伊原ゼータ関数と量子ウォーク

佐藤巌　小山高専

概要

１９６６年に伊原康隆先生が伊原ゼータ関数を定義されてから、伊原ゼータ関数は、数論、代数、ランダムウォーク、組合せ論、グラフ理論、量子グラフ、量子ウォーク、イジング模型などいろいろな分野において研究されている。 伊原ゼータ関数には４つの表示がある：オイラー積、指数型母関数、橋本型行列式表示、伊原型行列式表示。伊原先生により発見された、伊原ゼータ関数の伊原型行列式表示は、その中でも著しい表示であり、極めて多くの情報を内包している。

今回の発表では、グラフの伊原ゼータ関数とその変形の伊原型行列式表示について述べ、その観点から、伊原ゼータ関数と量子ウォークの関係を考察する。

最近、グラフ上の離散時間量子ウォークが、グラフ同型問題に有効であることが判明し、色々なアプローチがなされている。Emms et al は、グラフ上の Grover walk の Grover(遷移) 行列、その正台やその 2 乗の正台のスペクトルを決定し、Grover 行列の 3 乗の正台のスペクトルが、強正則グラフの同型性判定に優れていることを示した。また、Grover 行列が、グラフの伊原ゼータ関数の橋本型行列式表示に現れる edge marix に深く、関連することが明らかになった。我々は、それらの特性多項式を、伊原ゼータ関数、第 2 種加重ゼータ関数の伊原形行列式表示を用いて決定し、それらのスペクトルを、直接与える。

1　伊原ゼータ関数の定義

1.1　History

1. *1966* 年*, Ihara [22]: On discrete subgroups of the two by two projective linear group over p-adic fields, J. Math. Soc. Japan 18 (1966), 219-235.*
   伊原先生は $PGL(2,F)$ (F：p-進体) のある離散群の共役類を数え上げるために、p-進 Selberg ゼータ関数 (**伊原ーセルバーグゼータ関数** or **伊原ゼータ関数**) を定義し、その**伊原型行列式表示 (伊原の定理)** を与えた。
2. *1980* 年*, Serre* [35]: Serre は伊原ゼータ関数は正則グラフのゼータ関数であることを指摘。
3. *1986* 年*, Sunada* [38]: 砂田先生は正則グラフに対して、伊原ゼータ関数のグラフ理論的定義及び、伊原の定理のグラフ理論的証明を与えた。
4. *1990* 年*, Hashimoto* [18]: 橋本先生は、一般のグラフに対して、*edge matrix* を用いた伊原ゼータ関数の橋本型行列式表示を与えた。
5. *1992* 年*, Bass* [4]: Bass は、一般のグラフに対して、伊原ゼータ関数の**隣接行列**を用いた伊原型行列式表示を与えた。

1.2　伊原ゼータ関数のオリジナルの定義

伊原先生は伊原ゼータ関数を、一般的な状況において定義した ([22])。また、伊原先生は [20,21] において、伊原ゼータ関数を研究されている。

G を抽象群とする。このとき、$x \in G$ に対して、x の長さ $\ell(x) \in \mathbb{N}$ は次のように定義される:

- (G, ℓ, I): $\ell = 0, 1, 2, \ldots$ について、

$$G_\ell \neq \phi, U = G_0 < G(\text{部分群})$$

かつ

$$G_\ell^{-1} = G_\ell, UG_\ell U = G_\ell, |U \setminus G_\ell| < \infty (\ell = 0, 1, 2, \ldots),$$

- (G, ℓ, II):

$$|U \setminus G_1| = q + 1$$

かつ

1. $G_1^2 = G_2 + (q+1)U$,
2. $G_1 G_\ell = G_{\ell+2} + qG_{\ell-1} (\ell \geq 2)$.

次に、Γ は次の条件を満たす G の部分群とする:

1. (Γ I) Γ is torsion-free and $\Gamma \cap x^{-1}Ux = \{1\}, \forall x \in G$,
2. (Γ II) $|U \setminus G/\Gamma| < \infty$.

このとき、Γ は有限個の生成元を持つ自由群であることが知られている。

例

$G = PGL(2, k) = GL(2, k)/k^*$ とする。ここで、k は離散付値局所コンパクト体である。また、$\mathcal{O}(\mathcal{P})$ は k の整環 (素イデアル) とする。$x \in G$ について、次のような行列 $(a_{ij})_{1 \leq i,j \leq 2}$ を選ぶことができる:

$$a_{ij} \in \mathcal{O} \ and \ \sum_{i,j=1}^{2} a_{ij}\mathcal{O} = \mathcal{O}.$$

$$\det(a_{ij})\mathcal{O} = \mathcal{P}^{\ell(x)}.$$

とおくと、G と ℓ は、$q = N\mathcal{P}$ かつ $U = PGL(2, \mathcal{O}) = GL(2, \mathcal{O})/\mathcal{O}^*$ のもとで、条件 G, ℓ, I,II を満たす。

Γ の各共役類 $\{\gamma\} \neq \{1\}$ に対して、

$$\deg\{\gamma\} = \min_{x \in G} \ell(x^{-1}\gamma x) > 0$$

とおく。非自明な元 $\gamma \neq 1 \in \Gamma$ or 非自明な共役類 $\{\gamma\} \neq \{1\}$ が原始的とは、

$$C_\Gamma(\gamma) = \langle \gamma \rangle = \{x \in G \mid x^{-1}\gamma x = \gamma\}$$

を満たすことである。ここで、$C_\Gamma(\gamma)$ は Γ における γ の中心化群である。

伊原先生は Γ の原始的共役類を数え上げた。

Definition 1（Ihara, 1966）伊原ゼータ関数は次のように定義される：

$$Z_\Gamma(u) = \prod_P (1 - u^{\deg P})^{-1}.$$

ここで、P は Γ のすべての原始的共役類を亘る。

伊原先生は次の結果を与えた:

$$\log Z_\Gamma(u) = \sum_{P, m \geq 1} \frac{u^{m \deg P}}{m} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{N_m}{m} u^m, N_m = \sum_{\deg P | m} \deg P.$$

伊原先生は、さらに、一般的な状況を考察された ([22]).

ρ を標数 0 の体上の Γ の有限次元の表現とする。また、

$$\chi(\gamma) = \mathrm{Tr} \rho(\gamma), \gamma \in \Gamma$$

とおく。

Definition 2（Ihara, 1966）伊原 L-関数は次のように定義される:

$$\begin{cases} \log Z_\Gamma(u, \chi) = \sum_{P, m \geq 1} \frac{\chi(P^m) u^{m \deg P}}{m} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{N_{m, \chi}}{m} u^m \\ \log Z_\Gamma(0, \chi) = 1. \end{cases}$$

このとき、伊原 L-関数はオイラー積で表示できる：

$$Z_\Gamma(u, \chi) = \prod_P \det(I_d - \rho(P) u^{\deg P})^{-1}, d = \deg \rho.$$

今、伊原 L-関数の伊原型行列式表示を述べる。

$$G = \sum_{i=1}^{h} U x_i \Gamma \ (h = |U \setminus G / \Gamma|), S_{ij}^{(\ell)} = x_i^{-1} G_\ell x_j \cap \Gamma, \ S_{ij} = S_{ij}^{(1)} (\ell \geq 0; 1 \leq i, j \leq h).$$

とする。このとき、ρ が $\mathbb{Z}(\Gamma)$ 上の次のような表現に拡張できることが知られている：

$$\rho(G_\ell) = A_\ell^\chi = (\sum_{\gamma \in S_{ij}^{(\ell)}} \rho(\gamma))(\ell \geq 0).$$

ここで、

$$\deg \rho = \chi(1) h.$$

伊原 L-関数の伊原型行列式表示は次のように与えられる。

Theorem 1（Ihara, 1966）

$$Z_\Gamma(u, \chi) = (1 - u^2)^{-g_\chi} \det(I_d - A_1^\chi u + q u^2)^{-1}. \quad (1)$$

ここで、$g_\chi = (q-1) h \chi(1)/2$ かつ $d = \chi(1) h$.

$\rho = 1$ の場合は、

$$Z_\Gamma(u) = (1 - u^2)^{-(q-1)h/2} \det(I_h - A_1 u + q u^2)^{-1}. \quad (2)$$

ここで、

$$A_1 = (a_{ij}) : a_{ij} = |x_i^{-1} G_1 x_j \cap \Gamma| (1 \leq i, j \leq h).$$

右辺を**伊原型行列式表示**という。

$G = PGL(2,k)$, $U = PGL(2,\mathcal{O})$ で、Γ が G のトーションフリーの離散部分群の場合、$T = G/U$ は $(q+1)$-**正則木**、$K = \Gamma \setminus T = \Gamma \setminus G/U$ は有限 $(q+1)$-正則グラフとなる。また、T は K の *universal covering* で、$\Gamma = \pi_1(K)$ となる。Serre は伊原ゼータ関数 $Z_\Gamma(u)$ が $(q+1)$-正則グラフ K のゼータ関数であることを指摘した。この示唆を受けて、砂田先生は、グラフ理論の用語を用いて $PGL(2,k)$ に対する伊原ゼータ関数を定義した。次の節において、この定義を述べる。

1.3 グラフ理論の用語による伊原ゼータ関数の定義

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。D_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* とは、$e^{-1}_{i+1} = e_i$ 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 $(r \geq 2)$。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。

Definition 3（Sunada, 1986） グラフ G の**伊原ゼータ関数**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 ([38,39] を見よ)。また、$u \in \mathbf{C}$ で、$|u|$ が十分小さいものとする。

2　グラフ理論の用語による伊原ゼータ関数の伊原型行列式表示

2.1　伊原の定理

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** $\mathbf{A}(G) = (a_{ij})_{1 \le i,j \le n}$ を、

$$a_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if } v_i v_j \in E(G) \text{ (or } (v_i, v_j) \in D(G)), \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases}$$

点 v_i の**次数**を、$\deg_G v_i = |\{v_j \mid v_i v_j \in E(G)\}|$ 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。自然数 $r \in \mathbb{N}$ について、N_r を G の長さ r の reduced cycles の個数とする。

Theorem 2（Ihara, 1966） G を n 点、m 辺をもつ連結 $(q+1)$-正則グラフとするとき、G の伊原ゼータ関数は次のように与えられる:

$$\mathbf{Z}_G(u) = (1-u^2)^{-(m-n)} \det(\mathbf{I}_n - \mathbf{A}(G)u + qu^2 \mathbf{I}_n)^{-1} \tag{3}$$

$$= \exp(\sum_{k \ge 1} \frac{N_k}{k} u^k). \tag{4}$$

(3) の右辺は伊原ゼータ関数の**伊原型行列式表示のグラフ版**である。また、(4) は伊原ゼータ関数の**指数型母関数**である。

例

Let $G = K_3$ を 3 点 v, w, z を持つ完全グラフ (or 三角形) とし、$e = (v, w), f = (w, z)$, $g = (z, v)$ とおく。このとき、G は 2-正則グラフであり、G のすべての prime, reduced cycles の同値類は $[C], [C^{-1}]$ である。ここで、$C = (e, f, g)$, $C^{-1} = (e^{-1}, g^{-1}, f^{-1})$. 伊原ゼータ関数の定義により、

$$\mathbf{Z}(G, u)^{-1} = (1 - u^{|C|})(1 - u^{|C^{-1}|}) = (1 - u^3)^2.$$

また、

$$\mathbf{A}(G) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

かつ、$m = n = 3$, $q = 1$. 伊原の定理より、

$$\mathbf{Z}(G, u)^{-1} = (1-u^2)^{3-3} \det(\mathbf{I}_3 - u\mathbf{A}(G) + u^2 \mathbf{I}_3)$$

$$= \det \begin{bmatrix} 1+u^2 & -u & -u \\ -u & 1+u^2 & -u \\ -u & -u & 1+u^2 \end{bmatrix}$$

$$= (1+u^2)^3 - 2u^3 - 3u^2(1+u^2) = (1-u^3)^2.$$

$$\exp(\sum_{k \ge 1} \frac{N_k}{k} u^k) = (1-u^3)^{-2}$$

によって、

$$\sum_{k\geq 1}\frac{N_k}{k}u^k=\log(1-u^3)^{-2}=2(u^3+\frac{u^6}{2}+\frac{u^9}{3}+\cdots)=\frac{6}{3}u^3+\frac{6}{6}u^6+\frac{6}{9}u^9+\cdots.$$

これから、

$$N_3=N_6=N_9=\ldots=6,\ N_k=0(k\not\equiv 0\ mod\ 3).$$

次に、正則グラフ G の伊原ゼータ関数の性質を述べる。

I. 有理性

定理 2 より、伊原ゼータ関数 $\mathbf{Z}(G,u)$ はある多項式の逆数である。

II. 関数等式 ([37,40]).

$$\Lambda_G(u)=(1-u^2)^{n/2+r-1}(1-q^2u^2)^{n/2}\mathbf{Z}(G,u)$$

とおく。ここで、$n=|V(G)|$, $m=|E(G)|$, $r=m-n+1$. このとき、

$$\Lambda_G(u)=(-1)^n\Lambda_G(\frac{1}{qu}).$$

III. リーマン予想の類似 ([28,29]).

G を $(q+1)$-正則グラフとする。リーマン予想の類似 $s=\sigma+it,\ \mathbf{Z}(G,q^{-s})=0$ and $\mathrm{Re}(s)\in(0,1)$ ならば、

$$\mathrm{Re}(s)=\frac{1}{2}.$$

G がリーマン予想の類似を満たすことと、G がラマヌジャングラフであることは同値であることが知られている。ここで、$(q+1)$-正則グラフ G が**ラマヌジャン**であるとは、G が次の条件を満たすことである: $\mathbf{A}(G)$ の各固有値 λ について、

$$\lambda\neq\pm(q+1)\Rightarrow|\lambda|\leq 2\sqrt{q}$$

2.2 一般グラフに対する伊原ゼータ関数の行列式表示

G を n 点、m 辺を持つ連結単純グラフとするとき、**次数行列** $\mathbf{D}=(d_{uv})$ は次のような $n\times n$ 対角行列である:

$$d_{uv}=\begin{cases}\deg u & \text{if } u=v,\\ 0 & \text{otherwise,}\end{cases}$$

また、2 つの $2m\times 2m$ 行列 $\mathbf{B}=\mathbf{B}(G)=((\mathbf{B})_{e,f})_{e,f\in D(G)}$ と $\mathbf{J}_0=\mathbf{J}_0(G)=((\mathbf{J}_0)_{e,f})_{e,f\in D(G)}$ は次のように与えられる:

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

このとき、$\mathbf{B}-\mathbf{J}_0$ を G の *edge matrix* という。

一般グラフに対する伊原ゼータ関数の行列式表示のグラフ版は次のように与えられる ([4,18]).

Theorem 3（Hashimoto; Bass） 連結グラフ G について、

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

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

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

最初の公式を**橋本型行列式表示**、２番目の公式を**伊原型行列式表示**という。

例

G を４点 v, w, x, y と５辺 vw, vx, vy, wx, xy を持つ連結グラフとする。このとき、

$$\mathbf{A}(G) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{D} = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

G は無限個の prime, reduced cycles の同値類を持つので、伊原ゼータ関数の定義より、G の伊原ゼータ関数の明示式を求めることはできない。

定理３より、

$$\mathbf{Z}(G,u)^{-1} = (1-u^2)^{5-4}\det(\mathbf{I}_4 - u\mathbf{A}(G) + u^2(\mathbf{D} - \mathbf{I}_4)$$

$$= \det\begin{bmatrix} 1+2u^2 & -u & -u & -u \\ -u & 1+u^2 & -u & 0 \\ -u & -u & 1+2u^2 & -u \\ -u & 0 & -u & 1+u^2 \end{bmatrix}$$

$$= (1-u^2)(1-u)(1+u^2)(1+u+2u^2)(1-u^2-2u^3).$$

また、

$$\sum_{k\geq 1}\frac{N_k}{k}u^k = 4u^3 + 2u^4 + 4u^6 + 4u^7 + \cdots.$$

これから、

$$N_3 = 12,\ N_4 = 8,\ N_5 = 0,\ N_6 = 24,\ N_7 = 28, \ldots.$$

3 伊原ゼータ関数の一般化としての第２種加重ゼータ関数の定義

3.1 第２種加重ゼータ関数の定義

G を n 点、m 辺を持つ連結単純グラフとするとき、$n \times n$ 行列 $\mathbf{W}(G) = (w_{uv})$ は次のように定義される:

$$w_{uv} = \begin{cases} \textit{nonzero complex number} & \text{if } (u,v) \in D(G), \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

$\mathbf{W}(G)$ は G の *weighted matrix* という。$w(u,v) = w_{uv},\ u,v \in V(G),\ w(e) = w_{uv},\ e = (u,v) \in D(G)$ とおく。

また、新たな関数 $\tilde{w} : D'G) \times D(G) \longrightarrow \mathbb{C}$ を次のように定義する:

$$\tilde{w}(e,f) = \begin{cases} w(f) & \text{if } t(e) = o(f) \text{ and } f \neq e^{-1}, \\ w(f) - 1 & \text{if } f = e^{-1}, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

このとき、cycle $C = (e_1, e_2, \ldots, e_r)$ について、

$$w_C = \tilde{w}(e_1, e_2)\tilde{w}(e_2, e_3) \cdots \tilde{w}(e_{r-1}, e_r)\tilde{w}(e_r, e_1).$$

とおく。

Definition 4（Sato, 2007） グラフ G の**第２加重ゼータ関数**は次のように定義される:

$$\mathbf{Z}_1(G, w, u) = \prod_{[C]} (1 - w_C u^{|C|})^{-1}.$$

ここで、$[C]$ は G の prime cycles の同値類を亘る ([33]).

$w = \mathbf{1}$, i.e., $w(e) = 1, \forall e \in D(G)$ ならば、第２加重ゼータ関数は伊原ゼータ関数に等しい:

$$\mathbf{Z}_1(G, w, u) = \mathbf{Z}(G, u).$$

何故ならば、cycle C が backtracking を含むならば、$w_C = 0$.

3.2 第２種加重ゼータ関数の伊原型行列式表示

第２種加重ゼータ関数の伊原型行列式表示は次のように与えられる ([33]):

Theorem 4（Sato, 2007） G を n 点、m 辺を持つ連結単純グラフ、$\mathbf{W}(G)$ を G の weighted matrix とする。このとき、G の第２種加重ゼータ関数の逆数:

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

ここで、$\mathbf{D}_w = (d_{uv})$ は次のような $n \times n$ 対角行列である:

$$d_{uu} = \sum_{o(e)=u} w(e).$$

例

$G = K_3$ を３点 v, w, z をもつ完全グラフ、

$$\mathbf{W}(G) = \begin{bmatrix} 0 & a & b \\ c & 0 & d \\ p & q & 0 \end{bmatrix}$$

とする。

G に無限個の prime cycles の同値類が存在するので、第２種加重ゼータ関数の定義を用いて、G の第２種加重ゼータ関数の明示式を求めることはできない。定理４より、

$$\begin{aligned}
\mathbf{Z}_1(G,w,u)^{-1} &= (1-u^2)^{3-3}\det(\mathbf{I}_3 - u\mathbf{W}(G) + u^2(\mathbf{D}_w - \mathbf{I}_3)) \\
&= \det\begin{bmatrix} 1+(a+b-1)u^2 & -au & -bu \\ -cu & 1+(c+d-1)u^2 & -du \\ -pu & -qu & 1+(p+q-1)u^2 \end{bmatrix} \\
&= 1+(\alpha+\beta+\gamma-bp-ac-dq)u^2-(adp+bcq)u^3 \\
&+ (\alpha\beta+\beta\gamma+\gamma\alpha-bp\beta-ac\gamma-dq\alpha)u^4+\alpha\beta\gamma u^6.
\end{aligned}$$

ここで、$\alpha=a+b-1$, $\beta=c+d-1$, $\gamma=p+q-1$ とする。

次に注意を述べる。

[33] において、第２種加重ゼータ関数の橋本型行列式表示を与えた。G を n 点、m 辺を持つ連結単純グラフ、$\mathbf{W}(G)$ を G の weighted matrix とする。このとき、$2m \times 2m$ 行列 $\mathbf{B}_w = \mathbf{B}_w(G) = (\mathbf{B}^{(w)}_{e,f})_{e,f\in D(G)}$ を次のように与える:

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

このとき、

Theorem 5（Sato, 2007） G を n 点、m 辺を持つ連結単純グラフ、$\mathbf{W}(G)$ を G の weighted matrix とする。このとき、G の第２種加重ゼータ関数の橋本型行列式表示:

$$\mathbf{Z}_1(G,w,u)^{-1} = \det(\mathbf{I}_{2m} - u(\mathbf{B}_w - \mathbf{J}_0)).$$

4　グラフ同型問題から見た Emms et al の結果

4.1　量子ウォークの歴史的背景

量子ウォークは次の 3 つの分野から導入された:

1. **量子確率論**：1988 年, Gudder [16];
2. **量子セルオートマトン**：1996 年, Meyer [30];
3. **量子コンピューター**：

   2000 年, Nayak and Vishwanath [31] ;

   2001 年, Ambainis, Bach, Nayak, Vishwanath and Watrous [2];

   2001 年, Aharonov, Ambainis, Kempe and Vazirani [1].

上記の文献において、**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 [5] は**連続時間量子ウォーク**を定義した。

同じく、2002 年、今野先生 [23] は **$\mathbb{Z}$ 上の２状態量子ウォーク**の**極限定理**を与えた。今野分布は正規分布とかなり、異なっている。

次に、量子ウォークに関連するグラフ同型問題の歴史的背景を述べる。

1. 2006 年、Emms, Hancock, Severini and Wilson [9] はグラフの *Grover(遷移) 行列* (Grover ウォークの時間発展行列) と**その正台** etc のスペクトルを与え、**強正則グラフのグラフ同型問題**についての**予想**を提示した。
2. 2008 年、Emms [8] は Grover 行列を使って、グラフ上の**離散時間量子ウォーク** *(Grover ウォーク)* を定義した。
3. 2011 年、Ren, Aleksic, Emms, Wilson and Hancock [32] は、Grover 行列の正台の転置が伊原ゼータ関数の橋本型行列式表示に現れる *edge matrix* に等しいことを示した。
4. 2012 年、Konno and Sato [25] は、伊原ゼータ関数と第 2 種加重ゼータ関数の伊原型行列式表示を用いて、グラフの Grover 行列とその正台の特性多項式の明示公式を与え、直截的に、それらのスペクトルを得た。

4.2 今野分布

$\mathbb{Z}$ **上の 2 状態量子ウォーク**、即ち、粒子が各時間に、右左に 1 だけ移動する離散時間量子ウォークを考える ([24] を見よ)。

各 $k \in \mathbb{Z}$ について、**状態**

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

を考える。これは粒子の"内部状態"を考えられる。ここで、

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

このとき、ψ_k と α_k, β_k を、それぞれ、k の**量子ビット**、**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、$|a|^2 + |b|^2 = |b|^2 + |c|^2 = 1, \bar{b} + c\bar{d} = 0, c = -\Delta\bar{b}, d = \Delta\bar{a}(\Delta = ad - bc)$. $\mathbb{Z}$ 上のランダムウォークの確率 p,q の類似として、

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

を考えると、$\mathbf{U} = \mathbf{P} + \mathbf{Q}$ が $1 = p + q$ に対応する。$\mathbf{P}, \mathbf{Q}$ は p, q の非可環版である。

また、

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

を、時刻 $n(n = 1, 2, \ldots)$ における場所 $k(k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots)$ の量子ビットとする。このとき、$\mathbb{Z}$ 上の量子ウォークの**時間発展**は次のように与えられる:

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

簡単のために、**初期量子ビット** $(n = 0)$ は次のように与える:

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

ここで、$||\phi||^2=|\alpha|^2+|\beta|^2=1$. $n=0$ で量子ビット ϕ を伴って、$\mathbb{Z}$ の原点を出発する量子ウォークを考える。

$n=1$ の場合、

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

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

$k\neq\pm1$ ならば、$k\pm1\neq0$ より、

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

$n=2$ の場合、

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

同様に、

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

$k\neq0,\pm2$ ならば、$k\pm1\neq\pm1$ より、

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

今、X_n を時刻 n の量子ウォークとする。このとき、時刻 n で場所 k に粒子が存在する**確率**を次のように与える:

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

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、この量子ウォークを**アダマールウォーク**という。このとき、確率は次のようになる：

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、Konno [23] は、$\mathbb{Z}$ 上の 2 状態量子ウォークに対して、$n\to\infty$ に関する弱収束定理を導いた。

Theorem 6（Konno）

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

とする。$n=0$ で上記の量子ビット ϕ により、$\mathbb{Z}$ の原点を出発する量子ウォークに対して、

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

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) アダマールウォークにおいて、

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

4.3 グラフ上の離散時間量子ウォーク

G を m 辺の連結グラフとする。このとき、Emms [8] に沿って $D(G)$ 上の離散時間 Grover ウォークを述べる。

各 arc $e=(u,v)\in D(G)$ について、ヒルベルト空間 $\mathbb{C}^{2m}$ の正規直交底となるような *pure state* $\vec{x}_e = \vec{x}_{uv}$ を考える。　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**は次のように定義する:

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

arc (u,v) に粒子が存在する**確率**は次のように与えられる:

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

ここで、

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

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。同様にして、$D(G)$ 上の時間発展を、*Grover* **行列** $\mathbf{U}=(U_{(w,x),(u,v)})$ を用いて、定義する ([15]):

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

この量子ウォークを G 上の *(***離散時間***)Grover* **ウォーク**という。Grover 行列はユニタリ行列である。

例

G を $V(G)=\{u,v,w,x\}$、$D(G)=\{(u,v),(v,u),(v,w),(w,v),(v,x),(x,v)\}$ なるグラフとする。また、$D(G)$ の arcs の順序を次のように与える: $(u,v),(v,u),(w,v),(v,w),(x,v),(v,x)$. このとき、Grover 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。

$\psi_t = a\vec{x}_{uv} - b\vec{x}_{wv}$ $(a^2+b^2=1)$ ならば、$\psi_{t+1}=\mathbf{U}\psi_t = a\mathbf{U}\vec{x}_{uv} - b\mathbf{U}\vec{x}_{wv}$. $\vec{x}_{uv} = {}^t(100000)$,$\vec{x}_{wv} = {}^t(001000)$ より、

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

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

4.4 グラフ同型問題についての予想

2 つのグラフ G,H が**同型** $(G\cong H)$ とは、$uv\in E(G \Leftrightarrow f(u)f(v)\in E(H)$ を満たす全単射 $f:V(G)\longrightarrow V(H)$ 存在することである。このとき、グラフ同型問題は次のように与えられる:

Problem 1 2 つのグラフ G と H に対して、$G\cong H$ かどうかを決定せよ。?

グラフ同型問題は大変、難しいことがわかっている。また、次のような問題もある。

Problem 2 2 つのグラフ G と H に対して、$G\cong H \Leftrightarrow f(G)=f(H)$ を満たすようなグラフの不変量 $f(G)$ は存在するか。

今まで、そのような不変量は見つかっていない。

グラフ G の特性多項式 $\Phi(G;\lambda)=\det(\lambda\mathbf{I}-\mathbf{A}(G))$ は、問題 2 の不変量ではない。$\Phi(G;\lambda)=\Phi(H;\lambda)$ かつ $G\not\cong H$ なるグラフ G,H が存在することが知られている ([3]). また、グラフの伊原ゼータ関数も、問題 2 の不変量ではない。$\mathbf{Z}(G,u)=\mathbf{Z}(H;u)$ かつ $G\not\cong H$ なるグラフ G,H が存在することが知られている ([6]).

量子ウォークを通して、グラフ同型の決定アルゴリズムや、グラフ同型問題に対する新しい問題にアプローチが、Shiau, Joynt and Coopersmith [36], Emms, Severini, Wilson,and Hancock [10], Douglas and Wang [7], Gamble, Friesen, Zhou, Joynt and Coopersmith [11] によって、提案されている。さらに、Emms, Hancock, Severini and Wilson [9] は、問題 2 を部分的に肯定する予想を提出した。

実正方行列 $\mathbf{A}=(a_{ij})$ について、$\mathbf{A}$ の**正台** $\mathbf{A}^+=(a^+_{ij})$ は次のように定義される:

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

このとき、

Conjecture 1（Emms, Hancock, Severini and Wilson, 2006） G, H を同じパラメータを持つ、**強正則グラフ**とするとき、

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

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 行列である。

グラフ G が**パラメータ** n, k, λ, μ を持つ**強正則グラフ** or (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 ([14]):

1. $|V(G)| = n$；
2. G の各点 v について、$\deg v = k$；
3. どの隣接する 2 点 u, v も λ 個の共通の点に隣接する；
4. どの隣接しない 2 点 x, y も μ 個の共通の点に隣接する。

(n, k, λ, μ)-グラフは k-正則グラフである。例えば、完全 2 部グラフ $K_{n,n}$ は $(2n, n, 0, n)$-グラフである。

上の予想は正則グラフに対しては成り立たない。$G \not\cong H$ かつ $Spec((\mathbf{U}(G)^3)^+) = Spec((\mathbf{U}(H)^3)^+)$ を満たす、14 点の 4 −正則グラフ G, H が存在する ([9])。

コンピューターを使って、Emms et al [10] はある強正則グラフについて成立することを示した。もし、予想が成立すれば、グラフの小さな族 (無限集合?) において、$Spec((\mathbf{U}(G)^3)^+)$ or $\Phi((\mathbf{U}(G)^3)^+; \lambda)$ は、問題 2 の不変量となる。

5 Konno-Sato の定理

5.1 Konno-Sato の定理

グラフの Grover 行列の特性多項式について、明示公式を与える ([25]).

G を n 点、m 辺を持つ連結グラフとする。このとき、$n \times n$ 行列 $\mathbf{T}(G) = (T_{uv})_{u,v \in V(G)}$ を次のように定義する:

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

行列 $\mathbf{T}(G)$ は G 上の単純ランダムウォークの遷移行列である。

このとき、

Theorem 7（Konno and Sato, 2012） G を n 点 $v_1, \ldots, v_n$、m 辺を持つ連結グラフとする。このとき、G の Grover 行列 $\mathbf{U}$ の特性多項式：

$$\det(\lambda \mathbf{I}_{2m} - \mathbf{U}) = (\lambda^2 - 1)^{m-n} \det((\lambda^2 + 1)\mathbf{I}_n - 2\lambda \mathbf{T}(G)) \tag{5}$$

$$= \frac{(\lambda^2 - 1)^{m-n} \det((\lambda^2 + 1)\mathbf{D} - 2\lambda \mathbf{A}(G))}{d_{v_1} \cdots d_{v_n}}. \tag{6}$$

証明. 定理 4 による。Q.E.D.

定理 7.(5) より、$\mathbf{T}(G)$ のスペクトルを用いて、Grover 行列 $\mathbf{U}$ のスペクトルを表示する ([9])。

Corollary 1（Emms, Hancock, Severini and Wilson, 2006） G を n 点、m 辺を持つ連結グラフとする。このとき、Grover 行列 $\mathbf{U}$ のスペクトルは次のように与えられる:

1. $2n$ 個の固有値:
$$\lambda = \lambda_T \pm i\sqrt{1-\lambda_T^2}.$$
ここで、λ_T は $\mathbf{T}(G)$ の固有値である;
2. $2(m-n)$ 個の固有値: ± 1(同じ多重度).

Proof. 定理 7.(5) 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、
$$\lambda = \lambda_T \pm i\sqrt{1-\lambda_T^2},$$
を得る。Q.E.D.

定理 7.(6) より、正則グラフについて次の結果を得る (c.f., [9]).

Corollary 2（Emms, Hancock, Severini and Wilson, 2006） G を n 点、m 辺を持つ連結 k-正則グラフとする。このとき、Grover 行列 $\mathbf{U}$ のスペクトルは次のように与えられる:

1. $2n$ の固有値:
$$\lambda = \frac{\lambda_A \pm i\sqrt{k^2-\lambda_A^2}}{k}.$$
ここで、λ_A は G の隣接行列 $\mathbf{A}(G)$ の固有値;
2. $2(m-n)$ 個の固有値: ± 1(同じ多重度).

Proof. 先ず、$\mathbf{D} = k\mathbf{I}_n$. 定理 7.(5) より、
$$\det(\lambda \mathbf{I}_{2m} - \mathbf{U}) = \frac{(\lambda^2-1)^{m-n}}{d_{v_1}\cdots d_{v_n}} \prod_{\lambda_A \in Spec(\mathbf{A}(G))} (k\lambda^2 + k - 2\lambda_A \lambda).$$
$k\lambda^2 + k - 2\lambda_A\lambda = 0$ を解いて、
$$\lambda = \frac{\lambda_A \pm i\sqrt{k^2-\lambda_A^2}}{k},$$
が出る。Q.E.D.

5.2 Grover 行列の正台

先ず、伊原ゼータ関数と Grover 行列の関係を述べる ([32]).

Theorem 8（Ren, Aleksic, Emms, Wilson and Hancock） G を n 点、m 辺を持つ連結グラフとする。G の最小次数 $\delta(G)$ は 2 以上と仮定。このとき、G の Grover 行列 $\mathbf{U}$ の正台の転置は、G の伊原ゼータ関数に対する、橋本型行列式表示に出てくる edge matrix に等しい：
$$\mathbf{B} - \mathbf{J}_0 = ({}^t\mathbf{U})^+.$$

定理 3,8 より、グラフの Grover 行列の正台 $\mathbf{U}^+$ の特性多項式を得る。

Theorem 9　G を n 点、m 辺を持つ連結グラフとする。G の最小次数 $\delta(G)$ は 2 以上と仮定。このとき、G の Grover 行列の正台 $\mathbf{U}^+$ 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 3,8 より、

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

今、$u = 1/\lambda$ とおくと、

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

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、正則グラフの Grover 行列の正台 $\mathbf{U}^+$ のスペクトルを、隣接行列 $\mathbf{A}(G)$ のスペクトルで表す (c.f., [9])。

Corollary 3（Emms, Hancock, Severini and Wilson, 2006）　G を n 点、m 辺を持つ連結 k-正則グラフとする。このとき、Grover 行列 $\mathbf{U}$ の正台 $\mathbf{U}^+$ のスペクトルは次のように与えられる：

1. $2n$ の固有値:
$$\lambda = \frac{\lambda_A}{2} \pm i\sqrt{k - 1 - \lambda_A^2/4}.$$
ここで、λ_A は G の隣接行列 $\mathbf{A}(G)$ の固有値;
2. $2(m-n)$ 個の固有値: ± 1(同じ多重度).

Proof. 定理 9 より、

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

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

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

Q.E.D.

5.3 Grover 行列の 2 乗の正台

先ず、グラフの Grover 行列 $\mathbf{U}$ の 2 乗の正台 $(\mathbf{U}^2)^+$ の構造定理を述べる ([12])。

Theorem 10（Godsil and Guo, 2011） G を m 辺を持つ連結 k-正則グラフとし、$k > 2$ と仮定。このとき、

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

定理 9,10 より、グラフの Grover 行列の 2 乗の正台 $(\mathbf{U}^2)^+$ の特性多項式を得る ([19])。

Theorem 11（Higuchi, Konno, Sato and Segawa, 2013） G を n 点、m 辺を持つ連結 k-正則グラフとすし、$k > 2$ と仮定。このとき、グラフの Grover 行列の 2 乗の正台 $(\mathbf{U}^2)^+$ の特性多項式:

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

定理 11 より、正則グラフ G の Grover 行列の 2 乗の正台 $(\mathbf{U}^2)^+$ のスペクトルを、隣接行列 $\mathbf{A}(G)$ のスペクトルで表す (c.f., [9])。

Corollary 4（Emms, Hancock, Severini and Wilson, 2006） G を n 点、m 辺を持つ連結 k-正則グラフとし、$k > 2$ と仮定。このとき、Grover 行列 $\mathbf{U}$ の 2 乗の正台 $(\mathbf{U}^2)^+$ のスペクトルは次のように与えられる：

1. $2n$ の固有値:
$$\lambda = \frac{\lambda_A^2 - 2k + 4}{2} \pm i\lambda_A \frac{\sqrt{4k - 4 - \lambda_A^2}}{2}.$$
ここで、λ_A は G の隣接行列 $\mathbf{A}(G)$ の固有値;
2. $2(m-n)$ の固有値: 2.

Proof. 定理 11 より、

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

系 1,2,3 と同様にして、結果を得る。Q.E.D.

今、何故、$Spec(\mathbf{U})$, $Spec(\mathbf{U}^+)$, $Spec((\mathbf{U}^2)^+)$ が問題 2 の不変量にならないかの理由を述べる。

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

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

であることが知られている。ここで、

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

であり、θ, τ の多重度は n, k, λ, μ によって決まる ([14])。

系 1,2,3,4 より、$\mathbf{U}, \mathbf{U}^+, (\mathbf{U}^2)^+$ の固有値は隣接行列の固有値によって決定される。これから、

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

従って、$Spec(\mathbf{U})$, $Spec(\mathbf{U}^+)$, $Spec((\mathbf{U}^2)^+)$ によって、$G \cong H$ かどうかを決定することはできない。.

この事実により、Emms et al [9] は Grover 行列の 3 乗の正台のスペクトルを採用した。

5.4 Grover 行列の 3 乗の正台

定理 10 のような、$(\mathbf{U}^3)^+$ の構造定理を与える。

G をグラフとする。このとき、G の**内周** $g(G)$ を、G の prime, reduced cycles の長さの最小値とする。

$(\mathbf{U}^3)^+$ の構造定理は次のように与えられる ([19]):

Theorem 12（Higuchi, Konno, Sato and Segawa, 2013） G を n 点、m 辺を持つ連結 k-正則グラフとし、$k > 2$, $g(G) > 4$ と仮定。このとき、

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

(n,k,λ,μ)-グラフ G について $\lambda \geq 1$ ならば $g(G) = 3$ となるので、予想を解決するために、定理 12 は使えない。

定理 12 と同じ条件の下で、Grover 行列の 3 乗の正台の特性多項式を導くことができた ([27])。

Theorem 13（Konno, Sato and Segawa, 2014） G を n 点、m 辺を持つ連結 k-正則グラフとし、$k > 2$, $g(G) > 4$ と仮定。このとき、G の Grover 行列の 3 乗の正台 $(\mathbf{U}^3)^+$ の特性多項式:

$$\begin{aligned} \det(\lambda\mathbf{I}_{2m} - (\mathbf{U}^3)^+) &= (\lambda-4)^{m-n}\det((\lambda^2\mathbf{I}_n - \lambda(\mathbf{A}^3 - (3k-4)\mathbf{A}) \\ &+ (\mathbf{A}^4 - k^2\mathbf{A}^2 + 2(k-1)(k^2-2k+2)\mathbf{I}_n). \end{aligned}$$

ここで、$\mathbf{A} = \mathbf{A}(G)$.

これから、

Corollary 5（Segawa, 2014） G を n 点、m 辺を持つ連結 k-正則グラフとし、$k > 2$, $g(G) > 4$ と仮定。このとき、G の Grover 行列 $\mathbf{U}$ の 3 乗の正台 $(\mathbf{U}^3)^+$ のスペクトルは次のように与えられる ([34]):

1. $2n$ の固有値:

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{1}{2}\{\lambda_A(\lambda_A^2 - 3k + 4) \\ &\pm \sqrt{\lambda_A^6 - 2(3k-2)\lambda_A^4 + (13k^2 - 24k + 16)\lambda_A - 8(k-1)(k^2-2k+2)}\}. \end{aligned}$$

   ここで、λ_A は G の隣接行列 $\mathbf{A}(G)$ の固有値;
2. $2(m-n)$ の固有値: ± 2.

この結果から、予想に対するアプローチは次のようになる: G, H を (n, k, λ, μ)-グラフで、$k > 2$ を満たすとする。もし、$G \not\cong H$ かつ $g(G) > 4$, $g(H) > 4$ を満たす、そのようなグラフ G, H が存在すれば、予想は不成立。

しかし、$g(G) > 4$ なる強正則グラフ G は、高々 4 個しか存在しないことがわかっている。

5.5 予想の反例

2015 年、Godsil, Guo and Myklebust [13] は予想の反例を与えた。

$g(s,t)$ 次の *generalized quadrangle* は、次の条件を満たす接続構造である:

1. どの点も $(s+1)$ 個の lines に属し、かつ
2. どの line も $(t+1)$ 点を含む。

このとき、(s,t) 次の generalized quadrangle の *line* 交グラフは $((t+1)(st+1), s(t+1), t-1, s+1)$-グラフ (強正則グラフ) になることが知られている。また、同型でない *2* つの $(5^2, 5)$ 次の *generalized quadrangles* が存在することが知られている:

$$H(3, 5^2),\ FTWKB(5).$$

今、X と Y を、それぞれ、$H(3, 5^2)$ と $FTWKB(5)$ の line 交グラフとする。このとき、X, Y は $(756, 130, 4, 26)$-グラフで、$X \not\cong Y$ である。

Godsil et al [13] は、コンピューターを用いて、

$$Spec((\mathbf{U}(X)^3)^+) = Spec((\mathbf{U}(Y)^3)^+)$$

であることを示した。これから、Emms et al の予想は成立しない!!

5.6 Further remark

最近、我々は今野の問題を研究している ([25]):

Problem 3 (Konno, 2012) $\forall n \in \mathbb{N}$ について、グラフ G の Grover 行列の n 乗の正台 $(\mathbf{U}^n)^+$ の特性多項式を決定せよ。

今野の問題はかなり、難しい。

今野の問題は、次の問題と同値である:

Problem 4 $\forall n \in \mathbb{N}$ について、次のゼータ関数の伊原型行列式表示を決定せよ:

$$\zeta_k(G, u) = \det(\mathbf{I}_{2m} - u(\mathbf{U}^k)^+),\ m = |E(G)|.$$

G を n 点、m 辺を持つ連結 r-正則グラフとする。定理 11,13 より、次の結果が得られる:

1. $r = 2$:

$$\zeta_2(G, u)^{-1} = (1-2u)^{2m-2n} \det((1+u(r-2))^2\mathbf{I}_n - (1-u)\mathbf{A}(G)^2)\ (r > 2);$$

2. $r=3$:

$$\zeta_3(G,u)^{-1} = (1-4u^2)^{m-n} \det(\mathbf{I}_n - u(\mathbf{A}^3-(3r-4)\mathbf{A})$$

$$+ \quad u^2(\mathbf{A}^4 - k^2\mathbf{A}^2 + 2(r-1)(r^2-2r+2)\mathbf{I}_n)(r>2, g(G)>4).$$

ここで、$\mathbf{A}=\mathbf{A}(G)$.

また、ある条件下で、グラフ G の Grover 行列の n 乗の正台 $(\mathbf{U}^n)^+$ に対する、構造定理を与えることができた ([26])。

Theorem 14（Konno, Sato and Segawa, 2018） G を $g(G)>2k-2$ なる連結 r-正則グラフとする。このとき、

$$(\mathbf{U}^k)^+ = \sum_{j=0}^{k}(\epsilon_j(\mathbf{U}^+)^j + \tau_j\mathbf{J}_0(\mathbf{U}^+)^j) + \sum_{j=0}^{k-1}(\epsilon_{-j}{}^t(\mathbf{U}^+)^j + \tau_{-j}{}^t(\mathbf{J}_0(\mathbf{U}^+)^j)).$$

ここで、$\epsilon_j, \tau_j = 0, 1$ $(j=0,\pm1,\ldots,\pm(k-1),k)$.

この構造定理は明示的ではない。$r\leq 6$ まで、求まっている。

Corollary 6（Konno, Sato and Segawa, 2018）

$$(\mathbf{U}^4)^+ = \mathbf{J}_0(\mathbf{U}^+)^2\mathbf{J}_0 + \mathbf{I} + (\mathbf{U}^+)^4,$$

$$(\mathbf{U}^5)^+ = \begin{cases} \mathbf{J}_0(\mathbf{U}^+)^3\mathbf{J}_0 + \mathbf{J}_0\mathbf{U}^+\mathbf{J}_0 + \mathbf{U}^+ + (\mathbf{U}^+)^5 & \text{if } 3\leq r\leq 6, \\ \mathbf{J}_0(\mathbf{U}^+)^3\mathbf{J}_0 + (\mathbf{U}^+)^2\mathbf{J}_0 + \mathbf{J}_0\mathbf{U}^+\mathbf{J}_0 + \mathbf{U}^+ & \\ \qquad +\mathbf{J}_0(\mathbf{U}^+)^2 + (\mathbf{U}^+)^5 & \text{if } r\geq 7, \end{cases}$$

$$(\mathbf{U}^6)^+ = \begin{cases} \mathbf{J}_0(\mathbf{U}^+)^4\mathbf{J}_0 + \mathbf{J}_0(\mathbf{U}^+)^2\mathbf{J}_0 + \mathbf{I} + (\mathbf{U}^+)^2 + (\mathbf{U}^+)^6 & \text{if } r=3,4, \\ \mathbf{J}_0(\mathbf{U}^+)^4\mathbf{J}_0 + (\mathbf{U}^+)^3\mathbf{J}_0 + \mathbf{J}_0(\mathbf{U}^+)^2\mathbf{J}_0 + \mathbf{I} + (\mathbf{U}^+)^2 & \\ \qquad +\mathbf{J}_0(\mathbf{U}^+)^3 + (\mathbf{U}^+)^6 & \text{if } 5\leq r\geq 11, \\ \mathbf{J}_0(\mathbf{U}^+)^4\mathbf{J}_0 + (\mathbf{U}^+)^3\mathbf{J}_0 + \mathbf{I} + (\mathbf{U}^+)^2 + \mathbf{J}_0(\mathbf{U}^+)^3 & \\ \qquad +(\mathbf{U}^+)^6 & \text{if } r\geq 12. \end{cases}$$

これからも、今野問題を研究し、伊原ゼータ関数と量子ウォークの関係を追求して行きたい。

最後にコメントを述べたい。伊原ゼータ関数を用いて、グラフ同型問題の予想に挑戦したが、我々の試みは失敗に終わった。しかし、予想に対するこれらのアプローチで、伊原ゼータ関数が実に強力であることを示し、伊原ゼータ関数が量子ウォークの世界において、新しい分野を生み出したことを確信することができた。これからも、伊原ゼータ関数はいろいろな分野において、益々、発展して行くでしょう。

謝辞

本年度最初の室蘭工業大学数理談話会のご講演の機会を頂き、本稿を纏めるに当たりまして、微に入り、細に入りまして、全面的なご助言、並びに、ご支援を頂きました、森田英章先生に、深く、感謝申し上げます。

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

[5] 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.

[6] Y. Cooper, Properties determined by the Ihara zeta function of a graph, Electronic J. Combin. **16** (2009), R84.

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

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

[9] 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.

[10] 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.

[11] 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.

[12] C. Godsil and K. Guo, Quantum walks on regular graphs and eigenvalues, Electron. J. Combin. **18** (2011), paper 165, 9 pp.

[13] C. Godsil, K. Guo and T. G. J. Myklebust, Quantum walks on generalized quadrangles, Electron. J. Combin. **24** (2017), paper 4.16, 6 pp.

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

[15] 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.

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

[17] 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).

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

[19] Yu. Higuchi, N. Konno, I. Sato and E. Segawa, A note on the discrete-time evolutions

of quantum walk on a graph, J. Math-for-Ind. **5B** (2013), 103-109.

[20] Y. Ihara, Algebraic curves *mod* $\mathcal{B}$ and arithmetic groups, Proc. Sympos. in Pure Math. IX. Boulder, Colo. 265-271, 1965.

[21] Y. Ihara, Discrete subgroups of $PGL(k_{\mathcal{B}})$, Proc. Sympos. in Pure Math. IX. Boulder, Colo. 272-278, 1965.

[22] 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.

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

[24] H. Konno, *Mathematics of Quantum Walk*(in Japanese), Sangyo Tosho, 2008.

[25] N. Konno and I. Sato, On the relation between quantum walks and zeta functions, Quantum Inform. Process. **11(2)** (2012), 341-349.

[26] N. Konno, I. Sato and E. Segawa, Phase measurement of quantum walks: application to structure theorem of the positive support of the Grover walk, arXiv:1801.06209.

[27] N. Konno, I. Sato and E. Segawa, A zeta function related to the transition matrix of the discrete-time quantum walk on a graph, preprint.

[28] 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.

[29] A. Lubotzky, R. Phillips, and P. Sarnak, Ramanujan graphs, Combinatorica **8** (1988), 261-277.

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

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

[32] 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. **10** (2011), 405-417.

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

[34] E. Segawa, private communication, 2014.

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

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

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

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

[39] T. Sunada, *Fundamental Groups and Laplacians*(in Japanese), Kinokuniya Shoten,

1988.

[40] A. Terras, *Zeta functions of graphs: A Stroll through the Garden*, Cambridge studies in advanced mathematics, Vol. 128, Cambridge University Press, Cambridge (2011).