

Probabilistic aspects of topology of simplicial complexes

九州大学・マス・フォア・インダストリ研究所 白井朋之

Tomoyuki Shirai

Institute of Mathematics for Industry, Kyushu University

1 はじめに

滑らかな向き付けられたコンパクトリーマン多様体 M 上の 1-form に作用する Hodge-小平ラプラシアン $\Delta = d^*d + dd^*$ は, Levi-Civita 接続から決まる共変微分 ∇ を用いて形式的には $\Delta = \nabla^* \nabla + \text{Ric}$ と分解される (Weitzenböck formula). $\nabla^* \nabla$ は Bochner ラプラシアンとも呼ばれ, Ric は Ricci 曲率で定まるスカラー (ポテンシャル) に対応する. ポテンシャル項について $\text{Ric} > 0$ が各点で成り立てばスペクトルギャップが生じて調和形式の非存在, よって de Rham コホモロジーの消滅 ($\ker \Delta = \{0\}$) を示すことができる (Bochner の定理). リーマン多様体の情報はリーマン計量から自然に定まる M 上のブラウン運動が持っているので, ブラウン運動を多様体 M 上で走らせることにより上記結果を確率論的かつ直感的に捉えることもできる. また確率解析の手法と上の Δ の分解を用いて Bochner の定理を一般化することも可能である. Myer の定理 (や基本群の有限性) も同様の確率解析の手法で示されている. ただ, Weitzenböck formula によるこの分解は微分構造より定まるもので, 多様体の単体分割によって得られる単体複体にはそのままでは有効ではない. 一方 Hodge-小平ラプラシアンには単体複体上に自然な対応物があり, スペクトル理論も多くの部分は多様体の場合と平行な議論が可能である (cf. [2, 5, 6]). また, ブラウン運動のかわりに単体複体上のランダムウォークを考えて, 長時間挙動を見ることで (コ) ホモロジーの様子を調べるということもなされ始めている [7, 9]. ただこれらは離散時間ランダムウォークを考えているため, ディリクレ形式の理論や時間変更の議論などとは相性があまりよくない. 本稿では単体複体上で定義される Hodge-小平ラプラシアンに付随する連続時間マルコフ連鎖と Feynman-Kac 半群を構成してその性質などを考察する.

2 単体複体と離散 Hodge-小平ラプラシアン

2.1 単体複体

以下で使う記号について説明する. V を有限集合とすると, $\sigma \subset V$ が $|\sigma| = k+1$ のとき, σ は k -単体 (k -simplex) もしくは k -face という. このとき, $\dim(\sigma) = k$ とあらわす.

定義 2.1. X を V の非空部分集合の族とする. (V, X) が抽象的単体複体であるとは以下の条件をみたすときをいう.

- (1) $\{v\} \subset X$ for all $v \in V$.
- (2) $\sigma \in X, \tau(\neq \emptyset) \subset \sigma \implies \tau \in X$.

条件 (2) は「 X は非空の部分集合を取る操作に関して閉じていること」を意味する. $d = \max_{\sigma \in X} \dim(\sigma)$ のとき (V, X) を d -次元単体複体という.

RIMS 研究集会「量子場の数理論とその周辺」@京大 RIMS on Oct 5-7, 2015.

本研究は科学研究費挑戦的萌芽研究 No.26610025 および基盤研究 (B) No.26287019 の助成を受けたものです.

以下, 簡単のため, X を (V 上の) 単体複体という. また, 集合 $\{v_0, v_1, \dots, v_k\}$ はしばしば $v_0 v_1 \dots v_k$ と略記する.

例 2.2. 2次元単体複体 $X = \{1, 2, 3, 4, 12, 13, 14, 23, 34, 123\}$ を考える.

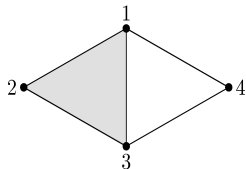


図 1: 2次元単体複体の例

X は facet $\{14, 34, 123\}$ (包含関係に関する極大な単体) で定まる. 実際, 定義 2.1(2) の条件をみたすように facet の非空部分集合をすべて取ればよい.

$$X = \underbrace{\{1, 2, 3, 4\}}_{X_0} \cup \underbrace{\{12, 13, 14, 23, 34\}}_{X_1} \cup \underbrace{\{123\}}_{X_2}$$

$X^{(1)}: \text{a graph}$

ここで, $X_k = \{\sigma \in X : \dim(\sigma) = k\}$ は X の k -face の全体とし, $X^{(k)} := \sqcup_{i=0}^k X_i = \{\sigma \in X : \dim(\sigma) \leq k\}$ を X の k -スケルトンという.

注意 2.3. 1次元単体複体はグラフであるから, 1-スケルトンは単体複体の骨格となっているグラフである.

定義 2.4 (pure 単体複体). X が pure d -次元の単体複体であるとはすべての facet が d 次元であるときをいう.

定義 2.5 (完全単体複体). X が $V = [n] = \{1, 2, \dots, n\}$ 上の d -次元完全単体複体であるとは, 次元が d 以下のすべての単体が含まれているときをいい, $K_n^{(d)}$ とあらわす. 特に 1次元完全複体 $K_n^{(1)}$ は完全グラフに対応する.

定義 2.6 (k -path). pure k -次元の単体複体 X が k -path であるとは, ある k -単体の集合 X_k の元の列 $F_1, F_2, \dots, F_m \in X_k$ が存在して, 各 $j = 1, 2, \dots, m-1$ に対して F_j と F_{j+1} が共通の $(k-1)$ -単体を含むときをいう.

高次元の単体複体に対する連結性は種々の定義がありうるが, 以下のハイパーグラフ連結性はグラフにおける (弧状) 連結性の自然な拡張である.

定義 2.7 (ハイパーグラフ連結). k -次元単体複体 X がハイパーグラフ連結であるとは, 任意の $(k-1)$ -単体 $\eta, \eta' \in X_{k-1}$ に対してある k -path $F_1, F_2, \dots, F_m$ が存在して $\eta \subset F_1, \eta' \subset F_m$ となるときをいう.

2.2 単体の向きと符号付き隣接行列

X を V 上の単体複体とする. V に適当に全順序を入れて, $\sigma = \{v_0, v_1, \dots, v_k\} \in X_k$ を $v_0 < v_1 < \dots < v_k$ なる順に並べた $(v_0, v_1, \dots, v_k) \in V^{k+1}$ と同一視する. 置換 $\pi \in S_{k+1} = S_{k+1}(0, 1, \dots, k)$ に対して $\pi(\sigma) = (v_{\pi(0)}, v_{\pi(1)}, \dots, v_{\pi(k)})$ として, 二項関係

$$(v_{\pi(0)}, v_{\pi(1)}, \dots, v_{\pi(k)}) \sim (v_{\eta(0)}, v_{\eta(1)}, \dots, v_{\eta(k)}) \iff \text{sgn}(\pi\eta^{-1}) = 1$$

を定義すると, 集合 $\{\pi(\sigma) \in V^{k+1} : \pi \in S_{k+1}\}$ 上の同値関係となる. $\{\pi(\sigma) \in V^{k+1} : \pi \in S_{k+1}\}$ は 2つの同値類に分割される. これらを $\sigma = \{v_0, v_1, \dots, v_k\} \in X_k$ の向きという. $(v_0, v_1, \dots, v_k)$ の属する同値類を $\langle v_0, v_1, \dots, v_k \rangle$ とあらわす. 各 $\sigma \in X_k$ に対して定義される二つの向きを適当に σ_+, σ_- とあらわし

$$X_k^+ = \{\sigma_+ : \sigma \in X_k\}, \quad X_k^- = \{\sigma_- : \sigma \in X_k\}, \quad X_k^\pm = X_k^+ \sqcup X_k^-$$

とする.

以下では, しばしば各単体 $\sigma = \{v_0, v_1, \dots, v_k\}$ の点を V の (適当に決めた) 全順序に従って辞書式に $v_0 < v_1 < \dots < v_k$ と並べて, $(v_0, v_1, \dots, v_k)$ が属する同値類を σ_+ , もう一方を σ_- とあらわす.

$\sigma = \{v_0, v_1, \dots, v_k\} \in X_k$ とする. V の全順序に関して $v_0 < v_1 < \dots < v_k$ であるとき $\sigma_j := \{v_0, v_1, \dots, v_{j-1}, v_{j+1}, \dots, v_k\} \in X_{k-1}$ ($j = 0, 1, \dots, k$) とする. $\epsilon : X_k \times X_{k-1} \rightarrow \{-1, 0, 1\}$ を以下のように定義する.

$$\epsilon(\sigma, \tau) = \begin{cases} (-1)^j & \text{if } \tau = \sigma_j, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (2.1)$$

$\epsilon(\pi(\sigma), \pi'(\eta)) = \text{sgn}(\pi) \text{sgn}(\pi') \epsilon(\sigma, \eta)$, ϵ を定義できない組合せ (σ, η) については $\epsilon(\sigma, \eta) = 0$ と定義することにより, しばしば ϵ は $V^{k+1} \times V^k$ 上の関数ともみなす. また, 対称な関数 $\alpha_k^{\text{up}} : X_k \times X_k \rightarrow \{-1, 0, 1\}$ を

$$\begin{aligned} \alpha_k^{\text{up}}(\sigma, \eta) &= -\epsilon(\sigma \cup \eta, \sigma) \epsilon(\sigma \cup \eta, \eta), \\ \alpha_k^{\text{down}}(\sigma, \eta) &= -\epsilon(\sigma, \sigma \cap \eta) \epsilon(\eta, \sigma \cap \eta). \end{aligned}$$

と定義する. これらを行列表示したものを $A_k^{\text{up}}, A_k^{\text{down}}$ とあらわす. 符号付きの隣接行列に対応.

例 2.8. 例 2.2 の図 1 において, $\epsilon(12, 1) = -1$, $\epsilon(12, 2) = 1$, $\epsilon(13, 1) = -1$, $\epsilon(12, 12) = 0$, $\epsilon(123, 12) = 1$, $\epsilon(123, 13) = -1$, $\epsilon(123, 23) = 1$ などより

$$\begin{aligned} \alpha_k^{\text{up}}(12, 12) &= -\epsilon(12, 12) \epsilon(12, 12) = 0, & \alpha_k^{\text{down}}(12, 12) &= -\epsilon(12, 12) \epsilon(12, 12) = 0, \\ \alpha_k^{\text{up}}(12, 13) &= -\epsilon(123, 12) \epsilon(123, 13) = 1, & \alpha_k^{\text{down}}(12, 13) &= -\epsilon(12, 1) \epsilon(13, 1) = -1, \\ \alpha_k^{\text{up}}(12, 23) &= -\epsilon(123, 12) \epsilon(123, 23) = -1, & \alpha_k^{\text{down}}(12, 23) &= -\epsilon(12, 2) \epsilon(23, 2) = 1. \end{aligned}$$

例 2.8 で観察されるように以下の補題が成り立つ.

補題 2.9. $\sigma, \eta \in X_k$ に対して, $\sigma \cap \tau \in X_{k-1}$ かつ $\sigma \cup \tau \in X_{k+1}$ のとき, $\alpha_k^{\text{up}}(\sigma, \tau) = -\alpha_k^{\text{down}}(\sigma, \tau)$. つまり, $A_k^{\text{up}} = -A_k^{\text{down}}$.

注意 2.10. $\sigma \cup \tau \in X_{k+1}$ ならば自動的に $\sigma \cap \tau \in X_{k-1}$ であるから, 上の条件は $\sigma \cup \tau \in X_{k+1}$ のみでもよい.

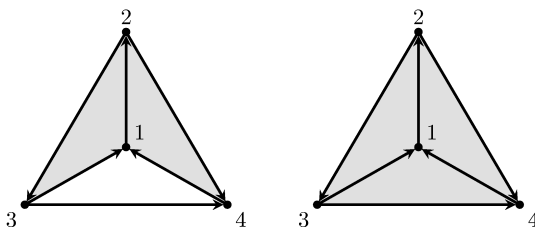


図 2: disorientation(左), disorientation でない(右)

定義 2.11 (disorientation). X を d -次元単体複体とする. d -単体のある向き付け X_d^+ が存在して以下の性質をみたすとき X_d^+ を disorientation という: 任意の $\sigma, \eta \in X_d^+$ に対して $\sigma \cap \eta \in X_{d-1}$ のとき, $\sigma \cap \eta$ に σ と η からそれぞれ同じ向きが誘導される.

注意 2.12. (1) $\alpha_d^{\text{down}}(\sigma, \eta) \neq 0$ ならば $\alpha_d^{\text{down}}(\sigma, \eta) = -1$ となる向き付けが存在すると言ってもよい. 図 2 の左図では 2 単体 134 が存在しないので disorientation となるが, 右図では 123 と 124 から 12 に誘導される向きを同じものとする, 134 にどちらの向きを入れても 123 から辺 13 に誘導される向きもしくは 124 から辺 14 に誘導される向きのどちらか一方には異なる向きが入る. (2) $d = 1$ のときには disorientation が存在することと, 1-skeleton が 2 部グラフであることは同値である. ちなみに, $G = (V, E)$ が 2 部グラフであるとは, 分割 $V = V_1 \sqcup V_2$ が存在して, $xy \in E$ ならば $x \in V_1, y \in V_2$ または $x \in V_2, y \in V_1$ となることをいう.

2.3 離散 Hodge-小平ラプラシアン

簡単のために係数は実数体 $\mathbb{R}$ とし, k -コチェインのなす実線形空間を

$$C^k(X) := C^k(X, \mathbb{R}) = \{f : X_k \rightarrow \mathbb{R}\}$$

と定義する. 各 $C^k(X)$ には正值関数 $w : X_k \rightarrow (0, \infty)$ をひとつ固定して, 内積

$$\langle f, g \rangle_{C^k} := \sum_{\sigma \in X_k} f(\sigma)g(\sigma)w(\sigma) \quad (2.2)$$

を定義しておく. $f \in C^k(X)$ に対して, $d_k : C^k(X) \rightarrow C^{k+1}(X)$ を

$$d_k f(\sigma) = \sum_{\tau \in X_{k+1}} \epsilon(\sigma, \tau) f(\tau). \quad (2.3)$$

ただし, ϵ は (2.1) で定義されたものである. 簡単に $d_{k+1}d_k = 0$ が確かめられるので, コチェイン複体

$$\cdots \rightarrow C^{k-1}(X) \xrightarrow{d_{k-1}} C^k(X) \xrightarrow{d_k} C^{k+1}(X) \rightarrow \cdots$$

が定義される. このことより $B^k(X, \mathbb{R}) := \text{Im } d_{k-1} \subset Z^k(X, \mathbb{R}) := \ker d_k$ であるから

$$H^k(X, \mathbb{R}) := Z^k(X, \mathbb{R}) / B^k(X, \mathbb{R})$$

とコホモロジー群を定義する.

以下は簡単に確かめられる.

補題 2.13. (2.2) で定義した内積のもと, d_k の双対作用素 $d_k^* : C^{k+1}(X) \rightarrow C^k(X)$ は

$$d_k^* F(\sigma) = \sum_{\tau \in X_{k+1}} \frac{w(\tau)}{w(\sigma)} \epsilon(\tau, \sigma) F(\tau)$$

で与えられる.

証明. 定義に従えば

$$\begin{aligned} \langle d_k f, F \rangle_{C^{k+1}} &= \sum_{\tau \in X_{k+1}} d_k f(\tau) F(\tau) w(\tau) \\ &= \sum_{\tau \in X_{k+1}} \left(\sum_{\sigma \in X_k} \epsilon(\tau, \sigma) f(\sigma) \right) F(\tau) w(\tau) \\ &= \sum_{\sigma \in X_k} f(\sigma) w(\sigma) \left(\frac{1}{w(\sigma)} \sum_{\tau \in X_{k+1}} \epsilon(\tau, \sigma) F(\tau) w(\tau) \right). \end{aligned}$$

□

重み $w : \cup_k X_k \rightarrow (0, \infty)$ を固定して, 以下のように Laplacian を定義する.

定義 2.14. 重み $w : \cup_k X_k \rightarrow (0, \infty)$ を固定して $C^k(X)$ 上の Laplacian を以下のように定義する.

$$\mathcal{L}_k^{\text{up}} = -d_k^* d_k, \quad \mathcal{L}_k^{\text{down}} = -d_{k-1} d_{k-1}^*, \quad \mathcal{L}_k = \mathcal{L}_k^{\text{up}} + \mathcal{L}_k^{\text{down}}$$

注意 2.15. ここでは確率論の流儀にあわせて非正定値となるようにラプラシアン¹⁾の符号を定義している.

命題 2.16. $w : \cup_k X_k \rightarrow (0, \infty)$ とする. このとき,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_k^{\text{up}} f(\sigma) &= \sum_{\eta (\neq \sigma) \in X_k} \frac{w(\sigma \cup \eta)}{w(\sigma)} \alpha_k^{\text{up}}(\sigma, \eta) f(\eta) - \left(\sum_{\tau \in X_{k+1} : \tau \supset \sigma} \frac{w(\tau)}{w(\sigma)} \right) f(\sigma) \\ \mathcal{L}_k^{\text{down}} f(\sigma) &= \sum_{\eta (\neq \sigma) \in X_k} \frac{w(\sigma)}{w(\sigma \cap \eta)} \alpha_k^{\text{down}}(\sigma, \eta) f(\eta) - \left(\sum_{\tau \in X_{k-1} : \tau \subset \sigma} \frac{w(\sigma)}{w(\tau)} \right) f(\sigma). \end{aligned}$$

証明. $\sigma \in X_k$ に対して, 定義通り計算すると

$$\begin{aligned} -\mathcal{L}_k^{\text{up}} f(\sigma) &= d_k^* d_k f(\sigma) \\ &= \sum_{\tau \in X_{k+1}} \frac{w(\tau)}{w(\sigma)} \epsilon(\tau, \sigma) d_k f(\tau) \\ &= \sum_{\tau \in X_{k+1}} \frac{w(\tau)}{w(\sigma)} \epsilon(\tau, \sigma) \sum_{\eta \in X_k} \epsilon(\tau, \eta) f(\eta) \\ &= \sum_{\eta \in X_k} \left(\sum_{\tau \in X_{k+1}} \frac{w(\tau)}{w(\sigma)} \epsilon(\tau, \sigma) \epsilon(\tau, \eta) \right) f(\eta) \\ &= \left(\sum_{\tau \in X_{k+1}} \frac{w(\tau)}{w(\sigma)} \epsilon(\tau, \sigma)^2 \right) f(\sigma) + \sum_{\eta (\neq \sigma) \in X_k} \frac{w(\sigma \cup \eta)}{w(\sigma)} \epsilon(\sigma \cup \eta, \sigma) \epsilon(\sigma \cup \eta, \eta) f(\eta) \\ &= \left(\sum_{\tau \in X_{k+1} : \tau \supset \sigma} \frac{w(\tau)}{w(\sigma)} \right) f(\sigma) - \sum_{\eta (\neq \sigma) \in X_k} \frac{w(\sigma \cup \eta)}{w(\sigma)} \alpha_k^{\text{up}}(\sigma, \eta) f(\eta). \end{aligned}$$

同様に

$$\begin{aligned}
 -\mathcal{L}_k^{\text{down}} f(\sigma) &= d_{k-1} d_{k-1}^* f(\sigma) \\
 &= \sum_{\tau \in X_{k-1}} \epsilon(\sigma, \tau) d_{k-1}^* f(\tau) \\
 &= \sum_{\tau \in X_{k-1}} \epsilon(\sigma, \tau) \sum_{\eta \in X_k} \frac{w(\eta)}{w(\tau)} \epsilon(\eta, \tau) f(\eta) \\
 &= \sum_{\eta \in X_k} \left(\sum_{\tau \in X_{k-1}} \frac{w(\eta)}{w(\tau)} \epsilon(\sigma, \tau) \epsilon(\eta, \tau) \right) f(\eta) \\
 &= \left(\sum_{\tau \in X_{k-1}} \frac{w(\sigma)}{w(\tau)} \epsilon(\sigma, \tau)^2 \right) f(\sigma) + \sum_{\eta(\neq \sigma) \in X_k} \frac{w(\eta)}{w(\sigma \cap \eta)} \epsilon(\sigma, \sigma \cap \eta) \epsilon(\eta, \sigma \cap \eta) f(\eta) \\
 &= \left(\sum_{\tau \in X_{k-1}: \tau \subset \sigma} \frac{w(\sigma)}{w(\tau)} \right) f(\sigma) - \sum_{\eta(\neq \sigma) \in X_k} \frac{w(\eta)}{w(\sigma \cap \eta)} \alpha_k^{\text{down}}(\sigma, \eta) f(\eta)
 \end{aligned}$$

よってともに示された. $\square$

例 2.17. (1) $w \equiv 1$ のとき.

$$\mathcal{L}_k^{\text{up}} = A_k^{\text{up}} - D_k^{\text{up}}, \quad \mathcal{L}_k^{\text{down}} = A_k^{\text{down}} - D_k^{\text{down}}.$$

このときは, 正規化されていない Laplacian に対応する (以後, この場合の $\mathcal{L}_k, \mathcal{L}_k^{\text{up}}, \mathcal{L}_k^{\text{down}}$ をそれぞれ $L_k, L_k^{\text{up}}, L_k^{\text{down}}$ とあらわす). ただし, $D_k^{\text{up}}, D_k^{\text{down}}$ はそれぞれ対角行列でその対角成分は $\sigma \in X_k$ に対して

$$\begin{aligned}
 D_k^{\text{up}}(\sigma, \sigma) &= \#\{\tau \in X_{k+1} : \tau \supset \sigma\}, \\
 D_k^{\text{down}}(\sigma, \sigma) &= \#\{\tau \in X_{k-1} : \tau \subset \sigma\} = k+1.
 \end{aligned}$$

(2) $w(\sigma) = \deg(\sigma)$ のとき. ただし, $\sigma \in X_{k-1}$ に対して次数を

$$\deg(\sigma) := \#\{\tau \in X_k : \tau \supset \sigma\}$$

と定義する ($\deg$ の定義は様々な可能性があるので注意が必要である).

X が pure k 次元単体複体のとき (定義 2.4), 任意の $\sigma \in X_{k-1}$ に対して $\deg(\sigma) = D_{k-1}^{\text{up}}(\sigma, \sigma) > 0$ となり内積 (2.2) が定義される. このとき,

$$\mathcal{L}_{k-1}^{\text{up}} = (D_{k-1}^{\text{up}})^{-1} A_{k-1}^{\text{up}} - I$$

となる. $(D_{k-1}^{\text{up}})^{-1} A_{k-1}^{\text{up}}$ は後で定義する推移行列の符号付き版である.

注意 2.18. 境界作用素 (boundary operator) $\partial_k : C_k \rightarrow C_{k-1}$ と余境界作用素 (coboundary operator) $d_k : C^k \rightarrow C^{k+1}$ の標準的な基底による行列表現は転置の関係にある. つまり,

$$\partial_{k+1} = d_k^*, \quad d_k = \partial_{k+1}^*$$

の関係がある. このことを用いると行列表現の意味では

$$\mathcal{L}_k^{\text{up}} = -\partial_{k+1} d_k, \quad \mathcal{L}_k^{\text{down}} = -d_{k-1} \partial_k \quad (2.4)$$

とあらわすことができる.

注意 2.19. Z^k 上では $\mathcal{L}_k^{\text{up}} = 0$, Z_k 上では $\mathcal{L}_k^{\text{down}} = 0$ である.

命題 2.20 (Eckmann). $\ker \mathcal{L}_k \cong H^k \cong H_k$.

証明. $\mathcal{E}_k^{\sharp}(f, f) := \langle -\mathcal{L}_k^{\sharp} f, f \rangle$ ($\sharp = \text{empty, up, down}$) とおくと

$$\mathcal{E}_k(f, f) = \mathcal{E}_k^{\text{up}}(f, f) + \mathcal{E}_k^{\text{down}}(f, f)$$

である. また定義より

$$\mathcal{E}_k^{\text{up}}(f, f) = \langle d_k^* d_k f, f \rangle = \|d_k f\|^2, \quad \mathcal{E}_k^{\text{down}}(f, f) = \langle d_{k-1} d_{k-1}^* f, f \rangle = \|d_{k-1}^* f\|^2$$

であるから,

$$\mathcal{E}_k(f, f) = \|d_k f\|^2 + \|d_{k-1}^* f\|^2$$

となる. よって,

$$f \in \ker \mathcal{L}_k \Leftrightarrow \mathcal{E}_k(f, f) = 0 \Leftrightarrow d_k f = d_{k-1}^* f = 0 \Leftrightarrow f \in Z^k \cap (B^k)^\perp \Leftrightarrow f \in H^k.$$

□

注意 2.21. X を k 次元単体複体として, 特に $\mathcal{L}_{k-1}^{\text{up}}$ を考える. 一般に $B^{k-1}(X; \mathbb{R}) \subset Z^{k-1}(X; \mathbb{R}) = \ker \mathcal{L}_{k-1}^{\text{up}}$ であるから任意の $f \in B^{k-1}(X; \mathbb{R})$, つまり任意の $g \in C^{k-2}(X; \mathbb{R})$ に対して $d_{k-2}g$ は $\mathcal{L}_{k-1}^{\text{up}}$ の 0 に属する固有関数となる. これらを $\mathcal{L}_{k-1}^{\text{up}}$ の「自明な零固有値」という.

例 2.22. $n \geq k+1$ とする. X を n 点上の k 次元完全単体複体 $K_n^{(k)}$ とする. $w \equiv 1$ に対応するラプラシアン $-L_{k-1}^{\text{up}}$ の固有値は 0 (重複度 $\binom{n-1}{k-1}$) と n (重複度 $\binom{n-1}{k}$) となる. このことは関係式

$$L_{k-1} = L_{k-1}^{\text{up}} + L_{k-1}^{\text{down}} = -nI \quad (2.5)$$

と注意 2.21 から簡単に従う.

補題 2.23. ウェイト $w_{k+1} : X_{k+1} \rightarrow (0, \infty)$ に対する $\tau \in X_k$ の次数 $\deg$ を

$$\deg(\tau) = \deg_{w_{k+1}}(\tau) := \sum_{\substack{\sigma \in X_{k+1} \\ \sigma \supset \tau}} w_{k+1}(\sigma) \quad (\tau \in X_k) \quad (2.6)$$

と定義する. このとき,

$$\|d_k f\|_{C^{k+1}}^2 \leq (k+2) \sum_{\tau \in X_k} |f(\tau)|^2 \deg(\tau).$$

証明. (2.3) においてシュワルツの不等式を用いると,

$$|d_k f(\sigma)|^2 \leq \sum_{\tau \in X_k} |\epsilon(\sigma, \tau)|^2 \cdot \sum_{\tau \in X_k, \sigma \supset \tau} |f(\tau)|^2 \leq (k+2) \sum_{\tau \in X_k, \sigma \supset \tau} |f(\tau)|^2.$$

よって,

$$\|d_k f\|_{C^{k+1}}^2 \leq (k+2) \sum_{\sigma \in X_{k+1}} \sum_{\tau \in X_k, \sigma \supset \tau} |f(\tau)|^2 w_{k+1}(\sigma) = (k+2) \sum_{\tau \in X_k} |f(\tau)|^2 \deg(\tau).$$

□

次の命題の後半は「グラフのラプラシアンが固有値 2 を持つための必要十分条件が 2 部グラフである」という事実の単体複体版である。

命題 2.24. $w \equiv 1$ に対するラプラシアンを L_k^{up} とする。また、ウェイト $w_{k+1} : X_{k+1} \rightarrow (0, \infty)$ に対してウェイト w_k を (2.6) で定義し、 $w_k = \deg$ と w_{k+1} より定まるラプラシアンを Δ_k^{up} とする。このとき、

$$\text{Spec}(-L_k^{\text{up}}) \subset [0, (k+2)d_{\max}], \quad \text{Spec}(-\Delta_k^{\text{up}}) \subset [0, k+2].$$

ただし、 $d_{\max} = \max_{\tau \in X_k} \deg_1(\tau) = \max_{\tau \in X_k} \#\{\sigma \in X_{k+1} : \sigma \supset \tau\}$ である。また、 X がハイパーグラフ連結な k -次元単体複体であるとする。このとき、 $-\Delta_{k-1}^{\text{up}}$ が固有値 $k+1$ を持つための必要十分条件は disorientation が存在することである。

証明. 補題 2.23 より以下のことがわかる。1°) $w_k = \deg_{w_{k+1}}$ のとき。

$$\langle \Delta_k^{\text{up}} f, f \rangle_{C^k} = \langle d_k f, d_k f \rangle_{C^{k+1}} \leq (k+2) \sum_{\tau \in X_k} |f(\tau)|^2 \deg(\tau) = (k+2) \|f\|_{C^k}^2.$$

2°) $w \equiv 1$ のとき。

$$\langle \Delta_k^{\text{up}} f, f \rangle_{C^k} \leq (k+2) \sum_{\tau \in X_k} |f(\tau)|^2 \deg_1(\tau) \leq (k+2) \max_{\tau \in X_k} \deg_1(\tau) \cdot \|f\|_{C^k}^2.$$

1°), 2°) より前半の主張は明らか。

まず、 k -次元単体複体がハイパーグラフ連結で disorientation X_k^+ が存在するとする。 $\sigma \in X_{k-1}$ に対して、 $X_k^+(\sigma) := \{\tau \in X_k^+ : \tau \supset \sigma\}$ とおく。ハイパーグラフ連結性より $X_k^+(\sigma) \neq \emptyset$ 。このとき、disorientation の定義から $\epsilon(\tau, \sigma)$ は $\tau \in X_k^+(\sigma)$ の取り方によらず定数であるから

$$f(\sigma) = \epsilon(\tau, \sigma) \quad (\sigma \in X_{k-1})$$

は well-defined. $\alpha_{k-1}^{\text{up}}(\sigma, \eta)f(\eta) = -f(\sigma)$ であることに注意すると

$$\begin{aligned} \Delta_{k-1}^{\text{up}} f(\sigma) &= \frac{1}{\deg(\sigma)} \sum_{\eta (\neq \sigma) \in X_{k-1}} w(\sigma \cup \eta) \alpha_{k-1}^{\text{up}}(\sigma, \eta) f(\eta) - f(\sigma) \\ &= \frac{-1}{\deg(\sigma)} \sum_{\eta (\neq \sigma) \in X_{k-1}} w(\sigma \cup \eta) f(\sigma) - f(\sigma) \\ &= -(k+1)f(\sigma). \end{aligned}$$

逆に $-\Delta_{k-1}^{\text{up}} f = (k+1)f$ ($f \neq 0$) を仮定する。ハイパーグラフ連結性と最大値原理より $|f|$ は X_{k-1} 上定数になることがわかる。よって、 $f(\sigma) \in \{-1, 1\}$ ($\forall \sigma \in X_{k-1}$) と仮定してよい。また、 $F = d_{k-1}f \in C^k$ と定義すると、 $|F| \leq k+1$ である。任意の $\sigma \in X_{k-1}$ に対して

$$k+1 = |-\Delta_k^{\text{up}} f(\sigma)| = |d_{k-1}^* F(\sigma)| \leq \left| \frac{1}{\deg(\sigma)} \sum_{\tau \in X} w(\tau) \epsilon(\tau, \sigma) F(\tau) \right| \leq k+1.$$

よって $|F| = k+1$ である。 $X_k^+ = \{\tau \in X_k^+ : F(\tau) > 0\}$ によって定義するとこれが disorientation となることがわかる。

□

3 マルコフ連鎖の構成

3.1 Q -行列と連続時間マルコフ連鎖

以下では, S は有限集合とする. 行列 $Q = (q(x, y))_{x, y \in S}$ が Q -行列とは

$$(1) \quad q(x, y) \geq 0 \quad (x \neq y)$$

$$(2) \quad \sum_{y \in S} q(x, y) = 0 \quad (\forall x \in S)$$

をみたす行列のことである*.

Q -行列は連続時間マルコフ連鎖の生成作用素に対応する. Q -行列 Q が与えられると $\{P_t := e^{tQ}\}_{t \geq 0}$ はマルコフ半群となり, S 上の連続時間マルコフ連鎖 $(\{w_t\}_{t \geq 0}, \{\mathbb{P}_x\}_{x \in S})$ が存在して

$$(P_t f)(x) = \mathbb{E}_x[f(w_t)], \quad (x \in S)$$

と表現される (cf. [8]). さらに $V : S \rightarrow \mathbb{R}$ が与えられると $\{P_t^V = e^{t(Q-V)}\}_{t \geq 0}$ はいわゆる Feynman-Kac 半群で Feynman-Kac の公式を用いると

$$(P_t^V f)(x) = \mathbb{E}_x[f(w_t) e^{-\int_0^t V(w_s) ds}] \quad (x \in S)$$

として表現される.

Q が m -対称, つまりある $m : S \rightarrow (0, \infty)$ が存在して

$$m(x)q(x, y) = m(y)q(y, x) \quad (\forall x, y \in S)$$

をみたすとき, Q は内積 $\langle f, g \rangle_m = \sum_{x \in S} f(x)g(x)m(x)$ のもと $\ell^2(S, m)$ 上自己共役となる. また対応するディリクレ形式は

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_Q(f, g) &:= \langle -Qf, g \rangle_m = \frac{1}{2} \sum_{x, y \in S} m(x)q(x, y)(f(y) - f(x))(g(y) - g(x)) \\ &= \sum_{xy: x \sim y} m(x)q(x, y)(f(y) - f(x))(g(y) - g(x)) \end{aligned}$$

であり, $\mathcal{E}_Q(f, f) \geq 0$ となるので Q は非正の実固有値をもつ. Q 行列の条件 (1) より $Q1 = 0$ であるから明らかに固有値 0 をもつ. また, Q 自身が対称行列のときは $m(x) \equiv 1$ ととれる.

Q は保存的なマルコフ連鎖を定義するが, $V \geq 0$ に対する Feynman-Kac 半群は既約成分上で $V > 0$ となる点があれば保存的でない. 簡単のため Q は既約とすると, S 以外に死点 ∂ を用意して状態空間を $S^\partial = S \sqcup \{\partial\}$ と拡大して,

$$Q^\partial(x, y) = \begin{cases} (Q - V)(x, y) & x, y \in S, \\ V(x) & x \neq \partial, y = \partial, \\ 0 & x = \partial, \end{cases}$$

としたものは S^∂ 上の Q^∂ -行列となる. この Q^∂ に対応する連続時間マルコフ連鎖 $\{w_t^\partial\}_{t \geq 0}$ を S 上に制限したものが $\{P_t^V\}_{t \geq 0}$ に対応すると思ってよい. $\zeta := \inf\{t \geq 0 : w_t^\partial = \partial\}$ は生存時間と呼ばれ, $w_t^\partial = \partial \quad (\forall t \geq \zeta)$ である.

*一般には S は任意の集合で, 局所有限でない場合 $(\sum_{y \neq x} q(x, y) = \infty)$ も想定するが, ここでは難しいことは考えない.

3.2 2重被覆上の連続時間マルコフ連鎖

グラフのラプラシアン L_0 は次数行列 D_0 と隣接行列 A_0 を用いて $L_0 = A_0 - D_0$ と分解できる. L_k ($k \geq 1$) についても同様の分解 $L_k = A_k - D_k$ が可能であるが A_0 の成分が非負であるのに対し, A_k ($k \geq 1$) には一般には負の成分もあらわれる. $k = 0$ のときは A_0 が非負であることより自然にランダムウォークが対応するが, $k \geq 1$ では一般にはそうではない. ここでは, 一般の行列について状態空間の 2 重被覆を考えることにより Feynman-Kac 型の半群を構成する.

S を有限集合とし, L を S を添字集合とする $|S| \times |S|$ 行列とし, L の対角成分だけ取り出して (-1) 倍した対角行列を D とする. $A = L + D$ と定義すると A は対角成分が 0 の行列で

$$L = A - D \quad (3.1)$$

となる. また,

$$A^+(x, y) = \max\{A(x, y), 0\}, \quad A^-(x, y) = \max\{-A(x, y), 0\}$$

とおくと, $A = A^+ - A^-$ である. $|A| := A^+ + A^-$ と定義する. さらに対角行列 M, V を

$$M(x, x) := \sum_{y \in S} |A|(x, y), \quad Q = A - M, \quad V = D - M$$

と定義する.

注意 3.1. 少し記号の使い方がよくないが, A の要素が負の値をもつこともあるので, ここで定義した Q 自体は一般には Q -行列ではない.

このことに注意して以下の定義をおく.

定義 3.2. ± 1 を対角成分とする対角行列 Λ が存在して, $\Lambda Q \Lambda$ が Q -行列となるときの Q -行列化可能という.

上の手続きで得られる Q が Q -行列化可能であるための条件を考えてみよう.

V を行列 $Q = (q(x, y))_{x, y \in V}$ の添字集合とする.

$$E_+ = \{\{x, y\} : x \neq y, q(x, y) > 0\}, \quad E_- = \{\{x, y\} : x \neq y, q(x, y) < 0\}$$

とし, 辺集合を E を $E = E_+ \sqcup E_-$ と定義して得られるグラフ $G = (V, E)$ を考える. G の部分グラフ $G_+ = (V, E_+)$ を連結成分に分解したものを

$$G_+ = G_+^{(1)} \cup G_+^{(2)} \cup \dots \cup G_+^{(p)}, \quad G_+^{(j)} = (V^{(j)}, E_+^{(j)})$$

とする. さらに, 異なる $i \neq j$ に対して点集合 $V^{(i)}$ と $V^{(j)}$ を結ぶ E_- の辺を $E_-^{(i, j)}$ とする.

$$E_-^{rest} := E_- \setminus \bigsqcup_{1 \leq i < j \leq p} E_-^{(i, j)}$$

とおく. さらに, $V(H) = \{1, 2, \dots, p\}$, $E(H) = \{\{i, j\} : 1 \leq i < j \leq p, E_-^{(i, j)} \neq \emptyset\}$ とグラフ $H = (V(H), E(H))$ を定義する.

命題 3.3. 行列 Q が Q -行列化可能であるための必要十分条件は, 上で定義したグラフが以下の 2 条件をみたすこと.

(1) $E_-^{rest} = \emptyset$. つまり、辺部分集合 E_- に含まれる辺は G_+ の各連結成分内の辺とはならない。

(2) グラフ H の各連結成分は 1 点もしくは 2 部グラフのいずれか。

証明. Q が Q -行列化可能であるとする、 ± 1 を対角成分とするある対角行列 Λ が存在して $\Lambda Q \Lambda$ の各要素は E 上で正になる. $xy \in E_+$ とすると $\Lambda(x, x)q(x, y)\Lambda(y, y) > 0 \Leftrightarrow \Lambda(x, x)\Lambda(y, y) > 0$. 同様に、 $xy \in E_-$ ならば $\Lambda(x, x)\Lambda(y, y) < 0$ となる. よって各連結成分の点集合 $V^{(j)}$ では $\Lambda(x, x)$ は同符号となる必要があるが、 $V^{(j)}$ の点同士をつなぐ E_- の辺が存在すると矛盾する. よって、条件 (1) が必要. 条件 (1) が満たされた状況では、各 $V^{(j)}$ 上では $\Lambda(x, x)$ が同符号、 E_- の辺は各連結成分 $V^{(i)}$ 達を結ぶ辺として存在する可能性があるのみである. もし、異なる i, j に対して $V^{(i)}$ と $V^{(j)}$ を結ぶ E_- の辺があると、 $\Lambda(x, x) (\forall x \in V^{(i)})$ と $\Lambda(y, y) (\forall y \in V^{(j)})$ は異符号となる必要がある. この条件がすべての $i \neq j$ で矛盾なく成立するためには、条件 (2) が必要である.

逆にグラフが 2 条件をみたすとき、グラフ H の点集合 $V(H)$ の連結成分のうち 1 点集合を集めたものを A とし、連結成分のうち 2 部グラフに対応するものの点集合 $B^{(1)}, \dots, B^{(q)}$ をすべて集めたものを B とする. このとき、 $V(H) = A \sqcup B$ である. また、各 2 部グラフからなる連結成分 $B^{(j)}$ の自然な分割を $B^{(j)} = B_1^{(j)} \sqcup B_2^{(j)}$ とし、 $B_1 = \sqcup_{j=1}^q B_1^{(j)}$, $B_2 = \sqcup_{j=1}^q B_2^{(j)}$ とおく. 対角行列 Λ を

$$\Lambda(x, x) = \begin{cases} 1 & \text{if } x \in \cup_{j \in A \cup B_1} V^{(j)}, \\ -1 & \text{if } x \in \cup_{j \in B_2} V^{(j)}, \end{cases}$$

と定義すると、 $\Lambda Q \Lambda$ は Q -行列となることは簡単に確かめられる. $\square$

L から定まる Q が Q -行列化可能のときは、 L のかわりにあらかじめ $\Lambda L \Lambda$ を考えておけば $L = A - D = Q - V$ として得られる Q は Q -行列としてよい. Λ による変換により固有値 (少なくとも固有多項式) はかわらないので、固有値に関する問題についてはこの変換した Q -行列 $\Lambda Q \Lambda$ が利用できる.

S のコピー $\tilde{S}$ を用意して、 $\tilde{S} = S \sqcup \tilde{S}$ とおく. L に対して

$$\tilde{L} := \begin{pmatrix} A^+ - D & A^- \\ A^- & A^+ - D \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} A^+ - M & A^- \\ A^- & A^+ - M \end{pmatrix}}_{=: \tilde{Q}} - \underbrace{\begin{pmatrix} V & O \\ O & V \end{pmatrix}}_{=: \tilde{V}} \quad (3.2)$$

を考える. 以下、 $m \equiv 1$ として、 $\ell^2(S, m), \ell^2(\tilde{S}, \tilde{m})$ などは単に $\ell^2(S), \ell^2(\tilde{S})$ と書く.

命題 3.4. $\ell^2(\tilde{S})$ の部分空間を

$$\ell_a^2(\tilde{S}) := \{(v, -v)^T, v \in \ell^2(S)\}, \quad \ell_s^2(\tilde{S}) := \{(v, v)^T, v \in \ell^2(S)\}$$

と定義するとともに $\tilde{L}$ の不変部分空間となる. それぞれ $\ell^2(S)$ と自然に同一視すると、 $\tilde{L}|_{\ell_a^2(\tilde{S})}, \tilde{L}|_{\ell_s^2(\tilde{S})}$ の作用はそれぞれ L と $|A| - D$ の作用に等しい. 特に、 $\tilde{L}$ の固有値は、 L の固有値と $|A| - D$ の固有値の和集合となる.

証明. 簡単な計算より明らか. $\square$

任意の行列 L から (3.2) を通じて $\tilde{L} = \tilde{Q} - \tilde{V}$ が定義されて、(3.2) 式において $\tilde{Q}$ は前節の意味で Q -行列となる. $\tilde{Q}$ を Q -行列とする $\tilde{S}$ 上の連続時間マルコフ連鎖 $\{\tilde{w}_t\}_{t \geq 0}$ が存在し、 $\tilde{V}$ をポテンシャルとする Feynman-Kac 半群を考えることができる.

注意 3.5. ここで定義される $\{\tilde{w}_t\}_{t \geq 0}$ は行列 L が既約だとしても既約とは限らない. 場合によっては, $\tilde{Q} = O$ となることもあり (例 5.5), その場合は出発点から動かないマルコフ連鎖を定義する.

注意 3.6. Q が Q -行列化可能ときある対角行列 Λ が存在して $\hat{Q} = \Lambda Q \Lambda$ は Q -行列となる. 命題 3.3 を考慮すると, 適当に $\tilde{S}$ の番号をつけかえることにより

$$\tilde{Q} = \begin{pmatrix} \hat{Q} & O \\ O & \hat{Q} \end{pmatrix}.$$

とすることができる. これは単体の向きを適当にかえると $\hat{Q}$ 自身が Q 行列となり自然に S 上のマルコフ連鎖が対応することを意味する. つまり, この場合は実質的には 2 重被覆を考える必要はない (例 5.2, 例 5.3).

命題 3.4 により $\tilde{L}|_{\ell_a^2(\tilde{S})} \cong L$ であったから, $\tilde{S}$ 上の連続時間マルコフ連鎖 $\{\tilde{w}_t\}_{t \geq 0}$ と $\tilde{V}$ を用いて

$$(e^{tL}f)(x) = \mathbb{E}_x[f(\tilde{w}_t)e^{-\int_0^t V(\tilde{w}_s)ds}], \quad x \in S, f \in \ell_a^2(\tilde{S})$$

の関係から行列 L の情報ある程度取り出すことが可能である. 特に L の固有値の実部が最大のものに対応する固有空間の情報は $t \rightarrow \infty$ で取り出すことが可能である.

例 3.7. L が対称行列の場合を考える. (3.2) にあらわれる $A^+, A^-, \tilde{Q}, \tilde{V}$ などはすべてまた対称となる. $f \in \ell^2(S)$ に対して $\tilde{f} \in \ell^2(\tilde{S})$ を

$$\tilde{f}(y) = \begin{cases} f(x), & y = x \in S, \\ -f(x), & y = \bar{x} \in \tilde{S} \end{cases}$$

と定義する. つまり, $\tilde{f}$ は f の $\tilde{S}$ への反対称拡張である. 明らかに $\{e_x := 2^{-1/2}\tilde{\delta}_x, x \in S\}$ は $\ell_a^2(\tilde{S})$ の正規直交基底となる. $\tilde{L}$ のスペクトル分解により

$$e^{t\tilde{L}}(x, y) = \langle e^{t\tilde{L}}e_y, e_x \rangle_{\tilde{m}} = \sum_{i=1}^{|S|} e^{t\lambda_i} \varphi_i(x) \varphi_i(y) = \langle e^{tL}\delta_y, \delta_x \rangle_m \quad (x, y \in S).$$

ただし, $\{\lambda_i, \varphi_i, i = 1, 2, \dots, |S|\}$ は L の固有値と (正規化) 固有関数. 特に最大固有値を $\lambda_{\max}$, その固有空間 $E_{\max}$ への直交射影を $P_{\max}$ とすると

$$e^{-t\lambda_{\max}} e^{t\tilde{L}}(x, y) \rightarrow P_{\max}(x, y).$$

となる. 特に,

$$e^{-t\lambda_{\max}} \text{Tr}(e^{t\tilde{L}}) \rightarrow \dim E_{\max}.$$

4 $-Q + V$ のスペクトルに関するいくつかの注意

4.1 Spectral positivity

S は有限集合とする. Q を S 上の連続時間マルコフ連鎖 $\{w_t\}$ の生成作用素とする. m は可逆分布とする.

$$\mathcal{E}_Q(f, f) := \langle -Qf, f \rangle_m = \frac{1}{2} \sum_{x, y \in S} m(x) q(x, y) (f(y) - f(x))^2 \geq 0.$$

特に, $\text{Spec}(Q) \subset (-\infty, 0]$. 以下では, $A \succeq B$ は $\langle Af, f \rangle \geq \langle Bf, f \rangle$ ($\forall f \in \ell^2(S)$) を意味するものとする. また, $\mathbf{1} \in \ell^2(S)$ を恒等的に 1 である定数関数とする.

この節では m -対称な Q -行列 Q を考える. 前節で述べたように $0 \in \text{Spec}(Q)$ かつ $\text{Spec}(Q) \subset (-\infty, 0]$ となる.

定義 4.1 (Spectral positivity). m -対称な Q -行列 Q に対して $V : S \rightarrow \mathbb{R}$ が spectrally positive であるとは, ある $c > 0$ が存在して $-Q + V \succeq cI$ となるときをいう.

Q が m -対称で V が spectrally positive ならば, ある $c > 0$ が存在して $\text{Spec}(Q - V) \subset (-\infty, -c]$ となることは定義より明らかである.

命題 4.2. (1) Q に対して spectrally positive なポテンシャル V の全体は凸集合となる.

(2) $\sum_{x \in S} V(x)m(x) \leq 0$ ならば V は spectrally positive でない. 特に, $-L = -Q + V$ は 0 以下の固有値をもつ.

証明. (1) 定義 4.1 は内積を用いて書けば,

$$\langle (-Q + V)f, f \rangle_m = \mathcal{E}_Q(f, f) + \langle Vf, f \rangle_m \geq c \|f\|_m^2 > 0 \quad (\forall f \in \ell^2(S)).$$

この不等式から, Q に対して spectrally positive なポテンシャル V の全体が凸集合となることは明らか.

(2) $f = \mathbf{1}$ とおくと $\mathcal{E}_Q(\mathbf{1}, \mathbf{1}) = 0$ であるから, 仮定より

$$\langle (-Q + V)\mathbf{1}, \mathbf{1} \rangle_m = \sum_{x \in S} V(x)m(x) \leq 0.$$

よって, V は spectrally positive でない. □

2重被覆グラフ上の行列 $-\tilde{L} = -\tilde{Q} + \tilde{V}$ を考えると, 命題 3.4 よりそのスペクトルは $\text{Spec}(-L)$ と $\text{Spec}(D - |A|)$ の和集合となるのであった. $-L = -Q + V$ の設定では, $-Q + V \succeq 0$ である. 特に Q が Q -行列化可能の場合にはこのことよりコホモロジーの存在のための十分条件が得られる.

系 4.3. $-\tilde{L} = -\tilde{Q} + \tilde{V}$ とする.

$$\sum_{x \in S} V(x)m(x) \leq 0 \tag{4.1}$$

のとき, $D - |A|$ は 0 以下の固有値をもつ. 特に, Q が Q -行列化可能のときは $0 \in \text{Spec}(-Q + V)$.

証明. S 上の定数関数 $\mathbf{1}$ の $\tilde{S}$ への対称拡張 $\tilde{\mathbf{1}}_s$ とすると簡単な計算により, $\langle -\tilde{L}\tilde{\mathbf{1}}_s, \tilde{\mathbf{1}}_s \rangle_m = 2 \sum_{x \in S} V(x)m(x)$ がわかる. よって, 命題 3.4 と命題 4.2(2) より $\sum_{x \in S} V(x)m(x) \leq 0$ ならば $-\tilde{L}_{sym}$ は 0 以下の固有値を持つ. 特に, Q が Q -行列化可能のときは, $-\tilde{L}_{sym}, -\tilde{L}_{asym}, -L$ はユニタリ同値で, $-L = -Q + V \succeq 0$ であるから固有値 0 をもつ. □

注意 4.4. Q を生成作用素とする S 上の連続時間マルコフ連鎖 $\{w_t\}_{t \geq 0}$ を考える. spectral positivity と同様の概念で stochastic positivity もある.

$$\limsup_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log \mathbb{E}_x [e^{-\int_0^t V(w_s) ds}] < 0.$$

compact manifold (有限状態) の場合は spectral positivity と同値になるが, noncompact manifold (無限状態) では $\sup \text{Spec}(Q) < 0$ となる可能性があり本質的な違いがでてくる可能性がある.

4.2 Gaugeability とコホモロジーの非存在

Q は S 上で定義された対称な Q 行列とし, $L = Q - V$ について $V = V_+ - V_-$ とする. $V_{\pm}$ はそれぞれ V の正部分と負部分である. また, $S_+ = \{x \in S : V(x) \geq 0\}$, $S_- = \{x \in S : V(x) < 0\}$ とする. $Q - V_+$ に対応する S 上の (killing のある) 連続時間マルコフ連鎖を ($W = \{w_t\}_{t \geq 0}, \zeta$) とする. ただし, ζ は生存時間をあらわす. Revuz 測度 $\mu_- := V_- dm$ に対応する正値加法的汎関数

$$A_t^{\mu_-} := \int_0^t V_-(w_s) ds$$

を考えて, $\tau_t := \inf\{s > 0 : A_s^{\mu_-} > t\}$ で定義される $A_t^{\mu_-}$ の右連続逆関数 $\{\tau_t, t \geq 0\}$ に対して

$$Y_t^{\mu_-} := w_{\tau_t}$$

と定義する. こうして定義される $\{Y_t^{\mu_-}\}_{t \geq 0}$ を W の $A_t^{\mu_-}$ による時間変更過程という. $\{Y_t^{\mu_-}\}_{t \geq 0}$ は S_- 上のマルコフ連鎖となり, その生存時間は $A_{\zeta}^{\mu_-} = \int_0^{\zeta} V_-(w_s) ds$ に等しい. この量は Q で生成される S 上のランダムウォークがポテンシャル V_+ によって kill されるまでに得る負のポテンシャル V_- の総量である. この量があり多くなければ $-L$ のスペクトルの下限が正となる. この量の指数可積分性は gaugeability とよばれる.

このとき, 単体複体 X のラプラシアン L_k から定まる $S := X_k$ の 2 重被覆 $\tilde{S} := \tilde{X}_k$ 上で定義される拡張されたラプラシアンの分解 $\tilde{L}_k = \tilde{Q}_k - \tilde{V}_k$ を考える. 対応するマルコフ連鎖の gaugeability の条件 $\sup_{x \in \tilde{S}} \mathbb{E}_x[\exp(A_{\zeta}^{\mu_-})] < \infty$ は

$$\inf\{\mathcal{E}_{\tilde{Q}_k}(u, u) + \sum_{x \in \tilde{S}_+} u(x)^2 \tilde{V}_+(x); \sum_{x \in \tilde{S}_-} u(x)^2 \tilde{V}_-(x) = 1\} > 1$$

と同値であり, これらが成り立つとき $H^k(X, \mathbb{R}) = 0$ である.

また, Q_k が Q -行列化可能であるときは本質的に S で考えればよく, このとき, $H^k(X, \mathbb{R}) = 0$, gaugeability $\sup_{x \in S} \mathbb{E}_x[\exp(A_{\zeta}^{\mu_-})] < \infty$,

$$\inf\{\mathcal{E}_{Q_k}(u, u) + \sum_{x \in S_+} u(x)^2 V_+(x); \sum_{x \in S_-} u(x)^2 V_-(x) = 1\} > 1$$

は同値となる.

gaugeability や時間変更の議論などは例えば [1, 3, 4] を参照のこと.

4.3 Birman-Schwinger principle

2 重被覆上 $\tilde{S}$ が連結のときは $-\tilde{Q} + \tilde{V}$ に負の固有値が出る可能性がある. 以下のようにして負の固有値の個数に対する評価を (原理的には) 得ることができる.

S は有限状態として, $-Q + V$ の負の固有値の個数について考える. V を正の部分と負の部分に分けて $V = V_+ - V_-$ とし, $\hat{Q} := Q - V_+$ とおく. $\hat{Q}$ には V_+ の台の上で killing のあるランダムウォークが対応する. 特に, $\text{Spec}(-\hat{Q}) \subset [0, \infty)$ である. $\lambda > 0$ として,

$$\begin{aligned} -\lambda \in \text{Spec}(-Q + V) &\iff \det(-Q + V - (-\lambda)) = 0 \\ &\iff \det(-\hat{Q} + \lambda - V_-) = 0 \\ &\iff \det(-\hat{Q} + \lambda) \det(I - \underbrace{V_-^{1/2}(-\hat{Q} + \lambda)^{-1}V_-^{1/2}}_{=: K_{\lambda}(V)}) = 0 \\ &\iff 1 \in \text{Spec}(K_{\lambda}(V)) \end{aligned}$$

ここで最後の同値性には $\text{Spec}(-\hat{Q}) \subset [0, \infty)$ であることを用いた。ここにあらわれる非負定値作用素 $K_\lambda(V)$ を Birman-Schwinger 作用素という。 $K_\lambda(V)$ は λ に関して非負定値作用素として単調減少。よって、「 $-Q+V$ の $-\lambda$ 以下の固有値の個数 $N(\lambda)$ 」は「 $K_\lambda(V)$ の 1 以上の固有値の個数」に等しい。 $K_\lambda(V)$ の固有値を $\{\mu_i(\lambda)\}_i$ とあらわすと、

$$\text{Tr} K_\lambda(V)^p = \sum_i \mu_i(\lambda)^p \geq \sum_{i: \mu_i(\lambda) \geq 1} 1^p = N(\lambda). \quad (4.2)$$

$(-\hat{Q} + \lambda)^{-1}(x, y)$ は λ 次の Green 核であるから、 $(\{w_t\}_{t \geq 0}, \{\mathbb{P}_x\}_{x \in S})$ を Q に対応するランダムウォーク、 $(\{\hat{w}_t\}_{t \geq 0}, \{\hat{\mathbb{P}}_x\}_{x \in S}, \zeta)$ を $\hat{Q}$ に対応するランダムウォークとすると

$$(-\hat{Q} + \lambda)^{-1}(x, y) = \mathbb{E}_x \left[\int_0^\infty e^{-\int_0^t (V_+(w_s) + \lambda) ds} \delta_y(w_t) dt \right] = \hat{\mathbb{E}}_x \left[\int_0^\zeta e^{-\lambda t} \delta_y(\hat{w}_t) dt \right].$$

よって、例えば (4.2) において $p = 1$ として $\lambda \searrow 0$ とすると

$$N(0+) \leq \sum_{x \in S_-} V_-(x) \hat{\mathbb{E}}_x \left[\int_0^\zeta \delta_x(\hat{w}_t) dt \right]$$

を得る。ここで $N(0+)$ は 0 未満の固有値の個数をあらわす。

さらに詳しくは [10] などを参照のこと。

5 単体複体上の連続時間マルコフ連鎖

重みが $w \equiv 1$ の場合を考える。

$$\mathcal{L}_k^{\text{up}} = -d_k^* d_k, \quad \mathcal{L}_k^{\text{down}} = -d_{k-1} d_{k-1}^*, \quad \mathcal{L}_k = \mathcal{L}_k^{\text{up}} + \mathcal{L}_k^{\text{down}}.$$

それぞれ (3.1) にあるように

$$\mathcal{L}_k^{\text{up}} = A_k^{\text{up}} - D_k^{\text{up}}, \quad \mathcal{L}_k^{\text{down}} = A_k^{\text{down}} - D_k^{\text{down}}, \quad \mathcal{L}_k = A_k - D_k$$

と分解すると、 $\sigma, \eta \in X_k$ に対して

$$A_k^{\text{up}}(\sigma, \eta) = \begin{cases} \pm 1 & \text{if } \sigma \cup \eta \in X_{k+1}, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad A_k^{\text{down}}(\sigma, \eta) = \begin{cases} \pm 1 & \text{if } \sigma \cap \eta \in X_{k-1}, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

ただし、符号 $\pm$ は face の向きの入れ方による。補題 2.9 と注意 2.10 に注意すると、

$$A_k(\sigma, \eta) = \begin{cases} \pm 1 & \text{if } \sigma \cup \eta \notin X_{k+1} \text{ and } \sigma \cap \eta \in X_{k-1}, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

また、対角成分については

$$\begin{aligned} D_k^{\text{up}}(\sigma, \sigma) &= \sigma \in X_k \text{ を含む } (k+1)\text{-face の個数} \\ D_k^{\text{down}}(\sigma, \sigma) &= \sigma \in X_k \text{ に含まれる } (k-1)\text{-face の個数} \\ &= k+1 \\ D_k(\sigma, \sigma) &= D_k^{\text{up}}(\sigma, \sigma) + k+1. \end{aligned}$$

$\tilde{\mathcal{L}}_k^{\text{up}}, \tilde{\mathcal{L}}_k^{\text{down}}, \tilde{\mathcal{L}}_k$ をそれぞれ 3 節で定義した方法で $\tilde{S} = S \sqcup \bar{S}$ 上に拡張したものを

$$\tilde{\mathcal{L}}_k^{\#} = \tilde{Q}_k^{\#} - \tilde{V}_k^{\#}$$

と分解する。ただし、 $\# = \text{up, down, empty}$ 。ここでは、 $\tilde{Q}_k^{\text{up}}, \tilde{Q}_k^{\text{down}}, \tilde{Q}_k$ に対応する連続時間マルコフ連鎖をそれぞれ X_k 上の up-MC, down-MC, MC と呼ぶことにする。注意 3.5 で述べたようにこれらの MC は既約とは限らない。

注意 5.1. ポテンシャル V が大きい所ほど killing rate が高いのでスペクトルを押し上げる効果が大い、つまり $\ker \Delta$ をなくす方向に働く。一方、 V が大きいということは、up-walk と down-walk の差が小さい、つまり k -face が密に入っているという直感を与えるから。これは k -face が多い方が (コ) ホモロジーが小さくなるという直感と整合している。

5.1 例

以下では $k = 1$ の場合、つまり辺 (1-単体) 上のランダムウォークについて考える。また重み $w \equiv 1$ の場合のラプラシアンを L_1 とあらわす。

例 5.2. 図 3 の左図の単体複体 X を考える。各単体の向きは辞書式順序が入っているものとする。

$$L_1 = \begin{array}{c} \begin{array}{ccccc} & ab & ac & ad & bc & bd & cd \\ \begin{array}{l} ab \\ ac \\ ad \\ bc \\ bd \\ cd \end{array} & \begin{bmatrix} -4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -3 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -3 \end{bmatrix} \end{array} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -2 \end{bmatrix}}_{=Q} - \underbrace{\begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{=V}$$

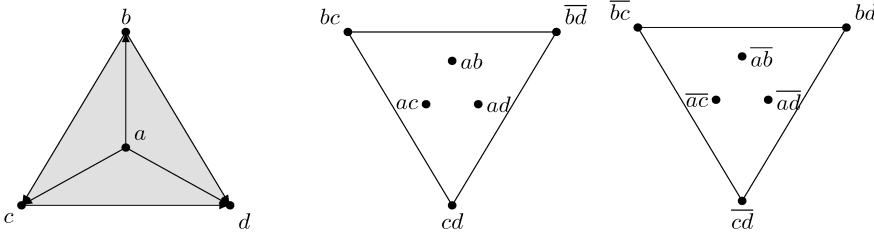
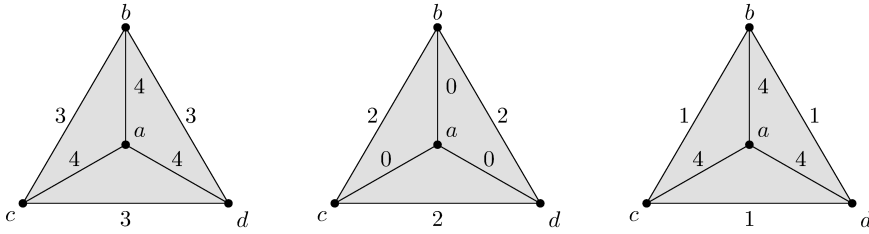


図 3: 単体複体 X (左) と $\tilde{Q}$ から定まる状態空間 (右 2 つ)

$\tilde{Q}$ に対応するマルコフ連鎖の状態空間は図 3 にあるような $bc, \overline{bd}, cd$ を 3 点とするサイクル C_3 と 3 つの孤立点 ab, ac, ad からなる点集合 S とそのコピー $\bar{S}$ である。命題 3.3 (とその証明中) の記号で書くと、 $E_+ = \{\{bc, cd\}\}$, $E_- = \{\{bc, bd\}, \{bd, cd\}\}$, $V^{(1)} = \{ab\}$, $V^{(2)} = \{ac\}$, $V^{(3)} = \{ad\}$, $V^{(4)} = \{bc, cd\}$, $V^{(5)} = \{bd\}$ で、 $V^{(4)}$ の内部に E_- の辺はなく、グラフ H は $\{1, 2, 3\}$ がそれぞれ孤立点で $\{4, 5\}$ は 2 部グラフをなす。よって、命題 3.3 より Q は Q -行列化可能である。注意 3.6 より S と $\bar{S}$ 上でのマルコフ連鎖は同一なので (図 3 参照)、ここでは S 上のみを考える。

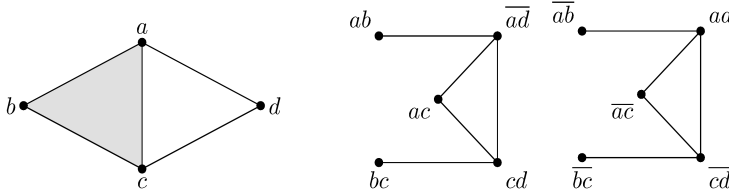
図 4: 左から順に D, M, V

ab, ac, ad を出発するとランダムウォークは動かず, $bc, \overline{bd}, cd$ 上では単純ランダムウォークである. ポテンシャルも考慮すると, ab, ac, ad 出発のときは rate 4 で killing が起る. $bc, \overline{bd}, cd$ ではそれ上で単純ランダムウォークしながら rate 1 で killing が起る. どの点から出発しても明らかに有限時間で killing が起る. よって, この例では $H^1(X, \mathbb{R}) = 0$ である.

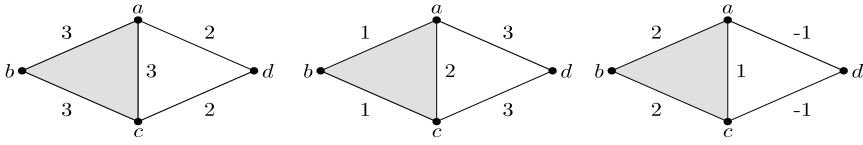
例 5.3. 図 5 の左図の単体複体 X を考える. 各単体の向きは辞書式順序が入っているものとする.

$$L_1 = \begin{array}{c} ab \\ ac \\ ad \\ bc \\ cd \end{array} \begin{array}{c} ab \quad ac \quad ad \quad bc \quad cd \\ \begin{bmatrix} -3 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & -1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & -2 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -3 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -2 \end{bmatrix} \end{array} = \underbrace{\begin{array}{c} \begin{bmatrix} -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & -1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & -3 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & -3 \end{bmatrix} \\ =Q \end{array}} - \underbrace{\begin{array}{c} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \\ =V \end{array}}$$

$V^{(1)} = \{ab\}, V^{(2)} = \{ac, bc, cd\}, V^{(3)} = \{ad\}, E_+ = \{\{ac, cd\}, \{bc, cd\}\}, E_-^{(1,3)} = \{\{ab, ad\}\}, E_-^{(2,3)} = \{\{ac, ad\}, \{ad, cd\}\}$ で $E_-^{rest} = \emptyset$. またグラフ H は連結で 2 部グラフであるから, Q は Q -行列化可能である. よって, 2 重被覆は二つの同型なグラフに分解する.

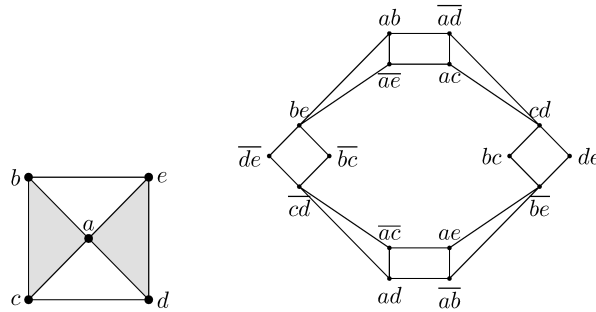
図 5: 単体複体 X (左) と $\tilde{Q}$ から定まる状態空間 (右 2 つ)

$\tilde{Q}$ に対応するマルコフ連鎖の状態空間は図 5 の右にある二つの連結成分からなり, それぞれの上の単純ランダムウォークが対応する. この例では $H^1(X, \mathbb{R}) \cong \mathbb{R}$ である.

図 6: 左から順に D, M, V

例 5.4. 図 7 の左図の単体複体 X を考える. 各単体の向きは辞書式順序が入っているものとする.

$$\begin{aligned}
 L_1 &= \begin{matrix} & ab & ac & ad & ae & bc & be & cd & de \\ \begin{matrix} ab \\ ac \\ ad \\ ae \\ bc \\ be \\ cd \\ de \end{matrix} & \begin{bmatrix} -3 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & -1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & -3 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & -3 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -3 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & -1 & -2 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & 0 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & -3 \end{bmatrix} \end{matrix} \\
 &= \underbrace{\begin{bmatrix} -3 & 0 & -1 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & -1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -1 & -1 & -3 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 0 & -3 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & -1 & -4 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & 0 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & -2 \end{bmatrix}}_{=Q} - \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{=V}
 \end{aligned}$$

図 7: 単体複体 X (左) と $\tilde{Q}$ から定まる状態空間

このとき, $V^{(1)} = \{ab, be\}$, $V^{(2)} = \{ac, bc, cd, de\}$, $V^{(3)} = \{ad\}$, $V^{(4)} = \{ae\}$,
 $E_+ = \{\{ab, be\}, \{ac, cd\}, \{bc, cd\}, \{cd, de\}\}$, $E_-^{(1,2)} = \{\{be, bc\}, \{be, de\}\}$, $E_-^{(1,3)} = \{\{ab, ad\}\}$,
 $E_-^{(1,4)} = \{\{ab, ae\}, \{be, ae\}\}$, $E_-^{(2,3)} = \{\{ac, ad\}, \{cd, ad\}\}$, $E_-^{(2,4)} = \{\{ac, ae\}\}$, $E_-^{rest} = \emptyset$. こ
 れらから定まるグラフ H は連結であるが 2 部グラフでないので Q は Q -行列化可能でない. また

2重被覆は図7右図のように連結である。 $\tilde{Q}$ は対称で $\tilde{m}(e) \equiv 1$ であるから、 $\sum_{e \in \tilde{S}} \tilde{V}(e) \tilde{m}(e) = 2 \sum_{e \in \tilde{S}} \tilde{V}(e) = -4 \leq 0$. よって、命題4.2より $\tilde{V}$ は $\tilde{Q}$ に関して spectrally positive ではなく、 $-\tilde{L}_1$ の対称部分 $-|A| + D$ には負の固有値があらわれる. また、 $H^1(X, \mathbb{R}) \cong \mathbb{R}^2$.

例 5.5. $X = K_n^2$ を n 点上の2次元完全複体とする. このとき、例2.22でみたように $L_1 = -nI = O - nI$ であるから、 $Q = O$, $V = nI$ となる. よって、状態空間 $S = \{1, 2, \dots, n\}$ は各点が連結成分で、対応するマルコフ連鎖は動かず rate n で killing が起こるのみである. よって、 $H^1(X, \mathbb{R}) = 0$ である.

参考文献

- [1] Z. Q. Chen. Gaugeability and Conditional Gaugeability, Trans. Amer. Math. Soc. 354(2002), 4639–4679.
- [2] B. Eckmann. Harmonische funktionen und randwertaufgaben in einem komplex, Commentarii Mathematici Helvetici 17 (1944), no. 1, 240–255.
- [3] M. Fukushima, Y. Oshima and M. Takeda. Dirichlet Forms and Symmetric Markov Processes, De Gruyter Studies in Mathematics 19.
- [4] 福島正俊・竹田雅好. マルコフ過程. 培風館, 2008 年.
- [5] A. Gundert and U. Wagner. On Eigenvalues of Random Complexes, available at <http://arxiv.org/abs/1411.4906>
- [6] D. Horak and J. Jost, Spectra of combinatorial Laplace operators on simplicial complexes, available at <https://arxiv.org/abs/1105.2712>
- [7] S. Mukherjee and J. Steenbergen. Random Walks on Simplicial Complexes and Harmonics, available at <http://arxiv.org/abs/1310.5099>
- [8] J. R. Norris. Markov Chains. Cambridge University Press, 1997.
- [9] O. Parzanchevski and R. Rosenthal. Simplicial complexes: spectrum, homology and random walks, available at <https://arxiv.org/abs/1211.6775>
- [10] M. Reed and B. Simon. Methods of modern mathematical physics. IV. Analysis of Operators. Academic Press, New York-London, 1978.