グラフのゼータ関数と量子ウォーク

佐藤巌　**小山高専**

0. 始めに

量子ウォークの分野では、グラフの同型問題について、グラフのスペクトラムを通していろいろなアプローチがなされている。特に、グラフの Grover 遷移行列を使った、グラフの同型に関する予想が提出され、Grover 遷移行列やその positive support のスペクトラムが求められた。そして、Grover 遷移行列とグラフのゼータ関数の行列式表示に現れる行列が、密接に、関連することが判明した。

今回は、グラフの Ihara ゼータ関数と第２種 weighted ゼータ関数の行列式表示を用いて、Grover 遷移行列等のスペクトラムを、系統的に与えることができたので、それらについて報告する。

1. グラフのゼータ関数

グラフのゼータ関数は、1966 年に、Ihara [19] による、$PGL(2,F)$ ($F:p$-進体) のある離散群の共役類の数え上げに関連する p-進 Selberg ゼータ関数 (Ihara-Selberg ゼータ関数、簡単に、Ihara ゼータ関数) から始まった。その後、1980 年に、 Serre [32] により、Ihara ゼータ関数は正則グラフのゼータ関数であることが指摘され、これを受けて、1986 年、Sunada [36,37] により、正則グラフに対しての Ihara ゼータ関数のグラフ理論的定義及び、Ihara の定理のグラフ理論的証明が与えられた。一方、Hashimoto [16] は、1989 年に、半正則２部グラフの Ihara ゼータ関数の行列式表示を与えた。

一般のグラフに対する拡張としては、先ず、1990 年に、Hashimoto [17] により、edge matrix を用いた Ihara ゼータ関数の行列式表示が与えられ、1992 年、Bass [5] により、Ihara ゼータ関数の隣接行列を用いる行列式表示が得られた。

別の拡張としては、群の growth の研究に絡み、1999 年に、Bartholdi [4] により、２変数のグラフのゼータ関数である Bartholdi ゼータ関数が定義された。これは一種の重み付きゼータ関数と見なされる。

1.1. グラフの Ihara ゼータ関数の定義

最も有名なゼータ関数である、<u>リーマンのゼータ関数</u> は、

$$\zeta(s)=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^s},\ s=\sigma+it\in\mathbf{C}$$

のように定義され、<u>オイラー積</u> で表示することができる：

$$\zeta(s)=\prod_{p}(1-p^{-s})^{-1},\ p:\text{素数}.$$

リーマンのゼータ関数の類似物をグラフの上で考えるならば、無限級数の形での定義は期待できない。そこで、素数に対応して、prime, reduced cycles の同値類を考え、さらに、オイラー積表示を用いて、グラフ版のゼータ関数が定義された。その Ihara ゼータ関数で見られる cycle は、離散群の原始的共役類のグラフ的解釈であり、結果として、その cycles の数え上げにもなっている。ゼータ関数の一般化においては、どれもこの類の “オイラー積”が基本となっている。

グラフ$G=(V,E)$ を、次のような V と E の対とする。$V=V(G)$ は 点 の有限集合、$E=E(G)$ は V の 2 点 u,v を結ぶ 辺$uv=\{u,v\}$ の族 (同じものを含む集合)。G の各辺 uv を、$(u,v),(v,u)\in V\times V$ で置き換えた symmetric digraph を、$D_G=(V,D(G))$ とする。(u,v) を arc という。G の arcs の集合を、$D(G)=\{(u,v),(v,u)|uv\in E(G)\}$ とおく。$e=(u,v)\in D(G)$ について、u,v をそれぞれ、e の 始点, 終点 といい、$u=o(e),v=t(e)$ とかく。また、$e^{-1}=(v,u)$ を $e=(u,v)$ の inverse という。G の path $P=(e_1,\cdots,e_n)$ は、$e_i\in D(G),t(e_i)=o(e_{i+1})(1\leq i\leq n-1)$ なる $e_1,\cdots,e_n$ の列である。n を P の 長さ といい、$|P|=n$ とかく。$o(P)=o(e_1),t(P)=t(e_n)$ とおき、P を $(o(P),t(P))$-path という。path $P=(e_1,\cdots,e_n)$ の backtracking (もしくは、bump) とは、$e_{i+1}^{-1}=e_i$ なる部分をいう。$o(e_1)=t(e_n)$ のとき、path $P=(e_1,\cdots,e_n)$ は cycle という。

2 つの cycle $C_1=(e_1,\cdots,e_n)$ と $C_2=(e'_1,\cdots,e'_n)$ が 同値 とは、ある自然数 k について、$e'_i=e_{i+k}$ となることである。ここで、添字は mod n で考える。$[C]$ で C を含む同値類を表す。cycle B の r 乗B^r は、B と同じ向きに、同じ始点から r 周してできる cycle である。cycle C が reduced とは、C と C^2 がともに backtracking をもたないことである。また、cycle C が prime とは、他の cycle B について $C\neq B^r$ となることである。グラフ G の prime, reduced cycle の同値類は、G のある点 v に対する G の基本群 $\pi_1(G,v)$ のただ一つの原始的共役類に対応する。

定義 1 (Sunada) グラフ G の Ihara ゼータ関数 を以下のように定義する:

$$\mathbf{Z}(G,u)=\mathbf{Z}_G(u)=\prod_{[C]}(1-u^{|C|})^{-1}.$$

ここで、$[C]$ は G の prime, reduced cycle の同値類全体を動き、$|C|$ は C の長さである ([36] を見よ)。また、$u\in\mathbf{C}$ で、$|u|$ が十分小さいものとする。

1.2. Ihara の定理

G を n 点 $v_1,\cdots,v_n$ を持つ連結単純グラフとするとき、G の 隣接行列$\mathbf{A}(G)=(a_{ij})_{1\leq i,j\leq n}$ を、$v_iv_j\in E(G)$(あるいは、$(v_i,v_j)\in D(G)$) のとき $a_{ij}=1$, さもなければ、$a_{ij}=0$ と定義する。点 v_i の 次数 を、$\deg_G v_i=|\{v_j\mid v_iv_j\in E(G)\}|$ と定義する。G の各点 v について、$\deg_G v=k$(一定) のとき、G を k-正則グラフ という。

正則グラフの Ihara ゼータ関数について、リーマンのゼータ関数と同様に、有理性、関数等式、リーマンの予想の類似が成立する ([38] を見よ)。

定理 1 (Ihara) G が連結 $(q+1)$-正則グラフのとき、G の Ihara ゼータ関数は次のように与えられる:

$$\mathbf{Z}_G(u)=(1-u^2)^{-(m-n)}\det(\mathbf{I}_n-\mathbf{A}(G)u+qu^2\mathbf{I}_n)^{-1}=\exp(\sum_{k\geq 1}\frac{N_k}{k}u^k).$$

ここで、$m=|E(G)|,n=|V(G)|$ である。また、N_k は G の長さ k の reduced cycles の個数を表す。

1.3. 非正則グラフの Ihara ゼータ関数

G を n 点 $v_1,\cdots,v_n$ と、m 辺を持つ連結グラフとするとき、$n\times n$ 対角行列 $\mathbf{D}=(d_{ij})$ を、$d_{ii}=\deg_G v_i$ と定義する。また、2 つの $2m\times 2m$ 行列 $\mathbf{B}=\mathbf{B}(G)=((\mathbf{B})_{e,f})_{e,f\in D(G)}$ and $\mathbf{J}_0=\mathbf{J}_0(G)=((\mathbf{J}_0)_{e,f})_{e,f\in D(G)}$ を、次のように与える：

$$(\mathbf{B})_{e,f}=\begin{cases}1 & \text{if } t(e)=o(f),\\ 0 & \text{otherwise,}\end{cases}\quad (\mathbf{J}_0)_{e,f}=\begin{cases}1 & \text{if } f=e^{-1},\\ 0 & \text{otherwise.}\end{cases}$$

$\mathbf{B}-\mathbf{J}_0$ は G の edge matrix と呼ばれる。

定理 2 (Hashimoto; Bass) 連結グラフ G について、

$$\mathbf{Z}_G(u)^{-1} = \det(\mathbf{I}_{2m} - u(\mathbf{B}-\mathbf{J}_0)) = (1-u^2)^{m-n}\det(\mathbf{I}_n - u\mathbf{A}(G) + u^2(\mathbf{D}-\mathbf{I}_n)) = \exp(-\sum_{k\ge 1}\frac{N_k}{k}u^k).$$

ここで、$m=|E(G)|, n=|V(G)|$. また、N_k は G の長さ k の reduced cycles の個数を表す。

本講演で扱うゼータ関数は、隣接行列、または、その類似による表示ができない場合でも、cycle の表現と相性が良い edge matrix、または、その類似物によってすべて表示できる。

ここで、Ihara ゼータ関数について、以下の Remark を挙げておく：

- 一般の連結グラフ G の Ihara ゼータ関数の収束半径 R について、$(\Delta(G)-1)^{-1} < R < (\delta(G)-1)^{-1}$ であることがわかっている ([23] を見よ)。ここで、$\Delta(G)$,$\delta(G)$ は、G の最大次数、最小次数である。
- 一般のグラフのリーマン予想の類似は定式化されておらず、Lubotzky [24], Stark and Terras [35] によって、２，３のリーマン予想の類似が提案されている。
- 整数論の類数公式のグラフ理論版は、Hashimoto [17], Northshield [29]、素数定理のグラフ理論版は、Hashimoto [18], Terras [39] によって得られている。

1.5. グラフの weighted ゼータ関数

グラフの weighted ゼータ関数は、Hashimoto [16] によって、辺に重みを与えることにより、最初に定義され、その後、Stark and Terras [34] により、グラフ G の arc に重みを与えることにより、以下のように一般化された：G を連結グラフ、$D(G)=\{e_1,\dots,e_m,e_{m+1},\dots,e_{2m}\}(e_{m+i}=e_i^{-1}(1\le i\le m))$ とするとき、$2m$ 個の複素数値 $\mathbf{u} =: (u_1,\dots,u_{2m})$ を導入し、各 cycle $C=(e_{i_1},\dots,e_{i_k})$ の重みを、$g(C)=u_{i_1}\cdots u_{i_k}$ として、G の edge ゼータ関数 $\zeta_G(\mathbf{u})$ を、

$$\zeta_G(\mathbf{u}) = \prod_{[C]}(1-g(C))^{-1}$$

と定義する。ここで、$[C]$ は G の prime, reduced cycle の同値類全体を動く。

定理 3 (Stark and Terras) m 辺の連結グラフ G について、

$$\zeta_G(\mathbf{u})^{-1} = \det(\mathbf{I}_{2m} - (\mathbf{B}-\mathbf{J}_0)\mathbf{U}) = \det(\mathbf{I}_{2m} - \mathbf{U}(\mathbf{B}-\mathbf{J}_0)).$$

ここで、$\mathbf{U}=\mathrm{diag}(u_1,\dots,u_{2m})$ は、重み $u_1,\dots,u_{2m}$ の対角行列である。

一方、Mizuno and Sato [27] は、グラフ G の重み付き隣接行列での行列式表示を目指すべく、$u_k=w(e_k)t$ として、グラフ G の weighted ゼータ関数を定義した。G を連結グラフ、$V(G)=\{v_1,\cdots,v_n\}$ とするとき、$n\times n$ 行列 $\mathbf{W}=(w_{ij})_{1\le i,j\le n}$ を考える。$(v_i,v_j)\in D(G)$ のとき、ij 成分は 0 でない複素数 w_{ij}、さもなければ、$w_{ij}=0$ とする。$\mathbf{W}=\mathbf{W}(G)$ を G の weighted matrix という。$w(v_i,v_j)=w_{ij},\ v_i,v_j\in V(G)$ かつ、$w(e)=w_{ij},\ e=(v_i,v_j)\in D(G)$ とおく。G の各 path $P=(e_1,\cdots,e_r)$ について、 P の norm $w(P)$ を、$w(P)=w(e_1)\cdots w(e_r)$ とおく。このとき、G の 第１種 weighted ゼータ関数 は、

$$\mathbf{Z}(G,w,t) = \prod_{[C]}(1-w(C)t^{|C|})^{-1}$$

と定義される。ここで、$[C]$ は G の prime, reduced cycles の同値類を動く。第１種 weighted ゼータ関数は、edge ゼータ関数の別表現と言える。

定理 4 (Mizuno and Sato) G を n 点の連結グラフ、$\mathbf{W} = \mathbf{W}(G)$ を G の weighted matrix とするとき、w が交代的、即ち、各 $e \in D(G)$ について、$w(e^{-1}) = w(e)^{-1}$ ならば、

$$\mathbf{Z}(G, w, t)^{-1} = (1-t^2)^{m-n} \det(\mathbf{I}_n - t\mathbf{W}(G) + t^2(\mathbf{D} - \mathbf{I}_n)).$$

w が交代的ならば、$\mathbf{Z}(G, w, t)$ の第１種 weighted matrix による行列式表示は可能であることがわかった。このことから、G の edge ゼータ関数 $\zeta_G(\mathbf{u})$ はどのような重み $\mathbf{u}$ に対して、G の位数 (G の点の個数) 次の行列で行列式表示が可能かという問題提起と同時に、$\mathbf{u}$ のある種の交代性の下で可能という予想も挙げられる。最近、Watanabe and Fukumizu [40] により、“無条件”に G の位数次の行列で, $\zeta_G(\mathbf{u})$ が行列式表示されることで、意外な形で解決されたことを付記しておく。ただし、その位数次行列が weighted matrix でないことも併せて注意しておく。

2. 量子ウォークとグラフの同型問題

量子ウォークは、ランダムウォークの量子化、非可換化であり、「内部状態」を持つ粒子が移動すると考える。ランダムウォークはブラウン運動の離散近似であり、ブラウン運動はランダムウォークの極限である。

中心極限定理はランダムウォークの確率分布の極限が、正規分布ということを述べているが、上のことから、中心極限定理はブラウン運動の確率分布を与えていることがわかる。

2.1. 量子ウォークとグラフの同型問題の歴史的背景

量子ウォークは、以下の３つの立場から導入された：

- 量子確率論：1988 年 Gudder [15].
- 量子セルオートマトン： 1996 年 Meyer [26].
- 量子コンピュータ： 2000 年 Nayak and Vishwanath [28];
  2001 年 Ambainis, Bach, Nayak, Vishwanath and Watrous [2];
  2001 年 Aharonov, Ambainis, Kempe and Vazirani [1].

上記５つにおいて、離散時間量子ウォークが導入され、その性質が研究された。

2002 年 Childs, Farhi and Gutmann [6] によつて、連続時間量子ウォークが導入された。また、2002 年 Konno [20] によって、１次元２状態離散時間量子ウォークの極限定理が導かれた。その極限分布は正規分布と異なる。

グラフの同型問題に関するものとしては、2006 年 Emms, Hancock, Severini and Wilson [10] により、グラフの Grover 遷移行列とその positive support のスペクトラムが求められ、グラフの同型問題について有力な予想が提出された。2008 年 Emms [9] は、グラフの Grover 遷移行列を使って、グラフの離散時間量子ウォークを提唱。2010 年 Ren, Aleksic, Emms, Wilson and Hancock [30] は、グラフの Grover 遷移行列の positive support の転置行列が、Ihara ゼータ関数の行列式表示に出てくる edge matrix に等しいことを示した。2011 年 Konno and Sato [22] により、Ihara ゼータ関数と第２種 weighted ゼータ関数の行列式表示を用いて、グラフの Grover 遷移行列とその positive support の特性多項式が明示され、それらのスペクトルが与えられた。

2.2. ランダムウォーク ([21])

１次元古典ランダムウォーク を考える。１次元整数格子 $\mathbf{Z}$ の原点から粒子が出発し、左右にランダムウォー

クする。単位時間に、左に確率 p、右に確率 $q = 1 - p$ $(1 \leq p \leq 1)$ で 1 移動。各時刻で各場所における粒子の存在確率を求める。

例えば、原点から５回で-1 に到達する場合を考えると、左左左右右、右左右左左…で、-1 に到達する。p が３個、q が２個の列が対応する。

原点から出発して、時刻 $n(n = 1, 2, \ldots)$ で場所 $k(k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots)$ に、粒子が存在する確率を求める。左に l 回、右に m 回とすると、$l + m = n$, $-l + m = k$ となり、

$$l = \frac{n-k}{2}, m = \frac{n+k}{2}.$$

各ルートの確率は $p^l q^{n-l}$ で、ルートには p が l 個、q が $n - l$ 個の列が対応するから、${}_nC_l$ 個のルートがある。X_n を原点から出発して、時刻 n で到達する場所とすると、求める確率は、

$$P(X_n = k) = {}_nC_l p^l q^{n-l}$$

となり、X_n は２項分布する。確率の総和は、

$$\sum_{k=-n}^{n} P(X_n = k) = \sum_{l=0}^{n} {}_nC_l p^l q^{n-l} = (p+q)^n = 1.$$

ランダムウォークの極限定理が、中心極限定理 で、$p = q = 1/2$ のとき、

$$\lim_{n \to \infty} P(a \leq \frac{X_n}{\sqrt{n}} \leq b) = \int_a^b \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{x^2}{2}) dx.$$

$1/\sqrt{2\pi} \exp(-x^2/2)$ は、標準正規分布 $N(0, 1)$ の確率密度関数である。

2.3. 離散時間量子ウォーク ([21,25])

１次元２状態離散時間量子ウォーク、つまり、１次元整数格子 $\mathbf{Z}$ 上の格子点を最近接に移動する量子ウォークを考える。

各格子点 $k \in \mathbf{Z}$ に、

$$\psi_k = \begin{bmatrix} \alpha_k \\ \beta_k \end{bmatrix} \in \mathbf{C}^2$$

を考える。これが粒子の「内部状態」に当たる。但し、

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} ||\psi_k||^2 = \sum_{k=-\infty}^{\infty} (|\alpha_k|^2 + |\beta_k|^2) = 1$$

とする。ψ_k を 量子ビット、α_k, β_k を 確率振幅 という。

次に、ユニタリ行列

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

を考える。このとき、$|a|^2 + |b|^2 = |b|^2 + |c|^2 = 1$、$a\bar{b} + c\bar{d} = 0, c = -\Delta\bar{b}, d = \Delta\bar{a} (\Delta = ad - bc)$. ランダムウォークの p,q に対応するものとして、

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} a & b \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{Q} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c & d \end{bmatrix}$$

を考えると、$\mathbf{U} = \mathbf{P} + \mathbf{Q}$ に $1 = p + q$ が対応して、p, q の非可換化になる。

$$\psi_k^n = \begin{bmatrix} \alpha_k^n \\ \beta_k^n \end{bmatrix}$$

を時刻 $n(n = 1, 2, \ldots)$ の場所 $k(k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots)$ の量子ビットとし、時間発展 を、

$$\psi_k^n = \mathbf{P}\psi_{k+1}^{n-1} + \mathbf{Q}\psi_{k-1}^{n-1}$$

で与える。

簡単のため、初期量子ビット $(n = 0)$ は、

$$\psi_0^0 = \phi = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} \in \mathbf{C}^2, \psi_k^0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} (k \neq 0)$$

とする。ここで、$||\phi||^2 = |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ である。即ち、時刻 0 で量子ビット ϕ をもって、原点を出発する量子ウォークを考える。

$n = 1$ のとき、

$$\psi_1^1 = \mathbf{P}\psi_2^0 + \mathbf{Q}\psi_0^0 = \begin{bmatrix} a & b \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ c\alpha + d\beta \end{bmatrix},$$

$$\psi_{-1}^1 = \mathbf{P}\psi_0^0 + \mathbf{Q}\psi_{-2}^0 = \begin{bmatrix} a & b \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a\alpha + b\beta \\ 0 \end{bmatrix}.$$

$k \neq \pm 1$ ならば、$k \pm 1 \neq 0$ より、

$$\psi_k^1 = \mathbf{P}\psi_{k+1}^0 + \mathbf{Q}\psi_{k-1}^0 = \begin{bmatrix} a & b \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

$n = 2$ のとき、

$$\psi_0^2 = \mathbf{P}\psi_1^1 + \mathbf{Q}\psi_{-1}^1 = \begin{bmatrix} a & b \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ c\alpha + d\beta \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c & d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a\alpha + b\beta \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b(c\alpha + d\beta) \\ c(a\alpha + b\beta) \end{bmatrix}.$$

同様にして、

$$\psi_2^2 = \begin{bmatrix} 0 \\ d(a\alpha + b\beta) \end{bmatrix}, \psi_{-2}^2 = \begin{bmatrix} a(c\alpha + d\beta) \\ 0 \end{bmatrix}.$$

$k \neq 0, \pm 2$ ならば、$k \pm 1 \neq \pm 1$ より、

$$\psi_k^2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

X_n を時刻 n における量子ウォークとして、時刻 n で場所 k に粒子が存在する 確率 を、

$$P(X_n = k) = ||\psi_k^n||^2 = |\alpha_k^n|^2 + |\beta_k^n|^2$$

で定義する。

例 アダマールウォーク

$$\mathbf{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix}$$

のとき、離散時間量子ウォークを アダマールウォーク という。このとき、確率は以下のようになる：

n/k	-2	-1	0	1	2	計
0	0	0	1	0	0	1
1	0	1/2	0	1/2	0	1
2	1/4	0	1/2	0	1/4	1

一般に、1次元2状態離散時間量子ウォークの $n \to \infty$ の確率分布 (極限分布) を与えたのが、以下の今野の定理 ([20] を見よ) である。

定理 5 (Konno) 量子ビット

$$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} (|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1)$$

でもって、原点から出発する量子ウォークについて、

$$\frac{X_n}{n} \longrightarrow Z \ (n \to \infty) \ [\text{弱収束}]$$

即ち、

$$\lim_{n\to\infty} P(u \leq \frac{X_n}{n} \leq v) = \int_u^v \frac{\sqrt{1-|a|^2}}{\pi(1-z^2)\sqrt{|a|^2-z^2}} \{1 - (|\alpha|^2 - |\beta|^2 + \frac{a\alpha\bar{b}\bar{\beta} + \bar{a}\bar{\alpha}b\beta}{|a|^2} z\} dz.$$

例 アダマールウォークのときは、

$$\lim_{n\to\infty} P(u \leq \frac{X_n}{n} \leq v) = \int_u^v \frac{1}{\pi(1-z^2)\sqrt{1-z^2}} dz$$

となる。

2.4. グラフ上の離散時間 Grover 量子ウォーク

G を n 点、m 辺のグラフとし、G の点 v の次数を $d_v = \deg_G v$ と略記する。$D(G)$ 上の離散時間量子ウォークを Emms [9] に従って考える。

$D(G)$ の各 arc $e = (u, v)$ について、pure な状態 $\vec{x}_e = \vec{x}_{uv}$ を指定し、$\{\vec{x}_e \mid e \in D(G)\}$ が、ヒルベルト空間 $\mathbf{C}^{2m}$ の正規直交底となるようにする。arc (u, v) から arc (w, x) への 遷移 は、$v = w$ のときのみ生ずるとする。量子ウォークの 状態 は、

$$\psi = \sum_{(u,v)\in D(G)} \alpha_{uv} \vec{x}_{uv}, \ \alpha_{uv} \in \mathbf{C}$$

とし、$\vec{x}_{uv}$ の存在確率を、

$$P(\vec{x}_e) = \alpha_{uv} \overline{\alpha_{uv}}$$

で与える。但し、

$$\sum_{(u,v)\in D(G)} \alpha_{uv} \overline{\alpha_{uv}} = 1$$

とする。

古典的離散時間ランダムウォークにおいて、状態 ψ_{t+1}, ψ_t の関係はユニタリ行列 $\mathbf{U}$ を通して、$\psi_{t+1} = \mathbf{U}\psi_t$ のように与えられるので、これに倣って、$D(G)$ 上の離散時間量子ウォークは、次の Grover 遷移行列 $\mathbf{U} = (U_{(w,x),(u,v)})$([14] を見よ):

$$U_{(w,x),(u,v)} = \begin{cases} 2/d_v & \text{if } v = w, x \neq u, \\ 2/d_v - 1 & \text{if } v = w, x = u, \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

によって、時間発展が与えられる。このようにしてできる $D(G)$ 上の離散時間量子ウォークを、G の離散時間 Grover 量子ウォーク という。

例 G を、$V(G)=\{u,v,w,x\}$ で、$D(G)=\{(u,v),(v,u),(v,w),(w,v),(v,x),(x,v)\}$ なるグラフとする。$D(G)$ の order を、$(u,v),(v,u),(w,v),(v,w),(x,v),(v,x)$ とするとき、Grover 遷移行列 $\mathbf{U}$ は、

$$\mathbf{U}=\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1/3 & 0 & 2/3 & 0 & 2/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 2/3 & 0 & -1/3 & 0 & 2/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 2/3 & 0 & 2/3 & 0 & -1/3 & 0 \end{bmatrix}$$

となる。

今、$\psi_t = a\vec{x}_{uv} - b\vec{x}_{wv}$ $(a^2+b^2=1)$ のとき、$\psi_{t+1}=\mathbf{U}\psi_t = a\mathbf{U}\vec{x}_{uv} - b\mathbf{U}\vec{x}_{wv}$ となり、$\vec{x}_{uv} = {}^T(100000)$,$\vec{x}_{wv}={}^T(001000)$ より、

$$\begin{aligned}\psi_{t+1} &= a^T(0\ -1/3\ 0\ 2/3\ 0\ 2/3) - b^T(0\ 2/3\ 0\ -1/3\ 0\ 2/3) \\ &= (-1/3a-2/3)\vec{x}_{vu} + (2/3a+1/3b)\vec{x}_{vw} + 2/3(a-b)\vec{x}_{vx}\end{aligned}$$

となる。ここで、$(-1/3a-2/3)^2+(2/3a+1/3b)^2+4/9(a-b)^2=a^2+b^2=1.$

グラフ上の離散時間 Grover 量子ウォークの確率の極限定理などの解析は、全く手つかずである。

2.5. グラフの同型問題

2つのグラフ G,H が 同型、即ち、$G \cong H$ となるのは、全単射 $f: V(G) \longrightarrow V(H)$ が存在して、$uv \in E(G)$ で有るのは、$f(u)f(v) \in E(H)$ のとき、そしてそのときに限ることである。このとき、グラフの同型問題は、次のように与えられる。

グラフの同型問題　2つのグラフ G,H について、$G \cong H$ かどうかを判定せよ。

この問題は難しい。次のような問題も考えられている。

問題2　任意のグラフ G,H について、

$$G \cong H \Leftrightarrow f(G)=f(H)$$

を満たすグラフの不変量 $f(G)$ は存在するか。

グラフの特性多項式 $\Phi(G;\lambda)=\det(\lambda\mathbf{I}-\mathbf{A}(G))$ は、その様な不変量になり得ない。$\Phi(G;\lambda)=\Phi(H;\lambda)$ かつ $G \ncong H$ となるグラフ G,H が存在する ([3])。また、Ihara ゼータ関数もその様な不変量になり得ない。$\mathbf{Z}(G,u)=\mathbf{Z}(H;u)$ かつ $G \ncong H$ となるグラフ G,H が存在する ([7])。

一方、量子ウォークを用いて、Shiau, Joynt and Coopersmith [33], Emms, Severini, Wilson,and Hancock [11], Douglas and Wang [8], Gamble, Friesen, Zhou, Joynt and Coopersmith [12] によって、グラフの同型判定アルゴリズムや、グラフの同型問題に対する新しいアプローチが提案されている。

また、Emms, Hancock, Severini and Wilson [10] により、問題2を部分的に肯定する予想が提出された。

実正方行列 $\mathbf{A}=(a_{ij})$ について、$\mathbf{A}$ の positive support $\mathbf{A}^+=(a^+_{ij})$ は、

$$a^+_{ij}=\begin{cases} 1 & \text{if } a_{ij}>0, \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

と定義される。

予想 1 (Emms, Hancock, Severini and Wilson) G, H が同じパラメーターを持つ、強正則グラフ のとき、

$$G \cong H \Leftrightarrow Spec((\mathbf{U}(G)^3)^+) = Spec((\mathbf{U}(H)^3)^+).$$

ここで、$Spec(\mathbf{F})$ は正方行列 $\mathbf{F}$ のスペクトル (固有値全体)、$\mathbf{U}(G)$ は G の Grover 遷移行列である。

G が 強正則グラフ、あるいは、パラメーター n, k, λ, μ を持つ、(n, k, λ, μ)-グラフ とは、次の４つの条件を満たすことである：

- $|V(G)| = n$；
- G の各点の次数 v は、$d_v = k$；
- 隣接する任意の２点 u, v は、λ 個の点に隣接する；
- 隣接しない任意の２点 x, y は、μ 個の点に隣接する。

例えば、完全２部グラフ $K_{n,n}$ は、$(2n, n, 0, n)$-グラフである。正則グラフにすると予想は不成立。14 点の正則グラフの反例が有る ([10])。また、同型でない $(16, 6, 2, 2)$-グラフは２個であり、同型でない $(36, 15, 6, 6)$-グラフは 32,548 通りあることがわかっている ([11])。Emms et al [11] は、いくつかの場合について、予想が成立することを確かめた。

もし、予想が成立するならば、小さいグラフの族 (無限集合?) において、$Spec((\mathbf{U}(G)^3)^+)$、あるいは、$\Phi((\mathbf{U}(G)^3)^+; \lambda)$ が、問題２の不変量を与えることになる。

3. グラフの第２種 weighted ゼータ関数と Grover 遷移行列の特性多項式

3.1. グラフの第２種 weighted ゼータ関数

G を n 点、m 辺をもつ連結グラフ、$\mathbf{W} = \mathbf{W}(G)$ を G の weighted matrix とする。このとき、2 つの $2m \times 2m$ 行列 $\mathbf{B}_w = \mathbf{B}_w(G) = (\mathbf{B}^{(w)}_{e,f})_{e,f \in D(G)}$ と $\mathbf{J}_0 = \mathbf{J}_0(G) = (\mathbf{J}_{e,f})_{e,f \in D(G)}$ は次のように与えられる：

$$\mathbf{B}^{(w)}_{e,f} = \begin{cases} w(f) & \text{if } t(e) = o(f), \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \mathbf{J}_{e,f} = \begin{cases} 1 & \text{if } f = e^{-1}, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

このとき、G の 第 2 種 weighted ゼータ関数 は、次のように定義される：

$$\mathbf{Z}_1(G, w, t) = \det(\mathbf{I}_n - t(\mathbf{B}_w - \mathbf{J}_0))^{-1}.$$

各 $e \in D(G)$ について $w(e) = 1$ ならば、G の第 2 種 weighted ゼータ関数は、G の Ihara ゼータ関数である。

グラフの第 2 種 weighted ゼータ関数の行列式表示は、次のようになる ([31] を見よ)。

定理 6 (Sato) G を連結グラフ、$\mathbf{W} = \mathbf{W}(G)$ を G の weighted matrix とする。このとき、G の第 2 種 weighted ゼータ関数は、次のように与えられる：

$$\mathbf{Z}_1(G, w, t)^{-1} = (1 - t^2)^{m-n} \det(\mathbf{I}_n - t\mathbf{W}(G) + t^2(\mathbf{D}_w - \mathbf{I}_n)).$$

ここで、$n =| V(G) |$, $m =| E(G) |$ で、$\mathbf{D}_w = (d_{ij})$ は、$d_{ii} = \sum_{o(e)=v_i} w(e)$, $V(G) = \{v_1, \cdots, v_n\}$ なる対角行列とする。

3.2. Grover 遷移行列の特性多項式

ここで、グラフの Grover 遷移行列の特性多項式を与える。

G を n 点、m 辺の連結グラフとするとき、$n \times n$ 行列 $\mathbf{T}(G) = (T_{uv})_{u,v \in V(G)}$ を次のように与える：

$$T_{uv} = \begin{cases} 1/(\deg_G u) & \text{if } (u, v) \in D(G), \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

定理 7 (Konno and Sato) G を n 点 $v_1, \dots, v_n$ と m 辺をもつ連結グラフとする。G の Grover 遷移行列 $\mathbf{U}$ の特性多項式：

$$\det(\lambda \mathbf{I}_{2m} - \mathbf{U}) = (\lambda^2 - 1)^{m-n} \det((\lambda^2 + 1)\mathbf{I}_n - 2\lambda \mathbf{T}(G)) = \frac{(\lambda^2 - 1)^{m-n} \det((\lambda^2 + 1)\mathbf{D} - 2\lambda \mathbf{A}(G))}{d_{v_1} \cdots d_{v_n}}.$$

Proof. G を n 点、m 辺の連結グラフとし、$V(G) = \{v_1, \dots, v_n\}$、$D(G) = \{e_1, \dots, e_m, e_1^{-1}, \dots, e_m^{-1}\}$ とする。各 $j = 1, \dots, n$ について $d_j = d_{v_j} = \deg v_j$ とおく。このとき、$2m \times 2m$ 行列 $\mathbf{B}_d = (B_{ef})_{e,f \in D(G)}$：

$$B_{ef} = \begin{cases} 2/d_{o(f)} & \text{if } t(e) = o(f), \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

を考える。定理 6 により、

$$\det(\mathbf{I}_{2m} - t(\mathbf{B}_d - \mathbf{J}_0)) = (1 - t^2)^{m-n} \det(\mathbf{I}_n - t\mathbf{W}_d(G) + t^2(\mathbf{D}_d - \mathbf{I}_n)).$$

ここで、$\mathbf{W}_d(G) = (w_{uv})_{u,v \in V(G)}$ と $\mathbf{D}_d = (d_{uv})_{u,v \in V(G)}$ は次のように与えられる：

$$w_{uv} = \begin{cases} 2/d_u & \text{if } (u,v) \in D(G), \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \qquad d_{uv} = \begin{cases} 2 & \text{if } u = v, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

また、

$$d_j \times (2/d_j) = 2 \ (1 \le j \le n)$$

に注意する。これから、

$$\det(\mathbf{I}_{2m} - t({}^T\mathbf{B}_d - {}^T\mathbf{J}_0)) = (1 - t^2)^{m-n} \det(\mathbf{I}_n - t\mathbf{W}_d(G) + t^2 \mathbf{I}_n).$$

ところで、

$${}^T\mathbf{B}_d - {}^T\mathbf{J}_0 = \mathbf{U} \ \textit{and} \ \mathbf{W}_d(G) = 2\mathbf{T}(G).$$

従って、

$$\det(\mathbf{I}_{2m} - t\mathbf{U}) = (1 - t^2)^{m-n} \det((1 + t^2)\mathbf{I}_n - 2t\mathbf{T}(G)).$$

今、$t = 1/\lambda$ とおくと、

$$\det\left(\mathbf{I}_{2m} - \frac{1}{\lambda}\mathbf{U}\right) = \left(1 - \frac{1}{\lambda^2}\right)^{m-n} \det\left(\left(1 + \frac{1}{\lambda^2}\right)\mathbf{I}_n - \frac{2}{\lambda}\mathbf{T}(G)\right)$$

を得る。これから、

$$\det(\lambda \mathbf{I}_{2m} - \mathbf{U}) = (\lambda^2 - 1)^{m-n} \det((\lambda^2 + 1)\mathbf{I}_n - 2\lambda \mathbf{T}(G)).$$

次に、

$$\mathbf{T}(G) = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{A}(G).$$

このとき、

$$\begin{aligned} \det(\lambda \mathbf{I}_{2m} - \mathbf{U}) &= (\lambda^2 - 1)^{m-n} \det((\lambda^2 + 1)\mathbf{I}_n - 2\lambda \mathbf{D}^{-1}\mathbf{A}(G)) \\ &= (\lambda^2 - 1)^{m-n} \det \mathbf{D}^{-1} \det((\lambda^2 + 1)\mathbf{D} - 2\lambda \mathbf{A}(G)). \end{aligned}$$

$\det \mathbf{D}^{-1} = 1/(d_{v_1} \cdots d_{v_n})$ だから、

$$\det(\lambda \mathbf{I}_{2m} - \mathbf{U}) = \frac{(\lambda^2 - 1)^{m-n} \det((\lambda^2 + 1)\mathbf{D} - 2\lambda \mathbf{A}(G))}{d_{v_1} \cdots d_{v_n}}.$$

Q.E.D.

定理 7 より、Grover 遷移行列 $\mathbf{U}$ のスペクトルを、行列 $\mathbf{T}(G)$ スペクトルで表示する ([10])。

Corollary 1 (Emms, Hancock, Severini and Wilson) G を n 点と m 辺をもつ連結グラフとする。Grover 遷移行列 $\mathbf{U}$ の固有値のうち、$2n$ 個は、

$$\lambda = \lambda_T \pm i\sqrt{1-\lambda_T^2}.$$

ここで、λ_T は行列 $\mathbf{T}(G)$ の固有値である。$\mathbf{U}$ の残りの $2(m-n)$ 個の固有値は ± 1 であり、同じ多重度をもつ。

Proof. 定理 7 より、

$$\det(\lambda \mathbf{I}_{2m} - \mathbf{U}) = (\lambda^2-1)^{m-n} \prod_{\lambda_T \in Spec(\mathbf{T}(G))} (\lambda^2 + 1 - 2\lambda_T \lambda).$$

$\lambda^2 + 1 - 2\lambda_T \lambda = 0$ を解くと、

$$\lambda = \lambda_T \pm i\sqrt{1-\lambda_T^2}$$

が得られ、結果が出る。Q.E.D.

Emms et al. [10] は、Grover 遷移行列の成分を調べ、行列の固有ベクトルの性質を用いて、Grover 遷移行列のスペクトルを決定した。

G が正則グラフのとき、Grover 遷移行列 $\mathbf{U}$ の固有値は次のようになる。

Corollary 2 G を n 点 $v_1, \dots v_n$ と m 辺をもつ連結 k-正則グラフとする。Grover 遷移行列 $\mathbf{U}$ の固有値のうち、$2n$ 個は、

$$\lambda = \frac{\lambda_A \pm i\sqrt{k^2-\lambda_A^2}}{k}.$$

ここで、λ_A は行列 $\mathbf{A}(G)$ の固有値である。$\mathbf{U}$ の残りの $2(m-n)$ 個の固有値は ± 1 であり、同じ多重度をもつ。

Proof. 定理 7 の第 2 式より、$\mathbf{D} = k\mathbf{I}_n$ とおくと、

$$\det(\lambda \mathbf{I}_{2m} - \mathbf{U}) = \frac{(\lambda^2-1)^{m-n}}{d_{v_1} \cdots d_{v_n}} \prod_{\lambda_A \in Spec(\mathbf{A}(G))} (k\lambda^2 + k - 2\lambda_A \lambda).$$

$k\lambda^2 + k - 2\lambda_A \lambda = 0$ を解くと、

$$\lambda = \frac{\lambda_A \pm i\sqrt{k^2-\lambda_A^2}}{k}$$

が得られ、結果が出る。Q.E.D.

3.2. Grover 遷移行列の positive support の特性多項式

正則グラフ G の Grover 遷移行列の positive support $\mathbf{U}^+$ のスペクトルを、隣接行列 $\mathbf{A}(G)$ のスペクトルで表示する ([10])。

Ren, Aleksic, Emms, Wilson and Hancock [30] は、Grover 遷移行列の positive support $\mathbf{U}^+$ と、Ihara ゼータ関数の行列式表示に現れる edge matrix の関係を導いた。

定理 8 (Ren, Aleksic, Emms, Wilson and Hancock) G を連結グラフ、G の最小次数 δ は $\delta(G) \geq 2$ とする。また、$\mathbf{B} - \mathbf{J}_0$ を G の Perron-Frobenius operator、あるいは、edge matrix とし、$\mathbf{U}$ は G の Grover 遷移行列とする。このとき、$\mathbf{B} - \mathbf{J}_0$ は $\mathbf{U}$ の positive support の転置行列である：

$$\mathbf{B} - \mathbf{J}_0 = ({}^T\mathbf{U})^+.$$

定理 2 と定理 8 より、Grover 遷移行列の positive support $\mathbf{U}^+$ の特性多項式を得る。

定理 9 (Konno and Sato) G を n 点 $v_1, \dots, v_n$ と m 辺をもつ連結グラフとする。G の Grover 遷移行列の positive support $\mathbf{U}^+$ の特性多項式：

$$\det(\lambda \mathbf{I}_{2m} - \mathbf{U}^+) = (\lambda^2 - 1)^{m-n} \det((\lambda^2 - 1)\mathbf{I}_n - \lambda \mathbf{A}(G) + \mathbf{D}).$$

Proof. 定理 2 と定理 8 より、

$$\begin{aligned} \det(\lambda \mathbf{I}_{2m} - u\mathbf{U}^+) &= \det(\mathbf{I}_{2m} - u({}^T\mathbf{B} - {}^T\mathbf{J}_0)) \\ &= \det(\mathbf{I}_{2m} - u(\mathbf{B} - \mathbf{J}_0)) \\ &= (1-t^2)^{m-n} \det(\mathbf{I}_n - u\mathbf{A}(G) + u^2(\mathbf{D} - \mathbf{I}_n)). \end{aligned}$$

今、$u = 1/\lambda$ とおくと、

$$\det\left(\mathbf{I}_{2m} - \frac{1}{\lambda}\mathbf{U}^+\right) = \left(1 - \frac{1}{\lambda^2}\right)^{m-n} \det\left(\mathbf{I}_n - \frac{1}{\lambda}\mathbf{A}(G) + \frac{1}{\lambda^2}(\mathbf{D} - \mathbf{I}_n)\right)$$

を得る。これから、

$$\det(\lambda \mathbf{I}_{2m} - \mathbf{U}^+) = (\lambda^2 - 1)^{m-n} \det((\lambda^2 - 1)\mathbf{I}_n - \lambda \mathbf{A}(G) + \mathbf{D}).$$

Q.E.D.

定理 9 より、正則グラフ G の Grover 遷移行列の positive support $\mathbf{U}^+$ のスペクトルを、隣接行列 $\mathbf{A}(G)$ のスペクトルで表示する

Corollary 3 (Emms, Hancock, Severini and Wilson) Let G を n 点と m 辺をもつ連結 k-正則グラフ、$\delta(G) \geq 2$ とする。Grover 遷移行列の positive support $\mathbf{U}^+$ の固有値のうち、$2n$ 個は、

$$\lambda = \frac{\lambda_A}{2} \pm i\sqrt{k - 1 - \lambda_A^2/4}.$$

ここで、λ_A は $\mathbf{A}(G)$ の固有値である。$\mathbf{U}^+$ の残りの $2(m-n)$ 個の固有値は ± 1 であり、同じ多重度をもつ。

Proof. 定理 9 より、$\mathbf{D} = k\mathbf{I}_n$ とおくと、

$$\begin{aligned} \det(\lambda \mathbf{I}_{2m} - \mathbf{U}^+) &= (\lambda^2 - 1)^{m-n} \det(\lambda^2 + k - 1)\mathbf{I}_n - \lambda \mathbf{A}(G)) \\ &= (\lambda^2 - 1)^{m-n} \textstyle\prod_{\lambda_A \in Spec(\mathbf{A}(G))} (k\lambda^2 + k - 1 - \lambda_A \lambda). \end{aligned}$$

$k\lambda^2 + k - 1 - \lambda_A \lambda = 0$ を解くと、

$$\lambda = \frac{\lambda_A}{2} \pm i\sqrt{k - 1 - \lambda_A^2/4}$$

が得られ、結果が出る。Q.E.D.

最後に、$Spec(\mathbf{U})$, $Spec(\mathbf{U}^+)$, $Spec((\mathbf{U}^2)^+)$ が、予想の不変量にならない理由をを述べる。

G, H を 2 つの (n, k, λ, μ)-グラフ (強正則グラフ) とすると、

$$Spec(\mathbf{A}(G)) = Spec(\mathbf{A}(H)) = \{k, \theta, \tau\}.$$

ここで、

$$\theta = \frac{(\lambda - \tau) + \sqrt{\Delta}}{2}, \tau = \frac{(\lambda - \tau) + \sqrt{\Delta}}{2}, \Delta = (\lambda - \tau)^2 + 4(k - \mu)$$

で、θ, τ の多重度は n, k, λ, μ で決まる ([13] を見よ)。

Cor 2、 Cor 3 と Emms et al [10] の結果より、$\mathbf{U}, \mathbf{U}^{+}, (\mathbf{U}^{2})^{+}$ の固有値は、隣接行列の固有値で決まる。これから、

$$Spec(\mathbf{U}(G)) = Spec(\mathbf{U}(H)), Spec(\mathbf{U}(G)^{+}) = Spec(\mathbf{U}(H)^{+}), Spec((\mathbf{U}(G)^{2})^{+}) = Spec((\mathbf{U}(H)^{2})^{+}).$$

よって、$G \cong H$ は、$Spec(\mathbf{U})$, $Spec(\mathbf{U}^{+})$, $Spec((\mathbf{U}^{2})^{+})$ で判定できない。

4. Further Remark

(1) 定理 9 を用いて、$(\mathbf{U}^{2})^{+}$ の特性多項式を導き、そのスペクトルを $\mathbf{A}(G)$ のスペクトルで表示できる。

(2) これからの課題：

1. $(\mathbf{U}^{3})^{+}$ の形の決定
2. $(\mathbf{U}^{3})^{+}$ の特性多項式、スペクトルの決定 $\longrightarrow$ 予想の解決に至るか?
3. $(\mathbf{U}^{n})^{+}$ の特性多項式の決定

1,2,3 は、誰もやっていない。特に、3 はかなり、困難と思われる。

謝辞

森田英章先生のご助言とご協力に、感謝いたします。

参考文献

[1] D. Aharonov, A. Ambainis, J. Kempe, and U. V. Vazirani, Quantum walks on graphs, Proc. of the 33rd Annual ACM Symposium on Theory of Computing, 50-59, 2001.

[2] A. Ambainis, E. Bach, A. Nayak, A. Vishwanath and J. Watrous, One-dimensional quantum walks, Proc. of the 33rd Annual ACM Symposium on Theory of Computing, 37-49, 2001.

[3] G. A. Baker, Drum shapes and isospectral graphs, J. Math. Phys. **7** (1966), 2238-2243.

[4] L. Bartholdi, Counting paths in graphs, Enseign. Math. **45** (1999), 83-131.

[5] H. Bass, The Ihara-Selberg zeta function of a tree lattice, Internat. J. Math. **3** (1992), 717-797.

[6] A. M. Childs, E. Farhi and S. Gutmann, An example of the difference between quantum and classical random walks, Quantum Inform. Process. **1** (2002), 35-43.

[7] Y. Cooper, Properties determined by the Ihara zeta function of a graph, Electronic J. Combin. **16** (20009), R84.

[8] B. L. Douglas and J. B. Wang, Classically efficient graph isomorphism algorithm using quantum walks, arXiv: 0705.2531.

[9] D. M. Emms, Analysis of graph structure using quantum walks, Ph. D. Thesis, University of York, 2008.

[10] D. M. Emms, E. R. Hancock, S. Severini and R. C. Wilson, A matrix representation of graphs and its spectrum as a graph invariant, Electronic J. Combin. **13** (2006), R34.

[11] D. M. Emms, S. Severini, R. C. Wilson and E. R. Hancock, Coined quantum walks lift the cospectrality of graphs and trees, Pattern Recognit. **42** (2009), 1988-2002.

[12] J. K. Gamble, M. Friesen, D. Zhou, R. Joynt and S. N. Coopersmith, Two-particle quantum walks applied to the graph isomorphism problem, Phys. Rev. A **81** (2010), 52313.

[13] C, Godsil and G. Royle, *Algebraic Graph Theory*, Springer, New York, 2001.

[14] L. Grover, A first quantum mechanical algorithm for database search, Proc. of the 28 th Annual ACM Symposium on Theory of Computing, 212-219, 1996.

[15] S. P. Gudder, *Quantum Probability*, Academic Press Inc. CA, 1988.

[16] K. Hashimoto, Zeta Functions of Finite Graphs and Representations of p-Adic Groups, Adv. Stud. Pure Math. Vol. 15, pp. 211-280, Academic Press, New York (1989).

[17] K. Hashimoto, On the zeta- and L-functions of finite graphs, Internat. J. Math. **1** (1990), 381-396.

[18] K. Hashimoto, Artin-type L-functions and the density theorem for prime cycles on finite graphs, Internat. J. Math. **3** (1992), 809-826.

[19] Y. Ihara, On discrete subgroups of the two by two projective linear group over p-adic fields, J. Math. Soc. Japan **18** (1966), 219-235.

[20] N. Konno, Quantum random walks in one dimension, Quantum Inform. Process. **1** (2002), 345-354.

[21] 今野紀雄, 「量子ウォークの数理」, 産業図書, 2008.

[22] N. Konno and I. Sato, On the relation between quantum walks and zeta functions, Quantum Inform. Process. (in press).

[23] M. Kotani and T. Sunada, Zeta functions of finite graphs, J. Math. Sci. U. Tokyo **7** (2000), 7-25.

[24] A. Lubotzky, Cayley graphs: Eigenvalues, expanders and random walks, in: Surveys in Combinatorics, in: London Math. Soc. Lecture Note Ser., vol. 218, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1995, pp. 155-189.

[25] 町田拓也, 時間依存型１次元離散時間量子ウォークの極限定理, 学位論文, 横浜国立大学, 2010.

[26] D. Meyer, From quantum cellular automata to quantum lattice gases, J. Statist. Phys. **85** (1996), 551-574.

[27] H. Mizuno and I. Sato, Weighted zeta functions of graphs, J. Combin. Theory Ser. B **91** (2004), 169-183.

[28] A. Nayak, and A. Vishwanath, Quantum walk on the line, DIMACS Technical report, 2000-43, 2000.

[29] S. Northshield, A note on the zeta function of a graph, J. Combin. Theory Ser. B **74** (1998), 408-410.

[30] P. Ren, T. Aleksic, D. Emms, R.C. Wilson and E.R. Hancock, Quantum walks, Ihara zweta functions and cospectrality in regular graphs, Quantum Inform. Process. (in press).

[31] I. Sato, A new Bartholdi zeta function of a graph. Int. J. Algebra **1** (2007), 269–281.

[32] J. -P. Serre, *Trees,* Springer-Verlag, New York, 1980.

[33] S. -Y. Shiau, R. Joynt and S. N. Coopersmith, Physically-motivatred dynamical algorithms for the graph isomorphism problem, Quantum Inform. Comput. **5** (2005), 492-506.

[34] H. M. Stark and A. A. Terras, Zeta functions of finite graphs and coverings, Adv. Math. **121** (1996), 124-165.

[35] H. M. Stark and A. A. Terras, Zeta functions of finite graphs and coverings. III, Adv. Math. **208** (2007), 467-489.

[36] T. Sunada, L-Functions in Geometry and Some Applications, in Lecture Notes in Math., Vol. 1201, pp. 266-284, Springer-Verlag, New York (1986).

[37] 砂田利一, 「基本群とラプラシアン」, 紀伊国屋書店, 1988.

[38] A. Terras, *Fourier Analysis on Finite Groups and Applications*, Cambridge Univ. Press, Cambridge

(1999).

[39] A. Terras, Zeta functions and chaos, preprint.

[40] Y. Watanabe and K. Fukumizu, Graph zeta function in the Bethe free energy and loopy belief propagation, to appear in Advances in Neural Information Processing Systems, 2010.