

グラフラプラシアン固有値問題

濱 壮大

Abstract

A Laplacian is defined for graphs of locally finite degrees as an analogue of that for Riemannian manifolds. In this paper, we prove that the shape of a graph can be determined by the eigenvalues of the Laplacian. We also investigate how the eigenvalues of the Laplacian depend on the weights on the edges of the graph.

グラフラプラシアン of 固有値問題

濱 壮大

目次

1	イントロダクション	3
2	グラフの基本事項	4
2.1	グラフの基礎	4
2.2	関数空間と作用素	8
2.3	ラプラシアンとグリーンの公式	15
3	ラプラシアンの固有値問題	19
4	重み付きラプラシアンの固有値問題	32
4.1	重み付きグラフ	32
4.2	Δ_μ の固有値による 2 部グラフの特徴づけ	33
4.3	辺の重みを変化させたときの Δ_μ の固有値の変化	36
5	参考文献	42

1 イントロダクション

本論文では, 浦川 [1] の第 7 章の内容を軸にグラフ理論におけるラプラシアン固有値問題について考察する.

グラフ理論におけるラプラシアンは, グラフの頂点全体の集合 V を定義域とする関数空間 $C(V)$ に作用する線形作用素として定義される. 特に, 頂点数が有限である場合, ラプラシアンはある内積に関して対称な正方行列となる. ラプラシアンを定義するために, グラフの辺の情報から定まる隣接行列, 推移行列とよばれる線形作用素を定義する. [1] ではこれらの作用素の作用素ノルムを評価する命題 (命題 2.26 に相当) とその証明が記載されているが, 本論文ではより詳しい証明を与えている.

グラフ理論におけるラプラシアンについて, グリーンの公式が成り立つ. これは今後の定理の証明において重要な役割を果たすとともに, ユークリッド空間やリーマン多様体におけるラプラシアンが満たすグリーンの公式との対比になっており, ここで定義したラプラシアンをラプラシアンと呼ぶべき根拠のひとつになっているといえる. [1], [2] においては $C_c(V) := \{f \in C(V) \mid \#\{x \in V \mid f(x) \neq 0\} < \infty\}$ 上でのみの証明が与えられていたが, 本論文ではこれを $C_c(V)$ を完備化した $L_2(V)$ にまで拡張したものの証明を与える.

3 節では, 有限グラフにおけるラプラシアンの固有値の性質において考察する. 基本的な要素や完全グラフのラプラシアンの固有値については [1], [2] に記載されているものであるが, 定理 3.5 および定理 3.7 以降は独自に証明したものである. これらの定理は, ラプラシアン Δ_A の固有値の情報からグラフの形の情報が得られることを示している.

4 節では, [2] を参考に有限グラフの各辺に重みを与えることを考え, 重み付きグラフの上でのラプラシアン Δ_μ の固有値問題を考える. 本論文では, [2] の内容に加え, 星型グラフや完全グラフの辺の重みを変化させたときの固有値のふるまいについて調べた. また, 副次的なものではあるが, 定理 4.6 からは, Δ_P に関して等スペクトルなグラフの組の例が得られた.

2 グラフの基本事項

2.1 グラフの基礎

まず, グラフとそれに関するいくつかの用語を定義する.

定義 2.1 (グラフ). グラフとは, 頂点の集合 V と頂点と頂点を結ぶ辺の集合 E の組 $G = (V, E)$ のことである.

定義 2.2 (端点). 辺 $e \in E$ が $x, y \in V$ を結ぶ辺であるとき, x, y は e の端点であるという. このとき, $e = (x, y)$ と表す.

定義 2.3 (隣接). $x, y \in V$ を結ぶ辺 $e \in E$ があるとき, x と y は隣接しているといい, $x \sim y$ とかく.

定義 2.4 (頂点の次数). 各頂点 $x \in V$ に対し, 頂点の次数 $\deg(x)$ を次のように定義する.

$$\deg(x) := \#\{e \in E \mid e \text{ の } 1 \text{ つの端点} \text{ が } x\}$$

定義 2.5 (孤立点). $\deg(x) = 0$ である点 $x \in V$ を孤立点という.

今後, グラフ G は孤立点を持たないものとする.

定義 2.6 (多重グラフ). $x \in V$ と $y \in V$ を結ぶ辺が 2 本以上あるとき, それらを多重辺という. 同じ頂点どうしを結ぶ辺をループという.

多重辺またはループをもつグラフを多重グラフといい, そうでないグラフを単純グラフという.

定義 2.7 (有限グラフ). 有限グラフとは, $\#E < \infty$ をみたすグラフのことである.

定義 2.8 (局所有限グラフ). 局所有限グラフとは, 全ての $x \in V$ が $\deg(x) < \infty$ をみたすグラフのことである.

今後, グラフは局所有限であるものを扱う.

定義 2.9 (完全グラフ). 完全グラフとは, $x, y \in V$ が $x \sim y \iff x \neq y$ をみたす単純グラフのことである.

頂点数が n である完全グラフを K_n と表す.

定義 2.10 (2部グラフ). 2部グラフとは, 次をみたす $\emptyset \neq V_1, V_2 \subset V$ が存在するグラフ

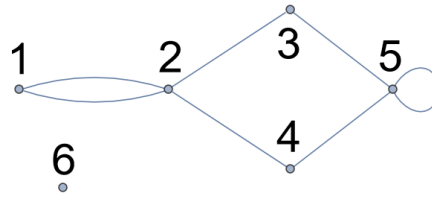


図1 グラフの例

のことである.

- $V = V_1 \sqcup V_2$.
- $x, y \in V_i \implies x \sim y$ ($i = 1, 2$).

定義 2.11 (完全 m 部グラフ). 完全 m 部グラフとは, 次をみたす $\emptyset \neq V_1, \dots, V_m \subset V$ が存在するグラフのことである.

- $V = \bigsqcup_{i=1}^m V_i$.
- $x \sim y \iff$ 「 $x \in V_i, y \in V_j$ のとき $i \neq j$ 」.

$\#V_i = n_i$ である完全 m 部グラフを K_{n_1, \dots, n_m} と表す.

定義 2.12 (道). V 上の頂点の列 $c = \{v_i\}_{i=0}^n$ が $x \in V$ と $y \in V$ を結ぶ (長さ n の) 道であるとは, 次を満たす時をいう.

- $v_0 = x, v_n = y$.
- $v_i \sim v_{i+1}$ ($i = 0, \dots, n-1$).

道 c の長さが n であるとき, $l(c) = n$ とかく.

定義 2.13 (グラフの連結性). グラフ $G = (V, E)$ が連結であるとは, 任意の $x, y \in V$ に対し, x と y を結ぶ道が存在するときをいう.

定義 2.14 (2 点間の距離). 連結なグラフ $G = (V, E)$ において, 2 点間の距離 $d(x, y)$ ($x, y \in V$) を次のように定義する.

$$d(x, y) := \inf\{l(c) \mid c \text{ は } x \text{ と } y \text{ を結ぶ道}\}$$

定義 2.15 (直径). 連結なグラフ $G = (V, E)$ に対し, グラフの直径 $\text{diam}(G)$ が次のよう

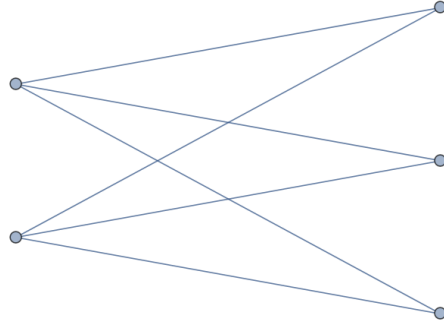


図2 完全2部グラフ $K_{2,3}$

に定義される.

$$\text{diam}(G) := \sup \{d(x, y) \mid x, y \in V\}$$

グラフについて, 次のことが成り立つ.

命題 2.16. グラフ $G = (V, E)$ が連結かつ局所有限のとき, V は高々可算である.

Proof. $x \in V$ を任意にとり固定する. 自然数 n に対し, $B_n(x) = \{y \in V \mid d(x, y) \leq n\}$ と定める. V の連結性より, 任意の頂点 y と x を結ぶ道が存在して, $d(x, y)$ が定義される. すなわち

$$V = \bigcup_{n=1}^{\infty} B_n(x)$$

任意の自然数 n に対し, $B_n(x)$ が有限集合であることを数学的帰納法で示す.

$n = 1$ のとき, $B_1(x) = \{x\} \cup \{y \in V \mid x \sim y\}$ より, $\#B_1(x) = \deg(x) < \infty$ (局所有限性より).

$\#B_n(x) < \infty$ と仮定したとき, $B_{n+1}(x) = B_n(x) \cup \{y \in V \mid \text{ある } z \in B_n(x) \text{ が存在し, } z \sim y\}$ なので,

$$\#B_{n+1}(x) \leq \#B_n(x) + \sum_{y \in B_n(x)} \deg(y) < \infty$$

以上より, V は有限集合の可算個の和で表せるので, V は高々可算である. □

命題 2.17. 連結2部グラフ $G = (V, E)$ の分割の仕方は一意である. すなわち,

$$V = V_1 \sqcup V_2 = V'_1 \sqcup V'_2 \implies V_1 = V'_1 \quad \text{or} \quad V_1 = V'_2$$

Proof. $V = V_1 \sqcup V_2 = V'_1 \sqcup V'_2$ ($V_1 \neq V'_1, V'_2$) と2通りに分割できると仮定する.

$V_1 \cap V'_1 \neq \emptyset$ かつ $V_1 \cap V'_2 \neq \emptyset$ としても一般性を失わない.

$x \in V_1 \cap V'_1, y \in V_1 \cap V'_2$ をとったとき, 連結性より x と y を結ぶ道 $\{v_i\}_{i=0}^n$ が存在する. このとき, $x \in V_1$ なので $v_1 \in V_2$ でなくてはならず, $x \in V'_1$ なので $v_1 \in V'_2$ でなくてはならない. よって $v_1 \in V_2 \cap V'_2$.

同様の議論により, 次のことがわかる.

- i が偶数のとき, $v_i \in V_1 \cap V'_1$.
- i が奇数のとき, $v_i \in V_2 \cap V'_2$.

これは $y = v_n \in V_1 \cap V'_2$ と矛盾する. よって分割は一意である. □

命題 2.18. グラフ $G = (V, E)$ が連結でないことと, 次を満たす $\emptyset \neq V_1, V_2 \subset V, E_1, E_2 \subset E$ が存在することは同値である.

1. $V = V_1 \sqcup V_2, E = E_1 \sqcup E_2$.
2. $(x, y) \in E_i \implies x, y \in V_i$ ($i = 1, 2$).
3. $x \in V_1, y \in V_2 \implies x \not\sim y$.

これらを満たす $\emptyset \neq V_1, V_2 \subset V, E_1, E_2 \subset E$ を**非自明な分割**とよぶ.

Proof. 非自明な分割 $V = V_1 \sqcup V_2, E = E_1 \sqcup E_2$ ($\emptyset \neq V_1, V_2 \subset V, E_1, E_2 \subset E$) が存在すると仮定する. $\emptyset \neq V_1, V_2$ より $x_0 \in V_1, y_0 \in V_2$ をとることができる.

ここで, x_0 と y_0 を結ぶ道 $\{v_i\}_{i=0}^n$ があるとすると, 条件 3 と $V_1 \ni x_0 = v_0 \sim v_1$ より $v_1 \in V_1$. これを繰り返すと $y_0 = v_n \in V_1$ を得るが, これは $y_0 \in V_2$ という仮定に反する. よって x_0 と y_0 を結ぶ道は存在せず, グラフ $G = (V, E)$ は連結でないといえる.

逆に, グラフ $G = (V, E)$ が連結でないと仮定する. このとき, 相異なる $x_0, y_0 \in V$ で, x_0 と y_0 を結ぶ道が存在しないものがとれる. ここで,

$$V_1 = \{x \in V \mid x \text{ と } x_0 \text{ を結ぶ道が存在する}\}, \quad V_2 = V \setminus V_1$$

とすると, $x_0 \in V_1$, x_0 と y_0 を結ぶ道は存在しないので $y_0 \in V_2$. よって $\emptyset \neq V_1, V_2$.

V_1, V_2 が条件 3 を満たすことを背理法で示す. $x_1 \in V_1, y_1 \in V_2$ で $x_1 \sim y_1$ を満たすものが存在すると仮定する. V_1 の定め方から x_0 と x_1 を結ぶ道 $\{v_i\}_{i=0}^n$ が存在する. 仮定より $x_1 \sim y_1$ なので, $v_{n+1} = y_1$ とすると, $\{v_i\}_{i=0}^{n+1}$ は x_0 と y_1 を結ぶ道になるが, これは $y_1 \in V_2$ と矛盾する. よって V_1, V_2 は条件 3 を満たす.

条件 3 の対偶から $x \sim y \implies x, y \in V_1$ または $x, y \in V_2$ を得る. よって,

$$E_1 = \{(x, y) \in E \mid x, y \in V_1\}, \quad E_2 = \{(x, y) \in E \mid x, y \in V_2\}$$

と定めると, V_1, V_2, E_1, E_2 は非自明な分割の条件を全て満たす. □

2.2 関数空間と作用素

グラフ $G = (V, E)$ に対し, V 上の実関数全体の集合を $C(V)$ と表す.

グラフの頂点を添え字にもつ行列 $B = (b_{xy})_{x,y \in V}$ を考える. V が有限集合のときは通常の $\#V$ 次正方行列と同様である. V が無限集合のとき, $B = (b_{xy})_{x,y \in V}$ のうち任意の $x \in V$ が $\{y \in V \mid b_{xy} \neq 0\} < \infty$ を満たすものを考え,

$$Bf(x) := \sum_{y \in V} b_{xy} f(y)$$

により $C(V)$ に作用する線形作用素として定義する.

定義 2.19 (隣接行列, 推移行列). グラフ $G = (V, E)$ 上の隣接行列 $A = (a_{xy})_{x,y \in V}$, 推移行列 $P = (p_{xy})_{x,y \in V}$ を次のように定義する.

$$a_{xy} := (x \text{ と } y \text{ を結ぶ辺の数}), \quad p_{xy} := a_{xy} / \deg(x)$$

定義より, $\sum_{y \in V} a_{xy} = \deg(x)$, $\sum_{y \in V} p_{xy} = 1$ である.

$C_c(V) := \{f \in C(V) \mid \#\{x \in V \mid f(x) \neq 0\} < \infty\}$ と定義する.

定義 2.20 ($C_c(V)$ 上の内積). $C_c(V)$ 上の内積 $(\cdot, \cdot), (\cdot, \cdot)_\#$ を次のように定義する.

$f_1, f_2 \in C_c(V)$ に対し,

$$\begin{aligned} (f_1, f_2) &:= \sum_{x \in V} f_1(x) f_2(x) \\ (f_1, f_2)_\# &:= \sum_{x \in V} \deg(x) f_1(x) f_2(x) \end{aligned}$$

次に示す通り, この内積は完備とは限らない.

命題 2.21. V が無限集合のとき, $C_c(V)$ 上の内積 $(\cdot, \cdot), (\cdot, \cdot)_\#$ は完備でない.

Proof. (\cdot, \cdot) について示す.

V は無限集合なので, 可算部分集合がとれる. その可算部分集合を $\{x_1, x_2, \dots\}$ と表す.

$C_c(V)$ 上の関数列 $\{f_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ を次のように定める.

$$f_n(x) := \begin{cases} 2^{-n} & (x = x_1, \dots, x_n) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

このとき,

$$\|f_n - f_m\|^2 = \sum_{k=m+1}^n 2^{-2k} \rightarrow 0 \quad (n, m \rightarrow \infty)$$

なので $\{f_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ はコーシー列である.

一方, 任意の $f \in C_c(V)$ に対し, $N := \max\{n \in \mathbb{N} \mid f(x_n) \neq 0\}$ とおくと,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|f_n - f\|^2 \geq \sum_{k=N+1}^{\infty} 2^{-2k} > 0$$

より, $\{f_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ は f に収束しない. よって, 内積 $(,)$ は $C_c(V)$ 上で完備でない.

$(,)_{\#}$ についても同様. □

$C_c(V)$ の内積 $(,), (,)_{\#}$ による完備化をそれぞれ $L_2(V), L_2^{\#}(V)$ と表す.

命題 2.22. $L_2(V), L_2^{\#}(V)$ は次のように書ける.

$$\begin{aligned} L_2(V) &= \{f \in C(V) \mid \|f\| < \infty\} \\ L_2^{\#}(V) &= \{f \in C(V) \mid \|f\|_{\#} < \infty\} \end{aligned}$$

ただし, ノルム $\|\cdot\|$ の $C(V)$ への拡張は次のように定義される ($\|\cdot\|_{\#}$ についても同様).

$f \in C(V)$ に対し,

$$\|f\| := \begin{cases} \sum_{x \in V} f(x)^2 & (\{x \in V \mid f(x) \neq 0\} \text{ が高々可算のとき}) \\ \infty & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

Proof. $L_2'(V) := \{f \in C(V) \mid \|f\| < \infty\}$ とおく. $\tilde{f} \in L_2(V)$ を任意にとり, その代表元 $\{f_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ をひとつとる. $L_2'(V)$ は l^2 と同一視できるので完備である. よって, $\{f_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ はある $f \in L_2'(V)$ に強収束する.

逆に, 任意の $f \in L_2'(V)$ に対し, $\{x_n\}_{n \in \mathbb{N}} := \{x \in V \mid f(x) \neq 0\}$ とおき, $\{f_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ を次のように定める.

$$f_n(x) := \begin{cases} f(x_i) & (\text{ある } i = 1, \dots, n \text{ に対し, } x = x_i) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

このとき, $f_n \in C_c(V)$ であり,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|f - f_n\|^2 = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=n+1}^{\infty} f(x_i)^2 = 0 \quad (\because \|f\| < \infty)$$

より, $\{f_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ は $f \in L_2'(V)$ に強収束する. □

$L_2^\#(V)$ と $L_2(V)$ の関係は次のようになっている.

命題 2.23. $L_2^\#(V) \subset L_2(V)$ である.

ただし, $\deg(G) := \sup\{\deg(x) \mid x \in V\} < \infty$ のときは, $L_2^\#(V) = L_2(V)$ が成り立つ.

Proof. 任意の $f \in L_2(V)$ に対し,

$$\|f\|^2 = \sum_{x \in V} f(x)^2 \leq \sum_{x \in V} \deg(x) f(x)^2 = \|f\|_{\#}^2$$

が成り立つので, $L_2^\#(V) \subset L_2(V)$ である.

$\deg(G) < \infty$ のとき, 任意の $f \in L_2(V)$ に対し,

$$\|f\|_{\#}^2 = \sum_{x \in V} \deg(x) f(x)^2 \leq \sum_{x \in V} \deg(G) f(x)^2 = \deg(G) \|f\|^2$$

が成り立つことから, $L_2(V) \subset L_2^\#(V)$ である. よって, $L_2^\#(V) = L_2(V)$ が成り立つ. \square

次の定理とその証明は [1], 第 6 章, 定理 (2.6), [3], 定理 4.9 を参考にした.

定理 2.24 (ミニ・マックス原理). X を N 次元実線形空間, $(,)$ を X 上の内積, M を $(,)$ について対称な N 次正方行列とする.

M の固有値を重複度込みで $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_N$ と表すとき, 次が成り立つ.

$$\lambda_k = \inf_{L_k} \sup \left\{ \frac{(M\mathbf{x}, \mathbf{x})}{(\mathbf{x}, \mathbf{x})} \mid \mathbf{0} \neq \mathbf{x} \in L_k \right\}$$

ただし, L_k は X の k 次元部分空間全てをわたる.

Proof. シュミットの直交化により, M 上の列 $\{\mathbf{e}_i\}_{i=1}^N$ で, 各 \mathbf{e}_i は固有値 λ_i の固有関数であり, M の $(,)$ に関する正規直交基底をなすものがとれる.

$U_k^0 := \langle \mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_k \rangle$ とする. $L_k = U_k^0$ とすると, 任意の $\mathbf{x} \in L_k$ は $\mathbf{x} = \sum_{i=1}^k \alpha_i \mathbf{e}_i$ と表せるので,

$$\frac{(M\mathbf{x}, \mathbf{x})}{(\mathbf{x}, \mathbf{x})} = \frac{\sum_{i=1}^k \alpha_i^2 \lambda_i}{\sum_{i=1}^k \alpha_i^2} \leq \lambda_k$$

よって,

$$\inf_{L_k} \sup \left\{ \frac{(M\mathbf{x}, \mathbf{x})}{(\mathbf{x}, \mathbf{x})} \mid \mathbf{0} \neq \mathbf{x} \in L_k \right\} \leq \lambda_k$$

一方, X の k 次元部分空間 L_k を任意にとり, 線形写像 $Q : L_k \rightarrow U_{k-1}^0$ を

$$Q(\mathbf{x}) := \sum_{i=1}^{k-1} (\mathbf{x}, \mathbf{e}_i) \mathbf{e}_i$$

により定めると, $k = \dim(L_k) > \dim(U_{k-1}^0) = k - 1$ より Q は単射でない. よって, ある $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ が存在し, $\mathbf{x} \in \ker(Q)$ が成り立つ.

ここで, $\{\mathbf{e}_i\}_{i=1}^{k-1}$ は U_{k-1}^0 の基底なので,

$$Q(\mathbf{x}) = 0 \iff (\mathbf{x}, \mathbf{e}_1) = \cdots = (\mathbf{x}, \mathbf{e}_{k-1}) = 0 \iff \mathbf{x} \in (U_{k-1}^0)^\perp$$

すなわち, $\ker(Q) = (U_{k-1}^0)^\perp$ である. よって, $\mathbf{x} \in (U_{k-1}^0)^\perp$.

この f に対し,

$$\frac{(M\mathbf{x}, \mathbf{x})}{(\mathbf{x}, \mathbf{x})} = \frac{\sum_{i=k}^N \alpha_i^2 \lambda_i}{\sum_{i=k}^N \alpha_i^2} \geq \lambda_k$$

よって,

$$\inf_{L_k} \sup \left\{ \frac{(M\mathbf{x}, \mathbf{x})}{(\mathbf{x}, \mathbf{x})} \mid \mathbf{0} \neq \mathbf{x} \in L_k \right\} \geq \lambda_k$$

以上より,

$$\lambda_k = \inf_{L_k} \sup \left\{ \frac{(M\mathbf{x}, \mathbf{x})}{(\mathbf{x}, \mathbf{x})} \mid \mathbf{0} \neq \mathbf{x} \in L_k \right\}$$

□

命題 2.25. A は $(,)$, P は $(,)_\#$ について対称である. すなわち, 任意の $f, g \in C_c(V)$ に対し,

$$(Pf, g)_\# = (Af, g) = (f, Ag) = (f, Pg)_\#$$

Proof. 任意の $f, g \in C_c(V)$ に対し,

$$\begin{aligned} (Pf, g)_\# &= \sum_{x \in V} \deg(x) (Pf)(x) g(x) \\ &= \sum_{x \in V} \deg(x) g(x) \left(\sum_{y \in V} p_{xy} f(y) \right) \\ &= \sum_{x \in V} \sum_{y \in V} f(y) g(x) a_{xy} \end{aligned} \tag{1}$$

$$= \sum_{x \in V} \sum_{y \in V} f(y) g(x) a_{yx} \tag{2}$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{y \in V} \deg(y) f(y) \left(\sum_{x \in V} p_{yx} f(x) \right) \\ &= \sum_{y \in V} \deg(y) f(y) (Pg)(y) = (f, Pg)_\# \end{aligned}$$

ここで,

$$(1) = \sum_{x \in V} g(x) \left(\sum_{y \in V} a_{xy} f(y) \right) = \sum_{x \in V} (Af)(x) g(x) = (Af, g)$$

$$(2) = \sum_{y \in V} f(y) \left(\sum_{x \in V} a_{yx} g(x) \right) = \sum_{x \in V} f(x) (Ag)(x) = (f, Ag)$$

なので,

$$(Pf, g)_{\#} = (Af, g) = (f, Ag) = (f, Pg)_{\#}$$

を得る. □

命題 2.26. 次が成り立つ.

- 任意の $f \in C_c(V)$ に対し, $\|Pf\|_{\#} \leq \|f\|_{\#}$ が成り立つ.
- $\deg(G) < \infty$ のとき, 任意の $f \in C_c(V)$ に対し, $\|Af\| \leq \deg(G)\|f\|$ が成り立つ.

Proof. P について示す. A についても同様.

$f \in C_c(V)$ を任意にとり固定し, $\{x \in V \mid f(x) \neq 0\} = \{x_1, \dots, x_n\}$ と表す. このとき,

$$\|Pf\|_{\#}^2 = (Pf, Pf)_{\#} = (P^2f, f)_{\#} \quad (\because P \text{ の対称性})$$

ここで, P^2 の $x_i x_j$ 成分を $p_{ij}^{(2)}$ とおくと, 任意の $i = 1, 2, \dots$ に対し,

$$\sum_{j=1}^{\infty} p_{ij}^{(2)} = \sum_{j,k=1}^{\infty} p_{ik} p_{kj} = \sum_{k=1}^{\infty} p_{ik} \left(\sum_{j=1}^{\infty} p_{kj} \right) \leq \sum_{k=1}^{\infty} p_{ik} \leq 1$$

P^2 の定義域と値域を $\mathbb{R}^n := \{f \in L_2^{\#}(V) \mid x \neq x_1, \dots, x_n \implies f(x) = 0\}$ に制限したものを Q_n とする. すなわち $Q_n := \left(p_{ij}^{(2)} \right)_{1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq n}$ とする. このとき,

$$\|Pf\|_{\#}^2 = |(P^2f, f)_{\#}| = |(Q_n f, f)_{\#}|$$

が成り立つ. ここで, λ を Q_n の最大固有値とし, その固有ベクトルを f_0 とする. さらに,

$$|f_0(x_k)| := \max\{|f_0(x_1)|, \dots, |f_0(x_n)|\}$$

とすると,

$$\begin{aligned} |\lambda| |f_0(x_k)| &= |(Q_n f_0)(k)| = \left| \sum_{j=1}^n p_{kj}^{(2)} f_0(x_j) \right| \\ &\leq \sum_{j=1}^n p_{kj}^{(2)} |f_0(x_j)| \leq |f_0(x_k)| \leq \sum_{j=1}^n p_{kj}^{(2)} \leq |f_0(x_k)| \end{aligned}$$

よって,

$$|\lambda| \leq 1$$

一方, ミニ・マックス原理より

$$\lambda = \sup \left\{ \frac{(Q_n f, f)_{\#}}{\|f\|_{\#}^2} \mid 0 \neq f \in \mathbb{R}^n \right\}$$

(ただし, $0 \neq f$ は f が定数関数 0 でないことを表す) なので,

$$|(Q_n f, f)_{\#}| \leq \|f\|_{\#}^2$$

よって,

$$\|Pf\|_{\#}^2 \leq \|f\|_{\#}^2$$

□

命題 2.25, 2.26 を $L_2(V), L_2^{\#}(V)$ に拡張するために, P および A の連続性を示す.

$C_c(V)$ は $L_2^{\#}(V)$ の中で稠密なので, 任意の $f \in L_2^{\#}(V)$ に対し, f に収束する $C_c(V)$ 上の関数列 $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}$ がとれる. ここで, $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}$ は収束列なのでコーシー列であり, 命題 2.26 より

$$\|Pf_n - Pf_m\|_{\#} = \|P(f_n - f_m)\|_{\#} \leq \|f_n - f_m\|_{\#}$$

が成り立つので, $\{Pf_n\}_{n=1}^{\infty}$ もまた $L_2^{\#}(V)$ 上のコーシー列である. $L_2^{\#}(V)$ は完備なので, $\{Pf_n\}_{n=1}^{\infty}$ はある $g \in L_2^{\#}(V)$ に収束する.

このようにして $f \in L_2^{\#}(V)$ から得られる $g \in L_2^{\#}(V)$ は f に収束する $C_c(V)$ 上の関数列 $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}$ のとり方によらない. なぜなら, f に収束する 2 種類の $C_c(V)$ 上の関数列 $\{f_n^1\}_{n=1}^{\infty}, \{f_n^2\}_{n=1}^{\infty}$ をとり,

$$\begin{aligned} g^1 &= \lim_{n \rightarrow \infty} Pf_n^1 \\ g^2 &= \lim_{n \rightarrow \infty} Pf_n^2 \end{aligned}$$

としたとき,

$$g^1 - g^2 = \lim_{n \rightarrow \infty} P(f_n^1 - f_n^2)$$

であり,

$$\|P(f_n^1 - f_n^2)\|_{\#} \leq \|f_n^1 - f_n^2\|_{\#} \leq \|f_n^1 - f\|_{\#} + \|f_n^2 - f\|_{\#}$$

より $\lim_{n \rightarrow \infty} P(f_n^1 - f_n^2) = 0$, すなわち $g^1 = g^2$ となるからである. よって, この $f \in L_2^{\#}(V)$ から $g \in L_2^{\#}(V)$ を得る対応は写像であるといえる. これを \tilde{P} とおく. 極限の線形性より \tilde{P} の線形性は明らかである. また, 任意の $f \in L_2^{\#}(V)$ に対し,

$$\|\tilde{P}f\|_{\#} = \lim_{n \rightarrow \infty} \|Pf_n\|_{\#} \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \|f_n\|_{\#} = \|f\|_{\#}$$

より $\tilde{P}: L_2^{\#}(V) \rightarrow L_2^{\#}(V)$ は有界線形作用素であることがわかる.

$\tilde{P} = P$ を示すために, 任意の $f \in L_2^{\#}(V)$, $x \in V$ に対して $\tilde{P}f(x) = Pf(x)$ が成り立つことを示す. そのためにまず, 次の命題を示す.

命題 2.27. $L_2^{\#}(V)$ 上の関数列 $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}$ がある $f \in L_2^{\#}(V)$ に強収束, すなわち $\lim_{n \rightarrow \infty} \|f_n - f\|_{\#} = 0$ を満たすとき, 任意の $x \in V$ に対し, $\lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x) = f(x)$

Proof. 各 $x \in V$ に対し,

$$(f_n(x) - f(x))^2 \leq \sum_{x \in V} \deg(x)(f_n(x) - f(x))^2 = \|f_n - f\|_{\#}^2$$

□

これを用いると, 任意の $f \in L_2^{\#}(V)$ に対し, f に収束する $C_c(V)$ 上の関数列を $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}$ としたとき, $\{Pf_n\}_{n=1}^{\infty}$ は \tilde{P} に強収束するので, 命題 2.27 より任意の $x \in V$ に対し,

$$\tilde{P}f(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} Pf_n(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{y \in V} p_{xy} f_n(y)$$

ここで, 右辺が有限和であることに注意し, 命題 2.27 を $\{f_n\}_{n=1}^{\infty}$ に適用すると

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{y \in V} p_{xy} f_n(y) = \sum_{y \in V} p_{xy} f(y) = Pf(x)$$

以上より, 任意の $x \in V$ に対し,

$$\tilde{P}f(x) = Pf(x)$$

これにより, $\tilde{P} = P$ が示された. \tilde{P} は有界線形作用素なので, P も有界線形作用素である. A についても同様のことがいえる.

これにより, 命題 2.25, 2.26 は次のように拡張される.

命題 2.28. 任意の $f, g \in L_2^\#(V)$ に対し,

$$(Pf, g)_\# = (f, Pg)_\#$$

$\deg(G) < \infty$ のとき, 任意の $f, g \in L_2(V)$ に対し,

$$(Pf, g)_\# = (Af, g) = (f, Ag) = (f, Pg)_\#$$

命題 2.29. 次が成り立つ.

- P は $L_2^\#(V)$ に作用する有界線形作用素で, $\|P\| \leq 1$ が成り立つ.
- $\deg(G) < \infty$ のとき, A は $L_2(V)$ に作用する有界線形作用素で, $\|A\| \leq \deg(G)$ が成り立つ.

2.3 ラプラシアンとグリーンの公式

定義 2.30 (ラプラシアン). ラプラシアン Δ_A, Δ_P を次のように定義する.

$$\Delta_A := D - A, \quad \Delta_P := I - P$$

ただし, $D = \{\deg(x)\delta_{xy}\}_{x,y \in V}, I = \{\delta_{xy}\}_{x,y \in V}$ とする.

ここで定義したラプラシアンは, グリーンの公式を満たす. まず, 次のものを定義する.

定義 2.31 (余境界作用素). グラフ $G = (V, E)$ に向きをひとつ与え, $x \in V$ から $y \in V$ に向かう辺を $[x, y]$ と表す.

このとき, 余境界作用素 (余微分) $d: C(V) \rightarrow C(E)$ を次のように定める.

$$df([x, y]) := f(y) - f(x)$$

定義 2.32 ($C_c(E)$ 上の内積). $C_c(E) := \{\varphi \in C(E) \mid \#\{e \in E \mid \varphi(e) \neq 0\} < \infty\}$ 上の内積 $(,)$ を次のように定義する.

$\varphi_1, \varphi_2 \in C_c(E)$ に対し,

$$(\varphi_1, \varphi_2) := \sum_{e \in E} \varphi_1(e)\varphi_2(e)$$

$C_c(E)$ を内積 $(,)$ により完備化した空間を $L_2(E)$ と表す.

定理 2.33 (グラフに対するグリーンの公式 ([1], 第7章, 定理 (2.17), [2], Theorem 2.1)). $\Omega \subset V$ を有限部分集合としたとき, 次が成り立つ.

任意の $f_1, f_2 \in C(V)$ に対し,

$$\begin{aligned} \sum_{x \in \Omega} \Delta_A f_1(x) f_2(x) \mu(x) &= \frac{1}{2} \sum_{x, y \in \Omega} df_1([x, y]) df_2([x, y]) a_{xy} \\ &\quad - \sum_{x \in \Omega} \sum_{y \in \Omega^c} df_1([x, y]) f_2(x) a_{xy} \end{aligned}$$

とくに, $f_1, f_2 \in C_c(V)$ のとき,

$$(df_1, df_2) = (\Delta_A f_1, f_2) = (\Delta_P f_1, f_2) \#$$

Proof. 任意の $f_1, f_2 \in C(V)$ に対し,

$$\begin{aligned} \sum_{x, y \in \Omega} df_1([x, y]) df_2([x, y]) a_{xy} &= \sum_{x, y \in \Omega} (f_1(y) - f_1(x))(f_2(y) - f_2(x)) a_{xy} \\ &= \sum_{x, y \in \Omega} f_1(x) f_2(x) a_{xy} - \sum_{x, y \in \Omega} f_1(y) f_2(x) a_{xy} \\ &\quad - \sum_{x, y \in \Omega} f_1(x) f_2(y) a_{xy} + \sum_{x, y \in \Omega} f_1(y) f_2(y) a_{xy} \\ &= 2 \sum_{x, y \in \Omega} f_1(x) f_2(x) a_{xy} - 2 \sum_{x, y \in \Omega} f_1(y) f_2(x) a_{xy} \\ &= -2 \sum_{x, y \in \Omega} df_1([x, y]) f_2(x) a_{xy} \end{aligned}$$

一方,

$$\begin{aligned} \sum_{x \in \Omega} \Delta_A f_1(x) f_2(x) \deg(x) &= \sum_{x \in \Omega} \left(\frac{1}{\deg(x)} \sum_{y \in V} (f_1(x) - f_2(y)) a_{xy} \right) f_2(x) \deg(x) \\ &= \sum_{x \in \Omega} \sum_{y \in V} (f_1(x) - f_1(y)) f_2(x) a_{xy} \\ &= - \sum_{x \in \Omega} \sum_{y \in \Omega} df_1([x, y]) f_2(x) a_{xy} \\ &\quad - \sum_{x \in \Omega} \sum_{y \in \Omega^c} df_1([x, y]) f_2(x) a_{xy} \end{aligned}$$

以上より,

$$\begin{aligned} \sum_{x \in \Omega} \Delta_A f_1(x) f_2(x) \mu(x) &= \frac{1}{2} \sum_{x, y \in \Omega} df_1([x, y]) df_2([x, y]) a_{xy} \\ &\quad - \sum_{x \in \Omega} \sum_{y \in \Omega^c} df_1([x, y]) f_2(x) a_{xy} \end{aligned}$$

□

グリーンの公式を $L_2(V)$ に拡張するために, 次の命題を示す.

命題 2.34. $\deg(G) < \infty$ のとき, $d : L_2(V) \rightarrow C(E)$ は $R(d) \subset L_2(E)$ を満たす有界線形作用素である.

Proof. $f \in L_2(V)$ を任意にとる. このとき,

$$\|df\|^2 = \frac{1}{2} \sum_{x \in V} \sum_{y \sim x} (f(x) - f(y))^2$$

ここで, 各 $x \in V$ に対し, $y_x \in V$ を $\{|f(x) - f(y)| \mid y \sim x\}$ の最大値を与える y とし, $\tilde{f}(x) := f(y_x)$ により \tilde{f} を定める. すると,

$$\begin{aligned} \|df\|^2 &\leq \frac{1}{2} \sum_{x \in V} \sum_{y \sim x} (f(x) - f(y_x))^2 \\ &= \frac{1}{2} \sum_{x \in V} \deg(x) (f(x) - f(y_x))^2 \\ &= \frac{1}{2} \|f - \tilde{f}\|_{\#}^2 \leq \frac{1}{2} (\|f\|_{\#} + \|\tilde{f}\|_{\#})^2 \end{aligned}$$

ここで, 各 $x \in V$ に対し, $\tilde{f}(x)^2 = f(y_x)^2 \leq \max_{y \sim x} f(y)^2 \leq \sum_{y \sim x} f(y)^2$ より,

$$\begin{aligned} \|\tilde{f}\|_{\#}^2 &= \sum_{x \in V} \deg(x) \tilde{f}(x)^2 \leq \deg(G) \sum_{x \in V} \sum_{y \sim x} f(y)^2 = \deg(G) \sum_{y \in V} \sum_{x \sim y} f(y)^2 \\ &= \deg(G) \sum_{y \in V} \deg(y) f(y)^2 \leq \deg(G)^2 \sum_{y \in V} f(y)^2 = \deg(G)^2 \|f\|^2 \end{aligned}$$

以上より,

$$\|df\| \leq \sqrt{\frac{1}{2}} \left(\sqrt{\deg(G)} + \deg(G) \right) \|f\|$$

が任意の $f \in L_2(V)$ に対して成り立つので, d は有界である.

また, 任意の $f \in L_2(V)$ に対して $\|df\| < \infty$ なので $R(d) \subset L_2(E)$ を得る. □

定理 2.35 (グリーンの公式の拡張). $\deg(G) < \infty$ のとき, 任意の $f_1, f_2 \in L_2(V)$ に対し,

$$(df_1, df_2) = (\Delta_A f_1, f_2) = (\Delta_P f_1, f_2)_{\#}$$

Proof. $C_c(V)$ は $L_2(V)$ 上稠密なので, 任意の $f_1, f_2 \in L_2(V)$ に対し, f_1 に収束する $C_c(V)$ 上の関数列 $\{f_{1,n}\}_{n \in \mathbb{N}}$, f_2 に収束する $C_c(V)$ 上の関数列 $\{f_{2,m}\}_{m \in \mathbb{N}}$ がとれて, グ

リーンの公式より

$$(df_{1,n}, df_{2,m}) = (\Delta_A f_{1,n}, f_{2,m}) = (\Delta_P f_{1,n}, f_{2,m})\#$$

が成り立つ. Δ_A, Δ_P, d および内積の連続性より, $n, m \rightarrow \infty$ として

$$(df_1, df_2) = (\Delta_A f_1, f_2) = (\Delta_P f_1, f_2)\#$$

を得る. □

参考として, リーマン多様体におけるグリーンの公式 ([1], 第4章, 定理 (1.1), [3], 定理 3.9) を紹介する.

定理 2.36 (参考: リーマン多様体におけるグリーンの公式). (M, g) を C^∞ コンパクトリーマン多様体, $f_1, f_2 \in C^\infty(M)$ としたとき, 次が成り立つ.

$$\int_M g(\nabla f_1, \nabla f_2)v_g = \int_M \Delta_g f_1 f_2 v_g$$

内積の形で表すと,

$$(\nabla f_1, \nabla f_2) = (\Delta_g f_1, f_2)$$

グラフにおけるグリーンの公式は, リーマン多様体におけるグリーンの公式と類似していることがわかる.

3 ラプラシアン固有値問題

以下、グラフは有限グラフのみを考える。

ラプラシアン Δ_A, Δ_P はそれぞれ内積 $(\cdot, \cdot), (\cdot, \cdot)_\#$ について対称なので、有限グラフのラプラシアンの固有値は全て実数で重複度込みで頂点数と同じ数存在する。

定理 3.1. 有限グラフ $G = (V, E)$ のラプラシアン Δ_A, Δ_P の固有値は全て非負である。

Proof. λ が Δ_A の固有値であるとき、固有値 λ に対する固有関数 f に対し

$$\lambda(f, f) = (\lambda f, f) = (\Delta_A f, f) = (df, df) \geq 0$$

f は固有関数なので $f \neq 0$ より $(f, f) \neq 0$. よって $\lambda \geq 0$ である。

Δ_P についても同様。 □

定理 3.2. 連結な有限グラフ $G = (V, E)$ のラプラシアン Δ_A, Δ_P の最小の固有値は 0 で、重複度は 1 である。

Proof. 定数関数は Δ_A の固有値 0 の固有関数であり、 Δ_A の固有値 0 の固有関数は定数関数に限ることを示す。

まず、 f が定数関数 c のとき、任意の $x \in V$ に対し、

$$\Delta_A f(x) = \sum_{y \sim x} f(x) - f(y) = \sum_{y \sim x} (c - c) = 0$$

となるので、定数関数は Δ_A の固有値 0 の固有関数である。

$f \in C(V)$ を固有値 0 の固有関数とすると、 $(df, df) = (\Delta_A f, f) = 0$ より $df \equiv 0$ なので、

$$x \sim y \implies f(x) = f(y)$$

$x_0 \in V$ をひとつ固定する。 G は連結なので、任意の $y \in V$ に対し、 x_0 と y を結ぶ道 $\{v_i\}_{i=0}^n$ が存在する。 よって、

$$f(x_0) = f(v_1) = \dots = f(y)$$

すなわち、 f は定数関数である。 Δ_P についても同様。 □

以降、3 節では Δ_A のみについて議論するため、孤立点および非連結なグラフも許すことにする。ただし、次の定理により非連結なグラフの Δ_A の固有値は、連結成分ごとの Δ_A の固有値をみればよいことがわかる。

定理 3.3. 連結でない有限グラフ $G = (V, E)$ は非自明な分割 $V = V_1 \sqcup V_2, E = E_1 \sqcup E_2$ をもつとし, $G_1 = (V_1, E_1)$ における Δ_A の固有値を $\lambda_1^1, \dots, \lambda_{N_1}^1$ (ただし $N_1 := \#V_1$), $G_2 = (V_2, E_2)$ における Δ_A の固有値を $\lambda_1^2, \dots, \lambda_{N_2}^2$ (ただし $N_2 := \#V_2$) とする.

このとき, G における Δ_A の固有値は $\lambda_1^1, \dots, \lambda_{N_1}^1, \lambda_1^2, \dots, \lambda_{N_2}^2$.

Proof. G_1 における固有値 λ_i^1 の固有関数を f_i^1 とし, 関数 $g_i^1 \in C(V)$ を

$$g_i^1(x) = \begin{cases} f_i^1(x) & (x \in V_1) \\ 0 & (x \in V_2) \end{cases}$$

により定めると, $x \in V_1$ のとき,

$$\begin{aligned} \Delta_A g_i^1(x) &= \sum_{y \sim x} g_i^1(x) - g_i^1(y) \\ &= \sum_{y \sim x} f_i^1(x) - f_i^1(y) \quad (\because y \sim x \implies y \in V_1) \\ &= \Delta_A f_i^1(x) = \lambda_i^1 f_i^1(x) = \lambda_i^1 g_i^1(x) \end{aligned}$$

$x \in V_2$ のとき,

$$\begin{aligned} \Delta_A g_i^1(x) &= \sum_{y \sim x} g_i^1(x) - g_i^1(y) \\ &= \sum_{y \sim x} (0 - 0) \quad (\because y \sim x \implies y \in V_2) \\ &= 0 = \lambda_i^1 f_i^1(x) = \lambda_i^1 g_i^1(x) \end{aligned}$$

以上より, $\Delta_A g_i^1 = \lambda_i^1 g_i^1$.

同様に, G_2 における固有値 λ_i^2 の固有関数を f_i^2 とし, 関数 $g_i^2 \in C(V)$ を

$$g_i^2(x) = \begin{cases} f_i^2(x) & (x \in V_2) \\ 0 & (x \in V_1) \end{cases}$$

により定めると, $\Delta_A g_i^2 = \lambda_i^2 g_i^2$.

Δ_P についても同様. □

定理 3.4. $G = (V, E)$ をループをもたない有限グラフとし, $V = \{1, \dots, N\}$ と表す.

G における Δ_A の固有値を $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ と表すとき, 次が成り立つ.

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i = 2\#E$$

Proof. Δ_A を対角化する正則行列を Q とする. このとき, トレースは基底の取り替えで不変なので,

$$\mathrm{tr}(\Delta_A) = \mathrm{tr}(Q^{-1}\Delta_A Q)$$

ここで, G はループをもたないと仮定しているので, A の対角成分はすべて 0 である. よって,

$$\mathrm{tr}(\Delta_A) = \mathrm{tr}(D) = \sum_{i=1}^N \deg(i)$$

$\deg(x)$ の定義より, $\deg(x)$ をすべての頂点にわたって足し合わせることは, すべての辺について両端点を数え上げると同じことなので, その和は $2\#E$ となる.

一方, $Q^{-1}\Delta_A Q$ の対角成分は $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ なので,

$$\mathrm{tr}(Q^{-1}\Delta_A Q) = \sum_{i=1}^N \lambda_i$$

である. 以上より,

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i = 2\#E$$

が成り立つ. □

定理 3.5. $G_1 = (V, E_1), G_2 = (V, E_2)$ 上の Δ_A の固有値をそれぞれ重複度込みで $\lambda_1^1 \leq \dots \leq \lambda_N^1, \lambda_1^2 \leq \dots \leq \lambda_N^2$ (ただし $N := \#V$) と表す. このとき,

$$E_1 \subset E_2 \implies \lambda_k^1 \leq \lambda_k^2$$

Proof. $G_3 := (V, E_2 \setminus E_1)$ とし, G_1, G_2, G_3 のラプラシアンをそれぞれ

$$\Delta_A^1 = D_1 - A_1, \quad \Delta_A^2 = D_2 - A_2, \quad \Delta_A^3 = D_3 - A_3$$

と表す. ここで, G_3 の辺の集合は $E_2 \setminus E_1$ であることから, 各 $x, y \in V$ に対し, G_2 における x と y を結ぶ辺の数は G_1 における x と y を結ぶ辺の数と G_3 における x と y を結ぶ辺の数の和である. よって

$$A_2 = A_1 + A_3$$

また, このことから各 $x \in V$ に対し, G_2 における x の次数は G_1 における x の次数と G_3 における x の次数の和である. よって

$$D_2 = D_1 + D_3$$

以上より,

$$\Delta_A^2 = \Delta_A^1 + \Delta_A^3$$

ここで, 任意の $f \in C(V)$ に対し,

$$\frac{(\Delta_A^2 f, f)}{\|f\|^2} = \frac{((\Delta_A^1 + \Delta_A^3)f, f)}{\|f\|^2} = \frac{(\Delta_A^1 f, f)}{\|f\|^2} + \frac{(\Delta_A^3 f, f)}{\|f\|^2}$$

であり, $\frac{(\Delta_A^3 f, f)}{\|f\|^2} \geq 0$ であることから

$$\frac{(\Delta_A^2 f, f)}{\|f\|^2} \geq \frac{(\Delta_A^1 f, f)}{\|f\|^2}$$

よってミニ・マックス原理より,

$$\begin{aligned} \lambda_k^2 &= \inf_{L_k} \sup \left\{ \frac{(\Delta_A^2 f, f)}{\|f\|^2} \mid 0 \neq f \in L_k \right\} \\ &\geq \inf_{L_k} \sup \left\{ \frac{(\Delta_A^1 f, f)}{\|f\|^2} \mid 0 \neq f \in L_k \right\} = \lambda_k^1 \end{aligned}$$

ただし, L_k は $C(V)$ の k 次元部分空間全てをわたる. また, $0 \neq f$ は f が定数関数 0 でないことを表す. □

次の定理とその証明は [2], Theorem 2.11.(b) を参考に行っている.

定理 3.6. 完全グラフ K_N の Δ_A の固有値は 0 (重複度 1) と, N (重複度 $N - 1$) である.

Proof. K_N は連結なので, 0 (重複度 1) を固有値にもつ.

$N - 1$ 個の一次独立な固有値 N の固有関数を構成する.

K_N の頂点全体の集合を $V = \{0, \dots, N - 1\}$ と表す.

$k = 1, \dots, N - 1$ に対し, $f_k \in C(V)$ を次のように定める.

$$f_k(x) = \begin{cases} 1 & (x = 0) \\ -1 & (x = k) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

このとき, 定め方から f_1, \dots, f_{N-1} は明らかに一次独立であり,

$$\begin{aligned} \Delta_A f_k(0) &= \deg(0) f_k(0) - \sum_{y \sim 0} f_k(y) \\ &= N - 1 - f_k(k) = N = N f_k(0) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Delta_A f_k(k) &= \deg(k) f_k(k) - \sum_{y \sim k} f_k(y) \\ &= -(N-1) f_k(k) - f_k(0) = -N f_k(k)\end{aligned}$$

$x \neq 0, k$ のとき,

$$\begin{aligned}\Delta_A f_k(x) &= \deg(x) f_k(x) - \sum_{y \sim x} f_k(y) \\ &= -(f_k(0) + f_k(k)) = 0 = N f_k(x)\end{aligned}$$

より

$$\Delta_A f_k = N f_k$$

□

定理 3.7. 単純グラフ $G = (V, E)$ の Δ_A の固有値は全て $\#V$ 以下である.

Proof. $K_N = (V, E')$ (ただし $N := \#V$) を完全グラフとすると $E \subset E'$ なので, 定理 3.5 と定理 3.6 より従う. □

定理 3.8. 完全 m 部グラフ K_{n_1, \dots, n_m} の Δ_A の固有値は 0 (重複度 1) と $N - n_i$ (重複度 $n_i - 1$) と N (重複度 $m - 1$) である. ただし $N := \sum_{i=1}^m n_i$ とする.

Proof. 完全 m 部グラフ K_{n_1, \dots, n_m} は連結なので, 0 (重複度 1) を固有値にもつ.

K_{n_1, \dots, n_m} の頂点全体の集合を $V = \bigsqcup_{i=1}^m V_i$ とし, $V_i = \{v_1^i, \dots, v_{n_i}^i\}$ と表す. $i = 1, \dots, m, k = 1, \dots, n_i - 1$ に対し, $f_k^i \in C(V)$ を次のように定める.

$$f_k^i(x) = \begin{cases} 1 & (x = v_k^i) \\ -1 & (x = v_{n_i}^i) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

このとき, 定め方から $f_1^i, \dots, f_{n_i-1}^i$ は明らかに一次独立であり, $x \in V_i$ のとき,

$$\Delta_A f_k^i(x) = \deg(x) f_k^i(x) - \sum_{y \sim x} f_k^i(y) = (N - n_i) f_k^i(x)$$

$x \notin V_i$ のとき,

$$\begin{aligned}\Delta_A f_k^i(x) &= \sum_{y \sim x} f_k^i(x) - f_k^i(y) = -(f_k^i(v_k^i) + f_k^i(v_{n_i}^i)) \\ &= -(1 - 1) = 0 = (N - n_i) f_k^i(x)\end{aligned}$$

以上より,

$$\Delta_A f_k^i = (N - n_i) f_k^i$$

を得る. よって, Δ_A は $N - n_i$ (重複度 $n_i - 1$) を固有値にもつ.

$k = 1, \dots, m - 1$ に対し, $f_k \in C(V)$ を次のように定める.

$$f_k(x) = \begin{cases} n_m & (x \in V_k) \\ -n_k & (x \in V_m) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

このとき, 定め方から f_1, \dots, f_{m-1} は明らかに一次独立であり, $x \in V_k$ のとき,

$$\begin{aligned} \Delta_A f_k(x) &= \deg(x) f_k(x) - \sum_{y \sim x} f_k(y) \\ &= (N - n_k) n_m - \sum_{y \in V_m} f_k(y) \\ &= N f_k(x) - n_k n_m - n_m (-n_k) = N f_k(x) \end{aligned}$$

$x \in V_m$ のとき,

$$\begin{aligned} \Delta_A f_k(x) &= \deg(x) f_k(x) - \sum_{y \sim x} f_k(y) \\ &= (N - n_m) (-n_k) - \sum_{y \in V_k} f_k(y) \\ &= N f_k(x) + n_k n_m - n_k n_m = N f_k(x) \end{aligned}$$

その他の場合,

$$\begin{aligned} \Delta_A f_k(x) &= \sum_{y \sim x} f_k(x) - f_k(y) \\ &= - \sum_{y \in V_k} f_k(y) - \sum_{y \in V_m} f_k(y) \\ &= -n_k n_m + n_m n_k = 0 = N f_k(x) \end{aligned}$$

以上より,

$$\Delta_A f_k = N f_k$$

を得る. よって, Δ_A は N (重複度 $m - 1$) を固有値にもつ.

□

定理 3.9. 単純グラフ $G = (V, E)$ が次を満たすとき, グラフ G の Δ_A の固有値のうち最大のもは N である. ただし $N := \#V$ とする.

ある $\emptyset \neq V' \subsetneq V$ が存在し,

$$\begin{aligned} x, y \in V' &\implies x \not\sim y \\ x \in V', y \notin V' &\implies x \sim y \end{aligned}$$

Proof. $\#V = n, \#V' = m$ とおく.

$f \in C(V)$ を

$$f(x) = \begin{cases} m - N & (x \in V') \\ m & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

と定めると, $x \in V'$ に対し,

$$\begin{aligned} \Delta_A f(x) &= \sum_{y \sim x} (f(x) - f(y)) \\ &= \sum_{y \notin V'} (f(x) - f(y)) \\ &= (N - m)(m - N - m) = N(m - N) = Nf(x) \end{aligned}$$

$x \notin V'$ に対し,

$$\begin{aligned} \Delta_A f(x) &= \sum_{y \sim x} (f(x) - f(y)) \\ &= \sum_{y \in V'} (f(x) - f(y)) \\ &= m(m - (m - N)) = Nm = Nf(x) \end{aligned}$$

以上より, $\Delta_A f = Nf$ である. □

完全 m 部グラフは, 各 V_i がこの定理における V' の条件を満たす.

この定理の仮定を満たすグラフの直径は 2 以下である. 何故なら,

$$\begin{aligned} x, y \in V' (x \neq y) &\implies x \not\sim y, \text{ある } z \in V \text{ が存在し, } x \sim z \sim y \implies d(x, y) = 2 \\ x \in V', y \notin V' &\implies x \sim y \implies d(x, y) = 1 \\ x, y \in V (x \neq y) &\implies x \not\sim y, \text{ある } z \in V' \text{ が存在し, } x \sim z \sim y \implies d(x, y) = 2 \end{aligned}$$

が成り立つからである.

以上のことから, 直径が 2 以下であり, Δ_A の最大固有値が頂点数に一致するグラフの例がいくつか得られた. 実際, 単純グラフの直径が 2 以下であることと Δ_A の最大固有値が頂点数に一致することの間には次のような関係がある.

定理 3.10. 連結な単純グラフ $G = (V, E)$ (ただし $N := \#V$) における Δ_A の固有値のうち最大のものを λ とおく. このとき,

$$\lambda = N \implies \text{diam}(G) \leq 2$$

Proof. 連結な単純グラフ $G = (V, E)$ が $\text{diam}(G) \geq 3$ を満たすとき, ある $x, y \in V$ が存在し, $d(x, y) = 3$. つまり, 次のような $\{1, 2, 3, 4\} = V_1 \subset V$ が存在する.

- $1 \sim 2 \sim 3 \sim 4$.
- その他の組み合わせは隣接していない.

さらに, それ以外の頂点は $1, 4$ と同時に隣接しない. 何故なら, ある $x \in V$ が $1 \sim x \sim 4$ を満たすとすると, これが頂点 1 と 4 を結ぶ長さ 2 の道になり, $d(1, 4) = 3$ に反するからである.

上の条件を満たしつつ多重辺やループができないように G の辺の集合 E に辺を可能な限り追加し, 新たな辺の集合 E' を構成することを考える. このとき, $V \setminus V_1$ 上の相異なる頂点は隣接してもよく, 任意の $x \in V \setminus V_1$ は $1, 4$ と同時に隣接しなければよいので, 次のどちらかを満たすことになる.

- $x \sim 2, x \sim 3, x \sim 4, x \not\sim 1$.
- $x \sim 1, x \sim 2, x \sim 3, x \not\sim 4$.

すなわち, 辺の集合 E に辺を追加することで, 次のような形のグラフ $G' = (V, E')$ が構成できる.

- $V = V_1 \sqcup V_2 \sqcup V_3$.
- $x \in V_2 \implies x \sim 2, x \sim 3, x \sim 4, x \not\sim 1$.
- $y \in V_3 \implies y \sim 1, y \sim 2, y \sim 3, y \not\sim 4$.
- $x, y \in V_2 \cup V_3, x \neq y \implies x \sim y$.

たとえば, 図 3 のようなグラフ G に対して辺を追加し, 図 4 のようなグラフ G' を構成する. ここで, 図 4 の赤い辺は図 3 のグラフから追加された辺を表す. また, 青い頂点が V_1 , 緑の頂点が V_2 , 赤い頂点が V_3 に相当する.

このような形のグラフ $G' = (V, E')$ におけるラプラシアン Δ_A は N を固有値にもたないことを示す.

$\#V_2 = n, \#V_3 = m$ としたとき, $N = \#V = n + m + 4$ であり, $G' = (V, E')$ におけ

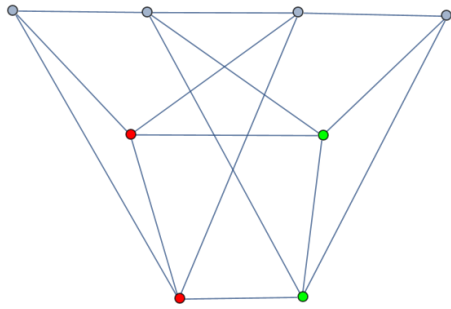


図3 グラフ G

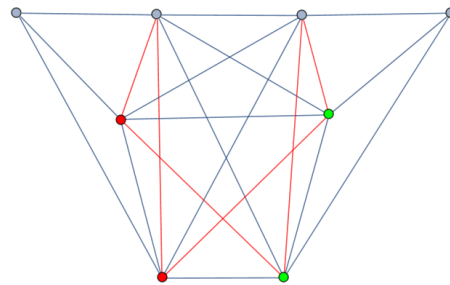


図4 グラフ G'

る隣接行列は

$$\left(\begin{array}{cccc|cccc|cccc} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \hline 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & \cdots & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 1 & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 1 & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 0 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 0 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots & 1 & \ddots & \ddots & \vdots & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 1 & \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 0 \end{array} \right)$$

(ただし, 行を上から 4 行, n 行, m 行, 列を左から 4 列, n 列, m 列に区切っている) であり,

$$\deg(x) = \begin{cases} m+1 & (x=1) \\ n+1 & (x=4) \\ N-2 & (\text{otherwise}) \end{cases} \iff N - \deg(x) = \begin{cases} n+3 & (x=1) \\ m+3 & (x=4) \\ 2 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

なので,

$$NI_N - \Delta_A = NI_N - (D - A)$$

$$= \left(\begin{array}{cccc|cccc|cccc} n+3 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ 1 & 2 & 1 & 0 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ 0 & 0 & 1 & m+3 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \hline 0 & 1 & 1 & 1 & 2 & 1 & \cdots & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 1 & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 1 & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 2 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 2 & 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots & 1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 1 & \cdots & 1 & 2 \end{array} \right)$$

となる. ここで, I_N は N 次単位行列. また, 行を上から 4 行, n 行, m 行, 列を左から 4 列, n 列, m 列に区切っている.

この行列に, 次の順で基本変形を行う.

- N 行目の $-(n+3)$ 倍を 1 行目に加える.
- N 行目の -1 倍を $2, n+5, \dots, N-1$ 行目に加える.

この基本変形を終えた後の行列は次のようなものになる. ただし, 行と列の区切り方は上のものと同様である.

$$\left(\begin{array}{cccc|cccc|cccc} 0 & -n-2 & -n-3 & 0 & -n-3 & \cdots & \cdots & -n-3 & -n-2 & \cdots & -n-2 & -2n-5 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 2 & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ 0 & 0 & 1 & m+3 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \hline 0 & 1 & 1 & 1 & 2 & 1 & \cdots & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 1 & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 1 & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 2 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 & & 0 & -1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & & \vdots & 0 & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 1 & \cdots & 1 & 2 \end{array} \right)$$

この基本変形は行列式の値を変えないものであり, 変形後の行列の 1 列目は N 行目の 1

を除いて全て0なので,

$$\det(NI_N - \Delta_A) = (-1)^{N+1} \det X$$

ただし, X は次のような行列である.

$$\left(\begin{array}{ccc|cccc|cccc} -n-2 & -n-3 & 0 & -n-3 & \cdots & \cdots & -n-3 & -n-2 & \cdots & -n-2 & -2n-5 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & -1 \\ 1 & 2 & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ 0 & 1 & m+3 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 2 & 1 & \cdots & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & 1 & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 1 & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 2 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ \hline & & & & & & & 1 & & 0 & -1 \\ & & & & & & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & & & & 0 & & 1 & -1 \end{array} \right)$$

ただし, 行を上から4行, n 行, $m-1$ 行, 列を左から3列, n 列, m 列に区切っている.

さらに, X に次の順で基本変形を行う.

- 5行目の $(n+2)$ 倍を1行目に加える.
- 5行目の -1 倍を2, 3, 6, \dots , $n+4$ 行目に加える.

この基本変形を終えた後の行列は次のようなものになる. これを X' とおく.

$$\left(\begin{array}{ccc|cccc|cccc} 0 & -1 & n+2 & n+1 & -1 & \cdots & -1 & 0 & \cdots & 0 & -n-3 \\ 0 & -1 & -1 & -2 & -1 & \cdots & -1 & -1 & \cdots & -1 & -2 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & m+3 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \hline 1 & 1 & 1 & 2 & 1 & \cdots & 1 & 1 & \cdots & \cdots & 1 \\ & & & -1 & 1 & & & & & & \\ & & & & & & & 0 & & & \\ & & & \vdots & & \ddots & & & & & 0 \\ & & & -1 & 0 & & 1 & & & & \\ \hline & & & & & & & 1 & & 0 & -1 \\ & & & & & & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & & & & 0 & & 1 & -1 \end{array} \right)$$

ただし, 行と列の区切り方は X と同様である.

この基本変形は行列式の値を変えないものであり, 変形後の行列の1列目は5行目の1を除いて全て0なので,

$$\det X' = (-1)^{5+1} \det Y$$

ただし, Y は次のような行列である.

$$\left(\begin{array}{cc|cccc|cccc} -1 & n+2 & n+1 & -1 & \cdots & -1 & 0 & \cdots & 0 & -n-3 \\ -1 & -1 & -2 & -1 & \cdots & -1 & -1 & \cdots & -1 & -2 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 1 & m+3 & 1 & \cdots & \cdots & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \hline & & -1 & 1 & & & & & & \\ & 0 & \vdots & & \ddots & & & & & 0 \\ & & -1 & 0 & & 1 & & & & \\ \hline & & & & & & 1 & & 0 & -1 \\ & 0 & & 0 & & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & & & 0 & & 1 & -1 \end{array} \right)$$

ただし, 行を上から 4 行, $n-1$ 行, $m-1$ 行, 列を左から 2 列, n 列, m 列に区切っている.
さらに, Y に次の順で基本変形を行う.

- ($N-2$ 列目と $N-3$ 列目), \dots , (5 列目と 4 列目) の順に列を入れ替える.
(その結果, $N-2$ 列目を 3 列目と 4 列目の間に挿入する形になる)
- $5, \dots, n+3$ 列目を 3 列目に加える.
- $n+4, \dots, N-2$ 列目を 4 列目に加える.

この基本変形を終えた後の行列は次のようなものになる.

$$Z := \begin{pmatrix} Z_1 & Z_2 \\ O & I_{N-6} \end{pmatrix}$$

ただし,

$$Z_1 = \begin{pmatrix} -1 & n+2 & 2 & -(n+3) \\ -1 & -1 & -(n+1) & -(m+1) \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & m+3 & n & 0 \end{pmatrix}$$

この基本変形では列の入れ替えを $N-6$ 回行っており, その他の変形は行列式の値を変えないので,

$$\det Y = (-1)^{N-6} \det Z = (-1)^{N-6} \det Z_1$$

以上より,

$$\det(NI_N - \Delta_A) = (-1)^{2N+1} \det Z_1 = -(-(n+m+4)^2) = N^2 \neq 0$$

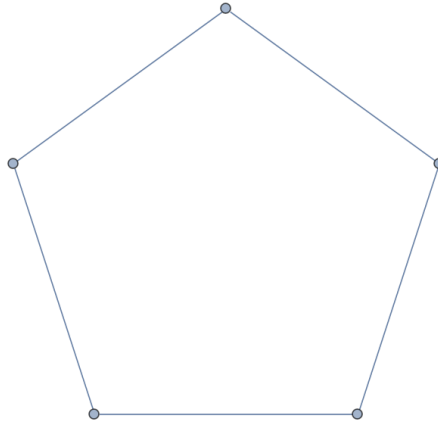


図 5 定理 3.10 の逆の反例

となるので, $G' = (V, E')$ におけるラプラシアン Δ_A は N を固有値にもたない. 定理 3.7 と合わせると, $G' = (V, E')$ におけるラプラシアン Δ_A の最大固有値は N 未満であることがわかる.

さらに, E' の構成から $E \subset E'$ なので, 定理 3.5 より, $G = (V, E)$ におけるラプラシアン Δ_A の最大固有値も N 未満である. 以上により, 示すべき命題の対偶が示された. \square

この定理の逆は成り立たない. 実際, 上の図 3 のグラフの直径は 2 であるが, Δ_A の固有値は $\{0, \frac{5-\sqrt{5}}{2}, \frac{5-\sqrt{5}}{2}, \frac{5+\sqrt{5}}{2}, \frac{5+\sqrt{5}}{2}\}$ であり, 最大固有値は頂点数 5 より真に小さい.

4 重み付きラプラシアン固有値問題

4.1 重み付きグラフ

本章では、グラフの辺に重みをつけたグラフを考える。その定義は以下の通りである。

定義 4.1 (重み付きグラフ). $G = (V, E)$ を単純グラフとする. $\mu : V \times V \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}; (x, y) \mapsto \mu_{xy}$ がグラフ G の**重み**であるとは、次の2つを満たすときをいう。

- 任意の $x, y \in V$ に対し, $\mu_{xy} = \mu_{yx}$.
- $\mu_{xy} > 0 \iff x \sim y$.

また,

- $e \in E$ が $x \in V$ と $y \in V$ を結ぶ辺であるとき, $\mu_e := \mu_{xy}$ と表す.
- $\mu(x) := \sum_{y \in V} \mu_{xy}$ とする.
- $\mu_{xy} = 1 \iff x \sim y$ を満たすとき, μ は**単純**であるという.

重みなしのグラフと同様に、次のものが定義される。

定義 4.2 (重み付きグラフの推移行列). 重み付きグラフ $G = (V, \mu)$ 上の**推移行列** $P_\mu = (p'_{xy})_{x, y \in V}$ を次のように定義する。

$$p'_{xy} := \mu_{xy} / \mu(x)$$

μ が単純であるとき, P と P_μ は一致する。

定義 4.3 ($C_c(V)$ 上の内積). $C_c(V)$ 上の内積 $(\cdot, \cdot)_\mu$ を次のように定義する。

$f_1, f_2 \in C_c(V)$ に対し,

$$(f_1, f_2)_\mu := \sum_{x \in V} \mu(x) f_1(x) f_2(x)$$

定義 4.4 (ラプラシアン). **ラプラシアン** Δ_μ を次のように定義する。

$$\Delta_\mu := I - P_\mu$$

ただし $I = \{\delta_{xy}\}_{x, y \in V}$ である。

4.2 Δ_μ の固有値による 2 部グラフの特徴づけ

次の定理は, 2 部グラフが Δ_μ の固有値により特徴づけられることを示している.

定理 4.5 ([2], Theorem 2.7.). $G = (V, \mu)$ を連結な重み付きグラフとする.

Δ_μ の固有値を $\lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_{N-1}$ (ただし $N := \#V$) と表すとき, 次が成り立つ.

- (a) $\lambda_0 = 0$ で, その重複度は 1.
- (b) $\lambda_{N-1} \leq 2$.
- (c) G が 2 部グラフでないとき, $\lambda_{N-1} < 2$.
- (d) G が 2 部グラフのとき, Δ_μ の固有値は 1 に対して対称に現れる. とくに $\lambda_{N-1} = 2$.

Proof. (a) は定理 3.2 から, (b) は命題 2.26 より $\|\Delta_\mu\| \leq \|P_\mu\| + \|I\| \leq 2$ であることから従う.

(c) Δ_μ が 2 を固有値にもつとする. まず, 任意の $f \in C(V)$ に対し,

$$\begin{aligned}
 (df, df)_\mu &= \frac{1}{2} \sum_{x, y \in V} (f(y) - f(x))^2 \mu_{xy} \\
 &\leq \sum_{x, y \in V} (f(y)^2 + f(x)^2) \mu_{xy} \\
 &= 2 \sum_{x \in V} f(x)^2 \mu(x) = 2(f, f)_\mu
 \end{aligned} \tag{3}$$

ここで, f が固有値 2 の固有関数であるとき,

$$(df, df)_\mu = (\Delta_\mu f, f)_\mu = 2(f, f)_\mu$$

より, (3) で等号が成立する. よって,

$$x \sim y \iff (f(x) - f(y))^2 = 2(f(x)^2 + f(y)^2) \iff f(x) + f(y) = 0$$

が成り立つ. このとき, ある $x_0 \in V$ が $f(x_0) = 0$ を満たすとすると, 任意の $y \sim x_0$ に対し $f(y) = -f(x_0) = 0$ となり, G の連結性から $f \equiv 0$ が従う. しかしこれは f が固有関数であることに反する. よって, $V^+ := \{x \in V \mid f(x) > 0\}$,

$V^- := \{x \in V \mid f(x) < 0\}$ とおくと $V = V^+ \sqcup V^-$ と分割できる. すると,

$$x, y \in V^+ \implies f(x) + f(y) > 0 \implies x \not\sim y$$

$$x, y \in V^- \implies f(x) + f(y) < 0 \implies x \not\sim y$$

より, G は 2 部グラフであることがわかる.

(d) G を 2 部グラフとし, $V = V^+ \sqcup V^-$ と分割されているとする.

固有値 λ に対する固有関数を f とし, $g \in C(V)$ を

$$g(x) = \begin{cases} f(x) & (x \in V^+) \\ -f(x) & (x \in V^-) \end{cases}$$

と定めると, $x \in V^+$ のとき,

$$\begin{aligned} \Delta_\mu g(x) &= g(x) - \sum_{y \in V} \frac{\mu_{xy} g(y)}{\mu(x)} \\ &= g(x) - \sum_{y \in V^-} \frac{\mu_{xy} g(y)}{\mu(x)} \\ &= f(x) + \sum_{y \in V^-} \frac{\mu_{xy} f(y)}{\mu(x)} \\ &= (2f - \Delta_\mu f)(x) = (2 - \lambda)g(x) \end{aligned}$$

$x \in V^-$ のときも同様にして $\Delta_\mu g(x) = (2 - \lambda)g(x)$. よって

$$\Delta_\mu g = (2 - \lambda)g$$

となり, g は固有値 $(2 - \lambda)$ の固有関数であることがわかる. \square

また, $\Delta_\mu = I - P_\mu$ なので, λ が Δ_μ の固有値であるとき, $1 - \lambda$ は P_μ の固有値である. よって, 次が成り立つ.

定理 4.6. $G = (V, \mu)$ を連結な重み付きグラフとする. P_μ の固有値を $\alpha_0 \geq \alpha_1 \geq \dots \geq \alpha_{N-1}$ (ただし $N := \#V$) と表すとき, 次が成り立つ.

- (a) $\alpha_0 = 1$ で, その重複度は 1.
- (b) $\alpha_{N-1} \geq -1$.
- (c) G が 2 部グラフでないとき, $\alpha_{N-1} > -1$.
- (d) G が 2 部グラフのとき, P_μ の固有値は 0 に対して対称に現れる. とくに $\alpha_{N-1} = -1$.

定理 4.7. 単純な重みをもつ完全 2 部グラフ $K_{m,n}$ (ただし $m + n \geq 3$) の $\Delta_\mu (= \Delta_P)$ の固有値は $\{0, 1, \dots, 1, 2\}$ である.

Proof. Δ_μ の固有値を $\lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_{m+n-1}$ と表す.

2部グラフの Δ_μ の固有値は 1 に対して対称に現れるので, $\lambda_1 \geq 1$ を示せば十分. ミニ・マックス原理より,

$$\lambda_1 = \inf_{f \perp \mathbf{1}} R(f)$$

なので,

$$f \perp \mathbf{1} \implies (\Delta_\mu f, f)_\mu \geq (f, f)_\mu$$

を示せばよい. ただし, $f \perp \mathbf{1}$ は f が定数関数 1 と直交していることを表す. 内積の線形性より, これは f が任意の定数関数と直交することと同値である.

$f \perp \mathbf{1}$ を満たす関数 f を任意にとる. $x \in V_1$ のとき,

$$\begin{aligned} \Delta_\mu f(x) &= f(x) - \sum_{y \in V} \frac{\mu_{xy} f(y)}{\mu(x)} \\ &= f(x) - \frac{1}{n} \sum_{y \in V_2} f(y) \end{aligned}$$

同様に $x \in V_2$ のとき,

$$\Delta_\mu f(x) = f(x) - \frac{1}{m} \sum_{y \in V_1} f(y)$$

と表せるので,

$$\begin{aligned} (\Delta_\mu f, f)_\mu &= \sum_{x \in V} (\Delta_\mu f(x)) f(x) \mu(x) \\ &= \sum_{x \in V_1} (\Delta_\mu f(x)) f(x) \mu(x) + \sum_{x \in V_2} (\Delta_\mu f(x)) f(x) \mu(x) \\ &= \sum_{x \in V_1} \left(f(x) - \frac{1}{n} \sum_{y \in V_2} f(y) \right) f(x) \cdot n \\ &\quad + \sum_{x \in V_2} \left(f(x) - \frac{1}{m} \sum_{y \in V_1} f(y) \right) f(x) \cdot m \\ &= \sum_{x \in V} f(x)^2 \mu(x) - 2 \left(\sum_{x \in V_1} f(x) \right) \left(\sum_{y \in V_2} f(y) \right) \end{aligned}$$

ここで, $f \perp \mathbf{1}$ より

$$\begin{aligned} \sum_{x \in V} f(x) \mu(x) &= 0 \\ \sum_{x \in V_2} f(x) &= -\frac{m}{n} \sum_{x \in V_1} f(x) \end{aligned}$$

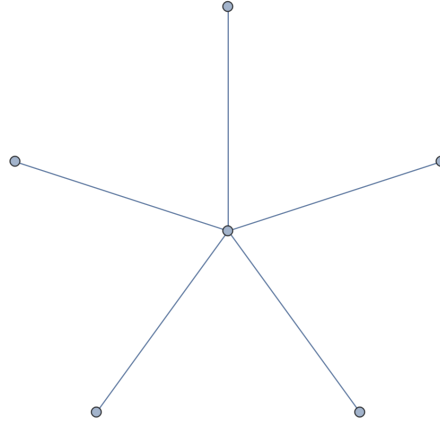


図6 星型グラフ $K_{1,5}$

が成り立つので,

$$(\Delta_\mu f, f)_\mu = (f, f)_\mu + \frac{2m}{n} \left(\sum_{x \in V_1} f(x) \right)^2 \geq (f, f)_\mu$$

□

とくに, $N \geq 4$ に対し, $K_{1,N-1}, \dots, K_{\lfloor N/2 \rfloor, N - \lfloor N/2 \rfloor}$ の Δ_P のスペクトルは等しい.

4.3 辺の重みを変化させたときの Δ_μ の固有値の変化

ここからは, いくつかの特殊なグラフについて辺の重みを変化させることを考え, そのときに固有値がどのように変化するかを調べる.

定義 4.8 (星型グラフ). 完全2部グラフの中でも $K_{1,n}$ の形のものをとくに**星型グラフ**という.

定理 4.9. 星型グラフのラプラシアン Δ_μ の固有値は重みに依存しない.

Proof. 星型グラフは2部グラフなので, 0と2は自明な固有値である. 残りの固有値が重みによらず1(重複度 $N-2$)であることを示す.

簡単のため, $\mu_{0k} = \mu_{k0} = \mu_k$ と表記する.

関数 f_k ($k = 1, \dots, N - 2$) を次のように定める.

$$f_k(x) = \begin{cases} \mu_{k+1} & (x = 1) \\ -\mu_1 & (x = k + 1) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

このとき, $\Delta_\mu f_k$ は次のようになる.

$x \neq 0$ のとき,

$$\begin{aligned} \Delta_\mu f_k(x) &= f_k(x) - \sum_{y \in V} \frac{\mu_{xy} f_k(y)}{\mu(x)} \\ &= f_k(x) - \frac{\mu_{0x} f_k(0)}{\mu(x)} = f_k(x) \\ \Delta_\mu f_k(0) &= f_k(0) - \sum_{y \in V} \frac{\mu_{0y} f_k(y)}{\mu(0)} \\ &= -\frac{1}{\mu(0)} \sum_{y=1}^{N-1} \mu_y f_k(y) \\ &= -\frac{1}{\mu(0)} (\mu_1 f_k(1) - \mu_{k+1} f_k(k+1)) \\ &= -\frac{1}{\mu(0)} (\mu_1 \mu_{k+1} - \mu_{k+1} \mu_1) = 0 = f_k(0) \end{aligned}$$

以上より, $\Delta_\mu f_k = f_k$.

f_1, \dots, f_{N-2} は定め方から明らかに一次独立なので, Δ_μ の固有値は重みによらず $0, 1$ (重複度 $N - 2$), 2 □

定理 4.10. r を正の実数とし, 完全グラフ K_N ($N \geq 3$) 上に次のような重み μ を与える. ただし K_N の頂点は $V = \{0, \dots, N - 1\}$ と表す.

$$\mu_{xy} = \begin{cases} r & ((x, y) = (0, 1), (1, 0)) \\ 0 & (x = y) \\ 1 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

このグラフ (V, μ) の Δ_μ の固有値を $\lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_{N-1}$ としたとき, 次が成り立つ.

- $\lambda_0 = 0$
- $\lambda_1 = \frac{2r + N - 2}{r + N - 2}$
- $\lambda_k = \frac{N}{N - 1}$ ($k = 2, \dots, N - 2$)

- $\lambda_{N-1} = \frac{2r + N^2 - N - 2}{(N-1)(r+N-2)}$

Proof. 各頂点の重みは次のようになる.

$$\mu(x) = \begin{cases} r + N - 2 & (x = 0, 1) \\ N - 1 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

各 λ_k に対応する固有関数 f_k を構成する. f_0 は定数関数をとればよい.

$k = 1, \dots, N-1$ のとき, f_k を次のように定める.

$$f_1(x) = \begin{cases} 1 & (x = 0) \\ -1 & (x = 1) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

$k = 2, \dots, N-2$ のとき,

$$f_k(x) = \begin{cases} 1 & (x = 2) \\ -1 & (x = k + 1) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

$$f_{N-1}(x) = \begin{cases} -\frac{(N-1)(N-2)}{2(r+N-2)} & (x = 0, 1) \\ 1 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

すると, $\Delta_\mu f_k$ は次のようになる.

$$\begin{aligned} \Delta_\mu f_1(0) &= f_1(0) - \sum_{y \in V} \frac{\mu_{0y} f_1(y)}{\mu(0)} \\ &= 1 - \frac{\mu_{01} f_1(1)}{\mu(0)} \\ &= 1 + \frac{r}{r+N-2} = \frac{2r+N-2}{r+N-2} = \frac{2r+N-2}{r+N-2} f_1(0) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta_\mu f_1(1) &= f_1(1) - \sum_{y \in V} \frac{\mu_{1y} f_1(y)}{\mu(1)} \\ &= -1 - \frac{\mu_{10} f_1(0)}{\mu(1)} \\ &= -1 - \frac{r}{r+N-2} = -\frac{2r+N-2}{r+N-2} = \frac{2r+N-2}{r+N-2} f_1(1) \end{aligned}$$

$x \neq 0, 1$ のとき,

$$\begin{aligned}\Delta_\mu f_1(x) &= f_1(x) - \sum_{y \in V} \frac{\mu_{xy} f_1(y)}{\mu(x)} \\ &= - \left(\frac{\mu_{x0} f_1(0)}{\mu(x)} + \frac{\mu_{x1} f_1(1)}{\mu(x)} \right) \\ &= - \frac{1}{N-1} (1-1) = 0 = \frac{2r+N-2}{r+N-2} f_1(x)\end{aligned}$$

以上より,

$$\Delta_\mu f_1 = \frac{2r+N-2}{r+N-2} f_1$$

$k = 2, \dots, N-2$ のとき,

$$\begin{aligned}\Delta_\mu f_k(2) &= f_k(2) - \sum_{y \in V} \frac{\mu_{2y} f_k(y)}{\mu(2)} \\ &= 1 - \frac{\mu_{2k+1} f_k(k+1)}{\mu(2)} \\ &= 1 + \frac{1}{N-1} = \frac{N}{N-1} = \frac{N}{N-1} f_k(2)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Delta_\mu f_k(k+1) &= f_k(k+1) - \sum_{y \in V} \frac{\mu_{k+1y} f_k(y)}{\mu(k+1)} \\ &= -1 - \frac{\mu_{k+12} f_k(2)}{\mu(k+1)} \\ &= -1 - \frac{1}{N-1} = -\frac{N}{N-1} = \frac{N}{N-1} f_k(k+1)\end{aligned}$$

$x \neq 2, k+1$ のとき,

$$\begin{aligned}\Delta_\mu f_k(x) &= f_k(x) - \sum_{y \in V} \frac{\mu_{xy} f_k(y)}{\mu(x)} \\ &= - \left(\frac{\mu_{x2} f_k(2)}{\mu(x)} + \frac{\mu_{xk+1} f_k(k+1)}{\mu(x)} \right) \\ &= - \frac{1}{N-1} (1-1) = 0 = \frac{N}{N-1} f_1(x)\end{aligned}$$

以上より,

$$\Delta_\mu f_k = \frac{N}{N-1} f_k$$

$x = 0, 1$ のとき,

$$\begin{aligned}
\Delta_\mu f_{N-1}(x) &= f_{N-1}(x) - \sum_{y \in V} \frac{\mu_{xy} f_{N-1}(y)}{\mu(x)} \\
&= -\frac{(N-1)(N-2)}{2(r+N-2)} - \frac{1}{r+N-2} \left(-2r \frac{(N-1)(N-2)}{2(r+N-2)} + N-2 \right) \\
&= \frac{2r + N^2 - N - 2}{(N-1)(r+N-2)} \cdot \left(-\frac{(N-1)(N-2)}{2(r+N-2)} \right) \\
&= \frac{2r + N^2 - N - 2}{(N-1)(r+N-2)} f_{N-1}(x)
\end{aligned}$$

$x \neq 0, 1$ のとき,

$$\begin{aligned}
\Delta_\mu f_{N-1}(x) &= f_{N-1}(x) - \sum_{y \in V} \frac{\mu_{xy} f_{N-1}(y)}{\mu(x)} \\
&= 1 - \frac{1}{N-1} - \left(-2 \frac{(N-1)(N-2)}{2(r+N-2)} + N-3 \right) \\
&= \frac{2r + N^2 - N - 2}{(N-1)(r+N-2)} = \frac{2r + N^2 - N - 2}{(N-1)(r+N-2)} f_{N-1}(x)
\end{aligned}$$

以上より,

$$\Delta_\mu f_{N-1} = \frac{2r + N^2 - N - 2}{(N-1)(r+N-2)} f_{N-1}$$

□

以上より, 完全グラフの 1 辺の重みを変化させると正の最大, 最小固有値にのみ変化が現れることが分かった. また,

$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= \frac{2r + N - 2}{r + N - 2} \\
&= 2 - \frac{N - 2}{r + N - 2} \\
\lambda_{N-1} &= \frac{2r + N^2 - N - 2}{(N-1)(r+N-2)} \\
&= \frac{2}{N-1} + \frac{N-2}{r+N-2}
\end{aligned}$$

と変形できるので, r を 1 から 0 まで動かすと λ_1 は $\frac{N}{N-1}$ から 1 に単調に減少し, λ_{N-1} は $\frac{N}{N-1}$ から $\frac{N+1}{N-1}$ に単調に増加する. さらに,

$$\frac{\lambda_1 + \lambda_{N-1}}{2} = \frac{N}{N-1} = \lambda_2 = \dots = \lambda_{N-2}$$

より, λ_1 と λ_{N-1} は $\lambda_2 = \cdots = \lambda_{N-2}$ について対称である.

r が 1 より大きい場合は λ_1 と λ_{N-1} の大小関係は逆転し, r を大きくすると λ_1 は 2 に, λ_{N-1} は $\frac{2}{N-1}$ に収束する.

5 参考文献

参考文献

- [1] 浦川肇. ラプラス作用素とネットワーク. 裳華房, 1996.
- [2] Alexander Grigor'yan. Introduction to analysis on graphs. American Mathematical Society, 2018.
- [3] 浦川肇. ラプラシアン of 幾何と有限要素法. 朝倉書店, 2009.
- [4] R.J. ウィルソン著 ; 斎藤伸自, 西関隆夫共訳. グラフ理論入門. 近代科学社, 1985.