有向グラフ上の量子ウォークが定める行列とグラフの同型問題

東北大学大学院情報科学研究科情報基礎科学専攻
久保田匠 (Sho KUBOTA)

概要

与えられたふたつのグラフが同型かどうかを判定する方法のひとつに，グラフから定まる行列の固有値を用いるというものがある．無向グラフの場合，グラフの隣接行列の固有値は，グラフの同型判定を完全に行うことは出来ずとも，グラフの良い不変量となっている．一方，有向グラフの場合，隣接行列の固有値はグラフの同型判定の道具としてはあまり機能しない．以上を踏まえた上で，本講演では有向グラフ上で定義される量子ウォークから定まるある行列をグラフの同型判定に用いる．これによって，有向グラフの良い不変量を与える．

1　グラフ理論の基本事項

グラフとは，大雑把にいえば「点」とそれらを結ぶ「辺」からなる図形である．右に表したものはグラフのひとつの例である．この棒人間に見えなくもない図形において，右腕と左腕に対応する部分はユークリッド距離の意味での長さは異なるが，本稿で扱うグラフにおいては 2 点が辺で「結ばれているかそうでないか」にだけ興味がある．したがって，集合論的にグラフを記述しようとした場合，このグラフは頂点を表す集合

$$V = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10\}$$

と辺を表す集合

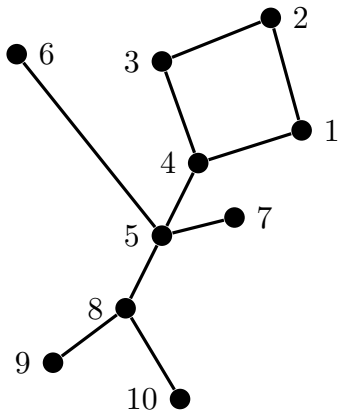


図 1: グラフの例

$$E = \{\{1, 2\}, \{1, 4\}, \{2, 3\}, \{3, 4\}, \{4, 5\}, \{5, 6\}, \{5, 7\}, \{5, 8\}, \{8, 9\}, \{8, 10\}\}$$

のペア (V, E) と書くべきであろう．

より厳密には，(有限単純) グラフ X とは，集合のペア $(V(X), E(X))$ のことで，$V(X)$ は空でない有限集合であり，$E(X)$ は $V(G)$ の 2 点部分集合の集合である．$V(X)$ をグラフ X の点集合または頂点集合といい，$V(X)$ の元を頂点という．$E(X)$ を X の辺集合といい，$E(X)$ の元を辺という．また，$\{x, y\} \in E(X)$ であるとき，x と y は隣接しているといい，$x \sim y$ で表す．

代表的なグラフの例をあげておこう．

Example 1.1 (完全グラフ)**.** 位数 n の完全グラフ K_n とは，

$$V(K_n) = \{1, 2, \ldots, n\},$$
$$E(K_n) = \{\{x, y\} \mid x, y \in V(X), x \neq y\}$$

で定まるグラフである．つまり，n 頂点からなるグラフで，どの相異なる 2 点も隣接しているグラフである．

Example 1.2 (完全 2 部グラフ)**.** $V_1 = \{1, \ldots, m\}, V_2 = \{m+1, \ldots, m+n\}$ とおく．完全 2 部グラフ $K_{m,n}$ とは

$$V(K_{m,n}) = V_1 \cup V_2,$$
$$E(K_{m,n}) = \{\{x, y\} \mid x \in V_1, y \in V_2\}$$

で定まるグラフである．つまり，V_1 内，V_2 内にはそれぞれ全く辺が無いが，V_1, V_2 間には必ず辺があるグラフである．

完全 2 部グラフのように，点集合のある分割 $V = V_1 \sqcup V_2$ が存在して，V_1 内，V_2 内にはそれぞれ全く辺が無いようにできるとき，そのグラフは 2 部グラフであるという．2 頂点の完全グラフ K_2 は 2 部グラフであるが，3 頂点の完全グラフ K_3 は 2 部グラフではない．一般に，3 頂点以上の完全グラフは勝手な 3 頂点を選ぶと必ず “三角形” が出来てしまうので 2 部グラフではない．

グラフ X の点 x と隣接している点の集合を x の近傍といい，$N(x)$ で表す．$N(x)$ の元の個数は x の次数と呼ばれ，$\deg x$ と書かれる．例えば，図 1 の棒人間的なグラフにおいては $N(1) = \{2, 4\}$ であるから $\deg 1 = 2$ であり，$N(5) = \{4, 6, 7, 8\}$ であるから $\deg 5 = 4$ である．また，グラフの任意の点 x の次数が常に k であるとき，そのグラフは k-正則グラフであるという．

点 x において，$\deg x$ は x と隣接している点の個数であるが，これを点 x に接続している辺の個数と見ると，次数の総和は，各辺を 2 回ずつカウントすることになるので次の命題が成り立つ．この主張は握手補題として大変よく知られている．

Theorem 1.3. グラフ X において次が成り立つ：

$$\sum_{x\in V(X)} \deg x = 2|E(X)|$$

特に，グラフの頂点の次数の総和は常に偶数である．

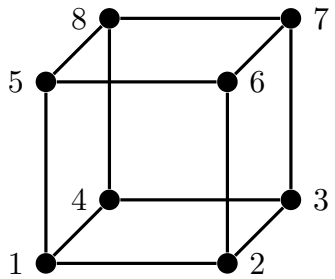
2　隣接行列とその基本的な性質

スペクトラルグラフ理論においては，グラフから様々な行列を定義し，その固有値を解析することを通してグラフを解析する．グラフの性質が固有値の性質としてどのように現れるか，あるいは，固有値の性質を見てグラフの何が分かるのか，グラフの不変量を固有値を用いて評価することができるか，固有値によってグラフを特徴づけることはできるか，など考察できる問題は数多く存在する．

グラフから定まる行列のうち，最も代表的なものは隣接行列であろう．X をグラフとする．このとき，X の隣接行列 $A(X)$ とは，$V(X)$ によって添え字付けられる行列で，

$$A(X)_{xy} = \begin{cases} 1 & \text{if } x \sim y, \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

によって定義される行列である．隣接行列の固有値の多重集合をグラフのスペクトルという．グラフとその隣接行列の例を下に与える．

$X =$ 

$$\leftrightarrow\ A(X) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

隣接行列の対角成分は常に 0 であるから，そのトレースも 0 である．したがって，グラフの固有値の総和は常に 0 となる．また，グラフ X の隣接行列を A とすると，

$$A^2_{xy} = \sum_{z\in V(X)} A_{xz}A_{zy} = \#\{z \in V(X) \mid x \sim z, z \sim y\} = |N(x) \cap N(y)|$$

となる．特に，$A^2_{xx} = |N(x)| = \deg x$ である．したがって，握手補題から

$$\operatorname{tr} A^2 = \sum_{x\in V(X)} A^2_{xx} = \sum_{x\in V(X)} \deg x = 2|E(X)|$$

が成立することが分かる．

また，隣接行列の第 x 行を見たとき，その行に現れる 1 の数は $\deg x$ 個であるから，グラフが正則グラフの場合は，隣接行列の行和は常に一定である．これは，成分がすべて 1 であるベクトル $\mathbf{1}$ が固有ベクトルとして現れることに他ならない．このように，グラフの性質は固有値や固有ベクトルの性質として反映されるケースが非常に多い．この他にも，グラフが 2 部グラフかそうでないかも固有値によって判定することができる．

Example 2.1 (完全グラフのスペクトル)**.** 完全グラフのスペクトルを計算してみよう．J_n を成分がすべて 1 の n 次正方行列とし，I_n を n 次の単位行列とすると，$A(K_n) = J_n - I_n$ とかける．よって，J_n の固有値が分かれば良い．J_n のランクは 1 であるから $\dim \mathrm{Ker}\, J_n = n - 1$ より，0 は J_n の固有値でありその重複度は $n - 1$ である．残りの固有値については，$\mathbf{1}$ が固有値 n に対する固有ベクトルとなっているから結局 J_n の固有値は n がひとつ，0 が $n - 1$ 個である．したがって，$\mathrm{Spec}(K_n) = \{n - 1^{(1)}, -1^{(n-1)}\}$ と分かる．

Example 2.2 (完全 2 部グラフのスペクトル)**.** 次は，完全 2 部グラフ $K_{m,n}$ のスペクトルを求める．$K_{m,n}$ の隣接行列は，

$$A(K_{m,n}) = \begin{bmatrix} O & J_{m,n} \\ J_{m,n}^{\top} & O \end{bmatrix}$$

とかける．ここで，$J_{m,n}$ はすべての成分が 1 である $m \times n$ 行列を表す．$A(K_{m,n})$ のランクは 2 であるから，0 は $A(K_{m,n})$ の固有値でその重複度は $m + n - 2$ である．また，少し考えると固有値 $\sqrt{mn}$ の固有ベクトルを見つけることができる．さらに，固有値の総和が 0 だったことを思い出すと，残りの固有値は $-\sqrt{mn}$ に決まる．したがって，$\mathrm{Spec}(K_{m,n}) = \{\sqrt{mn}^{(1)}, 0^{(m+n-2)}, -\sqrt{mn}^{(1)}\}$ と分かる．

3　有向グラフとその隣接行列

先までのセクションでは，向きの無いグラフを考え，その隣接行列の固有値の考察を行った．以降では，辺に向きをもつグラフ，すなわち有向グラフについて考えてみよう．

無向グラフでは，集合とその 2 点部分集合の集合のペアでもって無向グラフの定義を与えた．有向グラフでは，向きをもつ辺の集合として点集合 V の順序対 $V \times V$ の部分集合を考えるのが自然である．ただし，今回はループを持たないものを考えたいので，(x, x) のような順序対は持たないこととする．きちんと書くと，有向グラフ X

とは，集合のペア $(V(X), D(X))$ のことで，$V(X)$ は空でない有限集合であり，$D(X)$ は $V(X) \times V(X) \setminus \{(x,x) \mid x \in V(X)\}$ の部分集合である．$V(X)$ をグラフ X の頂点集合といい，$V(X)$ の元を頂点という．また，$D(X)$ の元を有向辺または弧という．$(x,y) \in D(X)$ であるとき，$x \to y$ で表す．

有向グラフの隣接行列も，無向グラフのときと同様に定めることができる．X を有向グラフとする．このとき，X の隣接行列 $A(X)$ とは，$V(X)$ によって添え字付けられる行列で，

$$A(X)_{xy} = \begin{cases} 1 & \text{if } x \to y, \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

によって定義される行列である．隣接行列の固有値の多重集合を有向グラフのスペクトルという．

無向グラフの場合，隣接行列の固有値はグラフの不変量としてそれなりに強いが，有向グラフの場合はどうだろうか．次の例を考える．

Example 3.1 (transitive tournament)**.** n 頂点の transitive tournament T_n とは，隣接行列が次のようにして与えられる有向グラフである：

$$A(T_n) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}.$$

この行列は，対角成分がすべて 0 である上三角行列であるから $\mathrm{Spec}(T_n) = \{0^{(n)}\}$ である．対角成分がすべて 0 である上三角行列を隣接行列にもつ有向グラフは数多く存在する．実際，transitive tournament の任意の「部分グラフ」である

$$\begin{bmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ 0 & 0 & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{n-1,n} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}.$$

を隣接行列にもつ有向グラフを考えると，任意の $a_{ij} \in \{0,1\}$ に対してこの有向グラフのスペクトルが transitive tournament と同じであることは明らかであろう．transitive tournament の例に限らず，有向グラフのスペクトルはグラフの不変量としてはそれほど強くないことが Guo–Mohar の論文 [5] からも分かる． このような背景があり，我々は有向グラフから定まる行列で，ある程度不変量として強いものが欲しいと考えている．

4　無向グラフ上の量子ウォーク

近年，グラフ上の量子ウォークが盛んに研究されている．量子ウォークにおいては，量子探索問題をはじめとして，物理や工学への応用が期待できる研究もあれば，周期性に関する考察など，数学的な興味としてランダムウォークとの対比の研究など様々な問題がある．一方で，量子ウォークから定まるある行列の固有値が，強正則グラフと呼ばれるあるグラフクラスの特別なシチュエーションにおいては「グラフの同型性を完全に識別できる」という結果を出した [3]． この考察によって，量子ウォークを定める行列や量子ウォークが定める行列がグラフの同型問題を解くための道具として注目されるようになった．

Grover walk と呼ばれる量子ウォークは，シフト作用素とコイン作用素と呼ばれるふたつの行列 (作用素) の積によって定義される．また，コイン作用素は境界作用素を用いて定義される．無向グラフ $X = (V, E)$ において，辺集合の各辺を双方向の弧からなる弧の集合と見たものを A とする，すなわち，$A = \{(x, y), (y, x) \mid \{x, y\} \in E\}$ とする．また，弧 a の始点を $o(a)$, 終点を $t(a)$ とかき，a の逆向きの弧を a^{-1} で表す．複素数を成分とする行列で行が V, 列が A によって添え字付けられる行列 K を

$$K_{v,a} = \frac{1}{\sqrt{\deg v}}\delta_{v,t(a)}$$

によって定める．ここで，δ はクロネッカーのデルタである．また，A によって添え字付けられる行列 S を

$$S_{ab} = \delta_{a,b^{-1}}$$

によって定義し，

$$C = 2K^*K - I$$

とする．ここで定義した K, S, C はそれぞれ境界作用素，シフト作用素，コイン作用素と呼ばれ，本来はヒルベルト空間上での線形作用素として定義されるが，私は代数的グラフ理論，あるいはスペクトラルグラフ理論の立場から量子ウォークの研究を行いたいと思っているため，必要に迫られない限り作用素はすべて行列の言葉に書き換えている．また，

$$U = SC$$

によって定まる行列を Grover transfer matrix といい，この U を時間発展作用素として定まる量子ウォークを Grover walk と呼ぶ．S, C がユニタリであることは直ちに確かめ

られるので，したがって U もユニタリ行列 (作用素) である．なお，U の (e, f) 成分は次のように計算することができる．

$$U_{ef} = \frac{2}{\deg_X(t(f))}\delta_{t(f),o(e)} - \delta_{e^{-1},f}.$$

U の固有値解析については非常に多くの結果が知られているが，ここでは解説しない．

実数を成分とする行列 M の正台 M^+ とは

$$(M^+)_{ab} = \begin{cases} 1 & \text{if } M_{ab} > 0, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

によって定まる行列である．U の 3 乗の正台 $(U^3)^+$ は，あるパラメータの強正則グラフを固有値によって完全に識別し，「強正則グラフの同型問題は $(U^3)^+$ の固有値で完全に解決できる」という予想が立つほど盛り上がったこともかつてはあったが，この予想は Godsil らによって否定的に解決された [4]．しかしながら，量子ウォークを媒介して定義された行列がスペクトラルグラフ理論で活躍したことは大変興味深く，面白いといえるだろう．

5　有向グラフ上の Grover walk

先のセクションでは，無向グラフ上で Grover walk を定義した．本研究の目的は，この無向グラフ上での Grover walk を有向グラフ上に拡張することである．また，それが可能な場合，我々は新たな「(有向) グラフから定まる行列」を手に入れることができたことになり，その行列の固有値の不変量としての強さを考察するべきである．以上のことについて，現在 (2018 年 12 月 17 日) までに分かっていることをまとめて本稿を締めくくりたい．また，以下の研究は横浜国立大学の瀬川悦生氏と広島工業大学の谷口哲至氏との共同研究に基づく．

有向グラフ $X = (V, D)$ において，$D^{-1} = \{a^{-1} \mid a \in D\}$ とし，$D^{\pm 1} = D \cup D^{-1}$ と定める．弧の集合として $D^{\pm 1}$ をもつグラフ $X^{\pm 1} = (V, D^{\pm 1})$ は，いわゆる X の underlying graph と呼ばれる無向グラフである．X の点 x について，その次数 $\deg_X x$ を

$$\deg_X x = \deg_{X^{\pm 1}} x$$

によって定める．これから定義する有向グラフ上の Grover walk でも，“波” は $D^{\pm 1}$ 上を動いてもらうが，有向辺上を動くときだけ適切な重みをつけておく．そのようにして量子ウォークを定める行列を定義してしまえば，それはもはや有向グラフ上の量子ウォークと呼んでよいだろう．

有向グラフ $X = (V, D)$ に対し，複素数を成分とする行列で行が V, 列が $D^{\pm 1}$ によって添え字付けられる行列 K を

$$K_{v,a} = \frac{1}{\sqrt{\deg v}} \delta_{v,t(a)}$$

によって定める．また，実数 η に対して，$D^{\pm 1}$ を定義域とする実数値関数 θ を

$$\theta(a) = \begin{cases} \eta & \text{if } a \in D \setminus D^{-1}, \\ -\eta & \text{if } a \in D^{-1} \setminus D, \\ 0 & \text{if } a \in D \cap D^{-1} \end{cases}$$

と定める．(後を見ると分かるが，η は実質的には回転角，すなわち有理数倍の π を想定している．) また，$D^{\pm 1}$ によって添え字付けられる行列 S_θ を

$$(S_\theta)_{ab} = e^{i\theta(b)} \delta_{a,b^{-1}}$$

によって定義し，

$$C = 2K^* K - I$$

とする．そして，量子ウォークを定める時間発展作用素を

$$U_\theta = S_\theta C$$

と定める．S_θ, C はやはりユニタリであるから，U_θ もまたユニタリ行列である．また，$D^{\pm 1}$ によって添え字付けられる対角行列 D_θ を $(D_\theta)_{ab} = e^{i\theta(a)} \delta_{a,b}$ によって定める．本稿では，U_θ の正台に関する結果をまとめる．

Definition 5.1. X を関数 θ を兼ね備えた有向グラフとする．正の整数 n に対して，$D^{\pm 1}$ で添え字付けられる行列 $U_\theta^{n,+}$ を

$$(U_\theta^{n,+})_{ab} = \begin{cases} 1 & \text{if } \mathrm{Re}(D_\theta U_\theta^n)_{ab} > 0, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

と定め，U_θ の n 乗の正台と呼ぶ．

このような定義を与えたのは，無向グラフ上の Grover transfer matrix の正台と類似性を持たせるためである．実際，1 乗の正台に関しては，$\mathrm{Re}(D_\theta U_\theta)_{ab}$ が正であることと，U_{ab} が正であることが同値になり，したがって次のことが分かる．

Proposition 5.2. 次が成り立つ：

$$U_\theta^{1,+} = U^+.$$

また，X が k-regular な有向グラフで $k \geq 3$ ならば

$$U_\theta^{1,+} = kSK^*K - S.$$

が成り立つ．

2 乗の正台については次のことが分かった．

Proposition 5.3. X を関数 θ を兼ね備えた k-regular な有向グラフで $k \geq 3$ とする．$-\frac{\pi}{2} < \eta < \frac{\pi}{2}$ ならば，次が成り立つ：

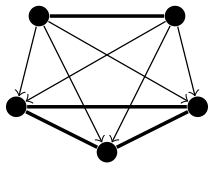
$$U_\theta^{2,+} = (U^+)^2 + I.$$

以上の命題は，例えば $\eta = \pm\frac{\pi}{2}$ の場合は一般には成立しない．しかしながら，この「一般には成立しない」という状況こそが有向グラフの固有値による識別という観点からは都合が良い．

Example 5.4. n を正の整数とし，$a \in \{0, 1, \ldots, n\}$ とする．Guo–Mohar はエルミート隣接行列と呼ばれる，有向グラフから定まる行列で隣接行列とはまた違ったものを定義した．以下に定めるグラフ $Y_{a,n-a}$ は，そのエルミート隣接行列の意味で完全グラフ K_n と同じスペクトルをもつグラフである．

$$\begin{aligned} V(Y_{a,n-a}) &= [n] = \{1, 2, \ldots, n\}, \\ D(Y_{a,n-a}) &= \{(x, y) \mid x, y \in [a], x \neq y\} \\ &\quad \sqcup \{(x, y) \mid x, y \in [n] \setminus [a], x \neq y\} \\ &\quad \sqcup \{(x, y) \mid x \in [a], y \in [n] \setminus [a]\}. \end{aligned}$$

例えば，$Y_{2,3}$ は次のグラフである．太字の無向辺は双方向の弧を表している．



この $Y_{a,n-a}$ の固有値による識別に関して，次のことが分かった．

Proposition 5.5. $\eta = \frac{\pi}{2}$ とする．また，$a \geq n-a$, $a' \geq n-a'$ (i.e., $a, a' \geq \frac{n}{2}$) とする．もし $a \neq a'$ ならば

$$\Phi(U_\theta^{2,+}(Y_{a,n-a})) \neq \Phi(U_\theta^{2,+}(Y_{a',n-a'})).$$

が成り立つ．ここで，$\Phi(U_\theta^{2,+}(X))$ は，有向グラフ X における $U_\theta^{2,+}$ の固有多項式を表す．

今後，様々なグラフクラスにおいて，$U_\theta^{n,+}$ の同型不変量としての強さを調べていくつもりである．実際にはもう少し分かっていることもあるが，紙面の都合上本稿はここで締めくくることにする．

参考文献

[1] A.E. Brouwer, W.H. Haemers, *Spectra of Graphs*, Springer, New York, 2012.

[2] Dragoš M. Cvetković, M. Doob, S. Horst, *Spectra of graphs*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1982.

[3] David Emms, Edwin R. Hancock, Simone Severini, and Richard C. Wilson, *A matrix representation of graphs and its spectrum as a graph invariant*, Electr. J. Comb., 13(1), 2006.

[4] C. Godsil, K. Guo, and T. G. J. Myklebust, *Quantum walks on generalized quadrangles*, arXiv:1511.01962.

[5] K. Guo, B. Mohar, *Hermitian adjacency matrix of digraphs and mixed graphs*, J. Graph Theory 85 (1) (2017) 217–248.

[6] C.D. Godsil and G. Royle, *Algebraic Graph Theory*, Graduate Texts in Mathematics, vol. 207, Springer, New York, 2001.

[7] 仁平政一，西尾義典，「グラフ理論序説」，プレアデス出版，2010.