f-equitable の一般化とランダムウォーク

早稲田大学大学院基幹理工学研究科　数学応用数理専攻 西村優作
Yusaku Nishimura
Graduate School of Fundamental Science and Engineering, Waseda University

本稿では、Aida Abiad 氏 (Eindhoven University of Technology, Vrije Universiteit Brussels) との共同研究により得られた結果 [2] について報告する。

1　はじめに

グラフのランダムウォークとは、グラフ内のある頂点に存在する粒子が辺に沿って異なる頂点にランダムに遷移する離散時間確率過程のことである。特に、頂点が等しい確率で選ばれる際にこれをシンプルランダムウォークと呼ぶ。ランダムウォークによるグラフの頂点 u から v への期待到達時間とは、頂点 u からランダムウォークを始めた時に、初めて頂点 v へ到達するまでにかかるステップ数の期待値のことである。グラフの期待到達時間はそのグラフの隣接行列から計算できるが、一部の対称性の高いグラフにおいては隣接行列よりも少ない情報で計算できることが知られている。例えば、距離正則グラフと呼ばれる、グラフ内の頂点間の距離に対して高い対称性を持つグラフがある。このグラフには intersection array と呼ばれるパラメータが与えられており、距離正則グラフの期待到達時間は intersection array の情報のみで計算できることが知られている [3, 6, 9]。更に、f-equitable グラフと呼ばれる、距離正則グラフの一般化においても同様に隣接行列よりも少ない情報で期待到達時間が求まることが知られている [8]。本稿では、f-equitable グラフを一般化した弱 f-equitable グラフと呼ばれるグラフを定義し、そのグラフの期待到達時間の公式を与える。更に、弱重み付き f-equitable グラフを定義し、そのようなグラフ上でのマキシマルエントロピーランダムウォークによる期待到達時間の公式を与える。これらの一般化によって、距離正則化グラフや擬距離正則グラフなどの期待到達時間を求める。本稿の構成は以下の通りである。第 2 章では基本的な用語と、f-equitable に関する期待到達時間に関する結果を述べる。第 3 章では弱 f-equitable を定義し、期待到達時間の公式を与え、また距離正則化グラフの期待到達時間を与える。第 4 章では重み付き弱 f-equitable を定義し、マキシマルエントロピーランダムウォークによる期待到達時間の公式を与え、また擬距離正則グラフの期待到達時間を与える。第 5 章では、今後の課題を紹介する。

2　f-equitable グラフ

2.1　用語の諸定義や表記

ある集合 V によって添え字づけられている $|V| \times |V|$ の行列 A があるとする。本稿では、任意の $v \in V$ に対して、A_{-v} を A から v 行 v 列を除いた行列を表すことにする。またベクトル $\mathbf{x}$ に対して、その v 成分を $\mathbf{x}_v$ と表記することにする。グラフの頂点 v に対してその近傍集合を $N(v)$ と表記し、グラフ G の 2 頂点に対し

て距離を与える関数を $d_G(u,v)$ と表記する。G が明らかである時は、$d(u,v)$ と表記する。まず、グラフのシンプルランダムウォークないし期待到達時間の定義を与える。

定義 2.1 (シンプルランダムウォーク)**.** グラフ G の隣接行列を $A = a_{uv}$ として、$D = d_{uv}$ を対角行列で、$d_{vv} = \sum_{u \in G} a_{vu}$ とする。この時、左推移確率行列を AD^{-1} とするマルコフ連鎖をグラフ G 上の**シンプルランダムウォーク**と呼ぶ。

定義 2.2 (期待到達時間)**.** グラフ G 上のシンプルランダムウォークによる**期待到達時間**とは、頂点 v からシンプルランダムウォークを始めた時に初めて頂点 u に入るまでにかかるステップ数の期待値である。

グラフ G の隣接行列を $A = a_{uv}$ として、$D = d_{uv}$ を対角行列で、$d_{vv} = \sum_{u \in G} a_{uv}$ とする。この時、$H(G;(v,u)) = -\mathbf{1}((AD^{-1})_{-v} - I)_u^{-1}$ とすると、これが G の頂点 u から v への期待到達時間となることが知られている。ただし、$\mathbf{1}$ は全ての成分が 1 のベクトルである。本稿では、グラフ G のシンプルランダムウォークによる u から v への期待到達時間を $H(G;(v,u))$ と表記する。

2.2 f-equitable

次に、f-equitable について定義する。まず、equitable 分割と呼ばれるグラフの頂点分割を定義する。

定義 2.3 (Equitable 分割)**.** グラフ G の頂点集合の分割 $P = \{V_0, \dots, V_r\}$ があるとする。任意の頂点 $v \in V_i$ に対して、$|N(v) \cap V_j| = q_{ij}$ が成り立つような整数 q_{ij} が $0 \le i, j \le r$ の任意の i, j に対して存在する時、これを **equitable 分割**と呼ぶ。また、この q_{ij} を**商行列 (quotient matrix)** と呼び、q_{ij} を隣接行列とするグラフを**商グラフ (quotient graph)** と呼ぶ。

Equitable 分割を用いて、f-equitable グラフが定義される。

定義 2.4 (f-equitable[8])**.** G をグラフとして、頂点集合を V とする。$f : V \times V \mapsto \{x_0, \dots, x_r\}$ なる関数 f があるとして、$F_{x_i}(v) \coloneqq \{u \in V \mid f(v,u) = x_i\}$ かつ

$$P(v) \coloneqq \{F_{x_0}(v), F_{x_1}(v), \dots, F_{x_r}(v)\}$$

なる V の分割を考える。任意の頂点 v に対して分割 $P(v)$ が下記の条件を満たす時、G が f-equitable であると呼ぶ。

- $F_{x_0}(v) = \{v\}$ となる。
- $P(v)$ が equitable 分割である。
- $P(v)$ の商行列が v の取り方によらない。

また、$P(v)$ の商行列を G の f による商行列と呼ぶ。同様に、G の f による商グラフを、G の f による商行列を隣接行列とするグラフとする。

$f : V \times V \mapsto \{x_0, \dots, x_r\}$ なる関数 f がある時、A_i という行列を $f(u,v) = x_i$ の時に uv 成分が 1 で、他の場合には 0 とする行列とすることで、f と一対一に対応する $r+1$ 個の行列を考えることが出来る。これを用いることで、f-equitable を f を表す行列の集合 $\{A_0, \dots, A_r\}$ を用いて定義することが出来る。

定義 2.5 (行列を使った f-equitable の定義)**.** G の隣接行列を A として、$\{A_0, \ldots, A_r\}$ を 0 と 1 のみからなる $r+1$ 個の行列とする。A と $\{A_0 \ldots, A_r\}$ が下記の条件を満たす時、$(A, \{A_0, \ldots, A_r\})$ が f-equitable であると呼ぶ:

· $A_0 = I$ である。

· $\sum_{i=0}^{r} A_i = J$ となる、ただし J は全ての成分が 1 の行列。

· $0 \leq i \leq r$ となる全ての整数 i に対して、q_{ij} という整数があって、

$$A_i A = \sum_{j=0}^{r} q_{ij} A_j$$

となる。

f-equitable グラフの期待到達時間について、以下の定理が知られている。

定理 2.1 ([8])**.** G が f-equitable であるとし、G の f による商グラフを G_Q とする。この時、

$$H(G; (v,u)) = H(G_Q; (f(v,v), f(v,u))).$$

この結果を用いると、例えば距離正則グラフと呼ばれるグラフの期待到達時間をそのパラメータから求めることが出来る。

定義 2.6 (距離正則グラフ)**.** グラフ G に対して、任意の i に対して距離が i であるようなどんな 2 頂点 u, v を選んでも、v から距離が $i-1$ かつ u と隣接する頂点の数がちょうど c_i であり、また v から距離が $i+1$ かつ u と隣接する頂点の数がちょうど b_i となるような整数 b_i, c_i が存在する時、G を距離正則グラフと呼ぶ。また、$\{b_0, \ldots, b_{\Delta_G - 1}; c_1, \ldots, c_{\Delta_G}\}$ を G の intrsection array と呼ぶ。ただし、Δ_G は G の直径である。

グラフ G に対して、d を 2 頂点の距離を与える関数とする。この時、G が距離正則グラフであることと G が d-equitable であることは同値であり、従って距離正則グラフの期待到達時間が定理 2.1 より求まる。他にもいくつかのグラフの期待到達時間が求まることが知られている [8]。

3 弱 f-equitable と期待到達時間

この章では弱 f-equitable グラフを定義し、その期待到達時間の公式を紹介する。また、その応用として距離正則化グラフの期待到達時間を与える。

定義 3.1 (弱 f-equitable)**.** G をグラフとして、頂点集合を V とする。$f : V \times V \mapsto \{c_1, \ldots, c_s, x_1, \ldots, x_r\}$ なる関数 f があるとして、$F_{x_i}(v) \coloneqq \{u \in V \mid f(v,u) = x_i\}$ かつ

$$P(v) \coloneqq \{F_{c_1}(v), \ldots, F_{c_s}(v), F_{x_1}(v), \ldots, F_{x_r}(v)\}$$

なる V の分割を考える。任意の頂点 v に対して分割 $P(v)$ が下記の条件を満たす時、G が**弱 f-equitable** であると呼ぶ。

- $F_{c_i}(v) = \{v\}$ となる i が存在し、また $j \neq i$ ならば $F_{c_j}(v) = \emptyset$。

- $P(v)$ が equitable 分割である。

- $P(v)$ の商行列が $f(v,v)$ の値にのみ依存する。

また、$P(v)$ の商行列を G の f による頂点 v の商行列と呼ぶ。同様に、G の f による頂点 v の商グラフを、G の f による頂点 v の商行列を隣接行列とするグラフとする。

弱 f-equitable と f-equitable との違いは、商行列が頂点によって変化しても良いという点である。f-equitable と同様に、f と対応する行列の集合 $\{A_0,\ldots,A_r\}$ を使って弱 f-equitable を定義することも出来る。

定義 3.2 (弱 f-equitable の行列を使った定義)**.** G の隣接行列を A として、$\{A_0,\ldots,A_r\}$ を 0 と 1 のみからなる $r+1$ 個の行列とする。A と $\{A_0\ldots,A_r\}$ が下記の条件を満たす時、$(A,\{A_0,\ldots,A_r\})$ が弱 f-equitable であると呼ぶ:

· ある c という整数があって、$\sum_{j=0}^{c} A_i = I$ となる。

· $\sum_{i=0}^{r} A_i = J$ となる、ただし J は全ての成分が 1 の行列。

· $0 \leq i \leq r$ となる全ての整数 i に対して、q_{ij} という整数があって、

$$A_i A = \sum_{j=0}^{r} q_{ij} A_j$$

となる。

弱 f-equitable であるグラフの期待到達時間は、f-equitable と同様に商グラフの期待到達時間と一致することがわかった。

定理 3.1. G を弱 f-equitable として、G の f による頂点 v の商グラフを $G_{Q(v)}$ とする。この時、

$$H(G;(v,u)) = H(G_{Q(v)};(f(v,v),f(v,u))).$$

定理 3.1 から、距離正則化グラフと呼ばれるグラフの期待到達時間を計算できる。

定義 3.3 (距離正則化グラフ)**.** グラフ G の任意の頂点 v と任意の整数 i に対して、v からの距離が i であるようなどんな頂点 u を選んでも、v から距離が $i-1$ かつ u と隣接する頂点の数がちょうど $c_i(v)$ であり、また v から距離が $i+1$ かつ u と隣接する頂点の数がちょうど $b_i(v)$ となるような整数 $b_i(v), c_i(v)$ が存在する時、G を**距離正則化グラフ**と呼ぶ。また、$\iota(v) = \{b_0(v),\ldots,b_{\Delta_G(v)-1}(v);c_1(v),\ldots,c_{\Delta_G(v)}(v)\}$ を G の頂点 v の intrsection array と呼ぶ。ただし、$\Delta_G(v) \coloneqq \max\{d(v,u) \mid u \in V\}$ である。

G が距離正則化グラフであり、かつ任意の頂点 v に対して $\iota(v)$ が v の取り方によらない時、G は距離正則グラフである。従って、距離正則化グラフは距離正則グラフの一般化である。特に、$\iota(v)$ がちょうど 2 種類しかない時、これを距離二部正則グラフと呼ぶ。距離正則化グラフは、距離正則グラフあるいは距離二部正則グラフに限ることが知られている [7]。また、距離正則グラフ上の期待到達時間は [3, 6, 9] において示されており、距離二部正則グラフ上の期待到達時間は [5] において示されている。定理 3.1 を用いることで、これらの結果をまとめることが出来る。

定理 3.2. G を距離正則化グラフとして、頂点 v の intersection array を

$$\iota(v)=\begin{bmatrix} * & c_1(v) & \cdots & c_{d-1}(v) & c_d(v) \\ 0 & a_1(v) & \cdots & a_{d-1}(v) & a_d(v) \\ b_0(v) & b_1(v) & \cdots & b_{d-1}(v) & * \end{bmatrix}$$

とする。また、

$$Q(v)=\begin{pmatrix} 0 & c_1(v) & & & \\ b_0(v) & a_1(v) & & & \\ & b_1(v) & & & \\ & & \ddots & c_{D_v-1}(v) & \\ & & & a_{D_v-1}(v) & c_{D_v}(v) \\ & & & b_{D_v-1}(v) & a_{D_v}(v) \end{pmatrix}.$$

とすると、$H(G;(v,u))=H(G_{Q(v)};(0,d(v,u)))$ である。ただし、$G_{Q(v)}$ は $Q(v)$ を隣接行列とするグラフとする。

4 重み付き f-equitable と期待到達時間

本章では、重み付き equitable 分割を用いて、弱重み付き f-equitable グラフを定義し、そのグラフ上でのマキシマルエントロピーランダムウォークによる期待到達時間の公式を紹介する。加えて、弱 f-equitable グラフのマキシマルエントロピーランダムウォークによる期待到達時間も与える。また、擬距離正則グラフの期待到達時間を与える。

まず初めに、重み付き equitable 分割を定義する。

定義 4.1 (重み付き equitable 分割)**.** グラフ G の隣接行列を A として、その最大固有値を λ_1 とする。更に、λ_1 に対応する固有ベクトルを ν とする。また、ν は成分が全て正かつ $\|\nu\|=1$ とする。$P=\{V_1,\cdots,V_m\}$ を G の頂点集合の分割とすると、$1\le i,j\le m$ である任意の整数 i,j について、任意の頂点 $v\in V_j$ における $b^*_{ij}(v)$ を下記で定義する。

$$b^*_{ij}(v)\coloneqq\frac{1}{\nu_v}\sum_{u\in N(v)\cap V_i}\nu_v.$$

$1\le i,j\le m$ を満たす任意の i,j と任意の 2 頂点 $u,v\in V_j$ について $b^*_{ij}(u)=b^*_{ij}(v)$ が成立する時、P を**重み付き equitable** と呼ぶ。また、$b^*_{ij}=B^*$ を P の**重み付き intersection numbers** と呼ぶ。

注意として、Perron-Frobenius の定理から ν の成分を全て正に取れることが知られているから、どんなグラフに対しても条件を満たす ν は存在する。equitable 分割は常に重み付き equitable 分割であることが知られている。

補題 4.1 ([1])**.** G をグラフとして、A を G の隣接行列かつ ν を最大固有値に対応する固有ベクトルとする。$P=\{V_1,\dots,V_r\}$ をグラフ G の頂点の分割とする。P が equitable である時かつその時に限り、P は重み付き equitable かつ任意の $V_i\in P$ について、V_i の全ての頂点 u について ν_u の値が i にのみ依存する。また、P が equitable である時、その商行列 Q と重み付き intersection numbers B^* について

$$B^*=D_\nu QD_\nu^{-1},$$

となる。ただし、$D_\nu=diag(\nu_1,\dots,\nu_n)$。

従って、重み付き equitable 分割とは equitable 分割の一般化になっている。重み付き equitable を用いて、弱重み付き f-equitable を定義する。

定義 4.2 (弱重み付き f-equitable)**.** G をグラフとして、頂点集合を V とする。$f : V \times V \mapsto \{c_1, \dots, c_s, \dots, x_r\}$ なる関数 f があるとして、$F_{x_i}(v) \coloneqq \{u \in V \mid f(v,u) = x_i\}$ かつ

$$P(v) \coloneqq \{F_{c_1}(v), \dots, F_{c_s}(v), F_{x_1}(v), \dots, F_{x_r}(v)\}$$

なる V の分割を考える。任意の頂点 v に対して分割 $P(v)$ が下記の条件を満たす時、G が**弱重み付き f-equitable** であると呼ぶ。

- $F_{c_i}(v) = \{v\}$ となる i が存在し、また $j \neq i$ ならば $F_{c_j}(v) = \emptyset$。
- $P(v)$ が重み付き equitable 分割である。
- $P(v)$ の重み付き intersection numbers が $f(v,v)$ の値にのみ依存する。

また、$P(v)$ の重み付き intersection numbers を G の f による頂点 v の重み付き intersection numbers と呼ぶ。同様に、G の f による頂点 v の**重み付き商グラフ**を、G の f による頂点 v の重み付き intersection numbers を隣接行列とするグラフとする。

補題 4.1 から、弱 f-equitable グラフは常に弱重み付き f-equitable グラフであることがわかるので、弱重み付き f-equitable は弱 f-equitable の一般化になっている。ただし、重み付き equitable は、グラフに固有ベクトルを使った重みを与えてしまうから、重み付き intersection numbers からシンプルランダムウォークの期待到達時間を求めることは難しい。しかし、重み付き equitable と同様な重みを与えるランダムウォークを考えれば、今までと同様に重み付き商グラフの期待到達時間から元のグラフの期待到達時間が決定できる。

定義 4.3 (マキシマルエントロピーランダムウォーク [4])**.** グラフ G の隣接行列を A とし、その最大固有値を λ_1、そして λ_1 に対応する固有ベクトルを $\nu = (\nu_1, \dots, \nu_n)$ とする。また、ν は成分が全て正かつ $\|\nu\| = 1$ として、ν の成分を対角に並べた対角行列を $D_\nu = \mathrm{diag}(\nu_1, \dots, \nu_n)$ とする。左推移確率行列を $\frac{1}{\lambda_1} D_\nu A D_\nu^{-1}$ とするマルコフ連鎖をグラフ G 上の**マキシマルエントロピーランダムウォーク**と呼ぶ。

定義 4.4 (マキシマルエントロピーランダムウォークの期待到達時間)**.** グラフ G 上の**マキシマルエントロピーランダムウォークによる期待到達時間**とは、頂点 v からマキシマルエントロピーランダムウォークを始めた時に初めて頂点 u に入るまでにかかるステップ数の期待値である。

グラフ G における頂点 u から v へのマキシマルエントロピーランダムウォークによる期待到達時間を $H_m(G;(v,u))$ と表記する。弱重み付き f-equitable であるグラフの、マキシマルエントロピーランダムウォークによる期待到達時間について以下の定理が成立する。

定理 4.1. G を弱重み付き f-equitable として、G の f による頂点 v の重み付き商グラフを $G_{B^*(v)}$ とする。この時、

$$H_m(G;(v,u)) = H(G_{B^*(v)}; (f(v,v), f(v,u))).$$

ここで、補題 4.1 より、弱 f-equitable グラフのマキシマルエントロピーランダムウォークによる期待到達時間も与えることが出来る。

定理 4.2. G を弱 f-equitable グラフとして、f による頂点 v の商行列を $Q(v)$ とし、$B^*(v) = D_\nu Q(v) D_\nu^{-1}$ とする。この時、

$$H_m(G;(v,u)) = H(G_{B^*(v)};(f(v,v),f(u,v))).$$

ただし、$G_{B^*(v)}$ は $B^*(v)$ を隣接行列とするグラフとする。

また、定理 4.1 の証明と同様な議論で、擬距離正則グラフと呼ばれるグラフのマキシマルエントロピーランダムウォークによる期待到達時間もパラメータから計算できることがわかった。

定義 4.5 (擬距離正則グラフ)**.** グラフ G について、頂点 v からの距離による頂点の分割が重み付き equitable である時、G を v を中心とする擬距離正則グラフと呼ぶ。

定理 4.3. G が頂点 v を中心とする擬距離正則グラフとして、v からの距離によって得られる分割を $D(v)$ とし、$D(v)$ の重み付き商グラフを G_{B^*} とする。この時、

$$H_m(G;(v,u)) = H(G_{B^*};(0,d(v,u))).$$

更に、$D(v)$ が equitable である時、

$$H(G;(v,u)) = H(G_Q;(0,d(v,u)))$$

である。ただし、$Q = D_\nu^{-1} B^* D_\nu$ であり、G_Q は Q を隣接行列とするグラフである。

5 今後の課題

本章では、今後の課題を二つ述べる。まず一つは、f-equitable とアソシエーションスキームとの関係についてである。例えば $\{A_0,\ldots,A_d\}$ という $d+1$ 個の行列からなるアソシエーションスキームが与えられたとき、$I \subset \{1,2,\ldots,d\}$ として $A = \sum_{i\in I} A_i$ とした時、$(A,\{A_0,\ldots,A_d\})$ は常に f-equitable になる。現在見つかっている f-equitable グラフはこのようにアソシエーションスキームから考えられるグラフしか見つかっていない。従って、アソシエーションスキームから作られていないような f-equitable グラフが存在するかまだわかっていない。つまり、$(A,\{A_0,\ldots,A_d\})$ が f-equitable であるが $\{A_0,\ldots,A_d\}$ がアソシエーションスキームにならないような物が存在するかまだ分かっていない。

また、弱重み付き f-equitable であって、弱 f-equitable でないようなグラフが存在するかどうかがわかっていない。重み付き f-equitable については、以下のことがわかっている。

定理 5.1. グラフ G が重み付き f-equitable の時、G は f-equitable となる。

つまり、重み付き f-equitable であるが f-equitable でないようなグラフは存在しないことはわかっている。

謝辞

研究集会において発表および議論の機会をいただきましたことに感謝申し上げます。また、世話人の方々をはじめ、関係者の皆様に深く御礼申し上げます。

参考文献

[1] A. Abiad. A characterization and an application of weight-regular partitions of graphs. *Linear Algebra and its Applications* 569 (2019), 162–174.

[2] A. Abiad, Y.Nishimura, Average hitting times of distance-regular graphs extensions. in preparation.

[3] N.L. Biggs. Potential theory on distance-regular graphs. *Combinatorics, Probability and Computing* 2(3) (1993), 243–255.

[4] Z. Burda, J. Duda, J. M. Luck, and B. Waclaw. Localization of the maximal entropy random walk. *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009), 160602.

[5] Á. Carmona, A. Encinas, M.J. Jiménez. Mean first passage time for distance-biregular graphs. *A: Conference of the International Linear Algebra Society (ILAS)*, Book of Abstracts (2022), 202–206.

[6] L. Devroye, A. Sbihi. Random walks on highly symmetric graphs. *Journal of Theoretical Probability* 3(4) (1990), 497–514.

[7] C.D. Godsil, J. Shawe-Taylor. Distance-regularised graphs are distance-regular or distance-biregular. *J. Combin. Theory Ser. B* 43 (1987), 14–24.

[8] Y. Nishimura. Average hitting times in some f-equitable graphs. arXiv:2312.11848v1.

[9] A.R.D. Van Slijpe. Random walks on regular polyhedra and other distance- regular graphs. *Statistica Neerlandica* 38(4) (1984), 273–292.