

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 5 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：2014～2016

課題番号：26610018

研究課題名（和文）複雑ネットワーク上のダイナミクスの量子確率解析

研究課題名（英文）Quantum probabilistic analysis of dynamics on complex networks

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） 2,900,000円

研究成果の概要（和文）：量子確率論研究の観点と手法を導入して、ネットワーク数理の構築に貢献することを目的とした。新たにいくつかのグラフ積について、スペクトル分布を導出する一般公式を得た。2次元制限正方形格子における道の数え上げに応用して、スペクトル密度関数を楕円積分で表示した。半直線上の量子ウォークの長時間極限分布をチェビシェフ多項式を用いて導出して、実験との整合性を確認した。有向パスのマンハッタン積の隣接行列・ラプラシアン固有値を計算し、数値計算も援用して振動子系の挙動を調べた。多変数直交多項式との関連では、強正則グラフの極限分布としてガウス・ポアソン分布を2変数クラウチュク多項式を用いて導出した。

研究成果の概要（英文）：From quantum probability point of view we aimed at developing mathematical approach to complex networks. We obtained formulas for spectral distributions of certain graph products. These are applied to counting walks on two-dimensional restricted lattices and the density functions are expressed in terms of elliptic integrals. We obtained the long-time asymptotics of quantum walks on the semi-infinite line by means of Chebyshev polynomials and examined the experimental data. We obtain the eigenvalues of the adjacency matrices and Laplacians of the Manhattan product of directed paths and, with the aid of numerical analysis, examined the behaviour of coupled oscillators. As for multi-variable polynomials, we obtained Gauss-Poisson distribution as a limit spectral distribution of strong regular graphs by means of two-variable Krautchuk polynomials.

研究分野：量子確率論・スペクトル解析

キーワード：スペクトル解析 量子確率論 複雑ネットワーク グラフのスペクトル 振動子系 量子ウォーク 有向グラフ 直交多項式

## 1. 研究開始当初の背景

巨大なグラフ、成長するグラフ、ランダム・グラフ、辺の向きや頂点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)は多くの応用分野に波及する重要な研究課題である。複雑ネットワークの研究の背景は様々であるが、数学的側面から二つの流れがある。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、ネットワーク上のダイナミクスの諸性質を扱うものである。マルコフ過程などの古典的なダイナミクスは、古くから研究されているが、複雑ネットワーク上の解析は、感染症や交通渋滞への応用もあり興味深い。また、量子ウォークなどの量子系との関連は新しい課題となっている。

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。

### 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

本研究では、量子確率論研究で培われた独自の観点と手法を積極的に導入して、ネットワーク数理の構築に貢献することを目的とした。古典的な(可換の世界の)問題を量子確率論によって(非可換な世界を経由して)解決するという点は数学的にも注目に値する。さらに、複雑ネットワークという具体的な題材を通して量子確率論に新しい概念や知見がもたらされることも期待される。そこで、ネットワークのスペクトル構造を核として、次のような課題を設定した。

(1) 複雑ネットワーク上のダイナミクス: 振動子系・反応拡散系・量子ウォークなどを扱う。ダイナミクスの挙動や統計的な性質とネットワーク・スペクトルの関連性の理解を課題とした。特に、量子ウォークは、局在性などそれ自身の性質もさることながら、スペクトル同型問題からの興味もある。

(2) ダイナミクス統計量によるネットワーク構造: まず、ネットワークに付随する様々な行列によるスペクトル解析を行い、具体例の蓄積を行う。特に、ネットワークの粗構造や階層構造などがスペクトルにどのように反映するかを探求する。

(3) スペクトル・モデルの提案と応用: 応用分野で重要な実世界ネットワークを念頭に、モデル化の手法やネットワークの制御の数理を探求する。モデル化の手法は、古典的なスペクトル逆問題の発展形という点で理論的興味が大きいだけでなく、応用面にも大きな広がりが期待できる。

## 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。

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 Štefaňák(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。また、Daniel Lenz(ドイツ、イェナ大学、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した。

小規模の研究集会 11th Sendai Workshop on Infinite Dimensional Analysis and

Quantum Probability (2015年10月) 12th Sendai Workshop on Non-commutative Stochastic Analysis and Applications (2016年10月)を主催するとともに、連携研究者とともに複数の国内研究集会の組織に参画した。これらを通して成果を公表するとともに、研究動向の最新情報がもたらされた。また、応用系との連携の母体として、研究代表者の主宰する「応用数学連携フォーラム」を通して、研究交流の推進を図った。

#### 4. 研究成果

##### (1) 複雑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とらえることができるが、粒子の存在確率の時間発展は古典マルコフ連鎖の分布として捉えることができず、拡散の速度や局在化などにその特徴を見出すことができる。距離正則グラフなど半直線上の量子ウォークに帰着できる場合については、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ことが分かった。一方で、松岡らは、レーザーによる同位体分離の実験から、エネルギー準位の変化が量子ウォークの振舞いに類似していることを見出し、実験を説明するための数理解析が期待されていた。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]。

これまで扱ってきた無向グラフでは、隣接行列やラプラシアン行列が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、さらに1変数直交多項式論と直接関連付けることができた。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ことを受けて、有向グラフの取扱いを開始している。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]。一方で、多変数直交多項式との関連の試論として、2変数クラウチュク多項式とガウス・ポアソン分布を用いた拡張について研究を継続している。

(2) ダイナミクス統計量によるネットワーク構造: 複雑ネットワークの構造をどのように把握するかは、今もって大きな課題である。例えば、グラフが成長することで複雑性を獲得してゆくと見れば、隣接行列の時間発展を確率過程の類似として捉えて、量子確率論の知見を深めて応用することは一つの方

向性であろう。成長するグラフの記述において、グラフ積は基本である。

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公式を得た[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]。

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]。

(3) スペクトルモデルの提案と応用: 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を目論んできたが、いまだ道半ばである。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さらに詳しく検討する必要がある。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浮かび上がったが、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(ランダムグラフのパーコレーションと言ってよい)から特徴をつかまえる可能性を調査した。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ったが、数学的に厳密に扱うことが課題である。

挑戦萌芽研究として目指した理論構築は道半ばであるが、数学では組合せ論、物理ではレーザー実験など、新たに研究の接点が生まれ、今後の発展に期待できる段階にある。

#### 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 2 件)

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

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

〔学会発表〕(計 14 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.

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

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, Kore, 2016.1.29.

Nobuaki Obata: Counting walks: A quantum probabilistic viewpoint, The 2nd International Conference on Mathematical Models, PSG College of Technology, Coimbatore, India, 2015.1.5.

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

Nobuaki Obata: Quantum white noise derivatives and quantum Girsanov transform, 10th Jikji Workshop on Infinite Dimensional Analysis and Quantum Probability, Chungbuk National University, 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.

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.

Nobuaki Obata: Synchronization of coupled oscillators, International Conference on Mathematical and Stochastic Analysis and its Applications, D. G. Vaishnav College, Chennai, India, 2014.12.19

Nobuaki Obata: Spectral analysis of digraphs and applications to coupled oscillators, International Conference on Mathematics and its Applications, Anna University, 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

無し

(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

長谷川雄央 (HASEGAWA, Takehisa)

茨城大学・理学部・准教授

研究者番号：10528425

(4)研究協力者

無し