数理解析研究所講究録 第2089巻 2018年 1-4

Partition-based quantum walk

瀬川 悦生 *

東北大学　情報科学研究科

1 Introduction

量子ウォークは多くのモデルがそれぞれの研究分野に応じた姿に形を変えて新たなモデルとして提案されている. 2000 年代初頭に頭角を現し始めた Coined walk モデルとして現れた量子ウォークを固有値解析や散乱などの視点から論じる場合は, Coined walk モデルそのものを取り扱うのが便利である [2, 3]. 一方で, 量子計算の分野における量子探索では, Bipartite walk として読み替えることによってアルゴリズムに適応しやすい形になる [8]. 複素平面の単位円周上の測度に付随するローラン直交多項式間の 5 項の漸化式を与える CMV 行列の定式化の中にも量子ウォークモデルを見出すことができる [1]. トポロジカル相の量子シミュレーションの研究 [4] や重分子同位体レーザー分離の工学的アプローチ [5] の中でこの CMV 行列の定式化による特別な場合に相当する量子ウォークモデルが採用されているとみることもできる. さらに, グラフ理論的な視点では, グラフの辺を被覆するクリーク分割の概念を用いた Staggered walk [7] が提案されており, 幾つかの量子ウォークモデルの包含関係などについて議論されている. さらに舞台をグラフから単体複体上への拡張を提案することも可能である [6]. ここでは, これらの様々な量子ウォークモデルを含むような, Partition-based walk という自然な拡張モデルを通じて, 各量子ウォークモデルの俯瞰を試みる. そして, 実はこれらのほとんどすべての量子ウォークモデルがこの Partition-based walk とユニタリ同値となることをが示されることを説明する.

2 Partition-based walk

離散集合 $\Omega=\{\omega_1,\omega_2,\dots\}$ 上の, 同値関係 π_1, π_2 から誘導される以下の二種類の分割を定義する.

$$\Omega/\pi_1=\{[\omega]_{\pi_1}\mid \omega\in\Omega\},$$
$$\Omega/\pi_2=\{[\omega]_{\pi_2}\mid \omega\in\Omega\},$$

但し, $[\omega]_{\pi_j}=\{\omega'\in\Omega\mid \omega'\overset{\pi_j}{\sim}\omega\}$ $(j=1,2)$ は ω の同値類. 商集合 Ω/π_1 の各元を C_i, Ω/π_2 の各元を D_j で記述し. C_i, D_j に含まれる Ω の元は有限とする.

離散集合 Ω から誘導されるヒルベルト空間は

$$\mathcal{H}=\ell^2(\Omega)=\{\psi:\Omega\to\mathbb{C}\mid \sum_{\omega\in\Omega}|\psi(\omega)|^2<\infty\}$$

*e-segawa@m.tohoku.ac.jp

で与え, 標準的な内積で定める. 各同値関係 π_j によってこのヒルベルト空間を次のように分割する.

$$\mathcal{H} = \bigoplus_i \mathcal{C}_i = \bigoplus_j \mathcal{D}_j,$$

但し,

$$\mathcal{C}_i = \{\psi \in \mathcal{H} \mid \omega \notin C_i \Rightarrow \psi(\omega) = 0\},$$
$$\mathcal{D}_j = \{\psi \in \mathcal{H} \mid \omega \notin D_j \Rightarrow \psi(\omega) = 0\},,$$

そして $\hat{E}_i$ と $\hat{F}_j$ を それぞれ $\mathcal{C}_i$ と $\mathcal{D}_j$ 上のユニタリ作用素とし, それぞれの i, j に関する直和を $\hat{E} = \oplus_{i\in[J_1]}\hat{E}_i$, $\hat{F} = \oplus_{j\in[J_2]}\hat{F}_j$ とおく.

Definition 1. *Partion based walk* $(\Omega; \pi_1, \pi_2; \hat{U})$ は以下で定義される*:*

(1) 付随するヒルベルト空間*:* $\mathcal{H} = \ell^2(\Omega)$.

(2) $\mathcal{H}$ 上の時間発展作用素*:* $\hat{U}(\Omega, \pi_1, \pi_2; \{\hat{E}_i\}_i, \{\hat{F}_j\}_j) := \hat{F}\cdot\hat{E}$. 以後単に $\hat{U}$ と書く.

(3) 確率分布*:* 初期状態 $\psi_0 \in \mathcal{H}$ に対して, $\mu_n^{(\psi_0)} : \Omega \to [0,1]$ $(n \in \mathbb{N})$ で,

$$\mu_n^{(\psi_0)}(\omega) = |\hat{U}^n\psi_0(\omega)|^2,$$

もしくは $\mu_n^{(\psi_0)}(C_j) := \sum_{\omega\in C_j}\mu_n^{(\psi_0)}(\omega)$.

3 Partition-based walkの例

このPartition-based walkによって上で紹介したCoined walk, Bipartite walk, Staggered walkモデルが以下のように記述できる.

(1) **Coined walk**: グラフ $G = (V, E)$ の上で定義される. A を辺 E から自然に誘導される有向辺の集合とする (すなわち $|A| = 2|E|$). 有向辺 a に対して $o(a)$ を始点, $t(a)$ を終点, さらに $\bar{a}$ を逆辺とする. さらに $|a| \in E$ を a の向きを取り除いた無向辺とする. 付随するヒルベルト空間は $\ell^2(A)$ で、時間発展は $\ell^2(A)$ 上のユニタリ作用素 $\hat{\Gamma} = \hat{S}\hat{C}$ によって $\psi_n = \hat{\Gamma}\psi_{n-1}$. ここで $(S\psi)(a) = \psi(\bar{a})$, $\hat{C} = \oplus_{u\in V}\hat{C}_u$. 但し, $\hat{C}_u$ は $\{\psi \mid t(a) \neq u \Rightarrow \psi(a) = 0\} \subset \ell^2(A)$ 上の任意の $\deg(u)$ 次元ユニタリ作用素. 従って, 任意のCoined walkはグラフと時間発展作用素のペア $(G; \hat{\Gamma})$ で決まる. すると, Partition-based walkの定式化によって次のように与えられる: $\Omega = A$, 任意の $a, b \in A$ に対して, $a \overset{\pi_1}{\sim} b \overset{def}{\Leftrightarrow} t(a) = t(b)$, $a \overset{\pi_2}{\sim} b \overset{def}{\Leftrightarrow} |a| = |b|$. さらに $\hat{F}_{|a|}\delta_a = \delta_{\bar{a}}$.

(2) **Bipartite walk**: 二部グラフ $G = (X \sqcup Y, E)$ の上で定義される. 任意の辺 $e \in E$ に対して, $X(e)$ を X 側の端点, $Y(e)$ を Y 側の端点とする. 付随するヒルベルト空間は $\ell^2(E)$ で、時間発展は $\ell^2(E)$ 上のユニタリ作用素 $\hat{W} = \hat{R}_Y\hat{R}_X$ によって $\psi_n = \hat{W}\psi_{n-1}$. 但し, $\hat{R}_X = \oplus_{x\in X}\hat{R}_x$, $\hat{R}_Y = \oplus_{y\in Y}\hat{R}'_y$. ここで $\hat{R}_x$ は $\{\psi \mid X(e) \neq x \Rightarrow \psi(e) = 0\} \subset \ell^2(E)$ 上の任意の $\deg(x)$ 次元ユニタリ作用素. $\hat{R}'_y$ は $\{\psi \mid Y(e) \neq y \Rightarrow \psi(e) = 0\} \subset \ell^2(E)$ 上の任意の $\deg(y)$ 次元ユニタリ作用素. 従って, 任意のBipartite walkは二部グラフと時間発展作用素のペア $(G; \hat{W})$ で決まる. すると, Partition-based walkの定式化によって次のように与えられる: $\Omega = E$, 任意の $e, f \in E$ に対して, $e \overset{\pi_1}{\sim} f \overset{def}{\Leftrightarrow} X(e) = X(f)$, $e \overset{\pi_2}{\sim} f \overset{def}{\Leftrightarrow} Y(e) = Y(f)$.

(3) **Staggered walk**: $G=(V,E)$ が, 以下の二種類の G のクリーク分割 $\mathcal{T}_1$, $\mathcal{T}_2$ が存在するとき, "tessellable"であるという. (i) $V=V(\mathcal{T}_1)=V(\mathcal{T}_2)$, (ii) $E=E(\mathcal{T}_1)\cup E(\mathcal{T}_2)$. Staggered walk は tessellable グラフとその二種類の分割 $\mathcal{T}_1$ と $\mathcal{T}_2$ で定義される. 付随するヒルベルト空間は $\ell^2(V)$ で、時間発展は $\ell^2(V)$ 上のユニタリ作用素 $\hat{V}=\hat{B}\hat{R}$ によって $\psi_n=\hat{V}\psi_{n-1}$. 但し, $\hat{R}=\oplus_{p\in\mathcal{T}_1}\hat{R}_p$, $\hat{B}=\oplus_{q\in\mathcal{T}_2}\hat{B}'_q$. ここで $\hat{R}_p$ は $\{\psi \mid v\notin p\Rightarrow\psi(v)=0\}\subset\ell^2(E)$ 上の任意の $|p|$ 次元ユニタリ作用素. $\hat{B}'_q$ は $\{\psi\mid v(e)\notin q\Rightarrow\psi(v)=0\}\subset\ell^2(E)$ 上の任意の $|q|$ 次元ユニタリ作用素. 従って, 任意の Staggered walk は 2-tessellable グラフとその二種類の分割 $\mathcal{T}_1$ と $\mathcal{T}_2$, そしてその時間発展作用素 $(G;\mathcal{T}_1,\mathcal{T}_2;\hat{V})$ で決まる. Partition-based walk の定式化によって次のように与えられる: $\Omega=V$, 任意の $u,v\in V$ に対して, $u\overset{\pi_1}{\sim}v\overset{def}{\Leftrightarrow}u,v\in p\in\mathcal{T}_1$, $u\overset{\pi_2}{\sim}v\overset{def}{\Leftrightarrow}u,v\in q\in\mathcal{T}_2$.

4 Main Result

4 種類の量子ウォークモデル, Partition-based walk, Coined walk, Bipartite walk, Staggered walk の族をそれぞれ $\mathcal{P}$, $\mathcal{B}$, $\mathcal{C}$, $\mathcal{S}$ と記述する. また $\mathcal{C}_2$ を Coined walk の二乗を時間発展とする量子ウォークモデルの属とする. 実は $\mathcal{C}_2$ は $\mathcal{P}$ による定式化で次のように書き表される: $\Omega=A$, 任意の $a,b\in A$ に対して, $a\overset{\pi_1}{\sim}b\overset{def}{\Leftrightarrow}t(a)=t(b)$, $a\overset{\pi_2}{\sim}b\overset{def}{\Leftrightarrow}o(a)=o(b)$. さらに $\langle\delta_b,\hat{E}_u\delta_a\rangle=\langle\delta_{\bar{b}},\hat{F}_u\delta_{\bar{a}}\rangle$ $(\forall u\in V)$. これらの量子ウォークモデルの属の間に順序を以下のように定義する.

Definition 2. $\mathcal{A},\mathcal{A}'\in\{\mathcal{C},\mathcal{P},\mathcal{B},\mathcal{C}_2,\mathcal{S}\}$ とする. モデル $\mathcal{A}$ に属する任意の量子ウォークの時間発展 $\hat{\Theta}:\ell^2(K)\to\ell^2(K)$ に対して, $\mathcal{A}'$ に属するある量子ウォークの時間発展 $\hat{\Theta}':\ell^2(K')\to\ell^2(K')$ と, 単射 $\eta:K\longrightarrow K'$ が存在して,

$$\hat{\Theta}=\mathcal{U}_\eta^{-1}\,\hat{\Theta}'\,\mathcal{U}_\eta,$$

が成立するとき, $\mathcal{A}\prec\mathcal{A}'$ と書く. ここで $\mathcal{U}_\eta:\ell^2(\Gamma)\to\ell^2(\eta(\Gamma))$ は ユニタリ写像で, $(\mathcal{U}_\eta\psi)(a)=\psi(\eta^{-1}(a))$. 特にその逆も成立して $\mathcal{A}\succ\mathcal{A}'$ のとき, $\mathcal{A}\cong\mathcal{A}'$ と記述する.

3 節の例などより, 明らかに $\mathcal{P}\succ\mathcal{B},\mathcal{C}_2,\mathcal{S}$ が成立する. ところがこの逆も成立し, 次の定理が言える.

Theorem 1. $\mathcal{C},\mathcal{P},\mathcal{B},\mathcal{C}_2,\mathcal{S}$ を上で定義した量子ウォークモデルの属とする. すると,

$$\mathcal{C}\prec\mathcal{P}\cong\mathcal{B}\cong\mathcal{C}_2\cong\mathcal{S}.$$

証明の流れ
$\mathcal{C},\mathcal{B}\prec\mathcal{P}$ であるから, 次を証明すればよい. $\mathcal{P}\prec\mathcal{S}\prec\mathcal{C}_2\prec\mathcal{B}$.

(1) $\mathcal{P}\prec\mathcal{S}$ の証明の流れ: $(\Omega;\pi_1,\pi_2;\hat{U})$ から誘導される次のような tessellable グラフ $H(V,E)$ を与えて, ある Staggered walk$(H(V,E);\mathcal{T}_1,\mathcal{T}_2;\hat{V})$ がこの Partition-based walk とユニタリ同値になることにより示される. そのためには $\mathcal{U}_\eta\hat{U}\mathcal{U}_\eta^{-1}$ が Partition-based walk の時間発展になっていることを示せばよい. ここで $H(V,E)$, Definition 2 の η は次のとおり.

$$\begin{aligned}&V=\eta(\Omega);\\&E=\{\eta(\omega)\eta(\omega')\mid\omega,\omega'\in\exists p\in\mathcal{T}_1\text{ or }\in q\in\mathcal{T}_2\}.\end{aligned}$$

また η は Ω から V への全単射.

(2) $\mathcal{S} \prec \mathcal{C}_2$ の証明の流れ: 任意の Staggered walk$(G; \mathcal{T}_1, \mathcal{T}_2; \hat{V})$ において, Tessellable グラフ $G = (V, E)$ の二種類のクリーク分割 $\mathcal{T}_1$, $\mathcal{T}_2$ から誘導される intersection graph $G' = (X \sqcup Y, E')$ を考える. X を終点とする初期状態から始めるある 2-step Coined walk$(G'; \hat{\Gamma}^2)$ がこの Staggered walk とユニタリ同値になることにより示される. そのためには $\mathcal{U}_\eta \hat{V} \mathcal{U}_\eta^{-1}$ が 2-step Coined walk の時間発展になっていることを示せばよい. ここで $G'(X \sqcup Y, E')$, Definition 2 の η は次のとおり.

$$X = \mathcal{T}_1,\ Y = \mathcal{T}_2;$$
$$|E(p,q)| = |p \cap q| \text{ in } G.$$

ここで $E(p,q) \subset E'$ は頂点 p と頂点 q を結ぶ辺の集合. 従って, 多重辺になることもある. E' から誘導される有向辺を A' とおくと, 単射 $\eta : V \to A'$ は次のようになる. Tessellable グラフ G において $v \in V$ が $v \in p \cap q$ とする. ただし intersection graph G' において $p \in X$, $q \in Y$. このとき, $t(\eta(v)) = p$, $o(\eta(v)) = q$.
注意: H は G' のラインググラフになる.

(3) $\mathcal{C}_2 \prec \mathcal{B}$ の証明の流れ: 任意の 2-step Coined walk$(G; \hat{\Gamma}^2)$ において, グラフ $G = (V, E)$ の duplication graph $G_2 = (V_2, E_2)$ を考える. 二部グラフ G_2 上のある Bipartite walk$(G_2; \hat{W})$ がこの 2-step Coined walk とユニタリ同値になることにより示される. そのためには $\mathcal{U}_\eta \hat{\Gamma}^2 \mathcal{U}_\eta^{-1}$ が Bipartite walk の時間発展になっていることを示せばよい. ここで $G_2(V_2, E_2)$, Definition 2 の η は次のとおり.

$$V_2 = V \sqcup \phi(V);$$
$$|E_2(u, \phi(v))| = |E(u,v)| \text{ in } G.$$

ここで $\phi(V)$ は V のコピー, $E(u,v) \subset E$ は頂点 u と頂点 v を結ぶ辺の集合, $E_2(u, \phi(v)) \subset E_2$ は頂点 u と頂点 v のコピー $\phi(v)$ を結ぶ辺の集合. 従って, 多重辺になることもある. 全単射 $\eta : A \to E_2$ は次のようになる. $V(\eta(a)) = t(a)$, $V'(\eta(a)) = \phi(o(a))$. ここで, $e \in E_2$ に対して, $V(e)$ は V-端点, $V'(e)$ は $\phi(V)$-端点.

References

[1] M. J. Cantero, F. A. Grünbaum, L. Moral and L. Velázquez, Quantum Inf. Process. **11** (2012) 1149-1192.

[2] C. Godsil and K. Guo, Electric Journal of Combinatorics **18** (2011) 165.

[3] Yu. Higuchi, N. Konno, I. Sato, E. Segawa, Yokohama Math. J. **59** (2013) 33-55.

[4] T, Kitagawa, M. S. Rudner, E. Berg, E. Demler, Phys. Rev. A **82** (2010) 033429.

[5] L. Matsuoka and K. Yokoyama, Journal of Computational and Theoretical Nanoscience **10** (2013) 1617–1620.

[6] K. Matsue, O. Ogurisu, and E. Segawa. Quantum Inf. Process. **15** (2016) 1865–1896.

[7] R. Portugal, Phys. Rev. A **93** (2016) 062335.

[8] M. Szegedy, Proc. 45th IEEE Symposium on Foundations of Computer Science (2004) 32-41.