

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 6 日現在

機関番号：11301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2011～2013

課題番号：23654046

研究課題名(和文) 複雑ネットワークのスペクトル解析と頂点間統計量によるモデル化手法の構築

研究課題名(英文) Spectral analysis of complex networks and modeling methods by statistics

研究代表者

尾畑 伸明 (Obata, Nobuaki)

東北大学・情報科学研究科・教授

研究者番号：10169360

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,800,000円、(間接経費) 840,000円

研究成果の概要(和文)：(1) ネットワークのスペクトル解析：グラフの直積の距離 $k$ グラフに対して、因子数を無限大とするときの極限分布を「組合せ的中心極限定理」として導出した。加重付超立方体を構成し、スペクトル分布を $q$ 変形エルミート多項式で記述する公式を得た。有向パスグラフのマンハッタン積に関して、因子の個数が小さいときには固有値分布を完全に決定し、パスが長くなるときの漸近的スペクトルを導出した。

(2) モデル化手法のためのダイナミクスの統計的漸近挙動：量子確率論の手法を古典的なランダムウォークに応用して、推移確率や再帰確率に関する公式を再構成した。スパイダーネット上の量子ウォークに対して、局在化の必要十分条件を導出した。

研究成果の概要(英文)：(1) Spectral analysis of networks: The asymptotic spectral distribution of the distance- $k$  graph of the cartesian product graph is derived as a combinatorial central limit theorem. The asymptotic spectral distribution of weighted hypercubes are described in terms of  $q$ -deformed Hermite polynomials. The spectral distribution is completely determined for the Manhattan product of directed paths of small orders, and their asymptotic behaviors are obtained in the infinite length.

(2) Statistical and asymptotic behaviors of dynamics for the modeling methods: A quantum probabilistic method is applied to classical random walks for reconstructing transition probability and recurrence probability. A necessary and sufficient condition is obtained for a quantum walk (Grover walk) on a spidernet in order to exhibit the localization.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：数学・基礎解析学

キーワード：ネットワーク 量子確率 量子ウォーク ランダムグラフ スペクトル 局在化 有向グラフ 固有値分布

## 1. 研究開始当初の背景

複雑ネットワーク研究の背景は様々であるが、数学的側面から2つの流れがある。一つは、次数分布・平均頂点間距離・クラスター係数などの統計量を用いて、その構造をとらえ分類することである。たとえば、「実世界の巨大グラフはスケールフリーである」といった標語的主張を厳密に証明する問題などがこれに属する。もう一つは、与えられたネットワーク上の確率過程の諸性質を明らかにすることである。最近注目されている渋滞や協働現象はこの方向に関連する。

研究代表者は、1998年頃からグラフのスペクトル解析に量子確率論的手法を導入して成果をあげ、2007年に連携研究者の洞との共著を出版した。その後、応用系を含めた多くの研究者と議論を重ね、複雑ネットワークのスペクトルに関する諸問題に対して、量子確率論的手法の可能性を見出すとともに、次の2つの問題意識をもった。

(1) 従来の分類論で用いられてきた統計量は単純すぎるため、より詳しい構造を反映するスペクトルが注目され始めた。当時、すでに物理学者による先行研究があったが、その多くは数値計算に負っており、数学的なアプローチは少なく、この状況は今もあまり変わらない。

(2) 応用の現場、たとえば、遺伝子発現ネットワークや環境ネットワークなどでは、ネットワークの詳細構造を知る術がなく、少数の頂点間統計量が計測されるにすぎない。したがって、ネットワーク構造を既知として、その上の確率過程を論じても貢献度は低い。

このような背景から、複雑ネットワークに対して量子確率論による独自の方法論で貢献し、基礎数理から応用までを一貫する研究手法を確立することを大きな目標として掲げるに至った。特に、頂点間統計量からネットワーク構造を推測する「逆問題」をスペクトル解析の立場から扱うことは挑戦的萌芽研究としてふさわしいものと考えた。

## 2. 研究の目的

巨大なグラフ、成長するグラフ、ランダムグラフ、辺に向きや加重など付加構造をもつもの(複雑ネットワークと総称する)は様々な分野に波及する重要な研究テーマである。本研究では、量子確率論特有の非可換的な観点と手法を導入して、複雑ネットワークのスペクトル解析に新しいアプローチを提案するとともに、複雑ネットワーク上の確率過程の統計的漸近挙動を解明する。その先には、頂点間統計量からネットワークの粗構造と階層構造を推定するモデル化手法を確立して、生物学や環境科学への応用を期待する。

(1) グラフのスペクトル解析：閾値グラフ・距離 $k$ グラフ・スパイダーネットなどの具体例に対して、スペクトル分布や固有関数

に関する詳しい計算を蓄積する。特に、成長パラメータをもつグラフに対して、スペクトル分布の漸近挙動と極限分布を明らかにする。これに並行して、従来の量子確率的手法を見直し、独立性とグラフ構造の関連を軸に、極限分布を量子中心極限定理の系として導出する体系について研究する。

(2) ランダムグラフのスペクトル解析：ランダム成長グラフとして、Erdős-Rényi ランダムグラフやランダム閾値グラフを取り上げ、ランダムグラフの平均スペクトルとその漸近挙動の解明をめざす。極限スペクトル密度の導出は未解決であり、これまでに蓄積した成長グラフの極限スペクトルの例(自由ポアソン分布や自由マイクスナー分布)や量子分解法を見直す。

(3) 有向グラフのスペクトル解析：情報理論やグラフ上のダイナミクスからも興味がある、マンハッタン積およびその一般化について、スペクトル計算の処方箋を作る。特に、パスグラフのマンハッタン積のスペクトルを決定したい。これによって、無向グラフに対して議論してきた積構造と量子確率の独立性の諸概念との関係を、有向グラフに拡張することをねらう。

(4) ネットワーク上のダイナミクス：ダイナミクスの漸近挙動などの特性からネットワークの構造を決定するという逆問題を念頭に置いて、多くの具体的な計算を蓄積する。特に、ダイナミクスとしてランダムウォーク・マルコフ連鎖・量子ウォーク・結合振動子系などを取り上げ、それらの長時間挙動がネットワークスペクトルにいかに関連しているかを具体的に調べる。そこに見出される共通点を整理して、ネットワークのモデル化手法につなげるのが、本研究の大きな目標である。

## 3. 研究の方法

数学の理論研究であるから、独自の研究方法があるわけではない。ネットワーク研究は多様な広がりを見せているので、日常の文献調査が欠かせない。関連する文献を収集して比較検討する。

連携研究者に協力を求めて、それぞれが強みとしている研究分野からの情報提供を受ける。相互訪問して研究討論を行うとともに、関連する研究者を紹介し合うことで、研究ネットワークが広がり、課題の整理や解決につながるができる。

成果の発表と新しい研究ネットワークを構築するために、量子確率・非可換解析・ネットワークが関連し合う境界領域に焦点を当てた小規模の研究会を開催し、共同研究の芽を育てる。統計物理学を基盤として特徴あるネットワーク研究を推進しているビーレフェルト大学などの海外の研究グループからも研究者招聘を行う。研究代表者が主宰する「応用数学連携フォーラム」などを通して、

他分野研究者との研究交流を深め、特に、生命科学系の研究者によるネットワーク解析について情報提供の協力を求める。

論文発表および口頭発表を積極的に行い、ウェブサイトなども活用して研究内容の公表に努める。

#### 4. 研究成果

(1) グラフのスペクトル解析：距離  $k$  グラフのスペクトル解析が進展した。超立方体の距離  $k$  グラフの固有値分布を完全に決定し、因子個数を無限大とするときの極限分布を具体的に導出した。この結果を一般のグラフの直積の場合に拡張して、同様の結果を得ることに成功した。その証明は「組合せ的中心極限定理」とみなすことができる。さらに、超立方体の場合には、議論を加重付グラフに拡張することで  $q$  変形を構成した。そのスペクトル分布は  $q$  変形エルミート多項式で記述されることを見出した。

グラフの  $Q$  行列が正定値になるためのパラメータ  $q$  の範囲を決定する問題は一般には困難である。グラフ積に関して、そのパラメータ域がどのように得られるかの一般的な結果を得た。これによって、これまでの多くの具体例が統一的に理解できるようになった。

(2) ランダムグラフのスペクトル解析：ランダム成長グラフとして、Erdős-Rényi ランダムグラフやランダム閾値グラフの平均スペクトルとその漸近挙動の解明をめざした。極限スペクトル密度については困難な問題があり、継続研究中である。

(3) 有向グラフのスペクトル解析：有向グラフの隣接行列やラプラシアンは非対称行列になるため、複素スペクトルが現れ大変興味深い。マンハッタン積を一般的に定式化し、ゼロ固有値に付随する固有空間が大きな次元をもつことを見出した。パスグラフのマンハッタン積に関して、因子の個数が小さいときには固有値分布を完全に決定し、パスが長くなるときの漸近的スペクトルを導出した。因子数が少し大きいときには、数値計算によって、固有値が複素平面に特殊な曲線を描くことが確認できた。この曲線を決定することはきわめて興味深い課題であり継続研究中である。

(4) ネットワーク上のダイナミクス：量子確率論において基本的である相互作用フォック空間の手法を古典的なランダムウォークに応用して、 $n$  ステップ推移確率や再帰確率に関する公式を再構成した。この公式をさらに一般のグラフに拡張する上で、量子確率の手法の有効性を確認した。

古典的なマルコフ連鎖とは性質が著しく異なる量子ウォークをネットワーク上で考えることで、古典論では反映しないネットワーク構造を捕まえる可能性が出てきた。具体例として、スパイダーネット上のグローバー・ウォークを取り上げ、ランダムウォーク

のスペクトル解析を援用して、数種類の局在化のパターンを見出した。それは、グラフのサイクル構造と局在化の関連を示唆するものである。

有向グラフ上の結合振動子系の同期現象についてもスペクトル解析の観点から研究を進めている。

ダイナミクスのもつ統計的性質からスペクトルの特徴を見出して、グラフ構造を再現することで、元のグラフの粗構造を捕まえる方向が少しずつ見えてきたところである。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 9 件)

[1] Nobuaki Obata: The Karlin-McGregor formula for paths connected with a clique. *Prob. Math. Stat.* 33(2):451-466, 2013. [査読有]

[2] Yuji Hibino, Hun Hee Lee and Nobuaki Obata: Asymptotic spectral distributions of distance- $k$  graphs of Cartesian product graphs. *Colloq. Math.* 132:35-51, 2013. [査読有] [DOI] 10.4064/cm132-1-4

[3] Hun Hee Lee and Nobuaki Obata: Distance- $k$  graphs of hypercube and  $q$ -Hermite polynomials. *Infin. Dimens. Anal. Quantum Probab. Relat. Top.* 16(2):1350011, 12, 2013. [査読有] [DOI] 10.1142/S0219025713500112

[4] Norio Konno, Nobuaki Obata and Etsuo Segawa: Localization of the Grover walks on spidernets and free Meixner laws. *Comm. Math. Phys.* 322(3):667-695, 2013. [査読有] [DOI] 10.1007/s00220-013-1742-x

[5] Nobuaki Obata: Spectra of Manhattan products of directed paths  $P_n \# P_2$ . *Interdiscip. Inform. Sci.* 18(1):43-54, 2012. [査読有] [DOI] 10.4036/iis.2012.43

[6] Nobuaki Obata: One-mode interacting Fock spaces and random walks on graphs. *Stochastics* 84(2-3):383--392, 2012. [査読有] [DOI] 10.1080/17442508.2010.550919

[7] Nobuaki Obata: Manhattan products of digraphs: characteristic polynomials and examples. *Ann. Funct. Anal.* 3(2):135-143, 2012. [査読有]

[8] Nobuaki Obata: Asymptotic spectral distributions of distance  $k$ -graphs of

large-dimensional hypercubes. Banach Center Publ. 96:287-292, 2012. [査読有]  
[DOI] 10.4064/bc96-0-20

[9] Nobuaki Obata: Markov product of positive definite kernels and applications to Q-matrices of graph products. Colloq. Math. 122(2):177-184, 2011. [査読有]

[学会発表](計 18 件)

[1] Nobuaki Obata: Free Meixner laws and localization of quantum walks on spidernets. Non-commutative and infinite dimensional harmonic analysis: representation theory and probability theory, 九州大学, 2014.02.17.

[2] Nobuaki Obata: Coupled oscillators on digraphs with self-adaptive dynamics. International Joint Research Week on Non-Commutative Stochastic Systems: Analysis, Modelling, and Applications 東北大学, 2014.02.07.

[3] Nobuaki Obata: Spectral analysis of digraphs and coupled oscillators. 3rd Tunisian-Japanese Conference: Geometric and Harmonic Analysis on Homogeneous Spaces and Applications, Yasmine Hammamet, Tunisia, 2013.12.19.

[4] Nobuaki Obata: Spectral analysis of Manhattan street networks. Tunisian-Japanese Symposium on Science, Society and Technology (TJASSST 2013), Yasmine Hammamet, Tunisia, 2013.11.15.

[5] Nobuaki Obata: Spectra of Manhattan street digraphs for synchronization of coupled oscillators. NIMS Hot Topics Workshops on The 8th Jikji workshop : Infinite Dimensional Analysis and Quantum Probability, Daejeon, Korea, 2013.08.19.

[6] Nobuaki Obata: Asymptotic spectral distributions of distance k-graphs of Cartesian product graphs. International Conference in Honour of Sixtieth Birthday of Rajendra Bhatia: Matrices and Operators Indian Institute of Science, Bangalore, India, 2012.12.29.

[7] Nobuaki Obata: Quantum probability and asymptotic spectral analysis of growing graphs. International Conference on mathematical modeling and its applications (ICMMA 2012), Annamalainagar, India,

2012.12.23.

[8] Nobuaki Obata: Asymptotic spectral analysis of growing graphs: A quantum probabilistic approach. International Conference on Frontiers of Statistics and its Applications, Puducherry, India, 2012.12.22.

[9] Nobuaki Obata: Quantum probability and asymptotic spectral analysis of growing graphs. International Conference on Stochastic Modelling and Simulation (ICSMS2012) Chennai, India 2012.12.17.

[10] Nobuaki Obata: Distance k-graphs of direct product graphs and their asymptotic spectral distributions. QP 33 "Quantum Probabilities and Related Fields" Centre International de Rencontres Mathematiques (CIRM), Luminy, France, 2012.10.05.

[11] Nobuaki Obata: Localization of quantum walks on spidernets. 15th Workshop on Non-Commutative Harmonic Analysis: Random Matrices, representation theory and free probability, with applications Mathematical Research and Conference Center (MRCC), Bedlewo, Poland, 2012.09.24.

[12] Nobuaki Obata: Random walk, quantum walk, and quantum probability. 6th KMS Probability Workshop, Seoul, Korea, 2012.06.01.

[13] Nobuaki Obata: Spectral analysis of digraphs. Workshop on Non-Commutative Harmonic Analysis with Applications to Real World Complex Phenomena. Hanyang University, Korea. 2012.1.16.

[14] Nobuaki Obata: Quantum probabilistic spectral analysis of graphs. 数理解析研究所研究集会「独立性と従属性の数理 -- 代数と確率の出会い --」京都, 2011.12.19.

[15] Nobuaki Obata: Quantum probabilistic spectral analysis of large graphs. The 2nd Tunisian--Japanese Conference: Geometric and Harmonic Analysis on Homogeneous Spaces and Applications, Sousse, Tunisia, 2011.12.14.

[16] Nobuaki Obata: Spectral analysis of product graphs. 3rd Conference of Settat on Operator Algebras and Applications Marrakesh, Morocco, 2011.11.1.

[17] Nobuaki Obata: Quantum probabilistic

spectral analysis of networks and applications. International Conference on Stochastic Analysis and Applications Hammamet, Tunisia, 2011.10.11.

[18] Nobuaki Obata: Spectral analysis of Manhattan products of digraphs. 14th Workshop: Non-commutative Harmonic Analysis, Bedlewo, Poland, 2011.09.25.

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕  
出願状況(計 0 件)

取得状況(計 0 件)

〔その他〕  
ホームページ  
<http://www.math.is.tohoku.ac.jp>

## 6 . 研究組織

### (1)研究代表者

尾畑 伸明 (OBATA, Nobuaki)  
東北大学・大学院情報科学研究科・教授  
研究者番号：10169360

### (2)研究分担者

なし

### (3)連携研究者

洞 彰人 (HORA, Akihito)  
北海道大学・大学院理学研究院・教授  
研究者番号：10212200

今野 紀雄 (KONNO, Norio)  
横浜国立大学・大学院工学研究院・教授  
研究者番号：80205575