

ランダムウォークのカットオフ現象

洞 彰人 Akihito HORA

岡山大学 Okayama University

1. 序
2. グラフ上のランダムウォーク
3. カットオフ現象
4. アソシエーションスキームと距離正則グラフ
5. レベル1のカットオフ現象
6. レベル2のカットオフ現象
7. ディスカッション

1 序

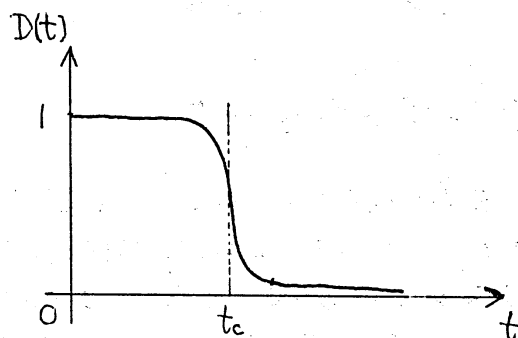
本稿は、ランダムウォークのカットオフ現象についてのサーベイ的な記事である。確率論や代数的組合せ論の予備知識が要らないように書いていきたい。ただし、自分の興味と仕事の周辺しか述べることができないので、相当偏ったものになったかもしれないことをお断りしておく。カットオフ現象の概括的な理解を得るには、創始者による手短なサーベイ [7] を一読されることを勧める。

まず、大ざっぱな説明から始めよう。カットオフ現象というのは、古典統計力学の粒子の拡散モデルなどにおいて、平衡状態への収束の過程で観測されるある種の臨界現象である。そこでは、

- ある臨界時刻を境にして、状況がガラッと変化し、
- 系を構成する要素の数が巨大なことが本質的

である。たとえば、2つに仕切られた箱の片方に気体を入れ、仕切をはずすと、気体が拡散して、ついにはマクロに見れば一様に拡散した平衡状態に達する。このとき、気体は「だんだんと」拡散していくのであろうか？ いや、そうではなくて、カットオフ現象の主張するところによれば、一見奇異な印象を与えるかもしれないが、秩序状態と無秩序状態とがある時点を境に明確に区別できるのである。（ただし、カットオフ現象が厳密に証明されているのは、今のところ、ずっと単純化されたモデルの場合にすぎない。）言い換えれば、時刻 t の

関数として、系の秩序の程度あるいは平衡状態との離れ具合を示す量 $D(t)$ を適当に定めると、そのグラフがおおよそ



のような形状になるのである。

このような現象を最初に見出したのは、P. Diaconis であった。その後、Diaconis を中心とした研究グループにより、カードシャufflingを始めとする幾つかの具体的なモデルにおいて、カットオフ現象が起こっていることが確認された。数学的にきちんとした最初の結果は、たぶん [11] であろう。ここで文献を個々に挙げることは省略する。[6] や [7] の文献表を参考にしてほしい。第5節と第6節も参照。ちなみに、「カットオフ」という呼び名は [1] で出現したようである。

私事にわたって恐縮であるが、私が初めてカットオフ現象に出会ったのは、博士課程の頃、[5] を目にしたときであった。前述のような驚くべき現象であるということと、その解析に群の表現論あるいは非可換フーリエ解析が有効に用いられているということの、つまり、問題そのものと方法論的なものとの両面から、非常に強い関心を持った。しかし、残念ながら、そのときは十分な理解に達することができなかった。主結果として導かれている一連の不等式の意味を、直観に合致した形で、現象に即して解釈することが、どうしてもできなかったのである。したがって、カットオフ現象というのが、数学的にきちんと把握できるものなのか、あるいはひょっとしたら、単にスローガンのものにすぎないのか、確信が持てなかった。そんな具合で、自分なりに理解した感触が持てて、自分でも計算を始めてみようとするまで、ずいぶん長い年月を要した（ムダにした？）ように思う。その後、自分を納得させるために作ったカットオフ現象の「定義」と幾つかの結果を書いた論文を Diaconis に送ったところ、「... I LIKED YOUR DEFINITION OF "CUT OFF" ...」云々という励ましの内容の返事を戴いて、だいぶ安心した。第3節に述べてあるのがこの定義である。Diaconis も [7] でやっとカットオフ現象の定義を書いてくれた。これについても、第3節で述べる。初めから良くわかっている人々にとっては、ことさらに定義など必要なかったのは、当然であったのかもしれない。（もっとも、具体的なモデルを越えて、ある程度一般的な枠組で議論しようとする、このような定義も目安として役立つと思う。）

本稿では、グラフ上のランダムウォークを基調として、議論を進めていく。カードシャufflingは、対称群の Cayley グラフ上のランダムウォークに他ならない。気体の拡散も、配置空間を頂点集合とするグラフの上で考えられる。本稿の一番の主題は、 Q -polynomial 距離正則グラフと呼ばれる良い対称性を備えたグラフ上のランダムウォークを考えることに

よって、カットオフ現象が起こるようなモデルを、ある程度一般的な判定条件の下で、取り出すことができるということを示すことである。

2 グラフ上のランダムウォーク

頂点集合 X と辺集合 E から成るグラフを $\Gamma := (X, E)$ とする。本稿で扱うのはすべて、有限 (i.e. $|X| < \infty$)、連結 (i.e. 任意の2頂点が辺の列でつながれている) で多重辺を持たないグラフである。 E は $X \times X$ の部分集合と思ってよい。さらに、ごく一部の例外を除いて、ほとんどは向きがなく (i.e. $E = E^*$)、ループを持たない (i.e. $\forall x \in X, (x, x) \notin E$) ものである。このような無向単純グラフに関する用語を少し準備しておく。2頂点 $x, y \in E$ が辺でつながっている (i.e. $(x, y) \in E$) とき、 x と y とが隣接していると言い、 $x \sim y$ で表す。 $x \in X$ と隣接している頂点の個数 $d_x := |\{y \in X | x \sim y\}|$ を x の degree または valency とする。 $\forall x \in X$ に対して $d_x = \kappa$ のとき、グラフ Γ は κ -正則であると言う。

次に、Markov 連鎖を考えよう。系の状態の集合 (state space) を X とする。 $|X|$ 次行列 P で $P_{x,y} \geq 0$ かつ $\sum_{y \in X} P_{x,y} = 1$ をみたすものが与えられているとき、頂点 x から頂点 y へ1単位時間で移る確率が $P_{x,y}$ であるような X 上のランダムな運動が考えられる。これが推移行列 P を持つ X 上の離散時刻 Markov 連鎖である。 $P_{x,\cdot}$ は x から出発したときの1単位時間後の分布を与える。さらに、 $k \in \mathbb{N}$ に対して

$$\begin{aligned} (P^k)_{x,y} &= \sum_{x_1, \dots, x_{k-1} \in X} P_{x,x_1} P_{x_1,x_2} \cdots P_{x_{k-1},y} \\ &= \text{頂点 } x \text{ から頂点 } y \text{ へ } k \text{ 単位時間で移る確率} \end{aligned}$$

であり、 $(P^k)_{x,\cdot}$ が x から出発したときの k 単位時間後の分布を与える。1パラメータ半群 $\{P^k | k \in \mathbb{N}\}$ がこの Markov 連鎖の時間発展を記述する。初期分布が $\mu = [\mu_x]_{x \in X}$ (横ベクトルとみなす) のときは、 μP^k が k 単位時間後の分布である。 $\pi P = \pi$ をみたす分布 $\pi = [\pi_x]_{x \in X}$ は不変測度と呼ばれる。マクロに見て時間発展がない訳であるから、このような π は平衡状態を記述している。 X 上の連続時刻 Markov 連鎖は、時間発展が1パラメータ半群 $\{e^{t(P-I)} | t \geq 0\}$ で記述されるものである。 x から出発して時刻 t に y にいる確率が $(e^{t(P-I)})_{x,y}$ で与えられる。

$$e^{t(P-I)} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{e^{-t} t^j}{j!} P^j$$

であるから、時刻 t までのジャンプの回数が Poisson 分布にしたがっている。これは、各頂点での待ち時間が指数分布にしたがっていることを意味する。離散時刻に比べて、連続時刻の方が、確率論的な構造は多少複雑であるが、(少なくとも本稿の話では) 実際の解析に際しては扱い易いと言える。(これは、連続時刻の場合には Markov 性の仮定がかなり強いものであるからであろう。)

普通、ランダムウォークというのは、Markov 連鎖の中でも、何らかの空間的対称性を有するものを指して使われることが多い。たとえば、状態空間 X に群 G が推移的に作用している場合を考えよう。 X の 1 点の安定化群を K とする。推移行列 P が $P_{gx,gy} = P_{x,y}$ ($\forall g \in G, \forall x, y \in X$) をみたすとすれば、 $K \backslash G / K$ 上の測度 p が一意的に定まって、 P が p による convolution 作用素 $p * \cdot$ で表される。このとき、 p を K -両側不変に G に持ち上げたものを分布に持つような G -値独立確率変数たちの積 (i.e. 素朴な意味のランダムウォーク) によって、もとの X 上の Markov 連鎖が記述される。群の作用の有無にかかわらず、ランダムウォークの対称性を扱うのに、グラフの構造に即して議論するのが便利である。本稿で主役を演じるのは、距離正則グラフ、中でも Q -polynomial 構造を併せ持つものである (第 4 節参照)。群の作用がある場合で言うと、2 点等質空間やランク 1 の対称空間に相当する。スペクトルや球関数が 1 変数の直交多項式 (Askey-Wilson 多項式) で具体的に統制されることが効く。

モデルの例を幾つか挙げておこう。

Example A (Ehrenfests の壺のモデル) d 個の球が 2 つの壺に入っているとし、1 ステップごとに 1 つの球をランダムに選んでその球を他方の壺に写しかえる。これは、P. and T. Ehrenfest (夫妻) によって導入されたものであり、気体の拡散を非常に単純化したモデルである。グラフの言葉で言えば、 $X := \{0, 1\}^d$ とし、 X 上の距離を $\partial(x, y) := |\{i | x_i \neq y_i\}|$ (ただし $x = (x_i)_{i=1}^d, y = (y_i)_{i=1}^d$) で定め、 $E := \{(x, y) \in X \times X | \partial(x, y) = 1\}$ とおいて、 $\Gamma := (X, E)$ 上の単純ランダムウォーク:

$$P_{x,y} := \begin{cases} 1/d & \text{if } x \sim y \\ 0 & \text{if } x \not\sim y \end{cases}$$

を考えていることになる。 Γ は d -正則グラフである。壺の個数も n 個に一般化すると、 $X := \{0, 1, \dots, n-1\}^d$ とし、 ∂ と E を上と同様に定めて、 $d(n-1)$ -正則グラフ $\Gamma := (X, E)$ 上の単純ランダムウォーク:

$$P_{x,y} := \begin{cases} 1/d(n-1) & \text{if } x \sim y \\ 0 & \text{if } x \not\sim y \end{cases}$$

を考えればよい。この $\Gamma =: H(d, n)$ は Hamming グラフと呼ばれる Q -polynomial 距離正則グラフである。

Example B (Bernoulli-Laplace の拡散モデル) 2 つに仕切られた箱の一方には d 個のもう一方には $v-d$ 個の球が入っているとし、1 ステップごとに両側から 1 つずつランダムに球を選んでその 2 球を交換して箱に戻す。これも気体の拡散を単純化したモデルである。 $d \leq v-d$ として一般性を失わない。グラフの言葉では、 $S := \{1, 2, \dots, v\}$ の d -部分集合全体を $X := \{x \subset S | |x| = d\}$ とし、 X 上の距離を $\partial(x, y) = d - |x \cap y|$ で定め、 $E := \{(x, y) \in X \times X | \partial(x, y) = 1\}$ とおいて、 $d(v-d)$ -正則グラフ $\Gamma := (X, E)$ 上の単純ラ

ランダムウォーク:

$$P_{x,y} := \begin{cases} 1/d(v-d) & \text{if } x \sim y \\ 0 & \text{if } x \not\sim y \end{cases}$$

を考えることになる. この $\Gamma =: J(v, d)$ は Johnson グラフと呼ばれる Q -polynomial 距離正則グラフである.

Example C (ランダムな互換によるカードシャッフリング) n 枚のカードを並べ, 1 ステップごとに, ランダムに 2 枚のカードを選んで (2 枚が一致することもあり得る), その 2 枚を入れ換える. $X := S_n$ (n 次対称群), $\Omega := \{\text{互換}\}$, $E := \{(x, y) \in X \times X | yx^{-1} \in \Omega\}$ とおく. この $\binom{n}{2}$ -正則グラフ $\Gamma := (X, E)$ は S_n とその生成元集合 Ω からできる Cayley グラフである. 推移行列は

$$P_{x,y} := \begin{cases} 1/n & \text{if } x = y \\ 2/n^2 & \text{if } x \sim y \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

で与えられる.

Example D (リッフルシャッフリングの Gilbert-Shannon-Reeds モデル) これは, カードをシャッフリングするときに最もよく使われるリッフルシャッフリングをきちんと定式化したモデルである. 詳しくは, [3], [18], [7] を参照してほしい. 1 ステップごとに, n 枚のカードの束を 2 項分布にしたがって 2 つに分け, 2 つの束を左右の手に持って, 両側からパラパラとリッフルする. すなわち, k 枚の束と $n-k$ 枚の束に分かれる確率が $\binom{n}{k}/2^n$ であり, リッフルの途中で左手の束が p 枚で右手の束が q 枚ならば, 次のカードを左手から落とす確率が $p/p+q$, 右手から落とす確率が $q/p+q$ とするのである. 今, $X := S_n$ とし, S_n の元でちょうど 2 つの昇数字列 (rising sequence) を含むものの全体を R とする. R は隣接 2 数字の互換 $(ii+1)$ をすべて含むが, 対称ではない (i.e. $R^{-1} \neq R$). したがって, S_n と R からできる Cayley グラフは向きのついた連結グラフになる. この Gilbert-Shannon-Reeds モデルの推移行列は

$$P_{x,y} := \begin{cases} (n+1)/2^n & \text{if } x = y \\ 1/2^n & \text{if } yx^{-1} \in R \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

で与えられる.

有限グラフ上のランダムウォークの平衡状態への収束は, かなり緩い条件の下で保証される. (推移行列 P が適当な対称性を持っていて support がそれほど偏っていなければ十分である.) したがって本稿では,

$$(P^k)_{x,y} \longrightarrow \pi(y) = 1/|X| \quad \text{as } k \rightarrow \infty \quad \text{for } \forall x, y \in X \quad (1)$$

となっている状況を扱う. どの頂点 x から出発しても, 時刻 ∞ での分布 $\lim_{k \rightarrow \infty} (P^k)_{x, \cdot}$ が X 上の一様な測度になっている場合である. われわれの関心は, (1) の収束の過程を注意深く追跡することにある.

3 カットオフ現象

(1) の収束を定量的に解析するために, k 単位時間後の分布 $(P^k)_{x, \cdot}$ と平衡状態との全変動距離を考える. 以後扱う場合では, P の空間的対称性により, この距離が出発点 x に依存しない. こうして, われわれが調べていくのは, 離散・連続時刻のランダムウォークの各々に対する次の量である.

$$D(k) := \frac{1}{2} \sum_{y \in X} |(P^k)_{x,y} - \frac{1}{|X|}| = \frac{1}{2|X|} \sum_{x,y \in X} |(P^k)_{x,y} - \frac{1}{|X|}| \quad (2)$$

$$C(t) := \frac{1}{2} \sum_{y \in X} |(e^{t(P-I)})_{x,y} - \frac{1}{|X|}| = \frac{1}{2|X|} \sum_{x,y \in X} |(e^{t(P-I)})_{x,y} - \frac{1}{|X|}|. \quad (3)$$

グラフ $\Gamma = (X, E)$ を 1 つ固定し, $\gamma := 1 - (P \text{ の第 2 固有値})$ ($I - P$ のスペクトルギャップ) とおくと, 容易に

$$C(t) \leq \frac{1}{2} \sqrt{|X| - 1} e^{-2\gamma t} = \frac{1}{2} e^{\log \sqrt{|X| - 1} - 2\gamma t}$$

を得る. このことから, $t = 1/2\gamma$ や $t = \log \sqrt{|X| - 1}/2\gamma$ が平衡状態に達するのに要する時間だとする立場も有り得るかもしれないが, われわれはもっと直観的で明快な根拠づけを求めたい. 一般に, 正しい臨界時刻はこのどちらでもなく, 両者の中間のスケールの時刻である.

カットオフ現象をきちんと定式化するために, ランダムウォークの有向族の無限体積極限を考える. Λ を有向集合 (e.g. $\mathbf{N}$ とか $\mathbf{N}^2$ とか) とし, グラフの族 $\{\Gamma^{(\lambda)} = (X^{(\lambda)}, E^{(\lambda)}) | \lambda \in \Lambda\}$ と推移行列 $P^{(\lambda)}$ を持つ $X^{(\lambda)}$ 上のランダムウォークを考え, (2) と (3) によって平衡状態との距離 $D^{(\lambda)}(k)$ と $C^{(\lambda)}(t)$ を定義する.

Definition 1 次の (i), (ii) をみたす $k_c^{(\lambda)} \in \mathbf{N}$ がとれたとする.

(i) $k_c^{(\lambda)} \rightarrow \infty$ and $k_c^{(\lambda)}/|X^{(\lambda)}| \rightarrow 0$ as $\lambda \rightarrow \infty$ (along Λ)

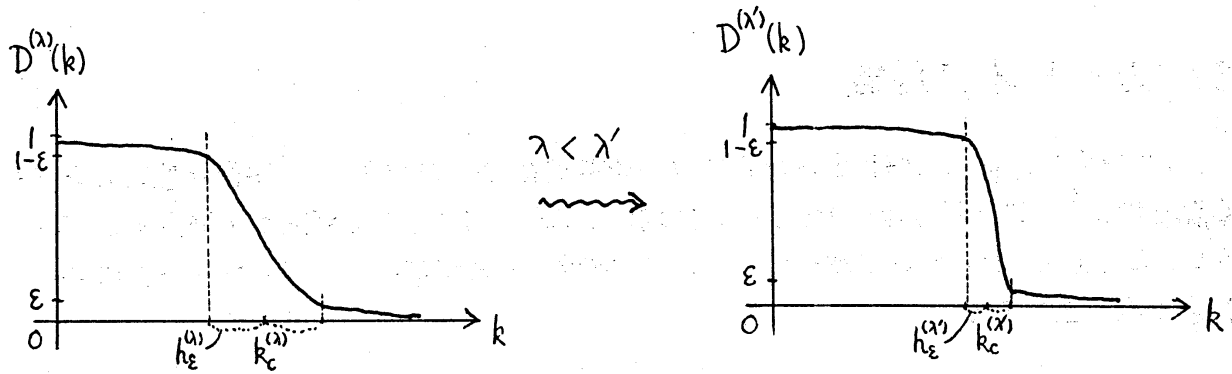
(ii) $\forall \epsilon > 0, \exists \lambda_\epsilon \in \Lambda$ and $\exists h_\epsilon^{(\lambda)} > 0$ such that

- $h_\epsilon^{(\lambda)}/k_c^{(\lambda)} \rightarrow 0$ as $\lambda \rightarrow \infty$
- $\lambda > \lambda_\epsilon$ のとき

$$\begin{aligned} 0 \leq k \leq k_c^{(\lambda)} - h_\epsilon^{(\lambda)} &\implies D^{(\lambda)}(k) \geq 1 - \epsilon \\ k \geq k_c^{(\lambda)} + h_\epsilon^{(\lambda)} &\implies D^{(\lambda)}(k) \leq \epsilon. \end{aligned}$$

このとき, この離散時刻ランダムウォーク (の族) に対してレベル 1 のカットオフ現象が起これると言い, $k_c^{(\lambda)}$ を臨界時刻と言う. 連続時刻ランダムウォークに対しても, $D^{(\lambda)}(k)$ を $C^{(\lambda)}(t)$ に, $k_c^{(\lambda)}$ を $t_c^{(\lambda)}$ に置き換えて同様の定義をする. —

ϵ を任意に与えられた非常に小さい正数で, $\lambda > \lambda_\epsilon$ とすると, 関数 $D^{(\lambda)}(k)$ のグラフは概念的に次の図のような形になる.



これは、 $k_c^{(\lambda)}$ が平衡状態に達するのに要する時間であることを明瞭に示している。

われわれが扱っているのは、一様な不変測度を持つ非周期的な Markov 連鎖であるから、1つの頂点への平均再帰時間は $|X^{(\lambda)}|$ に等しい。したがって、Def. 1 において、 $h_\varepsilon^{(\lambda)} \ll k_c^{(\lambda)} \ll |X^{(\lambda)}|$ という3つの時間スケールが現れる。ここでは、 $k_c^{(\lambda)}$ をマクロなスケールの時間だとみなしている。このレベル1のカットオフ現象は、再帰性を根拠にした Zermelo の Boltzmann 批判に対する Boltzmann の反論（たとえば [23] を参照）を、多少文脈は違うが、定量的にサポートすると思える。

さて、Def. 1 は、臨界時刻 $k_c^{(\lambda)}$ のまわりの微小な「グレーゾーン」($k_c^{(\lambda)} - h_\varepsilon^{(\lambda)}, k_c^{(\lambda)} + h_\varepsilon^{(\lambda)}$) を無視して、マクロな視点からカットオフ現象を捉えたものである。次の段階として、臨界時刻のまわりでの平衡状態への近づき方をもっと小さな時間スケール ($\asymp h_\varepsilon^{(\lambda)}$) で見て記述することを考えよう。

Definition 2 Def. 1 の下で、次の (i), (ii) をみたす $h^{(\lambda)}$ がとれたとする。

- (i) $h^{(\lambda)}/k_c^{(\lambda)} \rightarrow 0$ as $\lambda \rightarrow \infty$
- (ii) $D^{(\lambda)}(\lfloor k_c^{(\lambda)} + \theta h^{(\lambda)} \rfloor) \rightarrow c(\theta)$ as $\lambda \rightarrow \infty$ (θ に関してコンパクト一様収束)。

ただし、 $c(\theta)$ は $0 \leq c(\theta) \leq 1$, $c(-\infty) = 1$, $c(\infty) = 0$ をみたす関数である。このとき、この離散時刻ランダムウォーク (の族) に対してレベル2のカットオフ現象が起こると言う。連続時刻の場合の定義も同様。—

記号遣いは少しかえてあるが、これが、Diaconis が [7] で与えたカットオフ現象の定義である。 θ が小さな (場合によってはミクロな) スケールの時間パラメータであり、 $c(\theta)$ が臨界時刻のまわりでの平衡状態への落ち方をそのスケールで記述する関数である。

第5節と第6節でレベル1と2のカットオフ現象が検証されているモデルについて述べるが、ここでは、Ehrenfests の壺のモデルを例にとって、あらかじめ具体的な結果を1つ見しておこう。第2節の Ex. A の $n=2$ の場合である。この Hamming グラフは2部グラフであるから、 $(P^k)_{x,y}$ の $k \rightarrow \infty$ での極限值が定まらない。そこで、辺集合 E を少し修正し、各頂点にループをつけ加える: $\tilde{E} = E \cup \{(x, x) | x \in X\}$ 。そして単純ランダムウォーク:

$$\tilde{P}_{x,y} := \begin{cases} 1/(d+1) & \text{if } (x,y) \in \tilde{E} \\ 0 & \text{if } (x,y) \notin \tilde{E} \end{cases}$$

を考えれば、今度は $\lim_{k \rightarrow \infty} (\tilde{P}^k)_{x,y} = 1/|X|$ を得る。この Ehrenfests モデルでは、レベル1と2のカットオフ現象が起こる ([6], [8])。臨界時刻は $k_c^{(d)} \sim (1/4)d \log d$ ($d \rightarrow \infty$) であり、

Def. 1 の $h_\epsilon^{(d)}$ や Def. 2 の $h^{(d)}$ は d のオーダーである. また, Def. 2 の $c(\theta)$ は, 誤差関数を用いて

$$c(\theta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{e^{-\theta/2}/2\sqrt{2}} e^{-t^2} dt$$

と表される.

4 アソシエーションスキームと距離正則グラフ

次の第5節で主結果を述べるための準備として, アソシエーションスキームと距離正則グラフに関する必要事項を簡単に復習しておく. 確率論, 特に Markov 連鎖の話になじみがあると, アソシエーションスキームの概念は結構取っつき易いのではないかと思う. 私自身も, アソシエーションスキームの末端ユーザーにすぎないが, 便利なものだと思っている. 何と言っても, 非常に優れたマニュアル [2] があるのがありがたい. 本節も全面的に [2] にのっかる.

4.1 アソシエーションスキーム

有限集合 X と $X \times X$ の部分集合 R_i ($i = 0, 1, \dots, d$) について, 次の条件を考える.

- (i) $R_0 = \{(x, x) | x \in X\}$, $X \times X = R_0 \cup R_1 \cup \dots \cup R_d$ (disjoint union)
- (ii) $\forall i, \exists i'$ such that ${}^t R_i = R_{i'}$
- (iii) $\forall h, i, j$ に対して, $(x, y) \in R_h$ のとき

$$p_{ij}^h := |\{z \in X | (x, z) \in R_i, (z, y) \in R_j\}|$$

が x, y の取り方に依存しない.

- (iv) $p_{ij}^h = p_{ji}^h$ (v) $i' = i$.

(i) - (iii) をみたすとき, $\mathcal{X} = (X, \{R_i\}_{i=0}^d)$ を class d のアソシエーションスキームと呼ぶ. それに加えて (iv) をみたせば $\mathcal{X}$ は可換, さらに (v) をみたせば対称であると言う. p_{ij}^h を intersection number, $\kappa_i := p_{ii}^0 = |\{y \in X | (x, y) \in R_i\}|$ (x によらない) を valency と言う.

第 i 隣接行列 (adjacency matrix) と呼ばれる $|X|$ 次行列 A_i を

$$(A_i)_{x,y} := \begin{cases} 1 & \text{if } (x, y) \in R_i \\ 0 & \text{if } (x, y) \notin R_i \end{cases}$$

で定める. アソシエーションスキームの定義 (i) - (iii), および (iv), (v) は, 隣接行列に関する次の条件に翻訳できる.

- (i') $A_0 = I$ (単位行列), $A_0 + A_1 + \dots + A_d = J$ (すべての成分が 1 の行列)
- (ii') $\forall i, \exists i'$ such that ${}^t A_i = A_{i'}$
- (iii') $A_i A_j = \sum_{h=0}^d p_{ij}^h A_h$

$$(iv') A_i A_j = A_j A_i \quad (v') {}^t A_i = A_i.$$

$A_0, \dots, A_d$ によって生成される $Mat(|X|, \mathbb{C})$ の $d+1$ 次元部分代数 $\mathcal{A}$ を $\mathcal{X}$ の Bose-Mesner 代数と呼ぶ. 念頭に置くべき典型的な例は, X に群 G が推移的に作用しているときの軌道分解: $X \times X = R_0 \cup R_1 \cup \dots \cup R_d$ である. X の 1 点の安定化群を K とすれば, Bose-Mesner 代数 $\mathcal{A}$ は convolution 積を備えた $Fun(K \backslash G / K)$ と同型である. したがって, このアソシエーションスキームが可換なのは (G, K) が Gel'fand 対のときおよびそのときに限る.

Assumption 以後, 可換なアソシエーションスキームのみを扱う.

$\mathcal{A}$ の作用の極大な同時対角化:

$$Fun(X) = V_0 \oplus V_1 \oplus \dots \oplus V_r \quad (4)$$

を考える. ただし, 極大とは, $i \neq j$ ならば V_i と V_j の上で異なる固有値を持つ A_h が存在することを意味する. $\sum_{x \in X} \delta_x$ は $\mathcal{A}$ の同時固有ベクトルであり, かつ $J (= \sum_h A_h)$ の単純な固有ベクトルである. したがって, それは (4) の分解において 1 次元空間を張るから, その空間を V_0 としてよい. $Fun(X)$ から V_i への直交射影を E_i とする. 特に $E_0 = |X|^{-1} J$ とみなせる. (4) に即して $A_i = \sum_{j=0}^r p_i(j) E_j$ と表す. (4) の分解の極大性から E_j が $A_0, \dots, A_d$ の線型結合で書けることがわかり, A_i 's, E_j 's がそれぞれ線型独立なのは定義から明らかだから, 結局 $r = d$ を得る. $\mathcal{P} = [p_i(j)]_{j,i}$ とおくと,

$$[A_0 A_1 \dots A_d] = [E_0 E_1 \dots E_d] \mathcal{P}$$

となって, $\mathcal{P}$ がこの 2 つの $\mathcal{A}$ の基底を intertwine する. この $\mathcal{P}$ は $\mathcal{X}$ の指標表と呼ばれる. $m_i := \text{rank } E_i$ を multiplicity と言う. $\mathcal{A}$ が Hadamard 積 $\circ$ (i.e. 成分ごとのかけ算) に関して閉じているから, E_i 's の Hadamard 積が

$$(|X|E_i) \circ (|X|E_j) = \sum_{h=0}^d q_{ij}^h (|X|E_h)$$

と線型化される. この q_{ij}^h を Krein パラメータと呼ぶ. 第 5 節のレベル 1 のカットオフ現象の検証の際, Krein パラメータの 1 つ q_{11}^1 が重要な役割を演じる.

次に, 第 5 節で使うために, アソシエーションスキーム上の帯球関数を導入しておく. 比較のために Gel'fand 対 (G, K) の場合を思い出せば, G 上の帯球関数 φ は, K -両側不変, $\varphi(e) = 1$, $\{f * \cdot \mid f \in L^1(K \backslash G / K)\}$ の同時固有関数という性質で特徴づけられる.

Lemma 1 $\mathcal{A}$ が class d のアソシエーションスキーム $\mathcal{X}$ の Bose-Mesner 代数であるとき, $j = 0, 1, \dots, d$ に対して, $\sum_{i=0}^d (p_i(j)/\kappa_i) A_i$ は $\mathcal{A}$ の同時固有関数である.

証明は難しくない.

$$A_h \left(\sum_{i=0}^d \frac{p_i(j)}{\kappa_i} A_i \right) = p_{h'}(j) \sum_{i=0}^d \frac{p_i(j)}{\kappa_i} A_i$$

が示せる ([17] の Lemma 5). —

この Lemma 1 を勘案して, $\sum_{i=0}^d (p_i(j)/\kappa_i) A_i$ を第 j 帯球関数と呼ぶことにする.

4.2 距離正則グラフ

(X, E) を連結単純グラフとする. $x, y \in X$ に対して, x と y を結ぶ道の最短の長さを $\partial(x, y)$ で表し, $d := \max_{x, y \in X} \partial(x, y)$ をこのグラフの直径と言う. (X, E) が距離正則 (distance-regular) であるとは, $\partial(x, y) = h$ であれば

$$p_{ij}^h := |\{z \in X \mid \partial(x, z) = i, \partial(z, y) = j\}|$$

が x, y の取り方に依存しないときを言う. 距離正則性は

(ア) $R_i := \{(x, y) \in X \times X \mid \partial(x, y) = i\}$ とおくと, $\mathcal{X} = (X, \{R_i\}_{i=0}^d)$ がアソシエーションスキーム (必然的に対称)

(イ) 任意の $i = 0, 1, \dots, d$ に対して $A_i = v_i(A_1)$ をみたす i 次多項式 $v_i(x)$ が存在のいずれとも同値である. つまり, 距離正則グラフとは, アソシエーションスキームとグラフの共通部分と思ってよい. さらに, 任意の $i = 0, 1, \dots, d$ に対して $E_i = v_i^*(E_1)$ をみたす i 次多項式 $v_i^*(x)$ が存在するとき, Q -polynomial 距離正則グラフと呼ぶ. ここで, $v_i^*(E_1)$ という式の中では, Hadamard 積によって行列をかけている. 第2節の Examples で出てきた Hamming グラフ $H(d, n)$ と Johnson グラフ $J(v, d)$ は, ともに Q -polynomial 距離正則グラフの典型的な例である.

距離正則グラフでは, Bose-Mesner 代数 $\mathcal{A}$ は単位行列と $A := A_1$ で生成される. A の極大なスペクトル分解 $A = \sum_{j=0}^d p_1(j) E_j$ が直ちに $\mathcal{A}$ の極大な同時スペクトル分解を導く. したがって, $p_1(j)$ は異なる実数である. 一般に, グラフの隣接行列 A と隣接代数 $\mathcal{A}$ に対して

$$\text{直径} + 1 \leq \dim \mathcal{A} = A \text{ の最小多項式の次数} = A \text{ の異なる固有値の個数}$$

が成り立つが, 距離正則グラフではこの式で等号が成り立っている. すなわち, 対称性の帰結として, 固有値の縮退が起こり易くなっていると言える. この固有値 (特に第2固有値) の縮退がカットオフ現象に直接かかわってくる.

以下, 直径 d の距離正則グラフにおいては, 記号の簡略化のため,

$$\kappa := \kappa_1, \quad m := m_1, \quad \theta_j := p_1(j) \quad (j = 0, 1, \dots, d)$$

とおく. θ_j は絶対値が κ 以下の異なる実数であるので,

$$-\kappa \leq \theta_d < \theta_{d-1} < \dots < \theta_1 < \theta_0 = \kappa \quad (5)$$

と番号づけておく.

4.3 ランダムウォーク

アソシエーションスキーム上のランダムウォークを定義しよう. 比較のために, 推移行列 P を持つ $X = G/K$ 上の Markov 連鎖を考えると, G の作用による軌道分解 $X \times X =$

$R_0 \cup R_1 \cup \cdots \cup R_d$ において

$$\begin{aligned} P \text{ の空間的対称性} &\iff \forall g \in G, \forall x, y \in X, \quad P_{gx,gy} = P_{x,y} \\ &\iff P_{x,y} \text{ が } X \times X \text{ 上の関数として各 } R_i \text{ 上で定値} \\ &\iff P \text{ が Bose-Mesner 代数に属する} \end{aligned}$$

が成り立つ.

Definition 3 アソシエーションスキーム $\mathcal{X}$ 上の Markov 連鎖の中で, 推移行列 P が Bose-Mesner 代数に属するものを $\mathcal{X}$ 上のランダムウォークと呼ぶ. —

A_i/κ_i が確率行列であるから, ランダムウォークの推移行列 P はそれらの凸結合で表される:

$$P = \sum_{i=0}^d \frac{w_i}{\kappa_i} A_i \quad (w_i \geq 0, \sum_{i=0}^d w_i = 1). \quad (6)$$

このとき, (2) と (3) における等号 (i.e. 出発点 x に依存しないこと) が確かに成り立つ. $E_0 = |X|^{-1}J$ であったから, 離散・連続時刻のランダムウォークに対して, 平衡状態との距離をはかる量として, それぞれ

$$D(k) := \frac{1}{2|X|} \sum_{x,y \in X} |(P^k - E_0)_{x,y}| \quad (7)$$

$$C(t) := \frac{1}{2|X|} \sum_{x,y \in X} |(e^{t(P-I)} - E_0)_{x,y}| \quad (8)$$

を調べていく.

Proposition 1 (6) の形の P に対して, 次式が成り立つ.

$$\begin{aligned} D(k)^2 &\leq \frac{1}{4} \sum_{j=1}^d m_j \left| \sum_{i=0}^d w_i \frac{p_i(j)}{\kappa_i} \right|^{2k} \\ C(t)^2 &\leq \frac{1}{4} \sum_{j=1}^d m_j \exp \left\{ -2t \sum_{i=0}^d w_i \left(1 - \operatorname{Re} \frac{p_i(j)}{\kappa_i} \right) \right\}. \end{aligned}$$

証明は, P のスペクトル分解に Schwarz の不等式を援用して行う. —

この Prop. 1 は [11] において “upper bound lemma” と呼ばれたものの類似であり, $D(k)$ と $C(t)$ の上からの評価に最もよく使われる.

(6) において特に $w_1 = 1$ のとき, すなわち, $P = A_1/\kappa_1$ のときを単純ランダムウォークと呼ぶ. これは 1 単位時間後に隣接頂点の 1 つに等確率 $1/\kappa_1$ で移るものである. 距離正則グラフ上の単純ランダムウォークに対しては, Prop. 1 (upper bound lemma) は

$$D(k)^2 \leq \frac{1}{4} \sum_{j=1}^d m_j \left(\frac{\theta_j}{\kappa} \right)^{2k} \quad (9)$$

$$C(t)^2 \leq \frac{1}{4} \sum_{j=1}^d m_j \exp \left\{ -2t \left(1 - \frac{\theta_j}{\kappa} \right) \right\} \quad (10)$$

と簡易化される.

5 レベル1のカットオフ現象

本節では, Q -polynomial 距離正則グラフ上の単純ランダムウォークの族に対して, カットオフ現象が起こるための判定条件を述べる. Diaconis が指摘したように, 第2固有値の縮退が大事な要因である ([7]). まず, 大ざっぱな見積をしておこう.

連続時刻ランダムウォークにおける上からの評価 (10) に着目する. (5) を考慮すれば, (10) の右辺における主要部は $j = 1$ の項の可能性が高い. そして

$$m \exp\left\{-2t\left(1 - \frac{\theta_1}{\kappa}\right)\right\} = \exp\left\{\log m - \frac{2(\kappa - \theta_1)}{\kappa}t\right\}$$

は, $t = (\kappa/2(\kappa - \theta_1))(\log m + c)$ とおくと, e^{-c} になる. $\log m$ が大きければ, $t_c = (\kappa/2(\kappa - \theta_1)) \log m$ の直後あたりの $C(t)$ の落ち方が急激になる. こうして, 第2固有値の重複度 m の大きさの重要性がわかり, 臨界時刻 t_c の値の予想がつく. しかし, この議論をきちんと正当化するには, 第2よりももっと先の固有値と multiplicity の増大度に関する情報が要る. また, $C(t)$ の下からの評価には全く触れていない. その辺の事情を本節で詰めていく.

$\{\mathcal{X}^{(\lambda)} = (X^{(\lambda)}, E^{(\lambda)}) | \lambda \in \Lambda\}$ を Q -polynomial 距離正則グラフの有向族とし, $\mathcal{X}^{(\lambda)}$ 上の単純ランダムウォークに対して, (7) と (8) によって $D^{(\lambda)}(k)$ と $C^{(\lambda)}(t)$ を定義する. この他にも, $\mathcal{X}^{(\lambda)}$ の諸量を上添字^(λ)をつけて表す. e.g. $\kappa^{(\lambda)}, m^{(\lambda)}, \theta_j^{(\lambda)}, m_j^{(\lambda)}, d^{(\lambda)}, q_{11}^{1(\lambda)}$ etc. 本節の定理は [15], [17] による.

5.1 上からの評価

Theorem 1 (an upper estimate in continuous time) 次の (i) – (iv) をみたす定数 $\alpha > 0$, $\phi : \mathbf{N} \rightarrow \mathbf{R}$, $\psi : \mathbf{N} \rightarrow \mathbf{R}_+$ (すべて λ に依存しない) が存在するとする.

- (i) $\frac{\kappa^{(\lambda)} - \theta_j^{(\lambda)}}{\kappa^{(\lambda)} - \theta_1^{(\lambda)}} \geq \psi(j) \quad (j = 1, \dots, d^{(\lambda)})$
- (ii) $\log m^{(\lambda)} - \frac{\kappa^{(\lambda)} - \theta_1^{(\lambda)}}{\kappa^{(\lambda)} - \theta_j^{(\lambda)}} \log m_j^{(\lambda)} \geq \phi(j) \quad (j = 1, \dots, d^{(\lambda)})$
- (iii) $\liminf_{j \rightarrow \infty} \phi(j) > \alpha$
- (iv) $\sum_{j=1}^{\infty} e^{-\alpha\psi(j)} < \infty.$

このとき,

$$M := \sup_{\lambda \in \Lambda} \sum_{j=1}^{d^{(\lambda)}} \frac{m_j^{(\lambda)}}{m^{(\lambda)}(\kappa^{(\lambda)} - \theta_j^{(\lambda)})/(\kappa^{(\lambda)} - \theta_1^{(\lambda)})} < \infty$$

となり,

$$t := \frac{\kappa^{(\lambda)}}{2(\kappa^{(\lambda)} - \theta_1^{(\lambda)})} (\log m^{(\lambda)} + c) \quad (c > 0)$$

とおくと

$$C^{(\lambda)}(t) \leq \frac{\sqrt{M}}{2} e^{-c/2}$$

が成り立つ.

Theorem 2 (an upper estimate in discrete time)

$$(0) \quad |\theta_{d^{(\lambda)}}^{(\lambda)}| \leq \theta_1^{(\lambda)}$$

に加えて, 次の (i) – (iv) をみたす定数 $\alpha > 0$, $\phi : \mathbf{N} \rightarrow \mathbf{R}$, $\psi : \mathbf{N} \rightarrow \mathbf{R}_+$ (すべて λ に依存しない) が存在するとする.

$$(i) \quad \frac{\log |\theta_j^{(\lambda)} / \kappa^{(\lambda)}|}{\log(\theta_1^{(\lambda)} / \kappa^{(\lambda)})} \geq \psi(j) \quad (j = 1, \dots, d^{(\lambda)})$$

$$(ii) \quad \log m^{(\lambda)} - \frac{\log(\theta_1^{(\lambda)} / \kappa^{(\lambda)})}{\log |\theta_j^{(\lambda)} / \kappa^{(\lambda)}|} \log m_j^{(\lambda)} \geq \phi(j) \quad (j = 1, \dots, d^{(\lambda)})$$

$$(iii) \quad , \quad (iv) \quad \text{in Th. 1.}$$

このとき,

$$M := \sup_{\lambda \in \Lambda} \sum_{j=1}^{d^{(\lambda)}} \frac{m_j^{(\lambda)}}{m^{(\lambda)} \log |\theta_j^{(\lambda)} / \kappa^{(\lambda)}| / \log(\theta_1^{(\lambda)} / \kappa^{(\lambda)})} < \infty$$

となり,

$$k := \left\lceil \frac{\log m^{(\lambda)} + c}{-2 \log(\theta_1^{(\lambda)} / \kappa^{(\lambda)})} \right\rceil \quad (c > 0)$$

とおくと

$$D^{(\lambda)}(k) \leq \frac{\sqrt{M}}{2} e^{-c/2}$$

が成り立つ.

Th. 1 と Th. 2 は upper bound lemma (10) と (9) を用いた地道な評価によって示される. 途中, Q -polynomial 性を使ったりするが, 技術的な詳細は省略して [17] に譲る. —

Th. 1 の条件 (i) より,

$$\psi(d^{(\lambda)}) \leq \frac{\kappa - \theta_d^{(\lambda)}}{\kappa - \theta_1^{(\lambda)}} \leq \frac{2\kappa}{\kappa - \theta_1^{(\lambda)}} = \frac{2}{1 - (\theta_1^{(\lambda)} / \kappa^{(\lambda)})}$$

であるが, $\lambda \rightarrow \infty$ のとき (系のサイズが大きくなって) $d^{(\lambda)} \rightarrow \infty$ となり, 条件 (iv) より $\psi(d^{(\lambda)}) \rightarrow \infty$ であるから, $1 - (\theta_1^{(\lambda)} / \kappa^{(\lambda)}) \rightarrow 0$ を得る. したがって, 連続時刻の場合のわれわれの上からの評価 Th. 1 を適用できるのは, $\lambda \rightarrow \infty$ の極限でスペクトルギャップが消える場合に限られる.

5.2 下からの評価

Theorem 3 (a lower estimate in continuous time) 次の (i) – (iii) がみたされたとする.

- (i) $m^{(\lambda)} \rightarrow \infty$ as $\lambda \rightarrow \infty$
- (ii) $\frac{\kappa^{(\lambda)} - \theta_2^{(\lambda)}}{2(\kappa^{(\lambda)} - \theta_1^{(\lambda)})} = 1 + \frac{o(1)}{\log m^{(\lambda)}} \quad \text{as } \lambda \rightarrow \infty$
- (iii) $\exists \beta > 0$ and $\exists \lambda_1 \in \Lambda$ such that $\forall \lambda > \lambda_1, (q_{11}^{1(\lambda)})^2 \leq \beta^2 m^{(\lambda)}$.

このとき,

$$t := \frac{\kappa^{(\lambda)}}{2(\kappa^{(\lambda)} - \theta_1^{(\lambda)})} (\log m^{(\lambda)} - c) \quad (0 \leq c \leq \log m^{(\lambda)})$$

とおくと, $\forall \epsilon > 0, \exists c_\epsilon > 0$ and $\exists \lambda_\epsilon \in \Lambda$ such that

- $\lambda > \lambda_\epsilon \implies \log m^{(\lambda)} > c_\epsilon$
- $\lambda > \lambda_\epsilon$ and $\log m^{(\lambda)} \geq c > c_\epsilon \implies C^{(\lambda)}(t) \geq 1 - \epsilon$.

Theorem 4 (a lower estimate in discrete time) 次の (0) – (iii) がみたされたとする.

- (0) $\theta_2^{(\lambda)} > 0$, $\{\log(\kappa^{(\lambda)}/\theta_1^{(\lambda)})/\log m^{(\lambda)} | \lambda \in \Lambda\}$ が上に有界
- (i), (iii) in Th. 3
- (ii) $\frac{\log(\theta_2^{(\lambda)}/\kappa^{(\lambda)})}{2 \log(\theta_1^{(\lambda)}/\kappa^{(\lambda)})} = 1 + \frac{o(1)}{\log m^{(\lambda)}} \quad \text{as } \lambda \rightarrow \infty$.

このとき,

$$k := \left\lfloor \frac{\log m^{(\lambda)} - c}{-2 \log(\theta_1^{(\lambda)}/\kappa^{(\lambda)})} \right\rfloor \quad (0 \leq c \leq \log m^{(\lambda)})$$

とおくと, $C^{(\lambda)}(t)$ を $D^{(\lambda)}(k)$ にかえて Th. 3 と同じ結論が成り立つ. —

[17] には Th. 3 と Th. 4 の条件をもう少し緩くした下からの評価も述べてある.

Th. 3 と Th. 4 の証明は, Diaconis と Shahshahani が [11], [12] で開発した調和解析的な方法をアソシエーションスキームに拡張することによって遂行される. ここでは概略を記すにとどめ, 詳細は [17] に譲る. まず, 次の簡単な不等式に注意する.

Lemma 2 Q_1, Q_2 を $(\Omega, \mathcal{B})$ 上の確率測度とし, Ω 上の $\mathbb{R}$ -値関数 f で, Q_1 に関しては平均 $\mu > 0$, 分散 $v > 0$ を持ち, Q_2 に関しては平均 0, 分散 1 を持つものがあるとする, $0 < \forall r < \mu$ に対して

$$\|Q_1 - Q_2\| := \max_{B \in \mathcal{B}} |Q_1(B) - Q_2(B)| \geq 1 - \frac{1}{r^2} - \frac{v}{(\mu - r)^2}$$

が成り立つ. (証明は Chebychev の不等式による.) —

さて, $|X|$ 次 0-1 行列全体を $\mathcal{I}$ とし, 行列のすべての成分の和をとる操作を τ で表すと, 全変動距離 (8) は

$$C(t) = \frac{1}{|X|} \max_{A \in \mathcal{I}} \tau((e^{t\Delta} - E_0) \circ A) \quad (\Delta := P - I = \frac{1}{\kappa} A_1 - I)$$

と書き直せる. $\Omega := X \times X$ とし, $X \times X$ の部分集合とその特性関数を同一視して

$$Q_1 := \frac{1}{|X|} \tau(e^{t\Delta} \circ \cdot), \quad Q_2 := \frac{1}{|X|} \tau(E_0 \circ \cdot)$$

とおき, Lem. 2 を適用する. この際, 第 4 節で述べたアソシエーションスキームの帯球関数を用いて,

$$f := \sqrt{m} \sum_{i=0}^d \frac{p_i(1)}{\kappa_i} A_i \quad (\text{第 1 帯球関数})$$

を採る. 実際, アソシエーションスキームの指標表の直交関係や Q -polynomial 性などを使って

$$\begin{aligned} \frac{1}{|X|} \tau(E_0 \circ \sqrt{m} \sum_{i=0}^d \frac{p_i(1)}{\kappa_i} A_i) &= 0 \\ \frac{1}{|X|} \tau(E_0 \circ m \sum_{i=0}^d \frac{p_i(1)^2}{\kappa_i^2} A_i) &= 1 \\ \mu &:= \frac{1}{|X|} \tau(e^{t\Delta} \circ \sqrt{m} \sum_{i=0}^d \frac{p_i(1)}{\kappa_i} A_i) = \sqrt{m} e^{t((\theta_1/\kappa)-1)} \\ v &:= \frac{1}{|X|} \tau(e^{t\Delta} \circ m \sum_{i=0}^d \frac{p_i(1)^2}{\kappa_i^2} A_i) - \mu^2 \\ &= 1 + q_{11}^1 e^{t((\theta_1/\kappa)-1)} + (m-1-q_{11}^1) e^{t((\theta_2/\kappa)-1)} - m e^{2t((\theta_1/\kappa)-1)} \end{aligned}$$

を得る. そして Th. 3 の条件から $v/\mu^2 \rightarrow 0$ as $\lambda \rightarrow \infty$ が示せて, Lem. 2 がうまく適用できることがわかる. 離散時刻の場合もだいたい同様の議論である.

5.3 カットオフ現象

Th. 1 + Th. 3 および Th. 2 + Th. 4 で, レベル 1 のカットオフ現象の判定条件が得られたことになる.

Theorem 5 $\lambda \in \Lambda$ でパラメトライズされた Q -polynomial 距離正則グラフ上の単純ランダムウォークの有向族に対して, 次の結果が成り立つ.

(1) 連続時刻の場合. Th. 1 の (i) – (iv) と Th. 3 の (i) – (iii) のもとで, レベル 1 のカットオフ現象が起こる. その臨界時刻は

$$t_c^{(\lambda)} = \frac{\kappa^{(\lambda)}}{2(\kappa^{(\lambda)} - \theta_1^{(\lambda)})} \log m^{(\lambda)}$$

であって, 誤差の時間幅 $h_e^{(\lambda)}$ は $\kappa^{(\lambda)}/2(\kappa^{(\lambda)} - \theta_1^{(\lambda)})$ の程度である.

(2) 離散時刻の場合. Th. 2 の (0) - (iv) と Th. 4 の (0) - (iii) のもとで, レベル 1 のカットオフ現象が起こる. その臨界時刻は

$$k_c^{(\lambda)} = \left\lfloor \frac{1}{-2 \log(\theta_1^{(\lambda)}/\kappa^{(\lambda)})} \log m^{(\lambda)} \right\rfloor$$

であって, 誤差の時間幅 $h_e^{(\lambda)}$ は $1/-2 \log(\theta_1^{(\lambda)}/\kappa^{(\lambda)})$ の程度である. したがって, スペクトルギャップが $\lambda \rightarrow \infty$ で消えなければ, 誤差の時間幅が有界であって, いっそうシャープなカットオフ現象が見られる. —

この判定条件は Q -polynomial 距離正則グラフの

$$\begin{pmatrix} \theta_0 & \theta_1 & \cdots & \theta_d \\ m_0 & m_1 & \cdots & m_d \end{pmatrix} : \text{グラフのスペクトル}$$

$$q_{11}^1 : \text{1つの Krein パラメータ}$$

を知ればチェックできることを銘記すべきである. グラフのスペクトル構造によってカットオフ現象を記述することは, 応用上も意味を持つであろう. Krein パラメータが表に現れる本質的な理由は, 今のところまだはっきりしていない.

5.4 Hamming グラフでの具体的な検証

Ehrenfests の壺のモデルの一般化である $H(d, n)$ 上の単純ランダムウォークに対して, Th. 5 のチェック項目を具体的に計算してみよう. 実は, $H(d, n)$ は最も簡単な場合であると言ってよい. 特に, 連続時刻ランダムウォークでは, 各座標が独立になってずいぶん見やすくなる. 他のモデルに関する結果は, 次小節で触れる.

$H(d, n)$ のスペクトルと Krein パラメータは

$$\theta_j = d(n-1) - nj, \quad m_j = (n-1)^j \binom{d}{j} \quad (j = 0, 1, \dots, d), \quad q_{11}^1 = n-2$$

で与えられる ([2] の第 3 章). $n \geq 3$ としよう. 離散時刻の場合のみ記す. $d \rightarrow \infty$ でスペクトルギャップは消える.

まず, Th. 2 の条件のチェック. $\theta_1 - |\theta_d| = d(n-1) - n - d$ だから, d が大きければ (0) が OK. $\theta_j \geq 0 \iff j \leq (1 - (1/n))d$ である. $\log$ の凹性から

$$\log(1-b)/\log(1-a) > b/a \quad (0 < a < b < 1)$$

が成り立つことに注意する. そうすると

$$j \leq \left(1 - \frac{1}{n}\right)d \quad \text{ならば} \quad \frac{\log(\theta_j/\kappa)}{\log(\theta_1/\kappa)} \geq j$$

$$j > \left(1 - \frac{1}{n}\right)d \quad \text{ならば} \quad \frac{\log|\theta_j/\kappa|}{\log(\theta_1/\kappa)} \geq \frac{\log|\theta_d/\kappa|}{\log(\theta_1/\kappa)} \geq \left(1 - \frac{2}{n}\right)d \geq \left(1 - \frac{2}{n}\right)j$$

だから, $\psi(j) := j/3$ として (i) が OK.

$$\log m_j \leq j \log(n-1) + j \log d - \log j!$$

と上の不等式から, $j \leq (1 - (1/n))d$ ならば

$$\log m - \frac{\log(\theta_1/\kappa)}{\log(\theta_j/\kappa)} \log m_j \geq \frac{\log j!}{j}$$

であり, $j > (1 - (1/n))d$ ならば

$$\begin{aligned} \log m - \frac{\log(\theta_1/\kappa)}{\log(\theta_j/\kappa)} \log m_j &\geq -\frac{2/n}{1 - (2/n)} \log(n-1) - \frac{2/n}{1 - (2/n)} \log d + \frac{1}{1 - (2/n)} \frac{\log j!}{j} \\ &\geq -\frac{2/n}{1 - (2/n)} \log(n-1) - \frac{2/n}{1 - (2/n)} \log \frac{j}{1 - (1/n)} + \frac{1}{1 - (2/n)} \frac{\log j!}{j} \\ &= -\frac{2/n}{1 - (2/n)} \log(n-1) + \frac{2/n}{1 - (2/n)} \log\left(1 - \frac{1}{n}\right) + \log j + \frac{1}{1 - (2/n)} \left(\frac{\log j!}{j} - \log j\right) \\ &= \log j + O(1) \end{aligned}$$

だから, $\phi(j) := \log j + \text{定数}$ として (ii) が OK. (iii) と (iv) は明らか.

次に, Th. 4 の条件のチェック. d が大きければ (0) が OK. (i) は明らか.

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{\log(\theta_2/\kappa)}{2 \log(\theta_1/\kappa)} - 1 \right\} \log m &= \frac{O(1/d^2)}{\log(1 - n/(n-1)d)} \{\log(n-1) + \log d\} \\ &= \frac{O(1/d)}{-n/n-1 + O(1/d)} \{\log(n-1) + \log d\} \quad (d \rightarrow \infty) \end{aligned}$$

より, $(\log n)/d \rightarrow 0$ ならば (ii) が OK. 最後に

$$\frac{(q_{11}^1)^2}{m} = \frac{1 - 2/n}{1 - 1/n} \frac{n}{d}$$

より, n/d が有界ならば (iii) が OK.

全部あわせると, n/d が有界ならば, $d \rightarrow \infty$ でレベル 1 のカットオフ現象が起こることがわかった. 臨界時刻は

$$t_c^{(d,n)} \sim k_c^{(d,n)} \sim \frac{d}{2} \left(1 - \frac{1}{n}\right) (\log n + \log d)$$

で与えられる.

5.5 その他のモデル

レベル 1 のカットオフ現象が起こることが確認されているモデルは他にも結構多い. たとえば,

いろいろなカードシャッフリング — [11], [1], [6]

Bernoulli-Laplace の拡散モデルとその q -アナログ — [12], [13], [4]

有限体上の行列群での話 — [14]

コンパクトな古典群やその等質空間での話 — [21], [22], [19], [20], [24]

などである. Th. 5 を適用した他の距離正則グラフでのカットオフ現象の検証については, [15], [17] に譲る.

6 レベル 2 のカットオフ現象

レベル 2 のカットオフ現象が検証されているモデルはまだそう多くはない. 最初の結果は, Ehrenfests モデルにおける [8] である. Ehrenfests モデルとその一般化に対しては, その後 [25], [16] がある. リッフルシャッフルの Gilbert-Shannon-Reeds モデルで検証したのが [3] である. [26] は球面上の熱核についてのレベル 2 の話を扱っている. 本節では, [16] にしたがって Hamming グラフ $H(d, n)$ でのレベル 2 のカットオフ現象の概略を述べる. §5.4 において, n/d が有界のとき $d \rightarrow \infty$ でレベル 1 のカットオフ現象が起こることを確認したが, 臨界時刻のまわりの様子は, $d \rightarrow \infty$ で n/d が 0 になるか否かでずいぶん異なることが示される.

まず, アソシエーションスキーム上のランダムウォークの推移行列についての準備的な話をしておく. 推移行列 P が (6) の形に表されるとき,

$$P_k(h) := (P^k)_{x,y}, \quad P(t, h) := (e^{t(P-I)})_{x,y} \quad \text{for } (x, y) \in R_h$$

とおく. (右辺が h によって決まり, x, y の取り方によらないことに注意.) $|X|E_i = \sum_{j=0}^d q_i(j)A_j$ によって, 係数 $q_i(j)$ ($i, j = 0, 1, \dots, d$) を定める.

Proposition 2 (6) の推移行列 P を持つランダムウォークにおいて,

$$P_k(h) = \frac{1}{|X|} \sum_{j=0}^d \left(\sum_{i=0}^d \frac{w_i}{\kappa_i} p_i(j) \right)^k q_j(h) \quad (11)$$

$$P(t, h) = \frac{1}{|X|} \sum_{j=0}^d \exp \left\{ -t \left(1 - \sum_{i=0}^d \frac{w_i}{\kappa_i} p_i(j) \right) \right\} q_j(h) \quad (12)$$

が成り立つ. (証明は P のスペクトル分解による. [16] 参照.) —

さて, $H(d, n)$ 上の単純ランダムウォークを考えよう. $n \geq 3$ とする. Krawtchouk 多項式

$$K_i(u) := \sum_{l=0}^i (-n)^l (n-1)^{i-l} \binom{d-l}{i-l} \binom{u}{l}$$

を用いて, $p_i(j) = q_i(j) = K_i(j)$ と表せる ([2] の第 3 章を参照). したがって, (11) より, 離散時刻の場合は

$$P_k(h) = \frac{1}{|X|} \sum_{j=0}^d \left(\frac{\theta_j}{\kappa} \right)^k q_j(h) = \frac{1}{n^d} \sum_{j=0}^d \left(1 - \frac{nj}{(n-1)d} \right)^k K_j(h)$$

となる. Krawtchouk 多項式の母関数

$$(1 + (n-1)t)^{d-u}(1-t)^u = \sum_{i=0}^{\infty} K_i(u)t^i$$

を用いれば, (12) より, 連続時刻の場合は

$$\begin{aligned} P(t, h) &= \frac{1}{|X|} \sum_{j=0}^d \exp\left\{-t\left(1 - \frac{\theta_j}{\kappa}\right)\right\} q_j(h) \\ &= \frac{1}{n^d} \left\{1 + (n-1) \exp\left(-\frac{nt}{(n-1)d}\right)\right\}^{d-h} \left\{1 - \exp\left(-\frac{nt}{(n-1)d}\right)\right\}^h \end{aligned} \quad (13)$$

を得る. (13) は, $(\kappa_h P(t, h) | h = 0, 1, \dots, d)$ が 2 項分布であることを示している. これから, 連続時刻の場合の方が断然扱い易いことがわかる.

[25] において Voit は, 次のような手順で, Ehrenfests の壺のモデルにおけるレベル 2 のカットオフ現象を示した.

(Step 1) まず, 連続時刻の場合に直接的な計算によって示す.

(Step 2) 次に, P^k と $e^{k(P-I)}$ の差を評価することにより, 連続時刻の結果から離散時刻の結果を導く.

$H(d, n)$ 上の単純ランダムウォークにおいても, 評価を改良すれば, この Voit のアイデアが生かされる. (Step 2) については, $\|P^k - e^{k(P-I)}\|_{HS}$ が, 臨界時刻のまわりでコンパクト一様に, かつ n に関しても一様に, $d \rightarrow \infty$ で 0 に収束することが示される. (§5.4 で求めた臨界時刻を思い出してほしい.) これを使って, 次の Th. 6, Th. 7 を得ることができる. 途中, Berry-Esseen の定理 (中心極限定理における一様ノルム評価) を使ったりするが, 証明の詳細は [16] に譲る.

Theorem 6 $d \rightarrow \infty$ かつ $n/d \rightarrow \tau (> 0)$ のとき, θ に関してコンパクト一様に

$$D^{(d,n)}\left(\left[\left(1 - \frac{1}{n}\right)d\{\log(n-1)d + \theta\}\right]\right) \rightarrow \|p_{1/\tau} - p_{(1/\tau) + (e^{-\theta/2}/\sqrt{\tau})}\|$$

が成り立つ. ただし, $\|\cdot\|$ は全変動距離, p_α は intensity α の Poisson 分布を表す.

Theorem 7 $d \rightarrow \infty$ かつ $n/d \rightarrow 0$ のとき ($n \geq 3$ は有界でなくてもよい), θ に関してコンパクト一様に

$$D^{(d,n)}\left(\left[\left(1 - \frac{1}{n}\right)d\{\log(n-1)d + \theta\}\right]\right) \rightarrow \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{e^{-\theta/2}/2\sqrt{2}} e^{-t^2} dt$$

が成り立つ.

Th. 6, Th. 7 は, 連続時刻の場合も同じ形で成り立つ. —

これで, レベル 2 のカットオフ現象が示された.

7 ディスカッション

本節では、今後の問題や個人的な感想などをインフォーマルなコメントの形で列挙しておく。

1. レベル2のカットオフ現象を示すモデルの具体例がもっと集まればよいと思う。Hamming グラフは、固有値が等差数列をなすという非常に都合の良い状況にあって、その上のランダムウォークは確率論的構造が簡単であり、調和解析的な方法のメリットを生かしきっていないように感じる。推移行列に対する直接的な functional calculus によって強引に計算できる例もあるはずである。ちなみに、Bernoulli-Laplace の拡散モデルにおけるレベル2のカットオフ現象の検証は、未だオープンである。

2. レベル1のカットオフ現象を判定する Th. 5 の条件は、見かけがちょっと込み入っている。これを簡易化したり、別の判定条件を探したりする試みが必要であろう。グラフのずっと先の方のスペクトルに関する情報まで本当に必要かどうかは疑わしい。しかし、主としてスペクトルで統制するというアプローチ自体は、一番自然なものであると思う。

3. カットオフ現象の構造安定性もしくは不安定性の問題が、応用上たいへん重要である。本稿で扱ったのは系が強い対称性を有する場合であったのであるが、カットオフ現象が起こるためにこのような対称性が厳格に必要なとは、ちょっと考えにくい面がある。たとえば、グラフの辺がちょっとだけ欠損しているとか、ところどころに妙な頂点(不純物)があるとかいう場合も、考慮の中に置きたい。したがって、対称性を強力な指導原理としつつも、それに加えて推移行列の摂動も考えるべきである。実際、[9], [10] では、比較定理を主題にして、このような方向と関連する興味ある結果が得られている。

4. 連続時刻ランダムウォークのカットオフ現象を本稿のような観点で議論する場合、Markov 性の仮定は本質的でないように思う。何らかの自然な要請でもって各頂点での待ち時間の分布が与えられるようなモデルも考えるべきであろう。そのような場合でも、調和解析的な方法が依然として有効性を持つ感じである。

5. 本稿では、ランダムウォークの分布と平衡状態との距離をはかるのに、もっぱら全変動距離を用いた。エントロピーなどの他の物差しを使用したときに結果がどう変わるかも、大事な観点であろう。私自身、まだ詰めていないので何とも言えない。[7] の Diaconis のコメントとそこに挙げられている文献を参照されたい。今のところ、別の物差しを使って結果に注目すべき相違が現れたということはないようであるが...

6. 序で述べたように、本稿では、グラフ上のランダムウォークを基調としてカットオフ現象を議論してきた。少なくとも直観的には、1ステップごとのミクロな法則が古典力学的な描象のもとで捉えられている。カットオフ現象を量子統計力学の枠組の中で議論するのは、たいへん興味深い問題であると思う。3で述べたことともつながるのであるが、本稿の議論においても、実際に解析する立場から見て大事なものは、グラフの対称性そのものというよりもむしろ、推移行列が住んでいる Bose-Mesner 代数の良い構造であったと言える。こ

のような考え方から、非可換化 (いわゆる量子ランダムウォーク) への入口の話を [15] で論じた。量子化されたモデルにおけるカットオフ現象の具体的な例を早く見てみたい。

7. 計算機実験のノウハウを心得た方々が、カットオフ現象に興味を持たれてこの分野に参入されることを、強く望んでいる。

References

- [1] Aldous, D. and Diaconis, P., Shuffling cards and stopping times, *Amer. Math. Monthly* **93** (1986), 333–348.
- [2] Bannai, E. and Ito, T., *Algebraic combinatorics I. Association schemes*, Benjamin/Cummings, Menlo Park, California, 1984.
- [3] Bayer, D. and Diaconis, P., Trailing the dovetail shuffle to its lair, *Ann. Appl. Probab.* **2** (1992), 294–313.
- [4] D'Aristotile, A.J., The nearest neighbor random walks on subspaces of a vector space and rate of convergence, *J. Theoret. Probab.* **8** (1995), 321–346.
- [5] Diaconis, P., Applications of non-commutative Fourier analysis to probability problems, *Lecture Notes in Math.* **1362**, 1988, 51–100.
- [6] Diaconis, P., *Group representations in probability and statistics*, Inst. Math. Stat., Hayward, California, 1988.
- [7] Diaconis, P., The cutoff phenomenon in finite Markov chains, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **93**, no.4 (1996), 1659–1664.
- [8] Diaconis, P., Graham, R.L. and Morrison, J.A., Asymptotic analysis of a random walk on a hypercube with many dimensions, *Random Struct. Algor.* **1** (1990), 51–72.
- [9] Diaconis, P. and Saloff-Coste, L., Comparison theorems for reversible Markov chains, *Ann. Appl. Probab.* **3** (1993), 696–730.
- [10] Diaconis, P. and Saloff-Coste, L., Comparison techniques for random walks on finite groups, *Ann. Probab.* **21** (1993), 2131–2156.
- [11] Diaconis, P. and Shahshahani, M., Generating a random permutation with random transpositions, *Z. Wahr. verw. Geb.* **57** (1981), 159–179.
- [12] Diaconis, P. and Shahshahani, M., Time to reach stationarity in the Bernoulli-Laplace diffusion model, *SIAM J. Math. Anal.* **18** (1987), 208–218.

- [13] Donnelly, P., Lloyd, P. and Sudbury, A., Approach to stationarity of the Bernoulli-Laplace diffusion model, *Adv. Appl. Probab.* **26** (1994), 715–727.
- [14] Hildebrand, M., Generating random elements in $SL_n(\mathbb{F}_q)$ by random transvections, *J. Alg. Combin.* **1** (1992), 133–150.
- [15] Hora, A., Towards critical phenomena for random walks on various algebraic structures, In Heyer, H. and Hirai, T. (eds.), *Trans. German-Japanese Symposium 1995 in Tübingen*, D.+M. Gräbner, Bamberg, 1996, 113–127.
- [16] Hora, A., The cut-off phenomenon for random walks on Hamming graphs with variable growth conditions, *Publ. RIMS Kyoto Univ.* **33** (1997), to appear.
- [17] Hora, A., The cut-off phenomenon for random walks on P - and Q -polynomial association schemes, submitted.
- [18] Mann, B., How many times should you shuffle a deck of cards?, In Snell, J.L. (ed.), *Topics in contemporary probability and its applications*, CRC Press, Boca Raton, Florida, 1995, 261–289.
- [19] Porod, U., The cut-off phenomenon for random reflections, *Ann. Probab.* **24** (1996), 74–96.
- [20] Porod, U., The cut-off phenomenon for random reflections II: complex and quaternionic cases, *Probab. Th. Rel. Fields* **104** (1996), 181–210.
- [21] Rosenthal, J.S., Random rotations: characters and random walks on $SO(N)$, *Ann. Probab.* **22** (1994), 398–423.
- [22] Saloff-Coste, L., Precise estimates on the rate at which certain diffusions tend to equilibrium, *Math. Z.* **217** (1994), 641–677.
- [23] 朝永振一郎, 物理学とは何だろうか (下), 岩波新書, 1979.
- [24] Voit, M., Limit theorems for compact two-point homogeneous spaces of large dimensions, *J. Theoret. Probab.* **9** (1996), 353–370.
- [25] Voit, M., Asymptotic distributions for the Ehrenfest urn and related random walks, *J. Appl. Probab.* **33**, no.3 (1996), 340–356.
- [26] Voit, M., Asymptotic behavior of heat kernels on spheres of large dimensions, *J. Multivariate Anal.* **59** (1996), 230–248.