スーパーコン 2010 本選問題：背景

岡本 吉央 (東京工業大学)

2010 年 8 月 26 日

注：この文書は最終トライアルが行われる前に書かれていますので，審査結果は反映していません．

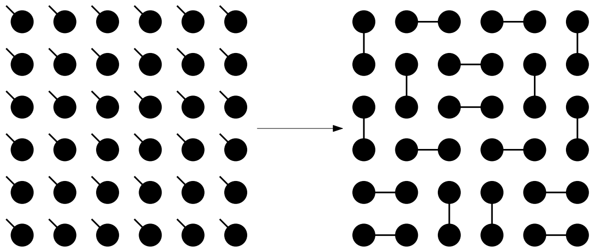
出場者の皆様，今年の問題「レンガ敷き詰め問題」はいかがだったでしょうか．今回の問題は (1) 理解しやすい，(2) アルゴリズムにおける工夫がしやすい，(3) 順位がはっきりと決まりやすい，(4) 科学的な背景がはっきりとしている，という観点から考案しました．実際に，出場者の皆さんが「理解しやすい」，「アルゴリズムにおける工夫がしやすい」と感じたのかどうかはよく分からないので，ご意見をいただけるとありがたいです．

ここでは上の 4 番目の項目「科学的な背景がはっきりとしている」という点について，実際にどのような背景があるのか説明していきます．

1 起源は統計物理学に...

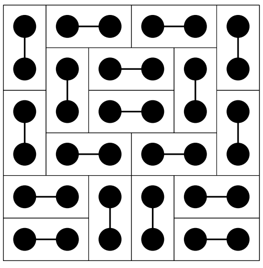
ことばだけをまず並べると，今回のレンガ敷き詰め問題は「二量体モデルにおける分配関数の計算問題」です．これは一体何でしょう？

次の図のように格子状に粒子が並んでいて，それらが 1 つずつ手を持っているとします．どの粒子も他の粒子と手をつなぎたいのですが，遠くの粒子とはつなげません．このまま放っておくと，この系は安定な状態に落ち着きますが，そのとき，(ほとんど) すべての粒子は他の粒子と手をつなぎます．これが二量体モデル (dimer model) です．統計物理学における様々な問題がこの単純な二量体モデルを用いて調べられています．



この二量体モデルにおいて，すべての粒子が手をつないでいる状態の数を分配関数 (partition function) と呼んでいます．分配関数が分かると，そこから自由エネルギー，エントロピーなど，この系に関する有用な熱力学的情報を知ることができます．そのため，分配関数の計算が統計物理学では大きなテーマになっています．

これとレンガの敷き詰めはどのように関係しているのでしょうか？ それは次の図を見てもらえば分かると思います．つまり，粒子が 1×1 のマス目に対応し，手をつないだ 2 つの粒子がレンガに対応するのです．これによって，分配関数はレンガの敷き詰め方の総数に一致することが分かります．レンガの敷き詰めでは障害物が存在していましたが，それが二量体モデルでは系内の不純物や空白に対応することになります．



二量体モデルのことばで語るのはここで終わりにして，慣れ親しんだレンガと広場のことばで話を進めていきます．

2　驚愕の公式 — 組合せ論から

障害物のない広場に対しては，レンガの敷き詰め方の総数が完全に分かっています．つまり，公式が知られているということです．これはカステリン (Kasteleyn)，テンパリー (Temperley)，フィッシャー (Fisher) が発見した公式で，障害物のない $m \times n$ の広場をレンガで敷き詰める方法の総数がちょうど

$$\prod_{i=1}^{m} \prod_{j=1}^{n} \left(4\cos^2 \frac{\pi i}{m+1} + 4\cos^2 \frac{\pi j}{n+1} \right)^{1/4}$$

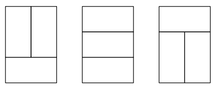
になる，というものです．ただし，cos の後の角の単位はラジアンで，$\prod$ は $\sum$ に似た記号ですが積 (乗算) を表します．この公式が発見されたのは 1961 年のことでした．

この式は驚きです．どうしてこの式が「○○する方法の総数」，すなわち自然数を与えるのでしょうか？しかし，実際そうなのです．そして，m と n が奇数であるとき，これは 0 になるのです．

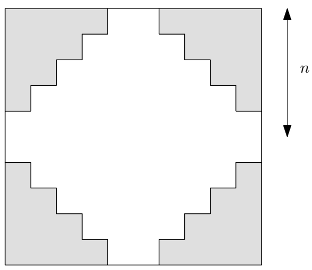
例えば，$m = 3$，$n = 2$ のとき，この式を評価すると，

$$\begin{aligned}
&\left(4\cos^2\frac{\pi}{4} + 4\cos^2\frac{\pi}{3}\right) \cdot \left(4\cos^2\frac{2\pi}{4} + 4\cos^2\frac{\pi}{3}\right) \cdot \left(4\cos^2\frac{3\pi}{4} + 4\cos^2\frac{\pi}{3}\right) \\
&\cdot \left(4\cos^2\frac{\pi}{4} + 4\cos^2\frac{2\pi}{3}\right) \cdot \left(4\cos^2\frac{2\pi}{4} + 4\cos^2\frac{2\pi}{3}\right) \cdot \left(4\cos^2\frac{3\pi}{4} + 4\cos^2\frac{2\pi}{3}\right) \\
&\quad = \left(4 \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 + 4 \cdot \left(\frac{1}{2}\right)^2\right) \cdot \left(4 \cdot 0^2 + 4 \cdot \left(\frac{1}{2}\right)^2\right) \cdot \left(4 \cdot \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 + 4 \cdot \left(\frac{1}{2}\right)^2\right) \\
&\qquad \cdot \left(4 \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 + 4 \cdot \left(-\frac{1}{2}\right)^2\right) \cdot \left(4 \cdot 0^2 + 4 \cdot \left(-\frac{1}{2}\right)^2\right) \cdot \left(4 \cdot \left(-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 + 4 \cdot \left(-\frac{1}{2}\right)^2\right) \\
&= (2+1) \cdot (0+1) \cdot (2+1) \cdot (2+1) \cdot (0+1) \cdot (2+1) = 3^4
\end{aligned}$$

の 4 乗根なので，敷き詰め方の総数は 3 です．次の図のとおりです．



障害物があっても，敷き詰め方の総数に対する公式が与えられている場合もあります．例えば，次のような広場を考えます．



これは「アステカのダイアモンド」 (Aztec diamond) と呼ばれる形で，縦と横の長さが $2n$ であり，図では $n = 5$ の場合を表しています．エルキーズ (Elkies)，クパーバーグ (Kuperberg)，ラーゼン (Larsen)，プロップ (Propp) は，アステカのダイアモンドにレンガを敷き詰める方法の総数が $2^{n(n+1)/2}$ であることを証明しました．つまり，上の $n = 5$ に対するアステカのダイアモンドでは，敷き詰め方の総数が $2^{5 \cdot 6/2} = 2^{15} = 32768$

になるというのです．この公式が発見されたのは 1992 年のことです．ちょうど皆さんが生まれた頃になります．

他にも，障害物の置かれ方が特殊であるいろいろな場合に敷き詰め方の総数の公式が知られていて，これは「数え上げ組合せ論」(enumerative combinatorics) において，重要なテーマになっています．簡単な解説を鳥取大学の石川先生が数学セミナーに書いていますので，参考にして下さい [1].

3 数え上げ問題 — 計算理論の側面から

統計物理学を動機とした問題が数え上げ組合せ論という数学の分野で研究されている，ということを説明してきました．

今回の問題は数を計算する問題だったのですが，そのような問題は「数え上げ問題」または「計数問題」と呼ばれたりします．計算理論の視点からは，今回の本選問題が多項式時間で解ける簡単な問題なのか，そうではない難しい問題なのか，ということが気になります．実を言うと，今回の問題は前者の簡単に解ける問題になっています．しかし，その解法 (アルゴリズム) は複雑で，簡単に書くことができません．

それでは肩すかしの度合いが大きすぎるので，キーワードだけを並べておきます．

- グラフの問題への変換．ここでいうグラフは，いわゆる「点と線の図」のこと．
  キーワード：グラフ，完全マッチング

- 線形代数の問題への変換．ここの部分があるため，高校生に説明することが困難．
  キーワード：パーマネント，行列式，パフィアン，パフィアン向き付け
  この部分のアイディアは実を言うとカステリン，テンパリー，フィッシャーが提案したものと同じです．

- 変換した問題が多項式時間で解けることの説明．ここはいわゆる「行列式の計算」．
  キーワード：ガウスの消去法，体

ちなみに,「本選課題説明」で出てきた数学者はパフ (Pfaff) です．彼の名前がパフィアン (Pfaffian) の由来になっています．

ここで注意しないといけないのですが，今回のコンテストではこの多項式時間アルゴリズムを思いつくこと，あるいは，知っていることによって得をすることはほとんどない (はず) です．その理由を説明することも簡単ではないのですが，あえて簡単に書こうとすると，今回の問題では「k で割った余り」を回答しなくてはいけないのに対して，このアルゴリズムは「割り算」という操作を使っているからです.「割り算」と「余りを取る操作」の相性はとても悪いのです．

数え上げ問題に対する計算理論の始まりはヴァリアント (Valiant) が 1979 年に書いた論文にあります[1]．彼は難しい数え上げ問題を「#P 完全問題」として捉え，重要ないくつかの問題が#P 完全であることを証明しました．(「#P」は「ナンバー・ピー」と読みます．)

また，ヴァリアントは量子アルゴリズムのアイディアと今回の問題に対する多項式時間アルゴリズムを組み合わせて,「ホログラム・アルゴリズム」(holographic algorithm) という枠組を 2004 年に提案しました．これは数え上げ問題に対する新しいアプローチとして計算理論では注目されています．特に，ヴァリアントは 2006 年，その枠組によって，ある自然な数え上げ問題に対して，その答えを 2 で割った余りを求めることは難しいのに，7 で割った余りを求めることは多項式時間で可能であるという，数え上げ問題に対して人々が描いていたイメージをぶち壊すような結果を発表しました．どうして 2 で割った余りを計算

[1] このヴァリアントという人は計算理論に大きな功績を残していて，数え上げ問題に対する計算理論を推し進めただけではなく，並列計算の理論モデルを提案したり，計算論的学習理論を創始したり，最近では「進化可能性の計算理論」というものを始めたり，と新しい枠組をどんどんと提案しています．

することが難しいのに，7 で割った余りを計算することが簡単であるということがあり得るのでしょうか？不思議です．

数え上げ問題は応用上重要であるばかりでなく，理論上も人々を魅了し続ける話題なのです．

4　探索木による列挙と動的計画法

「戦略のヒント」で簡単に説明した「探索木による列挙」と「動的計画法」はどちらもアルゴリズムを体系的に設計する枠組です．

動的計画法 (dynamic programming) はベルマン (Bellman) が 1940 年代に提案した枠組で，もともと最適制御問題や最適方策決定問題を定式化するために使われました．つまり，動的計画法は元来アルゴリズムの名前ではありません．「動的」といっている理由は，当時考えられていた「○○計画法」と呼ばれる他の枠組と違い，(制御のように) 時間軸を考慮した最適化問題を扱っていたからです．

動的計画法をアルゴリズム設計に応用できることに気付いたのもベルマンでした．ベルマンは 1962 年に巡回セールスマン問題と呼ばれる最適化問題に動的計画法を適用することで，単純に計算すると $n!$ に比例する時間がかかってしまうところを，およそ 2^n に比例する時間で計算を済ませることを示しました (同じ結果をヘルド (Held) とカープ (Karp) が 1962 年独立に示しました)．その他にも，最短経路問題やスケジューリングの問題についても動的計画法を適用することで効率のよいアルゴリズムを導きました．動的計画法が適用できる問題は，いわゆる「最適性の原理」を満たす問題であり，ある意味で特殊な構造を持つ問題にしか適用できないのですが，適用できる場合には大きな効果を発揮します．

巡回セールスマン問題に対するおよそ 2^n に比例する計算時間はこの問題に対して知られている中で最も速いアルゴリズムの計算時間でした．約 50 年の間，この記録は破られていなかったのですが，今年 (2010 年) の 8 月 (!) にビョークルンド (Björklund) は計算量がおよそ 1.657^n に比例するアルゴリズムを発表しました．そのアルゴリズムを書くこともまた簡単にはできないのですが，基本的なアイディアは，驚くことなかれ，線形代数なのです．

動的計画法が特殊な構造を持つ問題にしか適用できないのに対して，探索木を用いた列挙は広い範囲の問題に適用できます．その代わりに，効率は動的計画法より劣る場合が多いです．ここでは紙面が底を尽きましたので，効率を上げるための探索木構築法については私の短い解説 [2] を参照して下さい．

5　最後に

今回の問題には，統計物理からの動機，数学的な理論の深み，そして，アルゴリズム設計における最近の進展のすべてが備わっているのです．また，ここでは言及しませんでしたが,「問題の生成」にもきれいな理論を使っているのです (キーワードだけ書くと,「マルコフ連鎖モンテカルロ法」 (Markov chain Monte Carlo method) という計算統計の手法)．様々な分野の視点や重なりを気にしながら，最先端の研究というものが進んでいるということを感じていただけたら幸いです．

参考文献

[1] 石川雅雄．代数的組合せ論．数学セミナー 2006 年 11 月号，日本評論社，pp. 32–36.

[2] 岡本吉央．離散最適化に対する高速な厳密アルゴリズム．日本オペレーションズ・リサーチ学会学会誌 2005 年 11 月号，pp. 763–769.