ペンダント頂点をもつグラフの 零付近のスペクトル

信州大学・工学部 鈴木 章斗

Akito Suzuki

Department of Engineering, Shinshu University

1 はじめに

ペンダント頂点をもつ無限グラフのスペクトルを考える。ここで、ペンダント頂点とは、次数 1 の頂点を指す。[4] では、 d 次元格子に、周期的にペンダント頂点を付加したグラフを考え、そのようなグラフの推移作用素のスペクトルが調べられた。その結果、1 次元では、ペンダント頂点の配置によらず、スペクトルギャップが現れることが示された。また、零固有値が現れるための必要十分条件は、ペンダント頂点と隣接しない奇数個の頂点からなる歩道をもつことであることもわかった。2 次元以上の格子にペンダント頂点を周期的に付加する場合は、その配置によって、ギャップが現れる場合とそうでない場合がある。非周期的にペンダント頂点を付加した場合の結果としては、スペクトルギャップが現れないようなペンダント頂点の配置の十分条件が導かれている ([3])。

本稿では、ペンダントをもつ無限グラフの隣接作用素や推移作用素の零付近のスペクトルについて調べる。正則なグラフに対しては、推移作用素は隣接作用素の定数倍になるため、これらの作用素のスペクトルの関係は明白である。しかし、ペンダント頂点を付加したグラフは、正則グラフにはならない。一般に、正則とは限らないグラフに対しても、零付近のスペクトルに関しては同様の振る舞いをする事が示される。より正確にいうと、同じグラフに対しては、隣接作用素が零固有値をもつとき、そのときに限り推移作用素は零固有値をもつ。この場合、多重度も等しい。また、零付近におけるスペクトルギャップの有無についても同様である。こうして、これら零付近のスペクトルの性質をみるときは、隣接作用素か推移作用素のいずれか一方を考えればよいことがわかる。このことは、2 節で述べる。3 節では、隣接作用素に考察の対象を絞り、そのスペクトルの零付近での振る舞いとペンダント頂点の配置との関係について述べる。スペクトルの零付近の振る舞いと関連する話題として、2 部グラフに対するウィッテン指数に関する不変性についてもペンダント頂点との関連から議論することが可能であるが、それは別の機会に譲る。

2 隣接作用素と推移作用素のスペクトル

頂点の集合 $V(G)$ と辺の集合 $E(G) \subset V(G) \times V(G)$ からなる局所有限なグラフ $G = (V(G), E(G))$ に対して, $V(G)$ 上の 2 乗総和可能な関数全体のなすヒルベルト空間を

$$\mathcal{H}_G = \ell^2(V(G)) := \left\{ \psi : V(G) \rightarrow \mathbb{C} \mid \sum_{x \in V(G)} |\psi(x)|^2 < \infty \right\}$$

と表すとき, $\mathcal{H}_G$ の隣接作用素 A_G のスペクトルを考える. 隣接作用素 A_G は

$$(A_G \psi)(x) = \sum_{y \sim x} \psi(y), \quad x \in V(G)$$

によって定義される. ここで, $x \sim y$ と書いたら, 2 頂点 x, y が隣接すること, すなわち x と y を結ぶ辺 $\{x, y\} \in E(G)$ が存在することを意味する. また, 頂点 $x \in V(G)$ の次数を $\deg_G x := \#\{y \mid \{x, y\} \in E(G)\}$ と表す. 混乱の恐れがない場合は, G を省略して, 単に $\deg x$ と表すこともある.

以下, グラフ G は局所有限な無限グラフで

$$D(G) := \sup_{x \in V(G)} \deg x < \infty$$

を満たすと仮定する. また, 特に断りがない限り, ループや多重辺, グラフの向きは考えないことにする. この場合, A_G は有界な自己共役作用素であり, そのスペクトル $\sigma(A_G)$ は実数の閉区間で, $\sigma(A_G) \subset [-D(G), D(G)]$ となる.

一方, グラフ G に対して定義される重み付きのヒルベルト空間

$$\mathcal{H}_G^w := \left\{ \phi : V(G) \rightarrow \mathbb{C} \mid \sum_{x \in V(G)} |\phi(x)|^2 \deg x < \infty \right\}$$

上の推移作用素 L_G は

$$(L_G \phi)(x) = \frac{1}{\deg x} \sum_{y \sim x} \phi(y), \quad x \in V(G) \quad (2.1)$$

によって定義される. ここで, $\mathcal{H}_G^w$ の内積 $\langle \cdot | \cdot \rangle$ は

$$\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle = \sum_{x \in V(G)} \overline{\phi_1(x)} \phi_2(x) \deg x, \quad \phi_1, \phi_2 \in \mathcal{H}_G^w$$

で, G は上の仮定に加え

$$d(G) := \inf_{x \in V(G)} \deg x \geq 1$$

を満たすとする. この場合, L_G も有界な自己共役作用素で, $\sigma(L_G) \subset [-1, 1]$ となる. $d(G) = 0$ の場合は, この節の後半で論じる.

これら 2 つの異なるヒルベルト空間に作用する隣接作用素と推移作用素の関係を調べよう. そのために, 作用素 $J: \mathcal{H}_G \rightarrow \mathcal{H}_G^{\text{w}}$ を $(J\psi)(x) = \psi(x)$ による自然な同一視とし, 作用素 $D: \mathcal{H}_G \rightarrow \mathcal{H}_G$ を $(D\psi)(x) = \deg x \psi(x)$ ($x \in V(G)$) と定義すれば, $\mathcal{H}_G$ の内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ と $\mathcal{H}_G^{\text{w}}$ の内積は

$$\langle J\psi_1 | J\psi_2 \rangle = \langle \psi_1, D\psi_2 \rangle, \quad \psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}_G \quad (2.2)$$

という関係にあることがわかる. また, L_G と A_G の間には

$$L_G = J(D^{-1}A_G)J^{-1} \quad (2.3)$$

という関係がある. いま, $U: \mathcal{H}_G \rightarrow \mathcal{H}_G^{\text{w}}$ を $U\psi = JD^{-1/2}\psi$ によって定義すると, (2.2) より, U はユニタリであることがわかる. そこで, A_G の U によるユニタリ変換を考えると, (2.3) より $\mathcal{H}_G$ 上の作用素の等式

$$U^{-1}L_GU = D^{-1/2}A_GD^{-1/2} \quad (2.4)$$

が成り立つ. すなわち, $\mathcal{H}_G^{\text{w}}$ 上の作用素 L_G のスペクトルは, $\mathcal{H}_G$ 上の作用素 $D^{-1/2}A_GD^{-1/2}$ のスペクトルに等しい. このことから隣接作用素 A_G のスペクトルと推移作用素 L_G のスペクトルに関する次の命題が証明される.

一般に, 作用素 A が零付近にスペクトルギャップをもつとは

$$m(A) := (\inf \sigma(A^2) \setminus \{0\})^{1/2} > 0$$

となることをいう. ここで, $\sigma(A)$ は, A のスペクトルを表す. この場合, 作用素 A は $(-m(A), 0) \cup (0, m(A))$ をレゾルヴェントに含む. A が零付近にスペクトルギャップをもたなければ, $[-\epsilon, \epsilon] \subset \sigma(A)$ となるような正数 $\epsilon > 0$ が存在する.

命題 2.1. グラフ G が, 上の仮定を満たすとき, 次の (1), (2) が成り立つ.

- (1) A_G の零固有空間の次元と L_G の零固有空間の次元は等しい.
- (2) A_G が零付近にスペクトルギャップをもつとき, そのときに限り L_G は零付近にスペクトルギャップをもつ.

証明. $N_G := D^{-1/2}A_GD^{-1/2}$ とおくと, $A_G = D^{1/2}N_GD^{1/2}$ と表されるので, $\psi \in \ker A_G$ ならば, $D^{1/2}\psi \in \ker N_G$ である. 一方, $\phi \in \ker N_G$ に対して, $\psi = D^{-1/2}\phi$ とおくと, $A_G\psi = D^{1/2}N_G\phi = 0$ なので, $\psi \in \ker A_G$ となる. 明らかに, $\phi = D^{1/2}\psi$ であるから

$$\ker N_G = \{D^{1/2}\psi \mid \psi \in \ker A_G\}$$

が示された. これにより, 写像 $:\ker A_G \ni \psi \mapsto D^{1/2}\psi \in \ker N_G$ は全射である. またこの写像が単射であることは, $d(G) \geq 1$ より, $\|D^{1/2}\psi\|^2 \geq \|\psi\|^2$ となることからわかる. こうして, (1) が証明された.

(2) を示す. まず, A_G は零付近にギャップをもつとしよう. この場合

$$\mu_0 := (\inf \sigma(A_G^2) \setminus \{0\})^{1/2} > 0 \quad (2.5)$$

となる. いま $\eta \in (\ker N_G)^\perp \setminus \{0\}$ とすると

$$\begin{aligned} \langle \eta, N_G^2\eta \rangle &= \langle \eta, D^{-1/2}A_GD^{-1}A_GD^{-1/2}\eta \rangle \\ &\geq \frac{1}{D(G)} \|A_GD^{-1/2}\eta\|^2 \end{aligned} \quad (2.6)$$

となる. ここで, $D^{-1/2}\eta \in \ker A_G$ とすると, $\eta \in D^{1/2}\ker A_G = \ker N_G$ となるから, $\eta \in (\ker N_G)^\perp \setminus \{0\}$ に矛盾するので, $D^{-1/2}\eta \notin \ker A_G$ である. そこで

$$D^{-1/2}\eta = \chi_0 + \chi_1, \quad \chi_0 \in \ker A_G, \quad \chi_1 \in (\ker A_G)^\perp \setminus \{0\}$$

とすると, $D^{1/2}\chi_0 \in \ker N_G$ である. ゆえに, η と $D^{1/2}\chi_0$ は直交するから

$$\begin{aligned} \|\chi_1\|^2 &= \|D^{-1/2}(\eta - D^{1/2}\chi_0)\|^2 \\ &\geq \frac{1}{D(G)} \|\eta - D^{1/2}\chi_0\|^2 \geq \frac{\|\eta\|^2}{D(G)} \end{aligned}$$

となる. このことと, (2.5), (2.6) とあわせると

$$\langle \eta, N_G^2\eta \rangle \geq \frac{1}{D(G)} \|A_G\chi_1\|^2 \geq \frac{\mu_0^2}{D(G)} \|\chi_1\|^2 \geq \left(\frac{\mu_0}{D(G)} \|\eta\| \right)^2$$

を得る. 従って, $(\inf \sigma(N_G^2) \setminus \{0\})^{1/2} \geq \mu_0/D(G)$ となり, N_G は零付近にギャップをもつことが示された.

次に, N_G は零付近にギャップをもつと仮定して

$$\nu_0 := (\inf \sigma(N_G^2) \setminus \{0\})^{1/2} > 0 \quad (2.7)$$

としよう. $\xi \in (\ker A_G)^\perp \setminus \{0\}$ とすると,

$$\begin{aligned} \langle \xi, A_G^2 \xi \rangle &= \langle \xi, D^{1/2} N_G D N_G D^{1/2} \xi \rangle \\ &\geq d(G) \|N_G D^{1/2} \xi\|^2 \end{aligned} \quad (2.8)$$

となる. もし, $D^{1/2} \xi \in \ker N_G$ とすると, $\xi \in D^{-1/2} \ker N_G$ となるが, (1) の証明と同様の議論から

$$\ker A_G = \{D^{-1/2} \phi \mid \phi \in \ker N_G\}$$

となることに注意すれば, $\xi \in \ker A_G$ となり矛盾する. ゆえに, $D^{1/2} \xi \notin \ker N_G$ である. そこで

$$D^{1/2} \xi = \zeta_0 + \zeta_1, \quad \zeta_0 \in \ker N_G, \quad \zeta_1 \in (\ker N_G)^\perp \setminus \{0\}$$

とおくと, $D^{-1/2} \zeta_0 \in \ker A$ となり, $D^{-1/2} \zeta_0$ は ξ と直交するから

$$\begin{aligned} \|\zeta_1\|^2 &= \|D^{1/2}(\xi - D^{-1/2} \zeta_0)\|^2 \\ &\geq d(G) \|(\xi - D^{-1/2} \zeta_0)\|^2 \geq d(G) \|\xi\|^2 \end{aligned}$$

となる. これと (2.7), (2.8) をあわせると

$$\langle \xi, A_G^2 \xi \rangle \geq d(G) \|N_G \zeta_1\|^2 \geq d(G) \nu_0^2 \|\zeta_1\|^2 \geq (d(G) \nu_0 \|\xi\|)^2 \quad (2.9)$$

となり, $(\inf \sigma(A_G^2) \setminus \{0\})^{1/2} \geq d(G) \nu_0$ を得る. 以上によって, (2) が示された. $\square$

上の証明から, 次の命題を得る.

命題 2.2. G を命題 2.1 のものとし, $m(A_G) > 0$ とする. このとき

$$d(G) \leq \frac{m(A_G)}{m(N_G)} \leq D(G)$$

が成り立つ.

ここまでは, $d(G) \geq 1$ の場合を考えてきた. 次に, $d(G) = 0$ の場合を考えよう. この場合, $\deg x = 0$ となるような頂点 $x \in V(G)$ が存在する. このようなグラフに対しては, ヒルベルト空間を $\mathcal{H}_G = \ell^2(V(H)) \oplus \ell^2(V_0)$ と直和分解することで, 隣接作用素を

$$A_G = A_H \oplus 0 \quad (2.10)$$

と直和分解できる。ただし、 H は G から $V_0 := \{x \in V(G) \mid \deg x = 0\}$ の頂点を取り除いたグラフである。定義によって、 $x \in V_0$ を端点とする辺はないから、 $E(G) = E(H)$ となり

$$(A_H\psi)(x) = (A_G\psi)(x), \quad x \in V(H) := V(G) \setminus V_0$$

となる。(2.10) から、スペクトルは

$$\sigma(A_G) = \sigma(A_H) \cup \{0\}, \quad \sigma_p(A_G) = \sigma_p(A_H) \cup \{0\}$$

となる。一方で、 $V_0 \neq \emptyset$ のときは、推移作用素の定義式 (2.1) の右辺は意味を失うが

$$(L_G\psi)(x) := 0, \quad x \in V_0$$

と定義し、 $D^{-1/2}$ の代わりに $D_H^{-1/2} \oplus 0$ を用いて、作用素 U を再定義すると

$$U^{-1}L_GU = (D_H^{-1/2}A_HD_H^{-1/2}) \oplus 0$$

となる。ただし、 $D_H = D|_{\ell^2(V(H))}$ とした。この場合、 L_H のユニタリ変換が $D_H^{-1/2}A_HD_H^{-1/2}$ であり

$$\sigma(L_G) = \sigma(L_H) \cup \{0\}, \quad \sigma_p(L_G) = \sigma_p(L_H) \cup \{0\}$$

となる。こうして、グラフ G の代わりにグラフ H に対して、命題 2.1 を適用すればよいことがわかる。このような状況は 3 節において現れる。

以上の考察から、零固有値とスペクトルの零付近におけるギャップの有無に関しては、隣接作用素 A_G と推移作用素 L_G は同様のことが成り立つことがわかった。以下では隣接作用素 A_G の零付近のスペクトルについて論じるが、推移作用素 L_G についても同様のことがいえることに注意されたい。

3 零付近のスペクトル

グラフ G は、2 節の仮定を満たす連結な無限グラフとする。非連結な場合は、連結成分ごとにスペクトルが求まれば、その和集合が全体のスペクトルになるので、連結なグラフを考えれば十分である。また、連結性より、 $d(G) \geq 1$ となる。この節では、さらに $d(G) = 1$ と仮定する。このとき、ペンダント頂点の集合

$$\Lambda_0 := \{x \in V(G) \mid \deg x = 1\}$$

は空でない。つまり、 G はペンダント頂点をもつグラフである。簡単のため、1つの頂点に隣接するペンダント頂点の数は高々1個であると仮定する。これは、本質的な仮定ではない。1つの頂点にいくつかのペンダント頂点が隣接する場合は、[5]に譲る。

このようなグラフ G に対して、ペンダント頂点とそれを端点とする辺（ペンダント辺）のもう一方の端点（いわばペンダントの付け根）を取り去ったグラフを G_0 とする。注意すべき点は、 G は連結であっても、 G_0 は非連結であったり、 $d(G_0) = 0$ となることがある。このようなときは、前者の場合は連結成分ごとに取り扱えばよく、後者の場合は2節の後半のようにして G_0 を取り扱う。次の定理は、 A_G と A_{G_0} の零固有空間の次元は等しいことを意味する。

定理 3.1. G および G_0 は上述のものとする。このとき

$$\dim \ker A_G = \dim \ker A_{G_0}$$

が成り立つ。

注意 3.1. 同様の主張が bipartite な有限グラフで成り立つことは、[2, p. 234, Corollary 1] で証明されている。これを、bipartite とは限らない無限グラフに対して拡張したものが定理 3.1 である。また、定理 3.1 は、グラフ G_0 の代わりに、ペンダント頂点の集合 $\Lambda_1 \subset \Lambda_0$ ($\#\Lambda_1 \leq \infty$) を任意に指定して、 G から Λ_1 の頂点およびそれに隣接する頂点を取り除いたグラフに置き換えても成り立つ。

次に、ギャップの存在については次の定理が成り立つ。

定理 3.2. G および G_0 は定理 3.1 のものとする。このとき、 A_{G_0} が零付近にスペクトルギャップをもてば、 A_G も零付近にスペクトルギャップをもつ。

ギャップの非存在定理を述べるために、 G に周期性を仮定する。[1]によると、 G が $\mathbb{Z}^d$ -周期的であるとは、次の3条件を満たすグラフ（またはそれと同型なグラフ）をいう。

- 1) $V(G)$ の頂点は $\mathbb{R}^d$ に含まれ、有界領域内には有限個しかない。
- 2) 全ての頂点の次数は有限である。
- 3) $\mathbb{R}^d$ の基底 $\{a_1, \dots, a_d\}$ で

$$G + a_1 = G, \dots, G + a_d = G$$

を満たすものが存在する。

3) において、グラフ $G + a$ は、その頂点の集合が $\{x + a \mid x \in V(G)\}$ で、辺の集合が

$\{\{x+a, y+a\} \mid \{x, y\} \in E(G)\}$ となるものである。 G が $\mathbb{Z}^d$ -周期的なとき、任意の $(m_1, \dots, m_d) \in \mathbb{Z}^d$ に対して

$$G + \sum_{i=1}^d m_i a_i = G$$

が成り立つから、 $x-y = \sum_{i=1}^d m_i a_i$ ($(m_1, \dots, m_d) \in \mathbb{Z}^d$) となる頂点 $x, y \in V(G)$ を同一視すれば、基本有限グラフ $G^f := G/\mathbb{Z}^d$ を得る。

定理 3.3. G および G_0 は定理 3.1 と同じ仮定を満たすとする。さらに、 G は $\mathbb{Z}^d$ -周期的で、 A_G は零固有値をもたないとする。このとき、 A_{G_0} が零付近にスペクトルギャップをもたないならば、 A_G も零付近にスペクトルギャップをもたない。

定理 3.2 と定理 3.3 をあわせると、次の系を得る。

系 3.4. グラフ G および G_0 は定理 3.3 の仮定を満たすとする。このとき、次の 2 つは同値である。

- (i) A_G が零付近にスペクトルギャップをもつ。
- (ii) A_{G_0} が零付近にスペクトルギャップをもつ。

本稿では、定理 3.1 - 3.3 の証明は、[5] などに譲ることにして、いくつかの応用例を紹介して本稿を閉じたい。下の例にみるように、特殊な状況では零付近のスペクトルの様子が、計算することなく知ることができる。

例 3.1. G_1 はループと多重辺をもたない局所有限な連結無限グラフで、 $D(G_1) < \infty$ とする。このとき、 G を G_1 の有限個の頂点を除くすべての頂点に 1 つずつペンダント頂点を付加したグラフとする。このとき、 G_0 は有限グラフとなるから、定理 3.2 より、 A_G は零付近にスペクトルギャップをもつことがわかる。

例 3.2. G_1 を例 3.1 のものとする。 G を G_1 に次の条件を満たすようにペンダント頂点を付加したものとする。ペンダント頂点を付加していない頂点からなる連結なグラフの集合 $\{G_n\}_n$ が、 $\sup_n \#V(G_n) < \infty$ となる。このとき、 G_0 のスペクトルは固有値のみからなり、集積点をもたない。ゆえに、 A_{G_0} は零付近にスペクトルギャップをもつ。よって、定理 3.2 より、 A_G は零付近にスペクトルギャップをもつ。

例 3.3. G_1 は、 $\mathbb{Z}$ の頂点に周期的にペンダント頂点を付加したグラフとする。ただし、1 頂点に付加されるペンダント頂点の数は高々 1 つとする。 G は G_1 のペンダント頂点に、

さらに1つずつペンダント頂点を付加したグラフとする。このとき、 $G_0 = \mathbb{Z}$ となるから、 A_{G_0} は零固有値もスペクトルギャップをもたない。よって、定理3.1より、 A_G は零固有値をもたず、定理3.3より、 A_G は零付近にスペクトルギャップをもたない。

参考文献

- [1] A. Badanin, E. Korotyaev, N. Saurova, Laplacians on periodic discrete graphs, arXiv:1301.6896v1.
- [2] D. Cvetković, M. Doob, H. Sachs, Spectra of graphs. Theory and application, Academic press, New York-London, 1980.
- [3] I. Sasaki, A. Suzuki, Essential spectrum of the discrete Laplacian on a deformed lattice, in preparation.
- [4] A. Suzuki, Spectrum of the Laplacian on a covering graph with pendant edges I: The one-dimensional lattice and beyond, *Linear Algebra Appl.* **439** (2013), 3464 – 3489.
- [5] A. Suzuki, Spectrum of the Laplacian on a covering graph with pendant edges II: Lattices in multi-dimensions, in preparation.