

集中講義: 高次元エクспанダーとその応用

清水 伸高 (東工大)

2024 年 5 月

Contents

1	ランダムウォークの概論	2
1.1	収束性	2
1.2	定常分布	4
1.3	混交時間	4
1.4	グラフ上のランダムウォーク	5
1.5	グラフ上での上昇ウォークと下降ウォーク	6
2	ランダムウォークの固有値とエクспанダーグラフ	8
3	高次元エクспанダー	9
3.1	定義	9
3.2	単体複体上のランダムウォーク	10
3.3	局所スペクトルエクспанダー	10
3.4	Oppenheim のトリクルダウン定理	10
4	マトロイド	11
4.1	定義	11
4.2	例	11
4.2.1	グラフ的マトロイド	11
4.2.2	線形マトロイド	11
4.3	モチベーション	11
4.3.1	組合せ最適化	11
4.3.2	組合せ論	11
4.4	基の数え上げ	11
4.5	Anari, Liu, Gharan, Vinzant の定理	11

1 ランダムウォークの概論

一般に「ランダムウォーク」という用語は文脈によって様々である。例えば物理学や金融の文脈でブラウン運動を離散化したモデルを考える際は数直線上を等確率で左右どちらかに移動する粒子の軌跡をランダムウォークと呼ぶことがある。一方でネットワーク解析の文脈ではグラフ上の単純ランダムウォークをランダムウォークと呼ぶこともある。本講義では斉時性をもつ有限状態離散時間マルコフ連鎖をランダムウォークと呼ぶ。

定義 1.1 (ランダムウォーク)

有限集合 V と確率行列^a $P \in [0, 1]^{V \times V}$ に対し、 V 上に値をとる確率変数列 $(X_t)_{t \geq 0}$ であって、任意の $t \geq 0$, 頂点列 $(v_0, \dots, v_{t-1}) \in V^t$, および $v \in V$ に対して

$$\Pr[X_t = v \mid X_0 = v_0, \dots, X_{t-1} = v_{t-1}] = \Pr[X_t = v \mid X_{t-1} = u] = P(u, v)$$

を満たすものを V 上の**ランダムウォーク (random walk)** という。特に確率行列 P をランダムウォーク $(X_t)_{t \geq 0}$ の**遷移確率行列 (transition matrix)** と呼ぶ。

^a各行和が 1 となる非負行列を**確率行列 (stochastic matrix)** と呼ぶ。

初期地点 X_0 もまた確率変数であるためランダムに決まることに注意されたい。また、決定的に $X_0 = u$ からスタートしていても良い。初期頂点 X_0 の分布が決まれば各時刻 t における X_t の分布は一意に定まる。実際、 $t \geq 0$ に対し $p_t \in [0, 1]^V$ を X_t の分布とする (すなわち、 $p_t(u) = \Pr[X_t = u]$)。任意の $t \geq 1$ に対し

$$\begin{aligned} p_t(v) &= \Pr[X_t = v] \\ &= \sum_{u \in V} \Pr[X_t = v \text{ and } X_{t-1} = u] \\ &= \sum_{u \in V} \Pr[X_t = v \mid X_{t-1} = u] \Pr[X_{t-1} = u] \\ &= \sum_{u \in V} P(u, v) p_{t-1}(u) \end{aligned}$$

という漸化式を得る。これは $p_t = p_{t-1}P$ と表せる (ここで p_t は行ベクトルとして扱う) ので

$$p_t = p_0 P^t \tag{1}$$

を得る。

1.1 収束性

ランダムウォーク $(X_t)_{t \geq 0}$ を考え、時刻 t における X_t の周辺分布を p_t とする。すなわち、 $p_t \in [0, 1]^V$ は $p_t(v) = \Pr[X_t = v]$ で定義されるベクトルである。本講義では総じて時刻 t を大きくしていくときの p_t の収束性とそのスピードについて議論していく。

まずは収束性について議論するために分布間の距離として全変動距離を導入する。

定義 1.2 (全変動距離)

有限集合 V 上の二つの分布 $\mu, \nu \in [0, 1]^V$ に対し, **全変動距離 (total variation distance)** を

$$d_{\text{TV}}(\mu, \nu) := \frac{1}{2} \sum_{u \in V} |\mu(u) - \nu(u)| = \frac{1}{2} \|\mu - \nu\|_1$$

で定める.

全変動距離は単に ℓ^1 ノルムを 2 で割った値だが, 次の性質を持つがゆえに統計学, 情報理論, 機械学習, 計算機科学を含む様々な分野で非常に重要な役割を果たしている.

命題 1.3

有限集合 V を考え, 分布 $\pi \in [0, 1]^V$ と部分集合 $U \subseteq V$ に対し $\pi(U) := \sum_{u \in U} \pi(u)$ とする. 任意の二つの分布 $\mu, \nu \in [0, 1]^V$ と任意の部分集合 $U \subseteq V$ に対して

$$|\mu(U) - \nu(U)| \leq d_{\text{TV}}(\mu, \nu).$$

すなわち, 全変動距離が小さいということは任意の事象の発生確率の差が小さいことを意味する. なお, この不等式はタイトである. 実際, $U = \{u \in V : \mu(u) > \nu(u)\}$ とすれば等号が成り立つ.

次に, ランダムウォークが収束するための条件を与える.

定義 1.4 (既約性、非周期性)

遷移確率行列 $P \in [0, 1]^{V \times V}$ をもつランダムウォークを考える.

- 任意の頂点对 $u, v \in V$ に対しある $t \geq 0$ が存在して $P^t(u, v) > 0$ を満たすとき, ランダムウォーク $(X_t)_{t \geq 0}$ は**既約 (irreducible)** であるという.
- 各頂点 $u \in V$ に対し, 有向閉路長の集合 $L_u = \{t \geq 1 : P^t(u, u) > 0\}$ を考え, その最大公約数を頂点 u の**周期 (period)** と呼ぶ. 全ての頂点の周期が 1 であるとき, ランダムウォーク $(X_t)_{t \geq 0}$ は**非周期的 (aperiodic)** であるという.

既約性は任意の頂点对 u, v に対し u からスタートしたランダムウォークが v に到達可能であることを意味している.

非周期性は, ランダムウォークが「振動」しないことを意味する性質である. 例えば遷移確率行列が

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

で与えられるランダムウォークは全ての有向閉路の長さは 3 の倍数であるためどの頂点の周期も 3 に等しい. 特に, ランダムウォーク X_t は周期 3 でループしており, 例えば確率 1 で特定の頂点からスタートしたときに p_t は収束しないことがわかる. 非周期性はこのようなケースを排除するという意味を持つ.

1.2 定常分布

ランダムウォークの分布 p_t がある分布 $\pi \in [0, 1]^V$ に収束するならば、分布の漸化式 $p_t = p_{t-1}P$ より収束先の分布 π は

$$\pi = \pi P \quad (2)$$

を満たすはずである。

定義 1.5 (定常分布)

遷移確率行列 P をもつ V 上のランダムウォークに対し、式 (2) を満たす分布 π を**定常分布 (stationary distribution)** と呼ぶ。

任意のランダムウォークは必ず定常分布をもつ。詳細は省くがこれは以下の議論から証明できる：

- 定常分布 π は転置行列 P^\top の固有値 1 の固有ベクトルに対応する。
- P と P^\top の固有値は全て同じ (転置をとっても行列式は変わらないから) であり、最大固有値 1 を持つ。
- Perron–Frobenius の定理から P^\top の最大固有値 1 に対応する固有ベクトルの成分は非負なので、正規化すると分布になる。

定理 1.6 (一般のランダムウォークの収束性)

遷移確率行列 P を持つ V 上の任意のランダムウォークは定常分布 $\pi \in [0, 1]^V$ を持つ。さらに、

- ランダムウォークが既約的ならば、定常分布 π は一意に存在し、全ての頂点 $v \in V$ に対し $\pi(v) > 0$ である。
- ランダムウォークが非周期的ならば、任意の初期分布 p_0 に対してある定常分布 π が存在して $d_{TV}(p_t, \pi) \rightarrow 0$ ($t \rightarrow \infty$) が成り立つ。

特に、既約的かつ非周期的なランダムウォークの分布は一意に定まる定常分布に d_{TV} の意味で収束する。

すなわち、既約性とは定常分布の一意性を保証する性質であり、非周期性は収束性を保証する性質である。

1.3 混交時間

定理 1.6 ではランダムウォークの一意収束性の条件を与えた。では、その収束の速さはどれくらいだろうか？ この問題は日常的には例えば次のような状況で現れる：

- トランプカードで遊ぶとき、何回シャッフルすればカードが「混ざり合う」か？
- 料理で調味料をスープに入れたとき、何回かき回せば味が「混ざり合う」か？

ここでは「混ざり合う」とは定常分布への全変動距離の意味での収束性で定義し、ランダムウォークの混交時間を次で定義する：

定義 1.7 (混交時間)

既約なランダムウォーク $(X_t)_{t \geq 0}$ を考え、 $t \geq 0$ に対し $p_t \in [0, 1]^V$ を時刻 t における X_t の分布とする。定常分布を $\pi \in [0, 1]^V$ とする。正の実数 $\varepsilon > 0$ に対し、 ε -混交時間 $t_{\text{mix}}(\varepsilon)$ を

$$t_{\text{mix}}(\varepsilon) := \inf\{t \geq 0: d_{\text{TV}}(p_t, \pi) \leq \varepsilon\}$$

とする。また、 $(1/2)$ -混交時間を単に**混交時間 (mixing time)**と呼ぶ。^a

^a $1/2$ という数字に特に本質的な意味はない。

本講義では全体を通じてランダムウォークの混交時間 (特にその上界) を評価することに取り組む。中でも特に強力な固有値に基づく解析について説明し、これに基づいてグラフや単体複体のエクспанダー性を定義し、その性質を解説していく。最後にマトロイドと呼ばれる重要な離散構造上のランダムウォークを解析し、重要な未解決問題であり近年ようやく解決された Micali–Vazirani 予想の証明を与える。

1.4 グラフ上のランダムウォーク

グラフ上のランダムウォークとして最も有名な単純ランダムウォークを紹介する。

グラフの定義. まずグラフに関する基礎的な概念を定義する。グラフの定義に詳しい読者は定義 1.8 まで読み飛ばしても構わない。本講義では有限単純無向グラフを単に**グラフ (graph)**と呼ぶ。すなわち、グラフとは有限集合 V とその二元部分集合 $E \subseteq \binom{V}{2}$ の組 $G = (V, E)$ である。 V の元を**頂点 (vertex)**、 E の元を**辺 (edge)**と呼ぶ。二頂点 $u, v \in V$ が $\{u, v\} \in E$ を満たすとき、 u は v に隣接 (adjacent) しているという (v もまた u に隣接している)。頂点 u と辺 $e \in E$ が $u \in e$ を満たすとき、 e は u に接続 (incident) しているという。頂点 u に接続している辺の本数を u の**次数 (degree)**といい、 $\deg(u)$ で表す。全ての頂点の次数が d に等しいとき、 G は **d -正則 (d -regular)** であるという。二つのグラフ $G = (V, E), H = (U, F)$ に対して $U \subseteq V, F \subseteq E$ を満たすとき G は H を**部分グラフ (subgraph)**として含むといい、 $H \subseteq G$ で表す。

頂点列 $(v_0, \dots, v_\ell) \in V^{\ell+1}$ は $\{v_0, v_1\}, \dots, \{v_{\ell-1}, v_\ell\} \in E$ を満たすとき、**路 (walk)** といい、 ℓ を長さと呼ぶ。路 (v_0, \dots, v_ℓ) に対し v_0 と v_ℓ をそれぞれ始点、終点と呼ぶ。路 (v_0, \dots, v_ℓ) が $v_0 = v_\ell$ であって満たすものを**閉路 (cycle)**という。

任意の二頂点 $a, b \in V$ に対し、 a と b をそれぞれ始点と終点とする路が存在するとき、 $a \sim b$ 表す。この関係は同値関係になっており、 V を \sim で割った商集合 V/\sim の各同値類 $[v]$ を G の**連結成分 (connected component)**という。商集合 V/\sim が単一の連結成分からなるとき、 G は**連結 (connected)**であるという。

グラフ $G = (V, E)$ の二部性を定義する。ある頂点分割 $V = L \sqcup R$ が存在して $E \cap \binom{L}{2} = \emptyset$ かつ $E \cap \binom{R}{2} = \emptyset$ が成り立つとき、 G は**二部 (bipartite)**であるといい、頂点部分集合 L, R を G の**部集合 (partite set)**と呼ぶ。直感的には、 G が二部グラフであるというのは、ある頂点分割 $V = L \sqcup R$ に対して G の全ての辺が L と R の間を跨いでいることを意味する。なお、部集合への分割 $V = L \sqcup R$ は必ずしも一意であるとは限らない。よく知られる事実として、グラフ G が二部グラフであることの必要十分条件は G の全ての閉路の長さが偶数であることである。

単純ランダムウォーク 単純ランダムウォークとは、初期地点 X_0 を選び、現在いる頂点から一様ランダムな隣接点を選びそこに遷移するという確率的な操作を繰り返して得られるランダムウォークである。

定義 1.8 (単純ランダムウォーク)

グラフ $G = (V, E)$ を考える. 遷移確率行列が

$$P_{\text{SRW}}(u, v) := \begin{cases} \frac{1}{\deg(u)} & \text{if } uv \in E, \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

で与えられる V 上のランダムウォークを G 上の**単純ランダムウォーク (simple random walk)** という.

単純ランダムウォークの定常分布はの一つは

$$\pi(u) = \frac{\deg(u)}{2|E|}. \quad (3)$$

で与えられる. 一般に単純ランダムウォークは既約性や非周期性を持つとは限らない. 既約的であることの必要十分条件はグラフ G が連結であることであり, 非周期的であることの必要十分条件はグラフ G の全ての連結成分のなす誘導部分グラフが二部グラフでないことである. 実際, 全ての連結成分が二部グラフでないならばそれぞれに長さ奇数の閉路 C が存在する. 各頂点 u について, 辺 $\{u, v\}$ 上で $u \rightarrow v \rightarrow u$ という遷移を考えれば長さ 2 の閉路になっている. また, 頂点 u から奇閉路 C に向い, C に沿って遷移した後再び u に戻るという経路を考えればこれは奇数長の閉路である. すなわち $P^2(u, u) > 0$ かつある奇数 ℓ に対し $P^\ell(u, u) > 0$ となるため頂点 u の周期は 1 である. 逆に二部グラフならば全ての閉路が偶数長なので任意の奇数 ℓ と頂点 $u \in V$ に対し $P^\ell(u, u) = 0$ である.

定義 1.9 (遅延単純ランダムウォーク)

グラフ $G = (V, E)$ 上の単純ランダムウォークの遷移確率行列を P_{SRW} とする. 確率行列 $P_{\text{LSRW}} := \frac{1}{2}(I + P_{\text{SRW}})$ を遷移確率行列とする V 上のランダムウォークを**遅延単純ランダムウォーク (lazy simple random walk)** という. ここで I は単位行列.

要するに遅延単純ランダムウォークとは各頂点に確率 1/2 の自己ループの遷移を許したランダムウォークである. 遷移確率行列の定義より単純ランダムウォークと同じ定常分布を持つ. 自己ループの遷移を許すことによって各頂点の周期が必ず 1 となるため, 遅延単純ランダムウォークは必ず非周期的である. 従って, 連結グラフ上の遅延単純ランダムウォークは式 (3) で与えられる定常分布に一意収束する.

1.5 グラフ上での上昇ウォークと下降ウォーク

グラフ $G = (V, E)$ 上の遅延単純ランダムウォークの 1 回の遷移は次の 2 つのステップに分解して考えることができる:

1. 現在いる頂点 $u \in V$ に接続している辺 $e \in E$ を一様ランダムに選ぶ.
2. 選んだ辺 e に含まれる二頂点を一様ランダムに選び, その頂点に遷移する.

ステップ 1 でどの辺を選んだとしてもステップ 2 で確率 1/2 で元の頂点 u に戻る. 一方でステップ 2 で u でない方の頂点を選んだ場合は, u にとって一様ランダムな隣接点に遷移したことになる. 従ってこの 2 ステップに基づく遷移は遅延単純ランダムウォークと同じ遷移確率行列をもつ. ステップ 1 を頂点 u から開始したときに辺 e が選ばれる確率を $P_0^\uparrow(u, e) \in [0, 1]^{V \times E}$ とし, 同様にステップ 2 を辺

e から開始したときに頂点 $w \in \{u, v\}$ が選ばれる確率を $P_1^\downarrow(e, w)$ とする. すなわち

$$P_0^\uparrow(u, e) = \begin{cases} \frac{1}{\deg(u)} & \text{if } u \in e, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

$$P_1^\downarrow(e, w) = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{if } e \ni w, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

このとき, 遅延単純ランダムウォークの遷移確率行列 P_{LSRW} は $P_{\text{LSRW}} = P_0^\uparrow P_1^\downarrow$ と表せる.

逆に, 二つのステップを入れ替え, $P' := P_1^\downarrow P_0^\uparrow \in [0, 1]^{E \times E}$ を遷移確率行列としてもつ E 上のランダムウォークも考えることができる. このランダムウォークの遷移は次の 2 ステップで与えられる:

1. 現在いる辺 $e = \{u, v\}$ に含まれる頂点を一様ランダムに選び $w \in e$ とする.
2. 選んだ頂点 w に接続している辺 $e' \in E$ を一様ランダムに選び, その辺に遷移する.

このランダムウォークの遷移確率行列 P' の対角成分は全て正なので非周期的である. さらに元のグラフ G が連結ならば既約的である. 従って定理 1.6 より定常分布が一意に存在し, その分布への収束性が成り立つ.

演習問題 1.10

グラフ G が連結であるとする. 上記の P' を遷移確率行列としてもつ辺上のランダムウォークの定常分布を求めよ. 答えだけでよい.

2 ランダムウォークの固有値とエクspanダーグラフ

遷移確率行列 $P \in [0, 1]^{V \times V}$ に従う V 上の既約的かつ非周期的なランダムウォーク $(X_t)_{t \geq 0}$ を考え、その一意な定常分布を π とする. 定理 1.6 より収束性が保証されるが、

3 高次元エクスパンダー

高次元エクスパンダーとはグラフのエクスパンダー性を単体複体に拡張した概念である。

3.1 定義

まずは単体複体に関する基礎的な用語を定義していく。文脈によっては単体複体は多面体などを貼り合わせた幾何的な概念を指すこともあるが、本講義では組合せ的ないわゆる set system としての単体複体を扱う。

有限集合 V と V の部分集合族 $\mathcal{F} \subseteq 2^V$ であって部分集合で閉じているもの (すなわち, $\sigma \subseteq \tau \in \mathcal{F} \Rightarrow \sigma \in \mathcal{F}$) の組 $X = (V, \mathcal{F})$ を**単体複体 (simplicial complex)** という。集合族 \mathcal{F} の元を**面 (face)** と呼び、面 $\sigma \in \mathcal{F}$ の**次元 (dimension)** を $\dim \sigma = |\sigma| - 1$ で定義する。次元 0 の面を**頂点 (vertex)**、次元 1 の面を**辺 (edge)** と呼ぶ。特に、空集合 $\emptyset \in \mathcal{F}$ の次元は -1 である。単体複体 X の次元 $\dim X$ を、 X の面の次元のうち最大の値で定める。次元 d の単体複体 X は (包含関係に関して) 極大な面の次元が全て d に等しいとき、**純粋 (pure)** であるという。整数 $-1 \leq k \leq \dim X$ に対し $X(k) = \{\sigma \in \mathcal{F} : \dim \sigma = k\}$ とする。特に断りのない限り、 $X(0) = V$ を仮定する (そうでなければ V として $V = X(0)$ とした単体複体を考える)。

例 1. グラフ $G = (V, E)$ に対し、 $\mathcal{F} = \{\emptyset\} \cup \{\{v\} : v \in V\} \cup E$ とすると、 (V, \mathcal{F}) は単体複体である。

例 2. 有限集合 V に対し、 $\mathcal{F} = \binom{V}{\leq k} := \{\sigma \subseteq V : |\sigma| \leq k\}$ としたとき、 (V, \mathcal{F}) は純粋な $(k+1)$ -次元の単体複体である。

例 3. 閉路を含まないグラフを**森 (forest)** といい、連結な森を**木 (tree)** という。連結グラフ G の部分グラフであって木であるものを**全域木 (spanning tree)** という。

グラフ $G = (V, E)$ に対し、森であるような部分グラフの辺集合からなる集合族 $\mathcal{F} \subseteq 2^E$ は単体複体である。すなわち、

$$\mathcal{F} = \{F \subseteq E : \text{部分グラフ } (V, F) \text{ は森}\}$$

に対して (E, \mathcal{F}) は単体複体である。簡単のため G を連結グラフであるとする、 (E, \mathcal{F}) の極大面は G の全域木に対応し、その次元は $n-2$ に等しい。すなわち (E, \mathcal{F}) は純粋な $(n-2)$ -次元単体複体である。

例 4. 実行列 $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ (ただし $m \geq n$) の行ベクトルを $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n$ とする。集合 $V = \{1, \dots, n\}$ の部分集合族であって、線形独立な行ベクトル集合のインデックスとなるものの全体を \mathcal{F} とする。すなわち

$$\mathcal{F} = \{I \subseteq V : (\mathbf{a}_i)_{i \in I} \text{ は線形独立}\}$$

とすると、 (V, \mathcal{F}) は純粋な単体複体であり、その次元は A のランク $\text{rank}(A)$ に対し $\text{rank}(A) - 1$ となる。

例 5. 部集合 L, R を持つ二部グラフ $G = (V, E)$ を考える。辺部分集合 $M \subseteq E$ は、部分グラフ (V, M) の全ての頂点の次数が高々 1 であるとき**マッチング (matching)** という。マッチング M の部分集合 $M' \subseteq M$ もまたマッチングであるため、グラフ G のマッチング全体からなる辺部分集合族 $\mathcal{F} \subseteq 2^E$ に対し、 (E, \mathcal{F}) は単体複体である。一般に極大マッチングのサイズは異なる場合があるのでこの単体複体は純粋ではない (図 1)。

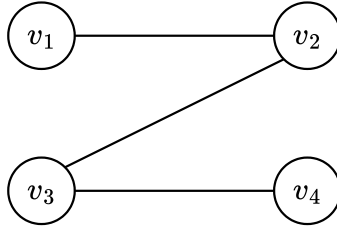


Figure 1: マッチング $M_1 = \{v_1, v_2\}, \{v_3, v_4\}$ と $M_2 = \{\{v_2, v_3\}\}$ はどちらも極大である.

定義 3.1 (リンクとスケルトン)

単体複体 $X = (V, \mathcal{F})$ を考える. 面 $\sigma \in \mathcal{F}$ のリンク (link) とは単体複体 $(V \setminus \sigma, \mathcal{F}_\sigma)$ であって集合族 \mathcal{F}_σ が

$$\mathcal{F}_\sigma = \{\tau \setminus \sigma : \sigma \subseteq \tau \in \mathcal{F}\}$$

で与えられるものである. 次元 k 以下の面の集合

$$\mathcal{F}_k = \{\sigma \in \mathcal{F} : \dim \sigma \leq k\}$$

に対し (V, \mathcal{F}_k) を k -スケルトン (k -skelton) という.

3.2 単体複体上のランダムウォーク

グラフ上のランダムウォークは頂点集合上で遷移するものを考えていたが, 単体グラフ上のランダムウォークは同じ次元の面の間で遷移するものを考える. アイデアとしては, セクション 1.5 で考えたようにある次元 k の面から次元 $k+1$ の面に遷移する上昇ウォークと逆に次元 $k+1$ の面から次元 k の面に遷移する下降ウォークを組み合わせることによって, $X(k)$ 上のランダムウォークを定義する.

定義 3.2 (上昇ウォークと下降ウォーク)

純粋な d 次元単体複体 $X = (V, \mathcal{F})$ を考える.

3.3 局所スペクトルエクспанダー

3.4 Oppenheim のトリクルダウン定理

4 マトロイド

4.1 定義

4.2 例

4.2.1 グラフ的マトロイド

4.2.2 線形マトロイド

4.3 モチベーション

4.3.1 組合せ最適化

4.3.2 組合せ論

4.4 基の数え上げ

4.5 Anari, Liu, Gharan, Vinzant の定理