



1. 計算機科学のMCMC法

来嶋 秀治

滋賀大学 データサイエンス学部

応募者の略歴等

マルコフ連鎖モンテカルロ法
(Markov chain Monte Carlo)

略歴

2007. 3. 東大院 情報理工 数理解析学専攻 博士了

博士論文「MCMC法における近似精度保証と完璧サンプリング法」

2007. 4.-2010.3. 京都大学 数理解析研究所 助教

2010. 4.- 2022.3 九州大学 大学院システム情報科学研究所 准教授
(2016.10-2020.3 JSTさきがけ研究員兼任 (数学協働: 國府統括))

2022. 4.-現在 滋賀大学データサイエンス学系教授

研究分野

数理工学, 理論計算機科学

所属学会

日本OR学会, 応用数理学会, 情報処理学会, 電子情報通信学会,
日本統計学会, 日本計算機統計学会, ACM, SIAM

来嶋 秀治 (きじま しゅうじ; Shuji Kijima)

理論計算機科学/確率過程

- 完璧サンプリング法/MCMC法
- 決定性ランダムウォーク
- 増えるクーポン収集
- データストリーム中の頻出アイテム検知
- 置換多面体上の点の乱択丸め

グラフ/離散数学

- 区間グラフの部分グラフ同型性判定問題はP? NP-c?
- 最大次数4の剛性サーキットは, いつでも
2つの互いに疎なハミルトン閉路に分解できるか?
- 劣モジュラ関数の変数変換
- 任意の有限分配束はM凹関数の最小化元の族と同型

その他 (応用)

- Multi-armed bandit
- 分散計算
- 組合せ最適化
- 安定マッチング

研究分野

- 数理工学,
- **理論計算機科学**,
- オペレーションズ・リサーチ

本講義のねらい

マルコフ連鎖モンテカルロ(Markov chain Monte Carlo: MCMC)法の
理論計算機科学での活用について紹介する.

□ 動機

- 普通のモンテカルロとMCMCはどっちが計算効率がいいの？
- MCMCで出てきた結果の信頼性は？
- MCMCでマルコフ連鎖は何回推移させればいいの？

□ 内容

- 多項式時間計算量という尺度で「計算効率」を数学的に証明する.
- マルコフ連鎖の定常分布への収束スピード(mixing time)の
数学的な見積もり方を紹介する.
 - カップリング法
 - コンダクタンス法

講義の進め方

□ 講義の進め方

- スライド + 板書
 - スライド（月、金）
 - 板書（火、水、木）

□ 講義資料

- webページに掲載
 - <https://shuji-kijima.com/kobe25/index.html>

□ 成績評価

- レポート
 - 締め切り: 2025年7月31日
 - Dropboxに提出（演習資料参照）

参考文献

Finite Markov Chains and Algorithmic Applications

OLLE HÄGGSTRÖM

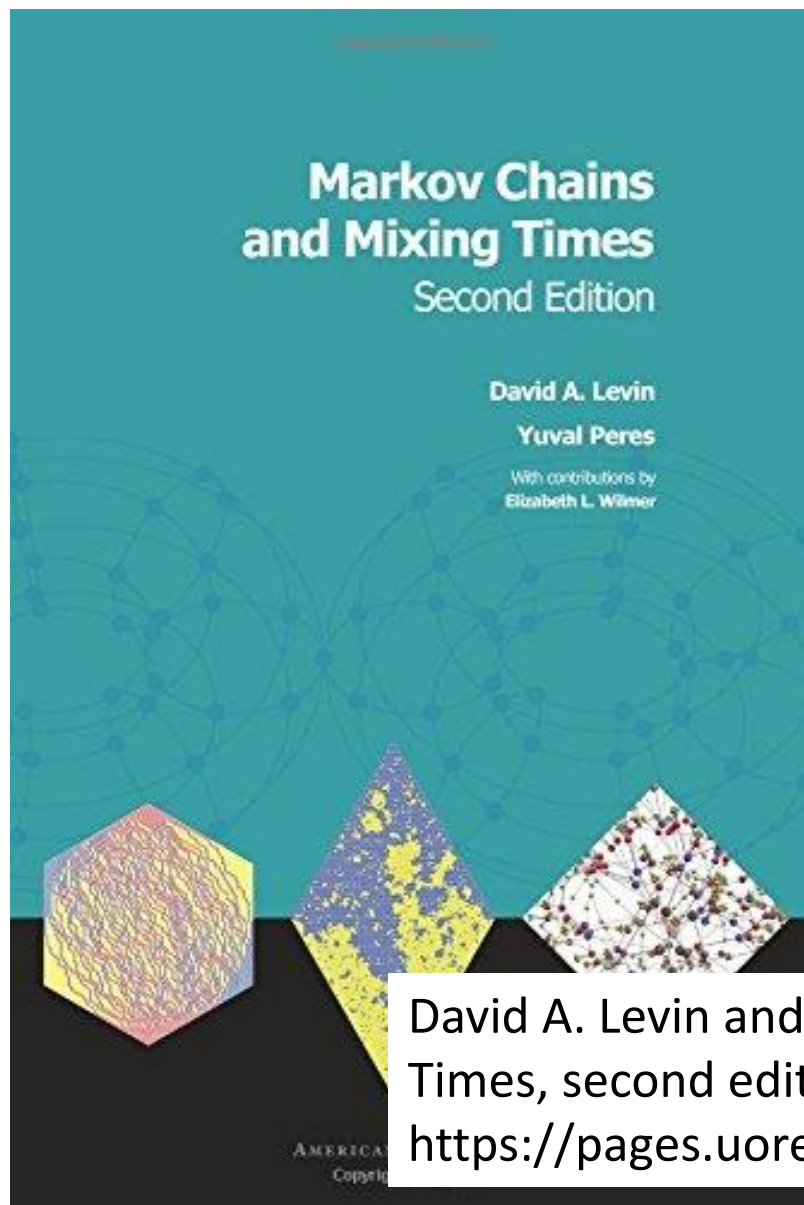
London Mathematical Society
Student Texts **52**

最初に読むべき名作.

Olle Häggström, *Finite Markov Chains and Algorithmic Applications*
(London Mathematical Society Student Texts, Series Number 52),
Cambridge University Press, 2002.

参考文献

定番. pdf公開(無料).



David A. Levin and Yuval Peres, Markov Chains and Mixing Times, second edition, American Mathematical Society, 2017.
<https://pages.uoregon.edu/dlevin/MARKOV/>

講義計画

		題材
1	導入	
2	多項式時間計算量	
3	Self-reduction	高次元凸体 / 分割表
4	有限マルコフ連鎖（定常分布、mixing time）	
5	Coupling（極限分布、mixing time）	Coloring
6	Path couplingとmixing time	Coloring / 分割表
7	CFTPと完璧サンプリング	分割表
8	固有値とmixing time	
9	コンダクタンスとmixing time	
10	Multi commodity flow とmixing time	
11	Bipartite matching [JS92]	二部マッチング
12	PermanentのFPRAS [JSV04]	二部マッチング
13	発展1: 0-1ナップサック	ナップサック
14	発展2: deterministic RW	
15	発展3: 増えるクーポン	

計算機科学

カップリング

コンダクタンス

研究紹介

以下、MCMC法の例を紹介

- 普通のモンテカルロとMCMCはどちらが計算効率がいいの？

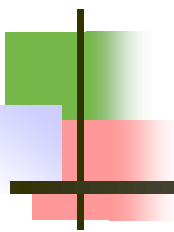
棄却サンプリング vs. 重点サンプリング
(rejection sampling vs. importance sampling)

Rejection sampling:

目標集合より広めに標本空間をとり, 条件に合致すれば採択

Importance Sampling:

目標集合=標本空間 (を目指す)



おねえさん問題の乱択近似

柴田友樹¹, 山内由紀子², 来嶋秀治², 山下雅史²

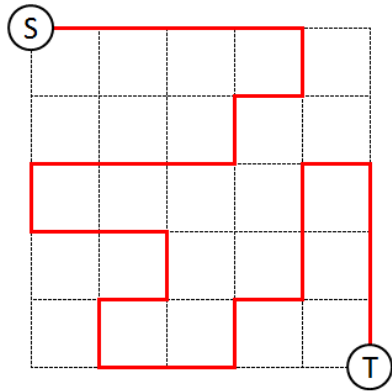
九州大学 工学部電気情報工学科 (1:研究当時)

大学院システム情報科学研究所 (2 :研究当時)

[参照]

- ❑ 柴田友樹, 山内由紀子, 来嶋秀治, 山下雅史, 格子上の経路数え上げの乱択近似--24時間で解くおねえさん問題, 2015年度 冬のLAシンポジウム, 京都大学数理解析研究所, 2016年1月28日.
- ❑ 柴田 友樹, 格子上の経路数え上げの乱択近似, 九州大学工学部電気情報工学科卒業論文, 2016年3月.

$n \times n$ 格子グラフ上で、左上(s)から右下(t)を結ぶ、 s - t 単純経路の総数を求めよ。



画像引用：日本科学未来館,『フカシギの数え方』おねえさんといっしょ！
みんなで数えてみよう！, YouTube, 2012/9/10公開,
<https://www.youtube.com/watch?v=Q4gTV4r0zRs>

おねえさん問題 youtube

search

01

12

212

318

1985

2004

719

657

778

832

941

101

111

126

136

142

152

166

176

181

101
102

16T

203

213

227

235

241

258

261

知られていること,

- ✓ 効率よく計算する方法 (公式) は知られていない.
 - たとえば, $\text{poly}(n)$ 時間.
 - ✓ 現在の世界記録は $n = 26$ で, 経路総数はおよそ 1.74×10^{163} [Iwashita et al. 2013].
 - ✓ 平面グラフ上の単純経路の数え上げは #P困難 [Provan 1986]
- 本研究ではMCMC法で近似総数を計算した.

*H. Iwashita, Y. Nakazawa, J. Kuwahara, T. Uno, S. Minato, Efficient computation of the number of paths in a grid graph with minimal perfect hash functions, Hokkaido University TCS Technical Report, TCS-TR-A-13-64, 2013.

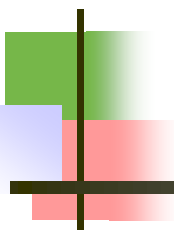
マルコフ連鎖モンテカルロ(MCMC)法で解いてみた

# steps of MC per sample	$\tau = 30$
# samples	$M = 10^7$

n	真の解*	近似解	実行時間
25	$8.40 * 10^{150}$	$8.55 * 10^{150}$	1h 27m
26	$1.74 * 10^{163}$	$1.78 * 10^{163}$	1h 33m
30	unknown	$2.09 * 10^{217}$	2h 4m
50	unknown	$6.35 * 10^{603}$	5h 44m
100	unknown	$6.07 * 10^{2415}$	23h 20m
200	unknown	$1.196 * 10^{9667}$	96h

(approx. is the average of five trials)

MCMC法の前に

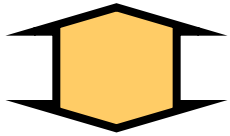


1. モンテカルロ法とは

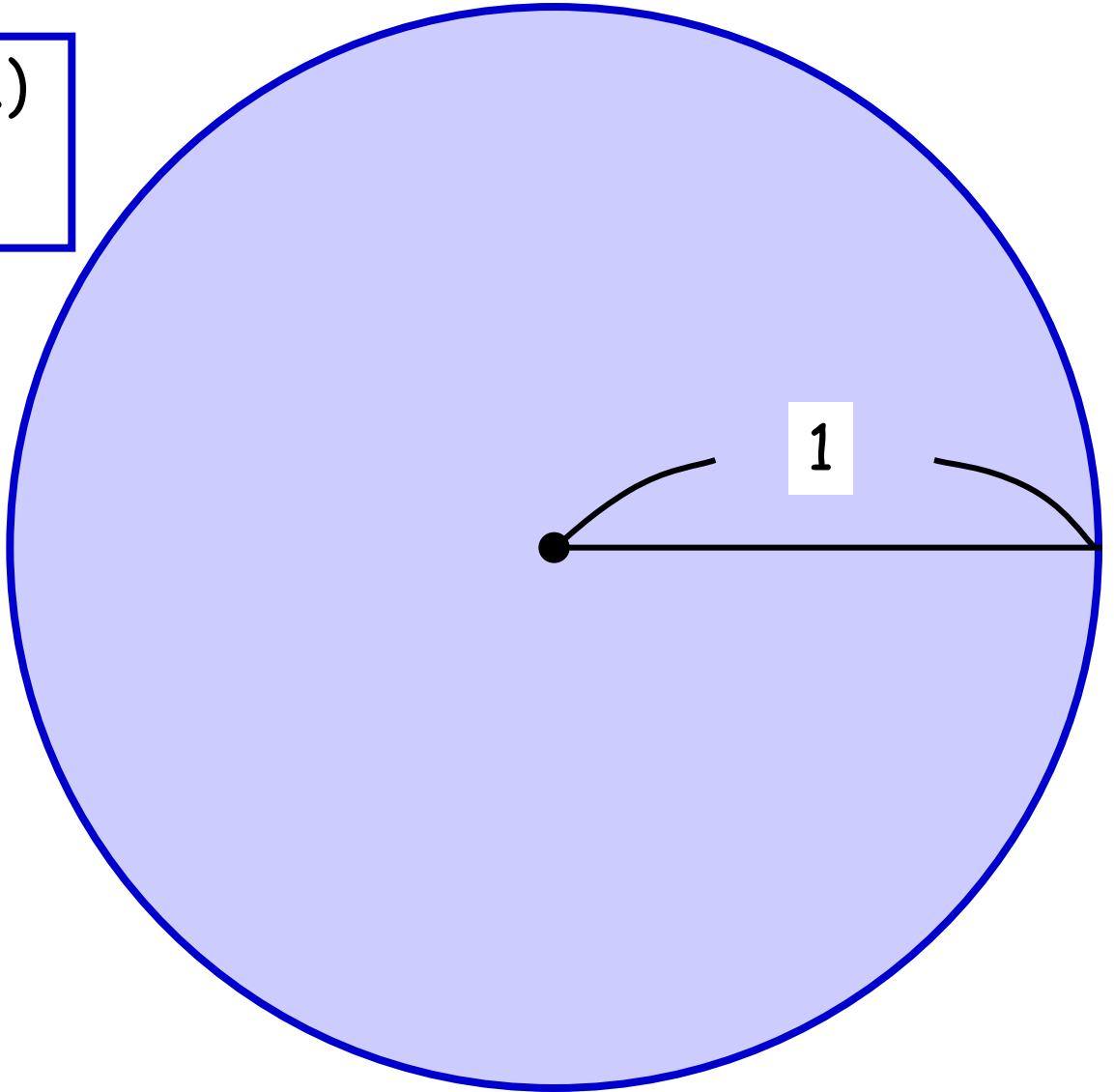
乱数を使うアルゴリズムのこと

モンテカルロ法 – 円周率の計算を例に

円周率 π の値 ($=3.141\dots$)
を求めよ.

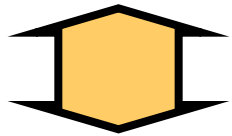


$\pi = (\text{半径}1\text{の円の面積})$

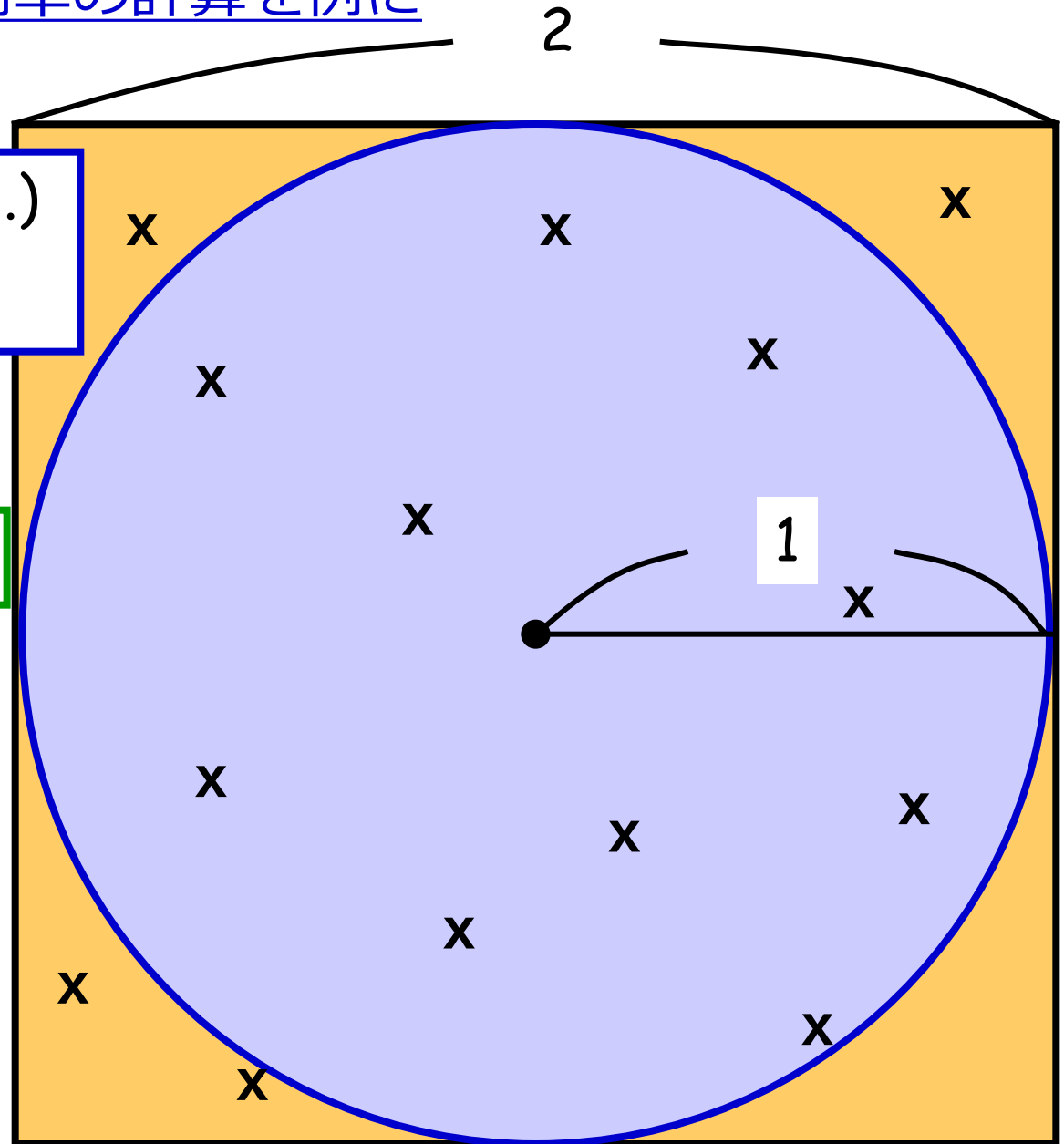


モンテカルロ法 – 円周率の計算を例に

円周率 π の値 ($=3.141\dots$)
を求めよ.

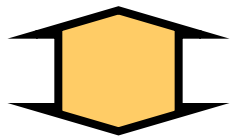


$\pi = (\text{半径}1\text{の円の面積})$



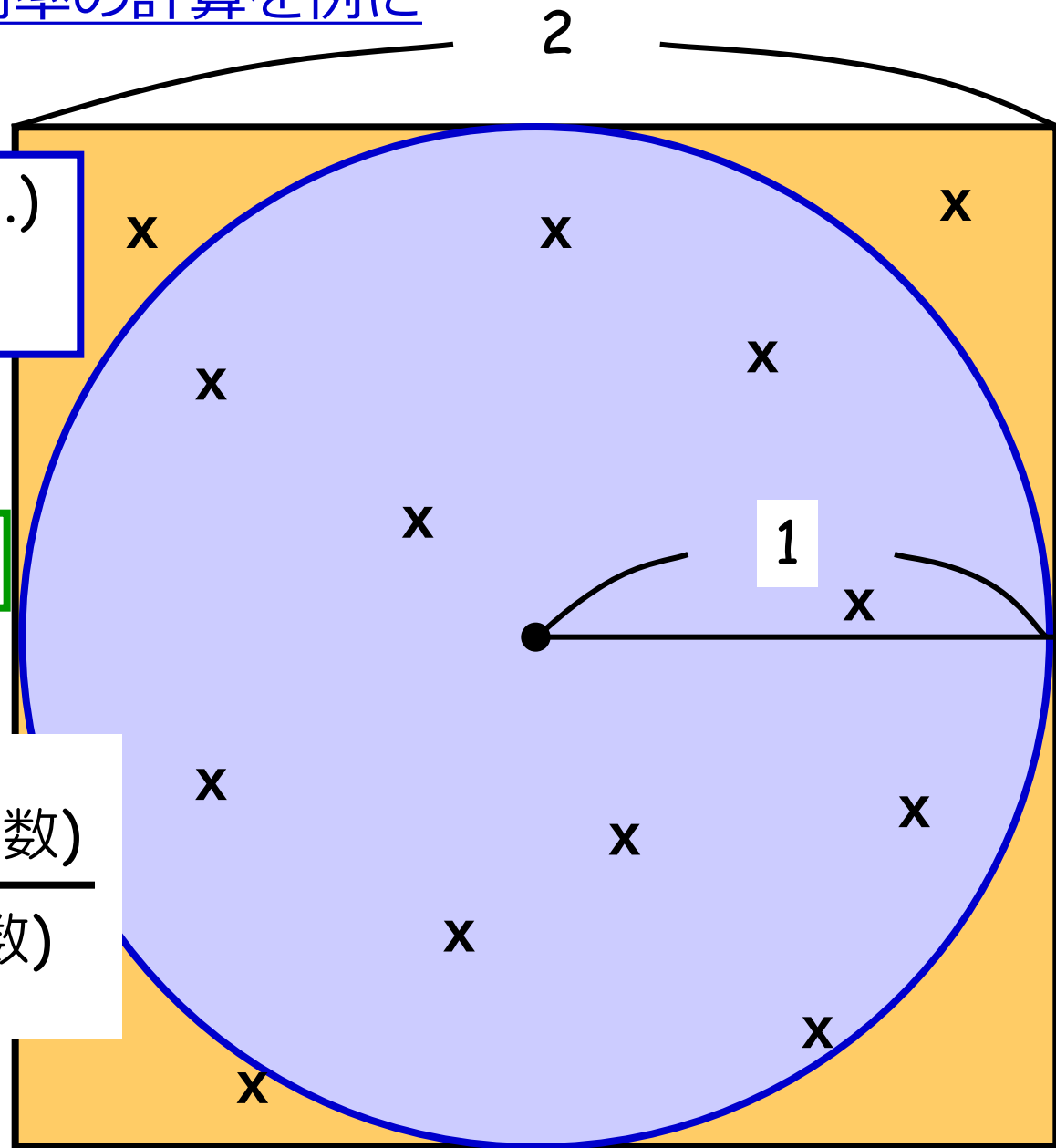
モンテカルロ法 – 円周率の計算を例に

円周率 π の値 (=3.141...) を求めよ。



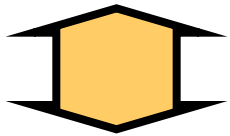
$\pi = (\text{半径1の円の面積})$

$$\pi = 4 \times \frac{(\text{円の中の点の数})}{(\text{打った点の数})}$$



モンテカルロ法 – 円周率の計算を例に

円周率 π の値 ($=3.141\dots$)
を求めよ。



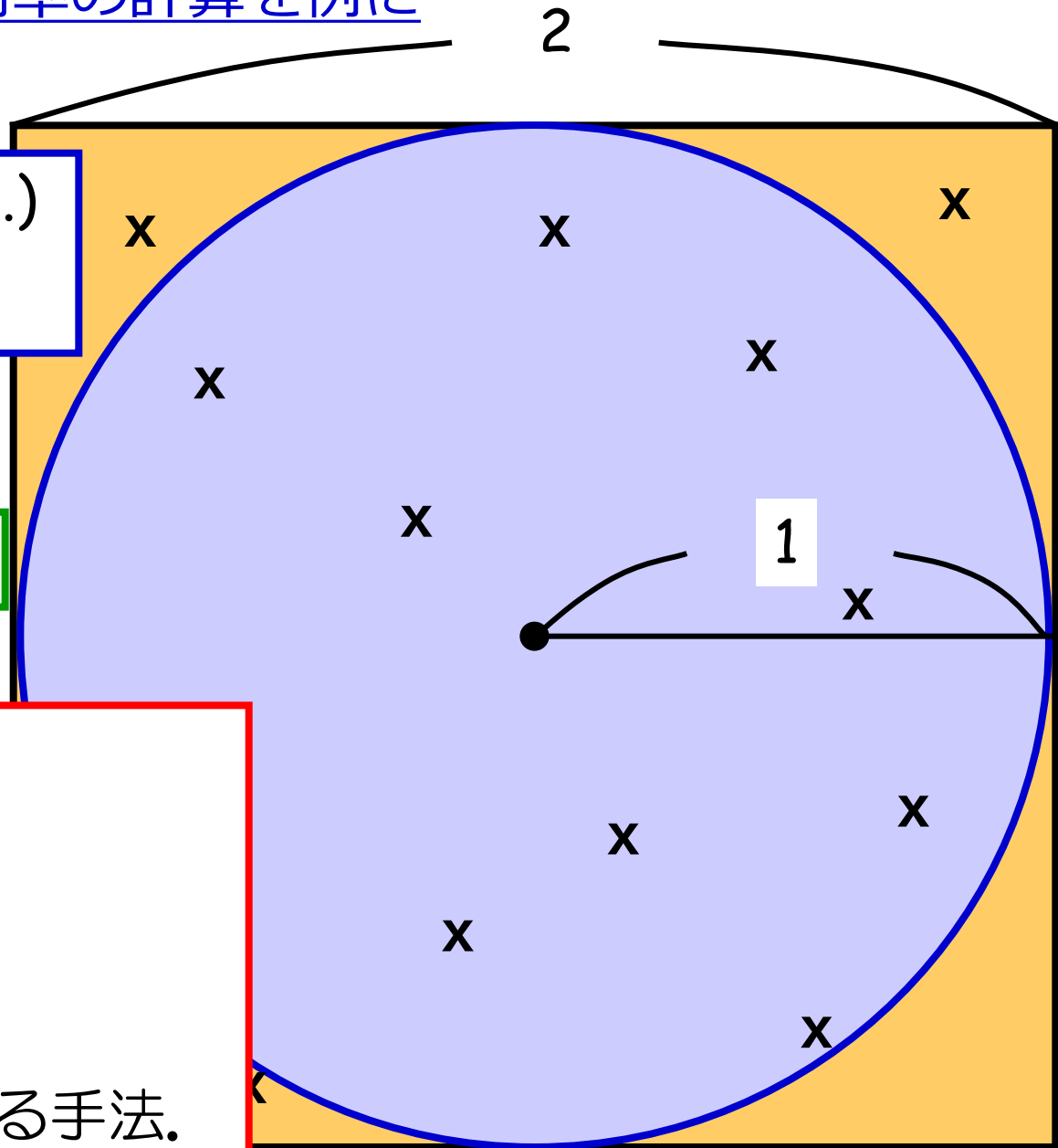
$\pi = (\text{半径}1\text{の円の面積})$

モンテカルロ法

乱数を使用して、

- ・ 比
- ・ 平均

などを近似的に計算する手法。



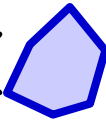
2次元領域の面積計算

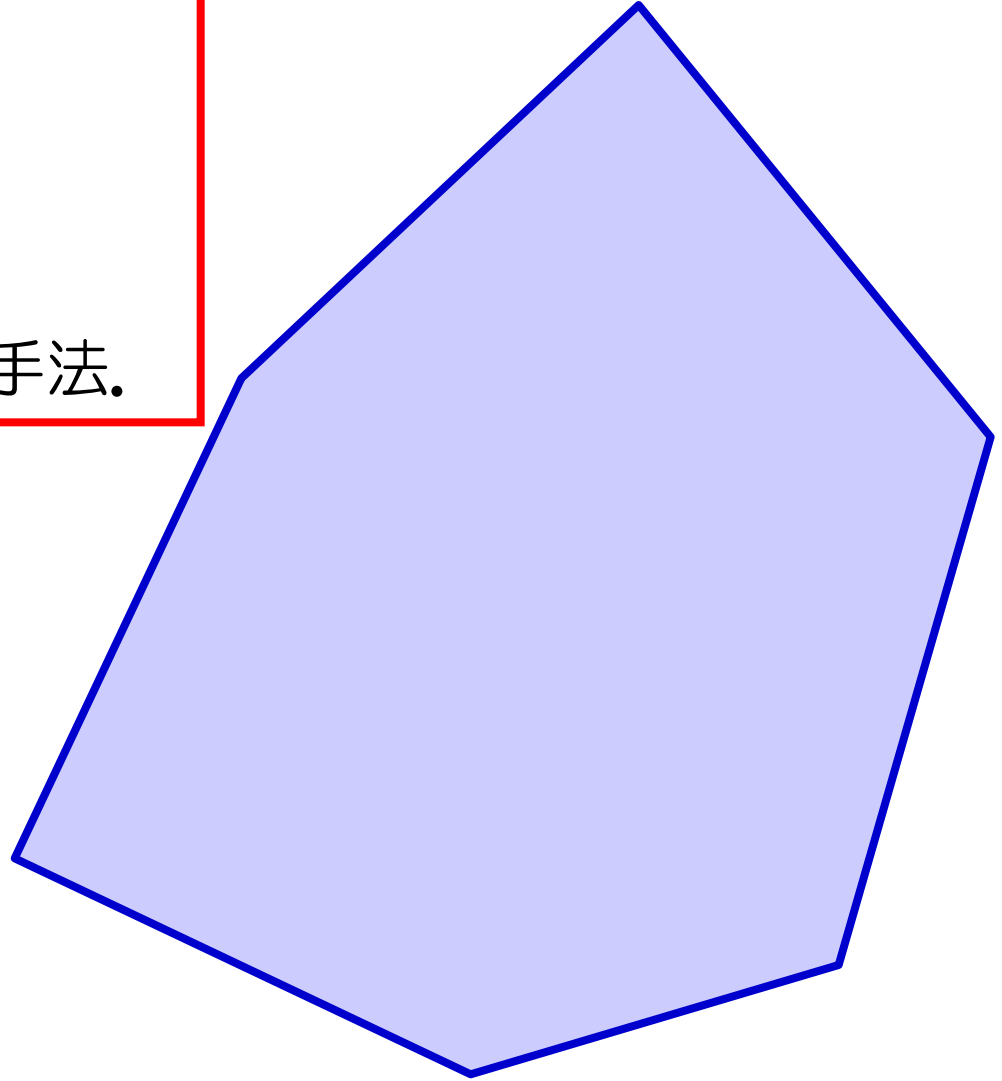
モンテカルロ法

乱数を使用して、

- ・ 比
- ・ 平均

などを近似的に計算する手法.

( の面積) =



2次元領域の面積計算

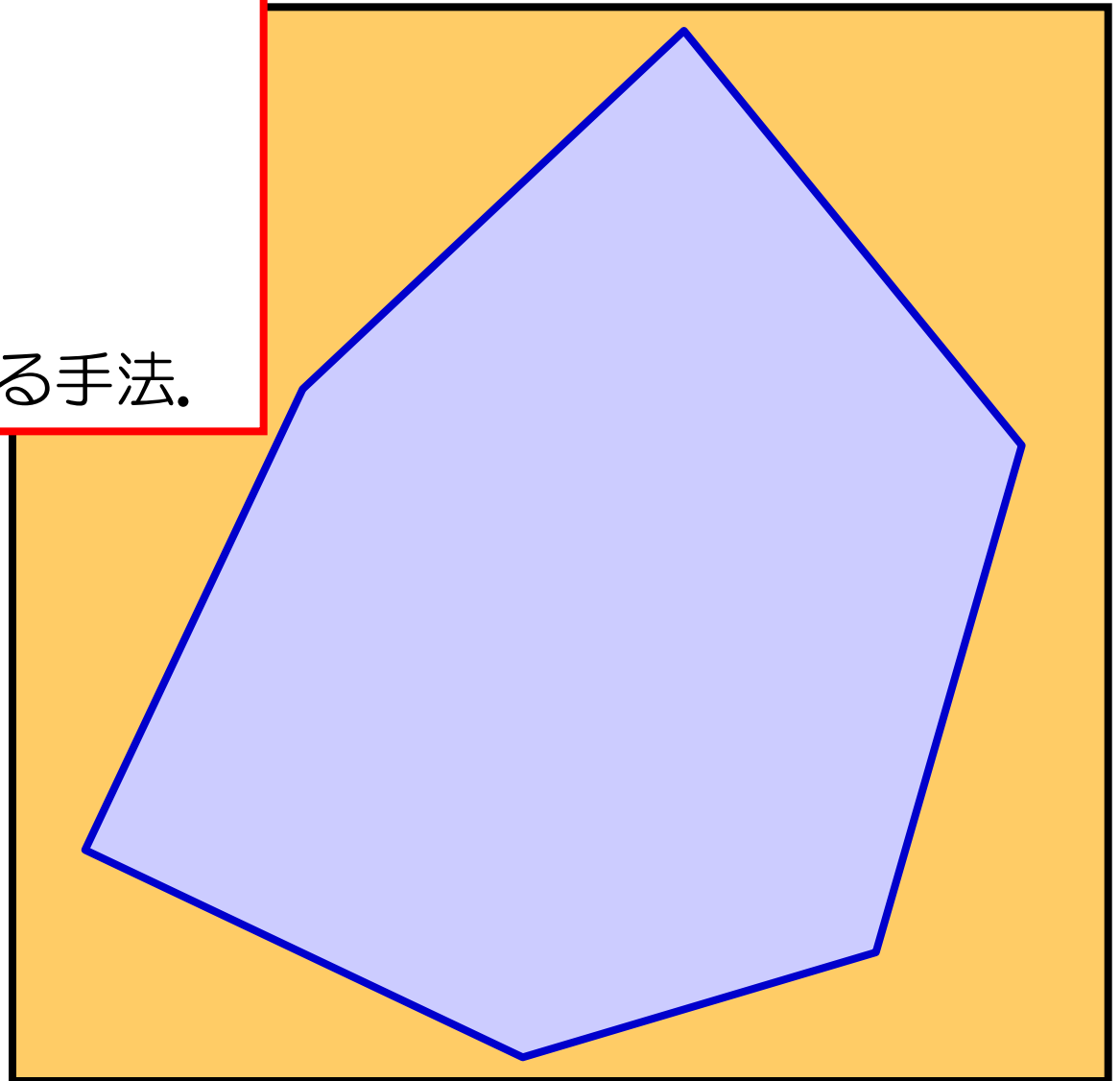
モンテカルロ法

乱数を使用して、

- ・ 比
- ・ 平均

などを近似的に計算する手法.

( の面積) =



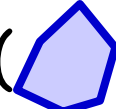
2次元領域の面積計算

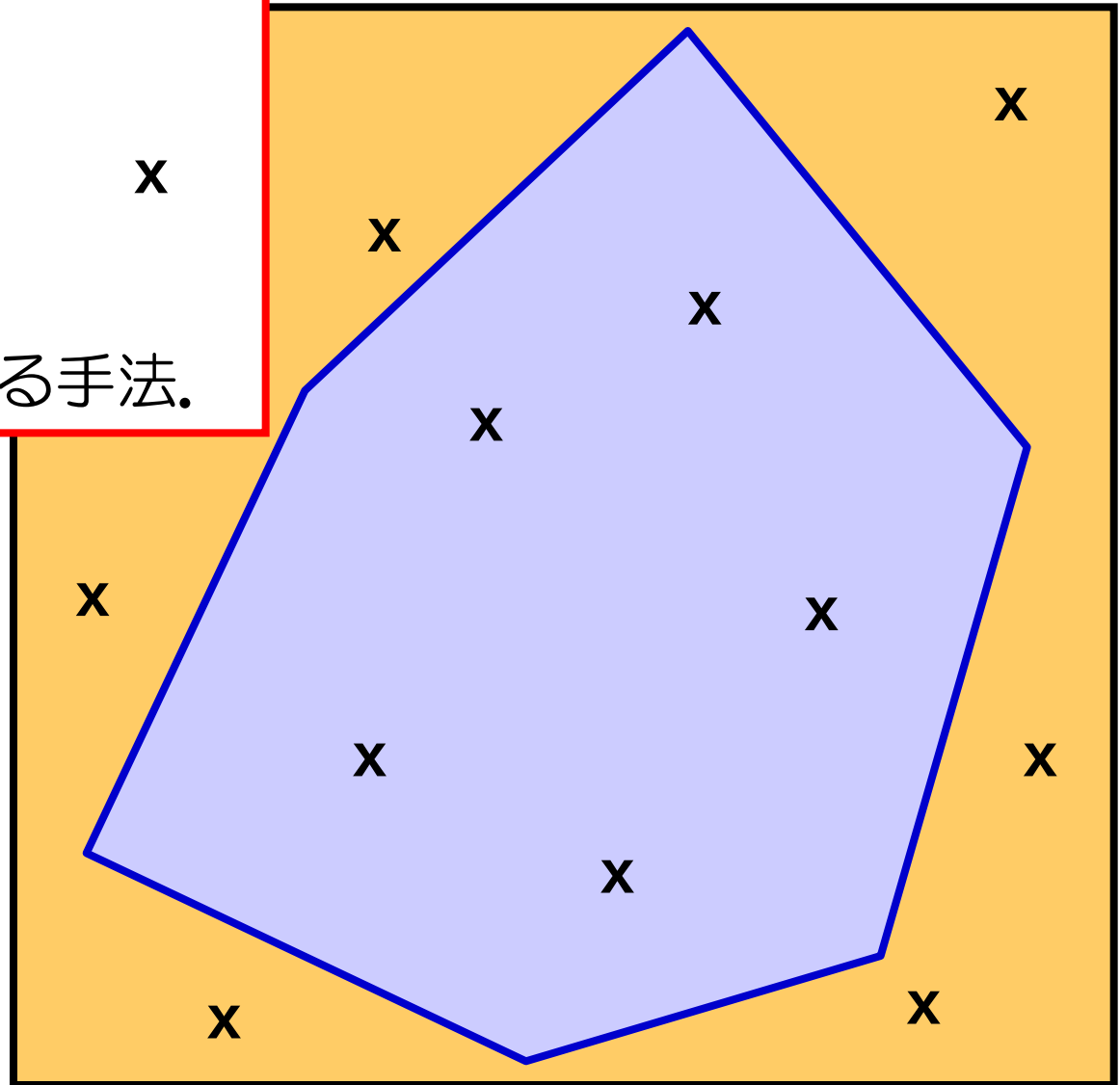
モンテカルロ法

乱数を使用して、

- ・ 比
- ・ 平均

などを近似的に計算する手法。

( の面積) =



2次元領域の面積計算

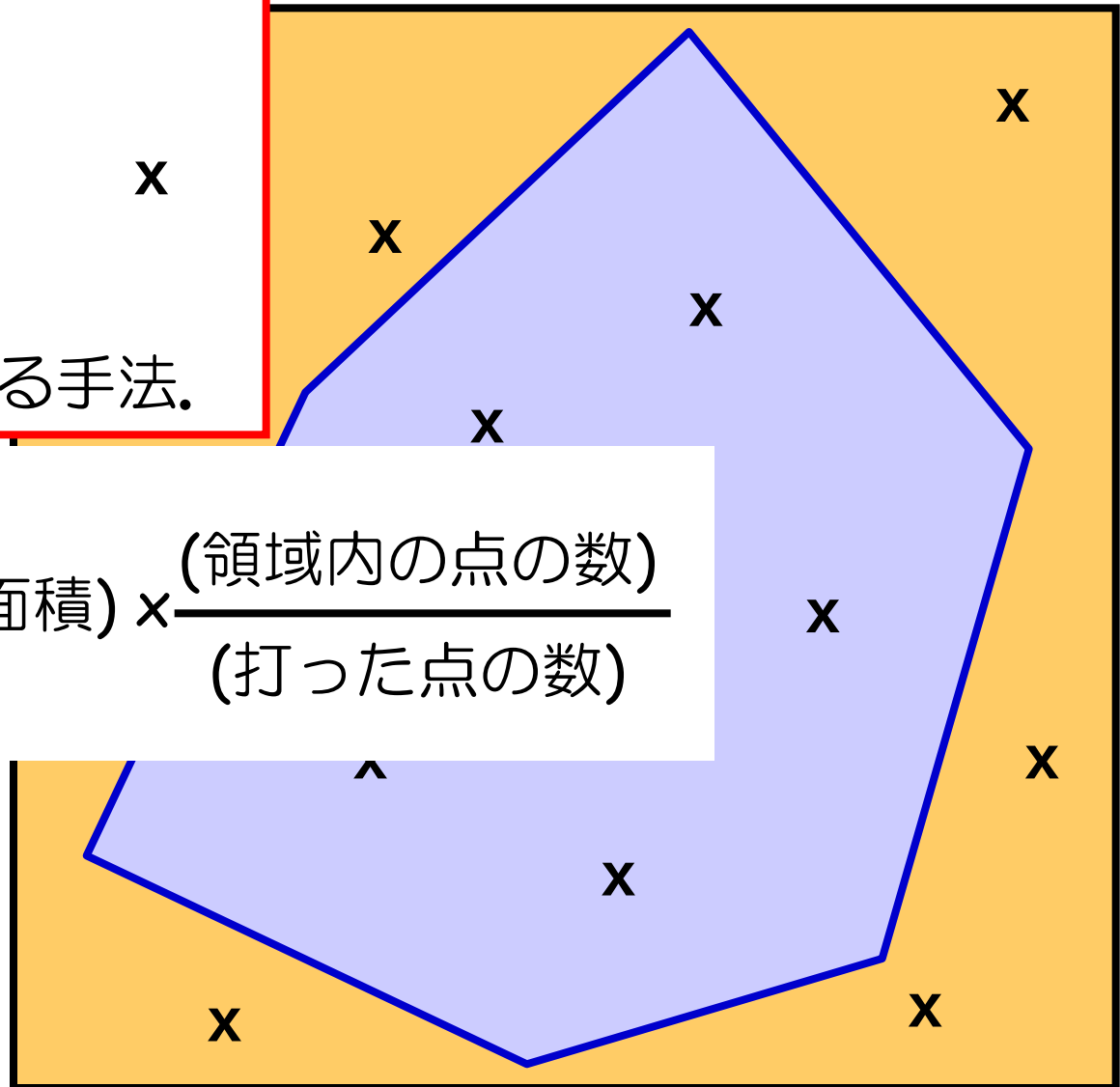
モンテカルロ法

乱数を使用して、

- ・ 比
- ・ 平均

などを近似的に計算する手法。

$$(\text{多角形の面積}) = (\text{正方形の面積}) \times \frac{(\text{領域内の点の数})}{(\text{打った点の数})}$$



2次元領域の面積計算

モンテカルロ法

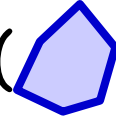
乱数を使用して,

- ・ 比
- ・ 平均

などを近似的に計算する手法.

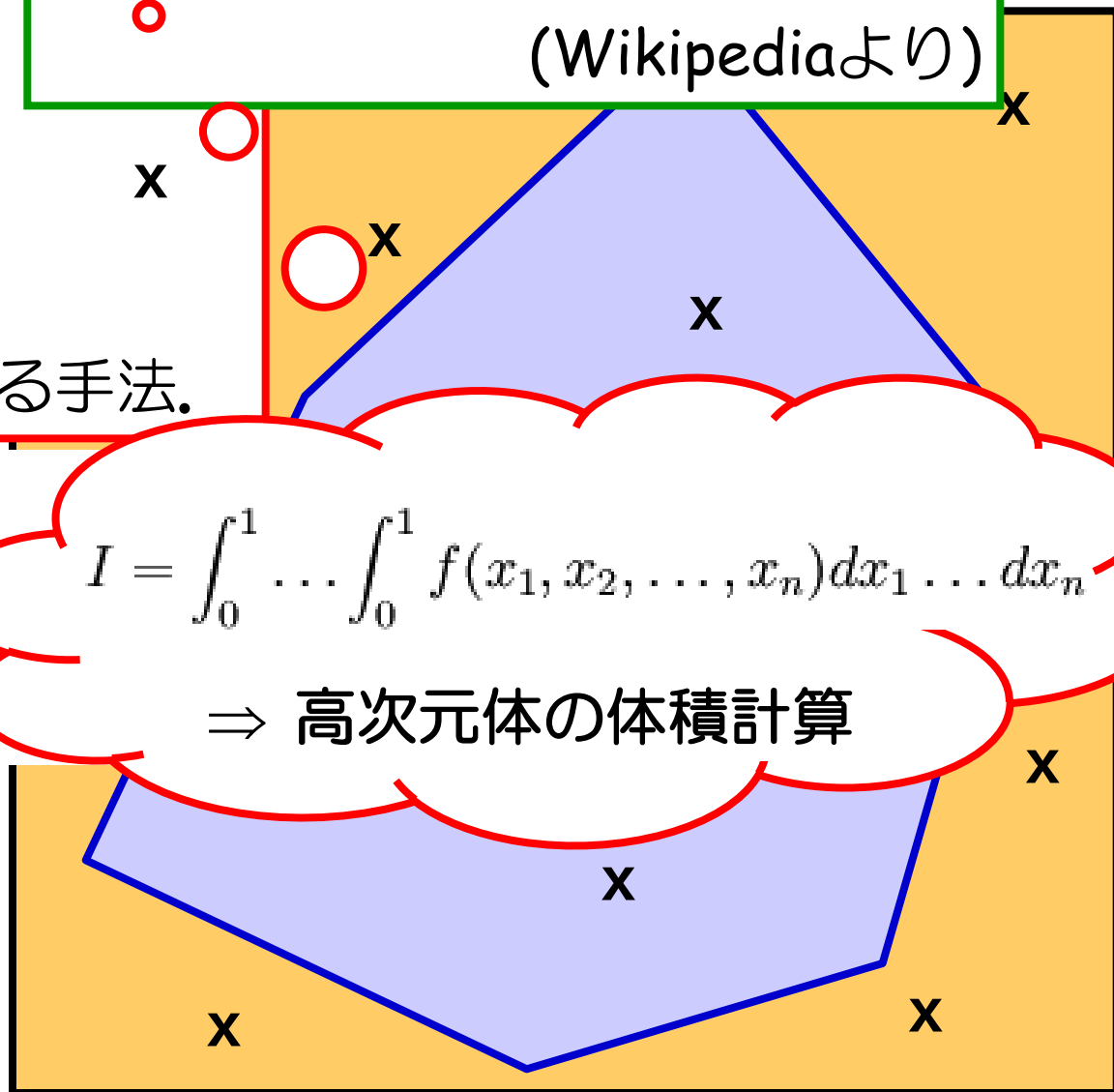
重積分に強いという特徴がある.

(Wikipediaより)

( の面積) = ( の

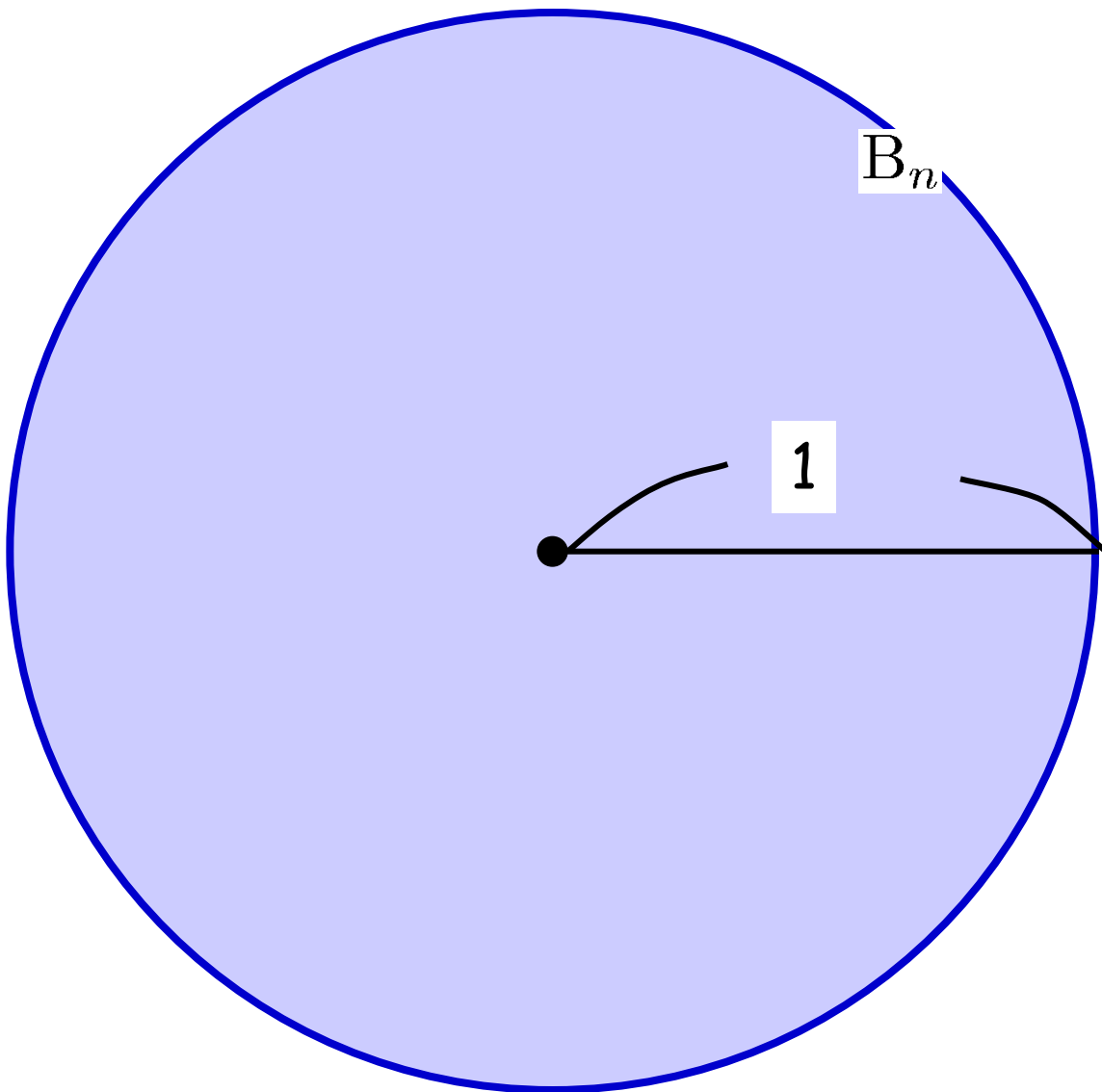
$$I = \int_0^1 \cdots \int_0^1 f(x_1, x_2, \dots, x_n) dx_1 \cdots dx_n$$

⇒ 高次元体の体積計算



高次元の呪い – 球を例に

n 次元球 B_n の体積

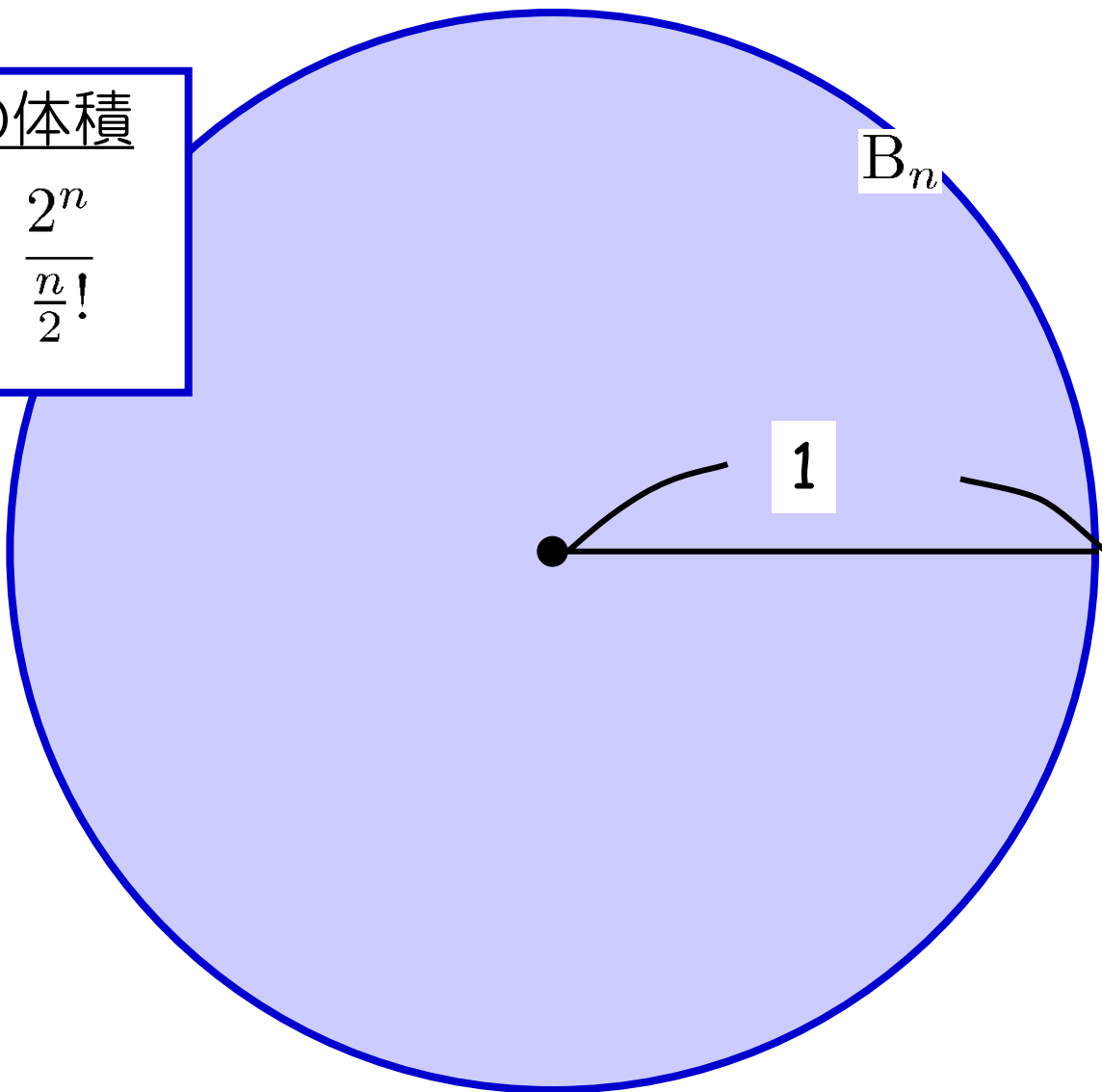


高次元の呪い – 球を例に

n 次元球 B_n の体積

n 次元ユークリッド球の体積

$$V(B_n) = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2} + 1)} < \frac{2^n}{\frac{n}{2}!}$$



高次元の呪い – 球を例に

n次元球 B_n の体積

n次元ユークリッド球の体積

$$V(B_n) = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2} + 1)} < \frac{2^n}{\frac{n}{2}!}$$

C_n 上の一様ランダムな点が B_n に入る確率

$$\frac{V(B_n)}{V(C_n)} = \frac{V(B_n)}{2^n} < \frac{1}{\frac{n}{2}!}$$

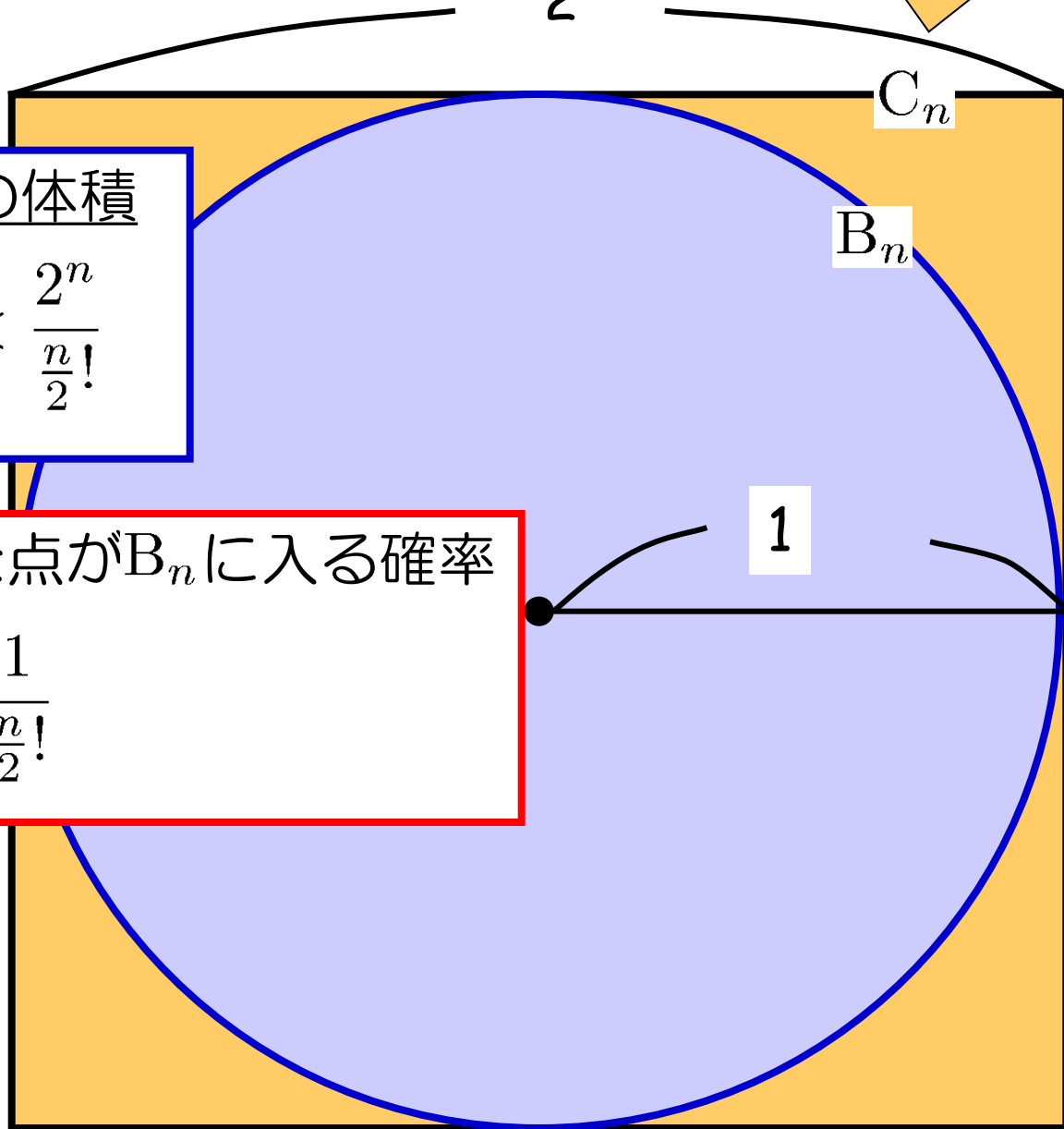
外接n次元超立方体

2

C_n

B_n

1



高次元の呪い – 球を例に

n次元球 B_n の体積

n次元ユークリッド球の体積

$$V(B_n) = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2} + 1)} < \frac{2^n}{\frac{n}{2}!}$$

C_n 上の一様ランダムな点が B_n に入る確率

$$\frac{V(B_n)}{V(C_n)} = \frac{V(B_n)}{2^n} < \frac{1}{\frac{n}{2}!}$$

$< 10^{-60}$ (n=100の時)

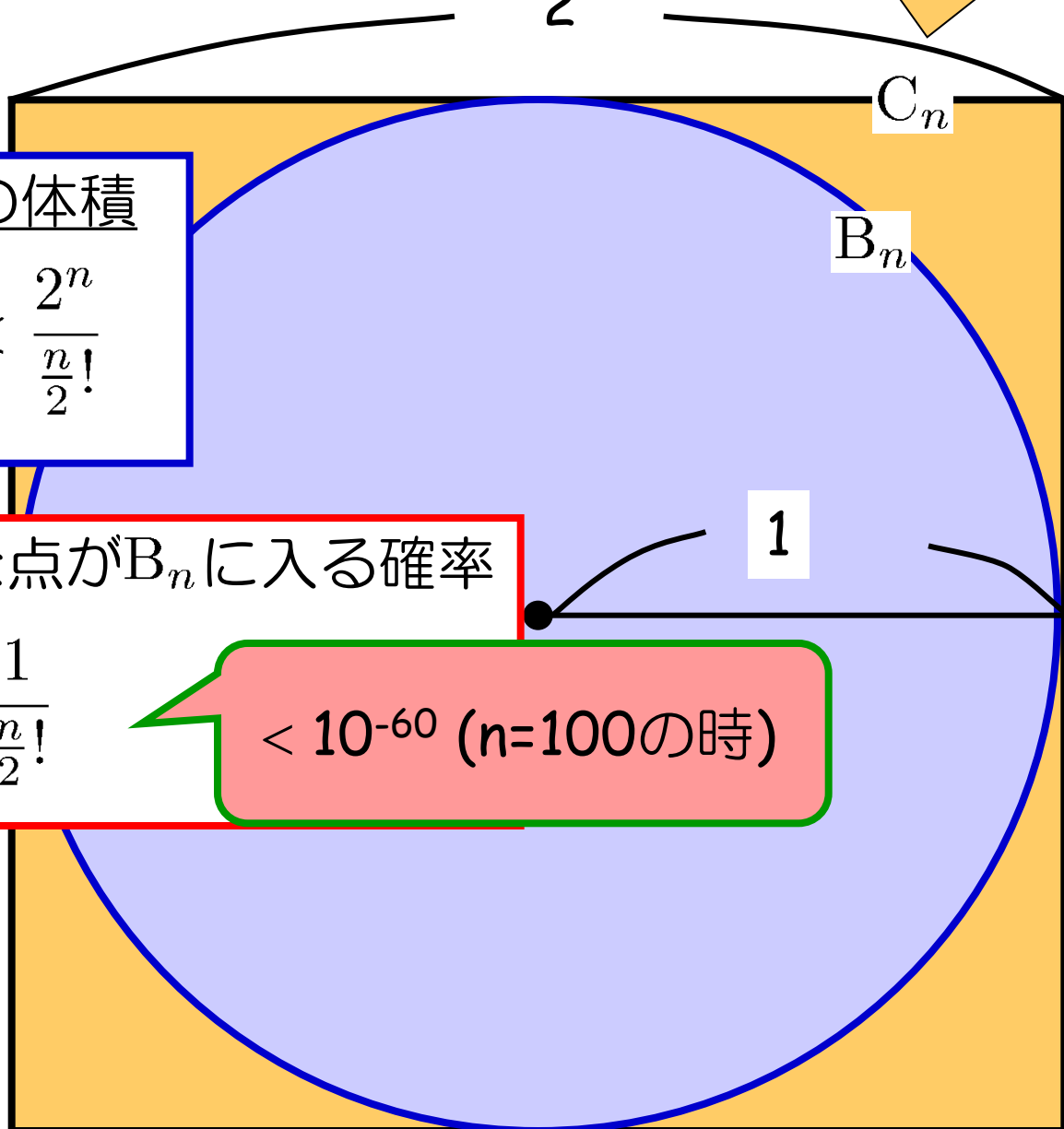
外接n次元超立方体

2

C_n

B_n

1



高次元の呪い – 球を例に

n 次元球 B_n の体積

n 次元ユークリッド球の体積

$$V(B_n) = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2} + 1)} < \frac{2^n}{\frac{n}{2}!}$$

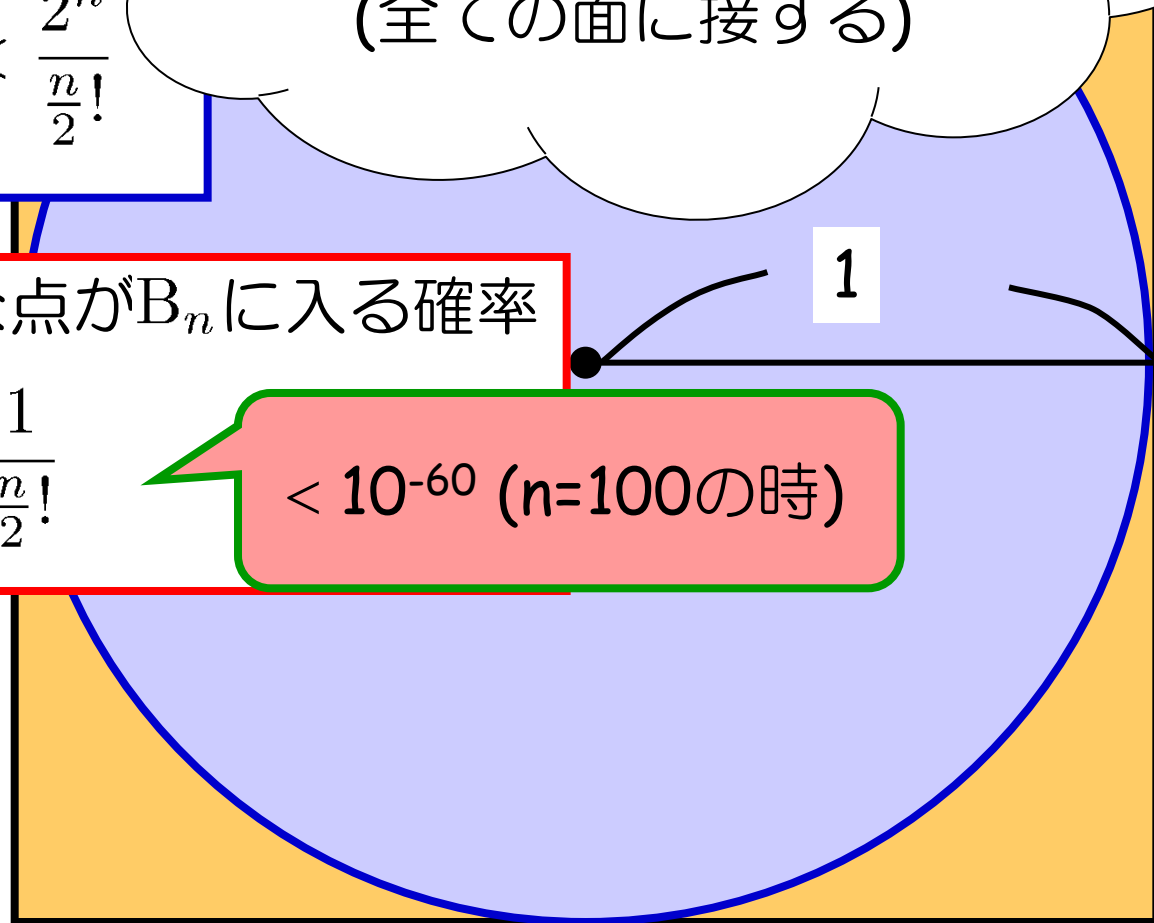
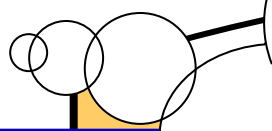
⇒ ふっくらした高次元体

- 
- C_n に内接する
(全ての面に接する)

C_n 上の一様ランダムな点が B_n に入る確率

$$\frac{V(B_n)}{V(C_n)} = \frac{V(B_n)}{2^n} < \frac{1}{\frac{n}{2}!}$$

$< 10^{-60}$ ($n=100$ の時)



高次元の呪い – 球を例に

n 次元球 B_n の体積

n 次元ユークリッド球の体積

$$V(B_n) = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma(\frac{n}{2} + 1)} < \frac{2^n}{\frac{n}{2}!}$$

⇒ ふっくらした高次元体

- 
- C_n に内接する
(全ての面に接する)

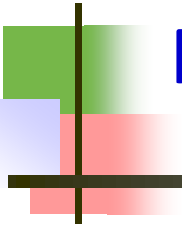
C_n 上の一様ランダムな点が B_n に入る確率

$$\frac{V(B_n)}{V(C_n)} = \frac{V(B_n)}{2^n} < \frac{1}{\frac{n}{2}!}$$

$< 10^{-60}$ ($n=100$ の時)

⇒ (素朴なモンテカルロ法では)

多項式時間での(近似)体積計算は困難！



Rejection sampling

Rejection sampling:

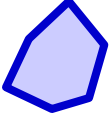
目標集合より広めに標本空間をとり, 条件に合致すれば採択

Importance Sampling:

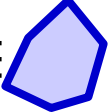
目標集合=標本空間 (を目指す)

Rejection sampling

Rejection sampling

 上の一様サンプリング

1. $X \in$  u..a.r.

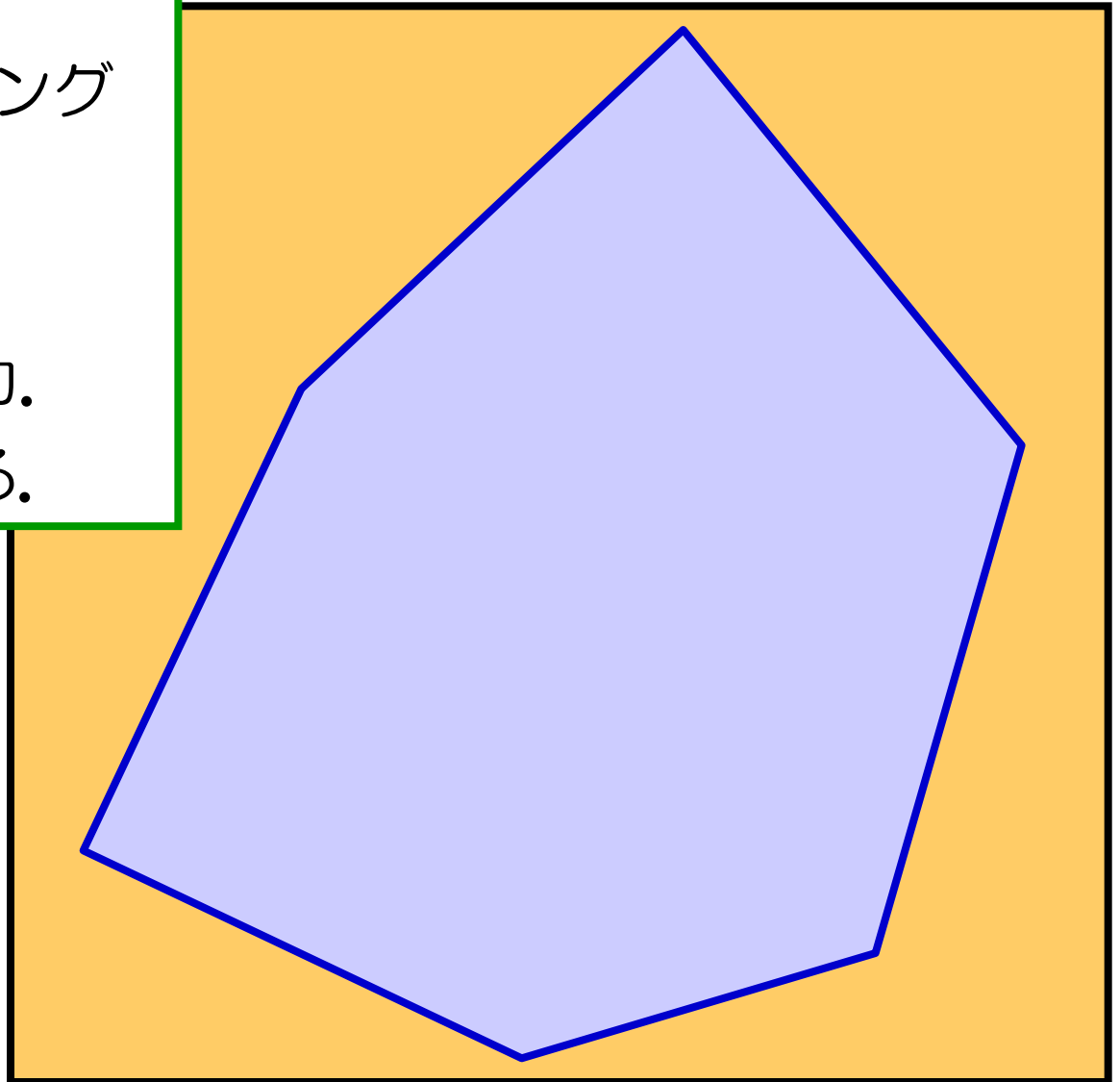
2. $X \in$  なら X を出力.

そうでなければ1に戻る.

命題

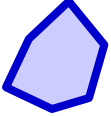
出力された X は

 上の一様標本.

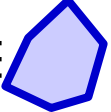


Rejection sampling

Rejection sampling

 上の一様サンプリング

1. $X \in$  u..a.r.

2. $X \in$  なら X を出力.
そうでなければ1に戻る.

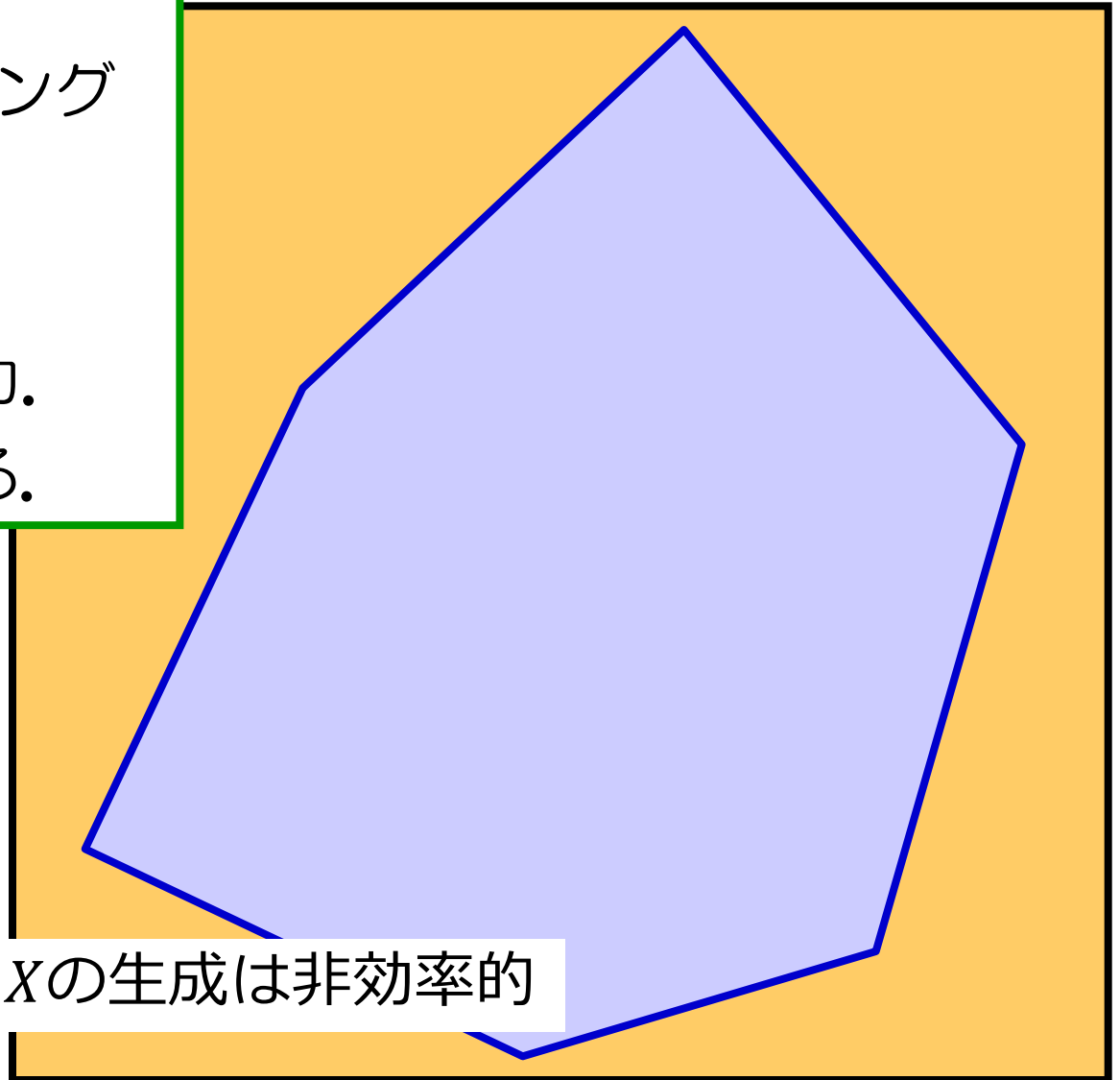
命題

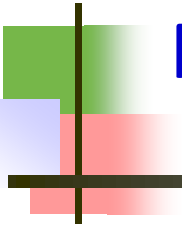
出力された X は

 上の一様標本.



次元が大きいと X の生成は非効率的





MCMC法

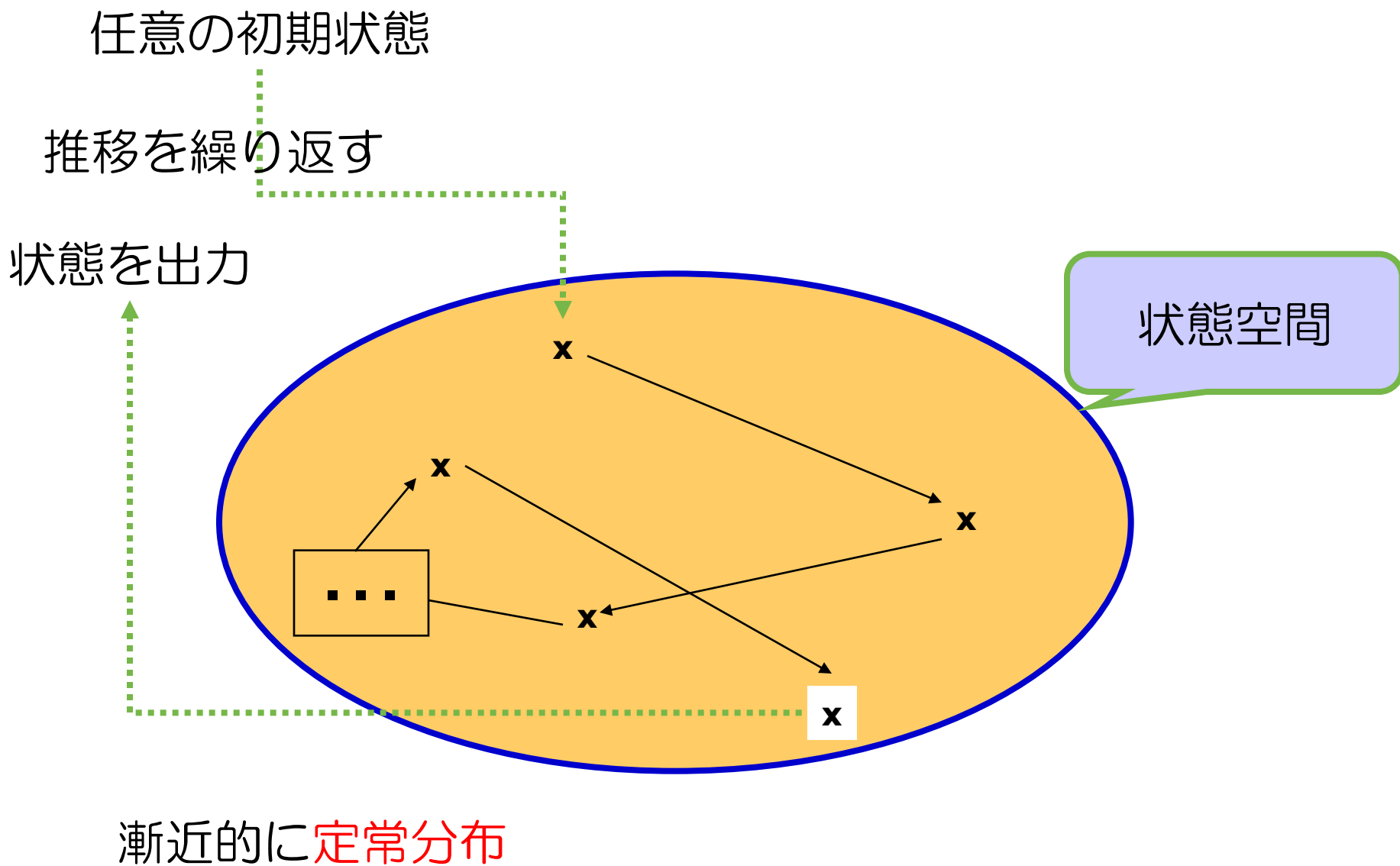
Rejection sampling:

目標集合より広めに標本空間をとり, 条件に合致すれば採択

Importance Sampling:

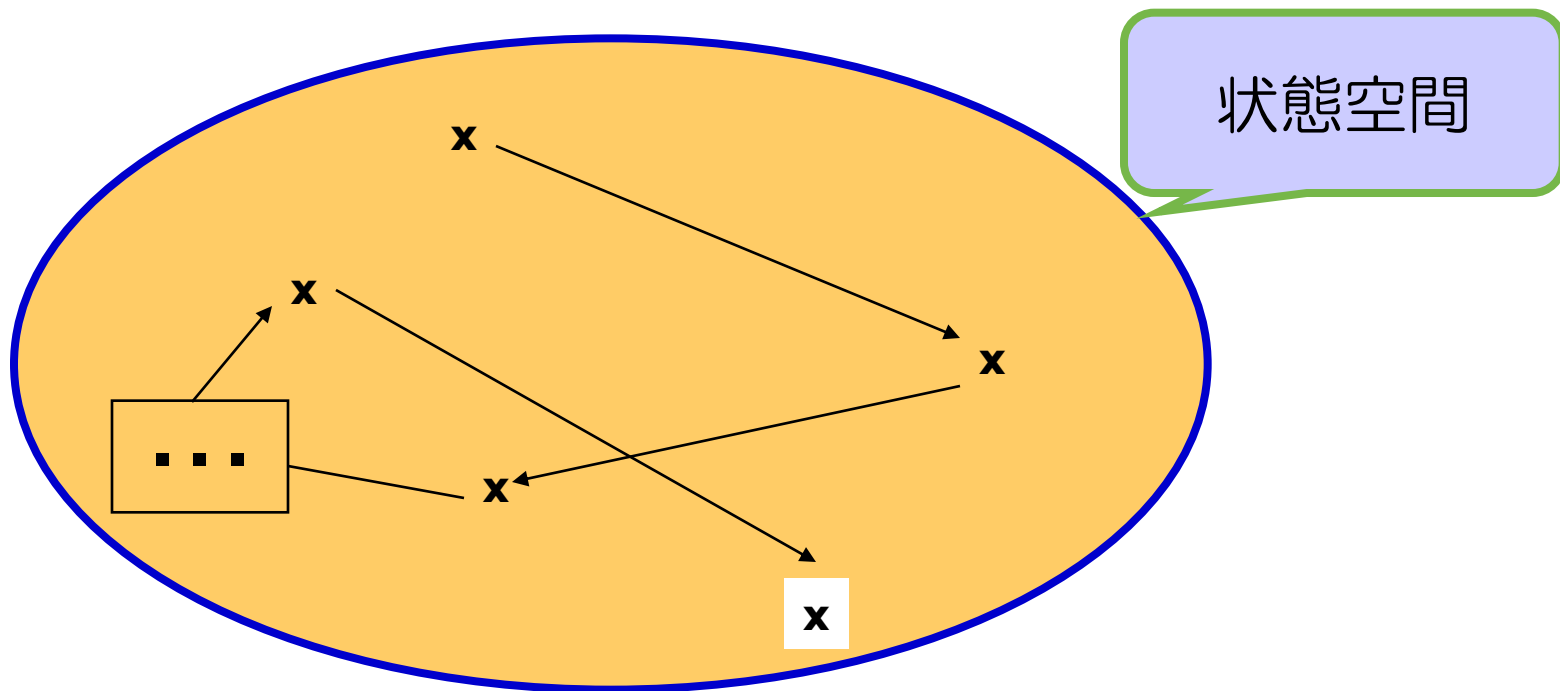
目標集合=標本空間 (を目指す)

マルコフ連鎖の極限分布



MCMC法のアイデア

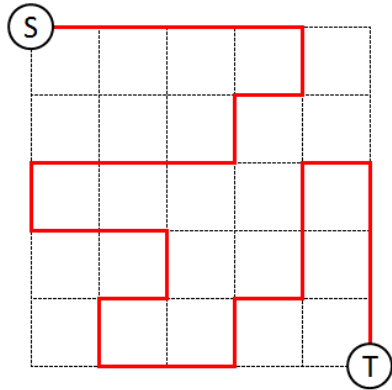
1. 所望の分布を定常分布にもつマルコフ連鎖を設計する.
2. 十分な回数推移させて, 定常分布からサンプリングする.



⇒ (漸近的に)所望の分布に従うサンプリングを実現

おねえさん問題

$n \times n$ 格子グラフ上で, 左上(s)から右下(t)を結ぶ,
s-t単純経路の総数を求めよ.



組み合わせの数え方
How to count combinations

画像引用：日本科学未来館,『フカシギの数え方』おねえさんといっしょ！
みんなで数えてみよう！, YouTube, 2012/9/10公開,
<https://www.youtube.com/watch?v=Q4gTV4r0zRs>

おねえさん問題 youtube

search

01

12

212

3184

48512

51262816

6575780564

7789360063252

83266598486981642

941044208702632496804

101568758030464750013214100

11182413291514248049241470885236

1264528039343270018963357185158482118

1369450664761521361664274701548907358996488

14227449714676812739631826459327989863387613323440

152266745568862672746374567396713098934866324885408319028

166874544560914993158763132489232824587945968099457285419306

176344814611237963971310297540795524404944398866480693646369387855336

181782112840842065129893384946652325275167838065704767655931452474605826692782532

1915233449717048799930807428103192969089945425553232329455577602986673735506059287756925844

20396289219982303756020729951713362502106339705739463771515237113377010682364035706704472064940398

2131374751050137102720420538137382214513103312193698723653061351991346433379389385793965576992246021316463868

22755970286667345339661519123315222619353103732072409481167391410479517925792743631234987038883317634987271171404439792

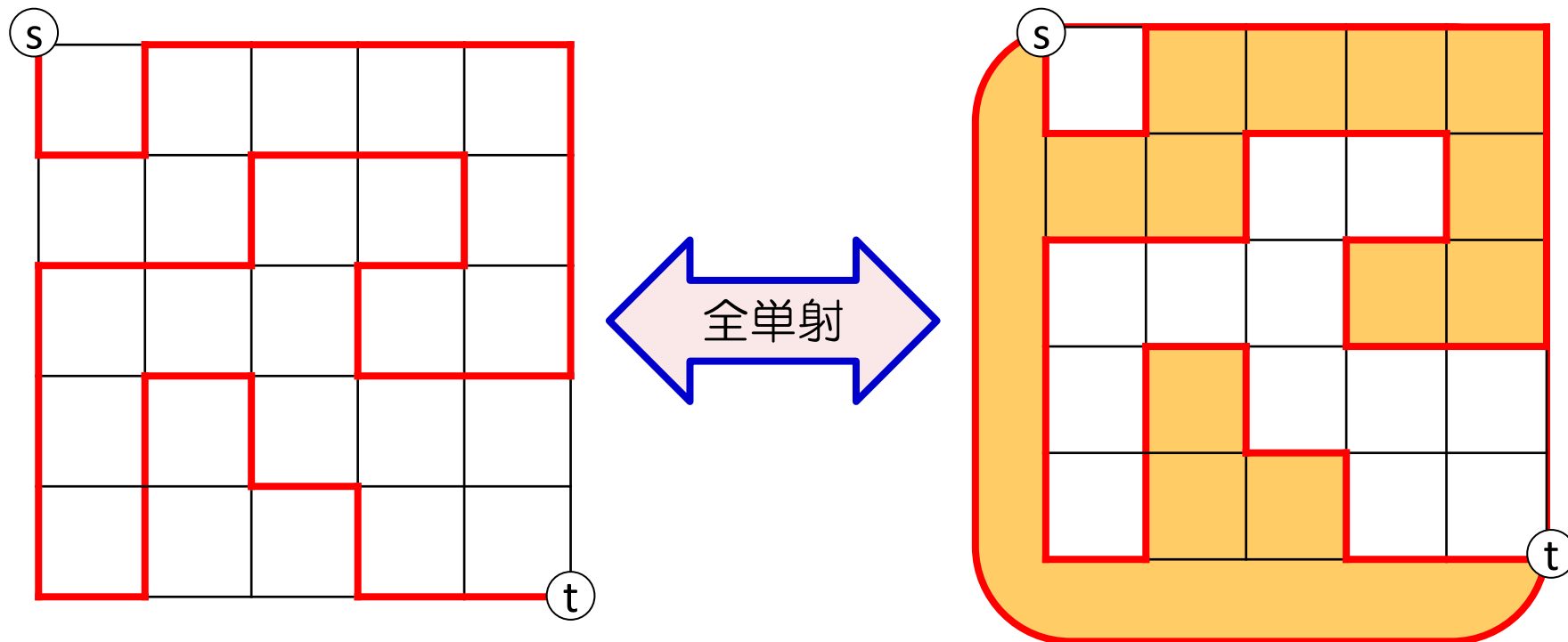
23554354293552374770099143184890614379306903799709643313325569586464840084073348855445663869240208757112420600854085134829333945720

2412371712321207064758338744862673570832373041989012943539678727080484951695515930485641394550792153037191858028212512280926600304581386791094

25840297485788113347100708374543680912729605429377538354982474262393702849789821525692917857708397096012625602506027316549718402106494049978375604247408

261736993158627927293117544042123649890037222958828814060466370372091034241327613476278921819349800610708296223143380491348290026771931129627708738890853908108906396

準備: 単純経路の表現



$s-t$ 単純経路

単連結な彩色

命題.

$$\begin{aligned}
 |\Omega| & (= |\{s-t \text{ 単純経路}\}|) \\
 & = |\{\text{単連結な彩色}\}|
 \end{aligned}$$

単連結な彩色のためのマルコフ連鎖

マルコフ連鎖 MC

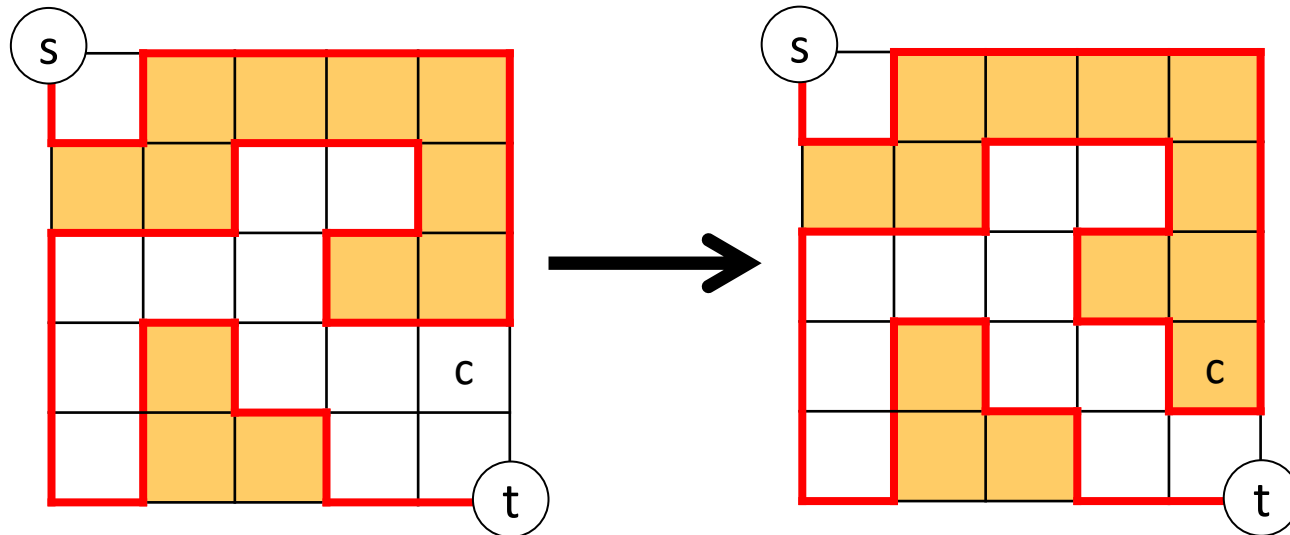
状態空間: Ξ_k ,

状態遷移: $X \rightarrow X'$:

Step 1. セル c を一様ランダムに選ぶ.

Step 2. $Y = X \oplus c$.

Step 3. もし $Y \in \Xi_k$ ならば $X' = Y$, そうでなければ $X' = X$.



単連結な彩色のためのマルコフ連鎖

マルコフ連鎖 MC

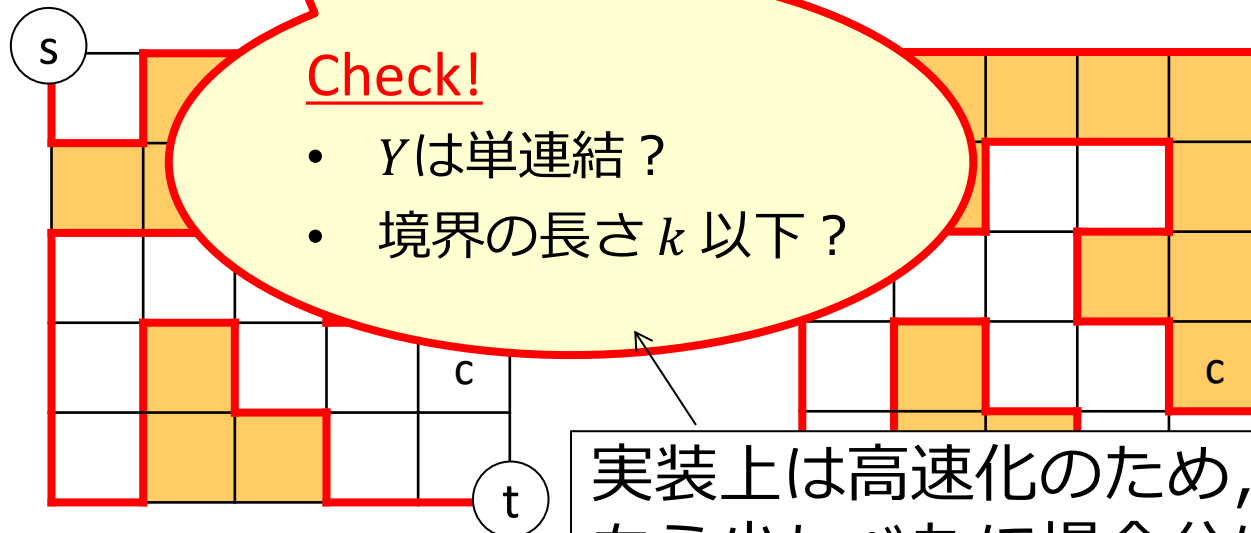
状態空間: Ξ_k ,

状態遷移: $X \rightarrow X'$:

Step 1. セル c を一様ランダムに選ぶ.

Step 2. $Y = X \oplus c$.

Step 3. もし $Y \in \Xi_k$ ならば $X' = Y$, そうでなければ $X' = X$.



実装上は高速化のため、
もう少しべたに場合分けする。

定理

マルコフ連鎖MCの**極限分布**は $\mathcal{E}_k$ 上の一様分布

証明の概略

- MCは**既約** ($\mathcal{E}_k$ 上の状態遷移グラフが**強連結**)
- MCは**非周期的**
- MCが**詳細釣り合いの式**を満たす.

$$\forall X, Y \in \mathcal{E}_k, \Pr(X \rightarrow Y) = \Pr(Y \rightarrow X)$$

[参考] MCMC設計のための基礎技術

- **既約で非周期的**な有限マルコフ連鎖は一意の定常分布をもつ.
- **詳細釣り合いの式**

$$\forall X, Y \in S, \Pr(X \rightarrow Y) = \Pr(Y \rightarrow X)$$

を満たす時, 定常分布は S 上の一様分布.

マルコフ連鎖モンテカルロ(MCMC)法で解いてみた

# steps of MC per sample	$\tau = 30$
# samples	$M = 10^7$

n	真の解*	近似解	実行時間
25	$8.40 * 10^{150}$	$8.55 * 10^{150}$	1h 27m
26	$1.74 * 10^{163}$	$1.78 * 10^{163}$	1h 33m
30	unknown	$2.09 * 10^{217}$	2h 4m
50	unknown	$6.35 * 10^{603}$	5h 44m
100	unknown	$6.07 * 10^{2415}$	23h 20m
200	unknown	$1.196 * 10^{9667}$	96h

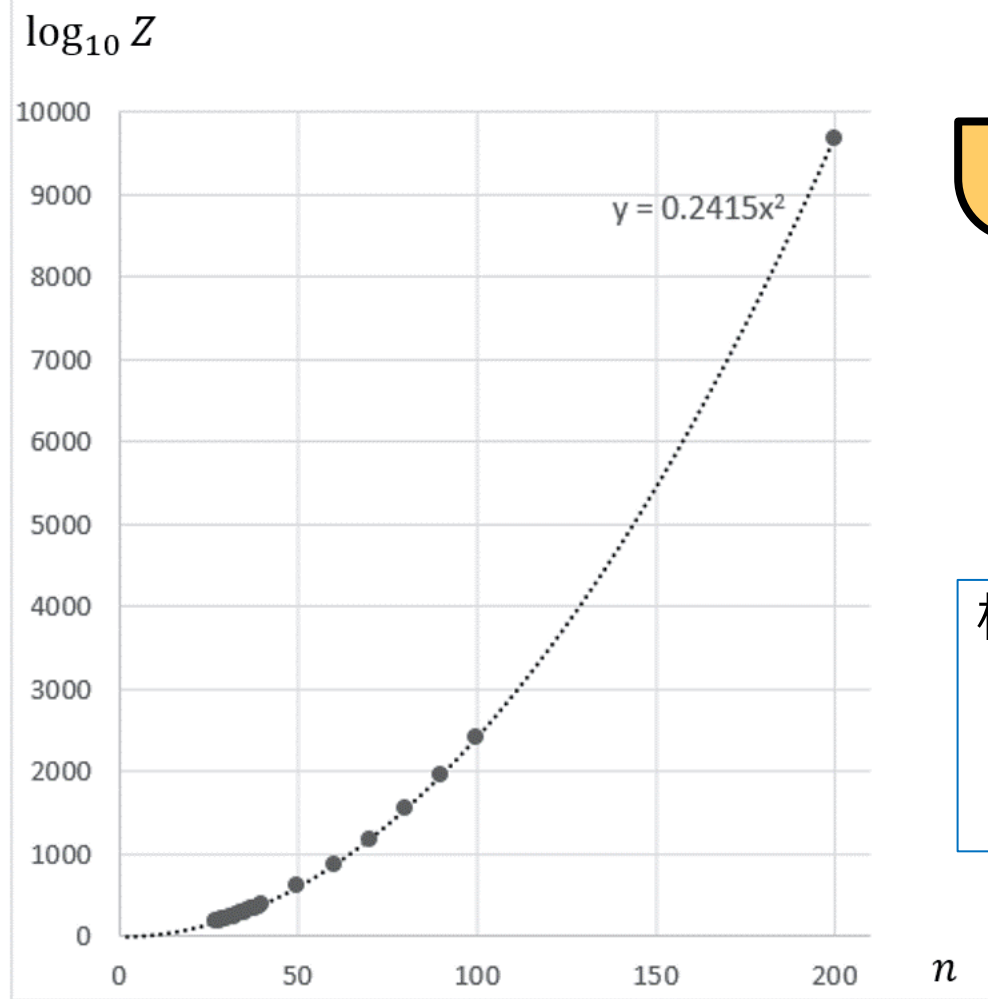
(approx. is the average of five trials)

おねえさんに教えてあげたい...

定理: $\sqrt{2}^{n^2} \leq |\Omega| \leq \sqrt{4}^{n^2}$ 43

経路の総数はおおよそ $10^{0.2415n^2} \simeq 1.744^{n^2}$ 個
(予想)

下界はもう少し改善
されている。



n と log₁₀ Z の関係

√3 予想

$$|\Omega| \geq \sqrt{3}^{n^2} = (1.732 \dots)^{n^2}$$

格子数 $n \times n$ における経路数 Z

： $n = 1 \sim 26$ の正しい経路数

： $n = 1 \sim 200$ の近似値

..... ： 放物線 $y = 0.2415x^2$

今後の課題

#単純経路 (a.k.a. self-avoiding walk)

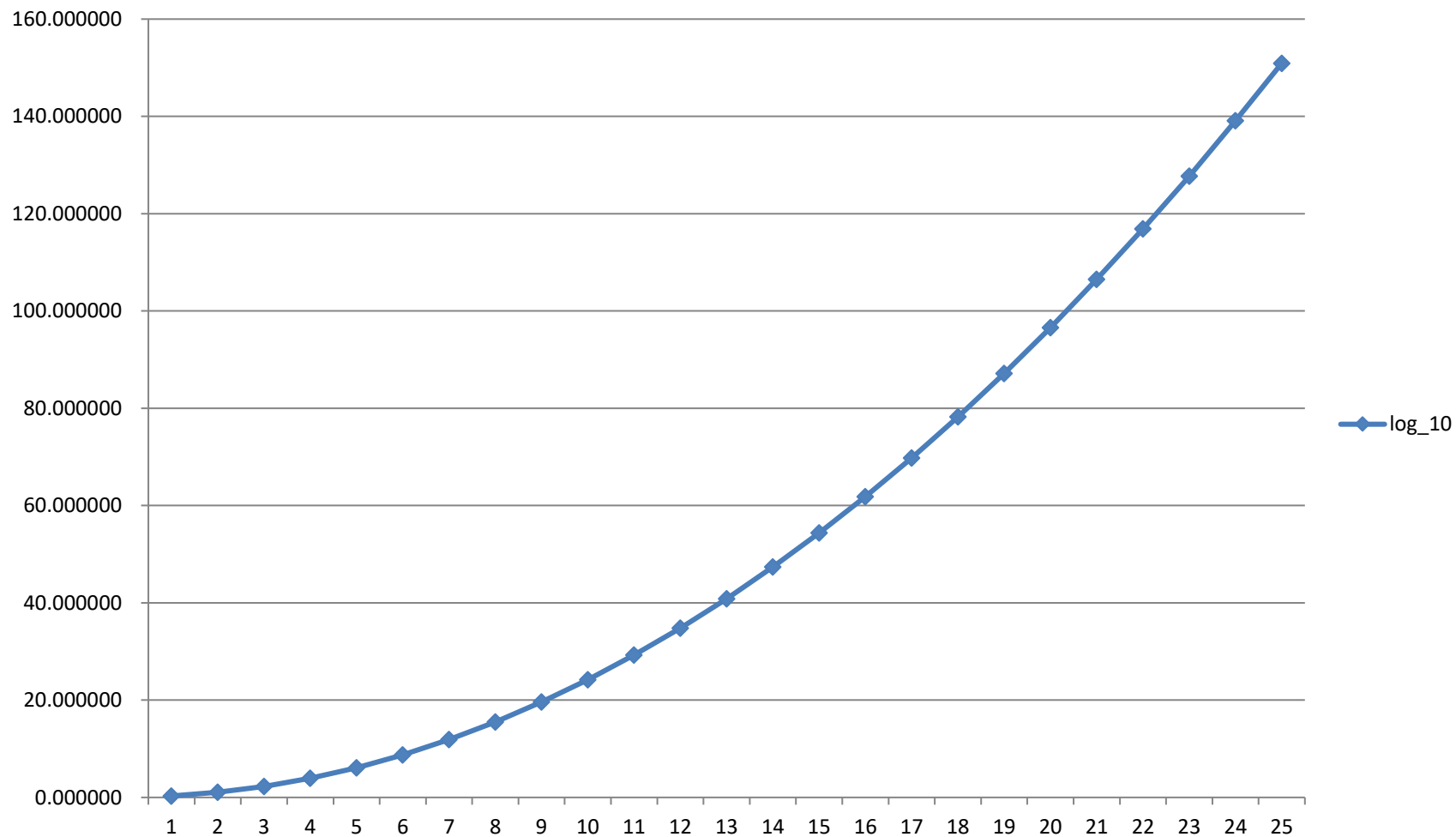
- MCの収束時間 (mixing time): $\text{poly}(n)$?
- 他の $\text{poly}(n)$ 時間(近似)アルゴリズム?
- $\sqrt{3}$ -予想
 - ✓ 下界: 1.628, 上界: 1.782, [Bousquet-Melos, Guttmann Jensen, 2005]
 - ✓ 漸近解 $1.744550 \simeq 10^{0.24168} \leftarrow$ 間違ってる?

参考資料1/3

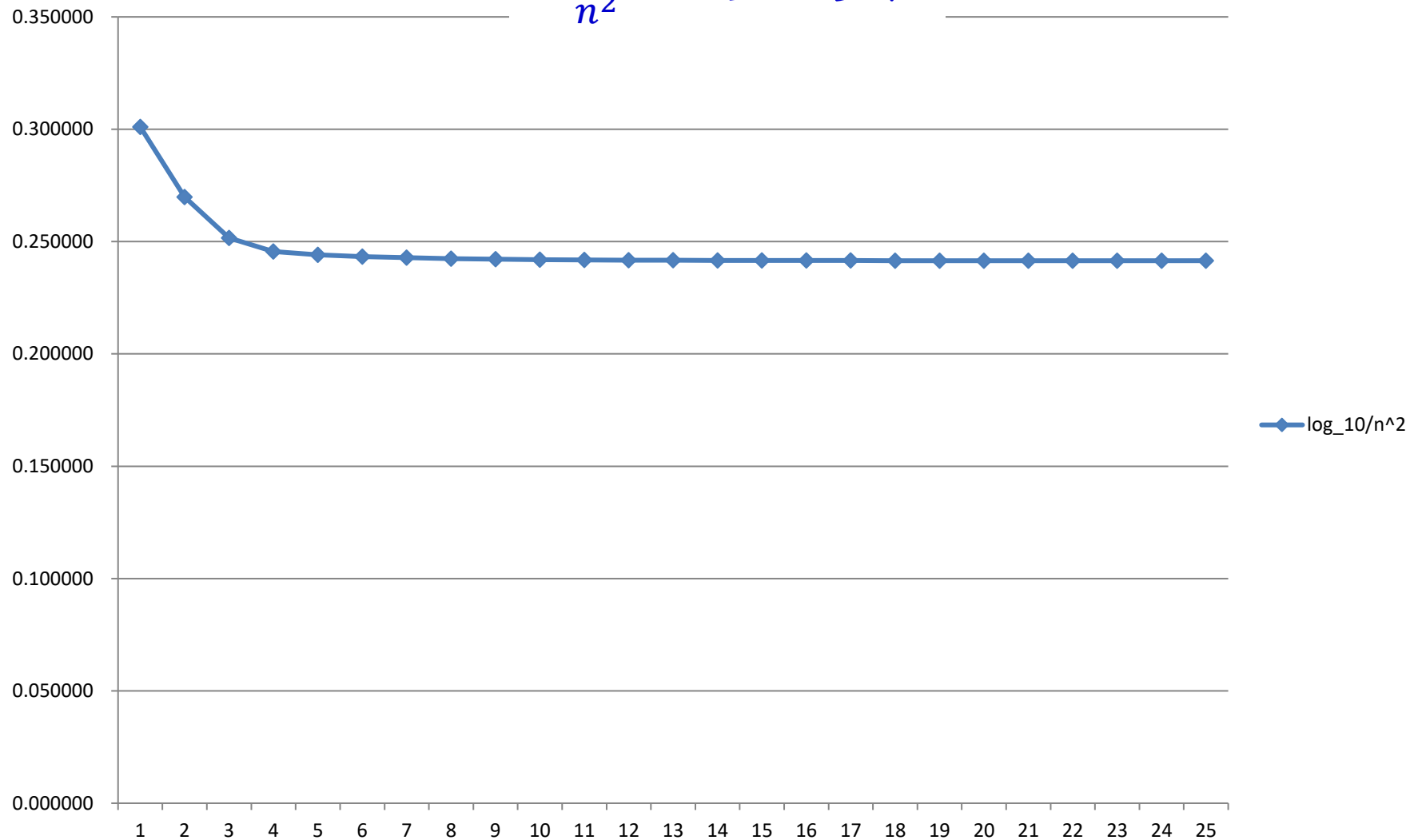
	$ \Omega $	$\log_{10} \Omega $	$\frac{\log_{10} \Omega }{n^2}$
1	2	0.301030	0.301030
2	12	1.079181	0.269795
3	184	2.264818	0.251646
4	8512	3.930032	0.245627
5	1262816	6.101340	0.244054
6	575780564	8.760257	0.243340
7	7.8936E+11	11.897275	0.242802
8	3.2666E+15	15.514096	0.242408
9	4.10442E+19	19.613252	0.242139
10	1.56876E+24	24.195556	0.241956
11	1.82413E+29	29.261056	0.241827
12	6.4528E+34	34.809748	0.241734
13	6.94507E+40	40.841676	0.241667
14	2.2745E+47	47.356885	0.241617
15	2.26675E+54	54.355403	0.241580

	$ \Omega $	$\log_{10} \Omega $	$\frac{\log_{10} \Omega }{n^2}$
16	6.87454E+61	61.837244	0.241552
17	6.34481E+69	69.802419	0.241531
18	1.78211E+78	78.250935	0.241515
19	1.52334E+87	87.182798	0.241504
20	3.96289E+96	96.598012	0.241495
21	3.1375E+106	106.496580	0.241489
22	7.5597E+116	116.878505	0.241485
23	5.5435E+127	127.743787	0.241482
24	1.2372E+139	139.092430	0.241480
25	8.403E+150	150.924433	0.241479

参考資料2/3

 $\log_{10}|\Omega|$ のプロット

参考資料3/3

 $\frac{\log_{10}|\Omega|}{n^2}$ のプロット

計算機科学のMCMC法

研究史

計算機科学のMCMC法

FPRAS

“Valiant計画” (since 1979)

#P困難な $A \in \mathbb{R}$ に対して, 近似解 $Z \in \mathbb{R}$ を精度

$$\Pr[(1 - \epsilon)A \leq Z \leq (1 + \epsilon)A] \geq 1 - \delta$$

で多項式時間($\text{poly}(\text{input}, \epsilon^{-1}, \log \delta^{-1})$)で求められるか?

Vijay Vazirani (PD at Harvard U.)

Mark Jerrum (PhD at U. Edinburgh in 1981)

Alistair Sinclair (PhD at U. Edinburgh in 1988)

Eric Vigoda (PhD at UC Berkeley in 1999)

MCMC法アプローチ

■ マルコフ連鎖の設計

➤ Detailed balance equation

■ サンプリング $\Rightarrow$ 数え上げ/積分

➤ Self-reducibility

□ 何回推移させれば定常分布か?

➤ Mixing timeの解析

計算機科学のMCMC法（パーマメント前）

1971, Cook, NP完全の提案

1971, Karp, 21のNP完全問題

1979, Valiant, 計算量クラス $\#P$ の提案

1979, Khachiyan, LP is in P（橢円体法）

1982, Aldous, カップリング法を応用したmixing time解析

1984, Valiant, PAC学習の提唱

1986, Jerrum, Valiant, Vazirani, 数え上げとランダムサンプリング

1987, Lovasz, d 次元凸体体積の決定性 1.999^d 近似不可能性

1989, Jerrum, Sinclair, mixing time 解析のためのコンダクタンス法

1989, Toda, $PH \subseteq P^{\#P}$

1991, Dyer, Frieze, Kannan, 凸体体積のFPRAS

1996, Propp, Wilson, 完璧サンプリング (cftp)

1997, Bubley, Dyer, mixing time解析のための経路カップリング法

2004, Jerrum, Sinclair, Vigoda, パーマメントのFPRAS

計算機科学のMCMC法（パーマメント後）

主要な未解決問題 (2004年ごろ)

- 森/マトロイド基
- 有限分配束/#BIS
- Tutte多項式

他にも

- #SAT
 - Isingモデル（反磁性）
 - Pottsモデル
 - 独立集合族
 - グラフ彩色
 - 凸体体積
 - S-t経路
 - 分割表
- などなど

計算機科学のMCMC法 (パーマメント後)

主要な未解決問題 (2025年ごろ)

- 森/マトロイド基 (FPRAS 2019)
- 有限分配束/#BIS
- Tutte多項式 (FPRAS不可?)

- ◆ Annealing
- ◆ Correlation decay
- ◆ Deterministic random walk
- ◆ FPTAS for #knapsack
- ◆ Holographic algorithm
- ◆ Log-concave polynomial
- ◆ Log-supermodular
- ◆ Many random walks
- ◆ Random walk on dynamic graphs

⋮

他にも

- #SAT
 - Isingモデル (反磁性)
 - Pottsモデル
 - 独立集合族
 - グラフ彩色
 - 凸体体積
 - S-t経路
 - 分割表
- などなど

マトロイド基

講義計画

1. 計算機科学 (月曜日)

- 多項式時間計算量
- サンプルングから近似数え上げ

2. Coupling (火曜日、水曜日前半)

- マルコフ連鎖の定常分布
- 定常分布への収束性 (coupling法)
- Couplingとmixing time

3. Conductance (水曜日、木曜日)

- 定常分布への収束性 (固有値)
- Multi commodity flowとmixing time
- 二部グラフの完全マッチングの近似数え上げ

4. 研究紹介 (金曜日)

例題紹介

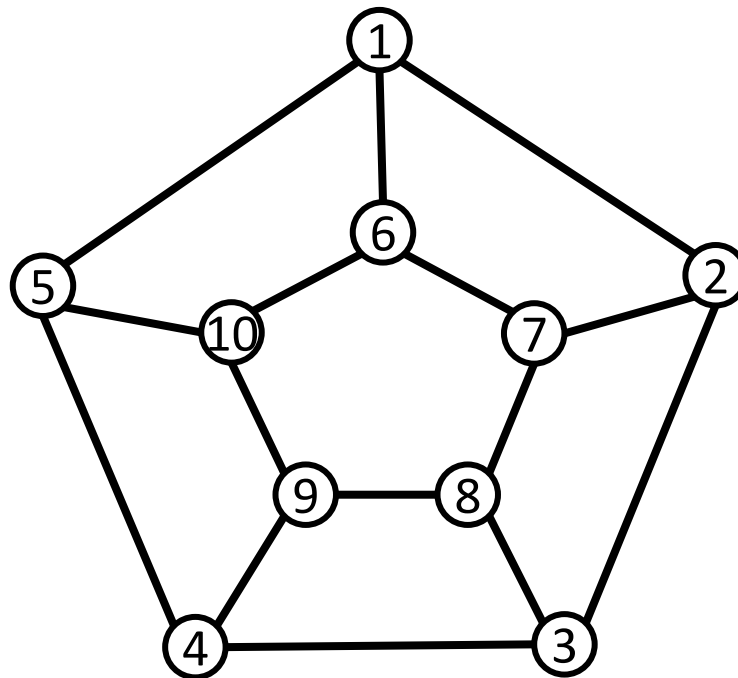
1. グラフ彩色
2. 二分分割表
 - $m \times n$ 分割表
 - $2 \times n$ 分割表
3. 二部マッチング
4. 森
5. 独立集合
 - 一般グラフ
 - 二部グラフ
6. イデアル/down set
7. 高次元凸体体積

グラフ彩色

隣り合う頂点の色は異なる

入力: グラフ $G = (V, E)$

問題: G の k 色以下の**彩色**のやり方は何通りあるか？

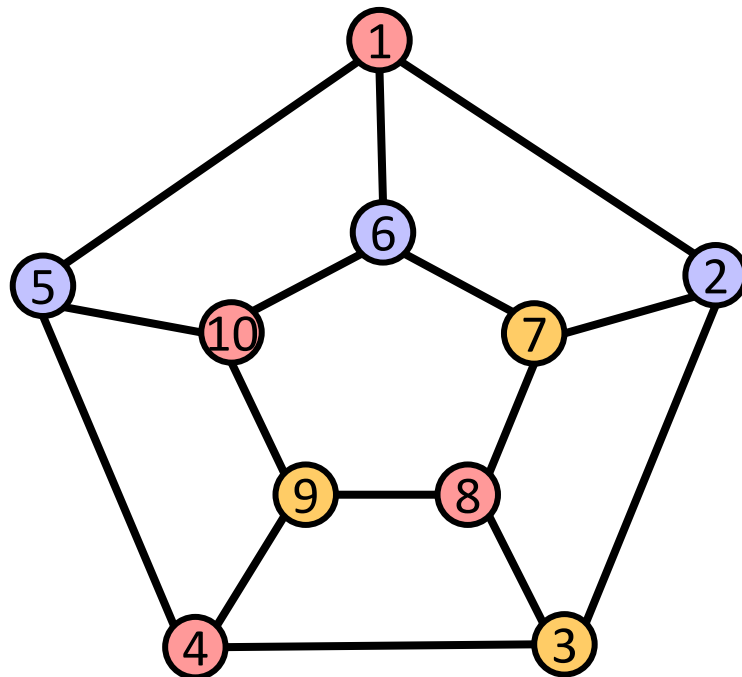


グラフ彩色

隣り合う頂点の色は異なる

入力: グラフ $G = (V, E)$

問題: G の k 色以下の彩色のやり方は何通りあるか？

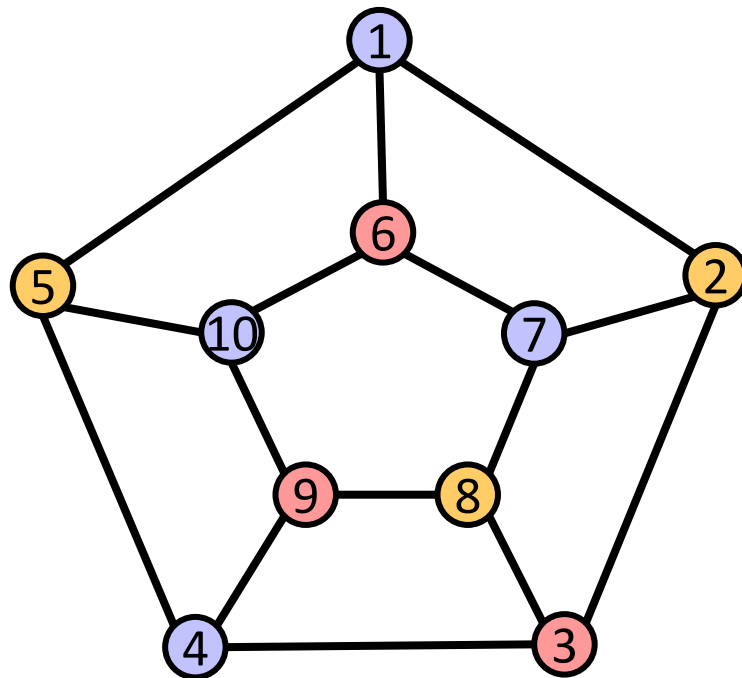


グラフ彩色

隣り合う頂点の色は異なる

入力: グラフ $G = (V, E)$

問題: G の k 色以下の**彩色**のやり方は何通りあるか？



二元分割表

二元分割表

- ✓ 各セルには非負整数が入る
- ✓ (与えられた) 周辺和を満たす

				7
				4
				9
5	5	5	5	20

5	2	0	0	7
0	3	1	0	4
0	0	4	5	9
5	5	5	5	20

分割表A

3	0	1	3	7
1	0	2	1	4
1	5	2	1	9
5	5	5	5	20

分割表B

1	3	1	2	7
1	1	1	1	4
3	1	3	2	9
5	5	5	5	20

分割表C

問題

入力: 周辺和

出力: 分割表は何通り存在するか？

未解決

2行分割表のランダム生成

二元分割表

- ✓ 各セルには非負整数が入る
- ✓ (与えられた) 周辺和を満たす

						12
						18
5	4	3	7	5	6	30

5	4	3	0	0	0	12
0	0	0	7	5	6	18
5	4	3	7	5	6	30

状態A

4	3	1	3	1	0	12
1	1	2	4	4	6	18
5	4	3	7	5	6	30

状態B

0	0	0	1	5	6	12
5	4	3	6	0	0	18
5	4	3	7	5	6	30

状態C

問題

入力: 周辺和

出力: 分割表は何通り存在するか？

- 1996年Gödel prize
- 2004年解決 (Fulkerson Prize)

Bipartite matching

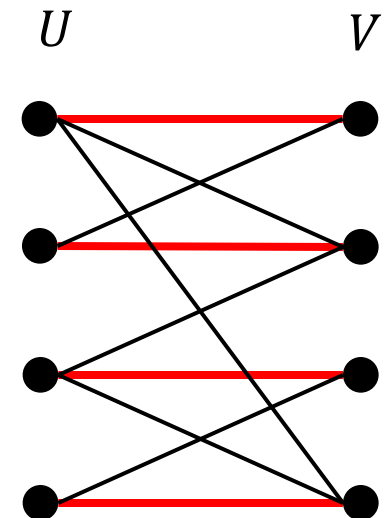
□ 二部グラフ: $G = (U, V; E)$. $|E| = m$ とする.

- 完全マッチングを考えるときは $|U| = |V| = n$ とする.

□ マッチング: $\mathcal{M} = \{M \subseteq E \mid \forall e, f \in M \ (e \neq f), e \cap f = \emptyset\}$

- サイズ k マッチング: $\mathcal{M}_k = \{M \mid |M| = k\}$; $\mathcal{M} = \bigcup_{k=0}^n \mathcal{M}_k$
- 完全マッチング: $\mathcal{P} = \mathcal{M}_n$

**Q. 二部グラフの完全マッチングの個数を求める
FPRASは存在するか? (1979~2004)**



- 1996年Gödel prize
- 2004年解決 (Fulkerson Prize)

Bipartite matching

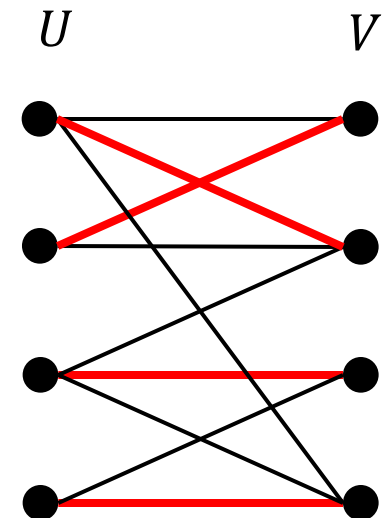
□ 二部グラフ: $G = (U, V; E)$. $|E| = m$ とする.

- 完全マッチングを考えるときは $|U| = |V| = n$ とする.

□ マッチング: $\mathcal{M} = \{M \subseteq E \mid \forall e, f \in M \ (e \neq f), e \cap f = \emptyset\}$

- サイズ k マッチング: $\mathcal{M}_k = \{M \mid |M| = k\}$; $\mathcal{M} = \bigcup_{k=0}^n \mathcal{M}_k$
- 完全マッチング: $\mathcal{P} = \mathcal{M}_n$

**Q. 二部グラフの完全マッチングの個数を求める
FPRASは存在するか? (1979~2004)**



- 1996年Gödel prize
- 2004年解決 (Fulkerson Prize)

Bipartite matching

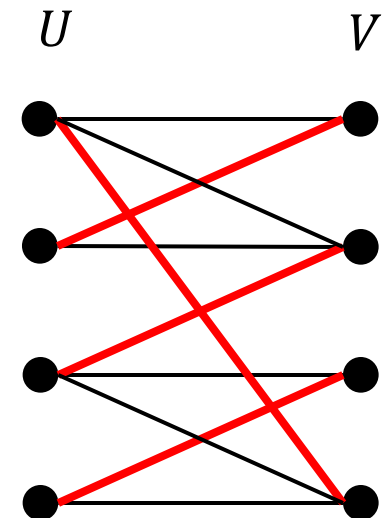
□ 二部グラフ: $G = (U, V; E)$. $|E| = m$ とする.

- 完全マッチングを考えるときは $|U| = |V| = n$ とする.

□ マッチング: $\mathcal{M} = \{M \subseteq E \mid \forall e, f \in M \ (e \neq f), e \cap f = \emptyset\}$

- サイズ k マッチング: $\mathcal{M}_k = \{M \mid |M| = k\}$; $\mathcal{M} = \bigcup_{k=0}^n \mathcal{M}_k$
- 完全マッチング: $\mathcal{P} = \mathcal{M}_n$

**Q. 二部グラフの完全マッチングの個数を求める
FPRASは存在するか? (1979~2004)**

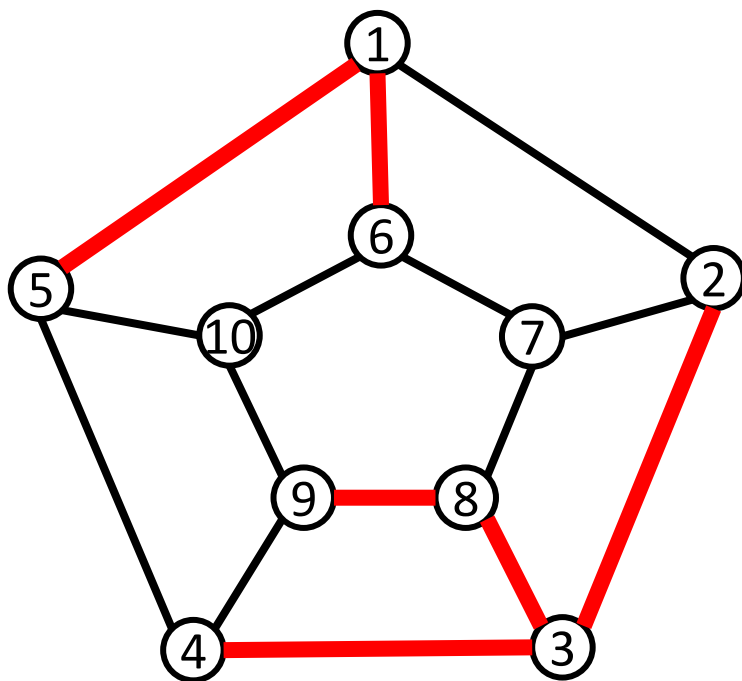


森の数え上げ

2019年解決 (STOC 2019 best paper)

入力: グラフ $G = (V, E)$

問題: G に含まれる森は何通りあるか？

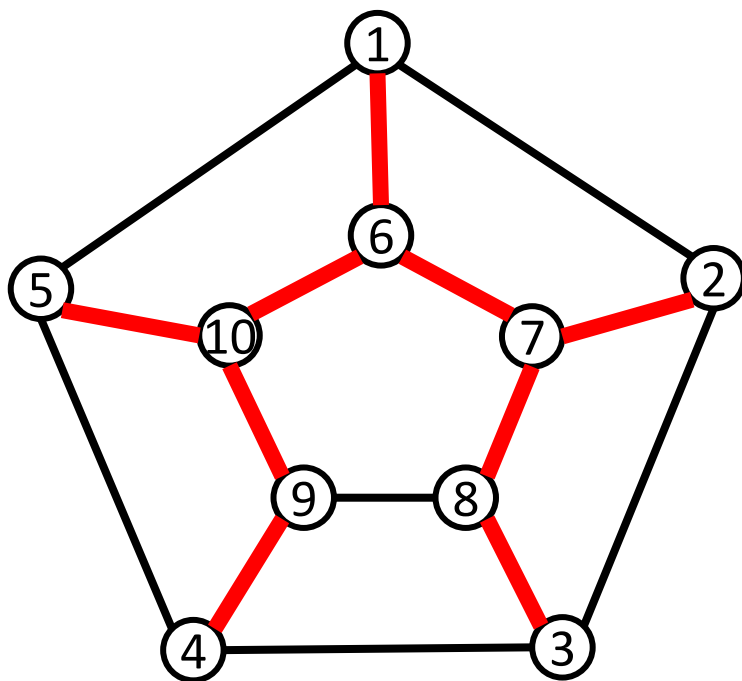


森の数え上げ

2019年解決 (STOC 2019 best paper)

入力: グラフ $G = (V, E)$

問題: G に含まれる森は何通りあるか？



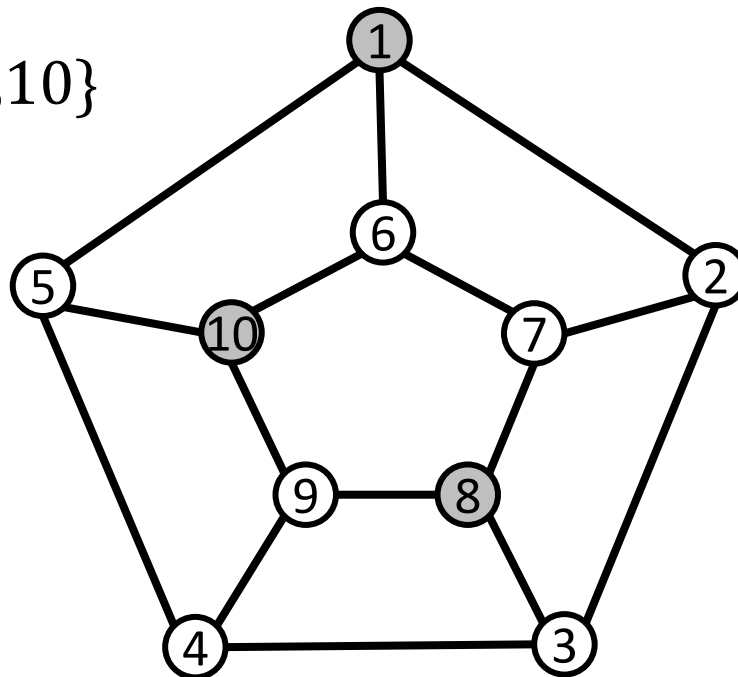
グラフの独立集合

入力: グラフ $G = (V, E)$

問題: G の独立集合は何通りあるか？

独立集合 (independent set) $X \subseteq V$: X の要素同士が隣り合ってはいけない.

$$X = \{1, 8, 10\}$$



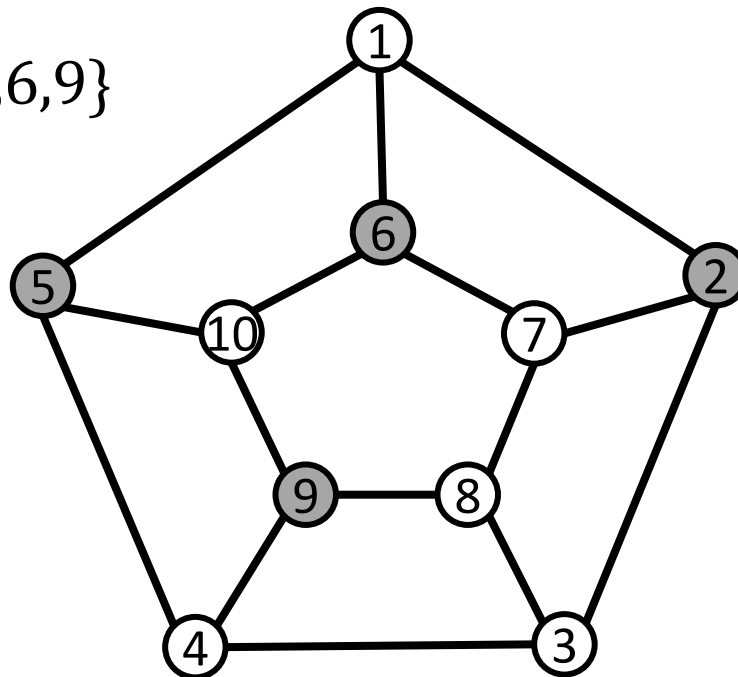
グラフの独立集合

入力: グラフ $G = (V, E)$

問題: G の独立集合は何通りあるか？

独立集合 (independent set) $X \subseteq V$: X の要素同士が隣り合ってはいけない.

$$X = \{2, 5, 6, 9\}$$



二部グラフの独立集合

#BIS (未解決)

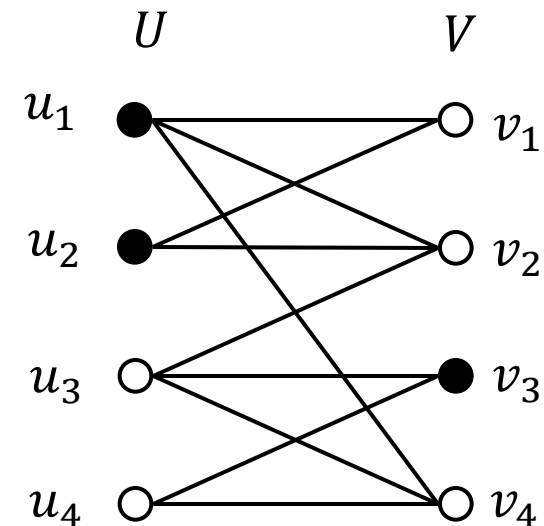
Bipartite independent set (#BIS)

入力: 二部グラフ $G = (U, V; E)$

問題: G の独立集合は何通りあるか?

独立集合 (independent set) $X \subseteq V$: X の要素同士が隣り合ってははいけない.

$$X = \{u_1, u_2, v_3\}$$



二部グラフの独立集合

#BIS (未解決)

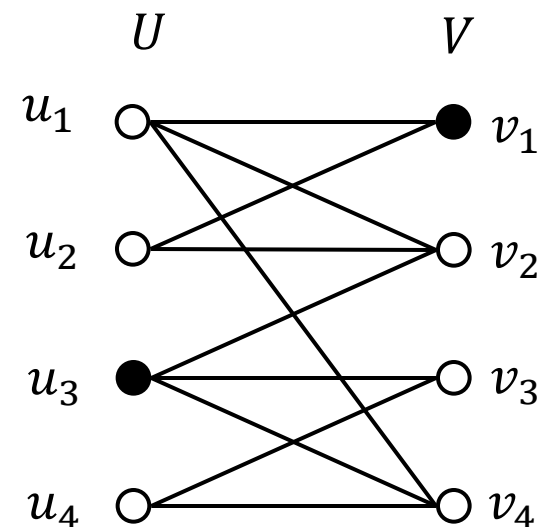
Bipartite independent set (#BIS)

入力: 二部グラフ $G = (U, V; E)$

問題: G の独立集合は何通りあるか？

独立集合 (independent set) $X \subseteq V$: X の要素同士が隣り合ってはいけない。

$$X = \{u_3, v_1\}$$



イデアル数え上げ

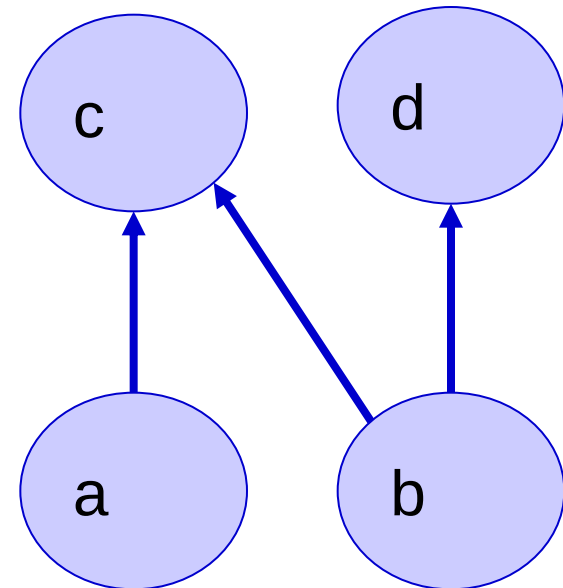
#BIS (未解決)

入力: 半順序集合 $P = (V, \leq)$

問題: G のイデアルは何通りあるか?

$X (\subseteq P)$ が poset P の イデアル

$\Leftrightarrow [x \in X, y \leq x \Rightarrow y \in X]$ を満たす



反順序集合

イデアル数え上げ

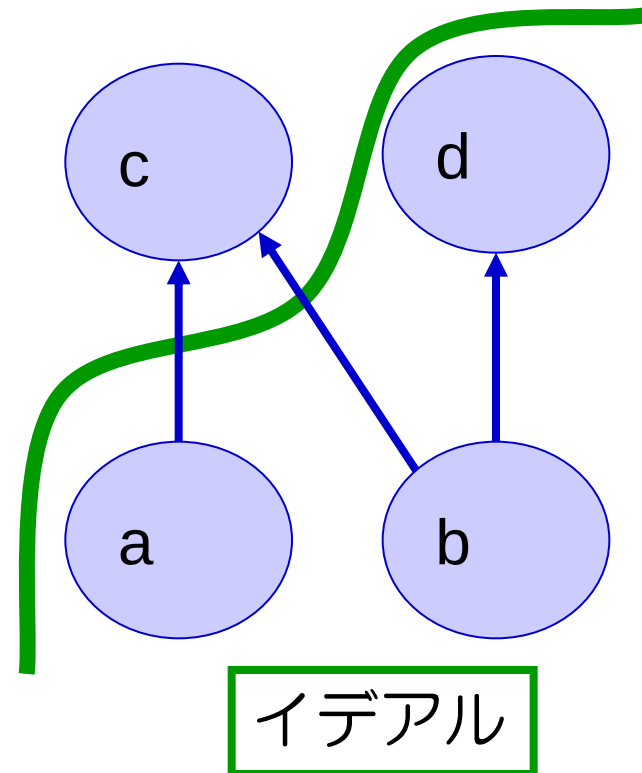
#BIS (未解決)

入力: 半順序集合 $P = (V, \leq)$

問題: G のイデアルは何通りあるか?

$X (\subseteq P)$ が poset P の イデアル

$\Leftrightarrow [x \in X, y \leq x \Rightarrow y \in X]$ を満たす



イデアル数え上げ

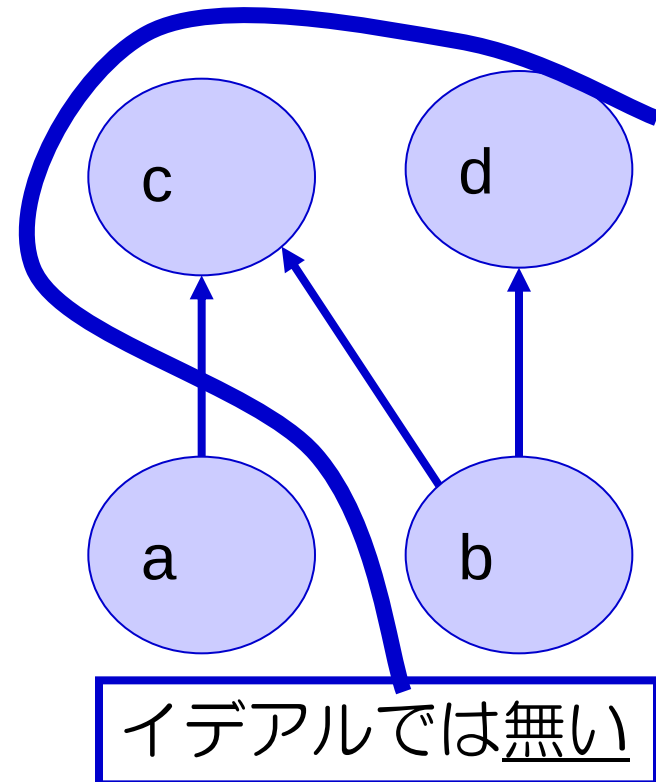
#BIS (未解決)

入力: 半順序集合 $P = (V, \leq)$

問題: G のイデアルは何通りあるか?

$X (\subseteq P)$ が poset P の イデアル

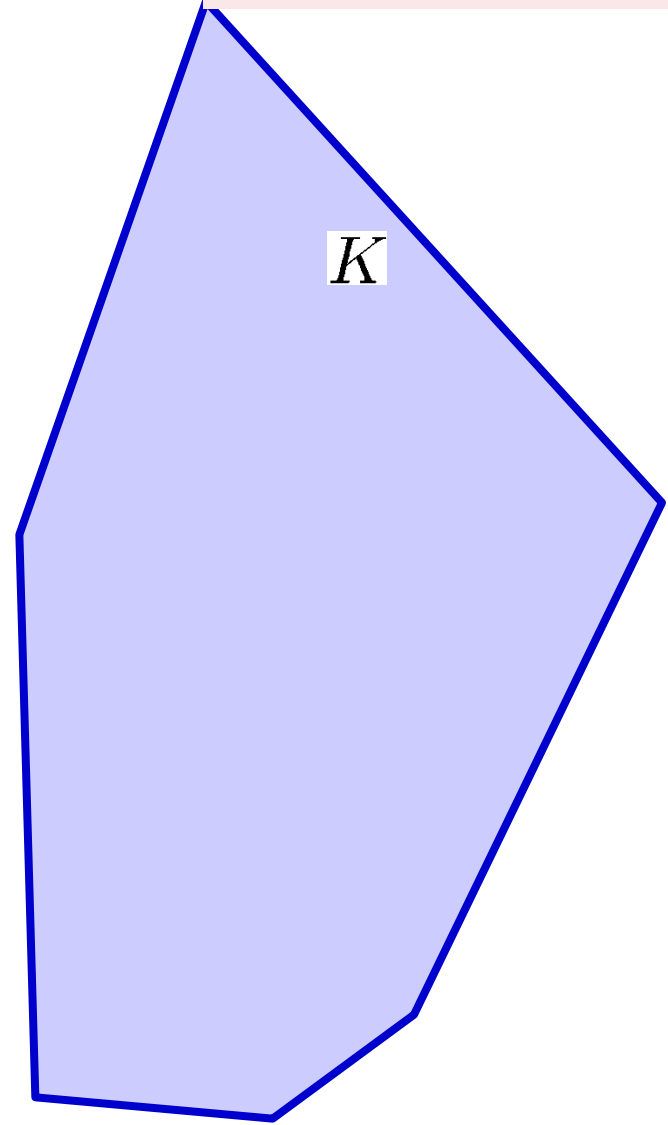
$\Leftrightarrow [x \in X, y \leq x \Rightarrow y \in X]$ を満たす



問題: 高次元凸体の体積計算

K : n 次元凸体

体積 $V(K)$ を計算



計算機科学のMCMC法

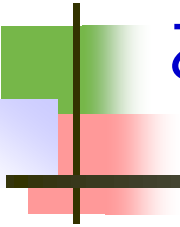
FPRAS

“Valiant計画” (since 1979)

#P困難な $A \in \mathbb{R}$ に対して, 近似解 $Z \in \mathbb{R}$ を精度

$$\Pr[(1 - \epsilon)A \leq Z \leq (1 + \epsilon)A] \geq 1 - \delta$$

で多項式時間($\text{poly}(\text{input}, \epsilon^{-1}, \log \delta^{-1})$)で求められるか?



おわり

日本語の解説

□ 羊数え問題, 高次元体積

来嶋秀治, 乱択と計算, 応用数理, 27:3 (2017), 15--23.

https://doi.org/10.11540/bjsiam.27.3_15

□ おねえさん問題

来嶋秀治, 計算機科学のMCMC法, 数理科学, サイエンス社, 2023年3月号, 51--57.

□ 完璧サンプリング

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, 50-3 (2005), 169--174, 264--269, 329--334.

- 第一話 遥かなる過去から,

https://orsj.org/wp-content/or-archives50/pdf/bul/Vol.50_03_169.pdf

- 第二話 天と地の狭間で,

https://orsj.org/wp-content/or-archives50/pdf/bul/Vol.50_04_264.pdf

- 第三話 終わりある未来,

https://orsj.org/wp-content/or-archives50/pdf/bul/Vol.50_05_329.pdf

□ 増えるクーポン収集

来嶋秀治, 清水伸高, 白髪丈晴, 動的グラフ上のランダムウォーク, 応用数理, 32:1 (2022), 5--15.

https://doi.org/10.11540/bjsiam.32.1_5

原著論文

□ 完璧サンプリング

Shuji Kijima and Tomomi Matsui, **Polynomial time perfect sampling algorithm for two-rowed contingency tables**, Random Structures & Algorithms, 29:2 (2006), 243--256.

<https://doi.org/10.1002/rsa.20087>

□ 羊数え

Masatora Ogata, Yukiko Yamauchi, Shuji Kijima and Masafumi Yamashita, **A randomized algorithm for finding frequent elements in streams using $O(\log \log N)$ space**, Lecture Notes in Computer Science, 7074 (ISAAC 2011), 514--523. https://doi.org/10.1007/978-3-642-25591-5_53

□ 高次元体積

Ei Ando and Shuji Kijima, **An FPTAS for the volume computation of 0-1 knapsack polytopes based on approximate convolution**, Algorithmica, 76:4 (2016), 1245--1263.

<https://doi.org/10.1007/s00453-015-0096-5>

□ Deterministic Random Walk

Takeharu Shiraga, Yukiko Yamauchi, Shuji Kijima and Masafumi Yamashita, **Deterministic random walks for rapidly mixing chains**, SIAM Journal on Discrete Mathematics, 32:3 (2018), 2180--2193.

<https://doi.org/10.1137/16M1087667>.

□ 増えるクーポン収集

Shuji Kijima, Nobutaka Shimizu, Takeharu Shiraga, **How many vertices does a random walk miss in a network with a moderately increasing number of vertices?**, Mathematics of Operations Research, to appear. <https://doi.org/10.1287/moor.2023.0060>.