

関数ルーターモデルによる ハイパーキューブ上ランダムウォークの脱乱択化

白髪 丈晴¹ 山内 由紀子¹ 来嶋 秀治¹ 山下 雅史¹

概要: 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する試みである。トークンを隣接点へランダムに発射するランダムウォークに対して、グラフの各頂点上にあらかじめ隣接点の順番を決め、その順番に従ってトークンを発射するロータールーターモデルや、乱数の代わりに超一様分布列 (low discrepancy sequence) を用いて隣接点にトークンを決定的に発射する関数ルーターモデルが提案されている。有理数の遷移確率のみを扱えるロータールーターモデルに対し、関数ルーターモデルは実数の遷移確率を扱えるという利点がある。本研究では、ハイパーキューブ上の単純ランダムウォークに関して、対応する関数ルーターモデルとの単一頂点誤差の頂点数の対数サイズの上界を与える。

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する試みである。

Cooper と Spencer[2] は、2000 年ごろに James Propp によって提案された複数トークン型のロータールーターモデルについて、 $|\chi_v^{(T)} - \mu_v^{(T)}|$ の解析を行った。ここで $\mu_v^{(t)}$ はランダムウォークにおける時刻 t , 頂点 v でのトークン数の期待値を表し、 $\chi_v^{(t)}$ は対応するロータールーターモデルにおける時刻 t , 頂点 v でのトークン数を表す。彼らは d 次元の整数格子点 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、任意のロータールーター、任意の頂点、任意の時間について、 $|\chi_v^{(T)} - \mu_v^{(T)}|$ 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。

ロータールーターモデルに対し、来嶋、古賀、牧野 [5] は頂点数 n , 枝数 $m^\#$ の強連結な有向多重グラフについて、対応するマルコフ連鎖の遷移確率行列が非負の固有値のみを持つ場合に $|\chi_v^{(T)} - \mu_v^{(T)}|$ が $O(m^\#n)$ で押さえられることを示した。また、下界に関して $\Omega(m^\#)$ の例を与えている。また、梶野、来嶋、牧野は一般の既約な有限グラフに対して $O\left(\frac{\alpha^* m^\# n^2}{1-\lambda^*}\right)$ の上界を与えている [4]。但し、 α^* は P に関するパラメータ、 λ^* は P の第二固有値である。

また、ロータールーターモデルとは別のモデルとして、乱数の代わりに van der Corput 列と呼ばれる超一様分布列 (low discrepancy sequence) を用いて、決定的にトークンを発

射する関数ルーターモデルが提案されている [7]。ロータールーターモデルでは有理数の遷移確率しか扱えないが、関数ルーターモデルは任意の実数の遷移確率を扱えるという利点がある。関数ルーターモデルに対し、頂点数 n のグラフ上で遷移確率行列 P が既約、非周期的かつ可逆な場合、総トークン数 M に対し $|\chi_v^{(T)} - \mu_v^{(T)}|$ が $O\left(\sqrt{\frac{\pi_{\max}}{\pi_{\min}}} \cdot \frac{n^3}{1-\lambda^*} \cdot \log M\right)$ で押さえられることが示されている [7]。但し、 π は P の定常分布である。ここで、 $\mu^{(T)}/M$ が時刻 t , 頂点 v での頂点集合 V 上における確率分布に対応することに注意すると、総トークン数 M が大きくなるほど $|\chi_v^{(T)}/M - \mu_v^{(T)}/M|$ が $O(\log(M)/M)$ で小さくなることが分かる。

ハイパーキューブ上のランダムウォークの脱乱択化に関して、来嶋、古賀、牧野 [5] は d 次元 0-1 ハイパーキューブ上の単純ランダムウォークに対し、対応するロータールーターモデルに関し $|\chi_v^{(T)} - \mu_v^{(T)}|$ の上界が $O(d^3)$ であることを示している。また、梶野、来嶋、牧野 [4] は [5] の解析を改善し、 d 次元 0-1 ハイパーキューブ上の単純ランダムウォークに対し $O(d^2)$ の上界を得ている。

本研究では、関数ルーターモデルにおいて、 d 次元 0-1 ハイパーキューブ上の単純ランダムウォークに対し $|\chi_v^{(T)} - \mu_v^{(T)}|$ の上界が $O\left(\frac{d^3 \log M}{\alpha}\right)$ であることを示す。特に、頂点数の対数の多項式サイズの上界を得るために、Krawtchouk 多項式を用いた解析技法を与える。但し、自己遷移確率を $1-\alpha$ とする。

2. モデルと主定理

有限の状態空間 V を $V \stackrel{\text{def}}{=} \{1, \dots, n\}$ と定義する。今、

¹ 九州大学
Kyushu University

M 個のトークンが独立に遷移確率行列 $P \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{n \times n}$ に従って状態空間上を遷移するランダムウォークを考える. 任意の状態 $u \in V$ に対し $\sum_{v \in V} P(u, v) = 1$ であることに注意する. ここで, $\mu^{(0)} = (\mu_1^{(0)}, \dots, \mu_n^{(0)}) \in \mathbb{Z}_{\geq 0}^n$ を V 上のトークンの初期配置とし, $\mu^{(t)} = (\mu_1^{(t)}, \dots, \mu_n^{(t)}) \in \mathbb{R}_{\geq 0}^n$ を時刻 $t \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ でのトークンの期待配置とする. すなわち, 任意の $t \geq 0$ に対し $\sum_{u \in V} \mu_u^{(t)} = M$ であり, $\mu^{(t)} = \mu^{(0)} P^t$ である.

ここで $\mathcal{G} = (V, \mathcal{E})$ を P の状態遷移図とする. すなわち, $\mathcal{G} = (V, \mathcal{E})$ は頂点集合 V と, 枝集合 $\mathcal{E} = \{(u, v) \in V^2 \mid P(u, v) > 0\}$ からなる多重辺をもたない有向グラフである. \mathcal{E} は (v, v) のような自己ループ辺も含むことに注意する. ここで $m = |\mathcal{E}|$ と定義する. 定義より, $m \leq n^2$ をみたす. $N(v)$ を v から出る枝の終端点の集合とし, $\delta(v) = |N(v)|$, $n = |V|$ とする.

一般性を失うことなく, v の隣接頂点 $N(v)$ 上に順番 $u_1, \dots, u_{\delta(v)}$ を付けることが出来る. このとき, 乱数 $r \in [0, 1)$ を用いて,

$$\sum_{j=1}^{k-1} P(v, u_j) \leq r < \sum_{j=0}^k P(v, u_j)$$

ならばトークンは隣接頂点 u_k へ移動させることで, ランダムウォークを実装できる. 但し, $\sum_{j=1}^0 P(v, u_j) = 0$ とする.

関数ルーターモデルは, $\mu^{(t)}$ を模倣する決定的な過程である. $\chi^{(0)} (= \mu^{(0)})$ を V 上のトークンの初期配置とし, $\chi^{(t)}$ を関数ルーターモデルでの時刻 t のトークンの配置とする. $[t, t+1)$ の間に各 $v \in V$ 上の各トークン $j \in \{0, 1, \dots, \chi_v^{(t)} - 1\}$ は,

$$\sigma_v \left(\sum_{s=0}^{t-1} \chi_v^{(s)} + j \right) \in N(v)$$

へ発射される. σ_v は $\sigma_v: \mathbb{Z}_{\geq 0} \rightarrow N(v)$ となる関数で, 以下のように定義する.

まず, $i \in \mathbb{Z}_{> 0}$ を $i = \sum_{j=0}^{\lfloor \lg i \rfloor} \beta_j(i) \cdot 2^j$ と表すとする. 但し, $\beta_j(i) \in \{0, 1\}$ ($j \in \{0, 1, \dots, \lfloor \lg i \rfloor\}$) は i の二進数表記 $\beta_{\lfloor \lg i \rfloor}^i \beta_{\lfloor \lg i \rfloor - 1}^i \dots \beta_1^i \beta_0^i$ の各位の値である. このとき, 関数 $\psi: \mathbb{Z}_{\geq 0} \rightarrow [0, 1)$ を,

$$\psi(i) \stackrel{\text{def.}}{=} \sum_{j=0}^{\lfloor \lg i \rfloor} \beta_j(i) \cdot 2^{-(j+1)}. \quad (1)$$

と定義する. 但し, $\psi(0) \stackrel{\text{def.}}{=} 0$ とする. 例えば, $\psi(1) = 1 \times 1/2 = 1/2$, $\psi(2) = 0 \times 1/2 + 1 \times 1/4 = 1/4$, $\psi(3) = 1 \times 1/2 + 1 \times 1/4 = 3/4$, $\psi(4) = 0 \times 1/2 + 0 \times 1/4 + 1 \times 1/8 = 1/8$, $\psi(5) = 1 \times 1/2 + 0 \times 1/4 + 1 \times 1/8 = 5/8$, $\psi(6) = 0 \times 1/2 + 1 \times 1/4 + 1 \times 1/8 = 3/8$ となる. 任意の $i \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ に対し $\psi(i) \in [0, 1)$ が成り立つ. 今, 一般性を失うことなく, v の隣接頂点 $N(v)$ 上に順番 $u_1, \dots, u_{\delta(v)}$ を付けることができ,

$$\sum_{j=1}^{k-1} P(v, u_j) \leq \psi(i) < \sum_{j=0}^k P(v, u_j)$$

$r: [0, 1)$ random number

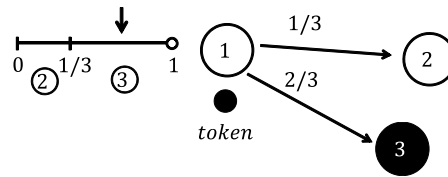


図1 ランダムウォーク: 各トークンは $[0, 1)$ 乱数に従って遷移する.

$\psi(i): i$ -th van der Corput sequence

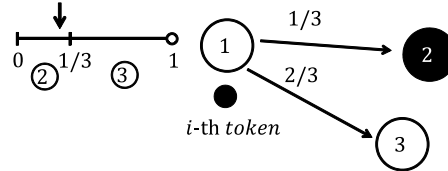


図2 関数ルーターモデル: 各頂点上で i 番目に発射されるトークンは $\psi(i)$ の値に従って遷移する.

ならば $\sigma_v(i) = u_k \in N(v)$ と定義する.

関数 ψ は van der Corput sequence と呼ばれ, 関数ルーターモデルは $[0, 1)$ 乱数の代わりに $\psi(i)$ を用いたモデルである. 図1, 2 にランダムウォークと関数ルーターモデルの動作例を表す.

今, $v \in V$ と $u \in N(v)$ に対し, 集合 $\mathcal{I}_{v,u}[z, z'] \subseteq \mathbb{Z}_{\geq 0}$ を

$$\mathcal{I}_{v,u}[z, z'] \stackrel{\text{def.}}{=} \{j \in \{z, \dots, z' - 1\} \mid \sigma_v(j) = u\}. \quad (2)$$

と定義する. 定義より, $|\mathcal{I}_{v,u}[\sum_{s=0}^{t-1} \chi_v^{(s)}, \sum_{s=0}^t \chi_v^{(s)}]|$ は $[t, t+1)$ で v から u に発射されたトークン数を表す. よって,

$$\chi_u^{(t+1)} = \sum_{v \in V} |\mathcal{I}_{v,u}[\sum_{s=0}^{t-1} \chi_v^{(s)}, \sum_{s=0}^t \chi_v^{(s)}]|$$

が任意の $u \in V, t \geq 0$ で成り立つ. 簡単のため, 以下では

$$Z_{v,u}^{(t)} \stackrel{\text{def.}}{=} |\mathcal{I}_{v,u}[\sum_{s=0}^{t-1} \chi_v^{(s)}, \sum_{s=0}^t \chi_v^{(s)}]|$$

と定義する.

本稿では, d 次元 0 - 1 ハイパーキューブ上で解析を行い, 任意の $w \in V, t \geq 0$ に対し, $|\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)}|$ の上界を与える.

今, d 次元ハイパーキューブの状態空間を $V_H = \{0, 1\}^d$ と定義する. ここで, $n = |V_H| = 2^d$ である. 任意の $u, v \in V_H$ について, 遷移確率行列 $P_H \in \mathbb{R}_{\geq 0}^{n \times n}$ を

$$P_H(u, v) = \begin{cases} \alpha/d & (\text{if } \|u - v\|_1 = 1) \\ 1 - \alpha & (\text{if } v = u) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (3)$$

と定義する. 本稿では, α は $0 < \alpha < \frac{d}{d+1}$ を満たす実数と仮定する. このとき, 以下の定理が成り立つことを示す.

定理 2.1. トークン数を M とする. 時刻 $T \in \mathbb{Z}_{\geq 0}$ において, 遷移確率行列 P_H に従うランダムウォークでのトークン数の期待配置を $\mu^{(T)}$, 対応する関数ルーターモデルでのトークン配置を $\chi^{(T)}$ とする. このとき,

$$|\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)}| < \frac{d^2(d+1)(\lg M + 1)}{\alpha} = O\left(\frac{d^3 \log M}{\alpha}\right)$$

が任意の $w \in V$ と $T \geq 0$ に対し成り立つ.

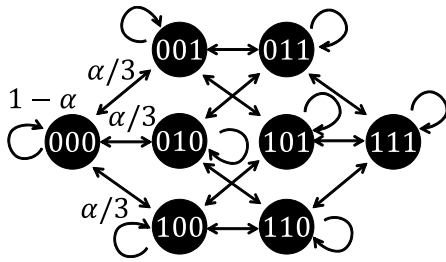


図3 3次元ハイパーキューブ上の P_H に従うランダムウォーク

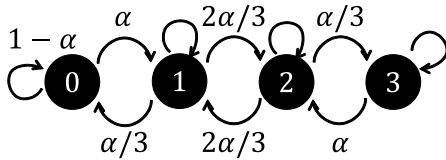


図4 $\{0, 1, 2, 3\}$ 上の Q_H に従うランダムウォーク

3. ハイパーキューブ上での単一頂点誤差の上界

この章では定理 2.1 の証明を行う。

単一頂点誤差 $|\chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)}|$ について、以下の補題が成り立つことが知られている。

補題 3.1. [7] 任意の $w \in V$ と $T \geq 0$ に関して、

$$\begin{aligned} \chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)} &= \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{v \in V} \sum_{u \in N(v)} \left(Z_{v,u}^{(t)} - \chi_v^{(t)} P(v, u) \right) P^{T-t-1}(u, w) \end{aligned}$$

が成り立つ。

補題 3.2. [7] 任意の $v \in V$ と $t \geq 0$ に対して、

$$\sum_{u \in N(v)} \left(Z_{v,u}^{(t)} - \chi_v^{(t)} P(v, u) \right) = 0$$

が成り立つ。

補題 3.3. [7] 任意の $v, u \in V$ と $t \geq 0$ に対して、

$$\left| Z_{v,u}^{(t)} - \chi_v^{(t)} P(v, u) \right| \leq 2 \lg(\chi_v^{(t)}) + 2$$

が成り立つ。

補題 3.1 を用いるため、 $P_H^z(u, w)$ について議論を行う。

準備として、 $(d+1) \times (d+1)$ 遷移確率行列 Q_H を $i, j \in \{0, 1, \dots, d\}$ に対し

$$Q_H(i, j) = \begin{cases} \alpha i/d & (j = i - 1) \\ \alpha(d - i)/d & (j = i + 1) \\ 1 - \alpha & (j = i) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (4)$$

と定義する。

この時、任意の $u \in V_H$ と $z \geq 0, k \in \{0, 1, \dots, d\}$ に対し、

$$Q_H^z(0, k) = \sum_{\{w: \|u-w\|_1=k\}} P_H^z(u, w) = \binom{d}{k} P_H^z(u, w)$$

が成り立つ。よって

$$P_H^z(u, w) = \frac{Q_H^z(0, \|u-w\|_1)}{\binom{d}{\|u-w\|_1}} \quad (5)$$

が成り立つ。

今、 Q_H^z に関し $K_{i,j}^{(d)}$ を導入する。 $K_{i,j}^{(d)}$ は $(1+\nu)^{d-j}(1-\nu)^j$ を展開したときの ν^i の係数であり、

$$\sum_{i=0}^d K_{i,j}^{(d)} \nu^i = (1+\nu)^{d-j}(1-\nu)^j \quad (6)$$

を満たす。 $K_{i,j}^{(d)}$ は Krawtchouk 多項式と呼ばれている ([1], [3], [6])。Krawtchouk 多項式に関し、以下の性質が成り立つことが知られている。

観察 3.4. [3], [6] 任意の $0 \leq \ell \leq d$ に対し、

$$K_{0,\ell}^{(d)} = 1, K_{\ell,0}^{(d)} = \binom{d}{\ell}, K_{d,\ell}^{(d)} = (-1)^\ell, K_{\ell,d}^{(d)} = (-1)^\ell \binom{d}{\ell}$$

である。

補題 3.5. [1], [3], [6] 任意の $0 \leq i, j \leq d$ に関して、

$$\sum_{k=0}^d K_{i,k}^{(d)} \cdot K_{k,j}^{(d)} = \delta_{i,j} \cdot 2^d$$

が成り立つ。

補題 3.6. [1], [6] 任意の $0 \leq i, j \leq d$ に関して、

$$(d-j)K_{i,j+1}^{(d)} = (d-2i)K_{i,j}^{(d)} - jK_{i,j-1}^{(d)}$$

が成り立つ。

補題 3.7. [3], [6] 任意の $0 \leq i, j \leq d$ に対し、

$$\binom{d}{j} K_{i,j}^{(d)} = \binom{d}{i} K_{j,i}^{(d)}$$

が成り立つ。

ここで、補題 3.5 と補題 3.6 の性質を用いることにより、 Q_H^z に関して以下の補題が成り立つことを示す。

補題 3.8. 任意の $z \geq 0, 0 \leq \ell \leq d$ に対し、

$$Q_H^z(0, \ell) = \frac{1}{2^d} \sum_{j=0}^d (\lambda_j)^z K_{\ell,j}^{(d)} \binom{d}{j}$$

が成り立つ。但し、 $\lambda_j = \frac{d-2\alpha j}{d}$ とする。

証明. まず、 $(d+1) \times (d+1)$ 行列 Λ と B_d を、 $\Lambda = \text{diag}(\lambda_0, \dots, \lambda_d)$, $B_d(i, j) = K_{j,i}^{(d)}$ と定義する。このとき、補題 3.5 より、

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2^d} B_d \cdot B_d \right)_{i,j} &= \frac{1}{2^d} \sum_{k=0}^d B_d(i, k) B_d(k, j) \\ &= \frac{1}{2^d} \sum_{k=0}^d K_{k,i}^{(d)} K_{j,k}^{(d)} = \frac{1}{2^d} \delta_{j,i} 2^d = \delta_{i,j} \end{aligned}$$

が成り立つため、

$$B_d^{-1} = \frac{1}{2^d} B_d \quad (7)$$

が成り立つ。また、

$$\begin{aligned}
 (Q_H B_d)_{i,j} &= \sum_{k=0}^d Q_H(i,k) B_d(k,j) \\
 &= Q_H(i,i-1) B_d(i-1,j) + Q_H(i,i) B_d(i,j) \\
 &\quad + Q_H(i,i+1) B_d(i+1,j) \\
 &= \frac{\alpha i}{d} K_{j,i-1}^{(d)} + (1-\alpha) K_{j,i}^{(d)} + \frac{\alpha(d-i)}{d} K_{j,i+1}^{(d)} \\
 &= \frac{\alpha(d-2j)}{d} K_{j,i}^{(d)} + \frac{d(1-\alpha)}{d} K_{j,i}^{(d)} \\
 &= \frac{d-2\alpha j}{d} K_{j,i}^{(d)}
 \end{aligned}$$

が成り立つことが分かる。4番目の等号は補題 3.6 より導かれる。そして、

$$\begin{aligned}
 (B_d \Lambda)_{i,j} &= \sum_{k=0}^d B_d(i,k) \Lambda(k,j) \\
 &= B_d(i,j) \Lambda(j,j) \\
 &= \frac{d-2\alpha j}{d} K_{j,i}^{(d)} = (Q_H B_d)_{i,j}
 \end{aligned}$$

が成り立つため、

$$Q_H B_d = B_d \Lambda \quad (8)$$

となる。式 (7) と式 (8) から、

$$Q_H^z = B_d \Lambda^z B_d^{-1} = \frac{1}{2^d} B_d \Lambda^z B_d \quad (9)$$

が成り立つことが分かり、行列の成分に着目すると

$$\begin{aligned}
 Q_H^z(0,\ell) &= \frac{1}{2^d} (B_d \Lambda^z B_d)_{0,\ell} = \frac{1}{2^d} \sum_{j=0}^d (B_d \Lambda^z)_{0,j} B_d(j,\ell) \\
 &= \frac{1}{2^d} \sum_{j=0}^d \sum_{k=0}^d B_d(0,k) \Lambda^z(k,j) B_d(j,\ell) \\
 &= \frac{1}{2^d} \sum_{j=0}^d B_d(0,j) \Lambda^z(j,j) B_d(j,\ell) \\
 &= \frac{1}{2^d} \sum_{j=0}^d K_{j,0}^{(d)} (\lambda_j)^z K_{\ell,j}^{(d)} \\
 &= \frac{1}{2^d} \sum_{j=0}^d (\lambda_j)^z K_{\ell,j}^{(d)} \binom{d}{j}
 \end{aligned}$$

となり、題意を得る \square

以上の議論より、 P_H に関して以下の補題を得る。

補題 3.9. 任意の $z \geq 0$ と $u, w \in V$ に対して、

$$P_H^z(u, w) = \frac{1}{2^d} \sum_{j=0}^d (\lambda_j)^z K_{j,\|u-w\|_1}^{(d)}$$

が成り立つ。

証明. 式 (5)、補題 3.7 と補題 3.8 より、

$$\begin{aligned}
 P^z(u, w) &= \frac{Q^z(0, \|u-w\|_1)}{\binom{d}{\|u-w\|_1}} \\
 &= \frac{1}{2^d} \sum_{j=0}^d \left(\frac{d-2\alpha j}{d} \right)^z K_{\|u-w\|_1, j}^{(d)} \binom{d}{j} \frac{1}{\binom{d}{\|u-w\|_1}} \\
 &= \frac{1}{2^d} \sum_{j=0}^d \left(\frac{d-2\alpha j}{d} \right)^z K_{j, \|u-w\|_1}^{(d)}
 \end{aligned}$$

が成り立つ。よって題意が示された。 \square

また、 $K_{i,j}^{(d)}$ の性質を用いて以下の補題を得る。

補題 3.10. 任意の $v, w \in V$ と $t \geq 0$ に対して、

$$\sum_{u \in N(v)} \left(Z_{v,u}^{(t)} - \chi_v^{(t)} P_H(v, u) \right) K_{0, \|u-w\|_1}^{(d)} = 0$$

が成り立つ。

証明. 任意の $u, w \in V_H$ に対し、観察 3.4 より $K_{0, \|u-w\|_1}^{(d)} = 1$ が成り立つ。よって補題 3.2 を用いることにより題意を得る。 \square

ここで補題 3.1 と補題 3.9、補題 3.10 より、

$$\begin{aligned}
 \chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)} &= \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{v \in V_H} \sum_{u \in N(v)} \left(Z_{v,u}^{(t)} - \chi_v^{(t)} P(v, u) \right) \\
 &\quad \cdot \frac{1}{2^d} \sum_{j=0}^d (\lambda_j)^{T-t-1} K_{j, \|u-w\|_1}^{(d)} \\
 &= \frac{1}{2^d} \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{v \in V_H} \sum_{u \in N(v)} \left(Z_{v,u}^{(t)} - \chi_v^{(t)} P(v, u) \right) \\
 &\quad \cdot \sum_{j=1}^d (\lambda_j)^{T-t-1} K_{j, \|u-w\|_1}^{(d)}
 \end{aligned}$$

が成り立つ。補題 3.3 より、

$$\left| Z_{v,u}^{(t)} - \chi_v^{(t)} P(v, u) \right| \leq 2 \lg(\chi_v^{(t)}) + 2 \leq 2(\lg M + 1)$$

が成り立つことに注意すると、

$$\begin{aligned}
 \left| \chi_w^{(T)} - \mu_w^{(T)} \right| &\leq \frac{1}{2^d} \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{v \in V_H} \sum_{u \in N(v)} \left| Z_{v,u}^{(t)} - \chi_v^{(t)} P(v, u) \right| \\
 &\quad \cdot \left| \sum_{j=1}^d (\lambda_j)^{T-t-1} K_{j, \|u-w\|_1}^{(d)} \right| \\
 &\leq \frac{\lg M + 1}{2^{d-1}} \\
 &\quad \cdot \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{v \in V_H} \sum_{u \in N(v)} \left| \sum_{j=1}^d (\lambda_j)^{T-t-1} K_{j, \|u-w\|_1}^{(d)} \right| \quad (10)
 \end{aligned}$$

を得る。

ここで、 $\sum_{u \in N(v)} \left| \sum_{j=1}^d (\lambda_j)^{T-t-1} K_{j, \|u-w\|_1}^{(d)} \right|$ について、

ハイパーキューブの性質を用いることで以下の補題が成り立つ。証明は省略する。

補題 3.11. 任意の $z \geq 0$ に対し、

$$\begin{aligned} & \sum_{v \in V_H} \sum_{u \in N(v)} \left| \sum_{j=1}^d (\lambda_j)^z K_{j, \|u-v\|_1}^{(d)} \right| \\ &= (d+1) \sum_{\ell=0}^d \left| \sum_{j=1}^d (\lambda_j)^z K_{\ell, j}^{(d)} \binom{d}{j} \right| \end{aligned}$$

が成り立つ。

また、 $K_{i, j}^{(d)}$ に関して、以下の補題が成り立つ。

補題 3.12. 任意の $d > 0$ と $0 \leq j \leq d$ に対し、

$$\sum_{i=0}^d K_{i, j}^{(d)} = \begin{cases} 2^d & (\text{if } j = 0) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

が成り立つ。

証明. まず、 $j = 0$ のとき、観察 3.4 より

$$\sum_{i=0}^d K_{i, 0}^{(d)} = \sum_{i=0}^d \binom{d}{i} = 2^d$$

が成り立つ。次に、 $j \neq 0$ のとき、定義より

$$\sum_{i=0}^d K_{i, j}^{(d)} \nu^i = (1 + \nu)^{d-j} (1 - \nu)^j$$

である。ここで、 $\nu = 1$ を仮定すると、

$$\sum_{i=0}^d K_{i, j}^{(d)} = (1 + 1)^{d-j} (1 - 1)^j = 2^{d-j} 0^j$$

となる。今、 $j \neq 0$ だから $2^{d-j} 0^j = 0$ が成り立つ。よって題意が示された。□

補題 3.13. 任意の $0 \leq j \leq d$ に対して、

$$K_{i, j+1}^{(d+1)} = \begin{cases} K_{0, j}^{(d)} & (\text{if } i = 0) \\ K_{i, j}^{(d)} - K_{i-1, j}^{(d)} & (\text{if } 1 \leq i \leq d) \\ -K_{d, j}^{(d)} & (\text{if } i = d + 1) \end{cases}$$

が成り立つ

証明. 式 (6) より、

$$\begin{aligned} & \sum_{i=0}^{d+1} K_{i, j+1}^{(d+1)} \nu^i = (1 + \nu)^{(d+1)-(j+1)} (1 - \nu)^{j+1} \\ &= (1 - \nu)(1 + \nu)^{d-j} (1 - \nu)^j \\ &= (1 + \nu)^{d-j} (1 - \nu)^j - \nu(1 + \nu)^{d-j} (1 - \nu)^j \\ &= \sum_{i=0}^d K_{i, j}^{(d)} \nu^i - \sum_{i=0}^d K_{i, j}^{(d)} \nu^{i+1} \\ &= \sum_{i=0}^d K_{i, j}^{(d)} \nu^i - \sum_{i=1}^{d+1} K_{i-1, j}^{(d)} \nu^i \\ &= K_{0, j}^{(d)} \nu^0 + \sum_{i=1}^d (K_{i, j}^{(d)} - K_{i-1, j}^{(d)}) \nu^i - K_{d, j}^{(d)} \nu^{d+1} \end{aligned}$$

が成り立ち、 ν^i の係数に注目することで補題を得る。□

最後に、補題 3.14 を導入する。証明は後に行う。

補題 3.14. 任意の $z \geq 0$ と $0 \leq \ell \leq d-1$ に対し、

$$\sum_{j=1}^d (\lambda_j)^z K_{\ell, j-1}^{(d-1)} \binom{d}{j} \geq 0$$

が成り立つ。

定理 2.1 の証明。まず、補題 3.11 より、

$$(10) = \frac{(d+1)(\lg M + 1)}{2^{d-1}} \cdot \sum_{t=0}^{T-1} \sum_{\ell=0}^d \left| \sum_{j=1}^d (\lambda_j)^z K_{\ell, j}^{(d)} \binom{d}{j} \right| \quad (11)$$

が成り立つ。ここで補題 3.13 を用いると、

$$\begin{aligned} & \sum_{\ell=0}^d \left| \sum_{j=1}^d (\lambda_j)^z K_{\ell, j}^{(d)} \binom{d}{j} \right| \\ &= \left(\left| \sum_{j=1}^d (\lambda_j)^z K_{0, j-1}^{(d-1)} \binom{d}{j} \right| \right. \\ &+ \sum_{\ell=1}^{d-1} \left| \sum_{j=1}^d (\lambda_j)^z (K_{\ell, j-1}^{(d-1)} - K_{\ell-1, j-1}^{(d-1)}) \binom{d}{j} \right| \\ &+ \left. \left| \sum_{j=1}^d (\lambda_j)^z (-K_{d-1, j-1}^{(d-1)}) \binom{d}{j} \right| \right) \\ &\leq \left(\left| \sum_{j=1}^d (\lambda_j)^z K_{0, j-1}^{(d-1)} \binom{d}{j} \right| + \sum_{\ell=1}^{d-1} \left| \sum_{j=1}^d (\lambda_j)^z K_{\ell, j-1}^{(d-1)} \binom{d}{j} \right| \right. \\ &+ \left. \sum_{\ell=1}^{d-1} \left| \sum_{j=1}^d (\lambda_j)^z K_{\ell-1, j-1}^{(d-1)} \binom{d}{j} \right| + \left| \sum_{j=1}^d (\lambda_j)^z K_{d-1, j-1}^{(d-1)} \binom{d}{j} \right| \right) \\ &= 2 \sum_{\ell=0}^{d-1} \left| \sum_{j=1}^d (\lambda_j)^z K_{\ell, j-1}^{(d-1)} \binom{d}{j} \right| \\ &= 2 \sum_{\ell=0}^{d-1} \sum_{j=1}^d (\lambda_j)^z K_{\ell, j-1}^{(d-1)} \binom{d}{j} \end{aligned}$$

が成り立つ。最後の等号は補題 3.14 より成り立つ。補題 3.12 より、

$$\sum_{j=1}^d (\lambda_j)^z \binom{d}{j} \sum_{\ell=0}^{d-1} K_{\ell, j-1}^{(d-1)} = (\lambda_1)^z \cdot d \cdot 2^{d-1}$$

を得る。以上より、

$$\begin{aligned} (11) &= \frac{(d+1)(\lg M + 1)}{2^{d-1}} \sum_{t=0}^{T-1} 2 (\lambda_1)^{T-t-1} \cdot d \cdot 2^{d-1} \\ &\leq 2d(d+1)(\lg M + 1) \cdot \frac{1}{1 - \lambda_1} \\ &= \frac{d^2(d+1)(\lg M + 1)}{\alpha} \end{aligned}$$

となり、題意が示された。□

以下では、補題 3.14 の証明を行う。まず、 $d \times d$ 行列 R を $i, j \in \{0, 1, \dots, d-1\}$ に対し

$$R(i, j) = \begin{cases} \frac{\alpha i}{d-2\alpha} & (j = i-1) \\ \frac{\alpha(d-1-i)}{d-2\alpha} & (j = i+1) \\ \frac{d-\alpha d-\alpha}{d-2\alpha} & (j = i) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \quad (12)$$

と定義する。今、 $0 < \alpha < \frac{d}{d+1}$ と仮定しているため、任意の $i, j \in \{0, 1, \dots, d-1\}$ に対し、 $0 \leq R(i, j) \leq 1$ であることが容易に確認できる。また、任意の i に対し $\sum_{j=0}^{d-1} R(i, j) = 1$ が成り立つため、 R は遷移確率行列であることが分かる。今、 $K_{i,j}^{(d)}$ の性質を用いると、以下の補題を得る。

補題 3.15. 任意の $z \geq 0$ と $0 \leq \ell \leq d-1$ に対し、

$$R^z(0, \ell) = \frac{1}{2^{d-1}} \sum_{j=0}^{d-1} (\lambda_j^R)^z K_{\ell,j}^{(d-1)} \binom{d-1}{j}$$

が成り立つ。但し、 $\lambda_j^R = \frac{d-2\alpha(j+1)}{d-2\alpha}$ とする。

証明. まず、 $d \times d$ 行列 Λ_R を $\Lambda_R = \text{diag}(\lambda_0^R, \dots, \lambda_{d-1}^R)$ と定義する。このとき、

$$\begin{aligned} (R \cdot B_{d-1})_{i,j} &= \sum_{k=0}^{d-1} R(i, k) B_{d-1}(k, j) \\ &= R(i, i-1) B_{d-1}(i-1, j) + R(i, i) B_{d-1}(i, j) \\ &\quad + R(i, i+1) B_{d-1}(i+1, j) \\ &= \frac{\alpha i}{d-2\alpha} K_{j,i-1}^{(d-1)} + \frac{d-\alpha d-\alpha}{d-2\alpha} K_{j,i}^{(d-1)} \\ &\quad + \frac{\alpha(d-1-i)}{d-2\alpha} K_{j,i+1}^{(d-1)} \\ &= \frac{\alpha(d-1-2j)}{d-2\alpha} K_{j,i}^{(d-1)} + \frac{d-\alpha d-\alpha}{d-2\alpha} K_{j,i}^{(d-1)} \\ &= \frac{d-2\alpha(j+1)}{d-2\alpha} K_{j,i}^{(d-1)} \end{aligned}$$

が成り立つ。4 番目の等式は補題 3.6 から導かれる。そして、

$$\begin{aligned} (B_{d-1} \cdot \Lambda_R)_{i,j} &= \sum_{k=0}^{d-1} B_{d-1}(i, k) \Lambda_R(k, j) \\ &= B_{d-1}(i, j) \Lambda_R(j, j) \\ &= \frac{d-2\alpha(j+1)}{d-2\alpha} K_{j,i}^{(d-1)} = (R \cdot B_{d-1})_{i,j} \end{aligned}$$

が成り立つため、

$$R \cdot B_{d-1} = B_{d-1} \cdot \Lambda_R \quad (13)$$

となる。式 (7) と式 (13) から、

$$R^z = B_{d-1} \Lambda_R^z B_{d-1}^{-1} = \frac{1}{2^{d-1}} B_{d-1} \Lambda_R^z B_{d-1} \quad (14)$$

が成り立つ。従って、行列の成分に着目すると、

$$\begin{aligned} R^z(0, \ell) &= \frac{1}{2^{d-1}} (B_{d-1} \Lambda_R^z B_{d-1})_{0,\ell} \\ &= \frac{1}{2^{d-1}} \sum_{j=0}^{d-1} (B_{d-1} \Lambda_R^z)_{0,j} B_{d-1}(j, \ell) \\ &= \frac{1}{2^{d-1}} \sum_{j=0}^{d-1} \sum_{k=0}^{d-1} B_{d-1}(0, k) \Lambda_R^z(k, j) B_{d-1}(j, \ell) \\ &= \frac{1}{2^{d-1}} \sum_{j=0}^{d-1} B_{d-1}(0, j) \Lambda_R^z(j, j) B_{d-1}(j, \ell) \\ &= \frac{1}{2^{d-1}} \sum_{j=0}^{d-1} K_{j,0}^{(d-1)} (\lambda_j^R)^z K_{\ell,j}^{(d-1)} \\ &= \frac{1}{2^{d-1}} \sum_{j=0}^{d-1} (\lambda_j^R)^z K_{\ell,j}^{(d-1)} \binom{d-1}{j} \end{aligned}$$

となり、題意を得る。□

補題 3.14 の証明。任意の $z \geq 0$, $0 \leq \ell \leq d$ に対し、

$$G(\ell, z) = \sum_{j=1}^d (\lambda_j)^z K_{\ell,j-1}^{(d-1)} \binom{d}{j}$$

と定義する。ここで、 $0 < \alpha < \frac{d}{d+1}$ と仮定しているため、任意の $1 \leq j \leq d$ に対し

$$|\lambda_j| = \left| \frac{d-2\alpha j}{d} \right| < 1$$

が成り立つ。従って、

$$\lim_{z \rightarrow \infty} G(\ell, z) = 0 \quad (15)$$

となる。

補題 3.15 と、 $(1-x)^z - (1-x)^{z+1} = (1-x)^z \cdot x$ が成り立つことに注意すると、

$$\begin{aligned} G(\ell, z) - G(\ell, z+1) &= \sum_{j=1}^d \left(\left(1 - \frac{2\alpha j}{d}\right)^z - \left(1 - \frac{2\alpha j}{d}\right)^{z+1} \right) K_{\ell,j-1}^{(d-1)} \binom{d}{j} \\ &= \sum_{j=1}^d \left(1 - \frac{2\alpha j}{d}\right)^z \cdot \frac{2\alpha j}{d} K_{\ell,j-1}^{(d-1)} \binom{d}{j} \\ &= 2\alpha \sum_{j=1}^d \left(\frac{d-2\alpha j}{d}\right)^z K_{\ell,j-1}^{(d-1)} \binom{d-1}{j-1} \\ &= 2\alpha \sum_{j=0}^{d-1} \left(\frac{d-2\alpha(j+1)}{d}\right)^z K_{\ell,j}^{(d-1)} \binom{d-1}{j} \\ &= 2\alpha \left(\frac{d-2\alpha}{d}\right)^z \sum_{j=0}^{d-1} \left(\frac{d-2\alpha(j+1)}{d-2\alpha}\right)^z K_{\ell,j}^{(d-1)} \binom{d-1}{j} \\ &= 2\alpha \left(\frac{d-2\alpha}{d}\right)^z \cdot 2^{d-1} R(0, \ell)^z \geq 0 \end{aligned}$$

が成り立つ。3 番目の等号は $\frac{j}{d} \binom{d}{j} = \binom{d-1}{j-1}$ から導かれる。従って、

$$G(\ell, z) \geq G(\ell, z+1) \quad (16)$$

が成り立ち, $G(\ell, z)$ は z に関して単調減少である. よって,
(15) と (16) より, 題意が示された. \square

4. おわりに

本稿では, d 次元 0-1 ハイパーキューブ上の単純ランダムウォークに対して, 対応する関数ルーターモデルとの $\left| \chi_v^{(T)} - \mu_v^{(T)} \right|$ の上界が自己遷移確率 $1-\alpha$ に対し $O\left(\frac{d^3 \log M}{\alpha}\right)$ であることを示した. その証明の手法は既存研究のものとは大きく異なり, また, 無理数の自己遷移確率を許す点で既存研究とは異なっている. 今後の課題として, d 次元 0-1 ハイパーキューブ上の任意の可逆なランダムウォークに対して, $\left| \chi_v^{(T)} - \mu_v^{(T)} \right|$ の頂点数の対数サイズの上界を得ることがあげられる.

参考文献

- [1] M. R. Best, A contribution to the nonexistence of perfect codes, Mathematical Centrum, Amsterdam, (1982), 23–30.
- [2] J. N. Cooper and J. Spencer, Simulating a random walk with constant error, Combinatorics, Probability and Computing, 15(2006), 815–822.
- [3] P. Feinsilver and J. Kocik, Krawtchouk matrices from classical and quantum random walks, Contemporary Mathematics, 287 (2001) 83–96.
- [4] H. Kajino, S. Kijima, and K. Makino, Discrepancy analysis of deterministic random walks on finite irreducible graphs, discussion paper.
- [5] S. Kijima, K. Koga, and K. Makino, Deterministic random walks on finite graphs, Proceedings of Analytic Algorithmics and Combinatorics (ANALCO 2012), 16–25.
- [6] I. Krasikov, and S. Litsyn, On integral zeros of Krawtchouk polynomials. Journal of Combinatorial Theory, Ser. A. 150, (1996), 441–447.
- [7] T. Shiraga, Y. Yamauchi, S. Kijima, M. Yamashita, Deterministic random walks for irrational transition probabilities, discussion paper, 24pages.