離散数理工学　第 11 回

離散確率論：乱択データ構造とアルゴリズム (基礎)

岡本 吉央
okamotoy@uec.ac.jp

電気通信大学

2023 年 1 月 10 日

最終更新：2023 年 1 月 10 日　10:10

今日の目標

典型的な乱択アルゴリズムの解析ができるようになる

- 前進問題
- 乱択クイックソート

乱択アルゴリズムとは？

乱数を用いる (あるいは，用いてもよい) アルゴリズムのこと

確率的アルゴリズム，乱数使用アルゴリズムとも呼ばれる

なぜ乱数を用いるのか？

- アルゴリズムを設計しやすくなる
- アルゴリズムを解析しやすくなる
- 乱数を使わないとできないことが，乱数を使うとできる

前進問題

設定

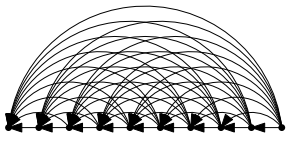
- 頂点集合を $\{1, 2, \ldots, n\}$ とする有向グラフ $(n \geq 2)$
- 大きな数から小さな数へ向かう辺が必ず存在

行うこと

- 頂点 n から始めて，辺をたどることで頂点 1 に到達

問題

- 辺をいくつたどれば頂点 1 に到達できるか？



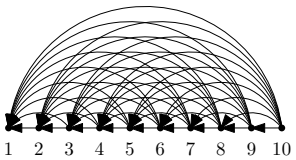
単純なアルゴリズム 1 (乱数を使わない)

1. たどる辺を **任意** に選び，辺の先に移動する
2. 移動先から出る辺がなければ終了，そうでなければ 1 に戻る

たどる辺の数

- 最悪の場合：$n - 1$ 個
- (最善の場合：1 個)

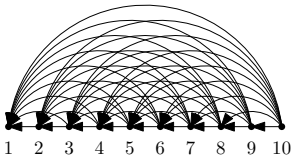
最悪計算量の意味では，よくないアルゴリズム

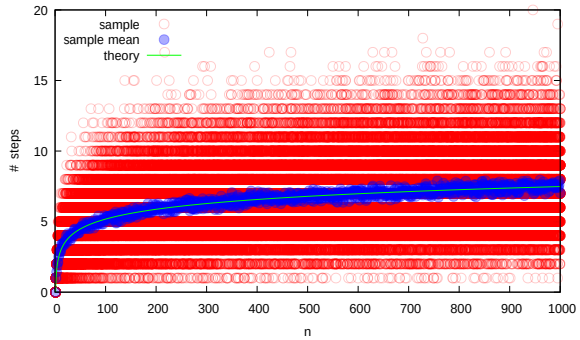


単純なアルゴリズム 2 (乱数を使う)

1. たどる辺を **一様分布に従って** に選び，辺の先に移動する
2. 移動先から出る辺がなければ終了，そうでなければ 1 に戻る

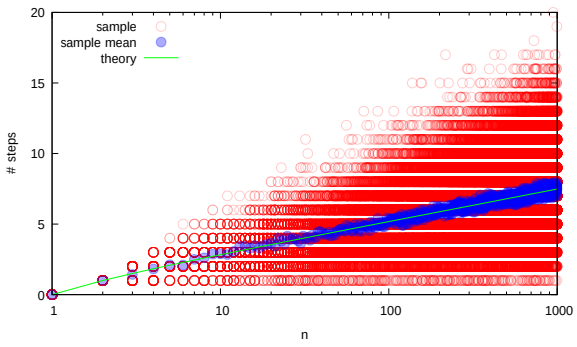
一様分布に従って選ぶ ≡ 出る辺が k 個ある場合，それぞれを確率 $1/k$ で選ぶ





各 n に対して，100 回実行

乱数を使うアルゴリズム：シミュレーション — 横軸が対数



各 n に対して，100 回実行

乱数を使うアルゴリズム：たどる辺の数の期待値

性質：アルゴリズム 2 でたどる辺数の期待値

単純なアルゴリズム 2 がたどる辺の数の期待値は H_{n-1}

復習：H_{n-1} は $n-1$ 次調和数 であり，

$$H_{n-1} = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \cdots + \frac{1}{n-1}$$

事実として，$H_{n-1} = \ln n + O(1)$ が成り立つ

- つまり，単純なアルゴリズム 2 がたどる辺の数の期待値は $O(\log n)$

乱数を使うアルゴリズム：たどる辺の数の期待値 — 証明 (1)

- 任意の $k \in \{1, 2, \ldots, n\}$ に対して，次の確率変数 R_k を定義

  R_k ＝ 頂点 k から始めて，頂点 1 への到達までにたどる辺数

- このとき，$\mathsf{E}[R_1] = 0$ で，$k \geq 2$ のとき，

$$\begin{aligned}
\mathsf{E}[R_k] &= \sum_{i=1}^{k-1} \mathsf{E}[R_k \mid \text{頂点 } k \text{ から頂点 } i \text{ に向かう辺を選ぶ}] \\
&\qquad \cdot \Pr(\text{頂点 } k \text{ から頂点 } i \text{ に向かう辺を選ぶ}) \\
&= \sum_{i=1}^{k-1} (\mathsf{E}[1 + R_i]) \cdot \frac{1}{k-1} = \sum_{i=1}^{k-1} (1 + \mathsf{E}[R_i]) \cdot \frac{1}{k-1} \\
&= 1 + \frac{1}{k-1} \sum_{i=1}^{k-1} \mathsf{E}[R_i]
\end{aligned}$$

- この漸化式を解きたい

解きたい漸化式：再掲

解きたい漸化式

$$\mathsf{E}[R_k] = \begin{cases} 0 & (k = 1) \\ 1 + \dfrac{1}{k-1} \displaystyle\sum_{i=1}^{k-1} \mathsf{E}[R_i] & (k \geq 2) \end{cases}$$

$k \geq 2$ のとき，両辺を $k-1$ 倍すると

$$(k-1)\mathsf{E}[R_k] = k - 1 + \sum_{i=1}^{k-1} \mathsf{E}[R_i]$$

乱数を使うアルゴリズム：たどる辺の数の期待値 — 証明 (2)

- $k \geq 2$ のとき，両辺を $k-1$ 倍すると

$$(k-1)\mathsf{E}[R_k] = k - 1 + \sum_{i=1}^{k-1} \mathsf{E}[R_i]$$

- よって，$k \geq 3$ のとき

$$(k-2)\mathsf{E}[R_{k-1}] = k - 2 + \sum_{i=1}^{k-2} \mathsf{E}[R_i]$$

- 上の式から下の式を引くと，$k \geq 3$ のとき

$$\begin{aligned}
(k-1)\mathsf{E}[R_k] - (k-2)\mathsf{E}[R_{k-1}] &= 1 + \mathsf{E}[R_{k-1}] \\
(k-1)\mathsf{E}[R_k] &= 1 + (k-1)\mathsf{E}[R_{k-1}] \\
\mathsf{E}[R_k] &= \frac{1}{k-1} + \mathsf{E}[R_{k-1}]
\end{aligned}$$

乱数を使うアルゴリズム：たどる辺の数の期待値 — 証明 (3)

- したがって，$k \geq 3$ のとき　　(厳密には数学的帰納法で証明)

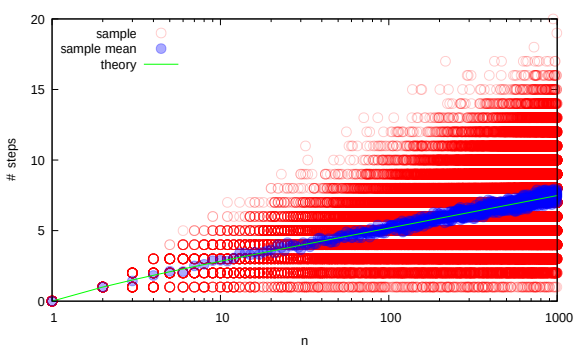
$$\begin{aligned}
\mathsf{E}[R_k] &= \frac{1}{k-1} + \mathsf{E}[R_{k-1}] \\
&= \frac{1}{k-1} + \frac{1}{k-2} + \mathsf{E}[R_{k-2}] \\
&= \cdots \\
&= \frac{1}{k-1} + \frac{1}{k-2} + \cdots + \frac{1}{2} + \underbrace{\mathsf{E}[R_2]}_{=1} \\
&= H_{k-1}
\end{aligned}$$

- 特に，$n \geq 2$ に対して，

$$\mathsf{E}[R_n] = H_{n-1}$$

□

乱数を使うアルゴリズム：シミュレーション — 横軸が対数：再掲



各 n に対して，100 回実行

期待値が分かるとなぜよいか？

期待値が分かると何が分かるか？

たどる辺数の期待値が分かったからといって，
アルゴリズムがそれだけの辺数しかたどらないとは限らない
(乱数を使っているから)

- しかし，期待値が分かると，マルコフの不等式から次が得られる

$$\begin{aligned}
\Pr(R_n \geq 2H_{n-1}) &\leq \frac{\mathsf{E}[R_n]}{2H_{n-1}} \\
&= \frac{H_{n-1}}{2H_{n-1}} = \frac{1}{2}
\end{aligned}$$

- つまり，$\Pr(R_n < 2H_{n-1}) \geq 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$
- $\frac{1}{2}$ 以上の確率で，たどる辺数は少ない ($2H_{n-1}$ 未満)

しっかりとした確率を導出するために，チェルノフ上界の技法を使う

前進問題：チェルノフ上界の技法

- R_n の代わりに 2^{R_n} を考えてみる

証明したいこと

任意の $k = 1, 2, \ldots, n$ に対して

$$\mathsf{E}[2^{R_k}] = k$$

- これが正しいとすると，

$$\begin{aligned}\Pr(R_n \geq 2\log_2 n) &= \Pr(2^{R_n} \geq 2^{2\log_2 n}) \\ &= \Pr(2^{R_n} \geq n^2) \leq \frac{\mathsf{E}[2^{R_n}]}{n^2} = \frac{1}{n}\end{aligned}$$

- つまり，$1 - \frac{1}{n}$ 以上の確率でたどる辺数は少ない ($2\log_2 n$ 未満)

$$\Pr(R_n < 2\log_2 n) = 1 - \Pr(R_n \geq 2\log_2 n) \geq 1 - \frac{1}{n}$$

前進問題：チェルノフ上界の技法 — 証明 (1)

先ほどと同様な手順で進める

- $\mathsf{E}[2^{R_1}] = \mathsf{E}[2^0] = 1$, $\mathsf{E}[2^{R_2}] = \mathsf{E}[2^1] = 2$ で，$k \geq 2$ のとき，

$$\begin{aligned}\mathsf{E}[2^{R_k}] &= \sum_{i=1}^{k-1} \mathsf{E}[2^{R_k} \mid \text{頂点 } k \text{ から頂点 } i \text{ に向かう辺を選ぶ}] \\ &\qquad \cdot \Pr(\text{頂点 } k \text{ から頂点 } i \text{ に向かう辺を選ぶ}) \\ &= \sum_{i=1}^{k-1} \mathsf{E}[2^{1+R_i}] \cdot \frac{1}{k-1} = \sum_{i=1}^{k-1} \mathsf{E}[2 \cdot 2^{R_i}] \cdot \frac{1}{k-1} \\ &= \sum_{i=1}^{k-1} 2\,\mathsf{E}[2^{R_i}] \cdot \frac{1}{k-1} = \frac{2}{k-1} \sum_{i=1}^{k-1} \mathsf{E}[2^{R_i}]\end{aligned}$$

- この漸化式を解きたい

前進問題：チェルノフ上界の技法 — 解きたい漸化式

解きたい漸化式

$$\mathsf{E}[2^{R_k}] = \begin{cases} 1 & (k = 1) \\ \dfrac{2}{k-1} \displaystyle\sum_{i=1}^{k-1} \mathsf{E}[2^{R_i}] & (k \geq 2) \end{cases}$$

前進問題：チェルノフ上界の技法 — 証明 (2)

- $k \geq 2$ のとき，両辺を $k-1$ 倍すると

$$(k-1)\mathsf{E}[2^{R_k}] = 2\sum_{i=1}^{k-1} \mathsf{E}[2^{R_i}]$$

- よって，$k \geq 3$ のとき

$$(k-2)\mathsf{E}[2^{R_{k-1}}] = 2\sum_{i=1}^{k-2} \mathsf{E}[2^{R_i}]$$

- 上の式から下の式を引くと，$k \geq 3$ のとき

$$\begin{aligned}(k-1)\mathsf{E}[2^{R_k}] - (k-2)\mathsf{E}[2^{R_{k-1}}] &= 2\mathsf{E}[2^{R_{k-1}}] \\ \mathsf{E}[2^{R_k}] &= \frac{k}{k-1}\mathsf{E}[2^{R_{k-1}}]\end{aligned}$$

前進問題：チェルノフ上界の技法 — 証明 (3)

- したがって，$k \geq 3$ のとき　　(厳密には数学的帰納法で証明)

$$\begin{aligned}\mathsf{E}[2^{R_k}] &= \frac{k}{k-1}\mathsf{E}[2^{R_{k-1}}] \\ &= \frac{k}{k-1} \cdot \frac{k-1}{k-2}\mathsf{E}[2^{R_{k-2}}] \\ &= \cdots \\ &= \frac{k}{k-1} \cdot \frac{k-1}{k-2} \cdot \cdots \cdot \frac{3}{2}\mathsf{E}[2^{R_2}] \\ &= k\end{aligned}$$

□

前進問題：まとめ

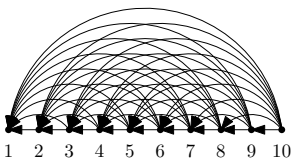
乱数を使わないアルゴリズム

- 最悪時：たどる辺数 $= n - 1$

乱択アルゴリズム

- 期待値：たどる辺数 $= H_{n-1}$ $(= \ln n + O(1))$
- 高確率：たどる辺数 $= O(\log n)$

∴ 乱数を使うことで，問題を高速に解けた



目次

ソーティング

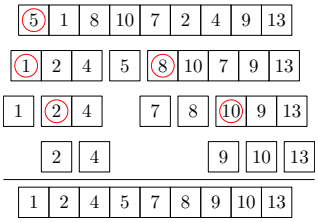
ソーティング (整列問題) とは？

- 入力：異なる n 個の数から成る配列 $A = (a_1, a_2, \ldots, a_n)$ (配列)
- 出力：A の並べ替え $A' = (a'_1, a'_2, \ldots, a'_n)$ で，
  $a'_1 < a'_2 < \cdots < a'_n$ を満たすもの

例：$A = (8, 3, 5, 1, 7, 9, 2, 4) \rightsquigarrow A' = (1, 2, 3, 4, 5, 7, 8, 9)$

アルゴリズムにおける基本的な問題

クイックソート：実行例



クイックソート：基本的な考え方

クイックソート

再帰によってソーティングを行うアルゴリズム (の 1 つ)

1. A から要素を 1 つ選択 (その要素を **ピボット** と呼ぶ)
2. A を 3 つの部分に分割
   - A_1：ピボットよりも小さい要素から成る配列
   - p：ピボット
   - A_2：ピボットよりも大きい要素から成る配列
3. A_1 と A_2 を再帰的に整列 (結果をそれぞれ A_1', A_2' とする)
4. A_1' と p と A_2' をこの順に連結して出力

- アルゴリズムの正当性は直ちに分かる
- ピボットの選択法，A_1, A_2 の作成法によって，細かな実装が変わる

クイックソート：ピボット選択法

ピボットの選択法，A_1, A_2 の作成法によって，細かな実装が変わる

よく使われるピボット選択法

- 配列の先頭の要素をピボットとする
- 配列の先頭の 3 要素の中央値をピボットとする
- 配列の中のランダムな要素をピボットとする　　(乱択アルゴリズム)
  (各要素が選択される確率は同一 (一様分布に従う標本抽出))

乱択クイックソート

乱択クイックソート (適当な疑似コード)

```
 1: def quicksort(A) # A: array of distinct numbers
 2:   return nil if length(A) == 0
 3:   p = a number in A chosen uniformly at random
 4:   delete p from A
 5:   foreach e in A {
 6:     print "G"
 7:     if e < p then add e to A1 else add e to A2
 8:   }
 9:   return quicksort(A1) + p + quicksort(A2)
10: end
```


乱択クイックソート

乱択クイックソート (Ruby)

```
 1: def quicksort(a)
 2:   return nil.to_a if a.length == 0
 3:   p = a.sample()
 4:   a.delete(p)
4':   a1 = Array.new(); a2 = Array.new()
 5:   a.each { |e|
 6:     print "G"
 7:     e < p ? a1 << e : a2 << e
 8:   }
 9:   return quicksort(a1) + [p] + quicksort(a2)
10: end
```


ソーティング・アルゴリズムの理論的性能評価

評価尺度として，以下のものがよく用いられる

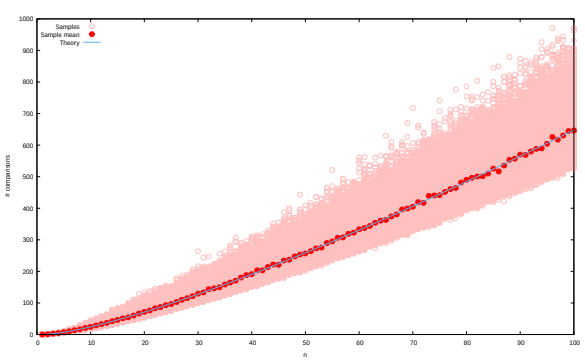
- 比較回数：2 要素の比較を行った回数
- 移動回数：要素を移動した回数
- 領域量：入力配列以外に用いた変数の数

ここでは，**比較回数** に注目 (比較回数 = 出力された G の個数)

- 乱択クイックソートにおいて，
  比較回数は使用される乱数によって変わる　　(つまり，確率変数)
  X_A = 入力 A に対する乱択クイックソートの比較回数　(確率変数)

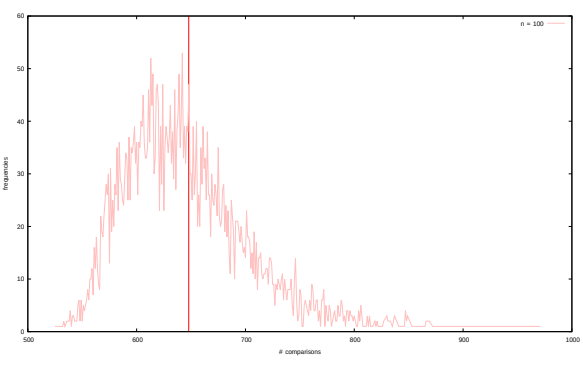
クイックソート：実験してみた (1)

各 n に対して，入力を $(n, n-1, \ldots, 1)$ として，5050 回実行



クイックソート：実験してみた (2)

比較回数の頻度分布



$n = 100$ のとき，入力を $(n, n-1, \ldots, 1)$ として 5050 回実行した

乱択クイックソートの解析：注目する確率変数

X_A = 入力 A に対する乱択クイックソートの比較回数 (確率変数)
x_n = 入力サイズを n としたときの，最悪時期待比較回数
$= \max\{\mathsf{E}[X_A] \mid |A| = n\}$ (実数)

目標：次を証明すること

x_n が小さいこと (具体的には，$x_n = O(n \log n)$ となること)

そのために x_n が満たす漸化式を導出する

- $x_0 = 0$ (要素数 0 の入力に対して，比較は行わない)

乱択クイックソートの解析：漸化式 (1)

$n \geq 1$ のとき，$x_n = \mathsf{E}[X_A]$ となるような入力 A を考えてみると

$$\begin{aligned} x_n &= \mathsf{E}[X_A] \\ &= \sum_{i=1}^{n} \mathsf{E}[X_A \mid a'_i \text{ がピボット}] \Pr(a'_i \text{ がピボット}) \\ &\quad (\text{ただし，} a'_i \text{ は } A \text{ の中で } i \text{ 番目に小さい要素}) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \mathsf{E}[X_A \mid a'_i \text{ がピボット}] \frac{1}{n} \end{aligned}$$

乱択クイックソートの解析：漸化式 (2)

$n \geq 1$ のとき，$x_n = \mathsf{E}[X_A]$ となるような入力 A を考えてみると

$$x_n = \sum_{i=1}^{n} \mathsf{E}[X_A \mid a'_i \text{ がピボット}] \frac{1}{n}$$

(ただし，a'_i は A の中で i 番目に小さい要素)

ここで，a'_i がピボットであるとき

- $|A_1| = i - 1$，$|A_2| = n - i$
- $\therefore \mathsf{E}[X_{A_1}] \leq x_{i-1}$ かつ $\mathsf{E}[X_{A_2}] \leq x_{n-i}$

したがって，$n \geq 1$ のとき

$$x_n \leq \sum_{i=1}^{n} (n - 1 + x_{i-1} + x_{n-i}) \frac{1}{n} = n - 1 + \sum_{i=0}^{n-1} \frac{2}{n} x_i$$

乱択クイックソートの解析：漸化式 (3)

x_n に関して得られた漸化式

$$\begin{aligned} x_0 &= 0 \\ x_n &\leq n - 1 + \sum_{i=0}^{n-1} \frac{2}{n} x_i \quad (n \geq 1) \end{aligned}$$

ここで，次の漸化式を満たす数列 $\{t_n\}_{n \geq 0}$ を考える

$$\begin{aligned} t_0 &= 0 \\ t_n &= n - 1 + \sum_{i=0}^{n-1} \frac{2}{n} t_i \quad (n \geq 1) \end{aligned}$$

- このとき，任意の $n \geq 0$ に対して次が成り立つ (演習問題)

$$x_n \leq t_n$$

- つまり，t_n の上界が分かれば，x_n の上界となる

漸化式を解く (1)

$$t_n = n - 1 + \sum_{i=0}^{n-1} \frac{2}{n} t_i \quad (n \geq 1)$$

この式において，添え字をずらしたものを考えると

$$t_{n+1} = n + \sum_{i=0}^{n} \frac{2}{n+1} t_i \quad (n \geq 0)$$

これら 2 つの式を変形すると

$$\begin{aligned} n t_n &= (n-1)n + \sum_{i=0}^{n-1} 2t_i \quad (n \geq 1) \\ (n+1) t_{n+1} &= n(n+1) + \sum_{i=0}^{n} 2t_i \quad (n \geq 0) \end{aligned}$$

下から上を引くと，$n \geq 1$ のとき，

$$(n+1) t_{n+1} - n t_n = 2n + 2t_n$$

漸化式を解く (2)

整理すると，$n \geq 1$ のとき，

$$(n+1) t_{n+1} = 2n + (n+2) t_n$$

両辺を $2(n+1)(n+2)$ で割ると，$n \geq 1$ のとき，

$$\frac{t_{n+1}}{2(n+2)} = \frac{n}{(n+1)(n+2)} + \frac{t_n}{2(n+1)}$$

ここで，$s_n = \frac{t_n}{2(n+1)}$ と置くと，得られる漸化式は

$$\begin{aligned} s_0 &= \frac{t_0}{2(0+1)} = 0 \\ s_1 &= \frac{t_1}{2(1+1)} = 0 \\ s_{n+1} &= \frac{2}{n+2} - \frac{1}{n+1} + s_n \quad (n \geq 1) \end{aligned}$$

解けそうな形に近づいてきた

漸化式を解く (3)

$n \geq 2$ のとき，

$$\begin{aligned} s_n &= \frac{2}{n+1} - \frac{1}{n} + s_{n-1} \\ &= \left(\frac{2}{n+1} - \frac{1}{n}\right) + \left(\frac{2}{n} - \frac{1}{n-1}\right) + s_{n-2} \\ &= \left(\frac{2}{n+1} - \frac{1}{n}\right) + \left(\frac{2}{n} - \frac{1}{n-1}\right) + \cdots + \left(\frac{2}{3} - \frac{1}{2}\right) + s_1 \\ &= \frac{2}{n+1} + \frac{1}{n} + \frac{1}{n-1} + \cdots + \frac{1}{3} - \frac{1}{2} \\ &= \frac{1}{n+1} + H_{n+1} - \frac{1}{2} - 1 - \frac{1}{2} \\ &= H_{n+1} + \frac{1}{n+1} - 2 \end{aligned}$$

復習：$H_{n+1} = 1 + \frac{1}{2} + \cdots + \frac{1}{n+1}$ (調和数)

漸化式を解く (4)

したがって，$n \geq 0$ に対して，

$$s_n = H_{n+1} + \frac{1}{n+1} - 2$$

したがって，$n \geq 0$ に対して，

$$t_n = 2(n+1) s_n = 2(n+1) H_{n+1} + 2 - 4(n+1)$$

したがって，

$$x_n \leq t_n = 2(n+1) H_{n+1} + 2 - 4(n+1)$$

$H_{n+1} \leq 1 + \ln(n+1)$ なので (第 9 回の演習問題)

$$\begin{aligned} x_n &\leq 2(n+1)(1 + \ln(n+1)) + 2 - 4(n+1) \\ &= 2(n+1)\ln(n+1) - 2n = O(n \log n) \end{aligned}$$

乱択クイックソートの解析：まとめ

ここまでで分かったこと

任意の $n \geq 0$ と，$|A| = n$ であるような任意の入力 A に対して

$$\mathsf{E}[X_A] \leq 2(n+1)\ln(n+1)$$

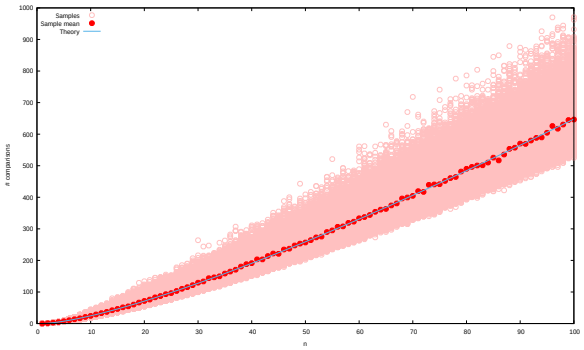
したがって，マルコフの不等式を適用してみると

$$\begin{aligned} \Pr(X_A \geq 4(n+1)\ln(n+1)) &\leq \frac{\mathsf{E}[X_A]}{4(n+1)\ln(n+1)} \\ &\leq \frac{2(n+1)\ln(n+1)}{4(n+1)\ln(n+1)} = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

- つまり，比較回数が $4(n+1)\ln(n+1)$ を超える確率は高くない
- 「チェルノフ上界の技法」を用いると，
  $n \to \infty$ のとき，この確率が 0 に収束することを証明できる
  (ちょっと面倒で，他のアイディアも必要なので，省略)

クイックソート：実験してみた (1) 再掲

各 n に対して，入力を $(n, n-1, \ldots, 1)$ として，5050 回実行



青い線 は $t_n = 2(n+1)H_{n+1} + 2 - 4(n+1)$ を示している

目次

今日の目標

今日の目標

典型的な乱択アルゴリズムの解析ができるようになる

- 前進問題
- 乱択クイックソート