

量子確率論とその応用

尾畑伸明 (東北大学大学院情報科学研究科)

<http://www.math.is.tohoku.ac.jp/~obata>

はじめに

量子確率論は非可換確率論,あるいは代数的確率論とも呼ばれる. 単に確率論というと, 伝統的なコルモゴロフ流の確率論を指すのが普通であるが, 本稿では, これを古典確率論と呼んで区別する. 古典確率論は確率空間 (Ω, \mathcal{F}, P) を基礎として展開されるが, 量子確率論は代数的確率空間 (\mathcal{A}, φ) を出発点とする. 代数的確率空間は, 古典確率論における確率空間を捨象し, 確率変数のなす(可換)代数と平均値 \mathbf{E} のもつ性質を抽象することで得られる概念である. もちろん, この理論の興味は非可換な \mathcal{A} を扱うところにある.

量子確率論は, フォンノイマンの有名な著書「量子力学の数学的基礎」(1932)によって拓かれたといえる. そこでは, 言葉こそ違っているが, 代数的確率空間 (\mathcal{A}, φ) を基礎とした新しい確率の計算方法が定式化された. その後, 確率論において基本的である確率変数・確率過程・条件付確率・独立性・従属性・マルコフ性などの概念が付け加わり, 理論と応用に急速な広がりを見せながら今日に至っている. 量子確率論という名称は, 量子力学の統計的諸問題に関する伝統的な研究を今日に引き継ぐものであるが, 一方で, 純粋数学的な興味からさまざまな拡張や応用が議論されている. たとえば, 自由独立性を基に構築される自由確率論 [21, 22, 43, 54, 56] は, やはりフォンノイマンの研究から派生して大きく発展したものといえよう. 題目にある量子確率論は広い意味にとっていただきたい.

この講義では,

第1回 量子確率論の基礎概念から始め,

第2回 概念的にも応用上も重要な「量子分解」を導入する.

第3回 スペクトル・グラフ理論を紹介し,

第4回 量子確率的手法を, 成長する正則グラフの漸近的スペクトル解析に応用する.

特に, 量子確率論は古典的な問題を非可換な世界を経由して議論するための枠組みとしても有用であり, さらなる発展が期待できよう. 直接の参考文献は, 次の2冊である:

1. 明出伊類似・尾畑伸明: 量子確率論の基礎, 数理情報科学シリーズ 21, 牧野書店, 2003.
2. A. Hora and N. Obata: “Quantum Probability and Spectral Analysis of Graphs,” Springer, 2007.

本稿では全く触れていないが, 量子確率論の解析的側面(量子確率解析)も重要な研究テーマである. 時間とともに変化するランダム現象に対しては, 伊藤解析をルーツとする無限次元確率解析が発展してきた. これに並行して, 伊藤解析の量子的拡張 [33] を皮切りに, 量子確率解析(無限個の非可換変数を扱う微分積分学という趣である)が展開されている [42, 50]. 量子ホワイトノイズ解析は, この一環に位置づけられる [2, 14, 35, 36, 49].

目次

1	量子確率論の基礎概念	1
1.1	代数的確率空間	1
1.2	代数的確率空間の例	2
1.2.1	全行列環	2
1.2.2	2次の全行列環 $M(2, \mathbb{C})$	5
1.2.3	全行列環の $*$ -可換部分環	6
1.2.4	古典(測度論的)確率空間	8
1.3	代数的確率変数とその分布	8
1.4	古典確率変数の代数的実現	11
2	量子分解	13
2.1	直交多項式とヤコビ係数	13
2.1.1	直交多項式の構成	13
2.1.2	チェビシェフ多項式	14
2.1.3	3項間漸化式とヤコビ係数	15
2.1.4	自由マイクスナー分布	17
2.2	相互作用フォック空間 (IFS)	20
2.3	実確率変数の量子分解	21
3	代数的グラフ理論	23
3.1	グラフ	23
3.2	隣接行列	24
3.3	隣接代数	26
3.4	特性多項式	28
3.5	パス・グラフ P_n とチェビシェフ多項式	30
3.6	発展: 完全グラフの星形積	32
4	スペクトル・グラフ理論	35
4.1	有限グラフのスペクトル	35
4.2	グラフの最大固有値	36
4.3	グラフのスペクトル分布(固有値分布)	37
4.4	スペクトルの一致するグラフ (Isospectral Graphs)	39
5	大きなグラフの漸近的スペクトル解析	40
5.1	スペクトル分布の漸近挙動	40
5.1.1	大きなパスグラフ P_n ($n \rightarrow \infty$)	40
5.1.2	大きな完全グラフ K_n ($n \rightarrow \infty$)	40
5.2	代数的確率空間としての隣接代数	42
5.2.1	トレース状態	42
5.2.2	真空状態	42

5.3	グラフの階層化と隣接行列の量子分解	43
5.3.1	グラフの階層化	43
5.3.2	隣接行列の量子分解	44
5.3.3	$\Gamma(G)$ の不変性	45
5.3.4	再論: P_n, K_n のスペクトル分布	47
5.4	スパイダーネット	48
5.5	$\Gamma(G)$ が A の量子成分に関して漸近的に不変な場合	51
5.6	展望	54
	参考文献	55

1 量子確率論の基礎概念

1.1 代数的確率空間

定義 1.1 $*$ -代数 \mathcal{A} とその上で定義された状態 φ を組にした (\mathcal{A}, φ) を代数的確率空間 (algebraic probability space) という。

この概念は非常に広いものであって、 $*$ -代数に位相的な性質 (C^* 代数等) を仮定しない。これによって、確率論で自然に現れる非有界作用素 (ガウス型確率変数, ポアソン型確率変数, 生成作用素や消滅作用素など) を量子確率論の枠組みに取り込みやすくなる。

念のため、 $*$ -代数と状態の定義を与えておこう。

定義 1.2 空でない集合 \mathcal{A} が以下の 4 条件を満たすとき、複素数体 \mathbb{C} 上の代数 (多元環) であるという:

- (i) \mathcal{A} には加法と呼ばれる写像 $\mathcal{A} \times \mathcal{A} \ni (a, b) \mapsto a + b \in \mathcal{A}$ とスカラー乗法と呼ばれる写像 $\mathbb{C} \times \mathcal{A} \ni (\lambda, a) \mapsto \lambda a \in \mathcal{A}$ が定義されていて、 \mathcal{A} は \mathbb{C} 上の線型空間である。加法の単位元 (零元) は 0 で表す。
- (ii) 積 (乗法) と呼ばれる写像 $\mathcal{A} \times \mathcal{A} \ni (a, b) \mapsto ab \in \mathcal{A}$ が定義されていて結合法則を満たす: $(ab)c = a(bc)$ 。
- (iii) 積は、各変数について線型である (分配法則を満たす)。すなわち、 $a, b \in \mathcal{A}$, $\lambda \in \mathbb{C}$ に対して、

$$a(b + c) = ab + ac, \quad (a + b)c = ac + bc, \quad \lambda(ab) = (\lambda a)b = a(\lambda b).$$

- (iv) 積の単位元 $1 = 1_{\mathcal{A}}$ が存在する。¹

代数 \mathcal{A} は、積が可換 (つまり、すべての $a, b \in \mathcal{A}$ に対して $ab = ba$) のとき可換代数、そうでないとき非可換代数と呼ばれる。

定義 1.3 代数 \mathcal{A} からそれ自身への写像 $a \mapsto a^*$ で次の 4 性質を満たすものを対合という: $a, b \in \mathcal{A}$, $\lambda \in \mathbb{C}$ に対して、

- (i) $(a + b)^* = a^* + b^*$ 。
- (ii) $(\lambda a)^* = \bar{\lambda} a^*$ 。
- (iii) $(ab)^* = b^* a^*$ 。
- (iv) $(a^*)^* = a$ 。

対合を備えた代数を $*$ -代数という。

¹代数の定義において、積の単位元の存在を仮定しない流儀も広く用いられているが、代数的確率空間の文脈では状態 (定義 1.4) が重要であるので、単位元の存在をつねに仮定する。文献によっては、単位元をもつ代数を単位的 (unital) ということもある。

定義 1.4 *-代数 \mathcal{A} 上で定義された関数 $\varphi: \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{C}$ は, 次の3つの性質を満たすとき, \mathcal{A} 上の状態 (state) と呼ばれる.

- (i) [線形性] $\varphi(\lambda a + \mu b) = \lambda\varphi(a) + \mu\varphi(b)$;
- (ii) [正值性] $a \in \mathcal{A}$ に対して $\varphi(a^*a) \geq 0$;
- (iii) $\varphi(1_{\mathcal{A}}) = 1$.

命題 1.5 *-代数 \mathcal{A} 上の状態 φ は次を満たす:

- (1) すべての $a \in \mathcal{A}$ に対して $\varphi(a^*) = \overline{\varphi(a)}$.
- (2) [Schwartz 不等式] すべての $a, b \in \mathcal{A}$ に対して $|\varphi(a^*b)|^2 \leq \varphi(a^*a)\varphi(b^*b)$.

演習 1 命題 1.5 を示せ. [ヒント: $\varphi((a + \lambda b)^*(a + \lambda b)) \geq 0$ に注意せよ.]

命題 1.6 *-代数 \mathcal{A} 上の状態の全体 $\mathfrak{S}(\mathcal{A})$ は凸集合をなす. つまり, $\varphi_1, \varphi_2 \in \mathfrak{S}(\mathcal{A})$ と $\alpha \geq 0, \beta \geq 0$ で $\alpha + \beta = 1$ を満たすものに対して, $\alpha\varphi_1 + \beta\varphi_2 \in \mathfrak{S}(\mathcal{A})$ が成り立つ.

証明 定義 1.4 の3条件を確認するだけで容易. ■

定義 1.7 *-代数 \mathcal{A} 上の状態で, 凸集合 $\mathfrak{S}(\mathcal{A})$ の端点になっているものを純粋状態 (pure state), そうでないものを混合状態 (mixed state) という. ただし, 状態 φ が凸集合 $\mathfrak{S}(\mathcal{A})$ の端点であるとは,

$$\varphi = \alpha\varphi_1 + (1 - \alpha)\varphi_2, \quad 0 < \alpha < 1, \varphi_1, \varphi_2 \in \mathfrak{S}(\mathcal{A}),$$

のように表現すれば, 必ず $\varphi_1 = \varphi_2 = \varphi$ となる時にいう.

1.2 代数的確率空間の例

1.2.1 全行列環

n 次複素行列の全体 $M(n, \mathbb{C})$ は *-代数である (行列の和, スカラー乗法, 積によって単位行列を単位元とする代数となり, 対合は共役転置をとる演算である).

状態 $\varphi: M(n, \mathbb{C}) \rightarrow \mathbb{C}$ の例をあげてから, 一般的な結果を示そう.

例 1.8 (トレース状態) 行列 $a = [a_{ij}] \in M(n, \mathbb{C})$ のトレースが

$$\text{Tr } a = \sum_{i=1}^n a_{ii}$$

で定義される. $\text{Tr } a$ は a の固有値の和 (重複も込めて和をとる) に一致する. 関数 $\varphi_{\text{tr}}: M(n, \mathbb{C}) \rightarrow \mathbb{C}$ を

$$\varphi_{\text{tr}}(a) = \frac{1}{n} \text{Tr } a, \quad a \in M(n, \mathbb{C}),$$

で定義すると, φ_{tr} は $M(n, \mathbb{C})$ 上の状態になる. 定義 1.4 の 3 条件を確認すればよい. ここでは正值性についてのみ述べよう. まず, 行列の積と対合の定義によって

$$(a^* a)_{ij} = \sum_{k=1}^n (a^*)_{ik} a_{kj} = \sum_{k=1}^n \bar{a}_{ki} a_{kj}.$$

したがって,

$$\varphi_{\text{tr}}(a^* a) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (a^* a)_{ii} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n \bar{a}_{ki} a_{ki} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n |a_{ki}|^2 \geq 0$$

となるが, これは φ_{tr} の正值性を示している.

例 1.9 (ベクトル状態) $M(n, \mathbb{C})$ は n 次元ヒルベルト空間 \mathbb{C}^n に行列の積で作用する. \mathbb{C}^n の内積は

$$\langle \xi, \eta \rangle = \sum_{k=1}^n \bar{\xi}_k \eta_k, \quad \xi = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \xi_n \end{bmatrix}, \quad \eta = \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \vdots \\ \eta_n \end{bmatrix},$$

によって定義する. 単位ベクトル $\xi \in \mathbb{C}^n$ に対して,

$$\varphi(a) = \langle \xi, a\xi \rangle, \quad a \in M(n, \mathbb{C}),$$

で定義される φ は $M(n, \mathbb{C})$ 上の状態になる (確かめよ). これを ξ に付随するベクトル状態という.

定理 1.10 $M(n, \mathbb{C})$ 上の状態 φ に対して, $\rho \in M(n, \mathbb{C})$ で 2 性質

- (i) 正定値行列である;
- (ii) $\text{Tr} \rho = 1$;

を満たすもの (密度行列と呼ぶ) が存在して,

$$\varphi(a) = \text{Tr}(\rho a), \quad a \in M(n, \mathbb{C}),$$

が成り立つ. この対応によって, $M(n, \mathbb{C})$ 上の状態と密度行列は 1 対 1 対応する. (この意味で, $M(n, \mathbb{C})$ 上の状態と密度行列は混用する.)

証明 行列単位を e_{ij} とする. つまり, $e_{ij} \in M(n, \mathbb{C})$ であって, (i, j) 成分が 1, それ以外はすべて 0 となっている. したがって, すべての $a \in M(n, \mathbb{C})$ は

$$a = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} e_{ij}, \quad a = [a_{ij}],$$

のように一意的に分解される.

さて, 与えられた φ に対して,

$$\rho_{ij} = \varphi(e_{ji}) \tag{1.1}$$

とにおいて, 行列 $\rho = [\rho_{ij}]$ を定義する.

$$\mathrm{Tr}(\rho a) = \sum_{i=1}^n (\rho a)_{ii} = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n \rho_{ik} a_{ki} = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n \varphi(e_{ki}) a_{ki} = \varphi(a)$$

となっている. ρ が φ によって一意的に定まることは (1.1) から明らか. この ρ が条件 (i), (ii) を満たしていることを示したい. 実際, (ii) は明らかである. (i) のためには, 任意の $\xi \in \mathbb{C}^n$ に対して,

$$\langle \xi, \rho \xi \rangle \geq 0 \quad (1.2)$$

を示せばよい. 行列 $a = [a_{ij}] \in M(n, \mathbb{C}^n)$ を $a_{ij} = \bar{\xi}_j \xi_i$ で定義すると,

$$\varphi(a) = \mathrm{Tr} \rho a = \sum_{i,j=1}^n \rho_{ij} a_{ji} = \sum_{i,j=1}^n \bar{\xi}_i \rho_{ij} \xi_j = \langle \xi, \rho \xi \rangle$$

が成り立つ. また, a が正定値行列であることが確かめられるので, その平方根 b (これも正定値行列) をとって, $a = b^2 = b^* b$ となる. そうすると,

$$\langle \xi, \rho \xi \rangle = \varphi(a) = \varphi(b^* b) \geq 0$$

が得られ, (1.2) が示された.

逆に (i), (ii) を満たす ρ が状態を定めることを示そう. 定義 1.4 において, 線形性と $\varphi(1_{\mathcal{A}}) = 1$ は明らかであろう. 正値性を示す. まず, ρ が正定値行列であることから, $\rho = \omega^* \omega$ と表示できることに注意しておく. そうすれば, 任意の $a \in M(n, \mathbb{C})$ に対して,

$$\varphi(a^* a) = \mathrm{Tr}(\rho a^* a) = \mathrm{Tr}(\omega^* \omega a^* a) = \mathrm{Tr}(\omega a^* a \omega^*) = \mathrm{Tr}((a \omega^*)^* (a \omega^*)) \geq 0.$$

これは, φ の正値性を示す. ■

注意 1.11 一般に, 複素行列 $a \in M(n, \mathbb{C})$ は

$$\langle \xi, a \xi \rangle \geq 0, \quad \xi \in \mathbb{C}^n,$$

を満たすとき, **正定値**であるという.² 次の3条件は同値である:

- (i) $a \in M(n, \mathbb{C})$ は正定値である;
- (ii) $a = a^*$ であり, a の固有値がすべて ≥ 0 である;
- (iii) ある $b \in M(n, \mathbb{C})$ があって $a = b^* b$ と表される.

演習 2 $M(n, \mathbb{C})$ 上の状態 φ に対して次の3条件は同値であることを示せ:

- (i) φ はベクトル状態である;
- (ii) 対応する密度行列の階数は1である;
- (iii) 純粋状態である.

²文献によっては, 上の不等式に加えて, $\xi \neq 0$ ならば $\langle \xi, \rho \xi \rangle > 0$ という条件も合わせて正定値ということもある. また, 正定値を単に正值ということもある.

1.2.2 2次の全行列環 $M(2, \mathbb{C})$

$M(2, \mathbb{C})$ の実確率変数とはエルミート行列にはかならない. 特に, パウリ行列 (Pauli matrix) が基本的である:

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

4つの実数 $x_0, x_1, x_2, x_3 \in \mathbb{R}$ に対して,

$$x_0 1 + x_1 \sigma_x + x_2 \sigma_y + x_3 \sigma_z = \begin{bmatrix} x_0 + x_3 & x_1 - ix_2 \\ x_1 + ix_2 & x_0 - x_3 \end{bmatrix} \quad (1.3)$$

となるので, すべてのエルミート行列 $a \in M(2, \mathbb{C})$ は, $a = x_0 1 + x_1 \sigma_x + x_2 \sigma_y + x_3 \sigma_z$ のように一意的に表示される ($\{1, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$ が1次独立であると言ってもよい).

さて, 定理 1.10 によって, $M(2, \mathbb{C})$ 上の状態は密度行列で表される. これを具体的に求めよう.

命題 1.12 $M(2, \mathbb{C})$ 上の状態 ρ は, $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq 1$ を満たす $x_1, x_2, x_3 \in \mathbb{R}$ によって,

$$\rho = \frac{1}{2}(1 + x_1 \sigma_x + x_2 \sigma_y + x_3 \sigma_z) \quad (1.4)$$

のように一意的に表示される. 対応 $\rho \mapsto (x_1, x_2, x_3)$ は, $\mathfrak{S}(M(2, \mathbb{C}))$ から3次元単位球 $B^3 = \{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3; x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq 1\}$ の上への1対1アフィン写像である.

証明 $M(2, \mathbb{C})$ 上の状態 ρ は $\text{Tr } \rho = 1$ を満たす正定値行列である. したがって, (1.3) のような表示ができ, $\text{Tr } \rho = 1$ から $x_0 = 1/2$ がわかる. したがって, あらためて,

$$\rho = \frac{1}{2}(1 + x_1 \sigma_1 + x_2 \sigma_2 + x_3 \sigma_3), \quad x_1, x_2, x_3 \in \mathbb{R}, \quad (1.5)$$

とおくことができる. 容易にわかるが, ρ の2つの固有値は, $(1 \pm \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2})/2$ である. したがって, ρ が正定値であるための必要十分条件は,

$$1 - \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} \geq 0 \iff x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq 1.$$

まとめると, $\rho \in M(2, \mathbb{C})$ が密度行列であるための必要十分条件は ρ が (1.4) のように表されることである. 表示の一意性はすでに明らかであり, 写像 $\rho \mapsto (x_1, x_2, x_3)$ は $\mathfrak{S}(M(2, \mathbb{C}))$ から3次元単位球 B^3 の上への1対1写像である. さらに, (1.5) の形から, この対応は凸集合 $\mathfrak{S}(M(2, \mathbb{C}))$ から B^3 へのアフィン写像であることがわかる. ■

命題 1.12 によって, 凸集合 $\mathfrak{S}(M(2, \mathbb{C}))$ は3次元単位球 $B^3 = \{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3; x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq 1\}$ と同型である. したがって, $M(2, \mathbb{C})$ 上の純粋状態は凸集合 B^3 の端点, すなわち, 球面 $S^2 = \{(x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3; x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1\}$ に対応する. よって, $M(2, \mathbb{C})$ 上の純粋状態 ρ は, $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$ を満たす $x_1, x_2, x_3 \in \mathbb{R}$ によって,

$$\rho = \frac{1}{2}(1 + x_1 \sigma_1 + x_2 \sigma_2 + x_3 \sigma_3) \quad (1.6)$$

のように一意的に表示される.

演習 3 $(x_1, x_2, x_3) \in S^2$ の極座標表示を

$$x_1 = \sin \theta \cos \phi, \quad x_2 = \sin \theta \sin \phi, \quad x_3 = \cos \theta, \quad 0 \leq \theta \leq \pi, \quad 0 \leq \phi < 2\pi,$$

とし、対応する $M(2, \mathbb{C})$ 上の状態を ρ とする. さらに, $\omega \in \mathbb{C}^2$ を

$$\omega = e^{i\alpha} \begin{bmatrix} e^{-i\phi/2} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi/2} \sin(\theta/2) \end{bmatrix}$$

と定義する. このとき, $\|\omega\| = 1$ であり,

$$\text{Tr}(\rho a) = \langle \omega, a\omega \rangle, \quad a \in M(2, \mathbb{C}).$$

が成り立つことを示せ. [つまり, 純粋状態 ρ はベクトル状態であり, ω が対応する状態ベクトルとなる. 状態ベクトルは, 位相因子 $e^{i\alpha}$ を除いて一意的に定まる.]

1.2.3 全行列環の *-可換部分環

n 次元ベクトル空間 \mathbb{C}^n は, 座標ごとの積で代数になる. さらに, 対合 $a \mapsto a^*$ を

$$a^* = \begin{bmatrix} \bar{a}_1 \\ \bar{a}_2 \\ \vdots \\ \bar{a}_n \end{bmatrix}, \quad a = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^n,$$

で定義して, \mathbb{C}^n は *-代数となる.

定理 1.13 *-代数 \mathbb{C}^n 上の状態 φ に対して, 数列 p_1, p_2, \dots, p_n で 2 性質

- (i) $p_i \geq 0$;
- (ii) $\sum p_i = 1$;

を満たすものが存在して,

$$\varphi(a) = \sum_{i=1}^n p_i a_i \quad a \in \mathbb{C}^n,$$

が成り立つ. この対応によって, *-代数 \mathbb{C}^n 上の状態と $n-1$ 次元単体

$$\left\{ (p_1, \dots, p_n) \in \mathbb{R}^n; p_i \geq 0, \sum_{i=1}^n p_i = 1 \right\} \quad (1.7)$$

はアフィン同型になる.

注意 1.14 $n-1$ 次元単体 (1.7) は $\{1, 2, \dots, n\}$ 上の (普通の意味での) 確率分布の全体を表している.

注意 1.15 $*$ -代数 \mathbb{C}^n 上の純粋状態は, $n-1$ 次元単体 (1.7) の端点に対応し, 全部でちょうど n 個ある. さらに, 任意の状態は純粋状態の凸結合として一意的にかけることがわかる. 一方, 命題 1.12 で見たように, $M(2, \mathbb{C})$ 上の任意の状態は純粋状態の凸結合で書けるが, その表示の一意性はない. これは注目すべき違いである.

演習 4 定理 1.13 を証明せよ.

$*$ -代数 \mathbb{C}^n から $*$ -代数 $M(n, \mathbb{C})$ への写像 Δ を

$$\Delta(a) = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_2 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & a_n \end{bmatrix}, \quad a = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^n,$$

で定義すると, Δ は次の性質をもつ.

- (i) [線形性] $\Delta(\lambda a + \mu b) = \lambda \Delta(a) + \mu \Delta(b)$;
- (ii) [積を保つ] $\Delta(ab) = \Delta(a)\Delta(b)$;
- (iii) [$*$ -写像] $\Delta(a^*) = \Delta(a)^*$;
- (iv) [単位的] $\Delta(1) = 1$ (左辺の 1 は \mathbb{C}^n の単位元, 右辺の 1 は $M(n, \mathbb{C})$ の単位元, つまり単位行列);
- (v) [単射] Δ は単射 (条件 (i) の下では, $\Delta(a) = 0$ となるのは $a = 0$ に限ることと同値).

以上の性質を合わせて, Δ は**中への $*$ -同型** であるという.³

したがって, Δ の像 $\Delta(\mathbb{C}^n)$ は $M(n, \mathbb{C})$ の $*$ -部分代数になる. これは, $M(n, \mathbb{C})$ の対角行列の全体 $\text{Diag}(n, \mathbb{C})$ に一致する. こうして,

$$\Delta : \mathbb{C}^n \rightarrow \text{Diag}(n, \mathbb{C}) \subset M(n, \mathbb{C})$$

は $*$ -同型写像になる.

$\text{Diag}(n, \mathbb{C})$ は可換な $*$ -代数である. $M(n, \mathbb{C})$ の可換な $*$ -部分代数で $\text{Diag}(n, \mathbb{C})$ を真に含むものは存在しない (このことを $\text{Diag}(n, \mathbb{C})$ は極大可換部分代数であるという).

演習 5 $M(n, \mathbb{C})$ 上の状態は密度行列 ρ で表されることを思い出そう. さて,

$$\varphi(a) = \text{Tr}(\rho \Delta(a)), \quad a \in \mathbb{C}^n,$$

は \mathbb{C}^n 上の状態になることを示せ. この φ は ρ によって定まるので φ_ρ と書くことにする. $\varphi_\rho = \varphi_{\rho'}$ となるのは, ρ, ρ' がどのような関係にあるときか?

³一般に, \mathcal{A}, \mathcal{B} を 2 つの $*$ -代数とすると, 写像 $f : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B}$ が (i)–(iv) をみたすとき, **$*$ -準同型写像** と呼ばれる. これが単射なら**中への $*$ -準同型写像**, 全単射なら **$*$ -同型写像** という. ただし, $*$ -代数に積の単位元の存在を仮定しない流儀を採用すれば, それに応じて, 条件 (iv) を落とすなどの変更が加わる.

1.2.4 古典 (測度論的) 確率空間

(Ω, \mathcal{F}, P) を古典確率空間とする.

$$L^{\infty-}(\Omega) = \bigcap_{1 \leq p < \infty} L^p(\Omega)$$

はすべての次数のモーメントが有限になる \mathbb{C} -値確率変数の全体である. 明らかに, $L^{\infty-}(\Omega)$ は積で閉じており, 可換な $*$ -代数になる. 確率変数 X の平均値

$$\mathbf{E}(X) = \int_{\Omega} X(\omega)P(d\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} x\mu_X(dx)$$

は $L^{\infty-}(\Omega)$ 上の状態になる. したがって, $(L^{\infty-}(\Omega), \mathbf{E})$ は代数的確率空間になる. これを古典確率空間 (Ω, \mathcal{F}, P) に対応する代数的確率空間と呼ぶ. 多くの問題では, 確率空間そのものより確率変数およびその分布が重要である. その意味で, 代数的確率空間 $(L^{\infty-}(\Omega), \mathbf{E})$ には古典確率空間 (Ω, \mathcal{F}, P) のもつ (確率論的に本質的な) 情報がすべて移っている.

注意 1.16 古典確率空間 (Ω, \mathcal{F}, P) の有界な確率変数の全体 $L^{\infty}(\Omega)$ は $L^{\infty-}(\Omega)$ の $*$ -部分代数であるから, $(L^{\infty}(\Omega), \mathbf{E})$ もまた代数的確率空間である. これも (Ω, \mathcal{F}, P) の (確率論的に本質的な) 情報をすべて保ち, しかも, $L^{\infty}(\Omega)$ は可換なフォンノイマン環になるなど有用な性質をもつ. しかしながら, ガウス型確率変数やブラウン運動などの重要な確率変数は非有界であるから, $L^{\infty}(\Omega)$ には属さず, $(L^{\infty-}(\Omega), \mathbf{E})$ を扱う必要がある.

上記では古典確率空間に代数的確率空間を対応させたが, 得られた代数的確率空間は可換な $*$ -代数に状態を合わせたものになっている. 代数的確率空間 (\mathcal{A}, φ) は, \mathcal{A} が可換なとき古典的と呼ばれることがある. 実際, \mathcal{A} が可換な C^* -代数であれば, コンパクト・ハウスドルフ空間 X とその上のボレル確率測度 μ が存在し,

$$\varphi(a) = \int_X \hat{a}(x)\mu(dx), \quad a \in \mathcal{A},$$

が成り立つ. ここで $a \mapsto \hat{a}$ は \mathcal{A} から連続関数環 $C(X)$ の上への同型 (ゲルファント写像) である. 特に, 2つの代数的確率空間 $(\mathcal{A}, \varphi), (C(X), \mu)$ は同型である (これをゲルファントの表現定理という).

1.3 代数的確率変数とその分布

定義 1.17 代数的確率空間 (\mathcal{A}, φ) が与えられたとき, 各 $a \in \mathcal{A}$ を代数的確率変数, または単に確率変数と呼ぶ. 特に $a = a^*$ をみたすときには**実確率変数**という.

確率変数 $a \in \mathcal{A}$ に対して,

$$\varphi(a^{\epsilon_1} a^{\epsilon_2} \cdots a^{\epsilon_m}), \quad \epsilon_1, \dots, \epsilon_m \in \{1, *\},$$

の形の量を a の**混合モーメント**と総称する. 特に, $\varphi(a)$ を a の φ における**平均**という. 代数的確率変数の統計的性質は混合モーメントで与えられる.

実確率変数 $a = a^*$ に対してはモーメント列

$$\varphi(a^m), \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

が確率変数を特徴づける. ($m = 0$ のときは $a^0 = 1_{\mathcal{A}}$ とする.) 実確率変数に対しては,

$$\varphi((a - \varphi(a))^2) = \varphi(a^2) - \varphi(a)^2$$

を a の φ における分散という.

定義 1.18 2つの代数的確率空間 (\mathcal{A}, φ) , (\mathcal{B}, ψ) の確率変数 a, b は, その混合モーメントがすべて一致するときに**確率同値**であるといい,

$$a \stackrel{M}{=} b$$

のように表す.⁴ a, b が実確率変数であれば, すべてのモーメント列が一致すれば確率同値になる.

演習 6 実確率変数 a の分散が $\varphi((a - \varphi(a))^2) = 0$ であれば, a と $\varphi(a)1$ が確率同値であることを示せ. [シュワルツの不等式によって, $\varphi((a - \varphi(a))^m) = 0$, $m = 1, 2, \dots$, が導ける. これを利用すれば, $\varphi(a^m) = \varphi(a)^m$ がわかる.]

代数的確率空間の実確率変数に対する基本定理を述べよう.

定理 1.19 代数的確率空間 (\mathcal{A}, φ) の実確率変数 $a = a^*$ に対して,

$$\varphi(a^m) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^m \mu(dx), \quad m = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.8)$$

をみたす \mathbb{R} 上のボレル確率測度 μ が存在する. これを a の φ における**スペクトル分布**という.

証明 簡単のため, $m = 0, 1, 2, \dots$ に対し, $M_m = \varphi(a^m)$ とおく. これは, $M_0 = 1$ から始まる実数の無限列になる. 実対称行列

$$Q_m = \begin{bmatrix} M_0 & M_1 & \cdots & M_m \\ M_1 & M_2 & \cdots & M_{m+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ M_m & M_{m+1} & \cdots & M_{2m} \end{bmatrix}, \quad m = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.9)$$

を考えよう. $\xi_0, \dots, \xi_m \in \mathbb{C}$ に対して,

$$\sum_{i,j=0}^m \bar{\xi}_i (Q_m)_{ij} \xi_j = \sum_{i,j=0}^m \bar{\xi}_i M_{i+j} \xi_j = \sum_{i,j=0}^m \bar{\xi}_i \varphi(a^{i+j}) \xi_j$$

⁴M はモーメントの頭文字をとっている. [31] では, S を付しているが, 複数の意味でよく使われる「確率収束」を想起するため記号を変更した.

$$= \sum_{i,j=0}^m \varphi(\bar{\xi}_i \xi_j a^i a^j) = \varphi\left(\left(\sum_{i=0}^m \xi_i a^i\right)^* \left(\sum_{j=0}^m \xi_j a^j\right)\right) \geq 0$$

すなわち, すべての $m = 0, 1, 2, \dots$ に対して, Q_m は正定値行列である. したがって, ハンケル行列式について, $\Delta_m \equiv \det Q_m \geq 0$ である. ある $m \geq 1$ で $\Delta_m = 0$ となったとしよう. 特に, Q_m は 0 を固有値にもつので, その固有ベクトルを考えれば,

$$\sum_{j=0}^m (Q_m)_{ij} c_j = 0, \quad i = 0, 1, \dots, m.$$

となるゼロベクトルでない $(c_0, c_1, \dots, c_m)^t \in \mathbb{C}^{m+1}$ が存在する. Q_m が Q_{m+1} の部分行列になっていることに注意すれば, $c_{m+1} = 0$ として,

$$\sum_{i,j=0}^{m+1} \bar{c}_i (Q_{m+1})_{ij} c_j = \sum_{i,j=0}^m \bar{c}_i (Q_{m+1})_{ij} c_j = \sum_{i,j=0}^m \bar{c}_i (Q_m)_{ij} c_j = 0.$$

つまり, Q_{m+1} も退化していて, 固有値に 0 をもつ. よって, $\Delta_{m+1} = \det Q_{m+1} = 0$. まとめると, ハンケル行列式 $\Delta_m \equiv \det Q_m$ について,

- (i) すべての m に対して $\Delta_m > 0$; または,
- (ii) ある $m_0 \geq 1$ が存在して $\Delta_0 > 0, \dots, \Delta_{m_0-1} > 0, \Delta_{m_0} = \dots = 0$ が成り立つ.

ハンブルガーの定理 [11, 53] によって, この性質が確率分布のモーメント列を特徴づけることが知られており,

$$M_m = \int_{-\infty}^{+\infty} x^m \mu(dx), \quad m = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.10)$$

を満たす確率分布 μ が存在する. これが求めたかったものである. ■

注意 1.20 定理 1.19 に述べた分布 μ の一意性は難しい問題 (モーメント非決定性問題) である. 簡単な十分条件としてカルレマン条件がよく知られている. すなわち, モーメント列 $\{M_m\}$ が

$$\sum_{m=0}^{\infty} M_{2m}^{-\frac{1}{2m}} = +\infty$$

を満たせば,

$$M_m = \int_{-\infty}^{+\infty} x^m \mu(dx), \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

を満たす確率分布 (ボレル確率測度) μ は一意的に定まる [53]. たとえば, コンパクト台をもつ確率分布, ガウス分布やポアソン分布に対しては一意性が成り立つ. しかし, ガウス分布に従う確率変数の 3 乗や数理ファイナンス等によく扱われる対数正規分布に対しては一意性が成り立たない.

例 1.21 代数的確率空間 $(M(2, \mathbb{C}), \varphi_{\text{tr}})$ を考えよう.

$$a = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

は実確率変数 ($a = a^*$) であり, そのモーメント列は,

$$\varphi_{\text{tr}}(a^m) = \begin{cases} 1, & m \text{ が偶数のとき,} \\ 0, & m \text{ が奇数のとき} \end{cases}$$

で与えられる. 明らかに,

$$\varphi_{\text{tr}}(a^m) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^m \frac{1}{2} (\delta_{-1} + \delta_{+1})(dx), \quad m = 1, 2, \dots$$

したがって, a のスペクトル分布は, ベルヌイ分布 $(\delta_{-1} + \delta_{+1})/2$ に一致する. この意味で, a は(ふつうの)コイン投げの「確率モデル」を与えている(次節 1.4 を参照).

1.4 古典確率変数の代数的実現

定義 1.22 古典確率空間 (Ω, \mathcal{F}, P) で定義された確率変数 X に対して,

$$\varphi(a^m) = \mathbf{E}(X^m) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^m \mu_X(dx), \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

を満たす代数的確率変数 a (と代数的確率空間 (\mathcal{A}, φ)) を X の代数的実現と呼ぶ.

コイン投げは

$$P(X = -1) = P(X = 1) = \frac{1}{2}$$

を満たす古典的確率変数 X によってモデル化される. そのモーメント列は,

$$\mathbf{E}[X^m] = \begin{cases} 1, & m \text{ が偶数のとき,} \\ 0, & m \text{ が奇数のとき} \end{cases}$$

となる. 例 1.21 でみたように, 代数的確率空間 $(M(2, \mathbb{C}), \varphi_{\text{tr}})$ の実確率変数

$$a = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

をとれば,

$$\mathbf{E}[X^m] = \varphi_{\text{tr}}(a^m), \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

が成り立つ. したがって, a は X の代数的実現である.

代数的実現は一意的ではない. このことを例で確認しておこう. $M(2, \mathbb{C})$ 上にベクトル状態

$$\psi(b) = \langle e_0, be_0 \rangle, \quad e_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix},$$

を考えて、別の代数的確率空間 $(M(2, \mathbb{C}), \psi)$ を考えよう。しかしながら、上と同じ a に対して、

$$\psi(a^m) = \begin{cases} 1, & m \text{ が偶数のとき,} \\ 0, & m \text{ が奇数のとき} \end{cases}$$

が成り立つ。したがって、これも X の代数的実現である。

演習 7 $P(X = 1) = p, P(X = -1) = 1 - p$ ($0 \leq p \leq 1$) を満たす確率変数 X の代数的実現を 1 つ構成せよ。

古典確率変数の代数的実現の作り方は多様である。ここで、古典確率変数を代数的確率変数とみなす標準的の方法を説明しておく。実確率変数 $X \in L^\infty(\Omega)$ に対してヒルベルト空間 $L^2(\Omega)$ に働く掛け算作用素 M_X を

$$(M_X \xi)(\omega) = X(\omega)\xi(\omega), \quad \xi \in L^2(\Omega),$$

で定義する (一般には、定義域を制限する必要がある)。 M_X は有界とは限らない自己共役作用素になる。 Ω 上で定数 1 をとる関数 $1 \in L^2(\Omega)$ に対応するベクトル状態を φ_0 とする。このとき、

$$\mathbf{E}(X^m) = \int_{\Omega} X^m(\omega) P(d\omega) = \langle 1, M_X^m 1 \rangle = \varphi_0(M_X^m), \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

が成り立つ。つまり、 X と M_X は確率同値であり、 M_X は X の代数的実現となる。

注意 1.23 ヒルベルト空間上の自己共役作用素 A は、そのスペクトル表示を考えれば、掛け算作用素によって表現される。したがって、1 つの自己共役作用素とある状態を考え合わせることで、実確率変数を 1 つ考えることは同じことである。古典確率変数を量子確率論の枠組みに取り入れることで、古典確率論では見えにくい非可換構造を用いた解析が可能になる (典型的には量子分解)。同様のアイデアで、自己共役作用素を量子確率論の手法で解析することができる (たとえば、グラフのスペクトル解析)。

2 量子分解

2.1 直交多項式とヤコビ係数

2.1.1 直交多項式の構成

実数 \mathbb{R} 上のボレル確率測度で, すべての次数のモーメントが有限になるものの全体を $\mathfrak{P}_{\text{fm}}(\mathbb{R})$ とおく. $\mu \in \mathfrak{P}_{\text{fm}}(\mathbb{R})$ に対して

$$M_m = M_m(\mu) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^m \mu(dx) \quad (2.1)$$

によって定義される実数列 $\{M_0 = 1, M_1, \dots\}$ を μ のモーメント列という. 以下, $\mu \in \mathfrak{P}_{\text{fm}}(\mathbb{R})$ とする. 単項式列 $1, x, x^2, x^3, \dots \in L^2(\mathbb{R}, \mu)$ にシュミットの直交化を施して得られる多項式列

$$P_0(x) = 1, \quad P_n(x) = x^n - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\langle x^n, P_k(x) \rangle}{\|P_k\|^2} P_k(x), \quad n \geq 1, \quad (2.2)$$

を μ に付随する直交多項式という. ただし, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ は $L^2(\mathbb{R}, \mu)$ の内積

$$\langle f, g \rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{f(x)} g(x) \mu(dx), \quad f, g \in L^2(\mathbb{R}, \mu),$$

であり, $\|\cdot\|$ はノルムである:

$$\|f\| = \langle f, f \rangle^{1/2}, \quad f \in L^2(\mathbb{R}, \mu).$$

各 $P_n(x)$ の最高次係数を 1 とする規格化を採用していることに注意しよう.

直交化の手続き (2.2) が途中で終わる場合がある. つまり, ある $N \geq 1$ があって,

$$\|P_0\| > 0, \quad \dots, \quad \|P_{N-1}\| > 0, \quad \|P_N\| = 0,$$

となることがある. このときは, 直交化の手続きが継続できず,

$$P_0, P_1, \dots, P_{N-1}$$

が得られた時点で終了するものとする. このことが起こるのは, 確率分布 μ の台が丁度 N 個の点からなるときに限ることが示される. 台が有限個の点から成るような確率分布を有限型, そうでないときは無限型と呼ぶことにする.

演習 8 (1) N 次多項式 $f(x)$ で

$$\|f\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 \mu(dx) = 0$$

を満たすものが存在するとき, $|\text{supp } \mu| \leq N$ であることを示せ.

(2) $|\text{supp } \mu| = N$ のとき, $\{1, x, x^2, \dots, x^{N-1}\}$ は 1 次独立であり, $\{1, x, x^2, \dots, x^{N-1}, x^N\}$ は 1 次従属になることを示せ.

確率測度が与えられたとき, 単項式列 $1, x, x^2, \dots$ にシュミットの直交化を直接施すのは困難な場合が多い. 多項式の無限列 $\{P_0(x) = 1, \dots, P_n(x) = x^n + \dots, \dots\}$ が

$$\int_{\mathbb{R}} P_m(x) P_n(x) \mu(dx) = 0, \quad m \neq n, \quad (2.3)$$

を満たせば, $\{P_n(x)\}$ は μ に付随する直交多項式となる.

注意 2.1 モーメントの非決定性から, 直交多項式から確率測度は一意的には定まらないので注意しよう. つまり, 異なる確率分布が共通の直交多項式をもつことがある. さらに, 多項式の有限列 $\{P_0(x) = 1, \dots, P_{N-1}(x) = x^{N-1} + \dots\}$ が (2.3) を満たして, かつ $\text{supp } \mu = N$ であったとしても確率測度 μ は一意に定まらない. たとえば, $\{1, x\}$ は, $pa + (1-p)b = 0$, $0 < p < 1$, $a \neq b$, を満たす限り, 2点分布 $\mu = p\delta_a + (1-p)\delta_b$ の直交多項式である.

2.1.2 チェビシエフ多項式

例 2.2 (第1種チェビシエフ多項式) $n = 0, 1, 2, \dots$ に対して

$$\cos n\theta = T_n(\cos \theta)$$

を満たす n 次多項式 $T_n(x)$ を第1種チェビシエフ多項式 (Chebyshev polynomials of the first kind) と呼ぶ. 基準化する (最高次の係数を 1 とする) ために,

$$\tilde{T}_0(x) = 1, \quad \tilde{T}_n(x) = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{n-2} T_n\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right), \quad n = 1, 2, \dots,$$

とおくと, $\{\tilde{T}_n(x)\}$ は, (平均 0, 分散 1 となるように) 正規化された逆正弦則

$$\frac{dx}{\pi\sqrt{2-x^2}}, \quad |x| < \sqrt{2},$$

に付随する直交多項式であり, ヤコビ係数は $\{\alpha_n \equiv 0\}$, $\{\omega_1 = 1, \omega_2 = \omega_3 = \dots = 1/2\}$.

例 2.3 (第2種チェビシエフ多項式) $n = 0, 1, \dots$ に対して

$$\frac{\sin(n+1)\theta}{\sin \theta} = U_n(\cos \theta)$$

で定義される n 次多項式 $U_n(x)$ を第2種チェビシエフ多項式 (Chebyshev polynomials of the second kind) と呼ぶ. 基準化するために,

$$\tilde{U}_n(x) = U_n\left(\frac{x}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

とおく. $\{\tilde{U}_n(x)\}$ は正規化された半円則

$$\frac{1}{2\pi} \sqrt{4-x^2} dx, \quad |x| \leq 2,$$

に付随する直交多項式であり, ヤコビ係数は $\{\alpha_n \equiv 0\}$, $\{\omega_n \equiv 1\}$ で与えられる.

演習 9 三角関数の加法定理を利用して,

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1, & T_1(x) &= x, & T_{n+1}(x) - 2xT_n(x) + T_{n-1}(x) &= 0, \\ U_0(x) &= 1, & U_1(x) &= 2x, & U_{n+1}(x) - 2xU_n(x) + U_{n-1}(x) &= 0 \end{aligned}$$

を証明せよ. [第1種, 第2種チェビシェフ多項式は同じ漸化式を満たすが, 初期条件が異なるのである.] これらを用いて, 例 2.2, 例 2.3 の内容を確認せよ.

2.1.3 3項間漸化式とヤコビ係数

定理 2.4 (3項間漸化式:無限型の場合) $\mu \in \mathfrak{P}_{\text{fm}}(\mathbb{R})$ を無限型の確率分布とし, $\{P_n\}_{n=0}^{\infty}$ を μ に付随する直交多項式とする. このとき, 2つの数列 $\{\alpha_n\}_{n=1}^{\infty}$ と $\{\omega_n\}_{n=1}^{\infty}$ で $\alpha_n \in \mathbb{R}$, $\omega_n > 0$ を満たすものがあって,

$$\begin{cases} P_0(x) = 1, \\ P_1(x) = x - \alpha_1, \\ xP_n(x) = P_{n+1}(x) + \alpha_{n+1}P_n(x) + \omega_n P_{n-1}(x), \quad n = 1, 2, \dots, \end{cases} \quad (2.4)$$

が成り立つ. さらに,

$$\|P_0\| = 1, \quad \|P_n\| = \sqrt{\omega_1 \omega_2 \cdots \omega_n}, \quad n \geq 1, \quad (2.5)$$

が成り立つ.

定理 2.5 (3項間漸化式:有限型の場合) 確率分布 $\mu \in \mathfrak{P}_{\text{fm}}(\mathbb{R})$ が有限型であるとし, その台が $N \geq 1$ 個の点からなるものとする. $\{P_n\}_{n=0}^{N-1}$ を μ に付随する直交多項式とする. このとき, 2組の有限数列 $\{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_{N-1}\}$, $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\}$ があって, (2.4) が $1 \leq n \leq N-1$ に対して成り立つ.¹ さらに, (2.5) は $1 \leq n \leq N-1$ に対して成り立つ.

定理 2.4 の証明は容易で, よく知られているので省略する. [11, 31, 53] などを見よ. 定理 2.5 も同様であるが, 直交化の手続きが終わる段階で若干の変更をすることになる. 無限型, 有限型いずれの場合も,

$$\alpha_1 = M_1(\mu) = \int_{-\infty}^{+\infty} x\mu(dx), \quad \omega_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \alpha_1)^2 \mu(dx).$$

つまり, α_1 と ω_1 はそれぞれ μ の平均と分散である.

上の2つの定理を統一し, 今後の議論をしやすくするために, 用語を導入しておこう.

定義 2.6 実数列の組 $(\{\omega_n\}, \{\alpha_n\})$ で次の条件 (i) を満たすものを**無限型のヤコビ係数**, (ii) を満たすものを**有限型のヤコビ係数**と呼ぶ.

- (i) [無限型] $\{\omega_n\} = \{\omega_1, \omega_2, \dots\}$ は正の実数の無限列 (すべての $n \geq 1$ に対して $\omega_n > 0$), $\{\alpha_n\} = \{\alpha_1, \alpha_2, \dots\}$ は実数の無限列である.

¹最後の番号の定数 ω_{N-1}, α_N は, (2.4) において $P_N = 0$ とおいた関係式 $xP_{N-1}(x) = \alpha_N P_{N-1}(x) + \omega_{N-1} P_{N-2}(x)$ から決定される.

- (ii) [有限型] 自然数 $N \geq 1$ があって, $\{\omega_n\} = \{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_{N-1}\}$ は $N-1$ 項からなる正の実数の有限列, $\{\alpha_n\} = \{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N\}$ は N 項からなる実数の有限列である.²

ヤコビ係数の全体を \mathfrak{J} と表す.

定理 2.4, 定理 2.5 によって, $\mu \in \mathfrak{P}_{\text{fm}}(\mathbb{R})$ に対して, ヤコビ係数 $(\{\omega_n\}, \{\alpha_n\})$ が 1 つ対応することになる. また, 与えられたヤコビ係数に対して, (2.4) によって, 多項式列 $\{P_n(x)\}$ が 1 つ決まる. このとき, $(\{\omega_n\}, \{\alpha_n\})$ を μ (または $\{P_n\}$) に付随するヤコビ係数と呼ぶことにする.³

ここで, ボレル確率測度, モーメント列, ヤコビ係数の関係を少し述べておこう. 実数列 $\{M_0 = 1, M_1, M_2, \dots\}$ に対して,

$$\Delta_m = \det \begin{bmatrix} M_0 & M_1 & \cdots & M_m \\ M_1 & M_2 & \cdots & M_{m+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ M_m & M_{m+1} & \cdots & M_{2m} \end{bmatrix}, \quad m = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.6)$$

をハンケル行列式という. 実数列 $\{M_0 = 1, M_1, M_2, \dots\}$ で,

- (i) すべての m に対して $\Delta_m > 0$; または,
- (ii) ある $m_0 \geq 1$ が存在して $\Delta_0 > 0, \dots, \Delta_{m_0-1} > 0, \Delta_{m_0} = \dots = 0$ が成り立つ;

のいずれかの条件を満たすもの全体を \mathfrak{M} で表わす. この性質が確率分布のモーメント列を特徴づける (ハンブルガーの定理).

与えられた確率分布 $\mu \in \mathfrak{P}_{\text{fm}}(\mathbb{R})$ に対して, そのモーメント列 $\{M_m\}$ とヤコビ係数 $(\{\omega_n\}, \{\alpha_n\})$ を対応させることができる. また, ヤコビ係数はシュミットの直交化によって定まるが, 直交化の過程で必要な内積はすべてモーメント列を用いて表すことができる. したがって, 写像 $F : \mathfrak{M} \rightarrow \mathfrak{J}$ が定義されて次の可換図式を得る:

$$\begin{array}{ccc} & \mathfrak{P}_{\text{fm}}(\mathbb{R}) & \\ M \swarrow & & \searrow J \\ \mathfrak{M} & \xrightarrow{F} & \mathfrak{J} \end{array}$$

実は, $F : \mathfrak{M} \rightarrow \mathfrak{J}$ は全単射である [31, Chapter 1]. さらに, F^{-1} の具体的表現 (Accardi–Bożejko 公式) が知られている. ここでは, ヤコビ係数と確率分布の関係式を述べておく.

定理 2.7 $\mu \in \mathfrak{P}_{\text{fm}}(\mathbb{R})$ のヤコビ係数を $(\{\omega_n\}, \{\alpha_n\})$ とする. もし, μ がモーメント問題の一意解であれば,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mu(dx)}{z-x} = \frac{1}{z-\alpha_1} - \frac{\omega_1}{z-\alpha_2} - \frac{\omega_2}{z-\alpha_3} - \frac{\omega_3}{z-\alpha_4} - \cdots \quad (2.7)$$

が成り立つ. ただし, 右辺の連分数は $\{\text{Im } z \neq 0\}$ で収束する.

² $N = 1$ のときは, $\{\omega_n\}$ は空列である.

³注意 2.1 と関係するが, 直交多項式が有限列 $\{P_0, P_1, \dots, P_{N-1}\}$ の場合は, その多項式の集合だけからでは, 最後の番号のヤコビ係数 ω_{N-1}, α_N を知ることはできない. その意味で, $\{P_n\}$ に付随するヤコビ係数と呼ぶときは注意を要する.

(2.7) の左辺は, (有限なモーメントをもつとは限らない) すべての確率分布 μ に対して定義される. これを μ の **スチルチェス変換** といい, $G_\mu(z)$ と書く. $G_\mu(z)$ は $\{\text{Im } z \neq 0\}$ で正則である. このとき,

$$-\frac{2}{\pi} \lim_{y \rightarrow +0} \int_s^t \text{Im } G_\mu(x + iy) dx = \mu(\{s\}) + \mu(\{t\}) + 2\mu((s, t)), \quad s < t$$

が成り立つ. これを **スチルチェス逆変換** という. μ の絶対連続部分 $\rho(x)dx$ は,

$$\rho(x) = -\frac{1}{\pi} \lim_{y \rightarrow +0} \text{Im } G_\mu(x + iy)$$

で与えられる.

さらに, (2.7) の第 n 近似分数

$$\frac{1}{z - \alpha_1} - \frac{\omega_1}{z - \alpha_2} - \frac{\omega_2}{z - \alpha_3} - \frac{\omega_3}{z - \alpha_4} - \cdots - \frac{\omega_n}{z - \alpha_{n+1}} = \frac{Q_n(z)}{P_{n+1}(z)}$$

で, 分母・分子ともに最高次の係数を 1 と基準化すれば, 分母の多項式が μ に付随する直交多項式に一致する. なお, $\{Q_n\}$ は μ の (または $\{P_n\}$ の) 随伴直交多項式と呼ばれる.

2.1.4 自由マイクスナー分布

定義 2.8 3つの定数 $p > 0, q \geq 0, a \in \mathbb{R}$ に対して, 確率分布 $\mu_{p,q,a}$ が

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mu_{p,q,a}(dx)}{z - x} = \frac{1}{z - z - a} - \frac{p}{z - a} - \frac{q}{z - a} - \frac{q}{z - a} - \frac{q}{z - a} - \cdots, \quad (2.8)$$

を満たすものとして一意的に定まる. これをパラメータ (p, q, a) の自由マイクスナー分布 (free Meixner distribution) と呼ぶ. 言い換えれば, パラメータ (p, q, a) の自由マイクスナー分布は, ヤコビ係数

$$\{\omega_n\} = \{p, q, q, \dots\}, \quad \{\alpha_n\} = \{0, a, a, \dots\}$$

によって定まる確率分布である. (特に, $\mu_{p,q,a}$ の平均値は 0, 分散は p となっている.)

自由マイクスナー分布の具体形を書き下しておこう. まず, (2.8) の連分数を計算する必要があるが, 循環連分数であるから計算は容易である:

$$G(z) = \frac{(2q - p)z + pa - p\sqrt{(z - a)^2 - 4q}}{2(q - p)z^2 + 2paz + 2p^2}. \quad (2.9)$$

ここで, 平方根 $\sqrt{\cdot}$ は $\mathbb{C} \setminus [a - 2\sqrt{q}, a + 2\sqrt{q}]$ で正則であって, $z \in \mathbb{R}$ かつ $z > a + 2\sqrt{q}$ のとき, $\sqrt{(z - a)^2 - 4q} > 0$ となるように分枝を定めるものとする. 自由マイクスナー分布の絶対連続部分 $\rho_{p,q,a}(x)$ はスチルチェス逆変換によって計算できて,

$$\rho_{p,q,a}(x) = \frac{p}{2\pi} \frac{\sqrt{4q - (x - a)^2}}{(q - p)x^2 + pax + p^2}, \quad |x - a| \leq 2\sqrt{q}, \quad (2.10)$$

を得る. $\rho_{p,q,-a}(x) = \rho_{p,q,a}(-x)$ に注意しておこう. 簡単のため, (2.10) の分母を

$$g(z) = (q - p)z^2 + paz + p^2$$

とおく. $g(z)$ の零点は开区間 $(a - 2\sqrt{q}, a + 2\sqrt{q})$ の外にあることに注意しておこう.

Case 1. $q = p > 0, a = 0$. 密度関数は

$$\rho_{p,p,0}(x) = \frac{1}{2\pi p} \sqrt{4p - x^2}, \quad |x| \leq 2\sqrt{p},$$

となる. これは平均値 0, 分散 p のウィグナー半円則である. 点測度を含まず,

$$\mu_{p,p,0}(dx) = \rho_{p,p,0}(x)dx.$$

Case 2. $q = p > 0, a \neq 0$. 密度関数は

$$\rho_{p,p,a}(x) = \frac{1}{2\pi} \frac{\sqrt{4p - (x - a)^2}}{ax + p}, \quad |x - a| \leq 2\sqrt{p}.$$

この場合は, $\mu_{p,p,a}$ は $g(z)$ の零点, つまり $x = \lambda_0 = -p/a$ に集中する点測度を含む可能性がある. その加重は $G(z)$ の留数から計算できる. たとえば, $a > 0$ のときは, $z = \lambda_0 \leq a - 2\sqrt{p}$ における $\sqrt{(z - a)^2 - 4q}$ の符号に注意して,

$$\lim_{z \rightarrow \lambda_0} (z - \lambda_0)G(z) = \frac{1}{2a} \left(a - \frac{p}{a} + \left| a - \frac{p}{a} \right| \right),$$

となるが, これは $a^2 > p$ なら $1 - p/a^2$, $a^2 \leq p$ なら 0 である. $a < 0$ の場合にも同様の考察を行い, まとめると,

$$\mu_{p,p,a}(dx) = \begin{cases} \rho_{p,p,a}(x)dx, & a^2 \leq p \text{ のとき,} \\ \rho_{p,p,a}(x)dx + \left(1 - \frac{p}{a^2}\right) \delta_{-p/a}, & a^2 > p \text{ のとき.} \end{cases}$$

実際, この結果は Case 1 を含んでいる. さらに, $\mu_{p,p,a}$ は, パラメータ p/a^2 の自由ポアソン分布のアフィン変換である.

次に, $q \neq p$ の場合を考えよう. $g(z)$ は 2 次関数であり, 判別式

$$D = a^2 - 4(q - p)$$

が重要である.

Case 3. $D < 0$, すなわち, $0 \leq a^2 < 4(q - p)$ のときは, $g(z)$ は実根をもたないので, 点測度は存在しない. よって,

$$\mu_{p,q,a}(dx) = \rho_{p,q,a}(x)dx. \quad (2.11)$$

Case 4. $D = 0$, すなわち, $0 < a^2 = 4(q - p)$ のときは, $g(z)$ は $[a - 2\sqrt{q}, a + 2\sqrt{q}]$ の外側に実の重根を持つ. しかしながら, 密度関数の積分を計算すると 1 となることが確かめられるので, 点測度は存在せず, (2.11) が成り立つ.

Case 5. $D > 0$, すなわち, $4(q - p) < a^2$ の場合. $g(z)$ は 2 個の異なる実根をもつ:

$$\lambda_{\pm} = \frac{p}{2(q - p)}(-a \pm \sqrt{D}).$$

したがって, $\mu_{p,q,a}$ は

$$\mu_{p,q,a}(dx) = \rho_{p,q,a}(x)dx + w_+\delta_{\lambda_+} + w_-\delta_{\lambda_-} \quad (2.12)$$

の形になる. w_{\pm} を見通しよく表示するために,

$$\nu_+ = \frac{1}{\sqrt{D}} \left(\frac{q\lambda_+}{p} - \frac{p}{\lambda_+} \right), \quad \nu_- = \frac{1}{\sqrt{D}} \left(\frac{q\lambda_-}{p} - \frac{p}{\lambda_-} \right) \quad (2.13)$$

とおく.

Case 5-1. $0 < 4(q-p) < a^2$. このときは, $\lambda_- < \lambda_+$ となり, 両方ともに $(-\infty, a - 2\sqrt{q}]$ か $[a + 2\sqrt{q}, +\infty)$ の一方に属する. 加重は次のようになる:

$$w_+ = \begin{cases} 0, & a \leq -2\sqrt{q-p}, \quad 2\sqrt{q-p} < a \leq (2q-p)/\sqrt{q}, \\ \nu_+, & a \geq (2q-p)/\sqrt{q}, \end{cases}$$

$$w_- = \begin{cases} -\nu_-, & a \leq -(2q-p)/\sqrt{q}, \\ 0, & -(2q-p)/\sqrt{q} \leq a < -2\sqrt{q-p}, \quad 2\sqrt{q-p} < a. \end{cases}$$

Case 5-2. $0 \leq q < 2q < p$. このときは, $\lambda_+ < a - 2\sqrt{p}$, $\lambda_- > a + 2\sqrt{p}$ となる. 加重 w_{\pm} は次のようになる:

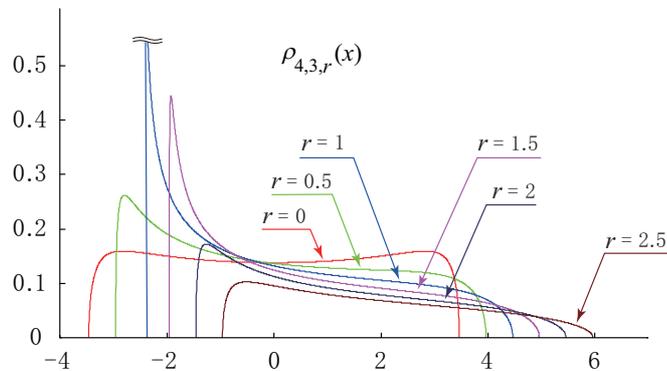
$$w_+ = \begin{cases} 0, & a \leq -(p-2q)/\sqrt{q}, \\ \nu_+, & a \geq -(p-2q)/\sqrt{q}, \end{cases} \quad w_- = \begin{cases} -\nu_-, & a \leq (p-2q)/\sqrt{q}, \\ 0, & a \geq (p-2q)/\sqrt{q}. \end{cases}$$

Case 5-3. $0 \leq q < p < 2q$. 状況は Case 5-2 と同様である.

$$w_+ = \begin{cases} 0, & a \leq (2q-p)/\sqrt{q}, \\ \nu_+, & a \geq (2q-p)/\sqrt{q}, \end{cases} \quad w_- = \begin{cases} -\nu_-, & a \leq -(2q-p)/\sqrt{q}, \\ 0, & a \geq -(2q-p)/\sqrt{q}. \end{cases}$$

なお, Case 5-2 と Case 5-3 はまとめることもできる:

$$w_+ = \frac{1}{2}(|\nu_+| + \nu_+), \quad w_- = \frac{1}{2}(|\nu_-| - \nu_-).$$



自由マイクスナー分布 $\mu_{4,3,r}$ の密度関数

2.2 相互作用フォック空間 (IFS)

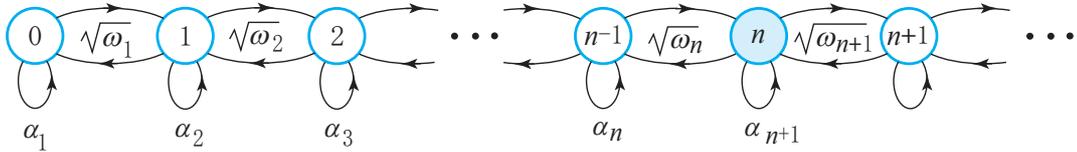
ヤコビ係数 $(\{\omega_n\}, \{\alpha_n\}) \in \mathfrak{J}$ が与えられたとき, それが無限型か有限型かに応じて, 正規直交基底 $\{\Phi_n\}_{n=0}^{\infty}, \{\Phi_n\}_{n=0}^{N-1}$ をもつヒルベルト空間 $\Gamma(\mathbb{C})$ を考える. 次に, $\Gamma(\mathbb{C})$ 上の線型作用素 $B^\epsilon, \epsilon \in \{+, -, \circ\}$, を次のように定義する:

$$B^+\Phi_n = \sqrt{\omega_{n+1}}\Phi_{n+1}, \quad n = 0, 1, \dots, \quad (2.14)$$

$$B^-\Phi_0 = 0, \quad B^-\Phi_n = \sqrt{\omega_n}\Phi_{n-1}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (2.15)$$

$$B^\circ\Phi_0 = \alpha_{n+1}\Phi_n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.16)$$

これらは代数的な定義であり, B^ϵ の定義域は $\{\Phi_n\}$ の張る線型部分空間とする. また, ヤコビ係数が有限型の場合は (2.14) に加えて, $B^+\Phi_{N-1} = 0$ とおく.



このとき, すべての $m, n = 0, 1, 2, \dots$ に対して,

$$\langle \Phi_m, B^\pm \Phi_n \rangle = \langle B^\mp \Phi_m, \Phi_n \rangle, \quad \langle \Phi_m, B^\circ \Phi_n \rangle = \langle B^\circ \Phi_m, \Phi_n \rangle$$

が成り立ち, この意味で B^\pm は互いに共役, B° は自己共役になる.⁴

定義 2.9 与えられたヤコビ係数 $(\{\omega_n\}, \{\alpha_n\})$ に対して, 上に述べたように構成されたヒルベルト空間 $\Gamma(\mathbb{C})$, その正規直交基底 $\{\Phi_n\}$, 作用素 B^ϵ を組にした $(\Gamma(\mathbb{C}), \{\Phi_n\}, B^+, B^-, B^\circ)$ を $(\{\omega_n\}, \{\alpha_n\})$ に付随する**相互作用フォック空間**と呼ぶ. このとき, B^+ を**生成作用素** (creation operator), B^- を**消滅作用素** (annihilation operator), B° を**保存作用素** (conservation operator) と呼ぶ.

定義 2.10 相互作用フォック空間 $(\Gamma(\mathbb{C}), \{\Phi_n\}, B^+, B^-, B^\circ)$ に対して, $\{B^+, B^-, B^\circ\}$ で生成される $*$ -代数を相互作用フォック代数という. 相互作用フォック代数に真空状態 (真空ベクトル Φ_0 の定めるベクトル状態) を合わせたものを**相互作用フォック確率空間**と呼ぶ.

例 2.11 基本的な例は以下のとおりである. ただし, これらの例では $\alpha_n \equiv 0$ で $B^\circ = 0$ である. また, q -フォック空間では $-1 \leq q \leq 1$ であり, $[n]_q = 1 + q + q^2 + \dots + q^{n-1}$ は q -整数である. 詳しくは, [9, 55] を見よ.

フォック空間	ヤコビ数列	交換関係	$B^+ + B^-$ の分布
ボゾン	$\omega_n = n$	$B^-B^+ - B^+B^- = 1$	ガウス分布
フェルミオン	$\omega_1 = 1, \omega_2 = \dots = 0$	$B^-B^+ + B^+B^- = 1$	ベルヌイ分布
自由	$\omega_n \equiv 1$	$B^-B^+ = 1$	半円則
q -	$\omega_n = [n]_q$	$B^-B^+ - qB^+B^- = 1$	q -変形ガウス分布

⁴これらも代数的な意味に使っており, 作用素解析における自己共役とは異なる.

$B^+ + B^-$ の分布について, はじめの3つの例について述べておく.

(1) ボゾン・フォック空間において,

$$\langle \Phi_0, (B^+ + B^-)^m \Phi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^m e^{-x^2/2} dx, \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

が成り立つ. 右辺の分布は標準正規分布 (Gauss 分布) である.

(2) フェルミオン・フォック空間において,

$$\langle \Phi_0, (B^+ + B^-)^m \Phi_0 \rangle = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} x^m (\delta_{-1} + \delta_{+1})(dx), \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

右辺の分布はベルヌイ分布である.

(3) 自由フォック空間において,

$$\langle \Phi_0, (B^+ + B^-)^m \Phi_0 \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-2}^{+2} x^m \sqrt{4 - x^2} dx, \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

右辺の確率分布は標準化されたウイグナー半円則である.

演習 10 上の (1)–(3) を証明せよ.

2.3 実確率変数の量子分解

確率分布 $\mu \in \mathfrak{P}_{\text{fm}}(\mathbb{R})$ を考えよう. この μ に付随する直交多項式を $\{P_n\}$, ヤコビ係数を $(\{\omega_n\}, \{\alpha_n\})$ とする. さらに, ヤコビ係数 $(\{\omega_n\}, \{\alpha_n\})$ に付随する相互作用フォック空間 $(\Gamma(\mathbb{C}), \{\Phi_n\}, B^+, B^-, B^\circ)$ を考える.

等距離作用素 $U : \Gamma(\mathbb{C}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}, \mu)$ が

$$U : \Phi_n \mapsto \frac{1}{\sqrt{\omega_n \cdots \omega_2 \omega_1}} P_n$$

によって定義される. 多項式のなす線形空間が $L^2(\mathbb{R}, \mu)$ で稠密であるとは限らないので, U は必ずしもユニタリではないことに注意しておこう. さて, $L^2(\mathbb{R}, \mu)$ において x による掛け算作用素を Q で表す. 相互作用フォック空間の定義と直交多項式の満たす3項間漸化式を比較すれば,

$$Q = U(B^+ + B^- + B^\circ)U^*$$

が容易にわかる. したがって,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^m \mu(dx) = \langle P_0, Q^m P_0 \rangle = \langle \Phi_0, (B^+ + B^- + B^\circ)^m \Phi_0 \rangle, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (2.17)$$

すなわち, すべての確率分布 $\mu \in \mathfrak{P}_{\text{fm}}(\mathbb{R})$ は適当な相互作用フォック空間において, 基本的な確率変数 $B^+ + B^- + B^\circ$ の真空状態における確率分布として表現できるのである. Accardi–Bożejko [1] はこの操作を**確率測度のガウス化**と呼んでいる.

さて, $a = a^* \in \mathcal{A}$ を代数的確率空間 (\mathcal{A}, φ) の実確率変数とし, その φ におけるスペクトル分布を μ とする.

$$\varphi(a^m) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^m \mu(dx), \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

が成り立つ. 前段の議論と合わせると, 適当な相互作用フォック空間を構成して

$$\varphi(a^m) = \langle \Phi_0, (B^+ + B^- + B^\circ)^m \Phi_0 \rangle, \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

とできることがわかる. これは, a と $B^+ + B^- + B^\circ$ が確率同値であることを示している:

$$a \stackrel{M}{=} B^+ + B^- + B^\circ.$$

これを a の**量子分解**という.

確率空間 (Ω, \mathcal{F}, P) で定義された古典確率変数 X ですべての次数が有限値になるものを考える. その確率分布を μ とすれば,

$$\mathbf{E}[X^m] = \int_{-\infty}^{+\infty} x^m \mu(dx), \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

が成り立つ. したがって, 上と同様に, 適当な相互作用フォック空間を構成して

$$\mathbf{E}[X^m] = \langle \Phi_0, (B^+ + B^- + B^\circ)^m \Phi_0 \rangle, \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

とできることがわかる. これは, X と $B^+ + B^- + B^\circ$ が確率同値であることを示している:

$$X \stackrel{M}{=} B^+ + B^- + B^\circ.$$

これを X の**量子分解**という.

量子分解によって得られる $\{B^+, B^-, B^\circ\}$ をその量子成分という. 量子成分は互いに非可換である. 代数的確率空間の枠組みであっても, 実確率変数 a を単独で考えるということは, 実際には a の生成する可換な $*$ -代数を考えることにほかならない. 古典確率変数 X の場合は, 本来的に可換代数を考えている. このような可換な世界にある話を量子分解を通して非可換な世界に持ち込んで解析するという新しい視点加わるのである.

3 代数的グラフ理論

3.1 グラフ

定義 3.1 空でない集合 V とその2点集合の部分集合 E , つまり, $E \subset \{\{x, y\}; x, y \in V, x \neq y\}$ の組 $G = (V, E)$ を**グラフ**という. V の元を頂点, E の元を辺という. 2頂点 $x, y \in V$ が $\{x, y\} \in E$ を満たすとき, それらは隣接しているといい, $x \sim y$ で表す.

グラフ $G = (V, E)$ は, V が有限 ($|V| < \infty$) のとき**有限グラフ**, そうでないとき**無限グラフ**と呼ばれる. ただし, 本稿では, V は高々可算集合に限る.¹

グラフとは, 考えている対象の隣接関係を抽象化して得られる概念であるが, もちろん幾何学的な図形としてとらえるのが便利である. グラフ $G = (V, E)$ に対して, 頂点を平面上の点として配置し, 隣接関係にある2頂点を線(線分または弧)で結んでできる図形をグラフ G の幾何学的実現という. 幾何学的実現は見掛け上多様であるので注意を要する.

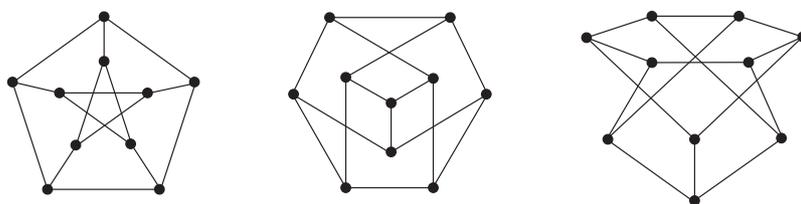


図 3.1: Petersen グラフの幾何学的実現

グラフを扱う上で基本的な概念を整理しておこう.

定義 3.2 グラフ G の頂点 $x \in V$ に対して,

$$\deg(x) = \deg_G(x) = |\{y \in V; y \sim x\}|$$

を頂点 x の**次数**という.

定義 3.3 グラフ $G = (V, E)$ において, すべての頂点の次数が一定値 κ であるとき, そのグラフを κ -**正則**という. 次数を明示する必要がなければ, 単に**正則**であるという.

定義 3.4 頂点の有限列 $x_0, x_1, \dots, x_n \in V$ で

$$x_0 \sim x_1 \sim \dots \sim x_n \tag{3.1}$$

をみたすものを長さ n の**歩道(ウォーク)**という. ここで, x_0, x_1, \dots, x_n の中に一致する頂点があってもかまわない. 歩道 (3.1) を構成する頂点 x_0, x_1, \dots, x_n が互いに異なるとき, それ

¹自然数 \mathbb{N} と濃度が等しい集合を可算集合といい, 有限集合と可算集合を合わせて高々可算集合という. 離散数学や組合せ数学で論じられるいわゆる「グラフ理論」の対象は有限グラフであるが, 我々の興味はむしろ無限グラフ, あるいは有限グラフの増大列の漸近挙動にある. 「無限」を対象にするため, グラフ理論で蓄積されている豊富な結果に加えて, 解析的な手法をさまざまに組み合わせるところが面白い. 特に, 量子確率論の応用として新しいパラダイムを構築することが本研究の主題である.

は長さ n の道と呼ばれる. 歩道 (3.1) において, $n \geq 3$ かつ x_0, x_1, \dots, x_{n-1} が互いに異なり, $x_n = x_0$ となっているとき, それを長さ n のサイクルという.

道には通常は向きを考えないので, (3.1) が道であれば,

$$x_n \sim x_{n-1} \sim \cdots \sim x_0$$

も道であり, それらを区別しない. サイクルに対しては, 向きを考慮しないと共に, 始点も考えない. つまり, $x_0 \sim x_1 \sim \cdots \sim x_{n-1} \sim x_0$ がサイクルならば, $x_1 \sim x_2 \sim \cdots \sim x_{n-1} \sim x_0 \sim x_1$ も同じサイクルを表す.

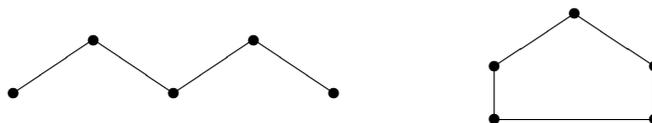


図 3.2: P_5 : 長さ 4 の道 (左). C_5 : 長さ 5 のサイクル (右)

定義 3.5 グラフ $G = (V, E)$ が連結であるとは, 任意の異なる 2 頂点 $x, y \in V$ ($x \neq y$) を結ぶウォークが存在するときをいう. (ウォークを道と言い換えても同じことである.)

定義 3.6 2つのグラフ $G = (V, E)$, $G' = (V', E')$ に対して, 全単射 $\Phi: V \rightarrow V'$ で

$$x \sim y \iff \Phi(x) \sim \Phi(y)$$

を満たすものが存在するとき, G と G' は同型であるといい, $G \cong G'$ と書く.

3.2 隣接行列

定義 3.7 頂点集合 V を添字集合とする行列 $A = (A_{xy})$ を

$$A_{xy} = \begin{cases} 1, & x \sim y, \\ 0, & \text{その他,} \end{cases}$$

で定義する. これをグラフ $G = (V, E)$ の隣接行列という.

隣接行列は (有限および無限) グラフの代数的表現として基本的である. 実際, 隣接行列はグラフを (同型を除いて) 再現する.

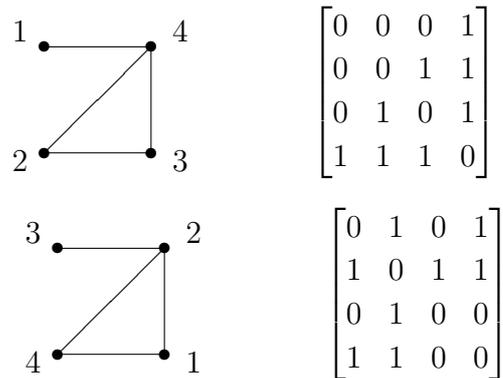
隣接行列について, もう少し詳しく説明しておこう. まず, 定義 3.7 に述べた隣接行列は, 線形代数で扱う正方行列とは異なり, 単に, 2 頂点 x, y ($x = y$ も含む) の隣接関係を述べているだけである. 隣接行列をふつうの正方行列のように表示するためには, 頂点に番号付けをする必要がある. 簡単のため, 頂点数 n の有限グラフ $G = (V, E)$ で説明しよう. 頂点の番号付けとは, 全単射 $f: I = \{1, 2, \dots, n\} \rightarrow V$ を 1 つ与えることである.

$$F = \{\{i, j\}; i, j \in I, \{f(i), f(j)\} \in E\}$$

とおくと, $H = (I, F)$ は $G = (V, E)$ と同型なグラフになる (確かめよ). H の隣接行列 B は本来の定義では, 2 頂点 i, j の隣接関係を述べているだけであるが, $i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$ なので, (i, j) 成分を i 行 j 列に表記することで普通の正方行列が得られる.

頂点の番号付けの仕方は多様である. 別の全単射 $f' : I \rightarrow V$ をとると, $G = (V, E)$ と同型なグラフではあるが, 別のグラフ $H' = (I, F')$ が得られる. H' の隣接行列 B' は先に求めた B とは一般には異なる.

例 3.8 同一のグラフでも頂点の番号付けを変えると, 隣接行列も変化する.



$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

もともと同じグラフであるのに, 頂点の番号づけを替えることで, 隣接行列の表示が変化してしまうことは重要である. グラフ本来の性質は, 正方行列の形に表示したときの表現型によらない性質だからである.

補題 3.9 $G = (V, E)$ に 2 つの番号づけ $f, f' : I \rightarrow V$ を与えて, 隣接行列を正方行列に表示したものを B, B' とする. ただし, $|V| = n$ のときは, $I = \{1, 2, \dots, n\}$ とし, $|V| = \infty$ のときは, $I = \mathbb{N} = \{1, 2, \dots\}$ とする. このとき, I 上の置換行列 S が存在して,

$$B' = S^{-1}BS = S^*BS \quad (3.2)$$

が成り立つ. つまり, 隣接行列の 2 つの表示は置換行列で互いに共役になる.

証明 $f, f' : I \rightarrow V$ とともに全単射であるから, 合成写像 $f^{-1}f'$ は I から I の上への全単射, つまり I 上の置換である. 行列 S を

$$S = [s_{ij}], \quad s_{ij} = \begin{cases} 1, & i = f^{-1}f'(j) \\ 0, & \text{その他,} \end{cases}$$

と定義する. 各行, 各列ともただ 1 つの成分が 1 で, 他の成分は 0 になっている (このような行列を一般に I 上の置換行列という). たとえば, 第 i 行は

$$s_{i1}, \quad s_{i2}, \quad \dots, \quad s_{ij}, \quad \dots$$

となるが, $j = f^{-1}f'(i)$ のときだけ 1 であり, 他は全部 0 である. このように定義された S と B との積 BS を計算してみよう:

$$(BS)_{ij} = \sum_{k \in I} b_{ik}s_{kj} = b_{i f^{-1}f'(j)} = \begin{cases} 1, & i \sim f^{-1}f'(j), \\ 0, & \text{その他.} \end{cases}$$

ここで, $i \sim f^{-1}f'(j)$ は $f(i) \sim f'(j)$ と同値である. 同様に,

$$(SB')_{ij} = \sum_{k \in I} s_{ik} b'_{kj} = b_{f'^{-1}f(i)j} = \begin{cases} 1, & f'^{-1}f(i) \sim j, \\ 0, & \text{その他.} \end{cases}$$

ここで, $f'^{-1}f(i) \sim j$ は $f(i) \sim f'(j)$ と同値である. したがって,

$$BS = SB'. \quad (3.3)$$

容易にわかるように S は $S^*S = SS^* = 1$ を満たすのでユニタリ行列である. よって, (3.3) から (3.2) が従う. ■

演習 11 例 3.8 で得られた 2 つの隣接行列が置換行列で共役になることを確かめよ.

3.3 隣接代数

隣接行列 A の生成する $*$ -代数を扱うことで多くの結果が導かれる. 有限グラフに対しては, 隣接行列のべき乗 A^m が問題なく定義できるが, 無限グラフの場合は,

[局所有限性] すべての $x \in V$ に対して $\deg(x) < \infty$,

を常に仮定する. 実際, 行列の積の定義から

$$(A^m)_{xy} = \sum_{x_1, \dots, x_{m-1} \in V} A_{xx_1} A_{x_1x_2} \cdots A_{x_{m-1}y} \quad (3.4)$$

であるが, 局所有限性によって, 和に現れる項は有限個を除いて $A_{xx_1} A_{x_1x_2} \cdots A_{x_{m-1}y} = 0$ であり, A^m の (x, y) -成分が定義される.

こうして, 隣接行列のべき乗 A^m が定義され, A の複素係数多項式の全体

$$\mathcal{A}(G) = \{p(A); p \text{ は複素係数多項式}\}$$

が通常の行列演算で可換な $*$ -代数となる. これをグラフ G の隣接代数という. 特に, 対合は,

$$(c_0 + c_1A + c_2A^2 + \cdots + c_mA^m)^* = \bar{c}_0 + \bar{c}_1A + \bar{c}_2A^2 + \cdots + \bar{c}_mA^m$$

で与えられる.

命題 3.10 $m = 0, 1, 2, \dots$ と $x, y \in V$ に対して,

$$(A^m)_{xy} = |\{x \text{ と } y \text{ を結ぶ長さ } m \text{ の歩道}\}|.$$

証明 $A_{xx_1} A_{x_1x_2} \cdots A_{x_{m-1}y}$ が 0 でないとすれば, $A_{xx_1} = A_{x_1x_2} = \cdots = A_{x_{m-1}y} = 1$ であり, それらの積は 1 となる. したがって, (3.4) の右辺の和は, $x \sim x_1 \sim x_2 \sim \cdots \sim x_{m-1} \sim y$ をみたすような添字列, すなわち, x と y を結ぶ長さ m の歩道の個数に一致する. ■

隣接行列を線形変換とみなすのも有用である。\$V\$ 上で定義された \$\mathbb{C}\$-値関数 \$f \rightarrow \mathbb{C}\$ で、有限個の \$x \in V\$ を除いて、\$f(x) = 0\$ となるもの全体のなす線形空間を \$C_0(V)\$ とする。各 \$x \in V\$ に対して

$$\delta_x(y) = \begin{cases} 1, & y = x, \\ 0, & \text{その他,} \end{cases}$$

とおくと、\$\{\delta_x; x \in V\} \subset C_0(V)\$ は基底になる。つまり、すべての \$f \in C_0(V)\$ は \$\{\delta_x; x \in V\}\$ の有限一次結合として一意的に表される。\$C_0(V)\$ の内積を

$$\langle f, g \rangle = \sum_{x \in V} \overline{f(x)} g(x), \quad f, g \in C_0(V), \quad (3.5)$$

で定義する。明らかに、\$\langle \delta_x, \delta_y \rangle = \delta_{xy}\$ が成り立つ。²

さて、\$A\$ は行列の積に基づいて \$C_0(V)\$ に作用する:

$$Af(x) = \sum_{y \in V} A_{xy} f(y) = \sum_{y \sim x} f(y), \quad f \in C_0(V), \quad x \in V.$$

基底に対しては、

$$A\delta_x = \sum_{y \sim x} \delta_y, \quad x \in V,$$

が成り立ち、特に、

$$A_{xy} = \langle \delta_x, A\delta_y \rangle$$

となる。

演習 12 有限グラフ \$G\$ に対して、\$\dim \mathcal{A}(G)\$ は隣接行列 \$A\$ の相異なる固有値の個数に一致することを示せ。[ヒント: \$A\$ の対角化]

命題 3.11 有限な連結グラフ \$G = (V, E)\$ に対して

$$\dim \mathcal{A}(G) \geq \text{diam}(G) + 1.$$

証明 For simplicity put \$\text{diam}(G) = d\$. If \$d = 0\$, we have \$|V| = 1\$ and \$\dim \mathcal{A}(G) = 1\$ so the assertion is clear. Assume that \$d \ge 1\$. By definition of the diameter there exists a pair of vertices \$x, y \in V\$ such that \$\partial(x, y) = d\$. Choose one path of length \$d\$ connecting \$x, y\$, say,

$$x = x_0 \sim x_1 \sim \cdots \sim x_k \sim x_{k+1} \sim \cdots \sim x_d = y.$$

²\$C_0(V)\$ を適当な位相で完備化した空間もよくあらわれる。たとえば、

$$l^2(V) = \left\{ f : V \rightarrow \mathbb{C}; \|f\|^2 = \sum_{x \in V} |f(x)|^2 < \infty \right\}$$

は基本的なヒルベルト空間であり、その内積は (3.5) で与えられる。隣接行列 \$A\$ が \$l^2(V)\$ 上の有界線形作用素になるための必要十分条件は \$\sup\{\text{deg } x; x \in V\} < \infty\$ である。

In this case, x_0, x_1, \dots, x_d are all distinct and $\partial(x, x_k) = k$ ($0 \leq k \leq d$). In particular, there is no walk of length $\leq k - 1$ connecting x and x_k . Hence

$$(A^m)_{xx_k} = 0, \quad 0 \leq m \leq k - 1; \quad (A^k)_{xx_k} \geq 1.$$

Now suppose that

$$\alpha_0 E + \alpha_1 A + \dots + \alpha_d A^d = 0, \quad \alpha_i \in \mathbb{C}. \quad (3.6)$$

Taking the xx_d -element of (3.6), since

$$(A^m)_{xx_d} = 0, \quad 0 \leq m \leq d - 1; \quad (A^d)_{xx_d} \geq 1,$$

we have $\alpha_d (A^d)_{xx_d} = 0$ so $\alpha_d = 0$. Next taking the xx_{d-1} -element of (3.6), we have $\alpha_{d-1} = 0$. We can continue this argument to have $\alpha_0 = \dots = \alpha_{d-1} = \alpha_d = 0$. Namely, $\{E, A, \dots, A^d\}$ is linearly independent. So $\dim \mathcal{A}(G) \geq d + 1$. ■

系 3.12 有限な連結グラフ $G = (V, E)$ は少なくとも $\text{diam}(G) + 1$ 個の異なる固有値をもつ。

証明 演習 12 と命題 3.11 を合わせればよい。 ■

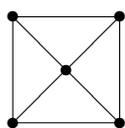
例 3.13 (1) K_n ($n \geq 2$).

$$(\text{number of different eigenvalues}) = 2, \quad \text{diam}(K_n) = 1.$$

(2) P_n ($n \geq 1$).

$$(\text{number of different eigenvalues}) = n, \quad \text{diam}(P_n) = n - 1.$$

(3) G (下図). $\varphi_G(x) = x^2(x + 2)(x^2 - 2x - 4)$



$$(\text{number of different eigenvalues}) = 4, \quad \text{diam}(G) = 2.$$

3.4 特性多項式

頂点数が n であるような有限グラフ $G = (V, E)$ を考える. 頂点に番号を付けて, 隣接行列を $n \times n$ 行列の形に書き下したとする. その行列を A としよう. 行列 A の特性多項式は

$$\varphi_A(x) = |xI - A| = \det(xI - A), \quad I: n \text{ 次の単位行列}$$

で定義される. まず, $\varphi_A(x)$ は頂点の番号づけの仕方によらずに決まることに注意しよう. 実際, 別の番号づけによって得られた行列を A' とすれば, 補題 3.9 によって, ある置換行列 S があって, $A' = S^{-1}AS$ が成り立つ. したがって,

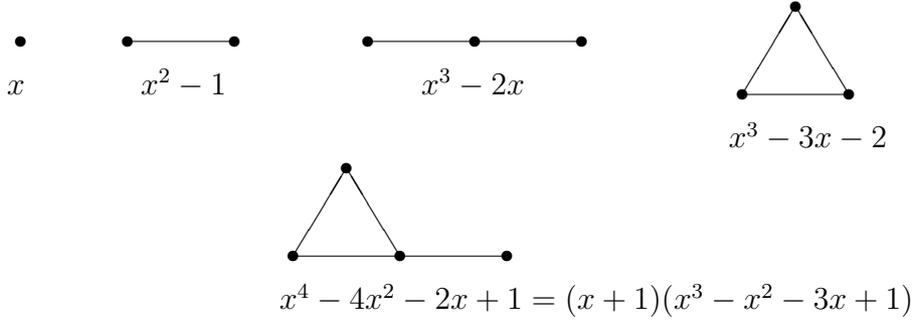
$$\varphi_{A'}(x) = |xI - A'| = |xI - S^{-1}AS| = |S^{-1}(xI - A)S| = |S^{-1}||xI - A||S| = \varphi_A(x).$$

こうして得られた多項式 $\varphi_A(x)$ をグラフ G の特性多項式と呼び、 $\varphi_G(x)$ と記す. 明らかに、 $\varphi_G(x)$ は n 次の多項式であって、

$$\varphi_G(x) = x^n + c_1x^{n-1} + c_2x^{n-2} + c_3x^{n-3} + \cdots \quad (3.7)$$

のような形をもつ.

例 3.14 簡単な例として、



x $x^2 - 1$ $x^3 - 2x$ $x^3 - 3x - 2$
 $x^4 - 4x^2 - 2x + 1 = (x + 1)(x^3 - x^2 - 3x + 1)$

定理 3.15 グラフ G の特性多項式が (3.7) のように与えられるとき、次が成り立つ:

- (1) $c_1 = 0$.
- (2) $-c_2 = |E|$.
- (3) $-c_3 = 2\Delta$, ここで Δ は G に含まれている三角形の個数である.

証明 $A = [a_{ij}]$ を G の隣接行列とする (行列式を考えたいので、頂点には番号付けがされ、通常の正方行列として書かれているものとする). A の対角成分は 0 であるから、特性多項式は、

$$\varphi_G(x) = |xI - A| = \begin{vmatrix} x & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ -a_{21} & x & \cdots & -a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ -a_{n1} & \cdots & \cdots & x \end{vmatrix}$$

の形をもつ. 簡単のため、右辺の行列を $B = [b_{ij}]$ とすると、

$$\varphi_G(x) = |B| = \sum_{\sigma \in \mathcal{S}(n)} \text{sgn}(\sigma) b_{1\sigma(1)} b_{2\sigma(2)} \cdots b_{n\sigma(n)}. \quad (3.8)$$

$\sigma \in \mathcal{S}_n$ に対して、 $\text{supp } \sigma = \{i \mid \sigma(i) \neq i\}$ とおく. そうすると、(3.8) は

$$\varphi_G(x) = \sum_{k=0}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{S}(n) \\ |\text{supp } \sigma|=k}} \text{sgn}(\sigma) b_{1\sigma(1)} b_{2\sigma(2)} \cdots b_{n\sigma(n)} \quad (3.9)$$

となる. ここで変数 x は対角線にしか現れないのだから、 $|\text{supp } \sigma| = k$ なる σ に対応する項は、 x^{n-k} の定数倍である. したがって、

$$f_k(x) = \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{S}(n) \\ |\text{supp } \sigma|=k}} \text{sgn}(\sigma) b_{1\sigma(1)} b_{2\sigma(2)} \cdots b_{n\sigma(n)} = c_k x^{n-k}, \quad k = 0, 1, \dots, n,$$

が成り立つ.

(1) $k = 1$. $|\text{supp } \sigma| = 1$ を満たす σ は存在しないので $c_1 = 0$.

(2) $k = 2$. $|\text{supp } \sigma| = 2$ を満たす置換 σ は互換 $\sigma = (i j)$ ($1 \leq i < j \leq n$) で尽くされる. そのような互換に対しては, $\text{sgn}(\sigma) = -1$ に注意して,

$$f_2(x) = \sum_{1 \leq i < j \leq n} (-1)(-a_{ij})(-a_{ji})x^{n-2} = - \sum_{1 \leq i < j \leq n} a_{ij}x^{n-2}.$$

ここで, 明らかな関係式 $a_{ij}a_{ji} = a_{ij}^2 = a_{ij}$ を用いた. したがって,

$$c_2 = - \sum_{1 \leq i < j \leq n} a_{ij} = -|E|.$$

(3) $k = 3$. $|\text{supp } \sigma| = 3$ を満たす置換 σ は長さ 3 の巡回置換だけである. それらは

$$\sigma = (i j k), \quad \sigma = (i k j), \quad 1 \leq i < j < k \leq n,$$

で尽くされる. そのような σ に対しては, $\text{sgn}(\sigma) = 1$ である. したがって,

$$f_3(x) = - \sum_{1 \leq i < j < k \leq n} (a_{ij}a_{jk}a_{ki} + a_{ik}a_{kj}a_{ji})x^{n-3}.$$

つまり,

$$c_3 = - \sum_{1 \leq i < j < k \leq n} (a_{ij}a_{jk}a_{ki} + a_{ik}a_{kj}a_{ji}).$$

ここで, $a_{ij}a_{jk}a_{ki}$ の値は 1 または 0 であるが, 1 となるのは, 3 頂点 i, j, k が三角形を形作るときである. 第 2 項についても同様であるから, $-c_3 = 2\Delta$ となる. ■

演習 13 以下に図示するグラフの隣接行列, 特性多項式を求めよ. 次に, 定理 3.15 の主張を確認せよ.



演習 14 完全グラフ K_n の特性多項式は $\varphi(x) = (x - (n - 1))(x + 1)^{n-1}$ となることを示せ.

3.5 パス・グラフ P_n とチェビシエフ多項式

頂点集合を $V = \{1, 2, \dots, n\}$, 辺集合を $E = \{\{i, i + 1\}; i = 1, 2, \dots, n - 1\}$ とするとき, グラフ (V, E) (と同型なグラフ) を n 頂点上の**パス・グラフ**といい, P_n で表す.

補題 3.16 パス・グラフ P_n の特性多項式を $\varphi_n(x) = \varphi_{P_n}(x)$ とすると, 次の関係式が成り立つ:

$$\begin{aligned} \varphi_1(x) &= x, \\ \varphi_2(x) &= x^2 - 1, \\ \varphi_n(x) &= x\varphi_{n-1}(x) - \varphi_{n-2}(x), \quad n \geq 3 \end{aligned} \tag{3.10}$$

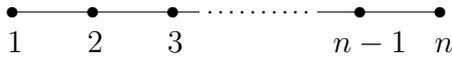


図 3.3: パス・グラフ P_n

証明 例 3.14 でみたとおりに,

$$\varphi_1(x) = x, \quad \varphi_2(x) = x^2 - 1.$$

$n \geq 3$ として $\varphi_n(x)$ を考えよう. 定義によって,

$$\varphi_n(x) = \begin{vmatrix} x & -1 & & & & \\ -1 & x & -1 & & & \\ & -1 & x & -1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & x & -1 \\ & & & & -1 & x \end{vmatrix}.$$

第 1 行に関する余因子展開によって,

$$\varphi_n(x) = x\varphi_{n-1}(x) + \begin{vmatrix} -1 & -1 & & & \\ & x & -1 & & \\ & -1 & x & -1 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & -1 & x & -1 \\ & & & & -1 & x \end{vmatrix} = x\varphi_{n-1}(x) - \varphi_{n-2}(x).$$

これが求めたかった関係式である. ■

$\varphi_0(x) = 1$ とすれば, 漸化式 (3.10) は $n \geq 2$ に対して成立する.

定理 3.17 パス・グラフ P_n の特性多項式は $\tilde{U}_n(x) = U_n(x/2)$ で与えられる. ただし, $U_n(x)$ は第 2 種チェビシェフ多項式 (例 2.3) である.

証明 パス・グラフ P_n の特性多項式 $\varphi_n(x)$ と $\tilde{U}_n(x) = U_n(x/2)$ は, 同一の 3 項間漸化式を同一の初期条件で満たすので, それらは一致する. ■

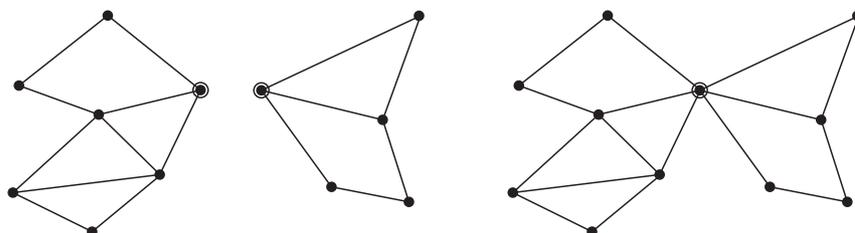
演習 15 グラフ $G = (V, E)$ には次数 1 の頂点 a があり, a と隣接する頂点を b とする. 頂点集合 V から $\{a\}$ および $\{a, b\}$ を取り除いてできる誘導部分グラフを $G' = G[V \setminus \{a\}]$, $G'' = G[V \setminus \{a, b\}]$ とする. このとき,

$$\varphi_G(x) = x\varphi_{G'}(x) - \varphi_{G''}(x).$$

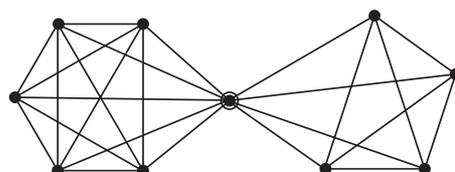
が成り立つことを示せ.

3.6 発展：完全グラフの星形積

グラフ G が何らかの意味でいくつかの部分グラフから構成されているとき、 G の特性多項式を、それら部分グラフの特性多項式で表現できると便利である。特に、2つのグラフからそれぞれ1個の頂点を選び、その頂点を張り合わせてできるグラフ (星形積) は基本的な積演算と考えられる。



ここでは、2つの完全グラフの星形積の特性多項式を導出しよう。2つの完全グラフを K_m , K_n とする。グラフの対称性から、どの頂点を選んでも得られる星形積は同型であるから、それを $K_m \star K_n$ と書くことにする。



すべての要素が 1 となる m 次行列を J_m とし、 m 次単位行列を I_m とする。 K_m の隣接行列を B_m は、

$$B_m = J_m - I_m$$

である。さて、 $K_m \star K_n$ の隣接行列 A は $(m+n-1)$ 次行列であり、次の形をもつ:

$$A = \begin{bmatrix} \boxed{B_m} & \\ & \boxed{B_n} \end{bmatrix}$$

以下の議論は、 $m \geq 1, n \geq 1$ で通用するが、 $m = 1$ または $n = 1$ のときは、星形積は実質的に何も新しいことを生み出さないなので、 $m \geq 2, n \geq 2$ とする。そうすると、 A は次のような形をもつ:

$$A = \left[\begin{array}{c|ccc} B_m & & & \\ \hline & 1 & \dots & 1 \\ \hline & 1 & & \\ & \vdots & & \\ & 1 & & B_{n-1} \end{array} \right] = \begin{bmatrix} B_m & F \\ F^T & B_{n-1} \end{bmatrix}. \quad (3.11)$$

したがって,

$$\varphi(x) = \det(xI - A) = \det \begin{bmatrix} x - B_m & -F \\ -F^T & x - B_{n-1} \end{bmatrix}.$$

ブロック行列の行列式の公式によって,

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \det(x - B_m) \det(x - B_{n-1} - (-F^T)(x - B_m)^{-1}(-F)) \\ &= \det(x - B_m) \det(x - B_{n-1} - F^T(x - B_m)^{-1}F) \end{aligned}$$

となる. 簡単な計算で m 次行列 $X = [x_{ij}]$ に対して, $F^T X F = x_{mm} J_{n-1}$ となることに注意して,

$$\varphi(x) = \det(x - B_m) \det(x - B_{n-1} - ((x - B_m)^{-1})_{mm} J_{n-1}) \quad (3.12)$$

が得られる. $\det(x - B_{n-1} - ((x - B_m)^{-1})_{mm} J_{n-1})$ を計算しよう. まず, $((x - B_m)^{-1})_{mm}$ は $(x - B_m)$ の余因子 Δ_{ij} を用いれば

$$((x - B_m)^{-1})_{mm} = \det(x - B_m)^{-1} \Delta_{mm} = \det(x - B_m)^{-1} \det(x - B_{m-1})$$

である. そうすると,

$$\begin{aligned} &x - B_{n-1} - ((x - B_m)^{-1})_{mm} J_{n-1} \\ &= x - B_{n-1} - \frac{\det(x - B_{m-1})}{\det(x - B_m)} (B_{n-1} + I_{n-1}) \\ &= x - \frac{\det(x - B_{m-1})}{\det(x - B_m)} - \left(1 + \frac{\det(x - B_{m-1})}{\det(x - B_m)}\right) B_{n-1} \end{aligned}$$

となるから,

$$\begin{aligned} &\det(x - B_{n-1} - ((x - B_m)^{-1})_{mm} J_{n-1}) \\ &= \det \left(x - \frac{\det(x - B_{m-1})}{\det(x - B_m)} - \left(1 + \frac{\det(x - B_{m-1})}{\det(x - B_m)}\right) B_{n-1} \right) \\ &= \left(1 + \frac{\det(x - B_{m-1})}{\det(x - B_m)}\right)^{n-1} \\ &\quad \times \det \left(\left(1 + \frac{\det(x - B_{m-1})}{\det(x - B_m)}\right)^{-1} \left(x - \frac{\det(x - B_{m-1})}{\det(x - B_m)} \right) - B_{n-1} \right) \end{aligned}$$

(3.12) に戻ると,

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \det(x - B_m) \left(1 + \frac{\det(x - B_{m-1})}{\det(x - B_m)}\right)^{n-1} \\ &\quad \times \det \left(\left(1 + \frac{\det(x - B_{m-1})}{\det(x - B_m)}\right)^{-1} \left(x - \frac{\det(x - B_{m-1})}{\det(x - B_m)} \right) - B_{n-1} \right). \quad (3.13) \end{aligned}$$

ここで, $\det(x - B_m)$ は完全グラフ K_m の特性多項式であるから, 演習 14 によって,

$$\det(x - B_m) = (x - (m - 1))(x + 1)^{m-1} \quad (3.14)$$

となることが知られている. この具体形を用いて, (3.13) を計算すると,

$$\varphi(x) = (x+1)^{m+n-4}((x-m-n+2)(x+1)^2 + (m-1)(n-1)(x+2))$$

が得られる. 公式として書き留めておこう.

定理 3.18 $m \geq 1, n \geq 1$ とするとき, $K_m \star K_n$ の特性多項式は,

$$\varphi(x) = (x+1)^{m+n-4}((x-m-n+2)(x+1)^2 + (m-1)(n-1)(x+2)).$$

上の計算において, K_m, K_n を一般のグラフ G, H に置き換えて, 共通頂点を o として作った星形積 $G \star H$ を考えよう. ただし, G, H の頂点数は m, n とし, それらの隣接行列を B, C とする. $G \star H$ の隣接行列 A は上の議論で B_m, B_n を B, C で置き換えればよい. 隣接行列の表示 (3.11) において, B_{n-1} は $H \setminus \{o\}$ の誘導部分グラフの隣接行列 \tilde{C} で置き換わる. さらに, F は最下行だけに 1 が現れる. 最下行を順に f_1, f_2, \dots, f_{n-1} とすると $f_i \in \{0, 1\}$ であり, a と H の他の点との隣接状況を記述する. 以上の置き換えの下, 同様の計算をすると,

$$\varphi_{G \star H}(x) = \det(x - B) \det \left(x - \tilde{C} - \frac{\det(x - \tilde{B})}{\det(x - B)} \tilde{F} \right)$$

となる. ここで \tilde{B} は $G \setminus \{o\}$ の誘導部分グラフの隣接行列, $\tilde{F} = [f_i f_j]$ である.

完全グラフでは, \tilde{B}, \tilde{C} は頂点数が 1 つ減った完全グラフの隣接行列, $\tilde{F} = J_{n-1}$ というふう
に特別な形をもったため, 最終的に具体的な計算が可能であった. 一般のグラフの場合, これ
以上見やすい表示は求められそうにないが, 特別な系列のグラフについてなら面白い公式が
見つかるかもしれない.

4 スペクトル・グラフ理論

4.1 有限グラフのスペクトル

$G = (V, E)$ を頂点数 n の有限グラフとして, その隣接行列を A , 特性多項式を $\varphi_G(x)$ とする. A は実対称行列であるから, その固有値はすべて実数である. 大きさの順に $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_s$ とすれば, 特性多項式は,

$$\varphi_G(x) = (x - \lambda_1)^{m_1} \dots (x - \lambda_s)^{m_s}, \quad (4.1)$$

のように因数分解される. ここで, $m_i \geq 1$ は固有値 λ_i の (代数的) 重複度と呼ばれる. もちろん, $\sum_i m_i = n$ となる. A の固有値と重複度を表に表して,

$$\text{Spec}(G) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & \dots & \lambda_s \\ m_1 & m_2 & \dots & m_s \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

としたものを G のスペクトルという.

命題 4.1 2つのグラフ G, G' が同型 ($G \cong G'$) であれば, $\text{Spec}(G) = \text{Spec}(G')$ が成り立つ.

証明は明らかであろう. 逆は一般には成り立たない (後で例をあげる).

例 4.2

$$\begin{aligned} \text{Spec}(\bullet) &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, & \text{Spec}(\bullet \text{---} \bullet) &= \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \\ \text{Spec}(\bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet) &= \begin{pmatrix} -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}, & \text{Spec}\left(\begin{array}{c} \bullet \\ \diagup \quad \diagdown \\ \bullet \quad \bullet \end{array}\right) &= \begin{pmatrix} -1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

定理 4.3 (パスグラフ P_n のスペクトル)

$$\text{Spec}(P_n) = \begin{pmatrix} 2 \cos \frac{\pi}{n+1} & \dots & 2 \cos \frac{k\pi}{n+1} & \dots & 2 \cos \frac{n\pi}{n+1} \\ 1 & \dots & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

証明 まず, 第2種チェビシエフ多項式の零点を求めよう. 定義によって,

$$U_n(x) = \frac{\sin(n+1)\theta}{\sin \theta}, \quad x = \cos \theta,$$

であるが, 右辺を見れば,

$$\theta = \frac{k\pi}{n+1}, \quad k = 1, 2, \dots, n,$$

のときに, $U_n(\cos \theta) = 0$ となることがわかる. そのような n 個の θ に対して $\cos \theta$ の値はすべて異なる. $U_n(x)$ は n 次多項式であるから, その零点は複素平面に重複度を込めてちょうど n 個あるが, すでに異なる n 個が見つかっている. したがって,

$$x_k = \cos \frac{k\pi}{n+1}, \quad k = 1, 2, \dots, n, \quad (4.3)$$

が $U_n(x)$ の零点であり, 重複度は 1 である.

定理 3.17 によって, P_n の特性多項式は $U_n(x/2)$ であることがわかっている. P_n のスペクトルは特性多項式の零点であるが, $U_n(x/2)$ の零点は $2x_1, \dots, 2x_n$ である. したがって, P_n のスペクトルは,

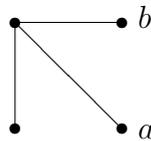
$$\lambda_k = 2 \cos \frac{k\pi}{n+1}, \quad k = 1, 2, \dots, n,$$

であり, それぞれの重複度は 1 である. ■

演習 16 次の公式を証明せよ [Hint: $\text{Spec}(P_n)$].

$$\prod_{k=1}^m 2 \cos \frac{k\pi}{2m+1} = 1.$$

演習 17 グラフのスペクトルを利用して, 下図のグラフで a から b に至る長さ m のウォークの個数を求めよ.



4.2 グラフの最大固有値

グラフのスペクトル $\text{Spec}(G)$ の存在範囲を抑えることは有用である. 言い換えると, G の最大固有値 $\lambda_{\max}(G)$ と最小固有値 $\lambda_{\min}(G)$ の大きさの評価は重要な課題である. ここでは, 最大固有値と次数分布との関連でよく知られた事実を述べておく.

グラフの頂点の次数は様々であるが, その分布を表す量 (統計量) として,

$$\begin{aligned} d_{\max}(G) &= \max\{\deg(x) \mid x \in V\}, \\ d_{\min}(G) &= \min\{\deg(x) \mid x \in V\}, \\ \bar{d}(G) &= \frac{1}{|V|} \sum_{x \in V} \deg(x) \end{aligned}$$

に注目する. 明らかに,

$$d_{\min}(G) \leq \bar{d}(G) \leq d_{\max}(G)$$

となっている.

定理 4.4 有限グラフ $G = (V, E)$ に対して,

$$d_{\min}(G) \leq \bar{d}(G) \leq \lambda_{\max}(G) \leq d_{\max}(G)$$

が成り立つ.

系 4.5 もし G が κ -正則グラフであれば, $\lambda_{\max}(G) = \kappa$.

証明は易しい. 例えば, [5, Chapter 8] を見よ.

4.3 グラフのスペクトル分布 (固有値分布)

グラフのスペクトル (4.2) はそのままでは計算に乗らず扱いにくいので, 対応して確率分布

$$\mu = \frac{1}{|V|} \sum_{i=1}^s m_i \delta_{\lambda_i},$$

を考えるのが面白い.¹ これをグラフの**スペクトル分布**または**固有値分布**という. グラフの固有値を, 重複度も込めて全部書き並べて, $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, n = |V|$, のように表示するときは, スペクトル分布は

$$\mu = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \delta_{\lambda_k}$$

で与えられることになる.

注意 4.6 グラフのスペクトルからスペクトル分布を作ったとき, どれほどの情報が落ちるのか? 実はよく認識していない. 例えば, 見かけ上, 頂点数の情報が失われるが, 本当にそうだろうか? 関連して, いくつかの問題が考えられるが, どの程度の議論が可能か, あるいは実のある問題なのかは不明である. 例えば, s 個の点に乗っている離散分布

$$\mu = \sum_{i=1}^s w_i \delta_{\lambda_i} \quad w_i > 0,$$

が与えられたとする.

(1) μ があるグラフのスペクトル分布となるのはどのような場合か?

μ がグラフのスペクトル分布なら w_i はすべて有理数であり, λ_i は代数的数である.

(2) グラフのスペクトル分布が μ となったとき, G の頂点数は一意的に定まるか?

μ がグラフのスペクトル分布なら $w_i = m_i/n$ のように通分して表示することができる. n はグラフの頂点数の候補であるが, 一意的に決まるのか? 特性多項式が一致する非同型なグラフが存在するが, それらのグラフの頂点数は同じである.

¹実数 λ に対して, δ_λ は λ に集中している**点測度** (デルタ測度ともいう) である. それは \mathbb{R} 上の確率分布であって, ボレル集合 E に対して, $\lambda \in E$ のときに $\delta_\lambda(E) = 1$ となり, そうでないときは $\delta_\lambda(E) = 0$ を返す. 有界連続関数 $f(x)$ に対して, $\int_{\mathbb{R}} f(x) \delta_\lambda(dx) = f(\lambda)$.

例 4.7 (パスグラフ P_n のスペクトル分布)

$$\mu = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \delta_{2 \cos \frac{k\pi}{n+1}}$$

例 4.8 (完全グラフ K_n のスペクトル分布) 演習 14 によって,

$$\mu = \frac{n-1}{n} \delta_{-1} + \frac{1}{n} \delta_{n-1}$$

定理 4.9 有限グラフのスペクトル分布 μ の m 次モーメントについて,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^m \mu(dx) = \frac{1}{|V|} \text{Tr } A^m, \quad m = 1, 2, \dots, \quad (4.4)$$

が成り立つ.

証明 隣接行列 A の固有値を, 重複度も込めて $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ とする. 定義によって,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^m \mu(dx) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \lambda_k^m.$$

一方, A^m の固有値は $\lambda_1^m, \dots, \lambda_n^m$ であるから, それらの和は $\text{Tr } A^m$ に一致する. したがって, (4.4) が成り立つ. ■

演習 18 有限グラフ $G = (V, E)$ の隣接行列を A とする. [定理 3.15 と比較せよ.]

- (1) $\text{Tr } A = 0$.
- (2) $\text{Tr } (A^2) = 2|E|$.
- (3) $\text{Tr } (A^3) = 6\Delta$.

演習 19 頂点数 n の有限グラフ $G = (V, E)$ の固有値を $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ とし, スペクトル分布を μ とする. 次の主張を示せ. [命題 4.9 と演習 18 から容易.]

- (1) μ の平均値は 0 である: $\text{mean}(\mu) = 0$.
- (2) G の平均次数を \bar{d} とすると,

$$\bar{d} = 2 \frac{|E|}{|V|} = \text{var}(\mu) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \lambda_i^2.$$

演習 20 次のグラフのスペクトル分布を求めよ.



4.4 スペクトルの一致するグラフ (Isospectral Graphs)

命題 4.1 の逆は不成立である. つまり, グラフのスペクトルはグラフを再現するには不十分であり, $n(n-1)/2$ の自由度のある隣接行列から n の自由度をもつスペクトルに落とした段階で情報が失われている. したがって, 同じスペクトルをもつグラフは互いにどのような関係があるかは興味深い問題である [13].

注意 4.10 頂点数が 4 以下のグラフでは, スペクトルが一致するものはない. これは, すべてのグラフを書き出して, 特性多項式を比較すれば容易に検証できる.

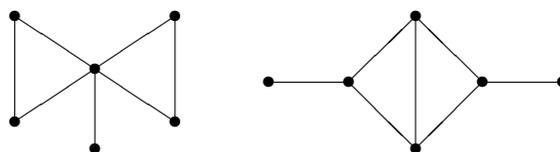
以下に, 非同型であるがスペクトルが一致するグラフのペアで有名なものを 3 組あげる.

例 4.11 $\varphi(x) = x^5 - 4x^3 = x^3(x-2)(x+2)$.

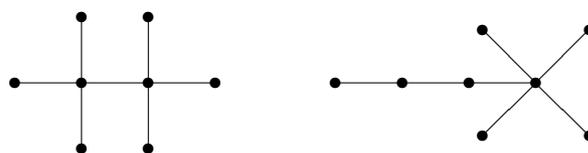


例 4.12 (Baker)

$$\begin{aligned}\varphi(x) &= x^6 - 7x^4 - 4x^3 + 7x^2 + 4x - 1 \\ &= (x-1)(x+1)^2(x^3 - x^2 - 5x + 1)\end{aligned}$$



例 4.13 (Collatz–Sinogowitz [12]) $\varphi(x) = x^8 - 7x^6 + 9x^4$



5 大きなグラフの漸近的スペクトル解析

5.1 スペクトル分布の漸近挙動

5.1.1 大きなパスグラフ P_n ($n \rightarrow \infty$)

例 4.7 ですでに示したように, P_n のスペクトル分布は,

$$\mu_n = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \delta_{2 \cos \frac{k\pi}{n+1}}$$

で与えられる. 有界な連続関数 $f(x)$ に対して, μ_n による積分は

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \mu_n(dx) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f\left(2 \cos \frac{k\pi}{n+1}\right)$$

となる. 右辺はリーマン和であるから,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \mu_n(dx) = \int_0^1 f(2 \cos \pi t) dt = \int_{-2}^2 f(x) \frac{dx}{\pi \sqrt{4-x^2}}$$

のように計算される. 最後の積分において,

$$\frac{dx}{\pi \sqrt{4-x^2}} \chi_{(-2,2)}(x) dx$$

は平均 0, 分散 2 の**逆正弦則**と呼ばれる確率分布になっている. 一般に, 有界連続関数の積分の意味で, 確率分布列が別の確率分布に収束するとき, これを**弱収束**という. この用語を用いると,

命題 5.1 パス・グラフ P_n のスペクトル分布は平均 0, 分散 2 の逆正弦則に弱収束する.

5.1.2 大きな完全グラフ K_n ($n \rightarrow \infty$)

完全グラフに対して, 前節と同じことを考えよう. 完全グラフ K_n のスペクトル分布は

$$\mu_n = \frac{1}{n} \delta_{n-1} + \frac{n-1}{n} \delta_{-1}$$

である. $f(x)$ を有界連続関数として,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \mu_n(dx) = \frac{1}{n} f(n-1) + \frac{n-1}{n} f(-1) \rightarrow f(-1), \quad \text{as } n \rightarrow \infty,$$

が得られる. ここで,

$$f(-1) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta_{-1}(dx)$$

に注意すると, K_n のスペクトル分布は点測度 δ_{-1} に弱収束していることがわかる. しかしながら, 基本的な統計量について,

$$\text{mean}(\mu_n) = 0, \quad \text{var}(\mu_n) = 2 \frac{|E|}{|V|} = n-1,$$

$$\text{mean}(\delta_{-1}) = -1, \quad \text{var}(\delta_{-1}) = 0$$

となっていて, δ_{-1} が大きな n の完全グラフ K_n の性質を反映しているとは言い難い. その原因の1つは μ_n の分散が発散している

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \text{var}(\mu_n) = \infty$$

にある. 確率論で典型的であるが, 分散を有限に抑えたスケール変換ののちに極限移行して有用な情報を取り出すことができる. 一般に, 確率分布 μ の平均値が $\text{mean}(\mu) = m$, 分散が $\text{var}(\mu) = \sigma^2$ で与えられているとき, μ の規格化 (標準化) $\bar{\mu}$ が

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \bar{\mu}(dx) = \int_{-\infty}^{+\infty} f\left(\frac{x-m}{\sigma}\right) \mu(dx)$$

によって定義される. このとき, 確かに $\text{mean}(\bar{\mu}) = 0$, $\text{var}(\bar{\mu}) = 1$ となっている.

命題 5.2 K_n の規格化されたスペクトル分布は δ_0 に弱収束する.

証明 $f(x)$ を \mathbb{R} 上の有界連続関数とする. 定義によって

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \bar{\mu}_n(dx) &= \int_{-\infty}^{+\infty} f\left(\frac{x}{\sqrt{n-1}}\right) \mu_n(dx) \\ &= \frac{1}{n} f\left(\frac{n-1}{\sqrt{n-1}}\right) + \frac{n-1}{n} f\left(\frac{-1}{\sqrt{n-1}}\right) \end{aligned}$$

となる. したがって,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \bar{\mu}_n(dx) = f(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta_0(dx)$$

となり, 主張は示された. ■

第 5.1.1 節で, P_n のスペクトル分布を議論したときは, 規格化をしなかった. はたして, それでよかったのだろうか? P_n のスペクトル分布 μ_n について

$$\text{mean}(\mu_n) = 0, \quad \text{var}(\mu_n) = 2 \frac{|E|}{|V|} = \frac{2(n-1)}{n}$$

が成り立つ. K_n の場合と違って, 分散が発散せず, 有界にとどまっていることがわかる. このことが効いてきて, 規格化せずとも意味のある極限分布が得られているといえる.

なお, 有限グラフのスペクトル分布の分散はそのグラフの平均次数に一致することを思い出しておこう. $n \rightarrow \infty$ において分散が発散しないということは, 考えているグラフ列において, グラフの平均次数が有界に抑えられていることと同値である.

演習 21 n 頂点からなるサイクル C_n について $\text{Spec}(C_n)$ を求めて, $n \rightarrow \infty$ におけるスペクトル分布を調べよ.

5.2 代数的確率空間としての隣接代数

隣接代数 $\mathcal{A}(G)$ に状態 φ を考え合わせることで、隣接行列 A を代数的確率変数として取り扱うことができる。このメリットは、量子確率論の視点や手法 (たとえば、量子分解) が導入できる点にある。

5.2.1 トレース状態

$G = (V, E)$ を有限グラフとする。規格化されたトレース

$$\varphi_{\text{tr}}(a) = \frac{1}{|V|} \text{Tr } a, \quad a \in \mathcal{A}(G),$$

は、隣接代数 $\mathcal{A}(G)$ 上の状態になる。

命題 5.3 隣接行列 A の φ_{tr} におけるスペクトル分布は、グラフのスペクトル分布 (隣接行列 A の固有値分布) に一致する。

証明 $G = (V, E)$ を頂点数 n の有限グラフとする。隣接行列 A の異なる固有値を小さいものから順に並べて、 $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_s$ とし、それらの重複度を m_1, m_2, \dots, m_s とする。グラフ G のスペクトル分布 (固有値分布) は

$$\mu = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^s m_i \delta_{\lambda_i} \quad (5.1)$$

で定義される。一方、代数的確率変数として A の φ_{tr} におけるスペクトル分布は、

$$\varphi_{\text{tr}}(A^m) = \int_{\mathbb{R}} x^m \mu'(dx), \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

を満たす μ' として定義される。(5.1) から、

$$\int_{\mathbb{R}} x^m \mu(dx) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^s m_i \int_{\mathbb{R}} x^m \delta_{\lambda_i}(dx) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^s m_i \lambda_i^m = \frac{1}{n} \text{Tr } A^m = \varphi_{\text{tr}}(A^m).$$

したがって、

$$\int_{\mathbb{R}} x^m \mu(dx) = \int_{\mathbb{R}} x^m \mu'(dx), \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

が成り立つ。 μ は有限型 (台が有限集合) であるから、モーメント列によって一意的に定まる。よって、 $\mu = \mu'$ 。 ■

5.2.2 真空状態

グラフ $G = (V, E)$ は有限でも無限でもよい。第 3.3 節で導入した空間 $C_0(V)$ を用いる。その標準的な基底を $\{\delta_x; x \in V\}$ 、内積を $\langle \cdot, \cdot \rangle$ とする。 G の頂点を 1 つとり、 $o \in V$ とする。 δ_o に付随するベクトル状態が

$$\varphi_o(a) = \langle \delta_o, a \delta_o \rangle, \quad a \in \mathcal{A}(G),$$

で定義される。これを頂点 $o \in V$ に付随する**真空状態**という。 A の φ_o におけるスペクトル分布を μ とすれば、

$$\langle \delta_o, A^m \delta_o \rangle = \varphi_o(A^m) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^m \mu(dx), \quad m = 1, 2, \dots,$$

が成り立つ。左辺は、 o を出発して m ステップで o に戻る歩道の個数である。そのような組合せ数は μ を用いて積分表示されるということである。なお、真空状態を考えると、実際上、 $o \in V$ を含む連結成分だけを問題にすることになるから、はじめからグラフは連結であるものとする。

5.3 グラフの階層化と隣接行列の量子分解

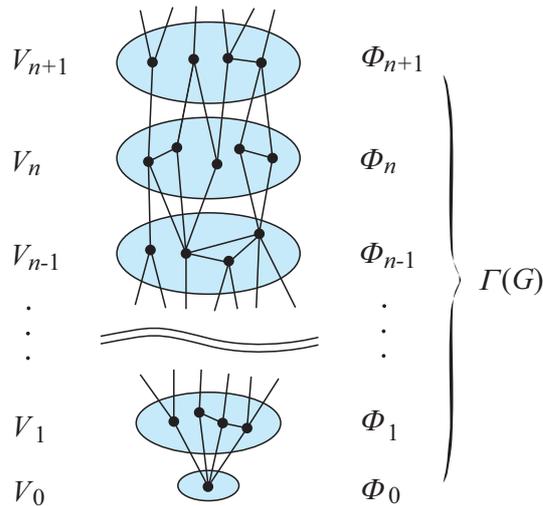
有限または無限グラフ $G = (V, E)$ は連結であるとし、原点 $o \in V$ が定まっているものとする。いつも通り、局所有限性は常に仮定されている。

5.3.1 グラフの階層化

このとき、グラフには自然な階層構造が導入される：

$$V = \bigcup_{n=0}^{\infty} V_n, \quad V_n = \{x \in V; \partial(o, x) = n\}. \quad (5.2)$$

特に、 $V_0 = \{o\}$, $V_1 = \{x \in V; x \sim o\}$ である。もし G が有限グラフであれば、ある番号 $m_0 \geq 1$ で $V_{m_0-1} \neq \emptyset$, $V_{m_0} = \emptyset$ となり、それ以降はすべて空集合である。 G が無限グラフならば、局所有限を常に仮定していたので、すべての n に対して $V_n \neq \emptyset$ となる。



次に、各 $n = 0, 1, 2, \dots$ に対して $\Phi_n \in C_0(V)$ を

$$\Phi_n = |V_n|^{-1/2} \sum_{x \in V_n} \delta_x \quad (5.3)$$

で定義する ($V_n = \emptyset$ のときは定義しない). 明らかに

$$\langle \Phi_m, \Phi_n \rangle = \delta_{mn}$$

が成り立つ. $\{\Phi_n\}$ によって張られる $C_0(V)$ の部分空間を $\Gamma(G)$ と書き, グラフ G の階層化 (5.2) に付随するフォック空間と呼ぶことにする.

5.3.2 隣接行列の量子分解

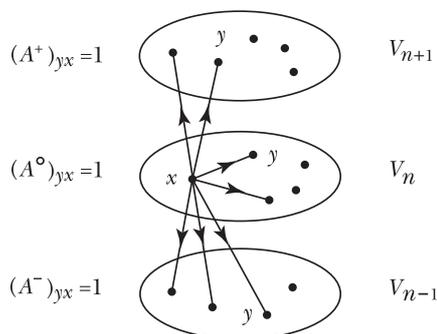
補題 5.4 グラフ G の階層化が (5.2) のように与えられているとする. もし $x \in V_n$ かつ $y \sim x$ であれば, $y \in V_{n+1} \cup V_n \cup V_{n-1}$.

証明 直感的には自明であろう. 形式的には, グラフ距離の三角不等式を用いるとよい. ■

隣接行列 A の量子成分 A^+, A^-, A° を定義しよう. $x \in V_n$ として

$$(A^\epsilon)_{yx} = \begin{cases} A_{yx} = 1, & y \sim x \text{ かつ } y \in V_{n+\epsilon}, \\ 0, & \text{その他,} \end{cases} \quad \epsilon \in \{+, -, \circ\}.$$

ただし, $n + \epsilon$ は $\epsilon = +, -, \circ$ に応じて, $n + 1, n - 1, n$ を意味する.



容易に確認できるように,

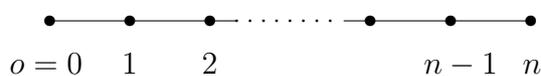
$$(A^+)^* = A^-, \quad (A^\circ)^* = A^\circ$$

および

$$A = A^+ + A^- + A^\circ \tag{5.4}$$

が成り立つ. 後者は補題 5.4 の帰結である. (5.4) を A の量子分解という. 量子分解はグラフの階層化 (つまり, 原点 $o \in V$ のとり方) に依存して定まる.

例 5.5 (1) P_n .



$$\begin{aligned}\omega_0(x) &= |\{y \in V_n; y \sim x\}|, \\ \omega_-(x) &= |\{y \in V_{n-1}; y \sim x\}|\end{aligned}$$

と定義する. まとめて,

$$\omega_\epsilon(x) = |\{y \in V_{n+\epsilon}; y \sim x\}|, \quad \epsilon \in \{+, -, 0\},$$

とするのが便利である. $\epsilon = +, -, 0$ に従って, ϵ の値を $+1, -1, 0$ と対応させている. 明らかに,

$$\deg(x) = \omega_+(x) + \omega_0(x) + \omega_-(x), \quad x \in V.$$

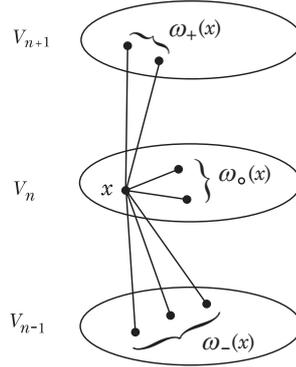


図 5.1: Stratification and $\omega_\epsilon(x)$

補題 5.6 $\epsilon \in \{+, -, 0\}$ と $n = 0, 1, 2, \dots$ に対して,

$$A^\epsilon \Phi_n = \frac{1}{\sqrt{|V_n|}} \sum_{y \in V_{n+\epsilon}} \omega_{-\epsilon}(y) \delta_y. \quad (5.5)$$

証明 まず, 量子成分の定義によって, $\epsilon \in \{+, -, 0\}$ に対して,

$$A^\epsilon \delta_x = \sum_{y \in V_{n+\epsilon}, y \sim x} \delta_y, \quad x \in V_n.$$

ここでは, A^+ を考えよう. 残り 2 つも同様である. (5.3) に上の作用をあてはめれば,

$$\sqrt{|V_n|} A^+ \Phi_n = \sum_{x \in V_n} A^+ \delta_x = \sum_{y \in V_{n+1}} \omega_-(y) \delta_y.$$

これが求めたかった式である. ■

命題 5.7 $\Gamma(G)$ が量子成分 A^+, A^-, A^0 の作用で不変になるための必要十分条件は, 各 ϵ に対して $|\omega_\epsilon(x)|$ が $x \in V_n$ の取り方によらず n だけで決まることである. このとき, $(\Gamma(G), \{\Phi_n\}, A^+, A^-, A^0)$ は相互作用フォック空間になり, そのヤコビ係数は,

$$\omega_n = \omega_-(x)^2 \frac{|V_n|}{|V_{n-1}|}, \quad x \in V_n; \quad \alpha_n = \omega_0(y), \quad y \in V_{n-1}, \quad (5.6)$$

で与えられる ($n = 1, 2, \dots$).

証明 $\Gamma(G)$ が量子成分 A^+, A^-, A° の作用で不変であると仮定する. 特に, 各 $n = 0, 1, 2, \dots$ に対して,

$$A^+ \Phi_n = \sqrt{\omega_{n+1}} \Phi_{n+1}$$

となる定数 ω_n が存在する. (5.5) と見比べると,

$$\sqrt{\omega_{n+1}} \Phi_{n+1} = \frac{\sqrt{\omega_{n+1}}}{\sqrt{|V_{n+1}|}} \sum_{x \in V_{n+1}} \delta_x = \frac{1}{\sqrt{|V_n|}} \sum_{y \in V_{n+1}} \omega_-(y) \delta_y$$

となるから, $\omega_-(y)$ は $y \in V_{n+1}$ によらない定数であり,

$$\omega_{n+1} = \omega_-(y)^2 \frac{|V_{n+1}|}{|V_n|}$$

が成り立つ. 同様に, 各 $n = 0, 1, 2, \dots$ に対して,

$$A^\circ \Phi_n = \alpha_{n+1} \Phi_n$$

となる定数 α_{n+1} が存在する. 上と同様の考察で, $\omega_o(y)$ は $y \in V_n$ によらない定数であり,

$$\alpha_{n+1} = \omega_o(y)$$

がわかる. さらに, $A^- \Phi_n = \sqrt{\omega_n} \Phi_{n-1}$ が確認できるので, 確かに $(\Gamma(G), \{\Phi_n\}, A^+, A^-, A^\circ)$ は (5.6) をヤコビ係数とする相互作用フォック空間である. 逆の主張は, 上の議論をおおむね逆にたどればよい. ■

5.3.4 再論: P_n, K_n のスペクトル分布

頂点集合を $V = \{0, 1, 2, \dots, n-1\}$ とするパス・グラフ P_n において端点を原点 $o = 0$ として階層化する. 各階層は1点だけを含むことになるので, 命題 5.7 の条件が成り立つ. 実際, $\Gamma(P_n)$ のヤコビ係数は

$$\begin{aligned} |V_0| &= |V_1| = \dots = |V_{n-1}| = 1, \\ \omega_1 &= \dots = \omega_{n-1} = 1, \quad \alpha_1 = \dots = \alpha_n = 0 \end{aligned}$$

のように求められる. したがって, $n \rightarrow \infty$ の極限は自由フォック空間で記述される.

定理 5.8 P_n の端点に付随するベクトル状態 (真空状態ともいう) における隣接行列のスペクトル分布は, 自由フォック空間 $(\Gamma(\mathbb{C}), \{\Psi_n\}, B^+, B^-)$ の真空状態における $B^+ + B^-$ のスペクトル分布にモーメント収束する. つまり,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle A^m \rangle_o = \langle \Psi_0, (B^+ + B^-)^m \Psi_0 \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-2}^{+2} x^m \sqrt{4 - x^2} dx, \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

ここで, 左辺の A は P_n の隣接行列である.

K_n の頂点を1つ選んで0として階層化すれば, 2階層しかなく,

$$|V_0| = 1, \quad |V_1| = n - 1$$

となる. 命題5.7の条件が成り立つことはすぐわかり, $\Gamma(K_n)$ のヤコビ係数は

$$\omega_1 = n - 1; \quad \alpha_1 = 0, \quad \alpha_2 = n - 2$$

のように求められる. 対応するスペクトル分布 μ のスチルチェス変換は

$$G(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mu(dx)}{z-x} = \frac{1}{z - \frac{n-1}{z-(n-2)}} = \frac{1}{n} \left(\frac{n-1}{z+1} + \frac{1}{z-(n-1)} \right)$$

となる. したがって,

$$\mu = \frac{n-1}{n} \delta_{-1} + \frac{1}{n} \delta_{n-1}$$

となる. これが, K_n の隣接行列 A の o に付随するベクトル状態におけるスペクトル分布である. K_n の対称性から, この分布は o の選び方によらない. したがって, トレース状態におけるスペクトル分布 (例4.8) に一致する.

5.4 スパイダーネット

一般に, 連結グラフでサイクルを含まないものを**樹木** (tree) という. 各頂点の次数が一定 (κ -正則, $\kappa \geq 2$) であるような樹木は**等質樹木**と呼ばれる. 次数2の等質樹木は \mathbb{Z} であり, これはあまり面白くない. なお, 等質樹木は必ず無限グラフになり, 次数ごとに同型な等質樹木は1つだけ存在する. ここでは, 等質樹木に大きなサイクルを付け加えた**スパイダーネット**と呼ばれるグラフを導入する. ランダムウォーク, 出生死亡過程, 量子ウォークなどの関連で興味深い研究対象である [31, 34, 38, 39].

いつも通り, $\epsilon \in \{+, -, o\}$ と $n = 0, 1, 2, \dots$ に対して,

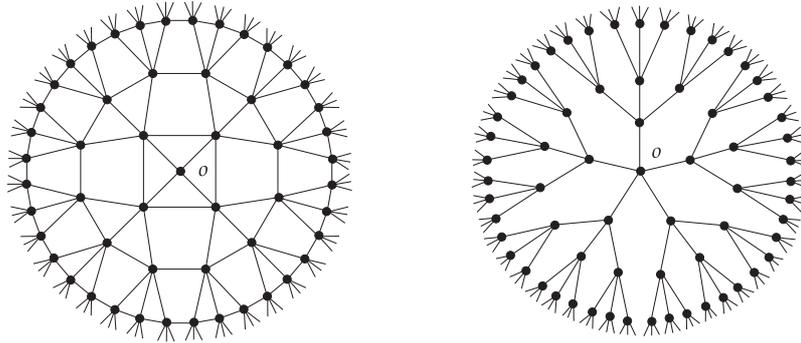
$$\omega_\epsilon(x) = |\{y \in V; y \sim x, \partial(o, y) = \partial(o, x) + \epsilon\}|, \quad x \in V,$$

とする.

定義 5.9 a, b, c を $a \geq 1, b \geq 2, 1 \leq c \leq b - 1$ を満たす整数とする. スパイダーネットとは, 原点 $o \in V$ が定まったグラフであって,

$$\begin{cases} \omega_+(o) = a, \\ \omega_-(o) = 0, \\ \omega_o(o) = 0, \end{cases} \quad \begin{cases} \omega_+(x) = c, \\ \omega_-(x) = 1, \\ \omega_o(x) = b - 1 - c, \end{cases} \quad \text{for } x \neq o \quad (5.7)$$

を満たすものをいう. このようなスパイダーネットを $S(a, b, c)$ で表す.



スパイダーネットの例: $S(4, 6, 3)$, $S(5, 4, 3)$

スパイダーネットはパラメータ a, b, c で一意的に定まっていらないことに注意しておこう. スパイダーネット $S(a, b, b-1)$ には実際にはサイクルはなく樹木になる. さらに, $S(a, a, a-1)$ は次数 a の等質樹木である.

注意 5.10 スパイダーネット $S(a, b, c)$ において,

$$\deg(x) = \begin{cases} a, & \text{if } x = o, \\ b, & \text{otherwise,} \end{cases}$$

が成り立つので, 一般には正則グラフではないが, 正則グラフにかなり近い. スパイダーネットは半正則グラフとも呼ばれ, スペクトル幾何的な性質で興味をもたれている [58].

注意 5.11 距離推移的 (distance-transitive) な無限グラフはスパイダーネットの例になる. 整数の組 $a, b \geq 2$ に対して, 完全グラフ K_b の a 個のコピーを各頂点で樹木のように張り合わせてできるグラフを $\Gamma(a, b)$ とする. たとえば, $\Gamma(a, 2)$ は次数 a の等質樹木である. $\Gamma(a, b)$ はスパイダーネット $S(a(b-1), a(b-1), (a-1)(b-1))$ である (原点は任意である). MacPherson の分類によれば, $\{\Gamma(a, b); a, b \geq 2\}$ は局所有限な距離推移的なグラフを尽くす.

補題 5.12 $G = S(a, b, c)$ をスパイダーネットとし, A をその隣接行列とする. このとき, $\Gamma(G)$ は量子成分 A^ϵ , $\epsilon \in \{+, -, \circ\}$, の下で不変である. さらに,

$$A^+ \Phi_0 = \sqrt{a} \Phi_1, \quad A^+ \Phi_n = \sqrt{c} \Phi_{n+1}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (5.8)$$

$$A^- \Phi_0 = 0, \quad A^- \Phi_1 = \sqrt{a} \Phi_0, \quad A^- \Phi_n = \sqrt{c} \Phi_{n-1}, \quad n = 2, 3, \dots, \quad (5.9)$$

$$A^\circ \Phi_0 = 0, \quad A^\circ \Phi_n = (b-1-c) \Phi_n, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (5.10)$$

が成り立つ.

証明 まず, (5.7) から

$$|V_0| = 1, \quad |V_n| = ac^{n-1}, \quad n = 1, 2, \dots$$

$n = 0, 1, 2, \dots$ に対して,

$$\sqrt{|V_n|} A^+ \Phi_n = \sum_{x \in V_n} A^+ \delta_x = \sum_{y \in V_{n+1}} \delta_y = \sqrt{|V_{n+1}|} \Phi_{n+1}$$

となるから, (5.8) が従う. 残りの関係式も同様である. ■

補題 5.12 を相互作用フォック空間の言葉で述べなおすと,

定理 5.13 スパイダーネット $G = S(a, b, c)$ に対して, $(\Gamma(G), \{\Phi_n\}, A^+, A^-, A^0)$ は

$$\omega_1 = a, \omega_2 = \omega_3 = \dots = c; \quad \alpha_1 = 0, \alpha_2 = \alpha_3 = \dots = b - 1 - c,$$

をヤコビ係数とする相互作用フォック空間である. したがって, $\mu_{a,c,b-1-c}$ をパラメータ $a, c, b-1-c$ の自由マイクスナー分布として,

$$\langle A^m \rangle_o = \int_{-\infty}^{+\infty} x^m \mu_{a,c,b-1-c}(dx), \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

が成り立つ.

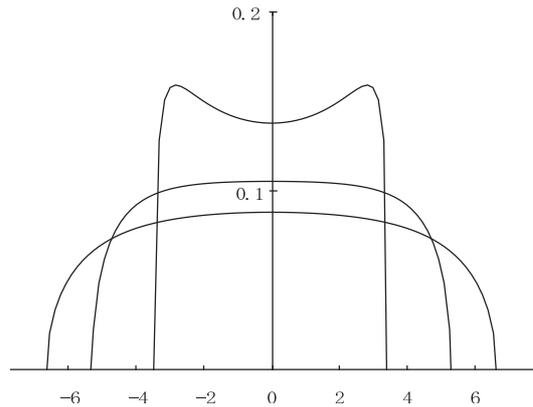
スパイダーネットのパラメータを特殊化して $S(\kappa, \kappa, \kappa - 1)$ は次数 κ の等質樹木である. このとき, A のスペクトル分布はパラメータ $\kappa, \kappa - 1, 0$ の自由マイクスナー分布であるが, これを **ケステン分布** という. 言い換えると, パラメータ κ のケステン分布とは, ヤコビ係数

$$\omega_1 = \kappa, \omega_2 = \omega_3 = \dots = \kappa - 1; \quad \alpha_1 = \alpha_2 = \dots = 0,$$

で定まる確率分布のことである. それは密度関数

$$\rho_\kappa(x) = \frac{1}{2\pi} \frac{\kappa \sqrt{4(\kappa - 1) - x^2}}{\kappa^2 - x^2}, \quad |x| \leq 2\sqrt{\kappa - 1}.$$

をもち, 点測度は現れない. Kesten [38] は, N 個の生成元をもつ自由群のケーリー・グラフ (次数 $2N$ の等質樹木) において, 等方的ランダムウォークの推移行列 $P_N = (2N)^{-1} A_{2N}$ の δ_e における分布を導いた. それは, $\rho_\kappa(x)$ に簡単なスケール変換を施すことで得られる.



ケステン分布: $\rho_4, \rho_8, \rho_{12}$

演習 22 ケステン分布を分散が 1 になるように正規化して, $\kappa \rightarrow \infty$ とするとウィグナー半円則に収束することを示せ.

定理 5.13 は, スパイダーネット上のランダム・ウォークの再帰性, グローバー・ウォークの局在性を示すのに有用である [39].

5.5 $\Gamma(G)$ が A の量子成分に関して漸近的に不変な場合

まず, $\Gamma(G)$ が A の量子成分に関して漸近的に不変になる例として整数格子 \mathbb{Z}^N を取り上げよう. 隣接行列を A_N とする. 原点を $o = (0, \dots, 0)$ として, δ_o における A_N のスペクトル分布の高次元極限 $N \rightarrow \infty$ に興味がある. \mathbb{Z}^N を

$$\mathbb{Z}^N = \bigcup_{n=0}^{\infty} V_n, \quad V_n = \{x \in \mathbb{Z}^N; \partial(x, o) = n\},$$

のように階層化して, 各階層に対応する単位ベクトル $\Phi_n \in C_0(\mathbb{Z}^N)$ を

$$\Phi_n = |V_n|^{-1/2} \sum_{x \in V_n} \delta_x, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

で定義する. 任意の頂点 $x \in V$ に隣接する点は, すぐ上または下の階層にだけ存在することから, 隣接行列 A_N の量子分解は,

$$A_N = A_N^+ + A_N^-$$

で与えられる. 簡単な考察によって,

$$\begin{aligned} \frac{A_N^+}{\sqrt{2N}} \Phi_n &= \sqrt{n+1} \Phi_{n+1} + O(N^{-1/2}), \\ \frac{A_N^-}{\sqrt{2N}} \Phi_n &= \sqrt{n} \Phi_{n-1} + O(N^{-1}), \end{aligned}$$

が得られる. つまり, $\Gamma(\mathbb{Z}^N)$ は A_N の量子成分 A_N^\pm で不変ではないが, $N \rightarrow \infty$ において「ほぼ」不変である. そのおかげで,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{A_N^\pm}{\sqrt{2N}} = B^\pm$$

はボゾン・フォック空間の生成・消滅作用素の作用に一致する. さらに, ボゾン・フォック空間において $B^+ + B^-$ の真空状態における分布は標準ガウス分布であることが知られているので,

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \left\langle \delta_o, \left(\frac{A_N}{\sqrt{2N}} \right)^m \delta_o \right\rangle &= \langle \Omega, (B^+ + B^-)^m \Omega \rangle_{\text{Boson}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^m e^{-x^2/2} dx, \quad m = 1, 2, \dots, \end{aligned}$$

が成り立つ. ただし, Ω はボゾン・フォック空間の真空ベクトルである. つまり, 整数格子 \mathbb{Z}^N の隣接行列 A_N の真空状態におけるスペクトル分布は標準ガウス分布に漸近する.¹

上に述べてきた \mathbb{Z}^N に対する考察を一般化して, 成長する正則グラフ $G^{(\nu)} = (V^{(\nu)}, E^{(\nu)})$ の漸近的スペクトルを求めることができる. ここで ν は成長を表すパラメータであり, ある有向集合を走るものとする. 以降では, 考える極限を $\nu \rightarrow \infty$ のように簡単に書くことにする. まず,

$$\omega_\epsilon(x) = \{y \in V; \partial(o, y) = \partial(o, x) + \epsilon\}, \quad \epsilon \in \{+, -, 0\}$$

¹この結果は可換独立性とそれに関する中心極限定理からも導かれる.

として, ω_ϵ の各階層 V_n における 3 つの統計量を

$$\begin{aligned} M(\omega_\epsilon|V_n) &= \frac{1}{|V_n|} \sum_{x \in V_n} |\omega_\epsilon(x)| \\ \Sigma^2(\omega_\epsilon|V_n) &= \frac{1}{|V_n|} \sum_{x \in V_n} \{|\omega_\epsilon(x)| - M(\omega_\epsilon|V_n)\}^2 \\ L(\omega_\epsilon|V_n) &= \max\{|\omega_\epsilon(x)|; x \in V_n\} \end{aligned}$$

で定義する. 次に, これらの統計量が $\nu \rightarrow \infty$ でどのように挙動するかを仮定をおく. 簡単のため $\kappa(\nu) = \deg(G^{(\nu)})$ とおく.

$$(A1) \quad \lim_{\nu \rightarrow \infty} \kappa(\nu) = \infty.$$

(A2) 各 $n = 1, 2, \dots$ に対して,

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} M(\omega_-|V_n^{(\nu)}) \equiv \omega_n < \infty, \quad \lim_{\nu \rightarrow \infty} \Sigma^2(\omega_-|V_n^{(\nu)}) = 0, \quad \sup_{\nu} L(\omega_-|V_n^{(\nu)}) < \infty.$$

(A3) 各 $n = 0, 1, 2, \dots$ に対して,

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} \frac{M(\omega_o|V_n^{(\nu)})}{\sqrt{\kappa(\nu)}} \equiv \alpha_{n+1} < \infty, \quad \lim_{\nu \rightarrow \infty} \frac{\Sigma^2(\omega_o|V_n^{(\nu)})}{\kappa(\nu)} = 0, \quad \sup_{\nu} \frac{L(\omega_o|V_n^{(\nu)})}{\sqrt{\kappa(\nu)}} < \infty.$$

定理 5.14 (量子中心極限定理 [32]) $\{G^{(\nu)} = (V^{(\nu)}, E^{(\nu)})\}$ を成長する正則グラフで (A1)–(A3) を満たすものとする. $(\Gamma(\mathbb{C}), \{\Psi_n\}, B^+, B^-)$ を $\{\omega_n\}$ に付随する相互作用フォック空間とし, B° を $\{\alpha_n\}$ に付随する対角作用素とする. このとき, すべての $\epsilon_1, \dots, \epsilon_m \in \{+, -, \circ\}$ と $m = 1, 2, \dots, j, n = 0, 1, 2, \dots$ に対して,

$$\lim_{\nu} \left\langle \Phi_j^{(\nu)}, \frac{A_\nu^{\epsilon_m}}{\sqrt{\kappa(\nu)}} \cdots \frac{A_\nu^{\epsilon_1}}{\sqrt{\kappa(\nu)}} \Phi_n^{(\nu)} \right\rangle = \langle \Psi_j, B^{\epsilon_m} \cdots B^{\epsilon_1} \Psi_n \rangle$$

が成り立つ.

証明 道筋だけ記す. A_ν^ϵ や $\kappa(\nu)$ の表記で ν を省略してある.

(1) 量子成分の作用を計算する. $\epsilon \in \{+, -, \circ\}$, $n = 0, 1, 2, \dots$ に対して,

$$\frac{A^\epsilon}{\sqrt{\kappa}} \Phi_n = \gamma_{n+\epsilon}^\epsilon \Phi_{n+\epsilon} + S_{n+\epsilon}^\epsilon$$

とするとき,

$$\gamma_n^+ = M(\omega_-|V_n) \left(\frac{|V_n|}{\kappa|V_{n-1}|} \right)^{1/2}, \quad \gamma_n^- = M(\omega_+|V_n) \left(\frac{|V_n|}{\kappa|V_{n+1}|} \right)^{1/2}, \quad \gamma_n^\circ = \frac{M(\omega_o|V_n)}{\sqrt{\kappa}}.$$

(2) 各階層の大きさを評価する:

$$|V_n| = \left\{ \prod_{k=1}^n M(\omega_-|V_k) \right\}^{-1} \kappa^n + O(\kappa^{n-1}).$$

(3) γ_n^ϵ の極限を計算する:

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} \gamma_n^+ = \sqrt{\omega_n}, \quad \lim_{\nu \rightarrow \infty} \gamma_n^- = \sqrt{\omega_{n+1}}, \quad \lim_{\nu \rightarrow \infty} \gamma_n^\circ = \alpha_{n+1}.$$

(4) 量子成分の作用を計算する:

$$\begin{aligned} \frac{A^{\epsilon_m}}{\sqrt{\kappa}} \cdots \frac{A^{\epsilon_1}}{\sqrt{\kappa}} \Phi_n &= \gamma_{n+\epsilon_1}^{\epsilon_1} \gamma_{n+\epsilon_1+\epsilon_2}^{\epsilon_2} \cdots \gamma_{n+\epsilon_1+\cdots+\epsilon_m}^{\epsilon_m} \Phi_{n+\epsilon_1+\cdots+\epsilon_m} \\ &+ \sum_{k=1}^m \underbrace{\gamma_{n+\epsilon_1}^{\epsilon_1} \cdots \gamma_{n+\epsilon_1+\cdots+\epsilon_{k-1}}^{\epsilon_{k-1}}}_{(k-1) \text{ times}} \underbrace{\frac{A^{\epsilon_m}}{\sqrt{\kappa}} \cdots \frac{A^{\epsilon_{k+1}}}{\sqrt{\kappa}}}_{(m-k) \text{ times}} S_{n+\epsilon_1+\cdots+\epsilon_k}^{\epsilon_k}. \end{aligned}$$

(5) (4) で現れる誤差項を評価する:

$$\lim_{\nu \rightarrow \infty} \left\langle \Phi_j^{(\nu)}, \frac{A^{\epsilon_m}}{\sqrt{\kappa(\nu)}} \cdots \frac{A^{\epsilon_{k+1}}}{\sqrt{\kappa(\nu)}} S_{n+\epsilon_1+\cdots+\epsilon_k}^{\epsilon_k} \right\rangle = 0.$$

以上で, $A_\nu^m / \sqrt{\kappa(\nu)}$ の作用が, 相互作用フォック空間の作用に収束することがわかり, 結論が導かれる. ■

定理 5.14 を隣接行列 $A_\nu = A_\nu^+ + A_\nu^- + A_\nu^\circ$ に適用すれば, 次の結果が得られる.

定理 5.15 定理 5.14 の仮定の下で,

$$\begin{aligned} \lim_{\nu} \left\langle \delta_o, \left(\frac{A_\nu}{\sqrt{\deg(G^{(\nu)})}} \right)^m \delta_o \right\rangle &= \langle \Phi_0, (B^+ + B^- + B^\circ)^m \Psi_0 \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^m \mu(dx), \quad m = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

よって, $A_\nu / \sqrt{\deg(G^{(\nu)})}$ の真空状態におけるスペクトル分布は, ヤコビ係数 $(\{\omega_n\}, \{\alpha_n\})$ で定まる確率分布に (モーメントの意味で) 収束する.

注意 5.16 $-1 \leq q \leq 1$ に対して,

$$Q = Q_q = [q^{\partial(x,y)}]$$

によって定義される行列をグラフの Q -行列という. これを用いて定義される $\mathcal{A}(G)$ 上の線形関数

$$\varphi_q(a) = \langle Q_q \delta_o, a \delta_o \rangle, \quad a \in \mathcal{A}(G),$$

は, フォック空間でいうコヒーレント状態に近い性質をもつ ($Q_q \delta_o \in \ell^2(V)$ とは限らないが). ただし, φ_q の正値性 ($\varphi_q(a^*a) \geq 0$) は一般には保障されない.² 定理 5.14–5.15 は Q 行列による真空状態の 1 径数変形の場合に拡張される [32].

² φ_q がどのような $q \in [-1, 1]$ に対して隣接代数 $\mathcal{A}(G)$ 上の状態になるかは興味深い問題であるが未解決である. 関連して, Q が V 上の正値核になるための条件もあまり知られていない [8, 46, 48].

5.6 展望

隣接行列 A_ν の量子成分 A_ν^ϵ に対して, その漸近挙動を記述する相互作用フォック空間 $(\Gamma(\mathbb{C}), \{\Phi_n\}, B^+, B^-, B^\circ)$ を構成し, $B^+ + B^- + B^\circ$ の分布から A_ν の漸近的スペクトルを導出するという一般的な処方箋を確立した. この方法によれば, 組合せ論的な問題が極限移行した後に現れるので, 有限の ν で直面する組合せ論的な問題 (こちらのほうが込み入っていることが多い) を回避することができる. この方法を用いて, これまでに得られた具体例を表にしておこう.

グラフ	IFS	真空状態	その1径数変形
Hamming graphs $H(d, N)$	$\omega_n = n$ (Boson)	Gaussian ($N/d \rightarrow 0$) Poisson ($N/d \rightarrow \lambda^{-1} > 0$)	Gaussian or Poisson
Johnson graphs $J(v, d)$	$\omega_n = n^2$	exponential ($2d/v \rightarrow 1$) geometric ($2d/v \rightarrow p \in (0, 1)$)	'Poissonization' of exponential distribution
odd graphs O_k	$\omega_{2n-1} = n$ $\omega_{2n} = n$	two-sided Rayleigh	?
homogeneous trees \mathcal{T}_κ	$\omega_n = 1$ (free)	Wigner semicircle	free Poisson
integer lattices \mathbb{Z}^N	$\omega_n = n$ (Boson)	Gaussian	Gaussian
symmetric groups \mathfrak{S}_n (Coxeter)	$\omega_n = n$ (Boson)	Gaussian	Gaussian
Coxeter groups (Fendler)	$\omega_n = 1$ (free)	Wigner semicircle	free Poisson
Spidernets $S(a, b, c)$	$\omega_1 = 1$ $\omega_2 = \dots = q$	free Meixner law	(free Meixner law)

しかしながら, この手法が有効であるのは, $\Gamma(G_\nu)$ が A_ν^ϵ に関して「漸近的に」不変であるときに限る. そうでないときに量子分解の手法を拡張することは, 本質的に興味深い問題である. 多変数の直交多項式も関連してくるであろう.

本稿で扱ってきた「グラフの漸近的スペクトル解析」の端緒は Hora [23] にある. そこでは, 量子分解によらず, 古典的な結果を援用して距離正則グラフの隣接行列の漸近的スペクトルが導出された. それに示唆されて, Hashimoto–Obata–Tabei [20] は量子分解の方法をハミング・グラフに適用し, 古典的手法に現れる組合せ論的議論なしに極限分布 (Gauss 分布と Poisson 分布) が導出できることを示した. Hashimoto [18] は同様な方法をケーリー・グラフに適用して一般論を展開した. 量子分解のアイデアそのものは素朴なもので, これまでもさまざまな文脈に現れているが, 隣接行列や古典確率変数を量子確率論の枠組みで解析するための方法として, 「量子分解」という言葉を初めて使ったのは Hashimoto [18] である.

成長するグラフは複雑ネットワークのモデルとしても興味がある. グラフの成長を, 各時刻で「独立増分」が付け加わってゆくような形で定式化できると面白いと思う. グラフの「積構造」と量子確率論の「独立性」の関連を発展させることでヒントが得られるかも知れない. それに関連して, ランダム・グラフへの適用も興味深い研究テーマである.

関連図書

- [1] L. Accardi and M. Bożejko: *Interacting Fock spaces and Gaussianization of probability measures*, *Infin. Dimen. Anal. Quantum Probab. Relat. Top.* **1** (1998), 663–670.
- [2] L. Accardi, Y.-G. Lu and I. Volovich: “Quantum Theory and Its Stochastic Limit,” Springer–Verlag, 2002.
- [3] 明出伊類似・尾畑伸明: 量子確率論の基礎, 数理情報科学シリーズ 21, 牧野書店, 2003.
- [4] 青本和彦: 直交多項式入門, 数学書房, 2013.
- [5] N. Biggs: “Algebraic Graph Theory (2nd Ed.),” Cambridge University Press, 1993.
- [6] B. Bollobás: “Modern Graph Theory,” Graduate Texts in Mathematics Vol. 184, Springer-Verlag, New York, 1998.
- [7] B. Bollobás: “Random Graphs,” Cambridge Studies in Advanced Mathematics 73, Cambridge University Press, Cambridge, 2001.
- [8] M. Bożejko: *Positive-definite kernels, length functions on groups and noncommutative von Neumann inequality*, *Studia Math.* **XCIV** (1989), 107–118.
- [9] M. Bożejko, B. Kümmerer and R. Speicher: *q-Gaussian processes: Non-commutative and classical aspects*, *Commun. Math. Phys.* **185** (1997), 129–154.
- [10] M. Bożejko and J. Wysoczanski: *Remarks on t-transformations of measures and convolutions*, *Ann. Inst. H. Poincaré Probab. Stat.* **37** (2001), 737–761.
- [11] T. S. Chihara: “An Introduction to Orthogonal Polynomials,” Gordon and Breach, 1978.
- [12] L. Collatz and U. Sinogowitz: *Spektren endlicher Grafen*, *Abh. Math. Sem. Univ. Hamburg* **21** (1957), 63–77.
- [13] D. M. Cvetković, M. Doob and H. Sachs: “Spectra of Graphs,” Academic Press, 1979.
- [14] D. M. Chung, U. C. Ji and N. Obata: *Quantum stochastic analysis via white noise operators in weighted Fock space*, *Rev. Math. Phys.* **14** (2002), 241–272.
- [15] S. N. Dorogovtsev, A. V. Goltsev, J. F. F. Mendes and A. N. Samukhin: *Random networks: eigenvalue spectra*, *Physica A* **338** (2004), 76–83.
- [16] N. Giri and W. von Waldenfels: An algebraic version of the central limit theorem, *Z. Wahr. Verw. Gebiete* **42** (1978), 129–134.
- [17] C. D. Godsil and B. D. McKay: *Constructing cospectral graphs*, *Aeq. Math.* **25** (1982), 257–268.

- [18] Y. Hashimoto: *Quantum decomposition in discrete groups and interacting Fock spaces*, *Infin. Dimen. Anal. Quantum Probab. Relat. Top.* **4** (2001), 277–287.
- [19] Y. Hashimoto, A. Hora and N. Obata: *Central limit theorems for large graphs: Method of quantum decomposition*, *J. Math. Phys.* **44** (2003), 71–88.
- [20] Y. Hashimoto, N. Obata and N. Tabei: *A quantum aspect of asymptotic spectral analysis of large Hamming graphs*, in “Quantum Information III (T. Hida and K. Saitô, Eds.),” pp. 45–57, World Scientific, 2001.
- [21] 日合文雄: 作用素環の自由積と自由確率論, *数学* **51** (1999), 377–394.
- [22] F. Hiai and D. Petz: “The Semicircle Law, Free Random Variables and Entropy,” *Amer. Math. Soc.*, 2000.
- [23] A. Hora: *Central limit theorems and asymptotic spectral analysis on large graphs*, *Infin. Dimen. Anal. Quantum Probab. Relat. Top.* **1** (1998), 221–246.
- [24] A. Hora: *Central limit theorem for the adjacency operators on the infinite symmetric group*, *Commun. Math. Phys.* **195** (1998), 405–416.
- [25] A. Hora: *Gibbs state on a distance-regular graph and its application to a scaling limit of the spectral distributions of discrete Laplacians*, *Probab. Theory Relat. Fields* **118** (2000), 115–130.
- [26] A. Hora: *A noncommutative version of Kerov’s Gaussian limit for the Plancherel measure of the symmetric group*, in “Asymptotic Combinatorics with Applications to Mathematical Physics (A. M. Vershik, Ed.),” pp. 77–88, *Lect. Notes in Math.* Vol. 1815, Springer–Verlag, 2003.
- [27] A. Hora: *Scaling limit for Gibbs states for Johnson graphs and resulting Meixner classes*, *Infin. Dimen. Anal. Quantum Probab. Relat. Top.* **6** (2003), 139–143.
- [28] 洞 彰人: 対称群の表現と漸近的組合せ論, *数学* **57** (2005), 242–254.
- [29] A. Hora and N. Obata: *Quantum decomposition and quantum central limit theorem*, in “Fundamental Problems in Quantum Physics (L. Accardi and S. Tasaki, Eds.),” pp. 284–305, World Scientific, 2003.
- [30] A. Hora and N. Obata: *An interacting Fock space with periodic Jacobi parameter obtained from regular graphs in large scale limit*, in “Quantum Information V (T. Hida and K. Saitô, Eds.),” pp. 121–144, World Scientific, 2006.
- [31] A. Hora and N. Obata: “Quantum Probability and Spectral Analysis of Graphs,” Springer, 2007.

- [32] A. Hora, N. Obata: *Asymptotic spectral analysis of growing regular graphs*, Trans. Amer. Math. Soc. **360** (2008), 899–923.
- [33] R. L. Hudson and K. R. Parthasarathy: *Quantum Itô’s formula and stochastic evolutions*, Commun. Math. Phys. **93** (1984), 301–323.
- [34] D. Igarashi and N. Obata: *Asymptotic spectral analysis of growing graphs: Odd graphs and spidernets*, Banach Center Publications **73** (2006), 245–265.
- [35] U. C. Ji and N. Obata: *Quantum white noise calculus*, in “Non-Commutativity, Infinite-Dimensionality and Probability at the Crossroads (N. Obata, T. Matsui and A. Hora, Eds.),” pp. 143–191, World Scientific, 2002.
- [36] U. C. Ji and N. Obata: *Annihilation-derivative, creation-derivative and representation of quantum martingales*, Commun. Math. Phys. **286** (2009), 751–775.
- [37] S. Kerov: *Gaussian limit for the Plancherel measure of the symmetric group*, C. R. Acad. Sci. Paris **316** Série I (1993), 303–308.
- [38] H. Kesten: *Symmetric random walks on groups*, Trans. Amer. Math. Soc. **92** (1959), 336–354.
- [39] N. Konno, N. Obata and E. Segawa: *Localization of the Grover walks on spidernets and free Meixner laws*, Commun. Math. Phys. **322** (2013), 667–695.
- [40] S. Liang, N. Obata and S. Takahashi: *Asymptotic spectral analysis of generalized Erdős–Rényi random graphs*, Banach Center Publications **78** (2007), 211–229.
- [41] Y.-G. Lu: *An interacting free Fock space and the arcsine law*, Probab. Math. Stat. **17** (1997), 149–166.
- [42] P.-A. Meyer: “Quantum Probability for Probabilists,” Lect. Notes in Math. Vol. 1538, Springer–Verlag, 1993.
- [43] A. Nica and R. Speicher: “Lectures on the Combinatorics of Free Probability,” London Mathematical Society Lecture Note Series Vol. 335, Cambridge University Press, Cambridge, 2006.
- [44] N. Obata: *Quantum probabilistic approach to spectral analysis of star graphs*, Interdiscip. Inform. Sci. **10** (2004), 41–52.
- [45] 尾畑伸明: 量子確率論における独立性とグラフのスペクトル解析, 数学 **57** (2005), 1–20.
- [46] N. Obata: *Positive Q -matrices of graphs*, Studia Math. **179** (2007), 81–97.
- [47] N. Obata: *Notions of independence in quantum probability and spectral analysis of graphs*, Amer. Math. Soc. Transl. **223** (2008), 115–136.

- [48] N. Obata: *Markov product of positive definite kernels and applications to Q -matrices of graph products*, Colloq. Math. **122** (2011), 177–184.
- [49] N. Obata, T. Matsui and A. Hora (Eds.): “Non-Commutativity, Infinite-Dimensionality and Probability at the Crossroads,” World Scientific, 2002.
- [50] K. R. Parthasarathy: “An Introduction to Quantum Stochastic Calculus,” Birkhäuser, 1992.
- [51] N. Saitoh and H. Yoshida: *A q -deformed Poisson distribution based on orthogonal polynomials*, J. Phys. A: Math. Gen. **33** (2000), 1435–1444.
- [52] N. Saitoh and H. Yoshida: *q -deformed Poisson random variables on q -Fock space*, J. Math. Phys. **41** (2000), 5767–5772.
- [53] J. A. Shohat and J. D. Tamarkin: “The Problem of Moments,” Amer. Math. Soc., 1943.
- [54] R. Speicher: “Free Probability Theory,” Oxford Univ. Press, Oxford, 2011.
- [55] H. van Leeuwen and H. Maassen: *A q deformation of the Gauss distribution*, J. Math. Phys. **36** (1995), 4743–4756.
- [56] D. Voiculescu, K. Dykema and A. Nica: “Free Random Variables,” CRM Monograph Series 1, Amer. Math. Soc., Providence, 1992.
- [57] J. von Neumann: *Mathematischen Grundlagen der Quantenmechanik* (Springer-Verlag, 1932)
- [58] H. Urakawa: The Cheeger constant, the heat kernel, and the Green kernel of an infinite graph. Monatsh. Math. **138** (2003), 225–237
- [59] H. S. Wall: “Analytic Theory of Continued Fractions,” AMS Chelsea Publ., 1948.
- [60] E. P. Wigner: *Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions*, Ann. of Math. (2) **62** (1955), 548–564.
- [61] E. P. Wigner: *Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions II*, Ann. of Math. (2) **65** (1957), 203–207.
- [62] E. P. Wigner: *On the distribution of the roots of certain symmetric matrices*, Ann. of Math. (2) **67** (1958), 325–327.