グラフの量子ウォークの遷移行列のスペクトル

佐藤巌　**小山高専**

0. 始めに

最近、量子ウォークの研究が盛んになり、量子コンピューターを始めとして、いろいろな分野に応用されている。例えば、グラフの同型問題について応用されている。量子ウォークの時間発展を与える遷移行列としては、スペクトルが分かっているユニタリ行列が都合が良く、いろいろなところで、グラフ上の離散時間量子ウォークの遷移行列である、Grover 遷移行列が用いられている。

Emms et al は、Grover 遷移行列を使って、グラフの同型問題について、有効な予想を提出し、そのスペクトルを与えた。また、そのスペクトルの計算に、グラフのゼータ関数が有効であることも分かってきた。

今回は、先ず、グラフ上の量子ウォークとグラフの同型問題の関係について概略を述べ、Konno-Sato の定理を中心に、Grover 遷移行列のスペクトルを見ていく。

1. グラフ上の離散時間 Grover 量子ウォーク

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 の点 v の 次数$d_v=\deg_G v$ は、v から出ている辺の個数である。G の各辺 uv を、反対向きの 2 つの有向辺 (arc) $(u,v),(v,u)\in V\times V$ で置き換えた有向グラフを、G の symmetric digraph といい、その arc set を、$D(G)=\{(u,v),(v,u)|uv\in E(G)\}$ で表す。

$D(G)$ 上の離散時間量子ウォークを Emms [2] に従って述べる。

$D(G)$ 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、$\sum_{(u,v)\in D(G)}\alpha_{uv}\overline{\alpha_{uv}}=1$ と仮定する。

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 の関係は推移確率行列 $\mathbf{U}$ 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 $\mathbf{U}=(U_{(w,x),(u,v)})$([6] 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。

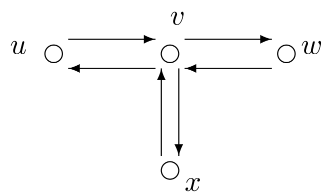

図 1　グラフ G

例

図 1 のグラフを G とし、$D(G)$ の order を、$(u,v),(v,u),(w,v),(v,w),(x,v),(v,x)$ とするとき、G の 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。

状態 ψ_t を、$\psi_t=a\vec{x}_{uv}-b\vec{x}_{wv}$ で与えるとき、

$$\psi_{t+1}=\mathbf{U}\psi_t=a\mathbf{U}\vec{x}_{uv}-b\mathbf{U}\vec{x}_{wv}$$

となり、$\vec{x}_{uv}={}^T(100000), \vec{x}_{wv}={}^T(001000)$ であるから、

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

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

量子ウォークは、量子コンピューターより派生した経緯もあり、必然的にアルゴリズム的な話題に関係し、特に、グラフの同型問題に置いては、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。

同型でないグラフを区別するために、従来より、グラフの隣接行列や、ラプラシアンのスペクトルが使われているが、どちらも反例があり、新たな行列として、Grover 遷移行列が登場した。Emms et al は、Grover 遷移行列や、その positive support 等のスペクトルを調べ、あるクラスの

グラフの同型性判定が、Grover 遷移行列の 3 乗の positive support のスペクトルで可能ではないかという予想を提示した。

2. グラフの同型問題と Grover 遷移行列のスペクトル

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、かつ、$uv \in E(G)$ 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。

この問題は難しい事が分かっている。Emms, Hancock, Severini and Wilson [3] により、次の予想が提出された。

実正方行列 $\mathbf{A} = (a_{ij})$ について、$\mathbf{A}$ の positive support $\mathbf{A}^+ = (a^+_{ij})$ は、$a_{ij} > 0$ のとき $a^+_{ij} = 1$、さもなければ $a^+_{ij} = 0$ 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 ([1] を見よ)：(1) $|V(G)| = n$；(2) G の各点の次数 v は、$d_v = k$；(3) 隣接する任意の 2 点 u, v は、λ 個の点に隣接する；(4) 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 ([3])。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 ([4])。Emms et al [4] は、64 点までの強正則グラフについて、予想が成立することを確かめた。

3. Grover 遷移行列のスペクトル

Emms et al. [3] 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 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：$(u, v) \in D(G)$ ならば $T_{uv} = 1/(\deg_G u)$、さもなければ $T_{uv} = 0$. $\mathbf{T}(G)$ は、G の単純ランダムウォークの遷移行列である。

命題 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。

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。グラフ G の各点 v の次数が $d_v = k$ を満たすとき、G を k-正則 グラフという。

命題 2 (Emms, Hancock, Severini and Wilson) 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。行列 $\mathbf{A}(G) = (a_{uv})_{u,v \in V(G)}$ は、G の 隣接行列 といい、次のように与える：$(u, v) \in D(G)$ ならば $a_{uv} = 1$、さもなければ $a_{uv} = 0$.

今、グラフの Grover 遷移行列の特性多項式を与える ([8] を見よ)。n 点連結グラフ G の $n \times n$ 対角行列 $\mathbf{D} = (d_{uv})_{u,v \in V(G)}$ は、次のように与えられる：$u = v$ ならば $d_{uv} = d_u$、さもなければ $d_{uv} = 0$.

定理 1 (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：

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

定理 1 より、命題 1,2 の証明が、次のように得られる：

命題 1 の証明. 定理 1 の第 1 式より、

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

$\lambda^2 + 1 - 2\lambda_T \lambda = 0$ 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.

命題 2 の証明. 定理 1 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.

4. Grover 遷移行列の positive support のスペクトル

Emms et al. [3] は、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した。

命題 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、$k \geq 2$ 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。

Grover 遷移行列の positive support $\mathbf{U}^+$ の特性多項式は次のように与えられる ([8] を見よ)。

定理 2 (Konno and Sato) G を n 点 $v_1, \ldots, v_n$ 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：

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

定理 2 より、命題 3 の証明が次のように得られる：

命題 3 の証明. 定理 2 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.

5. Grover 遷移行列の 2 乗の positive support $(\mathbf{U}^2)^+$ のスペクトル

定理 2 より、正則グラフの $(\mathbf{U}^2)^+$ の特性多項式は次のように与えられる ([7] を見よ)。

定理 3 (Higuchi, Konno, Sato and Segawa) G を n 点、m 辺の連結 k-正則グラフとし、$k > 2$ とする。このとき、positive support $(\mathbf{U}^2)^+$ の特性多項式：

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

Emms et al. [3] は、正則グラフ G の $(\mathbf{U}^2)^+$ のスペクトルを決定した。

定理 3 より、正則グラフ G の Grover 遷移行列の 2 乗の positive support $(\mathbf{U}^2)^+$ のスペクトルが、隣接行列 $\mathbf{A}(G)$ のスペクトルで表示される。

命題 4 (Emms, Hancock, Severini and Wilson) G を n 点、m 辺の連結 k-正則グラフとし、$k > 2$ と仮定。このとき、positive support $(\mathbf{U}^2)^+$ の固有値のうち、$2n$ 個の固有値は、

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

ここで、λ_A は $\mathbf{A}(G)$ の固有値である。$(\mathbf{U}^2)^+$ の残りの $2(m-n)$ 個の固有値は 2 である。

Proof. 定理 3 より、

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

$\lambda^2 + (2k-4-\lambda_A^2)\lambda + (k-2)^2 + \lambda_A^2 = 0$ を解いて、

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

を得る。Q.E.D.

6. グラフの Grover 遷移行列の 3 乗の positive support $(\mathbf{U}^3)^+$

先ず、Godsil and Guo [5] の結果について述べる。Godsil and Guo は、$(\mathbf{U}^2)^+$ と $\mathbf{U}^+$ の関係を与えた。

定理 4 (Godsil and Guo) G を m 辺の連結 k-正則グラフとし、$k > 2$ と仮定。このとき、

$$(\mathbf{U}^2)^+ = (\mathbf{U}^+)^2 + \mathbf{I}_{2m}.$$

Godsil and Guo は、定理 4 を用いて、命題 4 の別証明を導いた。我々も、定理 2 と定理 4 から、定理 3 を得た。

このように、$(\mathbf{U}^2)^+$ と $\mathbf{U}^+$ の関係を調べることによって、いろいろなことが分かるので、$(\mathbf{U}^3)^+$ と $\mathbf{U}^+$ の関係を調べたい。

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

という行程を経て、予想の証明に到達できるかも知れない。

１について、部分的な結果が得られたので、それについて述べる。

グラフ G において、始点と終点以外に同じ点を含まない cycle を、essential cycle という。明らかに、essential cycle は backtracking や tail を含まない。G の essenntial cycle の長さの最小値を G の girth といい、$g(G)$ で表す。

グラフ G の Grover 遷移行列 $\mathbf{U}$ の 3 乗の positive support $(\mathbf{U}^3)^+$ の構造について、次の結果を得た ([7] を見よ)。

定理 5 (Higuchi, Konno, Sato and Segawa) G を連結 k-正則グラフとする。$k > 2$ かつ、$g(G) > 4$ と仮定。このとき、positive support $(\mathbf{U}^3)^+$ は次の形である：

$$(\mathbf{U}^3)^+ = (\mathbf{U}^+)^3 + {}^T\mathbf{U}^+.$$

この結果を予想 1 の攻略の糸口にしたいけれども、強正則グラフについては、定義から、$\lambda \geq 1$ ならば $g(G) = 3$ となるので、定理 5 は使えない。他の方法を模索しないと行けない。また、$\mathbf{U}^{+}$ と ${}^{T}\mathbf{U}^{+}$ は、一般に同時対角化可能ではないので、定理 5 より、$(\mathbf{U}^{3})^{+}$ の特性多項式を求めることはできない。

しかし、定理 5 は、$\mathbf{U}$、$\mathbf{U}^{+}$、$(\mathbf{U}^{2})^{+}$ の構造と、$(\mathbf{U}^{3})^{+}$ の構造には、大きな差があることを示しており、そのことが予想の正当性を示しているように見える。

今後の課題として、さらに、予想の解決に向けて、$(\mathbf{U}^{3})^{+}$ の構造等を調べていきたい。また、グラフの内周を大きくして、$(\mathbf{U}^{4})^{+}$ や、$(\mathbf{U}^{5})^{+}$ 等の構造を考えていきたい。

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] A. E. Brower and W. H. Haemers Spectra of Graphs , Springer-Verlag, New York (2011).

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

[3] 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.

[4] 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.

[5] C. Godsil and K. Guo, Quantum walks on regular graphs and eigenvalues. arXiv:1011.5460 (2010).

[6] 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.

[7] Yu. Higuchi, N. Konno, I. Sato and E. Segawa, A note on the discrete-time evolutions of quantum walk on a graph, preprint.

[8] N. Konno and I. Sato, On the relation between quantum walks and zeta functions, Quantum Inform. Process. **11** (2012), 341-349.