

スケールフリーネットワークの連続極限における Allen-Cahn 方程式の数理解析

明治大学大学院 先端数理科学研究科 現象数理学専攻
藤原 瑠 (Ryu FUJIWARA)

概要

Allen-Cahn 方程式は相転移の様子を表す数理モデルであり、近年ではグラフ構造を持つデータに対する分類問題にも応用が見られる。グラフの連続極限を考慮する場合、拡散項は L^p -graphon により表現される。本稿では、スケールフリーネットワークに対するグラフラプラシアン の連続極限である自己共役作用素が解析的半群を生成することを示す。このことは、連続極限上の Allen-Cahn 方程式に局所解が存在することを示唆している。解の様子についても数値計算を用いて提示する。

1 はじめに

ネットワーク上で一種類の情報や化学種などが反応および拡散する現象は一般に、

$$\frac{d}{dt}X(t) = DLX(t) + F(X(t)) \quad (1)$$

と表現される [10]。これをネットワーク上の反応拡散方程式と呼ぶ。ここで、ネットワークは N 個のノードを持つ無向グラフ G として表現される。 $A = (A_{ij})_{i,j=1,\dots,N}$ は G の隣接行列であり、 k_i を i 番目のノードの次数、 N 次正方行列 $L = (L_{ij})_{i,j=1,\dots,N}$ を $L_{ij} = A_{ij} - k_i\delta_{ij}$ とする。ここで δ_{ij} は Kronecker のデルタである。 L をグラフ G に対するグラフラプラシアンと呼ぶ。 $X(t) = (X_1(t), \dots, X_N(t))^T$ は各ノード上の量であり、 $D > 0$ は拡散係数である。また、 $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ を反応に関する関数として、 $F: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ は $F(X(t)) = \{f(X_1(t)), \dots, f(X_N(t))\}$ のようにノード毎の反応を表す。中でも、ネットワーク上の Allen-Cahn 方程式は、 $0 < a < 1$ に対して $f(u) = u(1-u)(u-a)$ と定義し、イメージセグメンテーションなどのネットワーク構造を持つデータの分類問題に対して応用が見られる [8]。

近年では複雑なネットワーク上の反応拡散方程式のダイナミクスも調べられている。特に、Barabási と Albert [1] はインターネットのネットワークを観察することで、その次数の分布が冪分布に従っていることを発見し、そのような性質を持つネットワークをスケールフリーネットワークと名付けた。様々な場所で観察されるスケールフリーネットワークであるが、その上で起きる反応と拡散を伴う現象は中尾などにより研究されてきた [9]。スケールフリーネットワークは、多くの場合は大規模なネットワークであるので、ノードの数に関して極限を考えることは妥当である。グラフラプラシアン の連続極限を考えるためには、まずグラフの連続極限を考える必要がある。Lovász [6] は密なランダムグラフの連続極限を、 $(0, 1)^2$ 上で本質的に有界な可測関数によって表現する graphon という

概念を導入した. しかし, graphon の枠組みは密なグラフの極限のみしか考えることができないため, スケールフリーネットワークのような疎なグラフに対しては その極限を表現するには適していない.

そこで, Borgs らは graphon の性質の一つである, 本質的有界であるという条件を弱め, p 乗可積分関数を用いて疎なグラフの極限を捉えることで, L^p -graphon の理論を構築した [2]. 特に, スケールフリーネットワークの連続極限に対する L^p -graphon は, $0 < \alpha < 1$ として,

$$W(x, y) = (1 - \alpha)^2 (xy)^{-\alpha}$$

と表現できる. α を $1/2$ 未満に限定すれば, スケールフリーネットワークのグラフラプラシアン¹の連続極限は,

$$L : L^2(0, 1, x^{-2\alpha} dx) \rightarrow L^2(0, 1),$$

$$[Lu](x) = (1 - \alpha)^2 x^{-\alpha} \int_0^1 y^{-\alpha} u(y) dy - (1 - \alpha) x^{-\alpha} u(x)$$

として, $L^2(0, 1)$ 上の自己共役作用素として定義される. この作用素 L を graphon Laplacian と呼ぶことにする. ここで, $L^2((0, 1), x^{-2\alpha} dx)$ は重み付き L^2 空間であり,

$$\|u\|_{L^2((0,1), x^{-2\alpha} dx)} := \left(\int_0^1 u(x)^2 x^{-2\alpha} dx \right)^{\frac{1}{2}},$$

$$L^2((0, 1), x^{-2\alpha} dx) := \{u : (0, 1) \rightarrow \mathbb{R} \mid \|u\|_{L^2((0,1), x^{-2\alpha} dx)} < \infty\}$$

である.

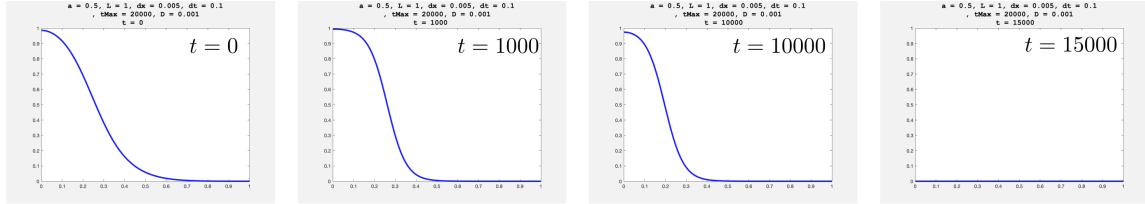


図1 ACの数値シミュレーション結果. $D = 0.001$, $a = 0.5$ である.

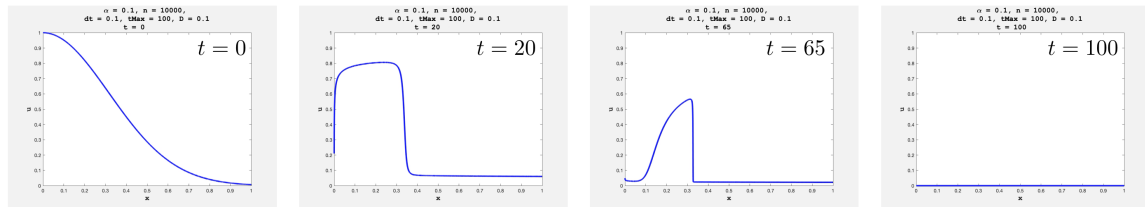


図2 SF-ACの数値シミュレーション結果. $D = 0.1$, $\alpha = 0.1$, $a = 0.5$ である.

Kaliuzhnyi-Verbovedsky らは L を用いて, 疎なネットワーク上の反応拡散方程式の連続極限として, (1) から

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D Lu + f(u) \quad (2)$$

を導出した [4]. ここで, $u(x, t)$ は上の実数値関数であり, $X(t)$ に対する連続極限である. (2) は通常の偏微分方程式と異なり, 積分を用いて定義されるため, 境界条件が存在しない.

(2) について, $f(u) = u(1-u)(u-a)$ とした方程式を SF-AC と呼ぶことにする. 一方で, Laplacian を用いた Neumann 境界条件下の Allen-Cahn 方程式,

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u(1-u)(u-a), & 0 < x < 1, t > 0, \\ \frac{\partial u}{\partial x} = 0, & x = 0, 1, t > 0 \end{cases}$$

を AC と呼ぶことにする. AC では図 1 の数値シミュレーション結果からもわかるように, 非線形項の影響で u は 0 か 1 に漸近し, 拡散項の影響でその間を滑らかに繋ぐ境界層が表れる. AC の安定な定常解は一様解 $u \equiv 0, 1$ のみであるため, 境界層は $x = 0$ の方向へと流れていき一様解へと収束していく. 図 2 は SF-AC の数値シミュレーション結果である. しかし, $x = 0$ 付近では, $u = a$ を跨いで $u = 0$ の側に誘引されている様子が見られる. その結果として, すべての x において, $u = 0$ に収束することが観察される.

このような性質は L が持つ固有モードにより特徴づけられると考えられる. したがって, 本発表では, L のスペクトル解析を行うことを目的とする. L に関するスペクトルやレゾルベントに関しては次の定理が成り立つ. なお, $\sigma_p(L)$ は $\sigma_c(L)$ はそれぞれ L の点スペクトルと連続スペクトルであり, $\rho(L)$ は L のレゾルベント集合である.

定理 1 (スペクトルとレゾルベント). $0 < \alpha < 1/2$ とする. このとき, $\sigma_p(L) = \{0\}$, $\sigma_c(L) = (-\infty, \alpha - 1]$ である. また, $\rho(L) = \mathbb{C} \setminus ((-\infty, \alpha - 1] \cup \{0\})$ であり, レゾルベント $(\lambda I - L)^{-1}$ は

$$[(\lambda I - L)^{-1}f](x) = \frac{f(x) + (1-\alpha)^2 x^{-\alpha} C}{\lambda + (1-\alpha)x^{-\alpha}}, \quad C = \frac{\int_0^1 \frac{y^{-\alpha} f(y)}{\lambda + (1-\alpha)y^{-\alpha}} dy}{1 - \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^2 y^{-2\alpha}}{\lambda + (1-\alpha)y^{-\alpha}} dy}$$

である. ここで, $f \in L^2(0, 1)$ である.

更に, ある角領域上ではレゾルベントは次の定理のように評価できる. ここで, 以下の定理において, $\arg(\lambda)$ は $\lambda \in \mathbb{C}$ の偏角であり, $[-\pi, \pi)$ の間の値を取るものとする.

定理 2 (角域作用素). $-L$ は角域作用素である. すなわち, ε を $(1-\alpha)$ 未満の任意の正数, $a_\varepsilon = \sqrt{2\varepsilon}$ とし,

$$S = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid 0 \leq |\arg(\lambda - a_\varepsilon)| \leq \frac{3\pi}{4}, \lambda \neq a_\varepsilon\}$$

とすると, ある $M \geq 1$ が存在して, 任意の $\lambda \in S$ に対して,

$$\|(\lambda I - L)^{-1}\| \leq \frac{M}{|\lambda - a_\varepsilon|}$$

が成り立つ.

定理 2 から, [3] に従えば, $-L$ は解析的半群の無限小生成作用素であることもわかる. そのため, スケールフリーネットワークの連続極限上の拡散方程式の初期値問題には解が存在することがわかる.

本要旨は次のような構成となっている．第 2 節では，定理 1 と定理 2 の証明を行う．第 3 節では， L と Laplacian Δ の比較を通して， L の連続スペクトルに対する形式的な「固有関数」が SF-AC の原点付近での挙動に影響を与えていることを言及する．

2 スペクトル解析

L のスペクトルに関する定理 1 の証明を行う．

証明．まず，スペクトルの特定を行う．作用素 A と K をそれぞれ L の第 1 項目と第 2 項目として，次のように定義する．

$$[Au](x) = (1 - \alpha)^2 x^{-\alpha} \int_0^1 y^{-\alpha} u(y) dy, \quad [Ku](x) = (1 - \alpha) x^{-\alpha} u(x).$$

L , A , K を $L^2(0, 1)$ 上で定義し，定義域を $D(K) = D(L) = L^2((0, 1), x^{-2\alpha} dx)$, $D(A) = L^2(0, 1)$ とする．このとき， A は Hilbert-Schmidt 作用素であり， K は非有界な掛け算作用素であるため， A は $(-K)$ -コンパクトである．よって，自己共役作用素のスペクトルに対する摂動論 [5] から， L の連続スペクトルは， $\sigma_e(L)$ を L の本質的スペクトルとすると，

$$\sigma_c(L) = \sigma_e(L) = \sigma_c(-K) = (-\infty, \alpha - 1]$$

のように求めることができる． $\{0\}$ が L の点スペクトルであることを示す．

$$\begin{aligned} [Lu](x) &= (1 - \alpha)^2 x^{-\alpha} \int_0^1 y^{-\alpha} u(y) dy - (1 - \alpha) x^{-\alpha} u(x) = 0, \\ u(x) &= (1 - \alpha) A, \quad \left(A = \int_0^1 y^{-\alpha} u(y) dy \right). \end{aligned}$$

となるので， $u(x)$ は定数関数となる． $Lu = 0$ は非自明解を持つので， $\{0\}$ は点スペクトルであり，固有関数は定数関数であることが示された．

次に， $f \in L^2(0, 1)$, $\lambda \in \mathbb{C} \setminus ((-\infty, \alpha - 1] \cup \{0\})$ として，

$$w(x) = \frac{f(x) + (1 - \alpha)^2 x^{-\alpha} C}{\lambda + (1 - \alpha) x^{-\alpha}}, \quad C = \frac{\int_0^1 \frac{y^{-\alpha} f(y)}{\lambda + (1 - \alpha) y^{-\alpha}} dy}{1 - \int_0^1 \frac{(1 - \alpha)^2 y^{-2\alpha}}{\lambda + (1 - \alpha) y^{-\alpha}} dy}$$

として， $w \in L^2(0, 1)$ であることを示す． $u, v \in \mathbb{R}$ をそれぞれ λ の実部と虚部とする．三角不等式および Cauchy-Schwarz の不等式より， $|C|$ は

$$|C| \leq \begin{cases} \frac{1}{|v|} \frac{1}{\sqrt{1 - 2\alpha}} \frac{1}{|h(\lambda)|} \|f\|_2, & (v \neq 0, u < -(1 - \alpha)) \\ \frac{1}{|\lambda + (1 - \alpha)|} \frac{1}{\sqrt{1 - 2\alpha}} \frac{1}{|h(\lambda)|} \|f\|_2, & (\text{otherwise}). \end{cases}$$

と評価できる．ここで， $h(\lambda)$ は C の分母として，

$$\begin{aligned} h(\lambda) &= 1 - (1 - \alpha)^2 \int_0^1 \frac{y^{-2\alpha}}{\lambda + (1 - \alpha) y^{-\alpha}} dy \\ &= \frac{1 - \alpha}{\alpha} \int_1^\infty \frac{\lambda z^{-\frac{1}{\alpha}}}{\lambda + (1 - \alpha) z} dz, \quad (\because y^{-\alpha} = z \text{ と変数変換する}) \end{aligned}$$

である。よって、 $\|w\|_2$ は三角不等式から、

$$\|w\|_2 \leq \begin{cases} \|f\|_2 \frac{1}{|v|} \left(1 + \frac{(1-\alpha)^2}{1-2\alpha} \frac{1}{|h(\lambda)|} \frac{1}{|v|} \right), & (v \neq 0, u < -(1-\alpha)) \\ \|f\|_2 \frac{1}{|\lambda + (1-\alpha)|} \left(1 + \frac{(1-\alpha)^2}{1-2\alpha} \frac{1}{|h(\lambda)|} \frac{1}{|\lambda + (1-\alpha)|} \right), & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

と評価される。ここで、 $\|w\|_2$ はいかなる $\lambda \in \mathbb{C} \setminus ((-\infty, \alpha - 1] \cup \{0\})$ に対しても有限であるので、 $w \in L^2(0, 1)$ である。最後に、 w が $[(\lambda I - L)w](x) = f(x)$ を満たすことを確認する。

$$C = \frac{\int_0^1 \frac{y^{-\alpha} f(y)}{\lambda + (1-\alpha)y^{-\alpha}} dy}{1 - \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^2 y^{-2\alpha}}{\lambda + (1-\alpha)y^{-\alpha}} dy} = \int_0^1 y^{-\alpha} \frac{f(y) + (1-\alpha)^2 y^{-\alpha} C}{\lambda + (1-\alpha)y^{-\alpha}} dy$$

であるから、

$$C = \int_0^1 y^{-\alpha} [(\lambda I - L)^{-1} f](y) dy = \int_0^1 y^{-\alpha} w(y) dy$$

となるため、 C は w を用いて表現することができる。よって、

$$[(\lambda I - L)w](x) = (1-\alpha)^2 x^{-\alpha} \int_0^1 y^{-\alpha} w(y) dy - (1-\alpha)x^{-\alpha} w(x) = f(x)$$

となる。 □

レゾルベントの更なる評価を行うことで、定理 2 を得る。

証明. $R > 1 - \alpha$ として、

$$\begin{aligned} S_{\frac{3\pi}{4}} &= \{\lambda \in \mathbb{C} \mid 0 \leq |\arg \lambda| \leq \frac{3\pi}{4}, \lambda \neq 0\} \\ D_R(0) &= \{\lambda \in \mathbb{C} \mid |\lambda| \leq R\} \\ B_\varepsilon(0) &= \{\lambda \in \mathbb{C} \mid |\lambda| < \varepsilon\} \end{aligned}$$

とし、 $\tilde{S} = S_{\frac{3\pi}{4}} \setminus B_\varepsilon(0)$ とする。 $\tilde{S} \subset \rho(L)$ であるので、 λ の実部と虚部をそれぞれ u と v とし、 $h(\lambda)$ を前定理で定義したものとすると、

$$\begin{aligned} |h(\lambda)| &\geq \frac{1-\alpha}{\alpha} |\lambda| \left| \int_1^\infty \frac{y^{-\frac{1}{\alpha}} (u + (1-\alpha)y)}{(u + (1-\alpha)y)^2 + v^2} dy \right|, \\ |h(\lambda)| &\geq \frac{1-\alpha}{\alpha} |\lambda| \left| \int_1^\infty \frac{y^{-\frac{1}{\alpha}} v}{(u + (1-\alpha)y)^2 + v^2} dy \right| \end{aligned}$$

である。ここで、

$$\begin{aligned} h_r(\lambda) &= \int_1^\infty \frac{y^{-\frac{1}{\alpha}} (u + (1-\alpha)y)}{(u + (1-\alpha)y)^2 + v^2} dy, \\ h_i(\lambda) &= \int_1^\infty \frac{y^{-\frac{1}{\alpha}} v}{(u + (1-\alpha)y)^2 + v^2} dy \end{aligned}$$

とする. 次に $\tilde{S}$ を次の 8 つの互いに素な集合 $S_1, \dots, S_8$ に分割して, 各集合上においてレゾルベントの評価を行う.

$$\begin{aligned} S_1 &= \{\lambda \in \tilde{S} \setminus D_R(0) \mid 0 \leq u, v \neq 0, |u + (1 - \alpha)| \leq |v|\}, \\ S_2 &= \{\lambda \in \tilde{S} \setminus D_R(0) \mid 0 \leq u, v \neq 0, |u + (1 - \alpha)| > |v|\}, \\ S_3 &= \{\lambda \in \tilde{S} \setminus D_R(0) \mid -(1 - \alpha) \leq u < 0, v \neq 0, |1 - \alpha| \leq |v|\}, \\ S_4 &= \{\lambda \in \tilde{S} \setminus D_R(0) \mid -(1 - \alpha) \leq u < 0, v \neq 0, |1 - \alpha| > |v|\}, \\ S_5 &= \{\lambda \in \tilde{S} \setminus D_R(0) \mid -2(1 - \alpha) \leq u < -(1 - \alpha)\}, \\ S_6 &= \{\lambda \in \tilde{S} \setminus D_R(0) \mid u < -2(1 - \alpha), v \neq 0\}, \\ S_7 &= \{\lambda \in \tilde{S} \setminus D_R(0) \mid 0 < u, v = 0\}, \\ S_8 &= \tilde{S} \cap D_R(0). \end{aligned}$$

各 $\lambda \in S_i$ ($i = 1, \dots, 8$) において, 実部と虚部の絶対値の大きさに着目して h_r もしくは h_i を評価していく. すると, $\lambda \in S_i$ ($i = 1, \dots, 8$) に対して,

$$\|(\lambda I - L)^{-1}\| \leq \frac{M_i}{|\lambda|}$$

を満たす正数 M_i が存在することが示される.

$$M' = \max\{M_1, M_2, M_3, M_4, M_5, M_6, M_7, M_8\}$$

とすれば任意の $\lambda \in \tilde{S}$ に対してレゾルベント評価

$$\|(\lambda I - L)^{-1}\| \leq \frac{M'}{|\lambda|}$$

を得る. また, 任意の $\lambda \in S$ は $|\lambda| \geq \varepsilon$ であり, $u < 0$ となる λ に対して,

$$\frac{|\lambda - a_\varepsilon|^2}{|\lambda|^2} \leq 3 + 2\sqrt{2} = (1 + \sqrt{2})^2$$

が成り立つので, $M = (1 + \sqrt{2})M'$ とすれば, 任意の $\lambda \in S$ に対して,

$$\|(\lambda I - L)^{-1}\| \leq \frac{M}{|\lambda - a_\varepsilon|}$$

となり, $-L$ が角域作用素であることが示された. □

$-L$ が角域作用素であるということは, 解析的半群の無限小生成作用素であることを意味するので, L を用いた発展方程式 $u_t = Lu$ の抽象 Cauchy 問題は well-posed であるということがわかる.

3 考察

スケールフリーネットワークの連続極限に対する graphon Laplacian L と通常の Laplacian Δ の比較を行う. まず, スペクトルに着目する. $n = 1$ として, $L^2(\mathbb{R})$ 上で定義した Δ の連続スペ

クトルは $(-\infty, 0]$ である。連続スペクトルに属する λ に対しては固有関数は存在しないものの、 $u(x) = \exp(i\sqrt{-\lambda}x)$ とすると、 u は固有方程式 $\Delta u = \lambda u$ を満たす。しかし、 u は $L^2(\mathbb{R})$ には属さないため、固有関数とはならない。このように連続スペクトルには固有関数が定義されないが、形式的な「固有関数」は存在することがわかる。

一方で、定理 1 より、 L の連続スペクトルは Δ と同じように半無限区間 $(-\infty, \alpha - 1]$ である。しかし、点スペクトルが存在していることがことなる。また、 $\lambda \in \sigma_c(L)$ に対して形式的な「固有関数」を考える。この場合、

$$u(x) = \frac{x^{-\alpha}}{\lambda + (1 - \alpha)x^{-\alpha}}$$

を λ に対する形式的な「固有関数」と見ることができる。図 3 は $u(x)$ を描いたものであり、 $x = \left(-\frac{\lambda}{1-\alpha}\right)^{-1/\alpha}$ における特異性から、特異点の周りで値が局在している様子を観察することができる。 Δ では振動する関数が形式的な「固有関数」であったが、 L は局在性のある関数となっている。

有限なスケールフリーネットワークに対しても、形式的な「固有関数」に見られる局在性を観察することができる。図 4 は Barabasi と Albert のアルゴリズム [1] により生成した 1000 個のノードを持つスケールフリーネットワークに対する固有ベクトルである。ノードの番号は次数に対して降順につけているため、固有ベクトルの値が近い添字の周りで局在していることは、次数が近いノードの周りで比較的大きな値を取ることを意味している。このような有限なスケールフリーネットワークに見られる局在性は L の形式的な「固有関数」に見られる局在性に由来していると考えられる。

L のスペクトルに対する形式的な「固有関数」に見られる局在性は、図 2 の SF-AC の数値シミュレーション結果の $x = 0$ 付近で $u = 0$ へと誘引される振る舞いを生んでいると考えられる。負の側に十分小さい $\lambda \in \sigma_c(L)$ に対する形式的な「固有関数」は減衰の影響を強く受けて、素早く減衰していく。そのため、形式的な「固有関数」の局在性の影響で、 $x = 0$ 付近でのみ強い減衰が起きる。減衰の影響が反応項による $u = 1$ への誘引を上回ったことで、 $u = a$ を跨いで $u = 0$ に収束したのである。

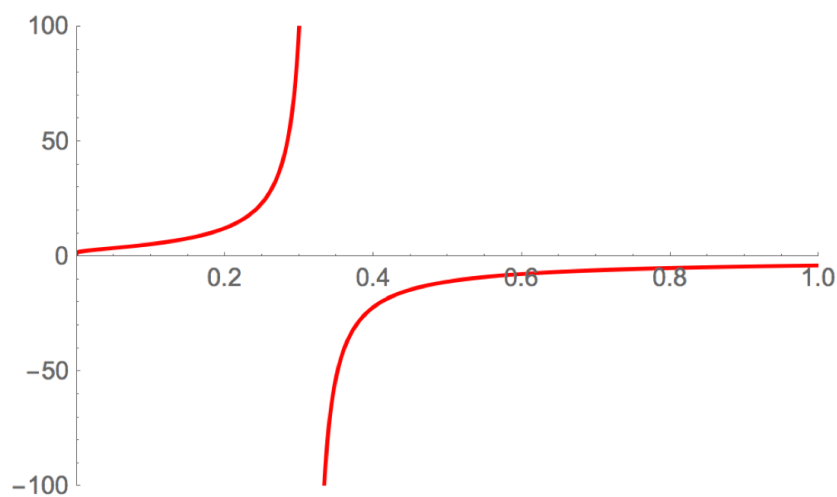


図 3 L の形式的な「固有関数」 $u(x)$ のグラフ。 $\alpha = 0.25$, $\lambda = -1.0$ である。

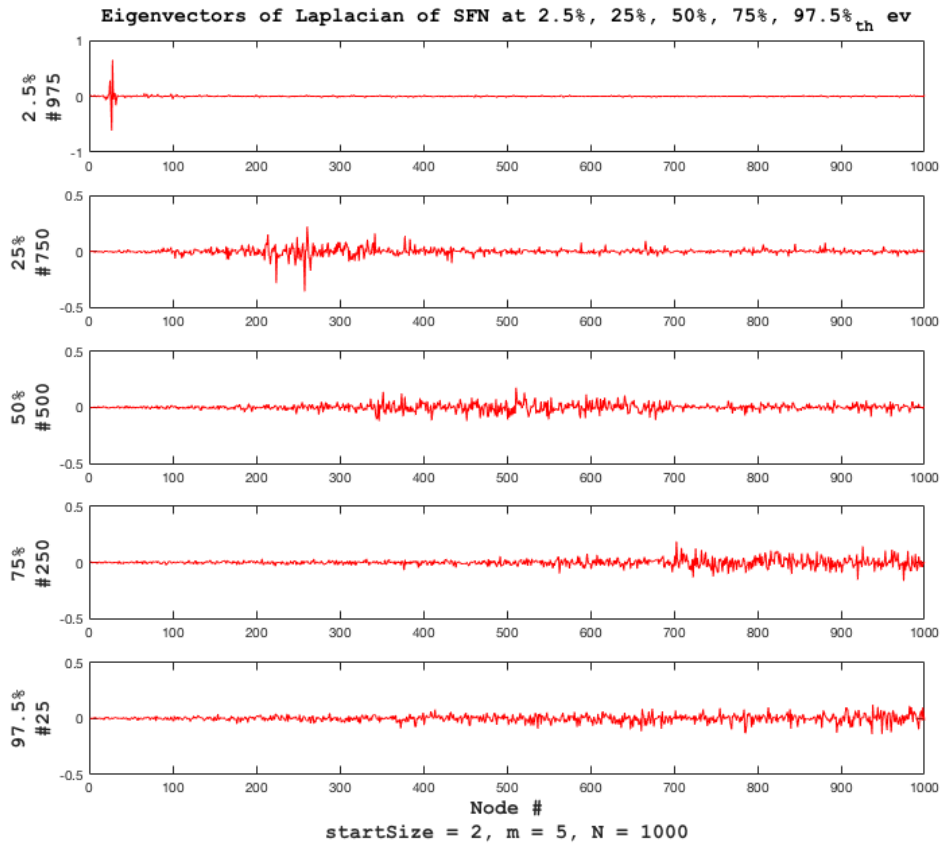


図4 Barabási と Albert の方法で生成したノード数 1000 のスケールフリーネットワークにおけるグラフラプラシアンの25, 250, 500, 750, 975 番目に小さい固有値に対応する、正規化された固有ベクトルの成分を横並びに表示した。上から 975, 750, 500, 250, 25 番目である。

参考文献

- [1] A. L. Barabási and A. Albert, *Emergence of scaling in random networks*, Science, **286** (1999), 509-512.
- [2] C. Borgs, J. T. Chayes, H. Cohn, and Y. Zhao, *An L^p theory of sparse graph convergence I: Limits, sparse random graph models, and power law distributions*, preprint, arXiv:1401.2906 (2014).
- [3] D. Henry, *Geometric theory of semilinear parabolic equations*, Lect. Notes in Math, 840, Springer-Verlag, New York, (1981).
- [4] D. Kaliuzhnyi-Verbovetskyi and G. S. Medvedev, *The semilinear heat equation on sparse random graphs*, Siam J. Math. Anal., **49** (2017), 1333-1355.
- [5] T. Kato, *Perturbation theory for linear operators*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, (1995).
- [6] L. Lovász, *Large networks and graph limits*, AMS, Providence, RI, (2012).

- [7] P. N. McGraw and M. Menzinger, *Laplacian spectra as a diagnostic tool for network structure and dynamics*, Phys. Rev. E, **77** (2008), 031102.
- [8] E. Merkurjev, T. Kostić, A. L. Bertozzi, *An MBO Scheme on Graphs for Classification and Image Processing*, SIAM J. Imaging Sciences, **6** (2013), 1903-1930.
- [9] H. Nakao and S. M. Alexander, *Turing patterns in network-organized activator-inhibitor systems*, Nature Physics, **6.7** (2010), 544–550.
- [10] H. G. Othmer and L. E. Scriven, *Instability and dynamic pattern in cellular networks*, Journal of theoretical biology, **32.3** (1971), 507–537.