

令和元年5月15日現在

機関番号：32622

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2018

課題番号：25400208

研究課題名(和文) グラフの幾何構造が支配するグラフのスペクトル構造と酔歩の挙動の解析

研究課題名(英文) The relationship between the behaviour of random walks and the spectral structure via some combinatorial geometries of graphs

研究代表者

樋口 雄介 (HIGUCHI, Yusuke)

昭和大学・教養部・講師

研究者番号：20286842

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,000,000円

研究成果の概要(和文)：主な成果として、ひとつは「量子ウォーク」に関するもので、東北大学(現、横浜国立大学)の瀬川悦生氏らと、ある意味波動性に重きをおいた量子ウォークとある意味粒子性に重きをおいた古典的酔歩の関連について進展が図れた。そこで示したスペクトル写像定理は現在では各所で用いられている。ふたつめは、野村祐司氏(兵庫県立大学)らと継続している共同研究「ラプラシアンの共鳴状態の解明」で、スペクトルの下端での埋蔵固有値が存続できるポテンシャルの摂動の存在とその摂動がなす代数多様体の具体的表現に成功した。最後に他分野への応用として、脳内辞書ネットワークの解析を田中幹大氏(甲南女子大学)らと行なった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

酔歩がより速く伝播するグラフの特徴付けは、未だ未解決な部分が多い双曲的なグラフの解明、さらには現実社会におけるネットワークの構築に貢献できるものである。一方、酔歩よりも速い拡散性を持つ量子ウォークへの研究成果は、今後より現実的に扱われるだろう量子コンピューティングなどの“量子化”された媒体での実装に貢献できると考えている。つまり当該研究は現状と未来を見据えた意義をもたらすと期待しても良いだろう。

研究成果の概要(英文)：Let us show three topics in our research supported by this grant. One is about quantum walks: we showed the spectral relationship between quantum walk and its underlying random walk. This kind of relation is now called “Spectral mapping theorem in quantum walk” and widely applied in this area. Next one is about some resonance of discrete Laplacians on a graph. We can characterize the intensities of potentials to keep the existence of edge-eigenvalues, which implies some eigenvalues whose value coincides with the lowest of continuous spectrum. Moreover we succeeded in construction of algebraic variety composed by such intensities. Finally, we tried to apply our basic results to one of other fields than mathematics: mental lexicon, which is one of topics in psycholinguistics.

研究分野：離散スペクトル幾何

キーワード：グラフ理論 スペクトル幾何 ラプラシアン 酔歩 量子ウォーク 状態密度函数 被覆構造 脳内辞書ネットワーク

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

## 1. 研究開始当初の背景

無限グラフのスペクトル幾何の研究(cf. [MW])において、多く見られるアプローチは、連続な構造を持つリーマン多様体上で導入されている各種幾何学的不変量が離散構造を持つグラフに対しても定義できるか、さらにはその性質の類似がどこまで成立するか、といったものである。研究代表者はこれまでに、たとえばグラフの曲率などをグラフの性質から導入しその正当化を示す(cf. [HS])など、離散ならではの、構造により注目し、幾何学的手法や解析的・確率論的手法を絡めたアプローチを行ってきた。本研究はその更なる発展を図るものであり、連続構造からの離散類似性を意識しながらも、離散ゆえの独自性が支配するグラフ上の作用素のスペクトル構造を解明することを目的としていた。もちろん先に発展してきた多様体でのスペクトル幾何の道具は強力なものが多く、類似する性質がグラフで見出されるときは大いに有用であるが、一方で離散構造故に連続の時に用いた戦略が使えないなどの理由の壁に阻まれると、全く歯が立たなくなることも多く見られる。したがって「連続からの離散類似」を意識しながらもとらわれ過ぎずに、離散独自の性質に注目した研究を継続することも重要と考えていた背景があった。もちろん今でも、そこでの成果は現実のネットワーク構築などはもとより、離散モデルを用いる各分野に反映もしくは適切に移植されることが期待され、つまりはグラフ理論・組合せ論や微分幾何にとどまらず、確率論、函数方程式論、さらには理論物理や情報工学さらには社会的ネットワーク分析の各分野の劇的な研究発展に貢献できるだろう。

[MW] B. Mohar and W. Woess, "A survey of spectra of infinite graphs", Bull. London Math. Soc. 21 (1989), 209-234.

[HS] Yu. Higuchi and T. Shirai, "Some spectral and geometric properties for infinite graphs", AMS Comtemp. Math. 347 (2004), 29-56.

## 2. 研究の目的

無限グラフのスペクトル幾何に関する従来から見られるアプローチは、先に発展してきた多様体上でのスペクトル解析の道具を離散の世界に忠実に移植するものであり、これは類似する性質がグラフに見いだされるときは非常に強力なものとなる。しかし一方で離散故の壁に阻まれて類似物が見られないときには全く歯がたたない。そこで本研究では、グラフという離散図形に潜む離散独自の性質に注目し、それがグラフ上の作用素のスペクトル構造やグラフ上の酔歩の挙動をいかに支配しているかを解析することを目的としている。ここでの成果は、ネットワーク上での情報の伝搬モデルなどの離散モデルを扱う各分野に応用されるだけでなく、さらには物性などの基本的性質の数学的解釈や新たなデバイスの作成なども期待される。また離散独自の性質と思われる性質の連続類似物を探ることにより、多様体でのスペクトル幾何に新たな光を与えることも可能となる。

なおグラフ上のダイナミクスである古典的酔歩や量子ウォークの挙動は、それぞれに附随するグラフ上の作用素、前者は離散ラプラス作用素、後者はユニタリ発展作用素、を解析することで多くの情報が引き出される。本研究のメインテーマは、それぞれのダイナミクスの挙動もしくは各種作用素のスペクトルと、グラフの持つ幾何的性質、とくに離散ゆえの組み合わせ構造との関係を明確にすることを目的としている。

## 3. 研究の方法

研究組織としては研究代表者ひとりであるので、基本としては手持ちや新たに入手した資料を用いて、グラフ理論・微分幾何・確率論のアイデアで目標を達成するものとなった。従来の研究の延長であるグラフ上の作用素のスペクトルとグラフの持つ幾何構造の関係の解析(離散スペクトル幾何)においては、構造を制御する離散独自の性質を浮き彫りにすると同時に、有限グラフの被覆無限グラフを可能な限り詳細に解析するため、被覆構造や商グラフの幾何的性質、さらには Harmonic Transform などの確率論的手法を用いてモデルの簡略化などを図ることを考えていた。その上で、量子ウォークと散乱作用素との関係なども詳細に調べてみた。初年度はとくに量子ウォークに関しては注目したばかりという研究代表者の背景もあり、主に国内に分散している様々な研究者の研究について議論しながら、研究代表者の研究に絡んだ話題でも活発な議論を繰り広げたい。様々な研究者を訪問(もしくは招へい)して議論を交わすこと主題におくこととなった。

なお当該研究は多種多様な分野の境界に属するので、研究代表者だけでは直接的な関係を引出せないような性質が多種あると感じていた。もちろん誰もがまだ発見していない普遍的な技術の不足によって行き先を阻まれる可能性もあったのだが、新たなアイデアの獲得や、研究代表者の中で眠っているアイデアを呼びさますためにも、多様な分野に属する研究者との密なる、かつ、継続的な交流が目標達成もしくはそれ以上の成果を出すためには必要と考え、実際に実行したつもりである。その他、新たな研究者と知り合う可能性を高め、新たなアイデアの取得や励起の可能性をより高めるためにも、可能な限り各種の研究集会に参加・講演した。

なお、たとえ当初の計画通りに研究が進まなくとも、ひとつひとつの議論や結果の蓄積は確実な進歩であり、いずれ当該分野もしくは隣接分野において「化学反応」を起こして新たな発見に至ることも期待できる、という意味でも無駄にはならないだろうという精神を維持したものである。

さらにグラフ上の作用素のスペクトル構造の理論的体系の構築、および、有限グラフ上の酔歩の被覆時間と幾何構造の相関関係に関する理論構築のためには、まず多くの具体例を調べることが重要だが、素朴な手計算では実質困難な例がほとんどである。したがって計算機計算でいけば「あたり」をつけてから手計算に戻るといった戦略、つまり数値計算による「実験」も並行して行うことになった。しかしこの類の計算の実装はたやすいものではなく、たとえば無限グラフ上のラプラス作用素のスペクトルを計算しようとする、有限部分グラフの増大列に対して、各有限グラフでディリクレ境界条件を付したラプラス作用素の最小固有値を次々に求めていく手法をとるため、思ったより進捗が遅かったのも事実である。同様に、有限グラフ上の酔歩の被覆時間や量子ウォークの時間発展に関しても、ひとつのグラフから大量のデータを取ることであり、グラフのサイズの増加と共に計算量が爆発してゆく。いずれにしても計算機自身の能力向上と共に、原則「疎な行列」である上記実験に対する有効なアルゴリズムの検討も必要となっていたが、こちらも予想以上に困難の壁がちはだかった。当初は手持ちの非力な PC を用いて、数値解析のソフトウェアの選択を含んだプログラムの作成の下準備を初年度に行い、2 年次以降により優れた計算機による本格的実行を開始する予定ではあったが、実際には本格的計算には至らなかったことを告白しておく。

また研究の発展のためには多分野にわたる多くの研究資料の迅速な入手が必要であったが、申請者が所属する部局には、数学専門誌の定期購読がないどころか数学に関する資料はほとんどなく、この傾向は変化しなかったため、研究協力者の協力も仰ぎながらある程度の紙もしくは電子媒体の数学専門誌や各種書籍を当該研究費で購入し研究の糧とした。

総ずれば、様々な分野の境界に属する本研究の発展のために、つねに各研究者と交流を持ち、各研究に対して感性を研ぎすましながら、迅速かつ定期的な資料の入手と、計算の補助となる数値解析、そして各分野の研究者との交流を維持してきたつもりである。

#### 4. 研究成果

[平成 25 年度]

グラフ上の酔歩から誘導される Grover walk や Szegedy walk といった典型的な類の量子ウォークを対象にして、ひとつは「量子グラフ」の散乱作用素を通した散乱振幅の言葉での確実な記述、もうひとつはグラフのスペクトル解析や酔歩の挙動解析で使われてきた道具を用いての量子ウォークの様々な挙動の解析を行い、そこでは、日本における量子ウォークの先駆者である横浜国立大学の今野紀雄氏、量子ウォークの若手研究者の東北大学の瀬川悦生氏、グラフ理論の専門家である小山高専の佐藤巖氏らと、ある意味波動性に重きをおいた量子ウォークと、粒子性に重きをおいた古典的酔歩の関連について、スペクトル写像定理を媒介することで新規の発展が図れた。これらの結果により従来から愛媛大学の野村祐司氏や金沢大学の小栗栖修氏と継続研究をしている、グラフ上の作用素のスペクトル解析、とくに状態密度函数や解析接続したグリーン函数との関連が明白になり、今後の研究に向けての新たな課題や方向性をも明確にすることができた。一方、古典軌道といえるグラフの閉路の分布の情報を持つグラフのゼータ函数と量子ウォークとの間の関連も浮き彫りになりつつあった。

[平成 26 年度]

前年度の発展形として Ihara ゼータ函数の量子ウォークによる解釈、さらには、量子ウォークから得られる新たなゼータ函数とその特異点の解析などを前述のグループで得ることができた。さらには瀬川氏とは、量子ウォークで見られる「局在性」に対して、新たな特徴付けを行った。具体的には、局在が起らない 1 次元格子においてある種の摂動を加えると、Szegedy walk という量子ウォークに局在が生じること、さらに drifted random walk に起源をもつ Szegedy walk は、その長時間漸近挙動において従来見られなかったような分布が得られることが分かった。このことから、1 次元といえども、drifted random walk をもう一度詳細に調べる方向性が得られ、実際局所的に「不純物」が入った drifted random walk のスペクトル解析を遂行中である。なお、当初の予定通り会場費などを補助して 2014 年 8 月に新潟県新潟総合テレビ「ゆめディア」にて研究集会「離散数学とその応用研究集会 2014」を開催した。

[平成 27 年度]

前年度に引き続き量子ウォークの局在の原因でもある、局所的に「不純物」が入った 1 次元格子上の酔歩のスペクトルを解析するとともに、酔歩と量子ウォークの間にあるジューコフスキ変換に注目し、今まで得られてきた結果の再整理を瀬川悦生氏(東北大学)らと行った。同時に、1 次元量子ウォークの定常測度として、今野紀雄氏および竹居正登氏(横浜国立大学)が得てい

た一様分布と多項式増大分布に加えて、新たに指数増大の測度の存在と具体形を提示した。これは過年度までに得られていた「スペクトル写像定理」の効果的な応用であり、さらなる発展として多次元格子に対する量子ウォークの定常測度に対する知見も得ている。なお、野村祐司氏(兵庫県立大学)小栗栖修氏(金沢大学)と継続している共同研究の主題はラブラシアン共鳴状態の解明であるが、この時点では、共鳴状態が固有値になった瞬間、より具体的には、スペクトルの下端での埋蔵固有値が存続できるポテンシャルの摂動の存在とその摂動がなす代数多様体の具体的表現に成功している。また三橋秀生氏(宇都宮大学)佐藤巖氏(小山高専)らとは、量子ウォークの四元数への拡張の研究の緒に就いた。現在、四元数拡張の利点を示すべく、複素数まででは見られなかったスペクトルの特質を示す具体例の作成にも取り組んだ。

[平成 28 年度]

当該年度では、瀬川悦生氏(東北大学)と、量子ウォークの長時間極限分布が今野分布と異なるタイプとなる 1 次元のモデル(Magnifier graph) の存在を示し、同時にこのモデルは「位相的絶縁体」の簡単なモデルになり得るという感触も得られた。また、グラフの持つサイクル構造が量子ウォークの局在状態を導く、という我々の研究に加えて、サイクルを持たない無限木においても局在状態が生じることも得られた。ここでは量子ウォークの“発生固有値”といわれるスペクトル構造が、グラフの幾何構造によって存在の可否が決定される“有限エネルギー流”によって支配されていることから得られるが、このことは従来の局在状態の解析も含んでいる結果となっている。あわせて、ディリクレ条件つきラプラス作用素を基礎にもつ量子ウォークの発展作用素は、量子探索のオリジナルといえるグローバ探索と深く関連していることも得られ、その一般化については継続して解析を行なっている。その他、鈴木彰斗氏(信州大)・瀬川氏との共同研究で、抽象空間における量子ウォークの一般化と、発展作用素と基礎となる判別作用素とのスペクトル構造を繋ぐジューコフスキ変換について詳細な解析を行った。なお、野村祐司氏(兵庫県立大学)小栗栖修氏(金沢大学)との 継続した共同研究であるラブラシアン共鳴状態の解明も、位置を定めた有限個のポテンシャルを持つ離散ラプラス作用素の埋蔵固有値および離散固有値の個数の分布を、ポテンシャルの強度の変化がなす代数多様体を用いて具体的表現に成功することで、さらなる発展をし、さらに現在でもその一般化に取り組んでいる。

[平成 29 年度]

瀬川悦生・吉江佑介両氏(東北大学)と、有限グラフの「入口」に一定量のエネルギー流を流し続けたときの「出口」からの流量および有限グラフ内部に滞在する量子ウォーク flow の長時間漸近挙動を考え、組合せ的手法を併用した詳細な解析に成功した。当初は toy model での数値計算で様子を確認しその後本格的な数値計算にとりかかる予定であったが、幸いにもより一般化されたケースにおける証明方針がメンバーとの議論から産出され、有限グラフ部分における“定常測度”の存在、および「入口と出口」の“応答問題”に対する結果が得られた。さらに瀬川悦生氏・Portugal 氏(Brazil)・佐藤巖氏(小山高専)らとは、2-tessellable graph における staggered quantum walk およびその Hamilton type に対する spectral mapping theorem および局在状態の固有函数の特徴づけに成功しており、この結果は量子探索問題における何らかの発展に寄与することが期待されている。

[延長：平成 30 年度]

延長した当該年度では、グラフ上のより一般の量子酔歩に注目した研究を行った。グラフ上の量子酔歩の中で Grover walk は単純酔歩と関連したコイン作用素と flip-flop というシフト作用素の積を基本作用素としてもつが、コイン作用素はそのままにシフト作用素をグラフの幾何に基く moving-shift に置きかえると当然のように量子酔歩のスペクトル構造は変化する。その変化はサイクルの選び方などに依存することを計算機実験から確認し、さらにその仕組みについて部分的な結果が得られた。そこではシフト作用素を moving-shift にした量子酔歩は、シフト作用素が flip-flop でコイン作用素が摂動されたものと見直すことから判別作用素(いわば一般化された酔歩)を用いてスペクトル構造を導くことが鍵となっている。より厳密かつ一般的な発展はこれからの課題にしても今後の礎となったという意味で大きな実績といえよう。さらには、以前受けていた科研費からの継続として田中幹大氏(甲南女子大学)らと、学生を対象とした単語間の結び付きの連想実験を行い、脳内辞書(mental lexicon)ネットワーク構造の解析を行った。実際の脳内辞書はランダムグラフや複雑系ネットワークとの親密性が高い動的ネットワークであり、ここでは学んだ単語群に複雑系ネットワークというハブの存在を確認することができた。今後に向けてまだ段階を重ねる必要があるが、他分野への応用に向けた第一歩の成果と自負している。

## 5. 主な発表論文等

[雑誌論文](計 9 件)

1. Yu.HIGUCHI and E.SEGAWA,  
Quantum walks induced by Dirichlet random walks on infinite trees.  
J. Phys. A:Math. Theor. 51 (2018), 075303(21pp). (査読有)

2. Yu.HIGUCHI and E.SEGAWA,  
The spreading behavior of quantum walks induced by  
drifted random walks on some magnifier graph.  
Quantum Inf. Comput. 17 (2017), 0399--0414. (査読有)
3. Yu.HIGUCHI, N.KONNO, I.SATO and E.SEGAWA,  
Periodicity of the discrete-time quantum walk on a finite graph,  
Interdiscip. Inform. Sci. 23 (2017), 75--86. (査読有)
4. Y.HAYASHI, Yu.HIGUCHI, Y.NOMURA and O.OGURISU,  
On the number of discrete eigenvalues of a discrete Schrödinger  
operator with a finitely supported potential,  
Lett. Math. Phys. 106 (2016), 1465--1478. (査読有)
5. Yu.HIGUCHI, N.KONNO, I.SATO and E.SEGAWA,  
Spectral and asymptotic properties of Grover walks on crystal lattices,  
J. Funct. Anal. 267 (2014), 4197--4235. (査読有)
6. Yu.HIGUCHI, N.KONNO, I.SATO and E.SEGAWA,  
A remark on zeta functions of finite graphs via quantum walks,  
Pacific Journal of Mathematics for Industry (2014), 6:9.(査読有)
7. Yu.HIGUCHI, N.KONNO, I.SATO and E.SEGAWA,  
A note on the discrete-time evolutions of quantum walk on a graph.  
Journal of Math-for-Industry 5(2013B-3), 103-109. (査読有)
8. Yu.HIGUCHI, N.KONNO, I.SATO and E.SEGAWA,  
Quantum graph walks II: quantum walks on covering graphs.  
Yokohama Math. J. 59 (2013), 57--90. (査読有)
9. Yu.HIGUCHI, N.KONNO, I.SATO and E.SEGAWA,  
Quantum graph walks I: mapping to quantum walks.  
Yokohama Math. J. 59 (2013), 34--56.(査読有)

〔学会発表〕(計 12 件)

1. 樋口 雄介, Combinatorial structure in the dictionary and the mental lexicon, 2019 Workshop on Text Mining and Discrete Spectral Analysis(招待講演), 2019年3月, 近畿大学東大阪キャンパス ACT
2. 樋口 雄介, グラフの幾何をもたらす作用素のスペクトル構造, RIMS 共同研究「量子ウォークと場の量子論における超対称性の数理」(招待講演), 2018年7月, 京都大学数理解析研究所
3. 樋口 雄介, Mental lexicon と Erdos-Renyi random graph model, 2018 Workshop on Text Mining and Discrete Spectral Analysis(招待講演), 2018年2月, 甲南女子大学
4. 樋口 雄介, 酔歩と量子ウォークのスペクトル幾何, 2017 鹿児島スペクトル幾何学研究会(招待講演), 2017年03月30日, 鹿児島大学理学部
5. 樋口 雄介, 文書分類に向けた点過程とスペクトル幾何, 2017 Workshop on Text Mining and Discrete Spectral Analysis(招待講演), 2017年03月08日, 愛媛大学工学部
6. 樋口 雄介, 1次元 Szegedy walk の定常測度, 横浜国立大学理工学部 応用数学研究室セミナー, 2015年11月24日, 横浜国立大学理学部
7. Yusuke HIGUCHI, An introduction to quantum walks via random walks on graphs, Workshop: Quantum walks, random walks and scattering theory on periodic systems (0)(招待講演), 2015年01月21,22日, Graduate school of mathematics, Nagoya University
8. Yusuke HIGUCHI, Zeta functions of finite graphs via quantum walks, 第5回「ハミルトン系とその周辺」研究集会(招待講演), 2014年05月31日, 金沢大学サテライトプラザ
9. 樋口 雄介, 量子ウォークが生みだすグラフのゼータ函数の変種, 田澤新成先生ご退職記念

研究集会，2014年02月20日，近畿大学 東大阪キャンパス

10. 樋口 雄介，グラフ上の酔歩と量子ウォーク，近畿大学数学教室講演会(招待講演)，2014年01月23日，近畿大学理工学部理学科

11. 樋口 雄介，離散スペクトル解析に寄添ふグラフ理論の翳(其の壹)(其の貳)，2014 スペクトル・散乱 鹿児島シンポジウム(招待講演)，2014年01月12日，鹿児島大学理学部

12. 樋口 雄介，グラフ上の酔歩と量子ウォーク，数理工学談話会(招待講演)，2013年06月10日，熊本大学工学部

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況(計 0 件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
出願年：  
国内外の別：

取得状況(計 0 件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
取得年：  
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ等

## 6. 研究組織

### (1)研究分担者

研究分担者氏名：

ローマ字氏名：

所属研究機関名：

部局名：

職名：

研究者番号(8桁)：

### (2)研究協力者

研究協力者氏名：瀬川悦生，野村祐司，小栗栖修，佐藤巖，今野紀雄，安藤和典，森岡悠，鈴木彰斗，田中幹大，Rento Portugal など

ローマ字氏名：Etsuo SEGAWA, Yuji NOMURA, Osamu OGURISU, Iwao Sato, Norio KONNO, Kazunori ANDO, Hisashi MORIOKA, Akito SUZUKI, Mikihiro TANAKA, Rento Portugal et al.

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。