局所情報を利用するグラフ上のランダムウオークの mixing time について

野中 良哲 [*]　　小野 廣隆 [†]　　山下 雅史 [†]
[*] 九州大学大学院システム情報科学府　　[†] 九州大学大学院システム情報科学研究院

概 要

グラフ $G = (V, E)$ 上のランダムウォークとは，グラフ上の頂点をトークンがランダムに遷移するモデルである．すべての隣接頂点へ等確率で遷移するランダムウォークは標準ランダムウォークと呼ばれる．一方，グラフの局所情報を利用することでランダムウォークの hitting time および cover time を高速化する試みとして，隣接頂点の次数を用いたランダムウォークが池田らによって提案されている [3]．本稿ではこれらのランダムウォークの mixing time の解析を行なう．

1　準備

1.1　グラフ上のランダムウォーク

グラフ $G = (V, E)$ について，$|V| = n, |E| = m$ とする．また，頂点 u に隣接する頂点の集合を $N(u)$ で表し，そのサイズ $|N(u)|$ を u の次数として d_u と書くことにする．

グラフ G 上のランダムウォークとはグラフ上の頂点をトークンが遷移確率行列 $P = (p_{uv})_{u,v \in V}$ にしたがってランダムに遷移していくモデルである．すべての隣接頂点に対して等確率で遷移するランダムウォークを標準ランダムウォークと呼ぶ．

定義 1.1 (標準ランダムウォーク)

$$p_{uv} = \begin{cases} \frac{1}{d_u} & v \in N(u), \\ 0 & otherwise. \end{cases}$$

標準ランダムウォークでは hitting time および cover time がそれぞれ $O(nm) = O(n^3)$ であることが知られている [1, 2]．ここで，hitting time とはある頂点から出発したトークンが別のある頂点へ到達するまでに要する遷移数の期待であり，cover time とは，ある頂点を出発したトークンが全ての頂点を訪問するために要した遷移数の期待地である．

一方，グラフの局所情報を利用して hitting time，cover time の観点から高速なランダムウォークを実現しようとする試みとして，池田らは隣接頂点の次数情報を用いたランダムウォークを提案し，hitting time が $O(n^2)$，cover time は $O(n^2 \log n)$ へ改善されることを示している [3].

定義 1.2 (一近傍ランダムウォーク)

$$p_{uv} = \begin{cases} \frac{d_v^{-1/2}}{\sum_{w \in N(u)} d_w^{-1/2}} & v \in N(u), \\ 0 & otherwise. \end{cases}$$

1.2　Mixing time

遷移確率行列 P の誤差 ε に対する mixing time(混合時間) とは，定常分布への収束の速さを表す指標である．P に従うランダムウォークが t ステップ後に各頂点を訪問する確率と定常分布との誤差は total variation distance と呼ばれる．

定義 1.3 (total variation distance)
V 上の確率行列 P と確率分布 π との t step の

時点における total variation distance $\|P^t,\pi\|_{tv}$ は．

$$\|P^t,\pi\|_{tv} = \max_{u\in V}\frac{1}{2}\sum_{v\in V}|P^t_{uv}-\pi_v|$$

で定義される．

遷移確率行列 P にしたがうランダムウォークの誤差 ε に対する mixing time $\tau(\varepsilon)$ は total variation distance が ε を下回るまでの遷移数で定義される．

定義 1.4 (mixing time)

$$\tau(\varepsilon) = \min\{t : \|P^{t'},\pi\|_{tv} \le \varepsilon, \forall t' \ge t\}$$

$\tau(\varepsilon)$ が $\log n$ と $\log \varepsilon^{-1}$ の多項式で抑えられるものを,rapidly mixing(高速混合) と呼ぶ．$\log n$ の多項式とは，n 状態を表すのに必要なビット数の多項式という意味である．本稿では標準ランダムウォークおよび一近傍ランダムウォークの mixing time に関する解析を行う．

2　mixing time の見積り手法

2.1　固有値による見積り

mixing time は遷移確率行列の固有値を用いて見積もることができる．遷移確率行列の固有値 $\lambda_0,\lambda_1,\cdots,\lambda_{n-1}$ について，任意の $i\ge 2$ に対して $1=\lambda_0>|\lambda_1|\ge|\lambda_i$ とする．特に，$Gap(P) = 1-|\lambda_1|$ を *special gap* と呼ぶ．special gap と mixing time の定理が知られている [4]．

定理 2.1 $\pi_* = \min_{u\in V}\pi_u$ とする．任意の $\varepsilon > 0$ について，

$$\tau(\varepsilon) \ge \frac{1}{2(1-|\lambda_1|)}\log\left(\frac{1}{2\varepsilon}\right),$$
$$\tau(\varepsilon) \le \frac{1}{1-|\lambda_1|}\log\left(\frac{1}{\pi_*\varepsilon}\right),$$

が成り立つ．

2.2　コンダクタンス

辺 $e=(u,u)$ の容量を $c_{uv}=\pi_u p_{uv}=\pi_v p_{vu}$ とする．このとき，状態の部分集合 $S\subset V$ について

$$\Phi_S = \frac{\sum_{u\in S, v\notin S} c_{uv}}{\pi_S}, \qquad (1)$$

とする．ここで，$\pi_S = \sum_{u\in S}\pi_u$ である．ランダムウォークのコンダクタンスを Φ を

$$\Phi = \min_{S:\pi_S\le 1/2}\Phi_S,$$

と定義する．

定理 2.2 コンダクタンス Φ を持つマルコフ連鎖について，

$$\frac{\Phi^2}{2} \le Gap(P) \le 2\Phi$$

が成り立つ．

2.3　Canonical Path

ランダムウォークのコンダクタンス Φ を見積もる手法として canonical path を用いる手法がしられている．頂点の順序対 (u,v) について，x と y を結ぶパス γ_{uv} を一つ選び，それを (u,v) の canonical path とよぶ．全ての順序対に対する canonical path の集合 $\Gamma=\{\gamma_{uv}|(u,v)\in V^2\}$ を考え，Γ の混雑度 $\rho(\Gamma)$ を

$$\rho(\Gamma) = \max_{e=(u,v)}\frac{1}{\pi_u p_{uv}}\sum_{\gamma_{uv}\ni e}\pi_u\pi_v. \qquad (2)$$

と定義する．

定理 2.3 任意の *canonical path* の集合 Γ について

$$\Phi \ge \frac{1}{2\rho(\Gamma)}$$

が成り立つ．

この定理から mixing time の上界を得ることもできるが，Γ の混雑度から直接 mixing time の上界を得ることができる [5]．$\bar{\rho} = \min_\Gamma \rho(\Gamma) l_\Gamma$ とする，ただし l_Γ は Γ に含まれる最長のパスの長さである．

定理 2.4 初期状態 x のマルコフ連鎖において以下が成り立つ．

$$\tau(\varepsilon) \le \bar{\rho}(\log(\pi_u)^{-1} + \log \varepsilon^{-1}).$$

以降の議論のため，パス集合 Γ における極大性を次のように定義する．

定義 2.5 パス集合 Γ の要素 γ_{uv} は，すべての $\gamma_{zw} \in \Gamma \setminus \{\gamma_{uv}\}$ に対して $\gamma_{uv} \not\subseteq \gamma_{zw}$ であるとき極大であるとする．

例えば，図 1 ではパス 1-2-3-4 が極大で他のパスはその部分パスになっている．

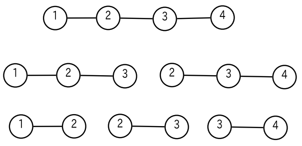

図 1: 極大パス 1-2-3-4 とその部分パス

Γ における極大なパスの集合を Γ_M とする．また，パス集合 Γ における辺 e の重複度 $\delta_\Gamma(e)$ を

$$\delta_\Gamma(e) = |\{\gamma_{uv} \in \Gamma : e \in \gamma_{uv}\}|$$

とし，その最大値を $\delta_\Gamma = \max_{e \in E} \delta_\Gamma(e)$ とする．例えば，$\delta_{\Gamma_M}((u,v))$ は (u,v) を含む極大なパスの数を表す．

2.4 枝重みによるランダムウォークの表現

各辺 (u,v) に重み w_{uv} が与えられ，遷移確率および定常分布が

$$p_{uv} = \frac{w_{uv}}{w_u},$$
$$\pi_u = \frac{w_u}{w}.$$

で表されるランダムウォークを考える．ただし，$w_u = \sum_{v \in N(u)} w_{uv}$, $w = \sum_{u \in V} w_u$ である．式 1 に代入すると，

$$\Phi_S = \frac{\sum_{u \in S, v \notin S} w_{uv}/w}{\sum_{u \in S} w_u/w}, = \frac{\sum_{u \in S, v \notin S} w_{uv}}{\sum_{u \in S} w_u}. \tag{3}$$

となる．特に $\sum_{u \in S} w_u/w \le 1/2$ のとき，

$$\frac{2\sum_{u \in S, v \notin S} w_{uv}}{w} \le \Phi_S. \tag{4}$$

となる．次に，式 2 に代入すると，

$$\rho(\Gamma) = \max_{e=(u,v)} \frac{w}{w_{uv}} \sum_{e \in \gamma_{uv}} \frac{w_u}{w} \frac{w_v}{w}, = \max_{e=(u,v)} \frac{1}{w w_{uv}} \sum_{e \in \gamma'_{uv} \in \Gamma_M} \sum_{i=1}^{k} w_i \sum_{j=k+1}^{l} w_j.$$

ただし，$\gamma'_{uv} := v_1(=x), \cdots, v_k(=u), v_{k+1}(=v), \cdots, v_l(=y)$ である．

任意の reversible なランダムウォークはこのような形で表現することが可能であり，$w_{uv} = 1$ とした場合が標準ランダムウォーク，$w_{uv} = 1/\sqrt{d_u d_v}$ とした場合が一近傍ランダムウォークとそれぞれ等価なランダムウォークである．

3 標準ランダムウォークの mixing time

標準ランダムウォークは $w_{uv} = 1$ の場合であり，コンダクタンスに関して以下の下界が導かれる．

補題 3.1 $\sum_{u \in S} \pi_u \le 1/2$ となる任意の $S \subseteq V$ のコンダクタンスについて以下が成り立つ．

$$\Phi_S \ge \Omega\left(\frac{1}{m}\right).$$

証明 式 4 へ $w_u = d_u \ge 1, w = 2m$ を代入すると，$\sum_{u \in S} \pi_u \le 1/2$ となる任意の $S \subseteq V$ について，

$$\Phi_S \ge \frac{1}{m}$$

が得られる． □

この結果と，補題 3.1 および定理 2.1 を組み合わせると，標準ランダムウォークの mixing time に関して $O(n^4(\log n+\log\varepsilon^{-1}))$ という上界を得ることができる．しかし，グラフの構造によってはより小さい上界をもつ場合がある．そこで，今度は canonical path の手法を用いてより詳細な解析を行う．

補題 3.2 Γ を最短路の集合とすると，以下が成り立つ．

$$\rho(\Gamma)=O\left(\frac{\delta_{\Gamma_M}n^2}{m}\right).$$

証明 Γ として shortest path の集合を考えると，

$$\begin{aligned}\rho(\Gamma)&=\max_{e=(u,v)}\frac{1}{2m}\sum_{e\in\gamma'_{uv}\in\Gamma_M}\sum_{i=1}^{k}d_i\sum_{j=k+1}^{l}d_j,\\&\le\frac{9\delta_{\Gamma_M}n^2}{2m}.\end{aligned}$$

を得る． □

この補題と定理 2.4 から，標準ランダムウォークにおける mixing time について次の上界を得ることができる．

定理 3.3 Γ を最短路の集合とし，l_Γ を最大の長さとする．任意のグラフにおける誤差 ε に対する mixing time について以下が成り立つ．

$$\tau(\varepsilon)=O\left(\frac{\delta_{\Gamma_M}l_\Gamma n^2}{m}(\log n+\log\varepsilon^{-1})\right).$$

$\frac{\delta_{\Gamma_M}l_\Gamma n^2}{m}$ はグラフの構造によって定数から n^4 程度とかなり差がある．

4 一近傍ランダムウォークの mixing time

$w_{uv}=1/\sqrt{d_ud_v}$ とすると，一近傍ランダムウォークに相当する．また，重みの総和 w について次の補題が成り立つ．

補題 4.1 $(u,v)\in E$ について，$w_{uv}=1/\sqrt{d_ud_v}$ とすると，以下が成り立つ．

$$w=\sum_{u\in V}\sum_{v\in N(u)}w_{uv}\le n.$$

証明 相加相乗平均の関係を用いると，

$$\begin{aligned}w&=\sum_{u\in V}\sum_{v\in N(u)}\frac{1}{\sqrt{d_ud_v}},\\&\le\frac{1}{2}\sum_{u\in V}\sum_{v\in N(u)}\left(\frac{1}{d_u}+\frac{1}{d_v}\right),\\&=n.\end{aligned}$$

を得る． □

補題 4.2 n 頂点からなる任意のグラフにおける一近傍ランダムウォークのコンダクタンスについて以下が成り立つ．

$$\Phi=\Omega\left(\frac{1}{n^2}\right).$$

証明 $w_{uv}=1/\sqrt{d_ud_v}$ を式 (4) に代入すると，

$$\Phi\ge\frac{2}{nw}.$$

補題 4.1 より，$\Phi=\Omega\left(\frac{1}{n^2}\right)$ が得られる． □

この補題と，補題 3.1 および定理 2.1 から一近傍ランダムウォークの mixing time について以下の定理を得る．一方，標準ランダムウォークと同様に canonical path の集合 Γ の混雑度に関して解析を行うと，次の補題を導くことができる．

補題 4.3 任意の Γ について，以下が成り立つ．

$$\rho(\Gamma)=O\left(\delta_{\Gamma_M}n^2\right).$$

この補題と定理 2.4 から，一近傍ランダムウォークにおける mixing time について次の上界を得ることができる．

定理 4.4 任意のグラフにおける一近傍ランダムウォークの誤差 ε に対する mixing time $\tau(\varepsilon)$ について，

$$\tau(\varepsilon)=O(\delta_{\Gamma_M}l_\Gamma n^2(\log n+\log\varepsilon^{-1}))$$

が成り立つ．

$\delta_{\Gamma_M} l_\Gamma n^2$ はグラフの構造によって n^2 から n^4 となる．一般のグラフに対する上界は標準ランダムウォークと同じだが，今回の結果からだけではあまりよい上界は得られない．実際は一近傍ランダムウォークでも rapidly mixing になる場合が存在する．

5 まとめ・今後の課題

本研究の目的は，ランダムウォークにおける局所情報の利用と mixing time との関係を明らかにすることであり，その第一歩として二つのランダムウォークに関する解析を行った．

標準ランダムウォークの任意のグラフに対する mixing time の上界は $O(n^4(\log n + \log \varepsilon^{-1}))$ という結果を得た．しかし，より詳細な解析を行うと，rapidly mixing の条件を満たす場合もあることがわかる．実際，完全グラフにおいては rapidly mixing になっている．一方，一近傍ランダムウォークでは一般のグラフに対する上界は $O(n^4(\log n + \log \varepsilon^{-1}))$ となり，標準ランダムウォークと変わらない上界となっている．今回得た結果からだけでは rapidly mixing の条件を満たすグラフの性質を導くことはできない．より詳細な解析は今後の課題である．

参考文献

[1] R.Aleliunas, R.M Karp, R.J. Lipton, L.Lovaasz, and C.Rackoff, “Random walks, universal traversal sequences, and the complexity of maze problems”, Proc. 20th IEEE Ann.Symposium on Foundations of Computer Science, 218-223, 1979.

[2] D.J.Aldous, “On the time taken by random walks on finite groups to visit every state”, Z.Wahrsch. verw. Gebiete 62 361-1983.

[3] Satoshi Ikeda, Izumi Kubo, Norihiro Okumoto, Masafumi Yamashita “Impact of Local Topological Information on Random Walks on Finite Graphs”, Proceedings of Thirtieth International Colloquium on Automata,Languages and Programming, 1054-1067,2003.

[4] M.R.Jerrum, L.G. Valiant, and V.V. Vazirani, “Random Generation of Conbinatirial Structures from a Uniform Distirbution”, Theoritical Computer Science, vol. 43, 1986, pp.169-188.

[5] A.J. Sinclair, “Improved Bounds for Mixing Rates of Markov Chains and Multicommodity Flow, ” Combinatorics, Probability and Computing, vol. 1, 1992, pp.351-370.