研 究 報 告 書

「乱択アルゴリズム設計の技法と脱乱択化の数理」

研究タイプ：通常型
研究期間： 2016 年 10 月～2020 年 3 月
研 究 者： 来嶋 秀治

1． 研究のねらい

情報環境の発達した現代において，計算は現実の社会に深く浸透し，計算の方法 = アルゴリズムは現代社会を支える基盤技術である．アルゴリズム設計において，確率的技法は，簡便さ，効率性，大数の法則に保証される頑強さを理由に，理論上も実用上も，もはや欠くことのできない基本的で重要な技術である．本課題のねらいは，確率的アルゴリズム設計の原理を解明し，社会における計算に係る諸課題に対する安心・便利なアルゴリズム設計の理論を進展させることにある．

本課題は特に，主に計算効率の観点からランダムネスの計算への寄与に焦点をあてる．逆説的ではあるが，確率的アルゴリズムの脱乱択化（derandomization）の可能性・不可能性を探り，確率的計算と決定性計算を比較することで，ランダムネスの計算への寄与にアプローチする．離散数学，確率論，数理論理学などの数学に基づき，乱択化と脱乱択化，理論と応用を連携させる研究である．本課題の特徴的なアプローチの一つが，決定性ランダムウォーク(deterministic random walk)である．これは，ランダムウォークと決定性過程を比較する試みで，マルコフ連鎖の mixing time の解析技術を応用し，漸近解析を超えて過渡状態の解析技法の開発が数理的な焦点である．また，高次元多面体の体積に対する決定性近似などの脱乱択可能性の研究や，安定マッチング，分散計算，スケジューリング，安定マッチング，実験計画など，社会的課題に関するアルゴリズム設計の研究にも取り組んだ．

2． 研究成果

（1）概要

乱択アルゴリズム設計の技術として，重要な未解決問題である対数優モジュラ分布からのサンプリングにも取り組んだ．この文脈で劣モジュラ関数の変数変換[1]や $M^\natural$凹関数の最小化元の特徴づけ[8]などの成果を得た．また脱乱択可能性に関して，高次元 V 多面体の体積に対する決定性近似可能性を示すことにも成功した[4]．決定性ランダムウォークの文脈においては，カオス的な決定性系列であるベータ展開に対して，これを記述するマルコフ連鎖を考案した．これを用いて，ベータ展開の乱択アルゴリズムを設計し，領域計算量が大きく改善する萌芽的知見を得た．社会的課題に関するアルゴリズム設計について，オンライン学習や分散制御の文脈で成果が得られた[2,3]．また，スケジューリング，安定マッチング，実験計画に関連する課題などにも取り組み，萌芽的な知見を得た．

（2）詳細

研究テーマ A「乱択アルゴリズム設計の技法」

正規分布に代表される対数凹分布は確率分布の主要クラスの一つで，現実的にも理論的

にも多くの場面に現れる.（一般に多変量の）対数凹分布πは$-\log\pi$が凸関数（“下に凸”）であり，すなわち極大値=全域最大値を満たし（単峰性），そのため取り扱いの良いクラスとして知られる.

劣モジュラ関数は有限集合の部分集合族上の実数値関数（集合関数）で，離散版の凸関数と言われる関数クラスである. 離散最適化の文脈では，劣モジュラ関数は効率的に最小化できることが知られる. 有限集合の部分集合族上の分布πが対数優モジュラとは $-\log\pi$が劣モジュラとなる分布である. 劣モジュラ関数は効率的に最小化できることから，対数優モジュラ分布の最尤推定も効率的に行え，このため機械学習などで注目され，対数優モジュラ分布からのサンプリングにも大きな需要がある. しかし，対数優モジュラ分布からのサンプリングを効率的に行うアルゴリズムの存在性は，理論計算機科学の重要な未解決問題（#BIS の FPRAS 存在性問題として知られる）である.

本課題ではこの問題に取り組み，特に離散数学の文脈でいくつかの知見を得た. まずは，劣モジュラ関数の変数変換に関する研究である[1]. 連続の凸関数の重要な性質に，アフィン変換（変数変換）に関する不変性がある. そこで，劣モジュラ関数の変数変換について考察した. アフィン変換に相当するものとして，（劣モジュラ関数の変数である）集合の対称差変換を考える. 一般に劣モジュラ性は対称差変換に関して保存されない例が観測される. これに対して，[1]では劣モジュラ性が保存される対称差変換の特徴づけを与えた. また，与えられた集合関数が対称差変換によって劣モジュラ関数に変換できるかという問題を考え，変換後に劣モジュラ関数になる場合でも，この問題が一般には指数時間必要であることを示した. 一方で，変換後に狭義劣モジュラ関数が得られる場合には，線形時間でこの問題が解けることを示した.

次は，対数優モジュラ分布の部分クラスの計算量の研究である[8]. 劣モジュラ関数の最小化元集合は分配束をなすことが知られる. 一方，任意の有限分配束が劣モジュラ関数の最小化集合として出現することも知られており，このことから，もし対数優モジュラ分布一般からの効率的サンプリングアルゴリズム（多項式時間アルゴリズム）が存在すれば，乱択計算量理論で重要な未解決問題である，二部グラフの独立集合の個数数え上げ（#BIS）に対する多項式時間乱択近似解法（FPRAS）の存在が導かれる（この事実を簡単に「#BIS 困難」という）.

$\mathrm{M}^\natural$凹関数は離散凸解析の（離散版）Fenchel 双対で重要な役割を果たす離散関数のクラスである. $\mathrm{M}^\natural$凹関数は経済学における粗代替性（gross substitutes property）と等価であることが知られ，オペレーションズ・リサーチの在庫管理や数理経済学，安定マッチングなどのゲーム理論などに応用を持つ. 有限集合の部分集合族上の$\mathrm{M}^\natural$凹関数は劣モジュラ関数の真の部分クラスをなすことが知られている. すなわち，$\mathrm{M}^\natural$凹集合関数の最小化元集合は分配束をなす. では，任意の有限分配束は $\mathrm{M}^\natural$凹集合関数の最小化集合として出現しうるであろうか？この問いを肯定的に解決した[8]. Birkhoff の表現定理を用い，分配束を表現する半順序集合から二部グラフのマッチングを利用した $\mathrm{M}^\natural$凹集合関数を設計し，その最小化元集合が与えられた分配束に等しいことを示している. この結果は，部分集合族上の対数優モジュラ分布からのランダムサンプリングは，クラスを対数 $\mathrm{M}^\natural$凸分布に制限しても#BIS 困難であることを意味する. 否定的な側面として，対数 $\mathrm{M}^\natural$凸に制限してもサンプリングアルゴリズムの設計は容易でない. 肯定的な側面として，対数 $\mathrm{M}^\natural$凸分布に対する FPRAS が設計できれば，#BIS は

FPRAS をもつ.

研究テーマ B「脱乱択化の数理」

乱数によって，計算量は真に改善されうるのであろうか？この問いに肯定的に答える有名な事実のひとつが，高次元凸体の体積計算である. メンバーシップオラクルで与えられた n 次元凸体（convex body）の体積計算は，多項式時間の決定性計算では 1.999^n 倍より良い近似比の達成が不可能であることが知られる. これに対して，1991 年の Dyer, Frieze, Kannan によるマルコフ連鎖モンテカルロ（MCMC）法を用いた FPRAS は乱択アルゴリズム設計の金字塔である.

一方で，凸体を凸多面体（convex polytope）に制限した場合，体積計算の多項式時間近似可能性は未解決である. 本課題に先行して，0-1 ナップサック多面体の体積が決定性計算で近似可能であることを示している [Ando, Kijima 2016]. 0-1 ナップサック多面体は，非負制約に不等式制約が 1 本課されただけの非常に素朴な多面体であるが，体積計算は#P 困難であることが知られる. 通常，線形計画などで現れる多面体は不等式で与えられる. これを H 表現といい，不等式で与えられる多面体を H 多面体という. これに対し，端点で与えられる多面体を V 多面体という. たとえば V 多面体上の線形最適化は非常に容易に解くことができる. では，V 多面体の体積計算は易しいのであろうか. 残念ながら，n 次元で頂点数が 2n+1 の V 多面体の体積計算は#P 困難であることが知られている. [4]では，この多面体の体積が決定性計算で近似可能であることを明らかにした. 用いた手法は古典的な畳み込み和の計算であるが，サブルーチンとして，2 つの正軸体（L1 ノルム球）の交わり部分の体積の近似計算を用いる. 興味深いことに，2 つの正軸体の交わり部分の体積計算自体が#P 困難であることも[4]では示している.

MCMC 法の脱乱択化を動機として，本課題に先行して決定性ランダムウォークの研究を行ってきた[Kijima et al. 2016, Shiraga et al. 2018, 他]. 関連して，決定性過程を確率過程で模倣する，いわば逆向きの課題についてもこれまでに構想してきた. ベータ展開は，2 進展開の基数 2 をベータ（ベータは 1 より大きく 2 より小さい値）に置き換えたものである. ベータ展開は初期値鋭敏性があり，カオス系列であることが知られる. このベータ展開を記述するマルコフ連鎖を考案し，これを用いた乱択ベータ展開を設計した. すなわち，ベータ展開は乱択ベータ展開の決定性ランダムウォークとみなすことができる. 興味深いことに，乱択ベータ展開は決定性のベータ展開の領域計算量を有意に改善する萌芽的事実を発見している. 詳細な解析と発展応用については今後の課題である.

研究テーマ C「社会における計算に係る課題の解決」

安定マッチング，スケジューリング，オンライン学習，分散計算，実験計画など，現実社会におけるアルゴリズム設計に関する諸問題の解決にも取り組んだ.

安定マッチングは，研修医の配属や卒業研究配属，海外大学の入学割当などに実用される. 一方で，Gale-Shapley のアルゴリズムは片側（例えば，研修医配属で有れば研修医側）に有利な解が出て，反対側（研修医配属では病院側）の満足度は低いことが知られている. この解決案としてメディアン安定マッチングの概念がある. メディアン安定マッチングの計算は

#BIS 困難であるが，実用的には MCMC 法に基づく素朴で多くの入力に対しては比較的効率よく動くアルゴリズムを提案している[Kijima, Nemoto 2012]. これを安定マッチングの一般化である安定割当問題に拡張するための研究に取り組み，構造に関する知見を得た.

数理最適化において，定式化ならびに多面体構造の理解は重要な基礎技術である. 研究者はこれまでにたとえば，多面体構造を用いた最適スケジュールのオンライン学習アルゴリズムの設計などを行っている[Yasutake et al. 2011, 他]. これに関連して，ジョブスケジューリングなどを対象として，緩和多面体への多段階射影を用いた新しいオンライン学習の枠組みを与えている[2]. また，線形緩和法と組み合わせた線形計画定式化は現実的な高速解法に不可欠な技法である. 順序制約が与えられたスケジューリングに対し，拡張複雑度(extension complexity)が指数的であることがわかり，すなわち，うまい定式化は存在しえないことが分かった. この事実は，線形緩和にさまざまなヒューリスティクスを加える現実的解法の妥当性を支持するものである.

このほか，自律分散制御の文脈で近年研究が盛んな探索競合比解析に関して国際共同研究を推進し，スピードの異なる乗り物への乗り換えを考慮した最短路探索の探索競合比解析で成果を得た[3]. また，実験計画に関して，古典的な Steiner 三項系のランダムサンプリングに関する国際共同研究を推進し，萌芽的知見を得ている.

3. 今後の展開

本課題を通じて，離散数学，確率論，論理学にまたがるいくつかの興味深い知見が得られた. ランダムネスの計算への寄与の観点から，決定性過程と確率過程の比較は重要な話題であり，今後の進展は大きな課題である. とくに MCMC の脱乱択可能性や，今回得られたカオス系列の乱択計算量の萌芽的知見は興味深い課題であり，物理シミュレーションなどの効率化に役立つ技術形成に取り組みたい.

深層学習をはじめとする昨今の人工知能技術において，もはや「乱択化」は欠くことのできない技術である. 入力（データ）の不確実性に計算の乱択化もあいまって，計算機工学は古典的な決定論的アプローチから実験科学の様相を強くしつつある. しかし，計算とは偶発的ものであろうか？今後の情報社会の基盤を保証する上でも，乱択計算の信頼性は重要な課題であろう. 決定性計算と確率的計算の差については，数学的に未解決な点も多く，社会を支える基盤技術に対する基礎研究として展開を図る.

4. 自己評価

現代の情報化社会において乱択アルゴリズムの果たす役割は大きく，ランダムネスの計算への寄与に関する数理研究は，現実の諸システムの安全性の観点からも重要性の高い課題と考える. この課題に正面から取り組むことができたことには大きく満足しており，乱択ベータ展開に関する萌芽的知見を得られた点は僥倖であった. 今後の展開は大きな課題である. 乱択アルゴリズム設計の技術として，重要な未解決問題である対数優モジュラ分布からのサンプリングにも取り組むことができ，この文脈で離散数学の進展に貢献できた点も幸いに思う[1,8]. 対数劣モジュラ分布と関連が深く同じく重要な未解決問題であったマトロイド基のサンプリングが 2018 年に解決されており，今後の乱択アルゴリズム設計の技術発展が予想される. また脱乱択可能性に関して，高次元 V 多面体の体積に対する決定性近似可能性を示すこと

にも成功した[4]. 社会的課題に関するアルゴリズム設計について, オンライン学習や分散制御の文脈で成果が得られた[2,3]. 一方で, スケジューリング, 安定割当, Steiner 三項系などの課題は研究途上にあり, 研究の完成は今後の課題である.

さきがけ研究費により, 国際共同研究を推進することもできた. 本課題で得られた知見を基に, 産官との今後の連携にもつなげたい.

5. 主な研究成果リスト

(1)論文(原著論文)発表

1. J. Nakashima, Y. Yamauchi, S. Kijima, M. Yamashita, Finding submodularity hidden in symmetric difference, SIAM J. Discrete Math., 34(1), 571–585.
2. T. Fujita, K. Hatano, S. Kijima, E. Takimoto, Online combinatorial optimization with multiple projections and its application to scheduling problem, IEICE Transactions, 101-A(9), 1334–1343, 2018.
3. L. Gasieniec, S. Kijima, J. Min, Searching with increasing speeds, SSS 2018, 126–138.
4. E. Ando, S. Kijima, An FPTAS for the volume of some V -polytopes – it is hard to compute the volume of the intersection of two cross-polytopes, COCOON 2017, 13–24.

(2)特許出願

研究期間累積件数:0 件(公開前の出願件名については件数のみ記載)

(3)その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

[5](解説記事) 来嶋秀治, グラフアルゴリズムの最先端, 電子情報通信学会誌 101:3, 246—247, 2018.

[6](解説記事) 来嶋秀治, 乱択と計算, 応用数理, 27:3, 15—23, 2017.

[7](招待講演) S. Kijima, Approximating volume – randomized vs. deterministic, the 10th Japanese-Hungarian Symposium on Discrete Mathematics and Its Applications, Budapest, Hungary, May 22-25, 2017 (May 22).

[8](プレプリント) T. Fujii and S. Kijima, Any finite distributive lattice is isomorphic to the minimizer set of an $M^\natural$-concave set function, arXiv:1903.08343, 2019.