セゲディウォークが対応する佐藤ゼータ函数

横浜国立大学大学院 理工学府 数物・電子情報系理工学専攻
石川彩香 (Ayaka Ishikawa)

1　概要

量子ウォークとはランダムウォークのウォーカーにスピンという状態を付与した数理モデルであり，ランダムウォークの量子版と言われている．現在，量子ウォークは多岐にわたる分野で研究されており，例えば量子探索や金融データの解析，さらには放射性同位体分離などでも応用されている (e.g., [8, 10, 11])．量子ウォークの挙動を解析するのはランダムウォークに比べて格段に難しく，「グラフ・量子ウォークモデル・初期状態」をどう設定するかによって挙動の特徴は大きく変わる．特に我々が扱っている有限グラフ上の離散時間量子ウォークは，その遷移を定める「遷移行列」の固有値を求めることで「局在化」や「周期性」などの遷移の特徴を掴むことができる．特に，量子ウォークの代表的なモデルの一つであるグローヴァーウォーク [2] は，「佐藤ゼータ」というグラフゼータを用いて遷移行列の特性多項式を与えることができる [7]．これは，佐藤ゼータの行列式表示の一つである「橋本表示」を構成する「辺行列」[9] が，遷移行列と類似した構成になっていることが要因となっている．さらに，もう一つの行列式表示である「伊原表示」に変形することで，グローヴァー遷移行列の固有値を明示的に与えることが可能となった [7]．本稿の主題にもある「セゲディウォーク」とはグローヴァーウォークを一般化したモデルである [13]．先行研究のグラフゼータにはセゲディウォークに対応するようなものは存在せず，本研究にて初めて定義された [4]．本講演では，このセゲディ遷移行列の固有値を与えるために，セゲディウォークに対応するグラフゼータの伊原表示について紹介する．

先の話にも既に出てきたが，改めてグラフゼータについて簡単に紹介しよう．グラフゼータとはグラフ上定義されたセルバーグゼータの類似である．1966 年に伊原 [6] によって初めて定義されて以来，様々なグラフ上で多くの種類のゼータが定義・研究されてきた (e.g. [1, 12])．グラフゼータにおける大きな研究の話題として，グラフゼータのもつ「表示」が挙げられる．一般に，グラフゼータはオイラー積（以下，オイラー表示と呼ぶ）で定義されるのが通例であり, 指数関数を用いた「指数表示」や橋本表示，伊原表示の導出は各グラフゼータで別個に導出されてきた．その中で，森田氏 [9] は「指数表示・オイラー表示・橋本表示」が同様の手法によって導出されている点に注目し, グラフゼータの三種の表示が互いに変形可能であることを示した．しかし，グラフゼータでしか観察されていない伊原表示については，どのような条件下で変形可能かは述べられていない．さらに，グラフが有向か無向かによって伊原表示に現れる行列が若干異なることが，既存のグラフゼータを特別な場合にもつ「一般荷重ゼータ」において確認された [3, 5]．本稿で紹介するゼータは一般荷重ゼータには含まれないが，伊原表示をもつことが確認された [4]．また，一般荷重ゼータと同様に，グラフが有向か

無向かによって伊原表示は異なり，有向グラフに対するゼータの伊原表示にはこれまでに観察されてこなかった行列が現れた．この結果は，伊原表示の存在性を議論するにあたって，そもそもの伊原表示の定義を拡張する必要性が出てきたということである．

本稿で扱うグラフは有限であり，特に断りがない限り多重辺（多重アーク）や多重ループを許す．$\mathbb{C}$ 上正方行列 M に対し，M の固有値全体の集合を $\mathrm{Spec}(M)$ と書く．命題 P に対し，δ_P を P が真の時に 1，偽の時に 0 を返す関数とする．

なお．本研究は今野紀雄氏との共同研究であり，JSPS 特別研究員奨励費 (課題番号:20J20590) の助成を受けたものである．

2 定義

集合 V と，V のいくつかの 2 元集合からなる集合 E からなる組 $G=(V,E)$ をグラフといい，V,E の元をそれぞれ頂点，辺と呼ぶ．グラフを描画する場合，辺 $\{u,v\}\in E$ は頂点 u,v を実線で結んで表される．V,E が共に有限集合の場合，G を有限グラフという．辺 $\{u,u\}\in E$ をループと呼ぶ．各 2 頂点間に辺が高々 1 つしか存在せず，さらにはどの頂点にもループが存在しないとき，そのようなグラフは単純であるという．頂点 u に接続する辺の個数 $\#\{\{u,v\}\in E|v\in V\}$ を u の次数といい，$\deg(u)$ で表す．

V を頂点集合，いくつかの頂点順序対からなる集合を $\mathcal{A}$ とおく．このとき，集合の組 $\Delta=(V,\mathcal{A})$ を有向グラフといい，$\mathcal{A}$ の元をアーク（有向辺）と呼ぶ．有向グラフを描画する場合，各アーク $a=(u,v)$ は頂点 v 側に矢尻が来るような u,v を結ぶ矢印で表される．また，このようなアーク a に対し，u,v をそれぞれ尾 (tail)，頭 (head) といい，$\mathfrak{t}(a),\mathfrak{h}(a)$ で表す．頂点 $u,v\in V$ に対し，次のアーク部分集合を定義する: $\mathcal{A}_{uv}:=\{a\in\mathcal{A}\mid\mathfrak{t}(a)=u,\mathfrak{h}(a)=v\}$, $\mathcal{A}_{u*}:=\{a\in\mathcal{A}|\mathfrak{t}(a)=u\}$, $\mathcal{A}_{*v}:=\{a\in\mathcal{A}\mid\mathfrak{h}(a)=v\}$, $\mathcal{A}(u,v):=\mathcal{A}_{uv}\cup\mathcal{A}_{vu}$. 無向グラフ $G=(V,E)$ に対して，アーク集合 $\mathcal{A}(G):=\{(u,v),(v,u)|e=\{v,u\}\in E\}$ を定義する．このとき，有向グラフ $\Delta(G)=(V,\mathcal{A}(G))$ を G に対する対称有向グラフという．また，元のグラフの辺に対応する 2 つのアークを互いに他の逆アークとする．$a,a'\in\mathcal{A}(G)$ が互いに逆アークであるとき，$\overline{a}=a'$ と書く．

2.1 セゲディウォーク

$G=(V,E)$ を単純グラフ，$\Delta(G)=(V,\mathcal{A})$ を G に対する対称有向グラフとする．任意の頂点 v に対し，$\sum_{a\in\mathcal{A}(G),\mathfrak{t}(a)=v}p(a)=1$ を満たす写像 $p:\mathcal{A}\to(0,1]$ を G 上の遷移確率という．セゲディウォーク [13] とは，以下の遷移行列 $U_{\mathrm{SZ}}=(u_{\mathrm{SZ}}(a,a'))_{a,a'\in\mathcal{A}}$ で定義される量子ウォークモデルである:

$$u_{\mathrm{SZ}}(a,a'):=2\sqrt{p(a)p(\overline{a'})}\delta_{\mathfrak{t}(a)\mathfrak{h}(a')}-\delta_{a'\overline{a}}.$$

ただし, $\delta_{\mathfrak{t}(a)\mathfrak{h}(a')}$ はクロネッカーのデルタである．これは, 次の遷移行列 $U_{\mathrm{GR}}=(u_{\mathrm{GR}}(a,a'))_{a,a'\in\mathcal{A}}$ で定義されるグローヴァーウォークの一般化と言われている:

$$u_{\mathrm{GR}}(a,a'):=\frac{2}{\deg\mathfrak{t}(a)}\delta_{\mathfrak{t}(a)\mathfrak{h}(a')}-\delta_{a'\overline{a}}.$$

実際，各 $a\in\mathcal{A}(G)$ に対して $p(a)=\frac{2}{\deg\mathfrak{t}(a)}$ とおくと $U_{\mathrm{SZ}}=U_{\mathrm{GR}}$ が成り立つ．

2.2 佐藤ゼータ

グラフ G に対する対称有向グラフ $\Delta(G)=(V,\mathcal{A}(G))$ を考える．任意の写像 $\tau:\mathcal{A}\to\mathbb{C}$ に対し，写像 $\theta^{\mathrm{S}}:\mathcal{A}\times\mathcal{A}\to\mathbb{C}$ を

$$\theta^{\mathrm{S}}(a,a')=\tau(a')\delta_{\mathfrak{h}(a)\mathfrak{t}(a')}-\delta_{a'\overline{a}}$$

と定義する．これを佐藤ゼータの荷重と呼ぶ．$|\mathcal{A}(G)|$ 次正方行列 $M_{\mathrm{S}}=(\theta^{\mathrm{S}}(a,a'))_{a,a'\in\mathcal{A}(G)}$ を辺行列と呼ぶ．これを用いて佐藤ゼータを以下のように定義する:

$$Z_{\Delta(G)}(t;\theta^{\mathrm{S}})=\frac{1}{\det(I-tM_{\mathrm{S}})}.$$

このような行列式表示を橋本表示という．元々の論文 [12] ではオイラー表示という別の表示で定義されていたが，この荷重は隣接条件 (see [9]) を満たすので，オイラー表示は橋本表示へ常に変形できる．本稿では量子ウォークとの関係を観察しやすくするため，橋本表示で定義した．

$|V|$ 次正方行列 $A^{\mathrm{S}}_{\Delta(G)}$, $D^{\mathrm{S}}_{\Delta(G)}$ を以下で定義する:

$$(A^{\mathrm{S}}_{\Delta(G)})_{uv}=\sum_{a\in\mathcal{A}_{uv}}\tau(a),\quad (D^{\mathrm{S}}_{\Delta(G)})_{uv}=\delta_{uv}\sum_{a\in\mathcal{A}_{u*}}\tau(a)$$

これらを用いて，佐藤ゼータは次の行列式表示に変形できる．

命題 1 (Sato [12])**.**

$$Z_{\Delta(G)}(t;\theta^{\mathrm{S}})=\frac{1}{(1-t^2)^{|E|-|V|}\det(I-tA^{\mathrm{S}}_{\Delta(G)}+t^2(D^{\mathrm{S}}_{\Delta(G)}-I))}.$$

このような行列式表示を伊原表示と呼ぶ．

注意 1. $\tau(a')=\frac{2}{\deg\mathfrak{t}(a')}$ と定めると，$U_{\mathrm{GR}}={}^tM_{\mathrm{S}}$ が成り立つ．一方で，セゲディ遷移行列と等しくなるような τ の設定はできないことに注意されたい．

以上の佐藤ゼータとグローヴァーウォークの関係を用いて，グローヴァー遷移行列の固有値集合が与えられる．

命題 2. 単純グラフ G に対して，グローヴァー遷移行列の特性多項式は次のように表せる*:*

$$\begin{aligned}\det(\lambda I-U_{\mathrm{GR}})&=(\lambda^2-1)^{|E|-|V|}\det((\lambda^2+1)I-2\lambda T)\\&=(\lambda^2-1)^{|E|-|V|}\prod_{\mu\in\mathrm{Spec}(T)}((\lambda^2+1)-2\mu\lambda).\end{aligned}$$

ただし，$T=(T_{uv})_{u,v\in V}$ は以下で定義される行列である*:*

$$T_{uv}=\begin{cases}\frac{1}{\deg(u)} & \textit{if}\ \ \{u,v\}\in E,\\ 0 & \textit{otherwise.}\end{cases}$$

さらに，グローヴァー遷移行列の固有値集合は次の通りである*:*

$$\mathrm{Spec}(U_{\mathrm{GR}})=\{\pm1\}^{|E|-|V|}\sqcup\{\lambda\mid\lambda^2-2\mu\lambda+1=0,\ \text{for each}\ \mu\in\mathrm{Spec}(T)\}.$$

3 セゲディウォークに対応するゼータとその伊原表示

冒頭にも述べた通り，ここで新しく導入するグラフゼータはグラフが有向か無向かにより導出される伊原表示が異なる．その要因は「逆アーク」の設定にある．先の佐藤ゼータは無向グラフに対する対称有向グラフ上で定義されていたが，そこでは各アークに対して必ず逆が 1 つ定まるように「逆アーク」を定義していた．しかし，多重アークや多重ループが存在するような有向グラフ上でゼータを考えるとき，そのような逆の一対一対応がうまく作れない場合がある．この状況に対して，どのような有向グラフ上でも定義できるような逆の定義を与えたのが I-森田-佐藤 [5] である．そこでは，各アークに対して「それとは逆向きのアーク全てを逆アーク」と定義した．本稿では，この 2 つの逆アークの定義により，伊原表示がどのように変わるかを以下で述べていく．

改めて「逆アーク」の定義を明記しよう．グラフ $G=(V,E)$ に対し，$\Delta(G)=(V,\mathcal{A}(G))$ を G に対する対称有向グラフとする．各辺 $e\in E$ には 2 つのアーク $a,a'\in\mathcal{A}(G)$ が対応し，それらを互いに他の逆アークとする．一方，有向グラフ $\Delta=(V,\mathcal{A})$ において，各 $u,v\in V$，各アーク $a\in\mathcal{A}_{uv}$ に対して，任意のアーク $a'\in\mathcal{A}_{vu}$ を a の逆アークとする．ただし，ループ $a\in\mathcal{A}_{uu}$ の逆アークの集合は $\mathcal{A}_{uu}$ であり，a 自身も a の逆アークに含まれる．今後，「逆」の定義に依らずアーク a の逆アークの集合を a^{-1} と書くこととする．また，グラフ G に対する対称有向グラフを考える際には前者の「逆」の定義を，一般の有向グラフを考える際には後者の「逆」の定義を用いることとする．

$\Delta=(V,\mathcal{A})$ を有限有向グラフとする．ただし，この Δ は対称有向グラフか一般の有向グラフかは問わない．写像 $\tau_1,\tau_2:\mathcal{A}\to\mathbb{C}$ に対し，写像 $\tau:\mathcal{A}\times\mathcal{A}\to\mathbb{C}$ を $\tau(a,a')=\tau_1(a)\tau_2(a')$ と定義する．さらに, 写像 $\theta:\mathcal{A}\times\mathcal{A}\to\mathbb{C}$ を $\theta(a,a')=\tau(a,a')\delta_{\mathfrak{h}(a)\mathfrak{t}(a')}-\delta_{a'\in a^{-1}}$ と定める．前述の通り, 逆アークの定義は扱うグラフによって変化するので注意されたい．辺行列 $M=(\theta(a,a'))_{a,a'\in\mathcal{A}}$ を用いて, 以下のようにグラフゼータを定義する:

$$Z_{\Delta}(t;\theta)=\frac{1}{\det(I-tM)}.$$

このゼータは森田 [9] で示された三種の表示をもつための条件を満たし，「指数表示・オイラー表示・橋本表示」は常に可変であることから，ここではセゲディウォークと関係のある橋本表示で定義する．

それでは，まずは無向グラフに対するゼータの伊原表示を示す．グラフ G に対する対称有向グラフ $\Delta(G)=(V,\mathcal{A}(G))$ について，$|V|$ 次正方行列 $A_{\Delta(G)},D_{\Delta(G)}$ を次で定義する:

$$(A_{\Delta(G)})_{uv}:=\sum_{a\in\mathcal{A}_{uv}}\tau(a,a),\qquad (D_{\Delta(G)})_{uv}:=\delta_{uv}\sum_{a\in\mathcal{A}_{u*}}\tau(\overline{a},a).$$

定理 1 (無向グラフに対する $Z_{\Delta(G)}(t;\theta)$ の伊原表示 (I-Konno [4]))**.** グラフ G に対する対称有向グラフ $\Delta(G)=(V,\mathcal{A}(G))$ に対し，

$$Z_{\Delta(G)}(t;\theta)=\frac{1}{(1-t^2)^{|E|-|V|}\det(I-tA_{\Delta(G)}+t^2(D_{\Delta(G)}-I))}$$

が成り立つ．

行列 $A_{\Delta(G)}$ の (u,v) 成分は u から v へ向かうアーク a の $\tau(a,a)$ の総和を取っている．$\tau_1=\tau_2=1$ とすれば, $A_{\Delta(G)}$ はグラフ G の隣接行列となることからも, これは隣接行列の類似と言える．また, 同様に $\tau_1=\tau_2=1$ のとき $D_{\Delta(G)}$ は次数行列となることより, これは次数行列の類似と言える．

次に，対称有向グラフではない一般の有向グラフ $\Delta=(V,\mathcal{A})$ 上のゼータの伊原表示を示す．各頂点 $u,v\in V$ に対し，行列 $J(u,v)=(\delta_{a\in a^{-1}})_{a,a'\in\mathcal{A}(u,v)}$ を定義する．さらに，$f(t;u,v)=\det(I+tJ(u,v))$ とおくと，

$$f(t;u,v):=\det(I+tJ(u,v))=\begin{cases}1-|\mathcal{A}_{uv}||\mathcal{A}_{vu}|t^2 & \text{if} \quad u\neq v,\\ 1+|\mathcal{A}_{uu}|t & \text{otherwise}\end{cases}$$

が成り立つ．さらに，$|V|$ 次正方行列 $A_\Delta,\overline{D}_\Delta,\overline{X}_\Delta$ を次で定義する:

$$\begin{aligned}(A_\Delta)_{uv}&:=\sum_{a\in\mathcal{A}_{uv}}\tau(a,a),\\ (\overline{D}_\Delta)_{uv}&:=\delta_{uv}\sum_{x\in V}f(t;u,x)^{-1}\sum_{a\in\mathcal{A}_{ux},a'\in a^{-1}}\tau(a',a),\\ (\overline{X}_\Delta)_{uv}&:=f(t;u,v)^{-1}|\mathcal{A}(u,v)\backslash\mathcal{A}_{uv}|\sum_{a,a'\in\mathcal{A}_{uv}}\tau(a,a').\end{aligned}$$

定理 2 (有向グラフに対する $Z_\Delta(t;\theta)$ の伊原表示 (I-Konno [4]))**.** 多重アークや多重ループを許す有限有向グラフ $\Delta=(V,\mathcal{A})$ 上の $Z_{\Delta(G)}(t;\theta)$ は以下のように書ける*:*

$$Z_\Delta(t;\theta)=\frac{1}{\prod_{u,v\in V}f(t;u,v)\det(I-tA_\Delta+t^2\overline{D}_\Delta-t^3\overline{X}_\Delta)}.$$

行列 $\overline{D}_\Delta$ は $Z_{\Delta(G)}(t;\theta)$ における $(1-t^2)^{-1}D_{\Delta(G)}$ に相当するものである．対称有向グラフにおいては，互いに逆アークとなる 2 つのアーク $a,\overline{a}$ に対する $\tau(\overline{a},a)$ の総和を取っている．一般の有向グラフでは各アークに対する逆アークは一意に決まらないので，a とその逆アーク $a'\in a^{-1}$ 全てに対して荷重 $\tau(a',a)$ の総和を取ることになる．この背景により，対称有向グラフにおける行列 $J(u,v)$ は，各辺 e とそれに対応する 2 つのアーク $a,\overline{a}$ に対して $J(e):=(\delta_{a'\in a^{-1}})_{a,a'\in\{a,\overline{a}\}}=\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}$ に相当している．よって，$f(t;u,v)$ も対称有向グラフにおいては $\det(I+tJ(e))=(1-t^2)$ にあたる．まとめると，行列 $\overline{D}_\Delta$ は $(1-t^2)D_{\Delta(G)}$ に対応し，これは次数行列の類似といえる．行列 A_Δ は $A_{\Delta(G)}$ と同様の定義であるが，$\overline{D}_\Delta,D_{\Delta(G)}$ の差により，実は A_Δ は $(1-t^2)^{-1}A_{\Delta(G)}$ に相当している．これも隣接行列の類似と言えよう．行列 $\overline{X}_\Delta$ は，この $A_\Delta,A_{\Delta(G)}$ 間の差によるもので生じた行列であることがわかる．

これまで, 伊原表示とはグラフの隣接行列と次数行列, またはそれらの類似で表される行列式表示であると捉えられてきたが, 既存のグラフゼータの荷重を少し拡張し, 有限有向グラフ上で考えると, $\overline{X}_\Delta$ のような行列が出現することが明らかになった．今後, より一般的な荷重をもつグラフゼータを考える上では,「伊原表示」の定義を改めて議論する必要がある．

参考文献

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

[2] Lov K. Grover (1996), *A fast quantum mechanical algorithm for database search*, Proceedings of the Twenty-Eighth Annual ACM Symposium on Theory of Computing, pp. 212-219.

[3] Y. Ide, A. Ishikawa, H. Morita, I. Sato and E. Segawa (2021), *The Ihara expression for the generalized weighted zeta function of a finite simple graph*, Linear Algebra and its Applications, Vol. 627, pp. 227-241.

[4] A. Ishikawa and N. Konno, *A weighted graph zeta function involved in the Szegedy walk*, Quantum Information and Computation, in press.

[5] A. Ishikawa, H. Morita and I. Sato, *The Ihara expression for generalized weighted zeta functions of Bartholdi type on finite digraphs*, in preparation.

[6] Y. Ihara (1966), *On discrete subgroups of the two by two projective linear group over p-adic fields*, Journal of the Mathematical Society of Japan, Vol. 18, pp.219-235.

[7] N. Konno and I. Sato (2012), *On the relation between quantum walks and zeta functions*, Quantum Information Processing, Vol. 11, pp.341-349.

[8] L. Matsuoka, A. Ichihara, M. Hashimoto, and K. Yokoyama (2011), *Theoretical study for laser isotope separation of heavy-element molecules in a thermal distribution*, In Proceedings of the International Conference Toward and Over the Fukushima Daiichi Accident (GLOBAL 2011), 392063.

[9] H. Morita (2020), *Ruelle zeta functions for finite digraphs*, Linear Algebra and its Applications, Vol. 603, pp.329-358.

[10] D. Orrell (2020), *A quantum walk model of financial options*, SSRN Electronic Journal.

[11] R. Portugal (2018), *Quantum Walks and Search Algorithms*, Springer International Publishing, 2nd edition.

[12] I. Sato (2007), *A new Bartholdi zeta function of a graph*, International Journal of Algebra, Vol. 1, pp.269-281.

[13] M. Szegedy (2004), *Quantum speed-up of markov chain based algorithms*, In 45th Annual IEEE symposium on foundations of computer science, pp.32-41.