Vol.2011-AL-135 No.5
2011/5/16

有限グラフ上のランダムウォークの脱乱択化

来 嶋 秀 治[†1]　古賀 健太郎[†2]　牧 野 和 久[†3]

Propp 機械，あるいは rotor-router モデルは，ランダムウォークを模倣する決定的過程である．ランダムウォークにおいては，グラフ上をトークンがランダムに巡回するのに対し，Propp 機械においては，各頂点上の router があらかじめ定められた隣接点の順番に従って，トークンを隣接点に発射する．本稿では，有限グラフ上の Propp 機械に着目し，ランダムウォークモデルにおけるトークンの期待配置と Propp 機械におけるトークンの配置の誤差の上下界を見積もる．より正確には，任意のグラフに対し，単一頂点誤差が $\mathrm{O}(mn)$ であることを示す．ただし，m は枝数，n は頂点数を表す．下界としは，単一頂点誤差が $\Omega(m)$ となるようなグラフと配置を与える．

Deterministic Random Walks on Finite Graphs

Shuji Kijima,[†1] Kentaro Koga[†2]
and Kazuhisa Makino[†3]

Propp machine, also known as the rotor-router model, is a deterministic process which may emulate a random walk on a graph. In the process, tokens on each node are launched one by one to the neighboring nodes served in a prescribed order, instead of random choice. In this paper, we focus on finite graphs and investigate the difference between the number of tokens in the Propp machine and the expected number of tokens in a random walk. We show that for any initial configuration, at any time, the difference is bounded by $\mathrm{O}(mn)$ when the corresponding random walk is lazy and reversible, where n denotes the number of nodes and m denotes the number of edges. We also show a lower bound $\Omega(m)$ of the difference by providing graphs and initial configurations such that the difference on any node at any time (> 0) is $\Omega(m)$.

†1 九州大学, Kyushu University
†2 ファナック株式会社, FANUC Ltd.
†3 東京大学, University of Tokyo

1. はじめに

ランダムウォークの脱乱択化とは，決定的過程によって，ランダムウォークを模倣しようと言う試みである．denotes a deterministic process which aims at emulating a random walk on a graph. James Propp は *rotor-router* **モデル** (あるいは *Propp* **機械**としても知られる) モデルを解析し，このモデルは *deterministic random walk* (決定的ランダムウォーク) とも呼ばれる．ランダムウォークモデルでは，グラフの頂点上をトークンが隣接点をランダムに巡回するが，Propp 機械においては，グラフの頂点上に多数のトークンが配置され，各頂点上ではトークンをある決められた順序に従って，隣接頂点に発射する．

Propp 機械に関する既存研究　Propp 機械の研究はこの数年の間に大きな発展を見せている．Cooper and Spencer[4] は**複数トークン**型の Propp 機械を扱い，単一頂点上の誤差，すなわち各頂点における Propp 機械とランダムウォークのトークン数の誤差 (の期待値)，について解析を行った．彼らは d 次元の整数格子点 $\mathbb{Z}^d$ に対して，偶奇性条件を満たす任意の初期トークン配置，任意の rotor-router，任意の頂点，任意の時間について，単一頂点誤差は次元 d のみに依存し，総トークン数には依存しない定数 c_d で押さえられることを示した．後に，c_1 (すなわち整数直線) はおよそ 2.29[3]，c_2 は rotor-router が時計回りの場合はおよそ 7.83，それ以外を許す場合は 7.29 であることが示された[7]．一方，無限の k 正則木に対して，Cooper, Doerr, Friedrich, and Spencer[2] は非常に悪い初期トークン配置 (特に偶奇性条件を満たさない配置)，rotor-router，を与え，単一頂点誤差の上界が時間 T に関して $\Omega(\sqrt{kT})$ となり得ることを示した．

並列ウォーク型以外には，Holroyd and Propp[14] が有限グラフ上の**単一トークン**型の rotor-router モデルを解析している．彼らは，rotor-router モデルの訪問時間 (hitting time) を解析し，任意の時刻 t に対して，単一頂点誤差が任意の頂点 v について $|\nu^{(t)}(v)/t - \pi(v)| = \mathrm{O}(mn/t)$ で押さえられることを示した．ただし，$\nu^{(t)}(v)$ は時刻 t までに rotor-router モデルでトークンが頂点 v を訪れた回数を，π はランダムウォークの定常分布を表し，n と m はグラフの頂点数を枝数を表す．最近では，Friedrich and Sauerwald[13] が有限の木，スター，トーラス，超立方体，完全グラフなどのグラフについて，rotor-router 機械の全訪問時間 (cover time) を算定している．

Propp 機械に関連する別の話題としては，集合問題が解析されている[16),20)–22]．整数格子点 $\mathbb{Z}^d$ 上の Internal Diffusion-Limited Aggregation (IDLA) モデルにおいて，ランダム

ウォークモデルは漸近的にユークリッド球に収束することが知られており[19]，$\Theta(n^d)$ ステップ後の球面の最大半径と最小半径の誤差は $\mathrm{O}(n^{1/3}\mathrm{poly}(\log n))^{\star 1}$で押さえられることが知られている[18]．Propp 機械については，Levin and Peres[20)–22)] が，rotor-router aggregation モデルにおけるトークンはユークリッド球をなすことを示しており，Kleber[16] は計算機実験結果を与えている．

Doerr, Friedrich, and Sauerwald[9] は，共通高さの木，内点正則な木，連結度の制限されたランダムグラフなどの特殊なグラフにおいて，rotor-router による情報拡散がランダムウォークよりも速いことを示しており，Doerr, Friedrich, Künnemann, and Sauerwald[8] は計算機実験の結果を示している．このほか，rotor-router 機械による情報拡散に関する多数の研究が存在する[1),6),10)–12),15)]．

本稿の成果 本稿では有限グラフに焦点を置き，複数トークン型の Propp 機械について，単一頂点誤差の解析を行う．複数トークン型の Propp 機械に対する単一頂点誤差の解析に関する既存研究[2)–4),7)] すべては，無限の二部グラフのみを対象としてきた．したがって本稿では，誤差を頂点数 n と枝数 m を用いて押さえる．本研究は，有限グラフ上のマルコフ連鎖を用いた (乱択) アルゴリズム$^{\star 2}$．の脱乱択化を動機にもつ．この目的に即し，本稿では Propp 機械を (明示的に) 有向多重グラフを用いて定義し，乱択アルゴリズムにおいてよく仮定される reversible マルコフ連鎖との比較を行う (詳細は 2 章を参考にされたい).

本稿では，対応するマルコフ連鎖の遷移確率行列が非負の (実) 固有値のみを持つ場合に，任意の初期トークン配置と rotor-router に対して，単一頂点誤差が $\mathrm{O}(mn)$ で押さえられることを示す．この上界は，モデル中のトークンの個数に依存しないことに注意されたい．一般に lazy(すなわち非周期的) で reversible なマルコフ連鎖の遷移確率行列はこの条件を満たす[24] ことから，対応する Propp 機械を用いたシミュレーションの誤差は $\mathrm{O}(mn)$ であることが保証される．一方下界として，任意の時刻 (>0) において，誤差が $\Omega(m)$ となるような初期トークン配置と rotor-router が存在することも示す．また特殊なグラフとして，高次元超立方体の稜線グラフおよび Johnson グラフに対して，頂点数 (と枝数) の対数の多項式サイズの誤差の上界を与える．本稿で用いる解析手法は Cooper and Spencer[4] のものに倣うが，有限グラフを扱う特性上，“境界条件” の振る舞いに注意する必要がある．この点について，推移確率行列の積和の評価が必要になる．

$\star 1$ この時，球の半径は約 n となる．
$\star 2$ 例えば，マルコフ連鎖モンテカルロ法を用いた近似数え上げなど．

Holroyd and Propp[14] と本稿の結果との比較を行う．両者とも有限グラフ上の Propp 機械に対する単一頂点誤差の解析を行っているが，最大の違いは前者が単一トークンモデルを扱っているのに対し，本稿では複数トークンモデルを扱っており，証明手法はまったく異なる．複数トークンモデルを扱う利点の一つとして，シミュレーションの並列化の容易性が挙げられる．誤差算定の結果について比較すると，前者[14] の上界 $\mathrm{O}(mn/t)$ が時刻 t に関して小さくなるのに対し，本稿の上界 $\mathrm{O}(mn/N)$ はトークンの総数に関して小さくなり，比較不能である．また Holroyd and Propp[14] が定常分布との誤差を見積もっているのに対し，本稿では各時刻における分布の誤差を見積もっている点も異なっていることに注意されたい．

2. モ デ ル

有向多重グラフ $\mathcal{G}=(V,\mathcal{E})$ (すなわち多重辺を持つ有向グラフ) は頂点集合 V と枝集合 $\mathcal{E}$ を持ち，$n=|V|$，$m=|\mathcal{E}|$ とする．本稿では $\mathcal{G}$ は強連結を仮定する．グラフ $\mathcal{G}$ 上の頂点 $v\in V$ から出る枝の終端点の多重集合を $N(v)$ とし，$\delta(v)=|N(v)|$ とる．すなわち $\delta(v)$ は $\mathcal{G}$ 上の頂点 $v\in V$ の出次数を表す．特に，$\mathcal{E}$ が v で自己閉路を持つ時，$v\in N(v)$ であることに注意されたい．

いま，$n\times n$ 行列 P は $\mathcal{G}$ 上の**標準ランダムウォーク**を表すものとする．すなわち，

$$P(u,v)=\frac{|\{a\in\mathcal{E}\mid a=(u,v)\}|}{\delta(u)}$$

である．グラフ $\mathcal{G}$ が強連結の仮定より，P は既約である．ここで，M 個のトークンが遷移確率行列 P に従って，グラフ $\mathcal{G}$ 上を独立にランダムウォークすることを考える．グラフ $\mathcal{G}$ 上の M 個のトークンの初期配置を $\mu^{(0)}=(\mu^{(0)}_{v_1},\ldots,\mu^{(0)}_{v_n})\in\mathbb{Z}^n_+$ で表し，$\mu^{(t)}=(\mu^{(t)}_{v_1},\ldots,\mu^{(t)}_{v_n})\in\mathbb{R}^n_+$ で，時刻 $t\in\mathbb{Z}_+$ におけるトークン配置の期待値を表すことにする．すなわち，$\mu^{(t)}=\mu^{(0)}P^t$，であり，$\mu^{(t)}_v$ は時刻 t における頂点 $v\in V$ 上のトークンの個数の期待値を表す．

Propp **機械**は $\mu^{(t)}$ を模倣することを目的とした，決定的過程 (deterministic process) である．いま，$\chi^{(0)}(=\mu^{(0)})$ は M 個のトークンの $\mathcal{G}$ 上の初期配置を表し，$\chi^{(t)}$ で時刻 t における Propp 機械のトークン配置を表すものとし，以下に Propp 機械の振る舞いを述べる．Propp 機械では，各頂点 $v\in V$ において，多重集合 $N(v)$ 上に順序 $\rho_v(0),\ldots,\rho_v(\delta(v)-1)$ が定められている．記法の簡便のため，任意の $i\in\mathbb{Z}_+$ について，

$$\rho_v(i)\stackrel{\text{def.}}{=}\rho_v(i \bmod \delta(v))\ \left(\equiv\rho_v\left(i-\delta(v)\cdot\left\lfloor\frac{i}{\delta(v)}\right\rfloor\right)\right)$$

が成り立つものとする．順序 ρ_v を v の *rotor-router* と呼ぶことにし，この rotor-router

は 時刻 $t \in \mathbb{Z}_+$ において頂点 v 上にある $\chi_v^{(t)}$ 個のトークンを隣接頂点に向け発射する．より正確には，時刻 $t=0$ において頂点 $v \in V$ 上にある $\chi_v^{(0)}$ 個のトークンについて，j ($j \in \{1,\ldots,\chi_v^{(0)}\}$) 番目のトークンは rotor-router によって $\rho_v(j-1) \in N(v)$ に移動させられるものとし，v 上の rotor-router は時間 $(0,1)$ の間に $\chi_v^{(0)}$ 個のトークンを移動させる．再帰的に，時刻 $t \geq 1$ においては，$\chi_v^{(t)}$ 個のトークンが $v \in V$ 上にあり，v 上の rotor-router は隣接点 $\rho_v(\sum_{s=0}^{t-1} \chi_v^{(s)})$ を指しているものとすると，v の rotor-router は j ($j \in \{1,\ldots,\chi_v^{(t)}\}$) 番目のトークンを隣接点 $\rho_v(j-1+\sum_{s=0}^{t-1}\chi_v^{(s)}) \in N(v)$ に移動させ，時間 $(t,t+1)$ の間に $\chi_v^{(t)}$ 個のトークンすべてについて隣接点への移動を完了させ，時刻 $t+1$ を迎える．

本稿の目的は各 $w \in V$ と $T \geq 0$ について，誤差 $\left|\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)}\right|$ を見積もることである．主結果は以下のとおりである．

定理 1 行列 P の全ての固有値が非負の時[*1]，任意の初期トークン配置，任意の rotor-router について，

$$\left|\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)}\right| \leq (2m-n)\left(\max_{i\in\{1,\ldots,\kappa\}} n_i + n + 3\right) \ = \ 4mn + \mathrm{O}(m)$$

が任意の $w \in V$ と $T \geq 0$ について成り立つ．ただし，n_i ($i \in \{1,\ldots,\kappa\}$) は P のジョルダン標準形における i 番目のジョルダン細胞のサイズを表す． ■

定理 2 ある有向グラフとトークンの初期配置，rotor-router が存在して，$\left|\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)}\right| = \Omega(m)$ を任意の w と任意の T について満たし，さらに対応する遷移確率行列 P は正定値 (すなわち，P は対角化可能で、かつ全ての固有値は正) である．

また，第 4 章では，超立方体の稜線グラフと Johnson グラフに対して，頂点数の対数多項式の上界を与える．

3. 有限グラフ上の解析の骨子

3.1 概　　論

本 3.1 節の議論は，Cooper and Spencer[4)] によって開発された解析手法に (本質的に) 倣う．各 $v \in V$ および $t \in \mathbb{Z}_+$ について，$X_v^{(t)}$ で時間 $(0,t)$ の間に頂点 v を訪問したトークンの個数を表す．すなわち $X_v^{(t)} \stackrel{\text{def.}}{=} \sum_{s=0}^{t} \chi_v^{(s)}$．また，$s_v(i)$ は $v \in V$ で発射された全トークンの内，i 番目のトークンが発射された時刻を表す．具体的には

$$s_v(i) \stackrel{\text{def.}}{=} \min\left\{t \geq 0 \mid i < X_v^{(t)}\right\},$$

である．簡便のため，定義式中の t が存在しない場合には $s_v(i) = +\infty$ とする．

命題 3 任意の $w \in V$ と $T \in \mathbb{Z}_+$ について，

$$\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)} = \sum_{v\in V}\sum_{i=0}^{X_v^{(T-1)}-1}\left(P^{T-s_v(i)-1}(\rho_v(i),w) - P^{T-s_v(i)}(v,w)\right).$$

証明．まず，以下の**部分的に決定的ランダムウォーク**を考える．時刻 t における状態 $\chi^{(t)}$ から，時間 (t,T) の間ランダムウォークを行った後のトークン配置の期待値を $\zeta(w;t,T)$ で表す．定義から，$\zeta(w;T,T) = \chi_w^{(T)}$ と $\zeta(w;0,T) = \mu_w^{(T)}$ が成り立ち，すなわち

$$\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)} = \sum_{t=0}^{T-1}(\zeta(w;t+1,T) - \zeta(w;t,T)) \tag{1}$$

を得る．また，

$$\zeta(w;t+1,T) - \zeta(w;t,T) = \sum_{v\in V}\sum_{i=X_v^{(t-1)}}^{X_v^{(t)}-1}\left(P^{T-t-1}(\rho_v(i),w) - P^{T-t}(v,w)\right) \tag{2}$$

も定義より得られる．ただし $X_v^{(-1)} = 0$ とする．式 (1) と (2) より，

$$\begin{aligned}
\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)} &= \sum_{t=0}^{T-1}\sum_{v\in V}\sum_{i=X_v^{(t-1)}}^{X_v^{(t)}-1}\left(P^{T-t-1}(\rho_v(i),w) - P^{T-t}(v,w)\right) \\
&= \sum_{v\in V}\sum_{t=0}^{T-1}\sum_{i=X_v^{(t-1)}}^{X_v^{(t)}-1}\left(P^{T-t-1}(\rho_v(i),w) - P^{T-t}(v,w)\right) \\
&= \sum_{v\in V}\sum_{i=0}^{X_v^{(T-1)}-1}\left(P^{T-s_v(i)-1}(\rho_v(i),w) - P^{T-s_v(i)}(v,w)\right) \qquad (3)
\end{aligned}$$

を得る． □

ここで簡便のため，

[*1] もし P が対称の場合，この条件は P が正定値 (positive semidefinite) であることを意味する．

$$f_{v,w}(u,t) \stackrel{\text{def.}}{=} P^{t-1}(u,w) - P^{t}(v,w) \tag{4}$$

を $v \in V$, $u \in N(v)$, $w \in V$ に対して定義する．この $f_{v,w}$ は次の等式を満たす．

命題 4

$$f_{v,w}(\rho_v(0),t) = -\sum_{r=1}^{\delta(v)-1} f_{v,w}(\rho_v(r),t). \tag{5}$$

証明. 標準ランダムウォークの定義から次の式を得る．

$$P^t(v,w) = \frac{1}{\delta(v)} \sum_{r=0}^{\delta(v)-1} P^{t-1}(\rho_v(r),w).$$

したがって，

$$\begin{aligned}\textstyle\sum_{r=0}^{\delta(v)-1} f_{v,w}(\rho_v(r),t) &= \textstyle\sum_{r=0}^{\delta(v)-1} \left(P^{t-1}(\rho_v(r),w) - P^t(v,w)\right)\\ &= \textstyle\sum_{r=0}^{\delta(v)-1} P^{t-1}(\rho_v(r),w) - \delta(v)\cdot P^t(v,w) \;=\; 0. \qquad \square\end{aligned}$$

いま，

$$g_w(v) \stackrel{\text{def.}}{=} \sum_{i=0}^{X_v^{(T-1)}-1} f_{v,w}(\rho_v(i), T - s_v(i)) \tag{6}$$

と定義すると，

$$\begin{aligned}\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)} &= \sum_{v\in V} \sum_{i=0}^{X_v^{T-1}-1} \left(P^{T-s_v(i)-1}(\rho_v(i),w) - P^{T-s_v(i)}(v,w)\right) && \text{(式 (3) より)}\\ &= \sum_{v\in V} \sum_{i=0}^{X_v^{T-1}-1} f_{v,w}(\rho_v(i), T-s_v(i)) && \text{(式 (4) より)}\\ &= \sum_{v\in V} g_w(v) && \text{(式 (6) より)} \qquad (7)\end{aligned}$$

を得る．

命題 4 を用いて $g_w(v)$ を書き換えるために，$v \in V$ に対して，

$$t_v(r,j) = \begin{cases} s_v(\delta(v)\cdot h) & (j = 2h)\\ s_v(\delta(v)\cdot h + r) & (j = 2h+1)\end{cases}$$

を定義する．任意に固定された整数 r $(1 \le r \le \delta(v)-1)$ に対して，$t_v(r,j)$ は整数 j に関して単調非減少であることに注意されたい．各 $r = 0,1,\ldots,\delta(v)-1$ に対して，$K_r \stackrel{\text{def.}}{=} \lfloor (X_v^{(T-1)} - 1 - r)/\delta(v) \rfloor$ を定義する．定義より，$K_r + 1$ は時間 $(0, T-1)$ の間に v の rotor-router が $\rho_v(r)$ に向けて発射したトークンの総数を表す．また，$K_r \le K_0 \le K_r + 1$ が任意の $r = 1,\ldots,\delta(v)-1$ について成り立ち，$r > r'$ に対しては $K_r \le K_{r'}$ が成り立つ．

命題 5

$$\begin{aligned}g_w(v) = &\sum_{r=1}^{\delta(v)-1} \left(\sum_{j=0}^{2K_r+1} (-1)^{j+1}\cdot P^{T-t_v(r,j)-1}(\rho_v(r),w) + \sum_{j=0}^{2K_r+1} (-1)^{j}\cdot P^{T-t_v(r,j)}(v,w) \right)\\ &- \sum_{r=1}^{\delta(v)-1} (K_0 - K_r)\cdot \left(P^{T-s_v(\delta(v)\cdot K_0)-1}(\rho_v(r),w) - P^{T-s_v(\delta(v)\cdot K_0)}(v,w)\right) \quad \blacksquare\end{aligned}$$

命題 5 の証明は省略する．以上の議論から，$\left|\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)}\right|$ の上界を得るには，すべての $v \in V$ について $g_w(v)$ を見積もれば良いことがわかる．たとえば，命題 5 から次の系を得る．

系 6

$$\begin{aligned}|g_w(v)| \le &\sum_{r=1}^{\delta(v)-1} \left(\left| \sum_{j=0}^{2K_r+1} (-1)^{j+1}\cdot P^{T-t_v(r,j)-1}(\rho_v(r),w) \right| \right.\\ &\left. + \left| \sum_{j=0}^{2K_r+1} (-1)^{j}\cdot P^{T-t_v(r,j)}(v,w) \right| \right)\\ &+ (\delta(v)-1)\cdot \max_{u\in\{v\}\cup N(v)} \max_{z\in\mathbb{Z}_+} P^z(u,w) \quad \blacksquare\end{aligned}$$

この系は次の章で使う．

3.2 有限グラフ上の $g_w(v)$ の解析

本節では，一般の有限グラフについて，$g_w(v)$ を解析する．まず簡単のため，対応する P が正定値**かつ**対角可能の場合を示す．

定理 7 もし P が正定値かつ対角化可能なら，任意の初期トークン配置と任意の rotor-router に対して，

$$\left|\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)}\right| \le (2m-n)(n+2)$$

が任意の $w \in V$ と $T \ge 0$ について成り立つ．

もし P が lazy かつ reversible なマルコフ連鎖の遷移確率行列ならば，P は定理 7 の条件

を満たすことに注意されたい[24)]. 以下の補題は定理 7 と定理 1 の証明に重要である.

補題 8 非負整数の列 $z_0, z_1, \ldots, z_\tau$ は $z_0 \le z_1 \le \cdots \le z_\tau$ を満たすとする. もし P が正定値かつ対角可能なら,

$$\left|\sum_{i=0}^{\tau}(-1)^i P^{z_i}(v,w)\right| \le \left\lceil \frac{n}{2} \right\rceil$$

が, 任意の $v, w \in V$ について成り立つ.

補題 8 を証明する前に, 補題 8 と前節の議論から, 定理 7 が導かれることを示す. 系 6 と補題 8 から,

$$\begin{aligned}
|g_w(v)| \le & \sum_{r=1}^{\delta(v)-1}\left(\left|\sum_{j=0}^{2K_r+1}(-1)^{j+1}\cdot P^{T-t_v(r,j)-1}(\rho_v(r),w)\right|\right. \\
& \left. + \left|\sum_{j=0}^{2K_r+1}(-1)^{j}\cdot P^{T-t_v(r,j)}(v,w)\right|\right) \\
& +(\delta(v)-1)\cdot 1 \\
\le & \sum_{r=1}^{\delta(v)-1}\left(\left\lceil \frac{n}{2}\right\rceil + \left\lceil \frac{n}{2}\right\rceil\right) + \delta(v) - 1 \ = \ (\delta(v)-1)\cdot\left(2\cdot\left\lceil \frac{n}{2}\right\rceil + 1\right) \\
\le & (\delta(v)-1)\cdot(n+2)
\end{aligned}$$

が任意の $v \in V$ について成り立つ. 式 (7) より,

$$\left|\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)}\right| \ = \ \left|\sum_{v \in V} g_w(v)\right| \ \le \ \sum_{v\in V}|g_w(v)| \ \le \ \sum_{v \in V}(\delta(v)-1)\cdot(n+2) \ = \ (2m-n)\cdot(n+2)$$

が成り立ち, 定理 7 を得る.

以下, 補題 8 を示す.

補題 8 の証明. 行列 P の固有値を $\lambda_i \in \mathbb{R}_+$ $(i = 1, \ldots, n)$ で表し, $\boldsymbol{b}_i \in \mathbb{R}^n$ $(i = 1, \ldots, n)$ を固有値 λ_i に対する右固有ベクトルをとする. Gershgorin の定理より, $|\lambda_i| \le 1$ が成り立つ. 各 $v \in V$ に対して, $\boldsymbol{e}_v \in \{0,1\}^V$ で添え字 v に関する単位ベクトルを表す. いま $\boldsymbol{e}_v$ は, ある $a_i \in \mathbb{R}$ $(i = 1, \ldots, n)$ を用いて, $\boldsymbol{e}_v = \sum_{j=1}^n a_j \boldsymbol{b}_j$ と表されるものとする. この時,

$$\begin{aligned}
P^z(v,w) &= \boldsymbol{e}_v^\top P^z \boldsymbol{e}_w = \boldsymbol{e}_v^\top P^z \sum_{j=1}^n a_j \boldsymbol{b}_j = \boldsymbol{e}_v^\top \sum_{j=1}^n a_j P^z \boldsymbol{b}_j \\
&= \boldsymbol{e}_v^\top \sum_{j=1}^n a_j (\lambda_j)^z \boldsymbol{b}_j = \sum_{j=1}^n a_j (\lambda_j)^z \boldsymbol{e}_v^\top \boldsymbol{b}_j = \sum_{j=1}^n c_j (\lambda_j)^z \qquad (8)
\end{aligned}$$

を得る. ただし $c_j \in \mathbb{R}$ $(j = 1, \ldots, n)$ は $c_j \overset{\text{def.}}{=} a_j \boldsymbol{e}_v^\top \boldsymbol{b}_j$ で定義される定数である.

表記の簡便のため, $h(x) \overset{\text{def.}}{=} \sum_{j=1}^n c_j (\lambda_j)^x$ $(x \in \mathbb{R})$ とすると, 関数 $h(x)$ は高々$\lceil n/2 \rceil$ 個の極大を持つことが示される. この証明は省略する. 式 (8) より $h(z) = P^z(v,w)$ であり, 行列 P が確率行列であることと併せると, 任意の $z \in \mathbb{Z}_+$ に対して $0 \le h(z) \le 1$ を得る.

関数 $h(x)$ は高々$\lceil n/2 \rceil$ 個の極大を持つので,

$$\left|\sum_{i=1}^{\tau}(-1)^i h(z_i)\right| \le \left\lceil \frac{n}{2}\right\rceil \max_{i \in \{1,\ldots,\tau\}} h(z_i)$$

を示すことができる. いま $0 \le h(z) \le 1$ より,

$$\left|\sum_{i=1}^{\tau}(-1)^i P^{z_i}(v,w)\right| = \left|\sum_{i=1}^{\tau}(-1)^i h(z_i)\right| \ \le \ \left\lceil \frac{n}{2}\right\rceil \max_{i \in \{1,\ldots,\tau\}} h(z_i) \ \le \ \left\lceil \frac{n}{2}\right\rceil$$

が得られ, 題意を得る. □

より一般に, P は対角化不可能だが, 半正定値の場合, 以下の補題を示すことができる.

補題 9 非負整数の列 $z_0, z_1, \ldots, z_\tau$ は $z_0 \le z_1 \le \cdots \le z_\tau$ を満たすとする. 行列 P の固有値は全て非負の時,

$$\left|\sum_{i=0}^{\tau}(-1)^i P^{z_i}(v,w)\right| \le \left\lceil \frac{\max_{i \in \{1,\ldots\kappa\}} n_i}{2}\right\rceil + \left\lceil \frac{n}{2}\right\rceil$$

が任意の $v, w \in V$ について成り立つ. ただし, n_i $(i \in \{1, \ldots \kappa\})$ は P のジョルダン標準形における, i 番目のジョルダン細胞のサイズを表すものとする. ■

補題 9 より, 定理 1 が得られる.

3.3 下界について

本節では $\left|\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)}\right|$ の下界を与える.(自己閉路を持つ) 完全グラフ K_n 上の標準ランダムウォークを考える. 遷移確率行列は以下のように与えられる.

$$P = \frac{1}{n} \cdot \mathbb{1}^{n \times n} \equiv \begin{pmatrix} \frac{1}{n} & \frac{1}{n} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n} & \cdots & \frac{1}{n} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

定理 10 ある有向グラフと初期トークン配置並びに rotor-router が存在して，任意の $w \in V$ と無限の $T \in \mathbb{Z}_+$ についてについて，$\left|\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)}\right| = \Omega(n)$ が成り立ち，かつ対応する P が正定値かつ対角化可能行列である．

証明. 上述の式 (9) で与えられるランダムウォークを考える．行列 P が正定値かつ対角化可能であることは容易に確認される．各頂点 $v \in V$ に対して，rotor-router $\boldsymbol{\rho}_v$ を $\boldsymbol{\rho}_v \stackrel{\text{def.}}{=} (1, 2, \ldots, n)$ と定義する．初期トークン配置を，$\chi_1^{(0)} = n$ かつ $\chi_v^{(0)} = 0$ ($v \in \{2, \ldots, n\}$) とする．グラフの対称性より，各頂点 $w \in V$ について，$\mu_w^{(T)} = 1$ が任意の $T > 1$ で成り立つ．Propp 機械に関しては，奇数時刻 $T = 2k + 1$ ($k \in \mathbb{Z}_+$) においては，任意の頂点で $\chi_w^{(2k)} = 1$ が成り立ち，偶数時刻 $T = 2k$ ($k \in \mathbb{Z}_+$) においては頂点 $w = (k \bmod n) + 1$ で $\chi_w^{(2k)} = n$ かつ，他の頂点では $\chi_{w'}^{(2k)} = 0$ ($w' \neq (k \bmod n) + 1$) が成り立つことが確認できる．従って，任意の $k \in \mathbb{Z}_+$ に対して，$\chi_{(k \bmod n)+1}^{(2k)} - \mu_{(k \bmod n)+1}^{(2k)} = n - 1$ が成り立ち題意を得る．

上記の例は自己閉路は持つものの，多重辺は持たないことに注意されたい．多重辺をもつグラフを用いることで，定理 2 を示すことが可能である．

4. 特殊なグラフに対する上界

4.1 超立方体の稜線グラフ

グラフ G_{C} は $\{0,1\}^d$ を頂点集合に持ち，d 次元超立方体の稜線を枝に持つ単純グラフとする．いま $2^d \times 2^d$ 行列 P_{C} は G_{C} 上の標準ランダムウォークを表すとする．すなわち，

$$P_{\mathrm{C}}(u,v) = \begin{cases} \frac{1}{d} & (\|u - v\|_1 = 1 \text{ の場合}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

グラフ G_{C} は二部グラフであり，したがって P_{C} は周期的であることに注意されたい．この時，次の補題が成り立つ．

補題 11 非負整数の列 $z_0, z_1, \ldots, z_\tau$ は $z_0 \leq z_1 \leq \cdots \leq z_\tau$ を満たし，かつ $z_0 \equiv z_1 \equiv \cdots \equiv z_\tau \pmod 2$ を満たすとする．このとき，

$$\left|\sum_{i=0}^{\tau} (-1)^i P_{\mathrm{C}}^{z_i}(v,w)\right| \leq \frac{\left\lceil \frac{d+1}{4} \right\rceil}{\binom{d}{\|v-w\|_1}}$$

が，任意の $v, w \in V$ について成り立つ．

上記のランダムウォークに対応して，有向辺集号 $\mathcal{E}_{\mathrm{C}} \stackrel{\text{def.}}{=} \{(u,v) \in \{0,1\}^d \times \{0,1\}^d \mid P_{\mathrm{C}}(u,v) > 0\}$ をもつ単純有向グラフ $\mathcal{G}_{\mathrm{C}}$ 上の Propp 機械を考える．このとき，補題 11 と系 6 から次を得る．

定理 12 任意の rotor-router と，偶奇性を満たす任意の初期トークン配置について，d 次元超立方体の稜線グラフに対して，

$$\left|\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)}\right| \leq \frac{3}{2} d^3 + \mathrm{O}(d^2)$$

が任意の $w \in V$ と $T \in \mathbb{Z}_+$ について成り立つ． ■

定理 12 においては，対応するマルコフ連鎖は lazy ではなく，さらには周期的であることに注意されたい．トークン配置の偶奇性の条件は[2)–4),7)] に見られる．偶奇性の条件をはずし，d 次元超立方体の稜線グラフ上の laze マルコフ連鎖に対応する Propp 機械についても，同様の定理を導くことができる．

4.2 Johnson グラフ

Johnson グラフ $J(d,c)$ は頂点集合 $V_{\mathrm{J}} \stackrel{\text{def.}}{=} \{v \subseteq \{1, 2, \ldots, d\} \mid |v| = c\}$ と枝集合 $E_{\mathrm{J}} \stackrel{\text{def.}}{=} \{\{u, v\} \in \binom{V_{\mathrm{J}}}{2} \mid |u \setminus v| = 1\}$ を持つ．以下，$d \geq 3$ と $2 \leq c \leq d/2$ を仮定する．グラフ $J(d,c)$ 上の lazy 標準ランダムウォークを考えるとサイズ $|V_{\mathrm{J}}| \times |V_{\mathrm{J}}|$ の遷移確率行列 P_{J} は

$$P_{\mathrm{J}}(u,v) = \begin{cases} \frac{1}{2c \cdot (d-c)} & (|u \setminus v| = 1 \text{ の場合}) \\ \frac{1}{2} & (u = v \text{ の場合}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

と定義される．

補題 13 任意の非負整数の列 $z_0, z_1, \ldots, z_\tau$ に対して，

$$\left|\sum_{i=0}^{\tau} (-1)^i P_{\mathrm{J}}^{z_i}(v,w)\right| \leq \frac{\left\lceil \frac{r+1}{2} \right\rceil}{\binom{c}{|w \setminus v|} \cdot \binom{d-c}{|w \setminus v|}}.$$

が任意の $v, w \in V$ について成り立つ． ■

対応して，有向辺 $E(\mathcal{G}_\mathrm{J}) \stackrel{\mathrm{def.}}{=} \{(u,v) \in V_\mathrm{J}^2 \mid u \neq v,\, P_\mathrm{J}(u,v) > 0\} \cup \{(u,u)^{(i)} \mid u \in V,\, i \in \{1,\dots,r\cdot(d-c)\}\}$ を持つ有向多重グラフ $\mathcal{G}_\mathrm{J}$ 上の Propp 機械を考える．このとき，補題 13 と系 6 から次を得る．

定理 14　任意の rotor-router と，偶奇性を満たす任意の初期トークン配置について，Johnson グラフ $J(d,c)$ に対して，

$$\left|\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)}\right| \leq 2c^3\cdot(d-c)^2 + \mathrm{O}(c^3\cdot(d-c))$$

が任意の $w \in V$ と $T \in \mathbb{Z}_+$ について成り立つ． ■

5. ま と め

本稿では，有限グラフに焦点をあて，Propp 機械とランダムウォークの誤差 $\left|\chi_v^{(T)} - \mu_v^{(T)}\right|$ の上下界を与えた．特に，遷移確率行列が非負の固有値のみを持つ場合に，誤差が $\mathrm{O}(mn)$ かつ $\Omega(m)$ であることを示した．この条件は，マルコフ連鎖モンテカルロ法などでよく用いられる，lazy かつ reversible なマルコフ連鎖のクラスを含む．$\mathrm{O}(mn)$ と $\Omega(m)$ の上下界の差は未解決である．

また，d 次元超立方体の稜線グラフ，Johnson グラフに対して，頂点数の対数多項式サイズの上界を与えた．例えばマトロイド基の交換グラフや，有限半順序集合のイデアルなど，組合せ構造に由来するグラフに対して，対数多項式サイズの上界の算定は今後の大きな課題である．

参 考 文 献

1) S.Angelopoulos, B.Doerr, A.Huber, and K.Panagiotou, Tight bounds for quasirandom rumor spreading, The Electronic Journal of Combinatorics, **16** (2009), #R102.
2) J.Cooper, B.Doerr, T.Friedrich, and J.Spencer, Deterministic random walks on regular trees, Proceedings of the Annual 19th ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms, (SODA 2008), 766–772.
3) J.Cooper, B.Doerr, J.Spencer, and G.Tardos, Deterministic random walks on the integers, European Journal of Combinatorics, **28** (2007), 2072–2090.
4) J.N.Cooper and J.Spencer, Simulating a random walk with constant error. Combinatorics, Probability and Computing, **15** (2006), 815–822.
5) P. Diaconis and W. Fulton, A growth model, a game, an algebra, Lagrange inversion, and characteristic classes, Rendiconti del Seminario Matematico, **49** (1991), 95–119.
6) B.Doerr, Introducing quasirandomness to computer science, Efficient Algorithms: Essays Dedicated to Kurt Mehlhorn on the Occasion of His 60th Birthday, 2009, 99–111.
7) B.Doerr and T.Friedrich, Deterministic random walks on the two-dimensional grid, Combinatorics, Probability and Computing, **18** (2009), 123–144.
8) B. Doerr, T. Friedrich, M. Künnemann, and T. Sauerwald, Quasirandom rumor spreading: An experimental analysis, Proceedings of the 11th Workshop on Algorithm Engineering and Experiments, 2009, 145–153.
9) B.Doerr, T.Friedrich, and T.Sauerwald, Quasirandom rumor spreading, Proceedings of the 19th Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms (SODA 2008), 773–781.
10) B. Doerr, T. Friedrich, and T. Sauerwald, Quasirandom rumor spreading: Expanders, push vs. pull, and robustness, Proceedings of the 36th International Colloquium on Automata, Languages and Programming, (ICALP 2009), 366–377.
11) B. Doerr, T. Friedrich, and T. Sauerwald, Quasirandom rumor spreading on expanders, Electronic Notes in Discrete Mathematics, **34** (2009), 243–247.
12) B.Doerr, A.Huber, and A.Levavi, Strong robustness of randomized rumor spreading protocols, Proceedings of the 20th International Symposium on Algorithms and Computation (ISAAC 2009), 812–821.
13) T. Friedrich and T. Sauerwald, The cover time of deterministic random walks, Lecture Notes in Computer Science, **6196** (COCOON 2010), 130–139.
14) A.E. Holroyd and J. Propp, Rotor walks and Markv chains, arXiv:0904.4507v3, 2010.
15) A.Huber and N.Fountoulakis, Quasirandom broadcasting on the complete graph is as fast as randomized broadcasting, Electronic Notes in Discrete Mathematics, **34** (2009), 553–559.
16) M.Kleber, Goldbug variations, The Mathematical Intelligencer, **27** (2005), 55–63.
17) I.Landau and L.Levine, The rotor-router model on regular trees, Journal of Combinatorial Theory Series A, **116** (2009), 421–433.
18) G.F.Lawler, Subdiffusive flunctuations for internal diffusion limited aggregation, The Annals of Probability, **23** (1995), 71–86.
19) G.F.Lawler, M.Bramson, and D.Griffeath, Internal diffusion limited aggregation, The Annals of Probability, **20** (1992), 2117–2140.
20) L. Levine and Y. Peres, The rotor-router shape is spherical, The Mathematical Intelligencer, **27** (2005), 9–11.
21) L. Levine and Y. Peres, Spherical asymptotics for the rotor-router model in $\mathbb{Z}^d$, Indiana University Mathematics Journal, **57** (2008), 431–450.
22) L.Levine and Y.Peres, Strong spherical asymptotics for rotor-router aggregation

and the divisible sandpile, Potential Analysis, **30** (2009), 1–27.
23) V.B. Priezzhev, D. Dhar, A. Dhar, and S. Krishnamurthy, Eulerian walkers as a model of selforganized criticality, Physical Review Letters, **77** (1996), 5079–5082.
24) A.Sinclair, Algorithms for Random Generation & Counting, A markov chain approach, Birkhäuser, 1993.