

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 9 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(B) (特設分野研究)

研究期間：2014～2016

課題番号：26310203

研究課題名(和文) 諸分野連携によるネットワーク数理の展開

研究課題名(英文) Interdisciplinary Approach to mathematical network theory

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) 11,100,000円

研究成果の概要(和文)：ネットワーク数理の構築に向けて、非可換解析を軸とした分野融合研究を推進した。同位体分離におけるエネルギー準位の長時間挙動を量子ウォークのスペクトルから導出して、物理実験との整合性を確認した。有向パスのマンハッタン積に対して、複素スペクトルを導出した。強正則グラフを2変数直交多項式によって記述して、漸近的スペクトル密度としてガウス・ポアソン分布を導出した。2次元の制限正方格子にクロネッカー積を応用して、スペクトル密度を楕円積分で表示した。ケーリー・ツリーのパーコレーションに対して、臨界相における連結成分の分布を導出した。複数の感染源をもつ感染症モデルに対して、感染爆発のメカニズムを解析した。

研究成果の概要(英文)：Based on the non-commutative analysis, we aimed at developing an interdisciplinary approach to mathematical theory of networks. The long-time behaviour of energy levels in the laser experiment of isotope separation was obtained by means of spectral analysis of quantum walk and we examined a good fitting to the physical experiment. We derived complex spectra of some Manhattan products of directed paths. The Gauss-Poisson distributions were derived as the asymptotic spectral distributions of strong regular graphs by means of two-variable orthogonal polynomials. Applying the Kronecker product to two-dimensional restricted lattices, we obtained the spectral density in terms of elliptic integrals. We derived the distribution of connected components at the critical phase of percolation on the Cayley tree. We analyzed the mechanism of the outbreak for an infection model with multiple sources of infection.

研究分野：量子確率論・スペクトル解析

キーワード：ネットワーク 関数解析 確率論 量子確率解析 スペクトル解析 量子ウォーク ランダムウォーク 直交多項式

## 1. 研究開始当初の背景

ネットワーク研究の基礎となるグラフ理論は、数学の分野としてはオイラーに遡る伝統があり、自然現象や社会現象におけるネットワーク構造の記述にとって本質的な役割を果たしてきた。さらに、Watts-Strogatz (1998)、Barabási-Albert (1999)らの有名な仕事を契機に、「複雑ネットワーク科学」が現実世界の様々な現象を説明する新たなパラダイムとして登場し、多くの研究分野を巻き込む学際的研究分野として発展している。とりわけ、実データ(ビッグデータ)に基づく統計解析、多種多様なモデルの提案、数値シミュレーションがますます盛んに行われている。個別のモデルについて研究が進展する一方で、数理的な原理・原則を探求する数学的な研究が後れを取っている。

複雑ネットワーク研究における数学的課題には二つの大きな流れが見て取れる。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、ネットワーク構造を分類し、生成過程や特性を明らかにすることである。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、ネットワーク上の(決定論的または確率的)ダイナミクスの諸性質を扱うものである。たとえば、感染の拡散や交通渋滞などのモデル化、それらの特徴的な挙動の解明、および制御などは応用分野でも盛んに研究されている。最近では、高次元化された接続構造をもつ超ネットワークが複雑系の記述に導入されてきている。

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てきた[1]。例えば、グラフの積構造と量子確率論における独立性の関連を見出して、漸近的なスペクトル分布を量子中心極限定理として導出した。その後、具体例の集積と、基礎的な統計量の導出などを通して、極限計算などの解析手法を発展させた。並行して、情報系や生命系の研究者と研究交流をもち、基本的な問題意識に至った。まず、従来の分類論で用いられている統計量は単純すぎるため、より豊富な情報を含むネットワーク・スペクトルに期待が高まっている。物理学者の先行研究[2,3]の多くは数値計算に負っているおり、数学的なアプローチは少ない[4]。また、応用の現場では、ネットワークの詳細構造は未知であり、むしろ、ダイナミクスなどを通して得られる少数の統計量からネットワーク構造を推定することが重要である。このような問題意識から、基礎から応用までを一貫するようなネットワーク数理の重要性が認識された。このことは今に至っても変わりはない。

さらに、代表者は、数学と諸分野の連携強化のため、平成19年に「東北大学応用数学連携フォーラム」を主宰者として立ち上げ、

学内部局を横断するフォーラム活動を行ってきた。これを受けて、研究シーズ探索を目指す研究交流と分野融合研究を志向する若手研究者の育成の継続を支援する体制が望まれた。

## 引用文献

- [1] A. Hora and N. Obata: Quantum Probability and Spectral Analysis of Graphs, Springer, 2007.
- [2] S. N. Dorogovtsev and J. F. F. Mendes: Evolution of Networks: From Biological Nets to the Internet and WWW, Oxford University Press, 2003.
- [3] Ph. Blanchard and D. Volchenkov: Random Walks and Diffusions on Graphs and Databases: An Introduction, Springer, 2011.
- [4] F. Chung and L. Lu: Complex Graphs and Networks, American Math. Soc., 2006.

## 2. 研究の目的

関連する研究課題を探索し、次の5つの階層に分けて、数学理論としてネットワーク数理の構築を目指した。

(1) ネットワーク構造の数理：代数的グラフ理論、スペクトルグラフ理論、量子確率論的手法を用いて、ネットワークのもつコミュニティ(階層)構造・積構造・モチーフに注目した接続構造などを明らかにする。特に、背後に隠れた非可換構造を鍵として、古典的なスペクトル同型問題の拡張や超ネットワークを視野に入れた理論を構築する。

(2) ネットワーク上のダイナミクス：決定論的な力学系、マルコフ連鎖などの古典確率過程、量子ウォークに代表される量子確率過程の統計的性質とネットワーク構造との関連性を明らかにする。特に、ネットワークのもつ非可換的構造とパラメータ依存性・相転移現象の関連を追究する。

(3) ネットワークのダイナミクス：細胞内ネットワークなどを念頭に、ネットワークそのものの時間変化の記述・解析方法を構築する。グラフダイナミクス理論と計算機シミュレーションの両面から扱い、特徴的なパラメータをとらえて、ネットワーク生成のメカニズムを明らかにする。

(4) ネットワークの制御：情報拡散を制御するためのワクチン戦略や攻撃に対するネットワークの頑健性について、従来の物理的研究を再考する。数学的には、ランダムグラフのパーコレーション理論に挑むとともに、計算機シミュレーションを行う。ダイナミクスの変化の根源となるネットワーク構造を探求し、最適問題のような数学的に適切な形で定式化し、数学理論を目指す。

(5) スペクトル・モデルの構成：上記課題を基礎として、複雑ネットワークの少ない情報から、そのネットワークの性質を十分に

復元するモデル化手法を構築する。スペクトル的な特性量やダイナミクスに関わる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問題に取り組む。これを通して、複雑ネットワークの分類理論が進展し、また数学的にはグラフのスペクトル同型問題に寄与することも期待できる。

### 3. 研究の方法

理論研究であるため、文献調査を継続的に行うとともに、関連分野研究者との研究交流を促進して、課題探索と問題設定を模索しながら、解決を具体化してゆくというプロセスを繰り返した。

研究集会を主催して、成果発表と研究交流の促進を図った。特に、ウィンタースクールでは 60 名を超える参加者を得て、若手研究者の啓発を図ることができた。

・ 11th Sendai Workshop on Infinite Dimensional Analysis and Quantum Probability (東北大学、2015 年 10 月)

・ Complex Network Winter Session 2016 (茨城大学、2016 年 3 月)

・ 12th Sendai Workshop on Non-commutative Stochastic Analysis and Applications (東北大学、2016 年 10 月)

さらに、海外招聘などを通して、次の研究集会を支援した。

・ 量子系の数理と物質制御への展開 II : 量子ウォークを架け橋に (統計数理解研究所、2016 年 10 月)

応用数学連携フォーラムの運営を担うため、平成 27 - 28 年度の 2 年間にわたり研究補助者を雇用した。講演会やセミナーを開催して、若手研究者を中心に異分野研究者との交流を促進した。特に、研究補助者の専門を生かして、数値計算分野に知見を広げた。

海外研究協力者として、Hyun Jae Yoo (韓国、ハンキョン国立大学、量子ウォーク・直交多項式)、Ameur Dhahri (チュニジア、チュニス大学、直交多項式)、Philippe Blanchard (ドイツ、ビーレフェルト大学、統計物理)、Dimitri Volchenkov (ドイツ、ビーレフェルト大学、複雑ネットワーク)、Martin Štefanač (チェコ、チェコ工科大学、量子ウォーク)、Shanshan Li (アメリカ、エモリー大学、複雑ネットワーク)らを招聘した。大学院研究生として、Georgina Rachel Carson (オーストラリア、西オーストラリア大学)、Alfi Yusrotis Zakiyah (インドネシア、バンドン工科大学)を受け入れた。また、Daniel Lenz (ドイツ、イェーナ大学、スペクトル解析)、Marek Bożejko (ポーランド、ヴロツワフ大学、非可換調和解析)、Wojciech Miotkowski (ポーランド、ヴロツワフ大学、直交多項式)、Edy Tri Baskoro (インドネシア、バンドン工科大学、グラフ理論)らのもとに研究滞在了した。

### 4. 研究成果

(1) ネットワーク構造の数理：無向グラフの隣接行列やラプラシアン行列は対称行列であるため、標準的なスペクトル理論に従って取り扱うことができ、1 変数直交多項式論と直接関連付けることができた。次の段階として、複素スペクトルや多変数直交多項式への一般化の方向が視野に入ってきた。

有向グラフの隣接行列は対称性をもたないため、複素スペクトルの扱いが必要となる。有向グラフに関する基本的な積構造として、マンハッタン積を定式化して、量子確率論とのつながりを模索している。一般論にはまだ遠いため、有向パスのマンハッタン積など、特に基本的と考えられるものについて、数値計算も援用して具体的な計算を蓄積した。有向グラフ上の結合振動子系の協同現象を厳密に扱える一例になることを期待している [成果の一部は口頭発表済み、論文準備中]。

強正則グラフのスペクトルを 2 変数クラウチク多項式によって記述して、漸近的スペクトル密度としてガウス・ポアソン分布を導出した [論文準備中]。これは、従来の量子分解法ではカバーされず、多変数直交多項式との関連を見出すための端緒になるものと期待される。

(2) ネットワーク上のダイナミクス：量子ウォークはランダムウォークの量子力学的一般化として位置づけられるが、粒子の存在確率を古典マルコフ連鎖の分布として捉えることはできず、拡散の速度や局在化などに興味深い特徴を見出すことができる。スパイダーネットなど回転対称性があるグラフ上の量子ウォークについては、量子確率論の成果がうまく応用され、長時間極限が 1 変数直交多項式の漸近解析から得られる。そのため、直交多項式を特徴づけるヤコビパラメータの摂動からスペクトル分布を導出する課題に取り組んだ [口頭発表済み、論文準備中]。

松岡らによって、レーザーによる同位体分離におけるエネルギー準位の時間変化を半直線上の量子ウォークでモデル化する可能性が指摘された。これを受けて、実験データを説明するための数理解析を行った。実際、チェビシェフ多項式を用いて、長時間極限分布が記述されることが示され、実験との整合性が確認された [雑誌論文]。

タンパク質の発現ネットワークについて生命系の研究者を交えて数理モデルの構成と解析に取り組んだ [論文準備中]。

(3) ネットワークのダイナミクス：複雑ネットワークの構造をどのように把握するかが課題である。ネットワークの生成メカニズムの数理解析を目指して課題の整理を行った。グラフが成長することで複雑性を獲得するという観点に立って、隣接行列の時間発展を確率過程の類似として、量子確率論の知見を深めて応用することに取り組んだ。多様なグラフ積の研究はその方向にある。

量子確率論の独立性と関連する4つのグラフ積については既知であるが、新たに、辞書式順序積、クロネッカー積、ストロング積について、スペクトル分布を導出する一般式を得た[雑誌論文]。これらの積構造は、道の数え上げ問題に直接応用され、ランダムウォークなどの統計的性質に役に立つ。特に、2次元の制限正方格子がクロネッカー積の構造を持つことを見出し、この積構造を道の数え上げに応用した。付随するスペクトル密度関数は、逆正弦則と半円則の合成積となり、楕円積分に帰着されることが示された[成果の一部は口頭発表済み。論文準備中]。

これまでは、隣接行列を主に扱ってきたが、グラフのユークリッド空間への埋め込み可能性に関連して、距離行列の条件付負定値性に着目した。小さなグラフについて、網羅的な計算を実行して、グラフ積などのグラフ演算が埋め込み可能性を保つかどうかを、いくつかの場合に明らかにした[成果の一部は口頭発表済み。論文準備中]。

(4) ネットワークの制御：ネットワークの頑健性の数理を目標にした。ランダムグラフのパーコレーションを数理的に厳密化できるかが大きな課題として浮かび上がっている。また、感染症モデルに対して、統計物理的アプローチや数値シミュレーションを継続して、モデルによらない解析手法を継続研究している。

ネットワーク上のパーコレーションの臨界相は興味深い課題である。ケーリー・ツリー上のボンドパーコレーションは臨界相を示すことがわかっている。新たに、臨界相における連結成分の分布の統計的な性質を母関数解析から明らかにした[雑誌論文]。さらに、複数の感染源をもつ感染症モデルにおける感染爆発のメカニズムを数値シミュレーションを援用して解析した[雑誌論文]。

(5) スペクトルモデルの構成：複雑ネットワークをスペクトル解析の立場から理解して、少数のパラメータで記述することが大きな目標である。グラフに付随する行列は様々あり、それぞれがスペクトル解析の対象となる。これまで、主に隣接行列とラプラシアン行列を扱ってきたが、距離行列も興味深いことがわかってきた。これらのスペクトルが、グラフ積などのグラフ演算によってどのように変化し、極限にどのように波及するかを系統的に調べることが興味深い。量子ウォークを記述するユニタリ行列は新しい対象として認識されたが、グラフ構造との関連は未着手である。一方で、小さなグラフから出発するのではなく、十分大きなグラフから出発して、枝を切除する演算によってグラフの連結性が崩れてゆく過程から特徴をつかまえる可能性を調査した。ランダムグラフのパーコレーション理論では、物理的な解析や数値シミュレーションによる研究が主流であるが、できるだけ数学的に厳密に扱うことが課題である。

グラフのスペクトル解析に量子確率論の視点を導入して10年以上が経過した。その系統的な扱いを論じ、最近の成果を含む専門書を出版した[図書]。成長するネットワークの構造と頑強性についての成果を図書にまとめる予定であったが、諸般の事情で執筆が遅れている。

#### 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 5 件)

Leo Matsuoka, Etsuo Segawa, Kenta Yuki, Norio Konno, Nobuaki Obata: Asymptotic behavior of a rotational population distribution in a molecular quantum-kicked rotor with ideal quantum resonance, *Physics Letters A*, 381(21), 1773-1779, 2017. DOI 10.1016/j.physleta.2017.03.032 査読有

Tomoaki Nogawa, Takehisa Hasegawa and Koji Nemoto: Local cluster-size statistics in the critical phase of bond percolation on the Cayley tree, *J. Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2016:053202: 1-18, 2016. [DOI] 10.1088/1742-5468/2016/05/053202 査読有

Takehisa Hasegawa and Koji Nemoto: Outbreaks in susceptible-infected-removed epidemics with multiple seeds, *Phys. Rev. E* 93: 032324:1-10, 2016. [DOI] 10.1103/PhysRevE.93.032324 査読有

Nobuaki Obata: Quantum probability aspects to lexicographic and strong products of graphs, *Interdiscip. Inform. Sci.*, 22(1):143-146, 2016. [DOI] 10.4036/iis.2016.S.1 査読有

Un Cig Ji and Nobuaki Obata: An implementation problem for boson fields and quantum Girsanov transform, *J. Math. Phys.*, 57:083502, 2016. [DOI] 10.1063/1.4960454 査読有

[学会発表](計 24 件)

Nobuaki Obata: Quantum Probability and counting walks, 研究集会「量子論にまつわる数学と数論の連携探索」早稲田大学, 東京 2017.3.8.

Nobuaki Obata: Distance matrices and quadratic embedding of graphs, 12th Sendai Workshop on Non-commutative Stochastic Analysis and Applications, 東北大学, 仙台, 2016.10.19.

根本幸児, 長谷川雄央: 複数の感染源が引き起こす感染症の爆発的拡がり, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 金沢大学, 金沢, 2016.9.16.

長谷川雄央, 根本幸児: ネットワーク上の感染症における隔離対策の効果, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 金沢大学, 金沢, 2016.9.16.

Nobuaki Obata: Quadratic embedding of graphs, Special Week Concentrated on IDAQP, Chungbuk National University, Cheongju, Korea 2016.9.9.

Takehisa Hasegawa: Outbreaks in the SIR epidemics with multiple seeds - a statistical physics approach, The 2016 (26th) annual meeting of the Japanese Society for Mathematical Biology, 九州大学, 福岡, 2016.9.7.

Nobuaki Obata: Counting walks: A quantum probability viewpoint, 17th Workshop: Non-Commutative Probability, Lévy Processes and Operator Algebras with Applications, Bedlewo, Poland, 2016.7.26.

Nobuaki Obata: Graph products and counting walks, Tunisia-Japan Symposium on Science, Society and Technology, 筑波大学, つくば, 2016.2.23.

Nobuaki Obata: Graph products and counting walks: A quantum probability viewpoint, 14th Korea-Japan Workshop on Algebra and Combinatorics, Pusan National University, Pusan, Korea, 2016.1.29.

Nobuaki Obata: Counting walks: A quantum probabilistic viewpoint, The 2nd International Conference on Mathematical Models, Coimbatore, India, 2016.1.5.

Nobuaki Obata: Algebraic central limit theorems for growing graphs, The 8th International Conference on Science and Mathematics Education in Developing Countries, Yangon, Myanmar, 2015.12.6.

Nobuaki Obata: On Stieltjes transform for augmented Jacobi parameters of Chebyshev type, 11th Sendai Workshop on Infinite Dimensional Analysis and Quantum

Probability, 東北大学, 仙台, 2015.10.27.

長谷川雄央, 根本幸児: 複数の感染源を持つ SIR モデルが起こすパーコレーション転移, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 関西大学, 大阪, 2015.9.16.

羽添勝紀, 根本幸児, 長谷川雄央: 意見共有とネットワークの共進化ダイナミクスにおけるリンク繋ぎ替えの効果, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 関西大学, 大阪, 2015.9.17.

中井直人, 根本幸児, 長谷川雄央: 極大独立集合の状態数, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 関西大学, 大阪, 2015.9.17.

Nobuaki Obata: Quantum white noise derivatives and characterization of white noise operators, Quantum Markov Semigroups in Analysis, Physics and Probability, Oaxaca, Mexico, 2015.8.26.

Takehisa Hasegawa: Recent Problems of Network Science, The 8th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM2015), Beijing, China, 2015.8.10.

Nobuaki Obata: Quantum white noise derivatives and quantum Girsanov transform, 10th Jikji Workshop on Infinite Dimensional Analysis and Quantum Probability, Cheongju, Korea. 2015.7.30.

Nobuaki Obata: 量子確率論の最近の話題から, 共同研究集会「科学における確率」統計数理研究所, 東京, 2015.7.06.

根本幸児, 長谷川雄央: 複数の感染源を持つ SIR モデルが起こすパーコレーション転移, 統計物理の新展開 2015, 伊東, 静岡, 2015.6.21.

② Nobuaki Obata: Quantum white noise derivatives and quantum Girsanov transform, 2015 International Conference of the Chungcheong Mathematical Society, Daejeon, Korea, 2015.06.12.

② Nobuaki Obata: 量子確率論の最近の展開 ~ スペクトルグラフ理論から量子場理論まで, 日本数学会東北支部会招待講演, 東北大学, 仙台, 2015.02.14.

③ Nobuaki Obata: Synchronization of coupled oscillators, International Conference on Mathematical and Stochastic Analysis and its Applications, Chennai, India, 2014.12.19

②4 Nobuaki Obata: Spectral analysis of digraphs and applications to coupled oscillators, International Conference on Mathematics and its Applications, Chennai, India, 2014.12.15.

〔図書〕(計 1 件)

Nobuaki Obata: Spectral Analysis of Growing Graphs - A Quantum Probability Point of View, Springer, 2017. viii+138 pp. ISBN 978-981-10-3505-0

〔産業財産権〕

出願状況(計 0 件)

取得状況(計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等

## 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

長谷川 雄央 (HASEGAWA, Takehisa)  
茨城大学・理学部・准教授  
研究者番号：10528425

### (3)連携研究者

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

瀬川 悦生 (SEGAWA, Etsuo)

東北大学・大学院情報科学研究科・准教授  
研究者番号：30634547

### (4)研究協力者

中澤 嵩 (NAKAZAWA, Takashi)  
東北大学・大学院情報科学研究科・助教  
研究者番号：20726765