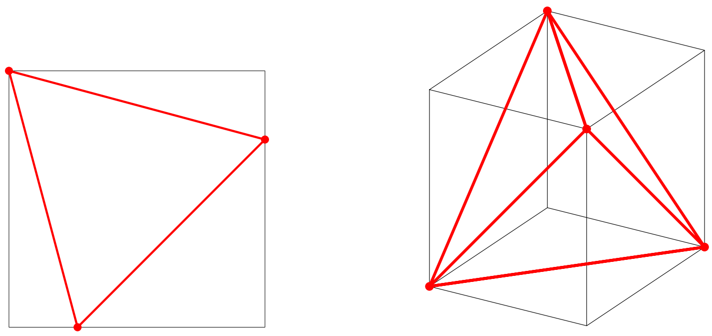
n 次元立方体の中の大きな n 次元正則単体

徳重典英

1. 問題と主結果

正方形の中にどのくらい大きな正三角形が入るか。立方体の中にどのくらい大きな正四面体が入るか。



n 次元正則単体 Δ_n は $n+1$ の頂点をもち、どの 2 点間の距離も等しい図形である。n 次元立方体 $Q_n \cong [0,1]^n$ は 2^n 個の頂点をもつ。$\ell\Delta_n, \ell Q_n$ でそれぞれ一辺の長さが ℓ の n 次元正則単体、n 次元立方体を表すことにする。例えば $1Q_3$ は単位立方体である。上の図から、$\sqrt{2}\Delta_3 \subset 1Q_3$ がわかる。

n 次元立方体の中にどのくらい大きな n 次元正則単体が入るだろうか。この問題について考えてみよう。そのために、

$$f(n) = \max\{\ell : \ell\Delta_n \subset 1Q_n\}$$

とおく。$1Q_n$ の頂点全体は $\{0,1\}^n$ と同一視できる。このうちの二点 $(0,\ldots,0), (1,\ldots,1)$ は $1Q_n$ の直径を与えるから $\mathrm{diam}(1Q_n) = \sqrt{n}$, 従って $f(n) \le \sqrt{n}$ である。では、適当な定数 $c > 0$ に大して $f(n) > c\sqrt{n}$ が成り立つだろうか。実は、だいたい $f(n) > \sqrt{n}/2$ がいえる。正確には次のことが成り立つ。

定理 1 (Maehara–Ruzsa–T [3])**.**

$$\forall \varepsilon > 0, \quad \exists N_0, \quad \forall n > N_0, \qquad \left(\frac{1-\varepsilon}{2}\sqrt{n}\right)\Delta_n \subset 1Q_n.$$

2. 上界

ここでは $f(n)$ の上界として次の不等式を示す。等号成立の例は次節で扱う。

命題 1.

$$f(n) \le \sqrt{\frac{n+1}{2}} \tag{1}$$

Date: March 14, 2010, 02:05pm.

Proof. $\ell\Delta_n \subset 1Q_n$ であると仮定しよう。この $\ell\Delta_n$ の外接球を S, その半径を r, $1Q_n$ の外接球を S', その半径 r' とおく。$\ell\Delta_n$ の頂点は S' の球体内でかつ S の球帽上にある。もし $r > r'$ なら、この球帽の凸包は S の中心 (従って $\ell\Delta_n$ の重心) を含まず矛盾が生じる。従って $r \le r'$ である。これに $r' = \sqrt{n}/2$ と

$$r = \ell\sqrt{\frac{n}{2(n+1)}} \tag{2}$$

を代入して $\ell \le \sqrt{\frac{n+1}{2}}$ すなわち (1) を得る。

(2) を $\ell = \sqrt{2}$ の場合に示そう。そのために $\sqrt{2}\Delta_n$ を $\mathbb{R}^{n+1}$ 内の超平面 $x_1 + \cdots + x_{n+1} = 1$ 上におく。ただし頂点は座標軸上にとり $p_1 = (1,0,\ldots,0),\ldots,p_{n+1} = (0,\ldots,0,1)$ とする。このとき $\sqrt{2}\Delta_n$ の重心は $(\frac{1}{n+1},\ldots,\frac{1}{n+1})$ だから、ここから頂点 p_1 までの距離の二乗は $(1-\frac{1}{n+1})^2 + n(\frac{1}{n+1})^2 = \frac{n^2+n}{(n+1)^2} = \frac{n}{n+1}$ となり、(2) が示せた。 □

3. アダマール行列

各成分が ±1 で、どの二行も直行する正方行列をアダマール行列という。例えば

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

はアダマール行列。アダマール行列は任意の行を (-1) 倍してもアダマール行列である。この性質を使うと、n 次のアダマール行列から、n 次のアダマール行列で一列目が全部 1 というものが作れる。

アダマールという性質はクロネッカー積について閉じている。例えば、

$$H \otimes H = \begin{pmatrix} H & H \\ H & -H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

もアダマール。この行列の 1 列目を取り除くと、残った 4 本の 3 次元横ベクトル

$$(1,1,1), (-1,1,-1), (1,-1,-1), (-1,-1,1)$$

は $2\sqrt{2}\Delta_3$ の頂点をなす。さらに $2Q_3 = [-1,1]^3$ とみなすことで、$2\sqrt{2}\Delta_3 \subset 2Q_3$ がわかる。これと (1) から $f(3) = \sqrt{2}$ が従う。一般に次のことが成り立つ。

命題 2 (folklore[1])**.**

$$n+1 \text{ 次のアダマール行列 } H_{n+1} \text{ が存在 } \iff f(n) = \sqrt{\frac{n+1}{2}}$$

Proof. まず $\Longrightarrow$ を示すため、H_{n+1} が存在すると仮定して、

$$H_{n+1} = \begin{pmatrix} 1 & u \\ 1 & v \\ \vdots & \vdots \\ 1 & w \end{pmatrix} \tag{3}$$

[1] Schoenberg [4] はこの “readlily established fact” は Coxeter にさかのぼると書いている。より詳しい文献等については [1] の §4 にある。

とおく。ここで u, v, w 等は n 次元横ベクトルである。アダマール行列の直交性から $(1,u)\cdot(1,v)=0$, すなわち $u\cdot v=-1$. 従って $|u-v|^2=|u|^2+|v|^2-2u\cdot v=n+n-2(-1)$, つまり $|u-v|=\sqrt{2(n+1)}$. これは H_{n+1} の一列目を除いて得られる $n+1$ 本の横ベクトルたちが $\sqrt{2(n+1)}\Delta_n$ の頂点集合をなすことを意味する。この頂点集合は $[-1,1]^n\cong 2Q_n$ の頂点集合に含まれるから、$\sqrt{2(n+1)}\Delta_n\subset 2Q_n$, すなわち $f(n)\geq\sqrt{\frac{n+1}{2}}$ であり、これと (1) より目標の等式を得る。

次に $\Longleftarrow$ を示すため、$\sqrt{\frac{n+1}{2}}\Delta_n\subset 1Q_n$ と仮定しよう。このとき対応する二つの外接球の半径は一致するが、さらに中心も一致する。(そうでなければ、(1) を示した議論により、正則単体の重心が単体からはみ出て矛盾。) 従って正則単体の頂点集合は立方体の頂点集合に含まれる。立方体を $2Q_n=[-1,1]^n$ に取り直せば、$\sqrt{2(n+1)}\Delta_n$ の $n+1$ 個の頂点 $u, v, \ldots, w\in\{\pm1\}^n$ は $|u-v|=\sqrt{2(n+1)}$ つまり $(1,u)\cdot(1,v)=0$ をみたす。そこで (3) により H_{n+1} を定義すれば、それはアダマール行列である。 $\square$

4. 強さ t の直交行列

$n>2$ のとき、n 次アダマール行列が存在するなら n は 4 の倍数である。アダマール予想とは「n が 4 の倍数なら n 次アダマール行列が存在するだろう」というもので未解決である。もし $n+1$ 次のアダマール行列があれば、$f(n)$ の最善の下界が得られる。(が、それが期待できるのは $n\equiv 3 \pmod 4$ のときだけで、その場合でも実際にアダマール行列を見つけるのは難しい。) そこで、アダマール行列のかわりとなる何かよい性質を持つ行列を見つけて、$f(n)$ のよい下界を達成したい。

行列 $A=(a_{ij})$ に対して、そのノルムを $\|A\|=\max_{ij}|a_{ij}|$ と定める。H がアダマール行列なら $\frac{1}{\sqrt{n}}H$ は直交行列でそのノルムは $\frac{1}{\sqrt{n}}$ である。これをふまえて次の定義をする。

定義 1. ある定数 $c>0$ に対して n 次直交行列 A が強さ c であるとは

$$\|A\|\leq\frac{1}{c\sqrt{n}} \tag{4}$$

かつ

$$\|J_nA\|\leq\frac{1}{c}, \tag{5}$$

をみたすことである。ただし J_n は成分が全部 1 の n 次行列である。

次の事実は強さ c の行列から $f(n)$ のよい下界が得られることを示している。

命題 3. 強さ c の n 次直交行列 A が存在すれば $f(n)\geq c\sqrt{n/2}$ である。

Proof. $A=(a_{ij})$ の第 i 行を $p_i=(a_{i1},\ldots,a_{in})$ とする。このとき $|p_i-p_j|^2=|p_i|^2+|p_j|^2-2p_i\cdot p_j=2$ だから、n 点 $p_1,\ldots,p_n\in\mathbb{R}^n$ は $\sqrt{2}\Delta_{n-1}$ の頂点を与える。(4) より $\|p_i\|\leq 1/(c\sqrt{n})$ なのでこれら n 頂点は $(2/(c\sqrt{n}))Q_n$ に入る。

ここにもう一点を付け加えて $\sqrt{2}\Delta_n$ を作ろう。上の $\sqrt{2}\Delta_{n-1}$ の重心は $g=\frac{1}{n}\sum p_i$ で、$p_i\cdot p_j=\delta_{ij}$ より $|g|^2=g\cdot g=\frac{1}{n^2}\sum|p_i|^2=\frac{1}{n}$. ここで $p_{n+1}=(1-\sqrt{n+1})g$ とおくと $|p_i-p_{n+1}|^2=|p_i|^2+|p_{n+1}|^2-2p_i\cdot p_{n+1}=1+(1-\sqrt{n+1})^2\frac{1}{n}-2(1-\sqrt{n+1})\frac{1}{n}=2$. 従って $p_1,\ldots,p_{n+1}$ は $\sqrt{2}\Delta_n$ を作る。さらに $\|g\|\leq\|J_nA\|/n$ と (5) より $\|p_{n+1}\|=(\sqrt{n+1}-1)\|g\|\leq(\sqrt{n+1}-1)/(cn)\leq\frac{1}{c\sqrt{n}}$. よって p_{n+1} も $(2/(c\sqrt{n}))Q_n$ に入る。 $\square$

H が n 次アダマール行列のとき $A=\frac{1}{\sqrt{n}}H$ は直交行列で $\|A\|=\frac{1}{\sqrt{n}}$ だから (4) を ($c=1$ で) みたす。しかし $\|J_nA\|=\sqrt{n}$ だから (5) はみたさない。つまり強さ c の行列は (4) の点でアダマール行列に似ているが、(5) の点でアダマール行列とはかけ離れている。

5. A_q (q:奇素数冪) の構成

q を奇素数冪とし、強さ $c=1-o(1)$ の q 次直交行列 A_q を構成しよう。q 元体 $\mathbb{F}_q=\{b_0,\dots,b_{q-1}\}$ ($b_0=0$) 上の指標 $\chi:\mathbb{F}_q\to\{0,\pm1\}$ を $\chi(0)=0$, x が平方数なら $\chi(x)=1$, x が非平方数なら $\chi(x)=-1$ とし、q 次行列 $B=(b_{ij})$ を $b_{ij}:=\chi(b_i-b_j)$ で定める。このとき $BB^T=qI_q-J_q$, $BJ_q=J_qB=O$ が成り立つ。(この証明、および B から得られる Paley 型のアダマール行列については [2] の 202–203 ページを見よ。) 最後に

$$A_q=\frac{1}{\sqrt{q}}\big(B+\frac{1}{\sqrt{q}}J_q\big)$$

とおく。これは直交行列で $\|A_q\|\le\frac{1}{\sqrt{q}}+\frac{1}{q}$ と $J_qA_q=J_q$ をみたすから強さ $c=1-o(1)$ の行列である。

実は $A_q=(a_{ij})$ は $|a_{ij}-1/q|\le 1/\sqrt{q}$ をみたすので、これを (4) の代わりに用いることで $\sqrt{q/2}\Delta_q\subset Q_q$ がいえる。すなわちこの場合には定理より強く次が成り立つ。

命題 4. n が奇素数冪なら $f(n)\ge\sqrt{n/2}$.

6. A_n の構成と問題点

$q_1,\dots,q_r$ を相異なる奇素数冪とし、$n=q_1\cdots q_r$ とおく。前節で構成した行列を用いて $A_n=A_{q_1}\otimes\cdots\otimes A_{q_r}$ と定める。これは強さ c の行列だろうか。A_n は直交行列で

$$J_nA_n=(J_{q_1}\otimes\cdots\otimes J_{q_r})(A_{q_1}\otimes\cdots\otimes A_{q_r})=(J_{q_1}A_{q_1})\otimes\cdots\otimes(J_{q_r}A_{q_r})=J_n$$

より (5) を ($0<c\le1$ で) みたす。そこで (4) を調べよう。A_n の定義から

$$\|A_n\|\le\frac{1}{\sqrt{n}}\prod_{i=1}^{r}\big(1+\frac{1}{\sqrt{q_i}}\big) \tag{6}$$

である。ここで

$$\prod_{i=1}^{r}\big(1+\frac{1}{\sqrt{q_i}}\big)\le\prod_{p|n}(1+\frac{1}{\sqrt{p}})=\sum_{d|n}\frac{1}{\sqrt{d}}=:g(n), \tag{7}$$

と評価できる。ただし 2 番目の項の積は n を割るすべての素数 p をわたる。ここで n が x 未満の素数の積の場合は、$g(n)\ge\sum\frac{1}{\sqrt{p}}\ge\sum\frac{1}{p}\approx\log\log x$ だから $g(n)$ を定数で押さえることはできない。従って (c をどう選んでも) A_n は一般には (4) をみたさない。

$g(n)$ は定数で押さえられないのだが、$g(n)$ の平均は定数で押さえられる。例えば、

$$\sum_{n=1}^{N}g(n)=\sum_{n=1}^{N}\sum_{d|n}\frac{1}{\sqrt{d}}=\sum_{d=1}^{N}\frac{1}{\sqrt{d}}\left\lfloor\frac{N}{d}\right\rfloor\le N\sum_{d=1}^{\infty}d^{-3/2}=N\zeta_{3/2}<2.62N.$$

このことを利用して、次節では強さ $c=1-o(1)$ の n 次行列が (n が奇素数冪のとき以外にも) 十分豊富にあることを示そう。

7. 補題 (初等整数論)

まず $g(n)=\sum_{d|n}\frac{1}{\sqrt{n}}\geq 1+\frac{1}{\sqrt{n}}>1$ に注意しよう。もし奇数 n が $g(n)<1+\delta$ をみたせば前節の結果により A_n は強さ $c=1/(1+\delta)$ の行列である。このような次元 n は次の意味で十分豊富にある。

補題 5. 任意の $\varepsilon,\delta>0$ に対してある n_0 が存在し、任意の $n>n_0$ について $2n=n_1+n_2$ なる奇数 n_1,n_2 で次の性質をもつものがある。各 $i=1,2$ に対して $(1-\varepsilon)n\leq n_i\leq(1+\varepsilon)n$ かつ $g(n_i)<1+\delta$.

Proof. ε,δ が与えられたとする。m を十分大きく ($m>(16/\delta)^2$ でよい) とり

$$q=\prod_{p\leq m}p$$

を m 以下の素数の積とする。$n>n_0>q$ となるように n を十分大きくとる。(後でわかるように $n_0=(12q/(\varepsilon\delta))^2>q/\varepsilon$ でよい。)

q と互いに素な自然数たちの上で $g(n)$ の平均をとることを考えよう。(そこでの平均が $1+o(1)$ となることをみる。) そのために $(q,r)=1$ なる r をとり

$$I_r=\{j\in[(1-\varepsilon)n,(1+\varepsilon)n]: j\equiv r \pmod q\}$$

とおく。このとき

$$\sum_{j\in I_r}(g(j)-1)=\sum_{d>1}\frac{1}{\sqrt{d}}N_d$$

である。ただし N_d は I_r における d の倍数の個数である。$(d,q)>1$ なら $N_d=0$ である。$(d,q)=1$ なら I_r における d の倍数は公差 qd の等差数列をなすから、

$$N_d\leq\frac{2\varepsilon n}{qd}+1.$$

さらに $d\geq 2n$ なら $N_d=0$ である。

$d>1$ かつ $(d,q)=1$ のとき、q の選び方から $d>m$ であり、従って

$$\sum_{j\in I_r}(g(j)-1)\leq\sum_{m<d<2n}\frac{1}{\sqrt{d}}\left(\frac{2\varepsilon n}{qd}+1\right).$$

右辺を評価するのに

$$\sum_{d>m}\frac{1}{d\sqrt{d}}<\int_m^\infty\frac{dx}{x\sqrt{x}}=2/\sqrt{m},\quad \sum_{d<2n}\frac{1}{\sqrt{d}}<\int_0^{2n}\frac{dx}{\sqrt{x}}=2\sqrt{2n}<3\sqrt{n}$$

を用いると

$$\sum_{j\in I_r}(g(j)-1)<\frac{4\varepsilon n}{q\sqrt{m}}+3\sqrt{n}. \tag{8}$$

さて r を以下のように定める。m 以下の各素数 p に対して、もし $2n\not\equiv 1 \pmod p$ なら $r\equiv 1 \pmod p$; もし $2n\equiv 1 \pmod p$ なら $r\equiv 2 \pmod p$ とし、このようにしてできた連立一次合同式の解を r とする。このとき r も $r'=2n-r$ も q と互いに素となる。(8) を r と r' に適用して足し合わせると

$$\sum_{j\in I_r}\big((g(j)-1)+(g(2n-j)-1)\big)<\frac{8\varepsilon n}{q\sqrt{m}}+6\sqrt{n}.$$

$n > q/\varepsilon$ より、上式左辺の項の数は $\geq 2\varepsilon n/q - 1 > \varepsilon n/q$ である。従って j をうまく選んで次式が成り立つとしてよい。

$$(g(j)-1)+(g(2n-j)-1) < \frac{8}{\sqrt{m}} + \frac{6q}{\varepsilon\sqrt{n}}.$$

$n_1 = j, n_2 = 2n-j$ とおくと、これらは q と互いに素だから奇数である。あとは、上式右辺が $< \delta$ ならおわり。これを達成するには右辺の各項が $< \delta/2$ ならよい。そのためにまず m を選ぶが、$8/\sqrt{m} < \delta/2$ となるように、つまり $m > (16/\delta)^2$ と選ぶ。これから q が決まり、最後に n を十分大きく、つまり $6q/(\varepsilon\sqrt{n}) < \delta/2$ となるように選ぶ。結局 $n > (12q/(\varepsilon\delta))^2$ としておけばよい。 □

8. 補題 (初等幾何)

補題 6. 実数 $\ell > 0$ と正整数 s,t が $\ell^2 \leq s \leq t$ をみたすとする。このとき $\ell\Delta_s \subset Q_s$ かつ $\ell\Delta_t \subset Q_t$ ならば $\ell\Delta_{s+t+1} \subset Q_{s+t+1}$ である。

Proof. Q_s 内の $\ell\Delta_s$ の頂点を $p_0, p_1, \ldots, p_s$ とし、Q_t 内の $\ell\Delta_t$ の頂点を $q_0, q_1, \ldots, q_t$ とする。この二つの単体を重心が原点になるように配置すると、(2) より原点から p_i までの距離は $\ell\sqrt{s/(2s+2)}$ である。これから頂点 $u_0, \ldots, u_s, v_0, \ldots, v_t$ をもつ $\ell\Delta_{s+t+1}$ を構成しよう。各 $0 \leq i \leq s$ および $0 \leq j \leq t$ に対して u_i, v_j を次のように定める。

$$u_i = (p_i, 0^t, x) \in \mathbb{R}^s \times \mathbb{R}^t \times \mathbb{R}, \quad v_j = (0^s, q_j, 0) \in \mathbb{R}^s \times \mathbb{R}^t \times \mathbb{R}.$$

次に $x > 0$ を $|u_i - v_j| = \ell$ がすべての i, j で成り立つように選ぶ。そのため

$$|u_i - v_j|^2 = \frac{s}{2s+2}\ell^2 + \frac{t}{2t+2}\ell^2 + x^2 = \ell^2$$

を解いて、$x = \ell(\frac{1}{2s+2} + \frac{1}{2t+2})^{1/2} < \ell/\sqrt{s+1} < 1$. このとき

$$u_i, v_j \in Q_s \times Q_t \times [0,1] = Q_{s+t+1}$$

がすべての i, j について成り立っている。すなわち $\ell\Delta_{s+t+1} \subset Q_{s+t+1}$ である。 □

9. 定理の証明

$\varepsilon_0 > 0$ が与えられたとする。$\varepsilon = \varepsilon_0/2$ とおいて $\delta > 0$ を

$$1-\varepsilon = \sqrt{1-\varepsilon}/(1+\delta). \tag{9}$$

となるように選ぶ。この ε と δ を補題 5 に与えて以下の性質をもつ $k_0 = k_0(\varepsilon,\delta) > 0$ を得る。すなわち、任意の $k > k_0$ に対して $2k = k_1 + k_2$ なる k_1, k_2 でさらに $i = 1,2$ について $k_i \geq (1-\varepsilon)k$ と $g(k_i) < 1+\delta$ が成り立つ。最後に $N_0 \geq 2k_0$ を

$$(1-\varepsilon)\sqrt{n-1} > (1-\varepsilon_0)\sqrt{n} \tag{10}$$

が任意の $n > N_0$ について成り立つように選ぶ。

さて $n > N_0$ が与えられたとしよう。まず n を奇数とし $n = 2k+1$ とおく。補題 5 から $2k = k_1 + k_2$ と分割できる。さらに $c = 1/(1+\delta)$ として補題 3 を適用すると、$i = 1,2$ に対し

$$f(k_i) \geq \frac{\sqrt{k_i/2}}{1+\delta} =: \ell_i$$

すなわち $\ell_i\Delta_{k_i} \subset Q_{k_i}$ である。また

$$\ell_i > \frac{\sqrt{(1-\varepsilon)k}}{(1+\delta)\sqrt{2}} \overset{(9)}{=} \frac{(1-\varepsilon)\sqrt{k}}{\sqrt{2}} = \frac{1-\varepsilon}{2}\sqrt{n-1} \overset{(10)}{>} \frac{1-\varepsilon_0}{2}\sqrt{n}.$$

補題 6 を $s=k_1, t=k_2$, $\ell = \frac{1-\varepsilon_0}{2}\sqrt{n}$ に対して適用することで $\ell\Delta_n \subset Q_n$ を得る。

次に n を偶数とし $n=2k$ とかく。補題 5 から $2k=k_1+k_2$ とできて、さらに

$$\|A_{k_i}\| \overset{(6)(7)}{\leq} \frac{g(k_i)}{\sqrt{k_i}} < \frac{1+\delta}{\sqrt{(1-\varepsilon)k}} \overset{(9)}{=} \frac{\sqrt{2}}{(1-\varepsilon)\sqrt{n}} < \frac{\sqrt{2}}{(1-\varepsilon_0)\sqrt{n}} =: \frac{1}{c\sqrt{n}}.$$

n 次直交行列 C を

$$C = \begin{pmatrix} A_{k_1} & 0 \\ 0 & A_{k_2} \end{pmatrix}.$$

と定義する。このとき $\|C\| \leq \max\|A_{k_i}\| < 1/(c\sqrt{n})$ かつ $\|J_nC\| = \max\|J_{k_i}A_{k_i}\| = 1$. 従って命題 3 から $(c\sqrt{n/2})\Delta_n = (\frac{1-\varepsilon_0}{2}\sqrt{n})\Delta_n \subset Q_n$. これで証明はおわり。

References

[1] M. Hudelson, V. Klee, D. Larman. Largest j-simplices in d-cubes: some relatives of the Hadamard maximum determinant problem. *Linear Algebra Appl.* 241/243 (1996) 519–598.

[2] J. H. van Lint, R. M. Wilson. A course in combinatorics. Second edition. Cambridge University Press, Cambridge, 2001.

[3] H. Maehara, I. Z. Ruzsa, N. Tokushige. Large regular simplices contained in a hypercube. Periodica Mathematicae Hungarica, 58 (2009) 121–126.

[4] I. J. Schoenberg. Regular simplices and quadratic forms. *Journal of the London Mathematical Society* 12 (1937) 48-55.

College of Education, Ryukyu University, Nishihara, Okinawa, 903-0213 Japan

E-mail address: hide@edu.u-ryukyu.ac.jp