Characterizing graphs with fully positive semidefinite Q-matrices

東北大学大学院情報科学研究科
純粋・応用数学研究センター
田中 太初

Hajime Tanaka
Research Center for Pure and Applied Mathematics
Graduate School of Information Sciences
Tohoku University

本稿の内容の背景等については洞–尾畑 [6] をご覧いただきたい。

代数的確率空間とは、$\mathbb{C}$ 上の $*$-代数 $\mathcal{A}$ とその上の状態 $\varphi : \mathcal{A} \to \mathbb{C}$ の組 $(\mathcal{A}, \varphi)$ のことである。ここで φ が**状態**であるとは、線形写像であって、$\varphi(1_{\mathcal{A}}) = 1$ かつ $\varphi(a^*a) \geqslant 0$ $(a \in \mathcal{A})$ を満たすことをいう ($1_{\mathcal{A}}$ は $\mathcal{A}$ の単位元を表す)。$\mathcal{A}$ の元は (代数的) **確率変数**と呼ばれる。例えば、確率空間 $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ に対し、$\mathcal{A}$ を本質的に有界な確率変数全体の成す可換 $*$-代数 (ここで $*$ としては複素共役を取る) とし、$\varphi = \mathbb{E}$ (期待値) とすると、$(\mathcal{A}, \varphi)$ は代数的確率空間になる。非可換な例としては、内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ を持つ前 Hilbert 空間 $\mathcal{D}$ に対して、$\mathcal{A} = L(\mathcal{D})$ を $\mathcal{D}$ 上の線形作用素で随伴作用素を持つもの全体の成す $*$-代数とし、単位ベクトル $\omega \in \mathcal{D}$ を一つ固定して $\varphi_\omega(a) = \langle \omega, a\omega \rangle$ $(a \in \mathcal{A})$ とすると、$(\mathcal{A}, \varphi_\omega)$ は代数的確率空間になる。実際、任意の代数的確率空間 $(\mathcal{A}, \varphi)$ に対して、前 Hilbert 空間 $\mathcal{D}$ と単位ベクトル $\omega \in \mathcal{D}$、及び $*$-準同型 $\pi : \mathcal{A} \to L(\mathcal{D})$ が存在して、$\varphi(a) = \varphi_\omega(\pi(a))$ $(a \in \mathcal{A})$ となることが分かる。

$G = (V, E)$ を連結な単純グラフとし、$\partial(x, y)$ $(x, y \in V)$ を x, y 間の距離 (すなわち最短経路の長さ) とする。行と列が V の元で添え字付けられた $\mathbb{C}$ 上の行列全体の集合を $M_V(\mathbb{C})$ とし、$A \in M_V(\mathbb{C})$ を G の**隣接行列**とする。すなわち、

$$A_{x,y} = \begin{cases} 1 & \text{if } x \sim y \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \qquad (x, y \in V)$$

である。以下しばらくの間、G は局所有限と仮定しよう。このとき、A で生成される $\mathbb{C}$-代数 $\mathcal{A} = \mathbb{C}[A]$ が定まり、これを G の**隣接代数**と呼ぶ。さて、$q \in \mathbb{R}$ を一つ固定し、$\boldsymbol{Q}$**-行列** $Q = Q_q \in M_V(\mathbb{C})$ を

$$(Q_q)_{x,y} = q^{\partial(x,y)} \quad (x, y \in V)$$

で定める。なお、$0^0 := 1$ と解釈する。さらに頂点 $x \in V$ も一つ固定し、**Gibbs 汎関数** (または**変形真空汎関数**) $\varphi_{q,x}$ を

$$\varphi_{q,x}(B) = \langle Q_q \delta_x, B\delta_x \rangle = \sum_{y \in V} B_{x,y}\, q^{\partial(x,y)} \qquad (B \in \mathcal{A})$$

により定める。ここで、δ_x はデルタ関数であるが、真ん中の式 (特に $Q_q\delta_x$) は形式的な表記である。また、G の局所有限性より右辺は有限和であることに注意されたい。

補題 1. $AQ_q = Q_qA$ かつ $Q_q \succcurlyeq 0$ (半正定値) ならば、$\varphi_{q,x}$ は $\mathcal{A}$ 上の状態となる。すなわち、$(\mathcal{A}, \varphi_{q,x})$ は代数的確率空間である。

Proof. $\varphi_{q,x}(B^*B) = \langle BQ_q\delta_x, B\delta_x\rangle = \langle Q_qB\delta_x, B\delta_x\rangle \geqslant 0 \ \ (B \in \mathcal{A}).$ □

Gibbs 汎関数 $\varphi_{q,x}$ は 1970 年代に Haagerup により自由群上の Cayley グラフ、すなわち正則木に対して考察された。Bożejko 等 (cf. [1]) は一般の木や Cayley グラフ等に対して Gibbs 汎関数を考察したが、洞 [5] は距離正則グラフを取り上げた。Gibbs 汎関数について、より詳しくは [6] を参照されたい。いずれにせよ、補題 1 により Q_q の半正定値性は大変重要であり、次の集合を考える：

$$\pi(G) = \{q \in \mathbb{R} : Q_q \succcurlyeq 0\}$$

以後、本稿ではこの集合にのみ注目することにし、(上の議論は最早忘れて) G の局所有限性は仮定しないことにする。また、G が 1 頂点のみからなるときは $\pi(G) = \mathbb{R}$ となるので、以下では G の頂点数は常に 2 以上としよう。まず分かることとして、明らかに $0, 1 \in \pi(G)$ であり、従って $\pi(G)$ は空集合ではない。さらに、もし $Q_q \succcurlyeq 0$ ならば、隣接した 2 頂点で添え字付けられた主小行列

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

も半正定値であり、これより $\pi(G) \subset [-1, 1]$ となることも分かる。なお、Q-行列は一般の距離空間 $\Gamma = (X, d)$ でも定義でき、従って集合 $\pi(\Gamma)$ が同様に考えられるが、$\pi(\Gamma)$ は Γ の Hilbert 空間への二次埋め込みの文脈でも登場する (Schoenberg の定理)：

定理 2 (cf. [12, Section 9.1])**.** 距離空間 $\Gamma = (X, d)$ に対し、次は同値である：

(i) $[0, 1] \subset \pi(\Gamma)$ となる。

(ii) Γ はある Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ への二次埋め込みを持つ。すなわち、$\|\theta(x) - \theta(y)\|^2 = d(x, y)$ $(x, y \in X)$ を満たす写像 $\theta : X \to \mathcal{H}$ が存在する。

(iii) d は X 上の負定値核である。すなわち、$\sum_{x \in X} f(x) = 0$ を満たす任意の $f \in C_0(X)$ に対して次が成り立つ：

$$\sum_{x,y \in X} \overline{f(x)} f(y)\, d(x, y) \leqslant 0$$

ここで、$C_0(X)$ は X 上のサポート有限の複素数値関数全体の集合を表す。

Haagerup や Bożejko [1] 等は、G が木のときは $\pi(G) = [-1, 1]$ となることを示した。また、Bożejko–Szwarc [2] は、Coxeter 群上の Cayley グラフの場合に、同様の等式を証明した。一方、洞 [5] は距離正則グラフの系列である Johnson グラフと Hamming グラフについて、上述の Schoenberg の定理を用いて $[0, 1] \subset \pi(G)$ となることを示した。より最近になって、Koohestani–尾畑–田中 [7] は、所謂「古典的パラメータ」を持つ直径 3 以上の距離正則グラフで「底」q が 1 でないものについて、$q^{-i} \in \pi(G)$ $(i = 0, 1, 2, \ldots)$ となることを証明した (一般に底 q は $0, -1$ 以外の整数値を取る)。このような距離正則グラフの例

として有限体 $\mathbb{F}_q$ 上の Grassmann グラフがあるが、この場合有限体の位数 q が底となる。Voit [14] は Grassmann グラフについて、異なる手法を用いて同様の結果を得た。グラフの Q-行列については、[8, 9] も参照されたい。

2022 年 8 月に Poland の Będlewo で開催された国際会議に於いて[1]、Marek Bożejko 氏は「$\pi(G) = [-1, 1]$ となる連結単純グラフの (良い) 特徴付けはできるか」と問いかけた。本稿の主結果はこの問いに答えるものである。まず、次の補題が成り立つ：

補題 3. G を連結単純グラフとするとき、次は同値である：

(i) $-1 \in \pi(G)$ となる。

(ii) G は二部グラフである。

さらに、(i) 及び (ii) が成り立つとき、$\pi(G)$ は 0 に関して対称である。

この補題により、$[0, 1] \subset \pi(G)$ となるような二部グラフ G を特徴付ければ良いことになる。定理 2 は確かにそのような特徴付けを与えてはいるが、使い易いとは言い難い。次に述べる主結果はグラフ理論的な特徴付けを与える。G の隣接した 2 頂点 x, y に対し、

$$G(x, y) = \{z \in V : \partial(z, x) = \partial(z, y) - 1\}$$

とおく。すなわち、y よりも x の方に近い頂点の集合である。

定理 4. G を頂点数が 2 以上の連結単純グラフとすると、次は同値である：

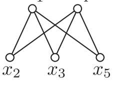
(i) $\pi(G) = [-1, 1]$ となる。

(ii) G からある超立方体 (下記参照) への等長埋め込みが存在する。

(iii) G は二部グラフであり、かつ、$x_1 \sim x_2,\ x_3 \sim x_4,\ x_3 \in G(x_1, x_2),\ x_4 \in G(x_2, x_1)$, $x_5 \in G(x_1, x_2) \cap G(x_4, x_3)$ を全て満たすような頂点の五つ組 $(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5)$ を持たない ($\sim$ は隣接関係を表す)。

(iv) G は二部グラフであり、かつ、隣接したどの 2 頂点 x, y についても $G(x, y)$ は凸である。すなわち、$G(x, y)$ 内の 2 頂点間の最短経路は必ず $G(x, y)$ に含まれる。

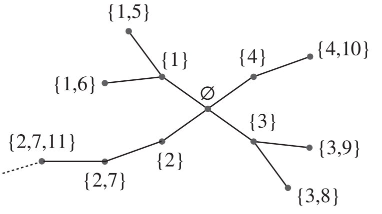
定理 4 中の (ii) と (iv) の同値性は Djoković [4] による。ここで、空でない集合 Σ に対し、**超立方体** $\mathcal{Q}_\Sigma$ は Σ の有限部分集合全体を頂点集合とするグラフであり、二つの頂点は、いずれか一方が他方から要素を一つ取り除いて得られるときに隣接させる。Σ 自身が有限集合だと仮定するのが普通だと思うが、ここでは無限集合の場合も許す。$\mathcal{Q}_\Sigma$ の 2 頂点間の距離はそれらの対称差の位数に等しい。また、$\mathcal{Q}_\Sigma$ から Hilbert 空間 $\ell^2(\Sigma)$ への二次埋め込みは自然に構成される。定理 4 (iii) の五つ組の例としては、(誘導)$K_{2,3}$ がある：



[1]筆者はオンラインで参加した。

補題 3 と定理 4 の証明については、論文 [13] をご覧いただきたい。

G が木のときに $\pi(G) = [-1, 1]$ となることを先に述べたが、木が適当な超立方体に等長に埋め込めることは次の例から推察されるであろう：



Σ が有限集合のとき、超立方体 $\mathcal{Q}_\Sigma$ は距離正則グラフとなるが、無限集合のときも同様に考察するために、距離正則グラフの定義を Zieschang [16] の流儀に則って少し拡張してみよう：

定義 5. 連結単純グラフ $G = (V, E)$ は、基数 $p^h_{i,j}$ $(i, j, h = 0, 1, 2, \dots)$ が存在して、2 頂点 x, y 間の距離が h ならば常に

$$|\{z \in V : \partial(x, z) = i,\, \partial(z, y) = j\}| = p^h_{i,j}$$

が成り立つとき、**距離正則**であるという。

この定義に従うと、超立方体 $\mathcal{Q}_\Sigma$ は Σ が無限集合のときにも距離正則グラフになる。頂点数が無限の距離正則グラフには、他に正則木が挙げられる。さて、有限距離正則グラフについては次の結果がある：

定理 6 (Weichsel [15])**.** 超立方体に等長に埋め込める有限距離正則グラフは有限超立方体、偶サイクル、及び二重化 Odd グラフのみである。

ここで、$|\Sigma| = 2m + 1$ が奇数のとき、位数が m または $m + 1$ の Σ の部分集合全体に誘導される $\mathcal{Q}_\Sigma$ の部分グラフを $\tilde{O}_{m+1}$ と表し、**二重化 Odd グラフ**と呼ぶ (cf. [3, Section 9.1D])。超立方体に等長に埋め込める無限距離正則グラフの例を (無限) 超立方体や正則木以外に見つけること、さらに可能であればそれらを分類することは、興味深い問題だと思われる。

ここでは詳細は述べないが、Coxeter 群 W 上の Cayley グラフについては、正のルート全体の集合を Π とし、各 $x \in W$ に対して、x により負のルートに移される Π の元全体の集合を $\theta(x)$ と書くと、θ は超立方体 $\mathcal{Q}_\Pi$ への等長埋め込みになる。

さて、研究集会での講演のアブストラクトには連結単純グラフの**二次埋め込み定数**について後半に話す予定である旨を述べたが、実際の講演では結局上記の内容までで時間が来てしまった。これは、尾畑–Zakiyyah [11] により導入された量であり、次で定義される：

$$\mathrm{QEC}(G) = \sup\left\{ \sum_{x,y \in V} \overline{f(x)} f(y)\, \partial(x, y) : f \in C_0(V),\, \sum_{x \in V} |f(x)|^2 = 1,\, \sum_{x \in V} f(x) = 0 \right\}$$

定理 2 により、G からある Hilbert 空間への二次埋め込みが存在することと、$\mathrm{QEC}(G) \leqslant 0$ は同値である。また、一般に $\mathrm{QEC}(G) \geqslant -1$ であり、等号が成り立つのは G が完全グラフの場合に限られる。尾畑 [10]、及びその引用文献等を参照されたい。二次埋め込み定数に関しては $-1/2$ がある種の閾値になっており、$\mathrm{QEC}(G) < -1/2$ を満たすグラフの構造にはかなりの制限が加わる。このようなグラフを記述することが目下の目標である。

参考文献

[1] M. Bożejko, Positive-definite kernels, length functions on groups and a noncommutative von Neumann inequality, Studia Math. 95 (1989) 107–118.

[2] M. Bożejko and R. Szwarc, Algebraic length and Poincaré series on reflection groups with applications to representations theory, in: Asymptotic combinatorics with applications to mathematical physics (A. M. Vershik, ed.), Lecture Notes in Mathematics, vol. 1815, Springer-Verlag, Berlin, 2003, pp. 201–221.

[3] A. E. Brouwer, A. M. Cohen, and A. Neumaier, Distance-regular graphs, Springer-Verlag, Berlin, 1989.

[4] D. Ž. Djoković, Distance-preserving subgraphs of hypercubes, J. Combinatorial Theory Ser. B 14 (1973) 263–267.

[5] 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 Related Fields 118 (2000) 115–130.

[6] A. Hora and N. Obata, Quantum probability and spectral analysis of graphs, Springer, Berlin, 2007.

[7] M. Koohestani, N. Obata, and H. Tanaka, Scaling limits for the Gibbs states on distance-regular graphs with classical parameters, SIGMA Symmetry Integrability Geom. Methods Appl. 17 (2021), Paper No. 104; arXiv:2106.14497.

[8] N. Obata, Positive Q-matrices of graphs, Studia Math. 179 (2007) 81–97.

[9] N. Obata, Markov product of positive definite kernels and applications to Q-matrices of graph products, Colloq. Math. 122 (2011) 177–184.

[10] N. Obata, Primary non-QE graphs on six vertices, to appear in Interdiscip. Inform. Sci.; arXiv:2207.13278.

[11] N. Obata and A. Y. Zakiyyah, Distance matrices and quadratic embedding of graphs, Electron. J. Graph Theory Appl. 6 (2018) 37–60.

[12] V. I. Paulsen and M. Raghupathi, An introduction to the theory of reproducing kernel Hilbert spaces, Cambridge University Press, Cambridge, 2016.

[13] H. Tanaka, Characterizing graphs with fully positive semidefinite Q-matrices, Linear Algebra Appl. 671 (2023) 59–66; arXiv:2208.11002.

[14] M. Voit, Positivity of Gibbs states on distance-regular graphs, Infin. Dimens. Anal. Quantum Probab. Relat. Top. 26 (2023) 2250026; arXiv:2111.02116.

[15] P. M. Weichsel, Distance regular subgraphs of a cube, Discrete Math. 109 (1992) 297–306.

[16] P.-H. Zieschang, An algebraic approach to association schemes, Springer-Verlag, Berlin, 1996.