The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics

スペクトル幾何学とグラフ理論

浦川 肇

1 はじめに

グラフ理論は，18 世紀，東プロシアのケーニヒスベルグにある「2 つの島と 7 つの橋を，どの橋も 2 度は渡らずに，すべて渡って町を散歩できるか」という問題を，オイラー(L. Euler)が 1736 年に「不可能である」と解決したことに始まる[**図 1**].

実際，オイラーは次の定理を示した.

定理 有限連結グラフが周遊可能(一筆書き可能)であるための必要十分条件は，各頂点が偶数の次数をもつことである.

これに対して，ハミルトン(W. R. Hamilton)によって提起された，「グラフが各頂点をちょうど 1 回だけ通る閉路(ハミルトン閉路という)を持つかどうか」という問題については，現在もなお最終的な判定法が知られていないようである[24]. これに関連して「すべての頂点を通る最短閉路を見つける」問題は，巡回セールスマン問題として著名であり，その有効なアルゴリズムを捜す問題は情報数理の大きな問題の一つである.

グラフ理論は様々な分野に顔を表す. 1875 年のケーリー(Cayley)による化

[筆者紹介]

うらかわ はじめ. 1969 年東北大学理学部数学科卒業. 1971 年大阪大学大学院理学研究科数学専攻修士課程修了，同博士課程中退. 1972 年名古屋大学理学部助手，1978 年東北大学教養部助教授，同教授，1993 年より大学院情報科学研究科教授，現在に至る. 理学博士. この間，マックス=プランク研究所(ボン)客員教授(1983 年 4 月～1985 年 3 月)，M. S. R. I.(数理科学研究所，バークレー)研究教授(1989 年 9 月～1990 年 7 月). 日本数学会所属. 同理事(4 期，1997 年 4 月～2001 年 3 月). 著書『Calculus of Variations and Harmonic Maps』(American Mathematical Society)，『ラプラス作用素とネットワーク』(裳華房)など. 微分幾何学，ゲージ理論，スペクトル幾何学，グラフの大域解析学，ロボットの運動解析，離散曲面，グラフィックス，ファジィ理論などの情報数理に広く興味を持っている.

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics

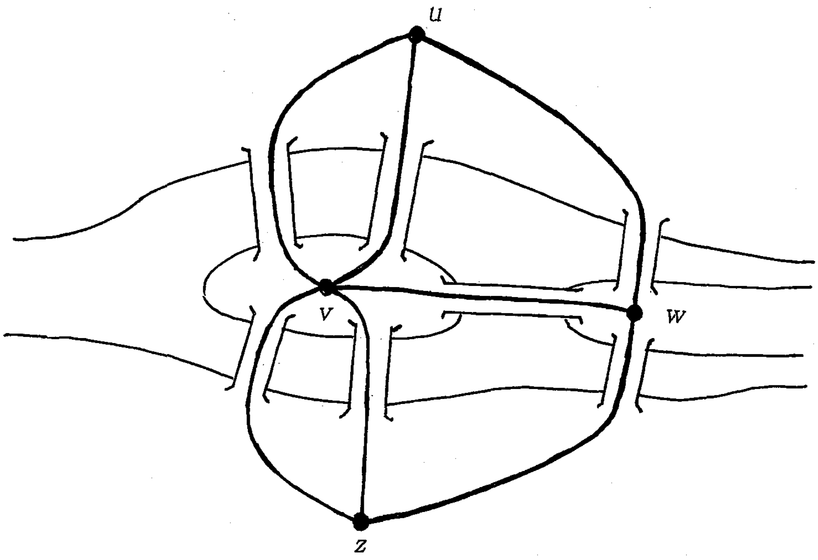


図 1

学式とグラフ理論の関係を示す仕事(例えば[20]を見よ)，キルヒホッフによる電気回路のグラフによる定式化や地図を 4 色で塗り分ける彩色問題(例えば[45]を見よ)はよく知られている．

本稿は，近年急速に進展したグラフのスペクトル幾何学について，非専門家の人々向けのサーベイを試みたものである．グラフは頂点数が有限な有限グラフと無限なものとに分かれるが，筆者がここで問題とするスペクトル幾何学の観点からは，有限グラフと無限グラフとで大きな違いが出てくるので，別々の節に分けて述べる．第 2 節において，まず，後で必要となるグラフ理論の基本事項について一通りの事柄をまとめてある．第 3 節では，有限グラフのスペクトル幾何学を扱っている．始めに隣接行列に関する有名なペロン=フロベニウスの定理と最大固有値の評価について述べ，グラフの 2 つのラプラシアンについて，彩色数との関連についてふれた後，(1) ラプラシアンの固有値の評価，(2) グラフの等スペクトル問題，(3) グラフの境界値固有値問題について，知られている結果を述べる．

無限グラフの場合には，有限グラフとは様相が一変する．ここでの大きな主題は，(1) ラプラシアンのスペクトルがどうなるか，(2) 熱核やグリーン核はどうなっているか，(3) 無限グラフの再帰性などランダムウォークの振る舞いはどうなっているか，などである．これらの 3 つの主題については，第 4 章でふれる．

第 5 章では，グラフ理論とは一見して無関係と思われるが，固有値問題としてみると非常に関係の深い有限要素法とグラフ理論との関係について述べる．有限要素法における質量行列 M と剛性行列 K が計算できて，平面グラフとの関係が示されている．この応用については今後の課題である．

最後に，歴史と展望について，第 6 章で概観したい．

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics

2 グラフ理論の基本事項

2.1 グラフとは

グラフとは，頂点の集合 V と2つの頂点を結ぶ辺の集合 E からなるもののことで，$G=(V,E)$ と書くこととする．頂点 $x\in V$ と自分自身 x を結ぶ辺をループという．2つの頂点 $x,y\in V$ について，x と y を結ぶ辺が2つ以上あるとき多重辺という．ループや多重辺をもつグラフを**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．本稿では，単純グラフのみを扱うのでグラフといえば単純グラフのことを指す．2つの頂点 x と y が辺 e で結ばれているとき，x と y は辺 e の端点で，**隣接する**といい，$x\sim y$ とかく．$x\in V$ について，x を端点とする辺の数を x の**次数**といい，$m(x)$ または $\deg(x)$ とかく．各 x について，$m(x)$ が有限値であるグラフを**局所有限グラフ**という．$m_\infty(G)=\sup\{m(x);x\in V\}$ は無限大のこともある．頂点の総数 $\#(V)$ が有限値のとき**有限グラフ**，そうでないとき**無限グラフ**という．各辺に向きを与えたグラフを**有向グラフ**という．2つの端点に**始点**と**終点**の区別を付けたものを，**有向辺**という．x を始点 y を終点とする有向辺 $e=[x,y]$ について，$\bar{e}=[y,x]$ は始点と終点を逆にした有向辺を表す．有向辺全体を $\boldsymbol{E}$ とかく．また，向きを考えないで，辺 e の両端点が x と y であることを表すときは，$e=(x,y)$ と書くものとする．

2つの頂点 x と y について，V 内の点列 $c=[v_1,v_2,\cdots,v_n,v_{n+1}]$ が x と y を結ぶ道であるとは，$v_1=x$, $v_{n+1}=y$ かつ $v_1\sim v_2\sim\cdots\sim v_n\sim v_{n+1}$ を満たすときをいう．このとき c の長さ $l(c)$ は n であるという．任意の2つの頂点について，それらを結ぶ道が必ず存在するグラフを**連結グラフ**という．本稿では常に，連結グラフを考える．また2点 x と y について，それらを結ぶ道 c をいろいろ動かしたときの長さ $l(c)$ の下限を2点 x と y の**グラフ距離**といい，$d(x,y)$ とかく．また，2点をいろいろ動かしたときのグラフ距離の上限をそのグラフの**直径**といい，$diam(G)$ とかく．グラフが有限であることと直径が有限値であることとは同等である．

2.2 グラフに付随する行列

グラフ $G=(V,E)$ に対して，それぞれ，**隣接行列**，**推移行列**と呼ばれる次の2つの行列 $A=(a_{uv})_{u,v\in V}$ と $P=(p_{uv})_{u,v\in V}$ を考える．ここで A の (u,v) 成分 a_{uv} と P の (u,v) 成分 p_{uv} は，

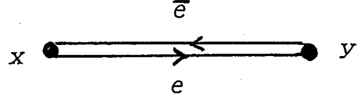


図2

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics

$$a_{uv}=\begin{cases}1 & (u\sim v)\\ 0 & (u\not\sim v)\end{cases}\qquad p_{uv}=\begin{cases}\dfrac{1}{m(u)} & (u\sim v)\\ 0 & (u\not\sim v)\end{cases}$$

と定める．ただし $u\not\sim v$ は u と v とは隣接していないことを表す．グラフ $G=(V,E)$ は隣接行列 A により完全に決まり，P はグラフ G 上の頂点を辺に沿って1ステップずつ等確率で進むランダムウォークを考えるとき，p_{uv} は頂点 u 上にいるランダムウォークが1ステップ後に v に移る確率を表している．

行列 B を A または P とするとき，$B=(b_{uv})_{u,v\in V}$ は縦ベクトル $\boldsymbol{x}=(x_v)_{x\in V}$ に自然に作用しているが，無限グラフのときにはむしろ，$\boldsymbol{x}$ を $f(v)=x_v(v\in V)$ により V 上の関数 f と考え，

$$(Bf)(u)=\sum_{v\in V}b_{uv}f(v),\qquad u\in V$$

により，V 上の関数全体のなす空間 $C(V)$ に作用していると考えた方が扱いやすい．ここでは局所有限なグラフを考えているので，上記の和は，各 u に対して v に関する有限個の和であるので面倒なことは起きていない．しかし，$f\in C(V)$ のうち，f の台 $\{u\in V;f(u)\neq 0\}$ が V の有限な部分集合である f のなす空間 $C_c(V)$ とそれを含む空間

$$L^2(V)=\{f\in C(V);\|f\|=(f,f)^{1/2}<\infty\}$$

を考えると便利なことが多い．ただし内積 (f,g) は

$$(f,g)=\sum_{u\in V}m(u)f(u)g(u)$$

を取る．このとき P は

$$(Pf,g)=(f,Pg),\qquad \|Pf\|\leqq\|f\|,\qquad (f,g\in L^2(V))$$

を満たす．

2.3 グラフのラプラシアン

次の2つの行列 Δ_A と Δ_P を考える：

$$\Delta_A=D-A,\qquad \Delta_P=I-P$$

ここで $D=(d_{uv})_{u,v\in V}$ は**次数行列**で，

$$d_{uv}=\begin{cases}m(u) & (u=v)\\ 0 & (u\neq v)\end{cases}$$

と定義され，I は単位行列である．Δ_A と Δ_P をそれぞれ**隣接ラプラシアン**，**推移ラプラシアン**と呼ぶ．これらは $L^2(V)$ 上に，それぞれ次のように作用している：$f\in L^2(V)$ に対して，

$$(\Delta_Af)(u)=m(u)f(u)-\sum_{v\sim u}f(v)=\sum_{v\sim u}(f(u)-f(v)),$$

$$\Delta_Pf(u)=f(u)-\frac{1}{m(u)}\sum_{v\sim u}f(v)=\frac{1}{m(u)}\sum_{v\sim u}(f(u)-f(v))$$

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics

である．ここで $\Sigma_{v\sim u}$ は u と隣接する頂点 v に関する和を表す．

関数 $f\in C(V)$ が**調和**であるとは，$\Delta_A f=0$ または $\Delta_P f=0$ を満たすときをいい，x において**優調和**であるとは，$\Delta_A f(x)\geqq 0$ または $\Delta_P f(x)\geqq 0$ を満たすとき，すなわち，

$$\frac{1}{m(x)}\sum_{y\sim x} f(y) \leqq f(x)$$

が成り立つときをいう．

2.4 微分とグリーンの公式

さて V 上の関数 f の微分 df を定義しよう．$C(\boldsymbol{E})$ を $\boldsymbol{E}$ 上の関数 φ で，

$$\varphi(\bar{e}) = -\varphi(e), \qquad e=[x,y]\in \boldsymbol{E}$$

をみたすもの全体とする．$f\in C(V)$ に対して，$df\in C(\boldsymbol{E})$ を

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

と定義することができる．ここで x は e の始点であり，y は e の終点である．

定理(離散的グリーンの公式)　$f_1, f_2\in C_c(V)$ に対して，次の等式が成り立つ：

$$(df_1, df_2) = (\Delta_P f_1, f_2) = \sum_{u\in V}(\Delta_A f_1)(u)f_2(u).$$

系　2つのラプラシアンはともに正値作用素である．すなわち，次式が成り立つ．

$$(\Delta_P f, f) = \sum_{u\in V}(\Delta_A f)(u)f(u) = (df, df) \geqq 0 \quad (f\in C_c(V))$$

次の定理は定義から直ちに得られるが有用である．

定理(離散的最小値原理)　$f\in C(V)$ が $x\in V$ において優調和とする．もし，

$$f(x) \leqq \min\{f(y)\,;\, y\sim x\}$$

を満たすならば，$z\sim x$ を満たす任意の z について，$f(z)=f(x)$ が成り立つ．

3 有限グラフの固有値問題

有限連結グラフの隣接行列の固有値問題については，次のペロン＝フロベニウス(Perron＝Frobenius)の定理が有名である(例えば[32]を見よ)．

定理　有限連結グラフの隣接行列 A の最大固有値を $\lambda_{\max}(A)$ とかく．このとき次が成り立つ：

(1)　A の任意の固有値 λ は，$|\lambda|\leqq\lambda_{\max}(A)$ を満たす．

(2)　$\lambda_{\max}(A)$ の重複度は1である．

(3)　$\lambda_{\max}(A)$ の固有ベクトルとして，すべての成分が正となるものを取ることができる．

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics

次の評価式が成り立つ(例えば[32]を見よ)：

定理 $p=\#(V)$ かつ $q=\#(E)$ とする.

(1) $\lambda_{\max}(A)\leqq m_\infty(G)$ が成り立つ.

(2) $\dfrac{2q}{p}\leqq\lambda_{\max}(A)\leqq\sqrt{\dfrac{2q(q-1)}{p}}$ が成り立つ．最初の不等式の等号成立は G は**正則グラフ**，つまりすべての頂点の次数が同一のグラフ，のときに限る．第2の不等式の等号成立は $G=K_p$(**完全グラフ**，つまり，すべての頂点を互いに辺で結んでできるグラフ)に限る.

(3) $G\neq K_p(p\geqq3)$ ならば，$-\sqrt{2}\leqq\lambda_{\min}(A)\leqq\lambda_{\max}(A)\leqq\sqrt{2}$ が成り立つ.

2つのラプラシアン Δ_A と Δ_P の固有値を重複度を数えて大きさの順に並べ,

$$\lambda_1^A\leqq\lambda_2^A\leqq\cdots\leqq\lambda_p^A\quad\text{および}\quad\lambda_1^P\leqq\lambda_2^P\leqq\cdots\leqq\lambda_p^P$$

とかく．ここで $p=\#(V)$ である．このとき，$\lambda_1^A=\lambda_1^P=0$ であり，その重複度は1であり，対応する固有ベクトルの成分はすべて1であるものを取ることができる.

グラフの頂点の彩色数 $\chi(G)$ については，次の関係がある.

定理

(1) (Wilf の定理[44]) $\chi(G)\leqq1+\lambda_{\max}(A)$ が成り立つ．等号成立は $G=K_p$ または C_p(p は奇数)である．ここで C_p は p 個の頂点を円状につないでできるグラフである.

(2) $X(G)\leqq\lambda_p^A$ が成り立つ．等号成立は $G=K_p$ に限る．また，$m_\infty(G)\geqq3$ かつ $G\neq K_p$ のときは $\chi(G)\leqq\dfrac{p-1}{p}\lambda_p^A$ が成り立つ[34].

Δ_A と Δ_P の固有値の下からの評価については，次の**チーガー定数**(拡大率)による評価が知られている：

$$i_P=\inf\left\{\frac{\#(\partial S)}{m(S)};\varnothing\neq S\subset V,m(S)\leqq\frac{1}{2}m(G)\right\},$$
$$i_A=\inf\left\{\frac{\#(\partial S)}{\#(S)};\varnothing\neq S\subset V,\#(S)\leqq\frac{p}{2}\right\},$$

ここで $m(S)=\Sigma_{x\in S}m(x)$ であり，$\partial S=\{e=(x,y)\in E;x\in S$ かつ $y\notin S\}$ である.

このとき次の評価が成り立つ：

定理

(1) $i_P\leqq\sqrt{2\lambda_2^P}$ が成り立つ[10].

(2) $p\geqq4$ とする．このとき

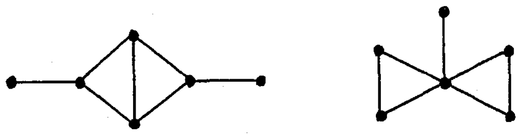
$$i_A<\sqrt{\lambda_2^A(2m_\infty(G)-\lambda_2^A)}$$

が成り立つ[26]．等号を実現するGは存在しない[34]．また，[34]によれば,

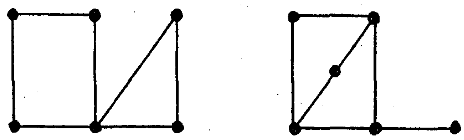
$$i_P\leqq\sqrt{\lambda_2^P(2-\lambda_2^P)}$$

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics



共スペクトルの例



Δ_A 等スペクトルの例

Δ_P 等スペクトルの例

図 3

が成り立つ．等号成立は $G=K_{1,p-1}$ に限る．ここで $K_{1,p-1}$ は星型グラフである．

固有値の上からの評価式については，次が成り立つ[37]．

定理　$s=2,3,\cdots,diam(G)$ に対して，次の不等式が成り立つ：

$$\lambda_s^A \leqq m_\infty(G)-2\sqrt{m_\infty(G)-1}\,\cos\left(\frac{\pi}{\frac{diam(G)}{2s}+1}\right),$$

$$\lambda_s^P \leqq 1-\frac{2\sqrt{m_\infty(G)-1}}{m_\infty(G)}\cos\left(\frac{\pi}{\frac{diam(G)}{2s}+1}\right).$$

有限グラフ $G=(V,E)$ の A, Δ_A, Δ_P のスペクトルをそれぞれ，Spec (G, A), Spec (G, Δ_A), Spec (G, Δ_P) とかく．2 つのグラフ G_1 と G_2 について，Spec $(G_1, A)=$ Spec (G_2, A) のとき，G_1 と G_2 とは**共スペクトル** (cospectrum)，Spec $(G_1, \Delta_A)=$ Spec (G_2, Δ_A) または Spec $(G_1, \Delta_P)=$ Spec (G_2, Δ_P) のとき，G_1 と G_2 とは**等スペクトル** (isospectrum) という．共スペクトルの最初の例は[11], [1]によって与えられた．等スペクトルの例は，[33], [12]によって与えられた．

境界付きグラフ $G=(\dot{V}\cup\partial V, \dot{E}\cup\partial E)$ とは，つぎの性質を満たすものをいう：辺の集合 E は内部の辺の集合 $\dot{E}$ と境界の辺の集合 ∂E の和集合に分割し，

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics

L_6

図4

頂点の集合 V も内部の頂点の集合 $\dot{V}$ と境界の頂点の集合 ∂V の和集合に分割しているときをいう．ただし，$e \in E$ の両端点を x と y とするとき，$e \in \dot{E}$ が成り立つのは $x \in \dot{V}$ かつ $y \in \dot{V}$ の場合に限り，$e \in \partial E$ が成り立つのは $x \in \dot{V}$ かつ $y \in \partial V$ となるか，$x \in \partial V$ かつ $y \in \dot{V}$ となる場合に限るものとする．

このとき，次の**離散ディリクレ固有値問題**も考えられる．

$$\begin{cases} \Delta_A v = \nu v & \text{on} \quad \dot{V} \\ v = 0 & \text{on} \quad \partial V \end{cases} \quad \text{または} \quad \begin{cases} \Delta_P v = \nu v & \text{on} \quad \dot{V} \\ v = 0 & \text{on} \quad \partial V \end{cases}$$

これらの問題の固有値を重複度をこめて，次のように書く．

$$\nu_1{}^A \leqq \nu_2{}^A \leqq \cdots \leqq \nu_k{}^A \quad \text{または} \quad \nu_1{}^P \leqq \nu_2{}^P \leqq \cdots \leqq \nu_k{}^P$$

ただし $k=\#(\dot{V})$ である．このとき $\nu_1{}^A$ および $\nu_1{}^P$ はともに正であり，重複度1で，すべての成分が正となる固有ベクトルを取ることができる(例えば[35]を見よ)．$\nu_1{}^P$ については，次のファーベル＝クラーン(Faber＝Krahn)型の定理が成り立つ[22], [23], [34]：

定理　$\#(\dot{E} \cup \partial E)=n$ とし，G の $\nu_1{}^P$ を $\nu_1{}^P(G)$ と表す．このとき次の不等式が成り立つ：

$$\nu_1{}^P(L_n) \leqq \nu_1{}^P(G)$$

ここで等式成立は $G=L_n$ に限る．ここで L_n は頂点数が $n+1$ の線グラフの最後の頂点と辺を境界頂点と境界辺に変えた境界付きグラフを表す．**図4**において，黒丸は内部の頂点，白丸は境界の頂点を表し，実線は内部の辺，破線は境界の辺を表す．

4　無限グラフ

無限グラフの場合には，Δ_A と Δ_P の**スペクトル**には，Spec (Δ_A) および Spec(Δ_P) とかく，連続スペクトルと重複度が無限の固有値からなる**本質的スペクトル**，Ess-Spec (Δ_A) および Ess-Spec (Δ_P) とかく，が現れ複雑な様相を呈する(例えば[35]を見よ)．

このとき Spec$(\Delta_P) \subset [0, 2]$ が成り立つ．また，$m_\infty(G) < \infty$ のときには，Spec $(\Delta_A) \subset [0, m_\infty(G)]$ が成り立つ．

例

(1)　$G=\boldsymbol{Z}^d$(d-次元整数格子よりなる無限グラフ)の場合．この場合には，Spec (Δ_P)＝Ess-Spec $(\Delta_P)=[0, 2]$ となっている．

(2)　$G=T_d$(次数が d の正則樹木である無限グラフ)の場合．ここで，樹

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics

木とは閉路を含まないグラフのことである．このとき，

$$\mathrm{Spec}\,(\varDelta_P)=\text{Ess-Spec}\,(\varDelta_P)=\left[1-\frac{2\sqrt{d-1}}{d},1+\frac{2\sqrt{d-1}}{d}\right]$$

が成り立つ．

一般の無限グラフの場合にも**チーガー定数** i_P が次のように定義される：

$$i_P=\inf\left\{\frac{\#(\partial S)}{m(S)}\,;\,\emptyset\neq S\subset V,\#(S)<\infty\right\}$$

このとき次が成り立つ(例えば[13], [40]などを見よ)．

定理　$\mathrm{Spec}\,(\varDelta_P)\subset[1-\sqrt{1-i_P},1+\sqrt{1-i_P}]\subset[0,2]$

定義　無限グラフ G の**指数体積増大度** $\mu(G)$ を

$$\mu(G)=\limsup_{r\to\infty}\frac{\log V(r)}{r}$$

と定義する．ここで $r>0$ に対して，$V(r)=\Sigma_{x\in B(r)}m(x)$ であり，$B(r)$ は固定された頂点 x_0 からグラフ距離が r より小さい頂点の集合を表す．$\mu(G)$ のこの定義は x_0 の選び方に依らない．

無限グラフ G のラプラシアン $\varDelta_P$ のスペクトル $\mathrm{Spec}\,(\varDelta_P)$ の下限 $\lambda_0(G)$ は上から次のように評価される[17]．

定理　Gを無限グラフとする．このとき次が成り立つ：

$$\lambda_0(G)\leqq 1-2e^{\mu(G)/2}(1+e^{\mu(G)})^{-1}$$

注　$G=T_d$ のときは等号成立．$\mu(G)=0$ のときは，$\lambda_0(G)=0$ を意味する．

本質的スペクトルの存在については次の結果がある．

定理

（1）　$m_\infty(G)=d<\infty$ とする．このとき $\text{Ess-Spec}\,(\varDelta_P)$ は必ず，$\left[0,1-\frac{2\sqrt{d-1}}{d}\right]$ と共通部分をもつ[37]．

（2）　G が次式を満たす樹木であれば，$\text{Ess-Spec}\,(\varDelta_P)=\{1\}$ となる[16]．

$$\limsup_{r\to\infty}K(r)=\infty,\qquad \text{ここで } K(r)=\inf\{m(x)\,;\,x\notin B(r)\}$$

である．

無限グラフでは，確率論と関連して，ランダムウォークの推移確率($\varDelta_P$ に関する熱核)とグリーン核が重要な役割を演じる．離散時刻 $t=0,1,\cdots$ に対して，$p^t(x,y)(x,y\in V)$ を逐次的に

$$p^{t+1}(x,y)=\sum_{z\in V}p(x,z)p^t(z,y)$$

と定義する．ただし $p^0(x,y)$ は y におけるディラック測度で，

$$p^0(x,y)=\begin{cases}1 & (x=y),\\ 0 & (x\neq y)\end{cases}$$

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics

である．また，$p(x,y)$ は p_{xy} のことである(2.2 を見よ)．$p^t(x,y)$ を時刻 t における熱核という．これは定義から，離散熱方程式

$$p^{t+1}(x,y)-p^t(x,y)+(\Delta_P)_x p^t(x,y)=0$$

を満たし，頂点 y に時刻 $t=0$ において単位熱量を与えたとき，時刻 t における頂点 x での熱量を表している．また，$p^t(x,y)$ は時刻 $t=0$ において頂点 x に立つランダムウォークが t 秒後に頂点 y に立つ確率を表している．級数 $\Sigma_{t=0}^{\infty} p^t(x,y)$ は無限グラフ $G=(V,E)$ の**グリーン核**と呼ばれている．任意の頂点 x と y に対して，この級数が収束するとき，このグラフは**非再帰的**(transient)，そうでないとき**再帰的**(recurrent)と呼ばれている．$G(x,y)$ は頂点 x を出発するランダムウォークが y を訪問する期待値を表すので，この名がある．無限グラフ $G=(V,E)$ が非再帰的であれば，$(\Delta_P)_x G(x,y)=p^0(x,y)$ である．

例 d-次元整数格子 $\boldsymbol{Z}^d$ は，$d\geqq 3$ のとき，非再帰的であり，$d\leqq 2$ のとき，再帰的である[29]．d 次斉次樹木 $T_d(d\geqq 3)$ は非再帰的であり，そのグリーン核は $G(x,y)=\dfrac{1}{d-2}(d-1)^{1-d(x,y)}$ である[5]．

一般の無限グラフ $G=(V,E)$ の熱核とグリーン核について考察する．このため，各頂点 y からのグラフ距離を $r_y(x)=d(x,y)(x\in V)$ とかく．そこで頂点 x における次数 $m(x)$ を次の 3 つの和に分ける，$m(x)=m_+(x)+m_0(x)+m_-(x)$：

$$m_+(x)=\#\{z\in V\,;\,z\sim x,\ r_y(z)=r_y(x)+1\},$$
$$m_0(x)=\#\{z\in V\,;\,z\sim x,\ r_y(z)=r_y(x)\},$$
$$m_-(x)=\#\{z\in V\,;\,z\sim x,\ r_y(z)=r_y(x)-1\}$$

ここで正の整数 $d>a\geqq 1$ に対して，(x_0 を中心とする) **準正則グラフ** $G(d,a)=(V(d,a),\ E(d,a))$ とは，$V(d,a)$ の固定頂点 x からのグラフ距離 r_{x_0} について，

$$m(x)=d,\quad m_+(x)=a,\quad m_-(x)=1\quad (x\in V(d,a)-\{x_0\})$$

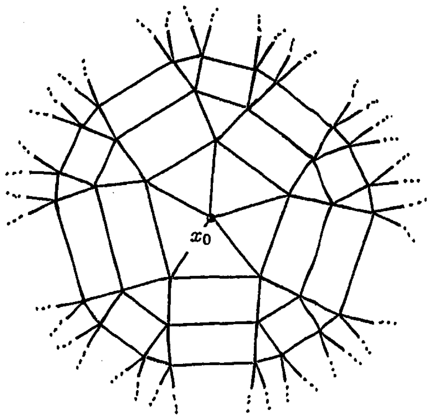


図 5

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics

を満たすものをいい，特に，x_0 を中心とする回転不変なもの，すなわち，x_0 から等距離にある任意の 2 つの頂点 x と y に対し，x_0 を固定し，$V(d,a)$ のグラフ距離を保つ写像 φ により，$y=\varphi(x)$ とできるものを考える．

準正則グラフ $G(d,a)$ の熱核とグリーン核は次のように計算される[42]．

命題 $r=d(x,x_0)$ および $c=d-1-a$, $S=\frac{a}{d}$, $T=\frac{c}{d}$, $U=\frac{1}{d}$ とおく．

（I） $t+r$ が偶数のとき，

$$p^t(x,x_0)=\sum_{p=0}^{(t-r)/2}\binom{t}{(t-r-2p)/2,\,2p,\,(t+r-2p)/2}\times S^{(t-r-2p)/2}T^{2p}U^{(t+r-2p)/2}$$

（II） $t+r$ が奇数のとき，

$$p^t(x,x_0)=\sum_{p=0}^{(t-r)/2}\binom{t}{(t-r-2p-1)/2,\,2p+1,\,(t+r-2p-1)/2}\times S^{(t-r-2p-1)/2}T^{2p+1}U^{(t+r-2p-1)/2}$$

（III） グリーン核は $G(x,x_0)=\frac{1}{a-1}a^{1-r(x)}$ と与えられる．

ここで $\binom{t}{\alpha,\beta,\gamma}=t!/\alpha!\beta!\gamma!\,(t=\alpha+\beta+\gamma)$ は 3 項係数で，$\binom{t}{\alpha}$ は 2 項係数である．

一般の無限グラフの熱核とグリーン核については，上の準正則グラフのそれらと比較することを考える．このため，次の 4 つの量を考える．

$$A=\inf\left\{\frac{m_+(x)}{m(x)};x\in V-\{y\}\right\},\qquad B=\sup\left\{\frac{m_-(x)}{m(x)};x\in V-\{y\}\right\}$$

$$C=\sup\left\{\frac{m_+(x)}{m(x)};x\in V-\{y\}\right\},\qquad D=\inf\left\{\frac{m_-(x)}{m(x)};x\in V-\{y\}\right\}$$

定理 ([41])任意の無限グラフ $G=(V,E)$ について，$y\in V$ を取り，上記の量のうち C と D を考え，$d=\left\lceil\frac{1}{D}\right\rceil$, $a=\lceil Cd\rceil$ とする．$\lceil\ \rceil$ は小数以下の切り上げを意味する．$k=\frac{d}{1+a}$ とし，$r=d(x,y)$ とおく．このとき次が成り立つ：

（I） $t+r$ が偶数のとき，

$$p^t(x,y)+kp^{t+1}(x,y)\geqq\binom{t}{(t+r)/2}\frac{a^{(t-r)/2}}{d^t}$$

（II） $t+r$ が奇数のとき，

$$p^t(x,y)+kp^{t+1}(x,y)\geqq\binom{t}{(t+r-1)/2}\frac{a^{(t-r+1)/2}}{d^t}\frac{1}{1+a}$$

（III） グリーン核については，$G(x,y)\geqq\frac{1}{a-1}a^{1-r(x)}(x\in V)$ が成り立つ．

注 (I), (II), (III)の不等式について，$c=d-1-a=0$ となる準正則グラフ $G(d,a)$ のときは等号がいずれも成立している．また，熱核とグリーン核の上からの評価も，A と B を用いて同様にできる[41], [42]．熱核 $p^t(x,y)$ の $t\to\infty$

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics

のときの漸近挙動の研究については，[25],[7]らの仕事がある．

5 有限要素法とグラフ理論

最後に，数値解析における有限要素法とグラフ理論との関係について見てみよう．有限要素法に現れるグラフは，三角形の辺と頂点から構成される平面グラフであるが頂点数がきわめて大きなグラフが現れる．本節では，従来，計算機によって行われてきた基底関数に係わる質量行列と剛性行列の計算が，共に数学的に厳密に計算され，簡略化できることを示そう．その結果，有限要素法の計算のある部分は，平面グラフの隣接行列の固有値の計算と等価であることを明らかにしたい．

平面グラフの理論が平面領域上のラプラシアンの固有値問題の漸近問題の未解決問題，例えばワイル予想，ポリア予想[35]に適用され解決される日を夢見ている．

有界な平面領域 Ω 上の次のような**ディリクレ固有値問題**を考える：

$$\begin{cases} \Delta u = \lambda u & (\Omega \text{ 上}), \\ u = 0 & (\partial\Omega \text{ 上}) \end{cases}$$

ここで $\Delta = -(\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2)$ である，ただし (x, y) は平面上の標準座標を表す．その固有値とそれに対応する固有関数で，$L^2(\Omega)$ の正規直交基底となるものをそれぞれ，$\lambda_k, u_k (k=1, 2, \cdots)$ とする．$\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$ の三角形分割 E を取り，Ω の内部にある頂点を $\{P_i\}_{i=1}^{l}$ とし，$\partial\Omega$ 上にある頂点を $\{P_i\}_{i=l+1}^{m}$ とする．以下では，この三角形分割 E によって，十分 Ω が近似されているものと仮定する．このような三角形分割 E について，その**基底関数** $\phi_i (i=1, \cdots, m)$ とは，各三角形上では高々 x と y の1次式で，$\phi_i(P_j) = \delta_{ij} (i, j=1, \cdots, m)$ を満たすものをいう．各 $\boldsymbol{u} \in \boldsymbol{R}^l$ に対して，ϕ_i の1次結合から得られる $\bar{\Omega}$ 上の関数

$$\hat{\boldsymbol{u}}(x, y) = \sum_{i=1}^{l} u_i \phi_i(x, y)$$

を考えると，その定義より $\hat{\boldsymbol{u}} = 0 (\partial\Omega \text{ 上})$ を満たしている．

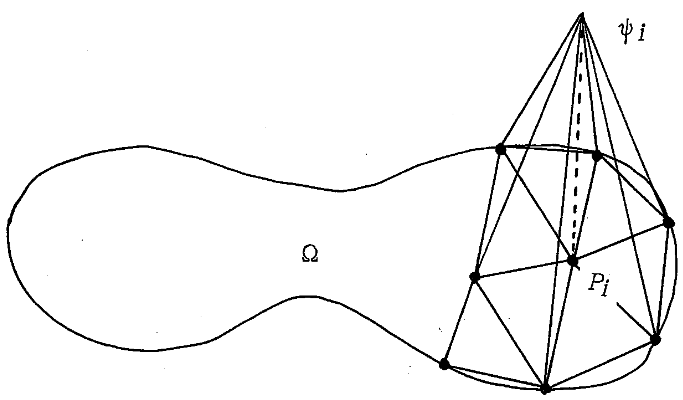


図6

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics

さて，$i, j=1, \cdots, l$ について，

$$K_{ij} = \int_\Omega \left\{ \frac{\partial \phi_i}{\partial x}\frac{\partial \phi_j}{\partial x} + \frac{\partial \phi_i}{\partial y}\frac{\partial \phi_j}{\partial y} \right\} dxdy, \qquad M_{ij} = \int_\Omega \phi_i \phi_j dxdy$$

とおいて，2つの l 次対称行列 $K=(K_{ij})$(**剛性行列**と呼ばれる)および $M=(M_{ij})$(**質量行列**と呼ばれる)について，次の**有限要素固有値問題**を考える：

$$K\boldsymbol{u} = \nu M \boldsymbol{u} \quad (\boldsymbol{u} \in \boldsymbol{R}^l)$$

この固有値問題の固有値と固有ベクトルを $\nu_k(E)$ および $\boldsymbol{u}_k(E)$ とする ($k=1, 2, \cdots, l$)．このとき次の定理が成り立つことが知られている(例えば[43]を見よ)．

定理　各 $k=1, 2, \cdots$ について，

$$\lim_{\delta(E)\to 0} \nu_k(E) = \lambda_k, \qquad \lim_{\delta(E)\to 0} \hat{\boldsymbol{u}}_k(E)(x, y) = u_k(x, y) \quad ((x, y) \in \bar{\Omega})$$

が成り立つ．ただし $\delta(E)\to 0$ は三角形分割 E を細かく取ることを意味し，$\hat{\boldsymbol{u}}_k(E)$ はベクトル $\boldsymbol{u}_k(E)$ に対応する $\phi_i(i=1, \cdots, l)$ の1次結合である．

このとき実は最近の筆者の計算では，次が成り立つ：

定理　$\bar{\Omega}$ の三角形分割 E に対し，頂点集合 V を $\{P_i\,;\, i=1, \cdots, m\}$ とし，辺集合 E を E の三角形の辺全体とするグラフ $G=(V, E)$ を考える．

(1)　$d(P_i, P_j) \geqq 2$ ならば，$K_{ij}=M_{ij}=0$ が成り立つ．ここで d は G のグラフ距離を表す．

(2)　E の各三角形は鈍角三角形ではないとする．$d(P_i, P_j)=1$ のとき，P_i と P_j を結ぶ辺 $\overline{P_iP_j}$ を共有する2つの三角形を e_μ と e_ν とし，P_i から2つの三角形に降ろした垂線と P_i を通る $\overline{P_iP_j}$ 以外の e_μ と e_ν の辺となす角をそれぞれ φ_μ および φ_ν とする．このとき次が成り立つ：

$$K_{ij} = -\frac{1}{2}(\tan\varphi_\mu + \tan\varphi_\nu), \qquad M_{ij} = \frac{1}{12}(e_\mu \text{ と } e_\nu \text{ の面積の和})$$

(3)　各 $i=1, \cdots, l$ について，P_i を共有する E の三角形 e_ν について，P_i から e_ν における対辺へ垂線をおろし，P_i を共有する2辺と垂線のなす角を φ_ν および ψ_ν とする．このとき次が成り立つ：

$$K_{ii} = \frac{1}{2}\sum_{e_\nu \ni P_i}(\tan\varphi_\nu + \tan\psi_\nu),$$

$$M_{ii} = \frac{1}{6}(P_i \text{ を共有する三角形の面積の和})$$

系　有界な平面領域 Ω について，$\bar{\Omega}$ を十分良く近似する，1辺の長さが h の正三角形よりなる三角形分割を E とする．E の頂点のうち Ω の内部にある頂点のなすグラフの隣接行列を A とする．このとき次式が成り立つ：

$$M^{-1}K = \frac{8}{h^2}(6I+A)^{-1}(6I-A)$$

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics

ただし I は l 次の単位行列である．従って，有限要素固有値問題の固有値 $\nu_1(E)\leqq\nu_2(E)\leqq\cdots\leqq\nu_l(E)$ は，A の固有値 $\lambda_1\leqq\lambda_2\leqq\cdots\leqq\lambda_l$ によって，次のように与えられる：

$$\nu_k(E)=\frac{8}{h^2}(6+\lambda_{l-k+1})^{-1}(6-\lambda_{l-k+1})\quad(k=1,\cdots,l)$$

上記の定理の系に現われた $M^{-1}K$ の右辺 $(6I+A)^{-1}(6I-A)$ について一言すると，これはいわゆるケーリー変換と呼ばれて研究されてきたものである．ここで実数値関数 $f(x)=(6+x)^{-1}(6-x)$ は，開区間 $(-6,6)$ を開区間 $(0,\infty)$ に1対1に写す単調減少関数であり，隣接行列 A の固有値とディリクレ問題の固有値とがちょうどうまく対応していることに注意して欲しい．

6 終わりに

最後に，歴史と展望についてふれよう．まず，ラプラシアンの固有値の評価については，リーマン幾何学との類比からチーガー定数による評価が有名である．これはチーガー(J. Cheeger)が1970年にリーマン多様体のラプラシアンの固有値の評価のために導入されたものであるが，ドシウク(J. Dodziuk)とケンドール(W. Kendall)らによってグラフ理論に用いられるようになって以来[10]，いろいろな人々によって研究され，有限グラフのときも無限グラフのときも重要である．有限グラフと無限グラフとでは，その定義が少し違うことに注意してほしい．砂田利一氏によれば，チーガー定数と有限グラフの各頂点に情報が伝わる時間(トランスミッション時間)との間には深い関係があるとのことである．チーガー定数の計算には，頂点数についてNP時間が必要となるので，これをわかりやすく評価すべきであるが，なにもわかっていない．

次に，等スペクトルグラフと共スペクトルグラフ，境界付きグラフのディリクレ固有値問題について述べた．1966年，カッツ(M. Kac)が有名な「Can one hear the shape of a drum ?」(Amer. Math. Monthly)という論文を発表後，直ちにフィッシャー(M. E. Fisher)[11]によりグラフの場合に反例が与えられ，J. Combinatorial Theory の第1巻で発表された([1]も見よ)．こうして，グラフの等スペクトルグラフと共スペクトルグラフが注目されるようになった．頂点数が7以下の等スペクトル，共スペクトルグラフの分類は[33]にある．頂点数が8以上の場合の分類は，大変興味ある未解決問題である．

境界付きグラフのディリクレ固有値問題の第1固有値の評価としては，1920年代に得られたファーベルとクラーンによる定理のアナロジーが知られている．境界付きグラフの固有値についてはその詳しい性質はほとんどまだわかっていない．境界付きグラフの固有値について等スペクトルなグラフを探し分類する問題も未解決である．その試みが[34]にある．

さて，無限グラフについては，まず，そのスペクトルと本質的スペクトルと

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics

を決定する問題がある．そのサーベイが[27]，[46]にある．[18]，[19]，[37]も参考にしてほしい．無限グラフのチーガー定数の評価については，[41]，[48]の結果があるが，いつチーガー定数が正数となるのかすらも，簡単にはわからないというもどかしさが残っているのが実状である．無限グラフのうち，「ケーリーグラフ」と呼ばれる(有限個の生成元をもった無限群から作られる)一連の規則的なグラフがある．これらのチーガー定数，指数体積増大度，熱核，グリーン核がどうなっているのか知りたいのであるが，それらの計算はまだ知られていないようである．また，無限グラフが再帰的か否かを判定する有効な判定法を得ることは重要な問題である．

グラフ理論の応用の１例として，有限要素法との関連を第５節で述べた．最後の系では，正三角形による三角形分割の場合に Ω の内部にある頂点の隣接行列との関係について述べたが，この隣接行列の固有値がどうなるのかよくわからない．また，別の三角形分割を考えると，たちまち K と M は隣接行列と関係が無くなり，複雑になってしまう．グラフ理論が数値解析に応用される日が来ることを夢見て，筆を置こう．非力のため筆者の極く周辺で起こったものに偏ったサーベイとなったことをお許し戴きたい．

[参考文献]

[1] Baker, G. A., Drum shapes and isospectral graphs, J. Math. Physics, 7(1966), 2238-2242.

[2] Bien, F., Constructions of telephone networks by group representations, Notices Amer. Math. Soc., 36(1989), 5-22.

[3] Brooks, R., Spectral geometry and the Cheeger constant, DIMACS Ser. Discrete Math. Theoret. Comp. Sci., 10(1993), 5-19.

[4] ——, Perry, P., and Petersen, P., On Cheeger's inequality, Comment. Math. Helv., 50 (1993), 599-621.

[5] Cartier, P., Fonctions harmoniques sur un arbre, Sympos. Math., 9(1972), 203-270.

[6] Cartright, D. I., Soardi, D. M., and Woess, W., Martin and end compactifications of non locally finite graphs, Trans. Amer. Math. Soc., 338(1993), 671-693.

[7] Coulhon, T., and Grigoryan, A., Random walks on graphs with regular volume growth, Geom. Funct. Anal.(GAFA), 8(1998), 656-701.

[8] Cvetkovic, D. M., Doob, M., and Sachs, H., Spectra of Graphs, Theory and Application, Academic Press, New York, 1980.

[9] Chung, Fan R. K., Spectral Graph Theory, Regional Conference Series in Math., CBMS, Amer. Math. Soc., 1997.

[10] Dodziuk, J., and Kendall, W. S., Combinatorial Laplacians and isoperimetgric inequality, From Local Times to Global Geomery, Control and Physics(K. D. Elworthy, ed.), Pitman, 1986, 68-74.

[11] Fischer, M. E., On hearing the shape of a drum, J. Combinatorial Theory, 1(1966), 105-125.

[12] Fujii, H., and Katsuda, A., Isospectral graphs and isoperimetric constants, Discrete Math., 207(1999), 33-52.

[13] Fujiwara, K., On the bottom of the spectrum of the Laplacian on graphs, Geometry and Its Applications(T. Nagano, eds.), World Scientific, 1993, 21-27.

[14] ——, Convergence of the eigenvalues of Laplacians in a class of finite graphs, Contemporary Math. 173(1994), 115-120.

[15] ——, Eigenvalues of Laplacians on a closed Riemannian manifold and its nets, Proc. Amer. Math. Soc., 123(1995), 2585-2594.

[16] ——, The Laplacian on rapidly branching trees, Duke Math. J., 83(1996), 191-202.

[17] ——, Growth and the spectrum of the Laplacian on an infinite graph, Tohoku Math. J.,

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics

48(1996), 293-302.
[18] Higuchi, Y., and Shirai, T., The spectrum of magnetic Schrödinger operators on a graph with periodic structure, J. Functional Analysis, 169(1999), 456-480.
[19] Higuchi, Y., A remark on exponential growth and the spectrum of the Laplacian, Kodai Math. J., 24(2001), 42-47.
[20] 細谷治夫，グラフ理論の化学物理への応用(その1〜12)，固体物理，32; 33(1997, 1998), 549-556, 629-636, 721-728, 801-810, 884-893, 965-973; 10-18, 181-189, 523-531, 603-607, 757-764, 901-908.
[22] Katsuda, A., and Urakawa, H., The first eigenvalue of the discrete Dirichlet problem for a graph, J. Combin. Math. Combin. Comp., 27(1998), 217-225.
[23] ——, The Faber-Krahn type isoperimetric inequalities for a graph, Tohoku Math. J., 51(1999), 267-281.
[24] Kawarabayashi, K., A survey on Hamiltonian cycles, Interdisciplinary Inform. Sci., 7 (2001), 25-39.
[25] Kotani, M., and Sunada, T., Albanese maps and off diagonal long time asymptotics for the heat kernels, Comm. Math. Phys., 209(2000), 633-670.
[26] Mohar, B., Isoperimetric numbers of graphs, J. Combin. Theory, Series B, 47(1989), 274-291.
[27] ——, and Woess, W., A survey on spectra of infinite graphs, Bull. London Math. Soc., 21(1989), 209-234.
[28] Ohno, Y., and Urakawa, H., On the first eigenvalue of the combinatorial Laplacian for a graph, Interdisciplinary Inform. Sci., 1(1993), 33-46.
[29] Polya, G., Über eine Aufgabe der Wahrscheinlichkeitstheorie betreffend die Irrfahrt im Strassennetz, Math. Ann., 84(1921), 149-160.
[30] Schwenk, A. J., Almost all trees are cospectral, New Directions in the Theory of Graphs, Academic Press, New York, 1973, 275-307.
[31] Shiral, T., Asymptotic behavior of the transition probability of a simple random walk on a line graph, J. Math. Soc. Japan, 52(2000), 99-108.
[32] 竹中淑子，線形代数的グラフ理論，培風館，東京，1989.
[33] Tan, Jinsong, On isospectral graphs, Interdisciplinary Infom. Sci., 4(1998), 117-124.
[34] ——, The Spectram of Combinatorial Laplacian for a Graph, Doctoral Thesis, Graduate School of Inform. Sci., Tohoku University, 2000.
[35] 浦川肇，ラプラス作用素とネットワーク，裳華房，東京，1996.
[36] Urakawa, H., Heat kernel and Green kernel comparison theorems for infinite graphs, J. Functional Analysis, 146(1997), 206-235.
[37] ——, Eigenvalue Comparison theorems of the discrete Laplacians for a graph, Geometriae Dedicata, 74(1999), 95-112.
[38] ——, A discrete analogue of the harmonic morphism, Harmonic Morphisms, Harmonic Maps and Related Topics(C. K. Anand, eds.), Chapman & Hall/CRC, 2000, 97-108.
[39] ——, A discrete analogue of the harmonic morphism and Green kernel comparison theorems, Glasgow Math. J., 42(2000), 319-334.
[40] ——, The spectrum of an infinite graph, Canadian J. Math., 52(2000), 1057-1084.
[41] ——, The Cheeger constant, the heat kernel and the Green kernel of an infinite graph (to appear).
[42] ——, The heat kernel of an infinite graph(to appear).
[43] ——, 有限要素法(数理システム科学　第7章)，放送大学大学院，東京，2002.
[44] Wilf, H. S., The eigenvalues of a graph and its chromatic numbers, J. London Math. Soc., 42(1967), 330-332.
[45] ウィルソン，R. J.; 西関隆夫，西関裕子，グラフ理論入門，近代科学社，東京，2001.
[46] Woess, W., Random walks on infinite graphs and groups-a survey on selected topics, Bull. London Math. Soc., 26(1994), 1-60.
[47] ——, Random Walks on Infinite Graphs and Groups, Cambridge University Press, London, 2000.
[48] Dodziuk, J and Karp, L, Spectral and function theory for combinatorial Laplacian, Contemp. Math., 73(1988), 25-40.
[49] Friedman, J., Some geometric aspects of graphs and their eigenfuncions, Duke Math. J., 69(1993), 487-525.

[**Abstract**] A brief survey on the spectral geometry of a finite or infinite graph is

NII-Electronic Library Service

The Japan Society for Industrial and Applied Mathematics

given.

After the adjacency matrix, discrete Laplacian and discrete Green's formula are introduced, the spectral geometry of finite graphs, particularly, estimation of the first positive eigenvalue in terms of the Cheeger constant, examples of isospectral or cospectral graphs and the Faber=Krahn type inequality are discussed.

For infinite graphs, spectrum of the discrete Laplacian, the heat kernel and Green kernel are estimated.

Finally, a relation between the finite element method for the Dirichlet boundary eigenvalue problem and the eigenvalue problem of the adjacency matrix for a graph is given.

NII-Electronic Library Service