であるという.

単調性の定義から, 単調な更新関数に対しては, 確率的事象 $[\exists y \in \Omega, \forall x \in \Omega, y = \Phi_T^0(x, \lambda)]$ (合流) と, 確率的事象 $[\exists y \in \Omega, y = \Phi_T^0(x_{\max}, \lambda) = \Phi_T^0(x_{\min}, \lambda)]$ が等価であることがわかる. 以上のことから, 更新関数が単調な場合, アルゴリズム 1 の Step 3, 4(a) を

Step 3. 状態 $x_{\max}, x_{\min} \in \Omega$ について, 乱数列 λ を用いて時刻 T から時刻 0 までマルコフ連鎖を推移させる.

Step 4. 以下の合流確認を行う.

(a) もし $\exists y \in \Omega, y = \Phi_T^0(x_{\max}, \lambda) = \Phi_T^0(x_{\min}, \lambda)$ ならば y を返し, 停止する.

と置き換えても, 等価な出力が得られ, すなわち定理 2 と同様の定理を得る.

3 マルコフ連鎖が単調更新関数もつ必要十分条件

有限分配束 $\mathcal{D}$ 上のマルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ を次のように定める; 現在の状態 $X \in \mathcal{D}$ に対して,

Step 1. $e \in E$ を一様ランダムに選択する.

Step 2. 一様乱数 $\Lambda \in [0, 1)$ を生成し, (仮の) 状態 $T \subseteq E$ を

$$T = \begin{cases} X \setminus \{e\} & \left(\text{if } \Lambda < \frac{\pi(X \setminus \{e\})}{\pi(X \setminus \{e\}) + \pi(X \cup \{e\})} \right), \\ X \cup \{e\} & (\text{otherwise}), \end{cases}$$

とする⁴.

Step 3. 次の時刻の状態 $X' = \phi(X; e, \Lambda)$ を

$$X' = \phi(X; e, \Lambda) \stackrel{\text{def.}}{=} \begin{cases} T & (\text{if } T \in \mathcal{D}), \\ X & (\text{otherwise}), \end{cases}$$

とする⁵.

命題 3 マルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ を定義する更新関数 ϕ は単調である. ■

次の定理は本稿の主結果のひとつである.

定理 4 有限分配束 $\mathcal{D}$ 上の可逆的ハッセ歩が, 単調な更新関数をもつための必要十分条件は, 定常分布 π が $\mathcal{D}$ 上の対数優モジユラであることである. ■

4 対数劣モジユラ分布に対する完璧サンプリング

状態空間 $\mathcal{D}$ 上の対数劣モジユラ分布 π に対して, 第 3 章で定義したマルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ を考える. このとき, 更新関数 ϕ は, π が対数モジユラ (対数劣モジユラかつ対数優モジユラ) でない限り, 単調ではない. したがって Häggström & Nelander [3] の提案した anti-monotone カップリングの利用を考える.

任意の対 $X, Y \in \mathcal{D}$ に対して, (決定的) 関数 $\psi: \mathcal{D} \times E \times [0, 1) \times \mathcal{D} \rightarrow \mathcal{D}$ を次のように定める.

$$\psi(X; e, \lambda | Y) \stackrel{\text{def.}}{=} \begin{cases} X \setminus \{e\} & \left(\text{if } \lambda < \frac{\pi(Y \setminus \{e\})}{\pi(Y \cup \{e\}) + \pi(Y \setminus \{e\})} \text{ and } X \setminus \{e\} \in \mathcal{D} \right), \\ X \cup \{e\} & \left(\text{if } \lambda \geq \frac{\pi(Y \setminus \{e\})}{\pi(Y \cup \{e\}) + \pi(Y \setminus \{e\})} \text{ and } X \cup \{e\} \in \mathcal{D} \right), \\ X & (\text{otherwise}). \end{cases}$$

このとき, ψ はマルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ の推移を実現するものではない, すなわち一様乱数 $e \in E$ と $\lambda \in [0, 1)$ に対して, $\Pr[Z = \psi(X; e, \lambda | Y)] \neq P(X, Z)$ が成り立つものではないことに注意されたい.

⁴ $X \in \{X \setminus \{e\}, X \cup \{e\}\}$ に注意.

⁵ したがって $X' \in \mathcal{D}$.

定理 5 関数 ψ が、任意の $e \in E$, $\lambda \in [0, 1)$ および任意の組 $X, Z, Y \in \mathcal{D}$ ($X \supseteq Z \supseteq Y$) に対して

$$\psi(X; e, \lambda | Y) \supseteq \phi(Z; e, \lambda) \supseteq \psi(Y; e, \lambda | X)$$

を満たす必要十分条件は π が対数劣モジュラであることである。 ■

表記の簡便のため、 $\Psi_s^{s+t}(X; e^t, \lambda^t | Y)$ は状態対 $X, Y \in \Omega$ に対して、時刻 0 から $e^t = (e_0, e_1, \dots, e_{t-1}) \in E^t$ と $\lambda^t = (\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_{t-1}) \in [0, 1)^t$ を用いて、帰納的に ψ を計算した時刻 t の状態を表すものとする。すなわち、

$$\Psi_s^{s+t}(X; e^t, \lambda^t | Y) \stackrel{\text{def.}}{=} \psi(\Psi_s^{s+t-1}(X; e^{t-1}, \lambda^{t-1} | Y); e_{t-1}, \lambda_{t-1} | \Psi_s^{s+t-1}(Y; e^{t-1}, \lambda^{t-1} | X))$$

とし、 $\Psi_s^{s+1}(X; e^1, \lambda^1 | Y) \stackrel{\text{def.}}{=} \psi(X; e_0, \lambda_0 | Y)$ である。

定理 5 より、 $\mathcal{D}$ 上の対数劣モジュラ分布に対して、もし $[\exists Z \in \mathcal{D}, Z = \Psi_s^{s+t}(E; e, \lambda | \emptyset) = \Psi_s^{s+t}(\emptyset; e, \lambda | E)]$ が成り立っている時、同一の Z に対して $[\forall X \in \mathcal{D}, \Phi_0^t(X; e, \lambda) = Z]$ が成り立つ。以上のことから、 $\mathcal{D}$ 上の対数劣モジュラ分布に対して、アルゴリズム 1 の Step 3, 4(a) を

Step 3. 乱数列 e, λ を用いて、時刻 T から 0 まで帰納的に $\Psi_T^0(x_{\max}; e, \lambda | x_{\min})$ と $\Psi_T^0(x_{\min}; e, \lambda | x_{\max})$ を計算する。

Step 4. 以下の合流確認を行う。

(a) もし $\exists y \in \Omega, y = \Psi_T^0(x_{\max}; e, \lambda | x_{\min}) = \Psi_T^0(x_{\min}; e, \lambda | x_{\max})$ ならば y を返し、停止する。

と置き換えて（かつ、適切に該当箇所を書き換えて）も、等価な出力が得られ、すなわち定理 2 と同様の定理を得る。

5 応用 — Tutte 多項式の計算

グラフ $G = (V, E)$ の Tutte 多項式は

$$T(G; x, y) \stackrel{\text{def.}}{=} \sum_{A \subseteq E} (x-1)^{r(E)-r(A)} (y-1)^{|A|-r(A)}$$

で与えられる。ただし $r(A)$ は G の部分グラフ (V, A) のランク（最大の森の枝数）を表わす。関数 $r(A)$ は著名な劣モジュラ関数である。

いま、グラフ G に対してブール束 2^E 上の分布 π_T を

$$\pi_T(A) \stackrel{\text{def.}}{=} \frac{(x-1)^{r(E)-r(A)} (y-1)^{|A|-r(A)}}{T(G; (x, y))} \quad (A \subseteq E)$$

と定義する。分布 $\pi_T(A)$ は $x > 1, y > 1$ かつ $(x-1)(y-1) \geq 1$ ならば対数優モジュラ、 $x > 1, y > 1$ かつ $(x-1)(y-1) \leq 1$ ならば対数劣モジュラとなる。さらに、マルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ の混交時間 ([5] 参照) に関して、次の命題を示すことができる。

補題 6 $x > 1, y > 1, (x-1)(y-1) \geq 1$ かつ $1/x + 1/y \geq 1 - 1/|E|$ のとき、分布 π_T に対するマルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ は多項式時間で混交する。 ■

補題 7 $x > 1, y > 1, (x-1)(y-1) \leq 1$ かつ $1/x + 1/y \leq 1 + 1/(|E| + 1)$ のとき、分布 π_T に対するマルコフ連鎖 $\mathcal{M}$ は多項式時間で混交する。 ■

補題 6 と 7 から, グラフ G の自己帰着性 ([5] 参照) を利用して, 次の定理を得る.

定理 8 任意に与えられるグラフ $G = (V, E)$ に対して, 領域 $R_1: [1 \leq x \leq 1+1/|E| \text{ かつ } y \geq |E|+1]$ または $R_2: [x \geq |E|+1 \text{ かつ } 1 \leq y \leq 1+1/|E|]$ 内の $(x, y) \in \mathbb{R}$ に対して, Tutte 多項式 $T(G; x, y)$ の値の計算に対する FPRAS が存在する. ■

6 対数劣モジュラ分布からのサンプリングの困難性

ここでは, 一般の対数劣モジュラ分布からのサンプリングに対しては, 多項式時間アルゴリズムは存在しないであろうことを示す.

命題 9 グラフ $G = (V, E)$ に対して, カット関数 c を $c(X) \stackrel{\text{def.}}{=} |\{ \{u, v\} \in E \mid u \in X \text{ かつ } v \in V \setminus X \}|$ ($X \in 2^V$) と定義し, 状態空間 2^V 上の分布 π_{MC} を

$$\pi_{\text{MC}}(X) \stackrel{\text{def.}}{=} \frac{e^{n \cdot c(X)}}{\sum_{X' \subseteq V} e^{n \cdot c(X')}} \quad (X \subseteq V)$$

と定義する. このとき, 分布 π_{MC} に対して $(1/2) \sum_{X \in 2^V} |\nu(X) - \pi_{\text{MC}}(X)| \leq 1/20$ を満たす近似分布 ν からのサンプリングを実現する多項式時間アルゴリズムは, $\text{RP} \neq \text{NP}$ の仮定の下では存在しない. ■

カット関数 c は劣モジュラ関数として良く知られ, すなわち π_{MC} は対数劣モジュラである.

7 まとめと今後の課題

本稿では, 有限束上の可逆的ハッセ歩が単調な更新関数をもつための必要十分条件が定常分布が対数優モジュラであることを示した. マルコフ連鎖をハッセ歩に限定しない場合, 対数優モジュラでない分布に対しても単調な更新関数の設計された例が存在する [8]. 非対数優モジュラ分布に対して, 単調な更新関数を設計する汎用的な手法については今後の課題である.

参考文献

- [1] B.A. Davey and H.A. Priestley, *Introduction to Lattices and Order*, Second Edition, Cambridge University Press, 2002.
- [2] L.A. Goldberg and M. Jerrum, Inapproximability of the Tutte polynomial, *Information and Computation*, **206** (2008), 908–929.
- [3] O. Häggström and K. Nelander, Exact sampling from anti-monotone systems, *Statistica Neerlandica*, **52** (1998), 360–380.
- [4] M. Jerrum, *Counting, Sampling and Integrating: Algorithms and Complexity*, ETH Zürich, Birkhauser, Basel, 2003.
- [5] 来嶋秀治, MCMC 法と近似精度保証, 第 19 回 RAMP シンポジウム, pp. 1–15.
- [6] 来嶋秀治, 松井知己, 完璧にサンプリングしよう!, *オペレーションズ・リサーチ*, **50** (2005), pp. 169–174, pp. 264–269, pp. 329–334.
- [7] S. Kijima and T. Nemoto, Finding a level ideal of a poset, *Proceedings of 15th International Computing and Combinatorics Conference (COCOON 2009)*, *Lecture Notes in Computer Science*, **5609** (2009), 317–327.
- [8] T. Matsui and S. Kijima, Polynomial time perfect sampler for discretized Dirichlet distribution, in H. Tsubaki, K. Nishina, and S. Yamada (eds.), *The Grammar of Technology Development*, Springer, 2007, pp. 179–199.
- [9] J.G. Propp and D.B. Wilson, Exact sampling with coupled Markov chains and applications to statistical mechanics, *Random Structures and Algorithms*, **9** (1996), 223–252.