

# ラプラシアン行列を用いた ネットワークダイナミクスの分析と ノード間の非対称相互作用モデル

会田 雅樹 高野 知佐

首都大学東京 広島市立大学

April 16, 2015

## 背景 & 本研究の目的

- 情報ネットワークの発展によって社会ネットワークにおける情報交換のあり方が活性化。  
⇒ そこから生みだされる多様なダイナミクスは興味深い研究対象。
- ネットワークの性質を表す指標には様々なものがあり、次数分布、クラスタ係数、ノードに関する中心性などの分析が行われている。
- ネットワークのグラフ構造を反映したラプラシアン行列を考え、その固有値や固有ベクトルを扱うスペクトルグラフ理論による分析も知られている。

### 研究目的

- ・ ネットワーク上のノード間相互作用：一般に非対称
- ・ ラプラシアン行列：対称行列による無向グラフのモデル  
⇒ 対称なラプラシアン行列を用いた非対称相互作用のモデルの検討

## 行列によるグラフ構造の表現

- $n$  個のノード  $\{0, 1, \dots, n-1\}$  からなる無向グラフ  $G = G(V, E)$  を考える. (但し,  $V$  はノードの集合,  $E$  はリンクの集合)
- 隣接ノード  $i-j$  間の重みを  $w_{ij} > 0$  とする.
- $G$  のリンクの有無とその重みを表す  $n \times n$  正方行列  $A = [A_{ij}]$  を

$$A_{ij} := \begin{cases} w_{ij}, & (\text{ノード } i-j \text{ 間にリンクがあるとき}) \\ 0, & (\text{ノード } i-j \text{ 間にリンクが無いとき}) \end{cases}$$

と定義し, (重み付き) 隣接行列という.

- $G$  は単純  $w_{ii} = 0$  で無向グラフ  $w_{ij} = w_{ji}$  だから,  $A$  対角成分が 0 の対称行列.
- $A$  は  $G$  の構造を代数的に調べることに利用可能.  
例えば全てのリンクの重みが  $w_{ij} = 1$  のとき,  $A^k$  の  $(i, j)$  成分はノード  $i$  からノード  $j$  に向かう長さ  $k$  の経路の数.

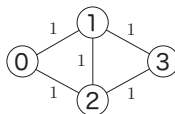
## ラプラシアン行列の定義

- ノードを  $i$  ( $i = 0, 1, \dots, n - 1$ ) の重み付き次数  $D_i$  を定義する.

$$D_i := \sum_{j \in \partial i} w_{ij}$$

- $D_i$  を対角成分に持つ次数行列を  $D$  とする. 隣接行列を  $A$  とする.
- ラプラシアン行列  $L$  を以下のように定義する.

$$L := D - A$$


$$D = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad L = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 3 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

- 正規化ラプラシアン行列  $N$  を以下のように定義する.

$$N := D^{-1/2} L D^{-1/2}$$

- ラプラシアン行列  $L$ , 正規化ラプラシアン行列  $N$  は**共に対称行列**.

## ラプラシアン行列の性質 (1)

ラプラシアン行列が実対称行列であることから成り立つ性質.

- $L$  の固有値は (重複している場合も含めて)  $n$  個あり, 全て実数.
- $L$  の固有ベクトルは互いに直交するように選ぶことが出来る.
- 互いに直交する長さ 1 の固有ベクトルで, 固有空間の基底となる.
- 固有空間の基底を用いて直交行列  $P$  ( ${}^tP = P^{-1}$ ) を作り,

$${}^tP L P$$

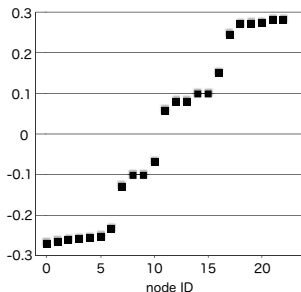
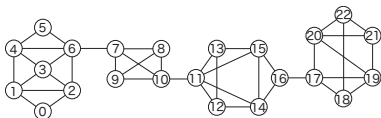
によって  $L$  を対角化することが出来る.

- 対角化した時の対角成分は  $L$  の固有値である.
- $N$  についても (実対称行列であることから) 同様の性質が成り立つ.

## ラプラシアン行列の性質 (2)

実対称行列の性質だけではいけないラプラシアン行列の性質.

- $L$  の  $n$  個の固有値は全て 0 以上.
- 固有値の最小値は 0 で, その重複数はグラフの連結成分数に一致.
- 0 でない最小固有値はグラフの連結の強さを表し, 代数的連結度と呼ばれる.
- 0 でない最小固有値に属する固有ベクトルはフィードラーベクトルと呼ばれ, グラフのおおまかな特徴を理解するのに役立つ.



## 対称行列と二次形式

- 二次形式とは、全ての項が変数の二次で書ける多項式。例えば二変数の例で

$$2x^2 + 6xy - 5y^2$$

- これは行列を用いて書ける。

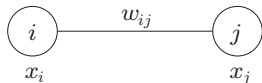
$$\begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 6 \\ 0 & -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

- cross term を  $6xy = 3xy + 3yx$  と分ければ、対称行列で書ける。

$$\begin{pmatrix} x & y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 3 & -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

## ラプラシアン行列の二次形式

- $G$  の各ノード  $i$  に重み  $x_i$  を与え,  $\mathbf{x} := {}^t(x_0, \dots, x_{n-1})$  とする.



- 隣接ノード間のノードの重みの差  $|x_i - x_j|$  を考え,  $G$  上の全リンクについてリンクの重み付き自乗和を取る.

$$F(\mathbf{x}) := \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} (x_i - x_j)^2$$

- $F(\mathbf{x})$  はラプラシアン行列の二次形式で書ける.

$$\begin{aligned} F(\mathbf{x}) &= \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} (x_i^2 - 2x_i x_j + x_j^2) \\ &= \sum_{i \in V} D_i x_i^2 - \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} x_i x_j - \sum_{(i,j) \in E} w_{ji} x_j x_i \\ &= {}^t \mathbf{x} L \mathbf{x} \end{aligned}$$



## ラプラシアン行列の固有値問題とその意味 (1)

- ラプラシアン行列の二次形式  ${}^t x L x$  は  $x$  の大きさ次第でいくらでも値が変わるので,  $|x| = 1$  の制約条件の下での値を考察してみる.
- $|x| = 1$  の制約条件の下での  $F(x) = {}^t x L x$  の停留値は, ラグランジュ未定乗数法を適用するため,

$$\Psi(x, \lambda) = \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} (x_i - x_j)^2 - \lambda \left( \sum_{i \in V} x_i^2 - 1 \right)$$

を考える. ここで  $\lambda$  はラグランジュ未定乗数.

- ラグランジュ未定乗数法より  $\partial \Psi / \partial x_i = 0, \partial \Psi / \partial \lambda = 0$  から,

$$\sum_{j \in \partial i} w_{ij} (x_i - x_j) = \lambda x_i, \quad \sum_{i \in V} x_i^2 = 1$$

- 最初の式はラプラシアン行列を用いて固有値問題で書ける.

$$L x = \lambda x, \quad |x| = 1$$

## ラプラシアン行列の固有値問題とその意味 (2)

- 結局,  $|x| = 1$  の制約条件の下で  $F(x)$  の停留値は  $\lambda$  で与えられ, これは  $L$  の固有値である.
- その停留値を与えるノードの重みの配置は, 固有値  $\lambda$  に属する固有ベクトルである.
- 故に,  $|x| = 1$  の制約条件の下で  $F(x)$  の最大値と最小値は, ラプラシアン行列の最大固有値と最小固有値 ( $= 0$ ) である.
- 同様に,  $|x| = 1$  の制約条件の下で

$$\bar{F}(x) := \sum_{(i,j) \in E} w_{ij} \left( \frac{x_i}{\sqrt{D_i}} - \frac{x_j}{\sqrt{D_j}} \right)^2 \geq 0$$

の停留値問題を考えると, 正規化ラプラシアン行列の固有値問題

$$N x = \bar{\lambda} x$$

に帰着する.

## ネットワーク上の拡散方程式

- ネットワーク上の拡散現象は、情報の伝播、負荷分散など、ネットワークダイナミクスに頻出する基本的な現象。
- 時刻  $t$  におけるノード  $i$  の重みを  $x_i(t)$  とする。

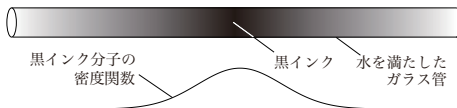


- 拡散現象は、リンク上をノードの重みが移動する現象の一種で、以下の特徴を持つ。
  - 移動の方向は、重みの大きいノードから小さいノードへ。
  - 移動の速さはノード間の重みの差  $|x_i(t) - x_j(t)|$  に比例。但し比例係数を  $\kappa > 0$  とする (拡散係数)
- ノードの重みを表す列ベクトルを定義  $\mathbf{x}(t) := {}^t(x_0(t), \dots, x_{n-1}(t))$ 。
- 拡散方程式はラプラシアン行列を用いて書ける。

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = -\kappa L \mathbf{x}(t)$$

## 一次元空間の拡散方程式との比較

- 時刻  $t$  における一次元空間上の位置  $x$  での「ある量」の密度関数を  $p(x, t)$  とする.



- 一次元の拡散方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t) = \kappa \frac{\partial^2}{\partial x^2} p(x, t)$$

- ネットワーク上の拡散方程式（再掲）との比較.

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = -\kappa L \mathbf{x}(t)$$

- ラプラス作用素  $\Delta = \partial^2 / \partial x^2$  とラプラス方程式は符号の違いを除いて同じ操作を意味している.

## 一次元拡散方程式の解法（抜粋）(1)

- $p(x, t)$  のフーリエ変換  $\hat{p}(\omega, t)$  を用いて  $p(x, t)$  を逆フーリエ変換の形式で表示

$$p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{p}(\omega, t) e^{i\omega x} d\omega$$

- 拡散方程式に代入.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{\partial \hat{p}(\omega, t)}{\partial t} + \kappa \omega^2 \hat{p}(\omega, t) \right] e^{i\omega x} d\omega = 0,$$

- 任意の  $x$  に対して上式が成り立つためには,

$$\frac{\partial \hat{p}(\omega, t)}{\partial t} = -\kappa \omega^2 \hat{p}(\omega, t)$$

- 拡散方程式が（与えられた  $\omega$  に対する）無限個の常微分方程式に分解できる.

## 一次元拡散方程式の解法（抜粋）（2）

- $\omega$  毎の常微分方程式（フーリエモード毎の時間発展方程式）（再掲）

$$\frac{\partial \hat{p}(\omega, t)}{\partial t} = -\kappa \omega^2 \hat{p}(\omega, t)$$

- これを  $\hat{p}(\omega, t)$  について解くと

$$\hat{p}(\omega, t) = c(\omega) e^{-\kappa \omega^2 t}$$

ここで  $c(\omega)$  は  $\omega$  によって定まる定数.

# ネットワーク上の拡散方程式の解法 (1)

- ネットワーク上の拡散方程式.

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = -\kappa L \mathbf{x}(t)$$

- ラプラシアン行列  $L$  の固有値を小さい順に並べ

$$0 = \lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \cdots \leq \lambda_{n-1}$$

とし, 固有値  $\lambda_\mu$  に属する固有空間の基底を  $\mathbf{v}_\mu$  とする.

- $\mathbf{x}(t)$  を  $L$  の固有空間の基底で展開する.

$$\mathbf{x}(t) = \sum_{\mu=0}^{n-1} a_\mu(t) \mathbf{v}_\mu$$

- これを拡散方程式に代入

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = -\kappa L \sum_{\mu=0}^{n-1} a_\mu(t) \mathbf{v}_\mu$$

## ネットワーク上の拡散方程式の解法 (2)

- 前頁の続き

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} &= -\kappa L \sum_{\mu=0}^{n-1} a_{\mu}(t) \mathbf{v}_{\mu} \\ &= -\kappa \sum_{\mu=0}^{n-1} a_{\mu}(t) \lambda_{\mu} \mathbf{v}_{\mu}\end{aligned}$$

- 従って,  $a_{\mu}(t)$  に関する  $n$  個の常微分方程式に分解できる.

$$\frac{da_{\mu}(t)}{dt} = -\kappa \lambda_{\mu} a_{\mu}(t)$$

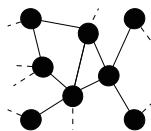
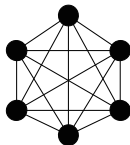
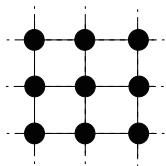
- これを解くと

$$a_{\mu}(t) = a_{\mu}(0) e^{-\kappa \lambda_{\mu} t}$$



## ネットワーク上のフーリエ変換 (1)

- 通常空間 (例えば二次元平面) のフーリエ変換をそのまま (座標の離散化で) ネットワークに応用する場合, 適用できるトポロジーが限定される.



(a) lattice graph (b) complete graph (c) general graph

- 格子状のネットワークは可能.
- その他一般には, 普通の座標系との対応 (近い点や繋がっているノードに近い数字を与える) をシステマティックに決めることは難しい.
- 一般のネットワークにフーリエ変換を導入して, ネットワーク上のダイナミクスを特定の時間的・空間的スケールに基づいて考察することは出来るか?

## ネットワーク上のフーリエ変換 (2)

- 一次元の拡散方程式とネットワーク上の拡散方程式から、以下の対応関係が見いだせる。
  - 逆フーリエ変換

$$\mathbf{x}(t) = \sum_{\mu=0}^{n-1} a_{\mu}(t) \mathbf{v}_{\mu}$$
$$p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{p}(\omega, t) e^{i\omega x} d\omega$$

- フーリエモード毎の時間発展方程式

$$\frac{da_{\mu}(t)}{dt} = -\kappa \lambda_{\mu} a_{\mu}(t)$$
$$\frac{\partial \hat{p}(\omega, t)}{\partial t} = -\kappa \omega^2 \hat{p}(\omega, t)$$

## ネットワーク上のフーリエ変換 (3)

- その他, 関連する対応関係:
  - フーリエ変換

$$a_\mu(t) = {}^t\mathbf{v}_\mu \mathbf{x}(t) = \mathbf{v}_\mu \cdot \mathbf{x}(t) = \sum_{\nu=0}^{n-1} a_\nu(t) \mathbf{v}_\mu \cdot \mathbf{v}_\nu$$

$$\hat{p}(\omega, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} p(x, t) e^{-i\omega x} dx$$

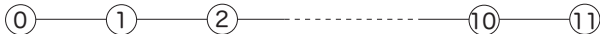
- 角振動数

$$\frac{\sqrt{\lambda_\mu}}{\omega}$$

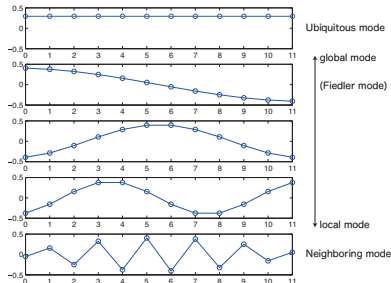
- 一般のネットワーク上にフーリエ変換が定義できる.
- 拡散現象のダイナミクスを特徴付ける時間スケールが決まり, フーリエモード  $a_\mu(t)$  の減衰の時定数は  $1/(\kappa\lambda_\mu)$  となる.

## ネットワーク上のフーリエ変換 (4)

- ネットワーク上のフーリエ変換で空間スケールは決まるか？



- 視覚的に理解しやすい次元ネットワークモデル (12 ノード) で固有ベクトルを例示.



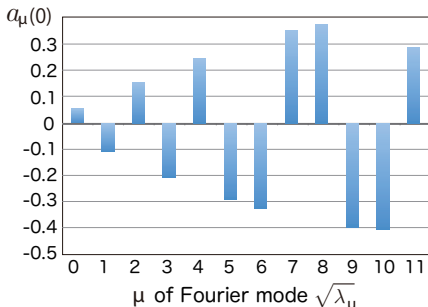
- $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_{11}$  に属する固有ベクトルの成分.
- 空間的な周期 (空間スケール) は概ね  $1/\sqrt{\lambda_\mu}$  に比例. 境界の影響を受けて若干乱れる.

# ネットワーク上の拡散現象の評価例 (1)

- 12 ノードからなる一次元ネットワークに対する  $L$  の固有値

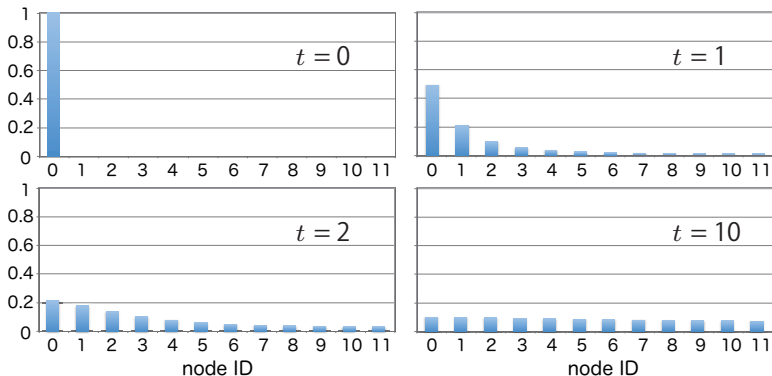
$\lambda_0$	$\lambda_1$	$\lambda_2$	$\lambda_3$	$\dots$	$\lambda_{11}$
0.00	$6.81 \times 10^{-2}$	$2.68 \times 10^{-1}$	$5.86 \times 10^{-1}$	$\dots$	3.93

- 時刻  $t = 0$  でノード 0 のみ  $x_0(0) = 1$  で、その他は  $x_i(0) = 0$  の場合の  $a_\mu(t)$  の初期値  $a_\mu(0)$ .



## ネットワーク上の拡散現象の評価例 (2)

- 時間発展の評価例 ( $\kappa = 1$ )



- 平滑化：時定数  $= \infty$  のユビキタスモードのみが生き残る。

## 正規化ラプラシアン行列による時間発展方程式 (1)

- 拡散方程式で、隣接ノード  $i$  から  $j$  への単位時間あたりの重みの移動レートは

$$\mathcal{J}^{[i \rightarrow j]}(t) = \begin{cases} \kappa (x_i(t) - x_j(t)), & (x_i(t) - x_j(t) > 0), \\ 0, & (x_i(t) - x_j(t) \leq 0). \end{cases}$$

- これが  $i$  と  $j$  の入れ替えに対して形式上で反対称となっている。

$$\mathcal{J}^{[i \rightarrow j]}(t) = -\mathcal{J}^{[j \rightarrow i]}(t)$$

- これは、ノード  $i$  から出て  $j$  に向かう量と、ノード  $j$  がノード  $i$  から受け取る量が等しく、**移動量のノード間の収支が釣り合っている**ことを示す。
- 次に、**正規化ラプラシアン行列  $N$  を用いた類似の時間発展方程式を考察する。**

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = -\kappa N \mathbf{x}(t)$$

## 正規化ラプラシアン行列による時間発展方程式 (2)

- 拡散方程式と同様に、隣接ノード  $i$  から  $j$  への重みの移動レートを考えると

$$\mathcal{J}^{[i \rightarrow j]}(t) = \begin{cases} \kappa \left( \frac{x_i(t)}{D_i} - \frac{x_j(t)}{\sqrt{D_i D_j}} \right), & \left( \frac{x_i(t)}{\sqrt{D_i}} > \frac{x_j(t)}{\sqrt{D_j}} \right), \\ 0, & \left( \frac{x_i(t)}{\sqrt{D_i}} \leq \frac{x_j(t)}{\sqrt{D_j}} \right), \end{cases}$$

- これは  $i$  と  $j$  の入れ替えに対して反対称ではないので**ノード間の移動とは見なせない**.
- 因みに、以下のように考えればノード間の移動とみなせる.
  - 次数依存性の一部をノードの重みベクトルの方に持たせて  $y(t) := D^{1/2} x(t)$  とする.
  - $N$  と同じ固有値を持つ行列  $LD^{-1}$  を考えて、時間発展方程式

$$\frac{dy(t)}{dt} = -\kappa L D^{-1} y(t)$$

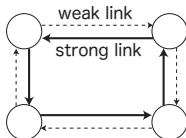


## 非対称相互作用モデル

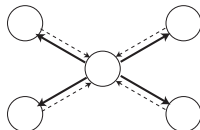
- 正規化ラプラシアン行列による時間発展方程式がノード間の重みの移動（輸送現象）とは見させないことを積極的に利用する。
- ベクトル  $x(t)$  の時間変化は移動によって起きるのではなく、**相手ノードとの相互作用によりノード毎に個別に重みの量が増減する**とする。その場合の重みの変化のレートは

$$\mathcal{J}_{ij}(t) = \kappa w_{ij} \left( \frac{x_i(t)}{D_i} - \frac{x_j(t)}{\sqrt{D_i D_j}} \right).$$

- **ノード固有の特性に依存する非対称性を表現可能** (右のタイプ).



(a) cyclic relation



(b) hub type relation

## 非対称相互作用モデルの一般化

- 正規化ラプラシアン行列はノードの次数によってラプラシアン行列をスケールしたものの。
- 次数以外の**多様なノード特性**  $m_i > 0$  を利用してラプラシアン行列をスケールすれば、**多様な非対称相互作用を記述するモデル**を得ることが出来る。
- ノード特性  $m_i > 0$  を対角成分に持つ対角行列を  $M$  とする。
- $M$  により**スケールしたラプラシアン行列** (対称行列) を以下のように定義する。

$$S := M^{-1/2} L M^{-1/2}$$

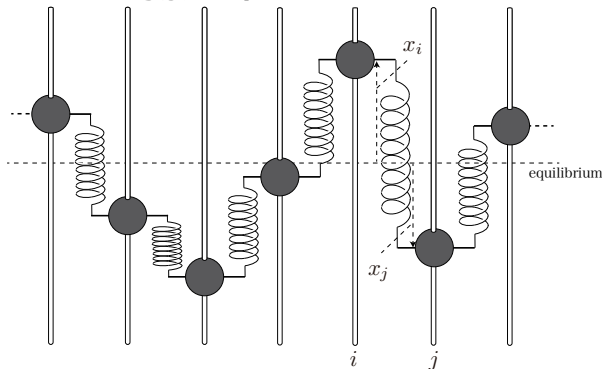
- 非対称相互作用を記述する時間発展方程式を以下のようにすればよい。

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = -\kappa S \mathbf{x}(t)$$

- (対称行列である) **スケールしたラプラシアン行列  $S$  の固有値問題に帰着**。

## ネットワーク上の振動現象 (1)

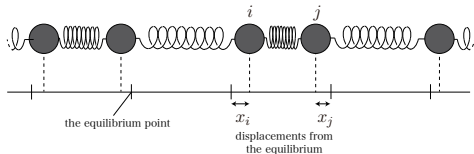
- ネットワークのノードが、隣接ノード同士で影響を与えながら振動するダイナミクスを考察する。



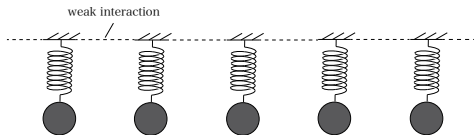
- ノード  $i$  の重み  $x_i$  は平衡状態からの変位だと考え、隣接ノードとの変位の差がバネのように復元力として働くシステムを考える。
- 図は一次元 NW として描いているが、一般の NW でも同様。

## ネットワーク上の振動現象 (2)

- 一次元 NW に限定すれば、縦波の遷移にして以下の様な図示も可能 (一般の NW では無理).



- ネットワーク上の結合振動子モデルとして有名な「蔵本モデル」との違い.



- 蔵本モデルでは、ノード上に置かれた「似た性質を持つ振動子」が、リンクを介して「弱い影響を与え合う」モデル.

## ネットワーク上の振動現象 (3)

- 我々の振動モデル（前々頁のシステム）のハミルトニアン  $H$  は、

$$\begin{aligned} H &:= \frac{1}{2m} \sum_{i \in V} (p_i)^2 + \frac{\kappa}{2} \sum_{(i,j) \in E} (x_i - x_j)^2 \\ &= \frac{1}{2m} \sum_{i \in V} (p_i)^2 + \frac{1}{2} (\mathbf{x} L \mathbf{x}) \end{aligned}$$

- ここで  $p_i$  はノード  $i$  の一般化運動量， $m$  はノードの質量， $\kappa$  はバネ定数で，バネ定数はリンクの重み  $w_{ij}$  として Laplacian 行列に取り込んだ。（リンク毎にバネ係数を変えることも可能）
- ハミルトニアンから正準運動方程式を導出

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} = -\sum_{j \in V} L_{ij} x_j$$

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{1}{m} p_i$$

## ネットワーク上の振動現象 (4)

- 二つの式をまとめて  $p_i$  を消去すると

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = \frac{1}{m} \frac{dp_i}{dt} = -\frac{1}{m} \sum_{j \in V} L_{ij} x_j$$

- 運動方程式をベクトルの形式で書けば

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = -L \mathbf{x}$$

- 結局、振動現象も Laplacian 行列の固有値問題に帰着される。

## ネットワーク上の振動現象 (5)

- 逆フーリエ変換

$$\mathbf{x}(t) = \sum_{\mu=0}^{n-1} a_{\mu}(t) \mathbf{v}_{\mu}$$

によって、 $\mathbf{x}(t)$  を  $L$  の固有ベクトルで展開する。

- このとき、フーリエモード  $a_{\mu}(t)$  に対する運動方程式は

$$m \frac{d^2 a_{\mu}(t)}{dt^2} = -\lambda_{\mu} a_{\mu}(t)$$

のように  $n$  個の単振動の方程式となる。

- $a_i(t)$  について解くと

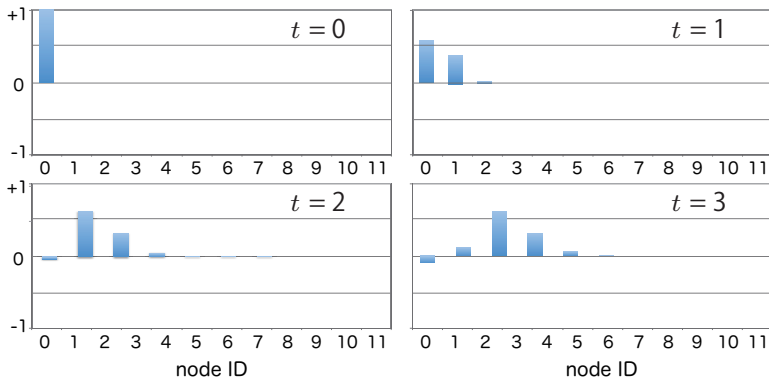
$$a_{\mu}(t) = c_{\mu} e^{i(\omega_{\mu} t + \theta_{\mu})}$$

但し  $\omega_{\mu} = \sqrt{\lambda_{\mu}/m}$  で、 $\theta_{\mu}$  は任意の位相。  $c_{\mu}$  は  $\mu$  によって定まる定数。

- $m = 1$  とすれば  $\omega_{\mu}^2 = \lambda_{\mu}$  で、拡散方程式で現れた解釈と一致する。

# ネットワーク上の振動現象の評価例

## ● 時間発展の評価例 ( $m = 1$ )



## ● 左端のノードのみ変位を与えた初期値からの波動の伝播.



## ノードの質量が異なる場合のモデル (1)

- バネ係数をリンク毎に定義し, リンクの重み  $w_{ij} > 0$  とする.
- ノードの質量をノード毎に定義し  $m_i$  とする.
- 結合振動子のシステムのハミルトニアン  $H$  は,

$$\begin{aligned} H &:= \sum_{i \in V} \frac{(p_i)^2}{2 m_i} + \sum_{(i,j) \in E} \frac{w_{ij}}{2} (x_i - x_j)^2 \\ &= \sum_{i \in V} \frac{(p_i)^2}{2 m_i} + \frac{1}{2} ({}^t \mathbf{x} L \mathbf{x}) \end{aligned}$$

- ハミルトニアンから正準運動方程式を導出

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i} = -\sum_{j \in V} L_{ij} x_j$$

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m_i}$$

## ノードの質量が異なる場合のモデル (2)

- 二つの式をまとめて  $p_i$  を消去すると

$$m_i \frac{d^2 x_i}{dt^2} = - \sum_{j \in V} L_{ij} x_j$$

- 運動方程式をベクトルの形式で書けば  $M := \text{diag}(m_0, \dots, m_{n-1})$  として

$$M \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = -L \mathbf{x}$$

- $L$  の固有値問題にはならない。

## ノードの質量が異なる場合のモデル (3)

- スケール変換で新たなベクトル  $\mathbf{y}$  を

$$\mathbf{y} = M^{1/2} \mathbf{x}$$

と定義する。成分で書けば

$$y_i = \sqrt{m_i} x_i$$

- このとき,

$$\sum_{i \in V} \frac{(p_i)^2}{2 m_i} = \sum_{i \in V} \frac{(\sqrt{m_i} \dot{x}_i)^2}{2} = \frac{1}{2} (\dot{\mathbf{y}})^2$$
$$\frac{1}{2} ({}^t \mathbf{x} L \mathbf{x}) = \frac{1}{2} ({}^t \mathbf{y} M^{-1/2} L M^{-1/2} \mathbf{y}) = \frac{1}{2} ({}^t \mathbf{y} S \mathbf{y})$$

## ノードの質量が異なる場合のモデル (4)

- $y_i = \sqrt{m_i} x_i$  を使って運動方程式を書き直せば,

$$\frac{d^2 \mathbf{y}}{dt^2} = -S \mathbf{y}$$

と書ける.

- 成分で書けば

$$\frac{d^2 y_i}{dt^2} = - \sum_{j \in V} S_{ij} y_j = - \sum_{j \in V} \left( \frac{D_i \delta_{ij}}{m_i} - \frac{w_{ij}}{\sqrt{m_i m_j}} \right) y_j$$

- 従って,  $y$  に変数変換すれば, スケーリングされたラプラシアン行列の固有値問題に帰着.
- 質量の違いによって慣性の強さが異なり, 周囲への影響の大きさ, 周囲からの影響の受けやすさ等を表現.
- リンクの強さ (リンク毎のバネ係数) によって関係性の強弱も表現.

## おわりに

- スケーリングされたラプラシアン行列を使って、ノード間の非対称相互作用を記述することが出来るモデルを提案した。
- スケーリングされたラプラシアン行列は**対称行列**ではあるが、ノード自体の特性に起因する**非対称な効果**が記述が可能である。
- そのような非対称性の典型例はハブのような関係で、**人気ブログとその読者**のような情報の流れの偏った関係であり、情報ネットワーク上の**多くのダイナミクスがこれに当てはまる**。
- 対称行列でモデル化することで、数学的には対角化の操作が可能で、代数的な手続きによりダイナミクスを完全に知ることが出来る。
- つまり、**ノード間の非対称性の記述**という実用性と、対称行列というダイナミクスの**分析の容易さを両立**したモデルとなっている。

## 参考文献

- ① D. Spielman: “Spectral graph theory,” Chapter 18 of *Combinatorial Scientific Computing* (Eds. U. Naumann & O. Schenk), pp. 495–524, Chapman and Hall/CRC, 2012.
- ② M. Aida: “Using a renormalization group to create ideal hierarchical network architecture with time scale dependency,” *IEICE Trans. Commun.*, vol. E95-B, no. 5, pp. 1488–1500, 2012.
- ③ 会田 雅樹: 「情報ネットワークの分散制御と階層構造」 情報ネットワーク科学シリーズ第3巻, コロナ社, 2015.
- ④ M. Fiedler: “Algebraic connectivity of graphs,” *Czechoslovak Mathematical Journal*, vol. 23, no. 98, pp. 298–305, 1973.
- ⑤ M.E.J. Newman: “The graph Laplacian,” Section 6.13 of *Networks: An Introduction*, pp. 152–157, Oxford University Press, 2010.
- ⑥ 高野 知佐, 会田 雅樹: “対称な正規化ラプラシアン行列を用いたノード間非対称相互作用モデル,” 2015年電子情報通信学会総合大会, B-7-83, 2015.