有限グラフ上の量子ウォークについてI：定義と条件

根岸　章
奈良産業大学　情報学部

概要

有限グラフ上の量子ウォークについて, 正準基底の存在を仮定せずに一般的な形式での定義を行う.

1.　はじめに

古典的粒子がグラフ上を確率的に移動するランダムウォークは古くから研究されてきた（[5] の文献を参照）. これに対し量子ウォーク（Quantum random walk あるいは Quantum walk）とは, 1988 年に Gudder[6] が導入したもので, 離散的な時間*1での量子的な粒子の移動をモデル化したものである. この論文では, 1 次元の格子点を頂点とし, 2 点を結ぶ線分を辺としたもので, 各頂点での 2 次元のコイン空間 $\mathbb{H}_C$ での状態に応じて, 1 つ隣りの頂点に状態が移っていくというモデルを扱っている. 1 次元格子の場合, 古典的粒子のランダムウォークでは, 原点から出た粒子の時刻 T での存在確率の分布は原点を中心とした正規分布に近づくのに対し, 量子ウォークでは, 初期状態にもよるが原点から離れた両端に山を持つ確率分布が得られる. このような違いがみられることから, 量子ウォークについての研究が盛んになってきた.

2000 年代初頭までの研究の結果は, Kempe[3] に詳しい. また, 今野 [7] では, 日本語の入門書としての役割を果たすとともに, 著者のそれまでの成果を解説している.

これらの文献にあらわれる量子ウォークは, そのほとんどが平面格子や正則木などの良い性質をもったグラフ上の量子ウォークを扱っている. そのため, 正準基底を顕わにして基底間のつながりを先に決定している. しかし, 一般的な有限グラフ上では, グラフ上の各頂点でのコイン空間の基底同士のつながりは一意には確定しない. 本論文では, 正準基底を先に決定せず, 一般的な有限グラフ上の量子ウォークを定義し, それらと通常の定義の関係について述べることを目的とする.

2.　定義

この節では, グラフ G に関する諸記号を導入し, そのグラフ G 上の量子ウォークを定義する.

2.1.　グラフに関する諸記号

$G = G(V, E)$ をグラフとする. ここで V はグラフの頂点集合, E はグラフの辺集合という. 各辺 $e \in E$ に対し, 2 つの頂点 $v,\ w \in V$ があって, $e = (v, w)$ となっているとき*2 , 有向グラフという*3.

---

*1 連続時間の量子ウォークもある.
*2 平行な辺は存在しないとする
*3 (v, w) と (w, v) を同一視したものを無向グラフという.

次の仮定は有限性に関する仮定である.

(G.1) $|V| < \infty,\ |E| < \infty$.

グラフ G が (G.1) を満たすとき, G は有限グラフであるという.
ある $e = (v, w)$ で $v = w$ となるとき, e はループといい, ループのないグラフは単純であるという.

(G.2) G は単純グラフである.

$v, w \in V$ に対し, $e_1,\ \ldots, e_k \in E$ で $e_1 = (v, v_1),\ e_2 = (v_1, v_2),\ \ldots, e_k = (v_{k-1}, w),\ v_1, \ldots, v_{k-1} \in V$ となるものが存在するとき, v と w は道 $e_1 e_2 \cdots e_k$ でつながっているという. 任意の $v, w \in V$ が適当な道でつながっているとき, G は連結であるという.

(G.3) G は連結グラフである.

本論文では, (G.1), (G.2), (G.3) は常に仮定する.

記号 1. $v,\ w \in V$ は $e = (v, w) \in E$ となっているとき, w は v に隣接しているといい, $v = o(e)$ を e の始点, $w = t(e)$ を e の終点, 両方を e の端点という. また $e = (v, w)$ に対し, $e^{-1} = (w, v)$ とする.[*4] $v \in V$ に対し, v に隣接する頂点全体の集合を $N(v)$ とする. また, v が隣接する頂点全体の集合を $N^{-1}(v)$ とする.

次の仮定はキルヒホッフの法則を示す.

(G.4) 任意の $v \in V$ に対し, $|N(v)| = |N^{-1}(v)|$.

無向グラフの場合, (G.4) は常に満たされている.

記号 2. $V' \subset V$ に対し,

$$N_0(V') := V',\ N_\ell(V') := \{w \in V \mid w \in N_{\ell-1}(V')\} \quad (\ell = 1, 2, \ldots) \tag{1}$$

とする. また,

$$\bar{N}_\ell(V') = \bigcup_{s=0}^{\ell} N_s(V') \tag{2}$$

とする. $N_\ell^{-1}(V'),\ \bar{N}_\ell^{-1}(V')$ も同様に定義する.

仮定 (G.1), (G.3) より, 任意の $v \in V$ に対し, $n < \infty$ が存在し, $V = \bar{N}_n(v)$[*5] が成り立つ.

記号 3. $v \in V$ に対し, $E(v) = \{e \in E \mid o(e) = v\}$, $E^{-1}(v) = \{e \in E \mid t(e) = v\}$ とする.

[*4] $e^{-1} \in E$ とは限らない.
[*5] $\{v\}$ と v を同じ記号であらわしている. 以下同様にする.

2.2. G 上の量子ウォークの定義

$G=(V,E)$ をグラフとする.

記号 4. $v \in V$ に対し, $\mathbb{H}_v$ を頂点 v に対応した複素計量線形空間とし,

$$\mathbb{H} := \bigoplus_{v \in V} \mathbb{H}_v \quad (直交直和)$$

をグラフ G 全体の複素計量線形空間とする. また, P_v を各部分空間 $\mathbb{H}_v$ への正射影とする. $\varphi,\ \psi \in \mathbb{H}_v$ に対し, $\mathbb{H}_v$ 上の内積を $<\varphi, \psi>_v$ で表し, $\varphi,\ \psi \in \mathbb{H}$ に対し, $\mathbb{H}$ 上の内積を

$$<\varphi, \psi> := \sum_{v \in V} <P_v\varphi, P_v\psi>_v$$

とする. このとき, ノルムについても $\varphi \in \mathbb{H}$ のとき

$$||\varphi||^2 = \sum_{v \in V} ||P_v\varphi||^2 \tag{3}$$

が成り立つ.

定義 2.1. $\varphi \in \mathbb{H}$ が単位ベクトルのとき, φ を（1 粒子の）状態ベクトルという. 状態ベクトル全体の集合を $\mathbb{H}_u$ とする. $\varphi \in \mathbb{H}_u$ のとき, $V' \subset V$ に対し

$$P_\varphi(V') := \sum_{v \in V'} ||P_v\varphi||^2 \tag{4}$$

を粒子 φ が頂点集合 V' に存在する確率という.

記号 5. $\mathcal{U}$ を $\mathbb{H}$ 上のユニタリ作用素全体の集合とする.

定義 2.2. （広義の量子ウォーク）$T \in \boldsymbol{N}$, $\varphi_0 \in \mathbb{H}_u$, U_1, U_2, $\ldots$, $U_T \in \mathcal{U}$ とする. このとき, 状態ベクトルの列 $\{\varphi_t\}_0^T$ が

$$\varphi_t = U_t\varphi_{t-1} \quad (t = 1, 2, \ldots, T) \tag{5}$$

として得られる. $\{\varphi_t\}_0^T$ を初期状態 φ_0 の量子ウォークという. とくに, $U = U_1 = U_2 = \cdots = U_T$ の場合, U から生成される量子ウォークという.

定義 2.3. $\varphi \in \mathbb{H}$ に対し,

$$V(\varphi) := \{v \in V \mid ||P_v\varphi|| > 0\} \tag{6}$$

を φ の台という. $|V(\varphi)| = 1$ のとき, φ を点台ベクトルといい, 点台ベクトル全体の集合を $\mathbb{H}_0$ とする. $\mathbb{H}_0 = \bigcup_{v \in V} \mathbb{H}_v$ である.

ユニタリ作用素の一般論より, $\varphi \perp \psi \Leftrightarrow U\varphi \perp U\psi$ が成り立つ. これの特別な場合として, 次が成り立つ.

命題 1. $\varphi, \psi \in \mathbb{H}$, $U \in \mathcal{U}$ とする. このとき

$$V(\varphi) \cap V(\psi) = \emptyset \Rightarrow U\varphi \perp U\psi. \tag{7}$$

次の仮定は, 任意の頂点での状態が, そこを始点とする辺へ分離できるということを意味する.

(O.1) $U \in \mathcal{U}$ とする. 任意の $e = (v, w) \in E$ に対し, ある $\varphi \in \mathbb{H}_v \cap \mathbb{H}_u$ が存在して

$$P_w U\varphi = U\varphi. \tag{8}$$

が成り立つ. これを満たす単位ベクトル φ（のうちの 1 つ）を $\varphi_{e,U}$ とする.

補題 2.1. (O.1) を満たす $U \in \mathcal{U}$ が存在するとする. このとき

$$\text{任意の } v \in V \text{ に対し, } \dim(\mathbb{H}_v) \geq \max(|N(v)|, |N^{-1}(v)|) \tag{9}$$

が成り立つ.

証明： $v \in V$ に対し, $w_1, w_2 \in N(v)$, $w_1 \neq w_2$ とする. 仮定より $e_1 = (v, w_1), e_2 = (v, w_2) \in E$ に対し $\varphi_{e_1,U}$, $\varphi_{e_2,U} \in \mathbb{H}_v \cap \mathbb{H}_u$ が存在し,

$$U\varphi_{e_1,U} = P_{w_1} U\varphi_{e_1,U} \in \mathbb{H}_{w_1}, \quad U\varphi_{e_2,U} = P_{w_2} U\varphi_{e_2,U} \in \mathbb{H}_{w_2}$$

となる. したがって, ユニタリ作用素の一般論より $\varphi_{e_1,U} \perp \varphi_{e_2,U}$ となる. これは任意個の $w \in N(v)$ に対して成り立つから, $\mathbb{H}_v \geq |N(v)|$ となる.

次に, $w_1, w_2 \in N^{-1}(v)$, $w_1 \neq w_2$ とする. 仮定より $e_1 = (w_1, v), e_2 = (w_2, v) \in E$ に対し $\varphi_{e_1,U} \in \mathbb{H}_{w_1} \cap \mathbb{H}_u$, $\varphi_{e_2,U} \in \mathbb{H}_{w_2} \cap \mathbb{H}_u$ が存在し,

$$U\varphi_{e_1,U} = P_v U\varphi_{e_1,U} \in \mathbb{H}_v, \quad U\varphi_{e_2,U} = P_v U\varphi_{e_2,U} \in \mathbb{H}_v$$

となる. したがって, 命題 1 より $\varphi_{e_1,U} \perp \varphi_{e_2,U}$ となる. これは任意個の $w \in N^{-1}(v)$ に対して成り立つから, $\mathbb{H}_v \geq |N^{-1}(v)|$ となる. □

定義 2.4. 任意の $\varphi \in \mathbb{H}$ に対し, $U \in \mathcal{U}$ が

$$V(U\varphi) \subset N_\ell(V(\varphi)) \tag{10}$$

を満たすとき, U を速さ ℓ のユニタリ作用素という. 速さ ℓ のユニタリ作用素全体の集合を $\mathcal{U}_\ell$ とする. さらに

$$V(U\varphi) \subset \bar{N}_\ell(V(\varphi)) \tag{11}$$

を満たすとき, U を速さが高々 ℓ のユニタリ作用素という. 速さが高々 ℓ のユニタリ作用素全体の集合を $\bar{\mathcal{U}}_\ell$ とする.

命題 2. $\mathcal{U}_\ell$, $\bar{\mathcal{U}}_\ell$ に関して次が成り立つ.

(1) $\ell < m$ ならば $\bar{\mathcal{U}}_\ell \subset \bar{\mathcal{U}}_m$
(2) $\mathcal{U}_\ell \mathcal{U}_m \subset \mathcal{U}_{\ell+m}$
(3) $\mathcal{U}_\ell \bar{\mathcal{U}}_m \subset \bar{\mathcal{U}}_\ell \bar{\mathcal{U}}_m \subset \bar{\mathcal{U}}_{\ell+m}$

証明： N_ℓ, $\bar{N}_\ell$, $\mathcal{U}_\ell$, $\bar{\mathcal{U}}_\ell$ の定義より明らか.

記号 6. $v, w \in V$, $U \in \mathcal{U}$ に対し,

$$U_{v,w} := P_w U P_v$$

とする．とくに, $U_v = U_{v,v}$ とする．

命題 3. $U = \mathcal{U}$ とする．このとき

$$U = \sum_{v \in V} \sum_{w \in V} U_{v,w} \tag{12}$$

と分解できる．ノルムに関しては, 任意の $\varphi \in \mathbb{H}$ に対し

$$||U\varphi||^2 = \sum_{v \in V} \sum_{w \in V} ||U_{v,w}\varphi||^2 \tag{13}$$

が成り立つ．

証明： (12) は射影作用素の定義より明らか. (13) については, $v \neq w$ なら命題 1 より $UP_v \perp UP_w$ となることより従う． $\square$

系 1. $U = \mathcal{U}_0$ とする．このとき

$$U = \sum_{v \in V} U_v \tag{14}$$

と分解できる．ノルムに関しては, 任意の $\varphi \in \mathbb{H}$ に対し

$$||U\varphi||^2 = \sum_{v \in V} ||U_v\varphi||^2 \tag{15}$$

が成り立つ．

証明： $\mathcal{U}_0$ の定義より $v \neq w$ なら $U_{v,w} = 0$ となる． $\square$

系 2. $U \in \mathcal{U}_1$ とする．このとき

$$U = \sum_{v \in V} \sum_{w \in N(v)} U_{v,w} \tag{16}$$

と分解できる．ノルムに関しては, 任意の $\varphi \in \mathbb{H}$ に対し

$$||U\varphi||^2 = \sum_{v \in V} \sum_{w \in N(v)} ||U_{v,w}\varphi||^2 \tag{17}$$

が成り立つ．これより, $e = (v, w) \in E$ として, $U = \sum_{e \in E} U_e$ と表すことができる．

証明： $\mathcal{U}_1$ の定義より $w \notin N(v)$ なら $U_{v,w} = 0$ となる． $\square$

系 3. $U \in \bar{\mathcal{U}}_1$ とする．このとき

$$U = \sum_{v \in V} \sum_{w \in N(v) \cup v} U_{v,w} \tag{18}$$

と分解できる．ノルムに関しては, 任意の $\varphi \in \mathbb{H}$ に対し

$$||U\varphi||^2 = \sum_{v \in V} \sum_{w \in N(v) \cup v} ||U_{v,w}\varphi||^2 \tag{19}$$

が成り立つ．

証明： $\bar{\mathcal{U}}_1$ の定義より $w \notin N(v) \cap v$ なら $U_{v,w} = 0$ となる． $\square$

定義 2.5. （狭義の量子ウォーク）初期状態が $\varphi \in \mathbb{H}_u \cap \mathbb{H}_0$ で $U \in \bar{\mathcal{U}}_\ell$ から生成されるもの速さが高々 ℓ の量子ウォークという．さらに, $\ell = 1$ のとき狭義の量子ウォークという[*6]. $\mathbb{H}_v$ をコイン空間という．

[*6] 以降, これを単に量子ウォークという

3. 量子ウォークの存在条件

この節では, 良い性質を持った量子ウォークが存在するための必要十分条件を与える.

次の仮定は, 辺ごとの情報伝達量の上限を規定する.

(O.2) $U \in \mathcal{U}_1$ とする. 任意の $e = (v, w) \in E$ に対し $\dim(Ran(U_{v,w})) \leq 1$.

補題 3.1. 仮定 (O.2) を満たす $U \in \mathcal{U}_1$ が存在するとする. このとき

$$\text{任意の } v \in V \text{ に対し,} \ \ \dim(\mathbb{H}_v) \leq \min(|N(v)|, |N^{-1}(v)|) \tag{20}$$

が成り立つ.

証明： $U \in \mathcal{U}_1$ なので, $v \in V$ に対し $UP_v = \sum_{w \in N(v)} P_w U P_v$ となる. したがって仮定より $\dim(U\mathbb{H}_v) \leq |N(v)|$ となる. これは $\dim(\mathbb{H}_v) \leq |N(v)|$ を意味する.

また, $P_v U = \sum_{w \in N^{-1}(v)} P_v U P_w$ も成り立ち, これより, $\dim(Ran(P_v U)) \leq |N^{-1}(v)|$ となる. これは $\dim(\mathbb{H}_v) \leq |N^{-1}(v)|$ を意味する. □

ここで, 次の仮定をおく.

(G.5) 任意の $v \in V$ に対し $\dim(\mathbb{H}_v) = |N(v)|$

補題 3.2. 仮定 (O.1),(O.2) を満たす $U \in \mathcal{U}_1$ が存在するとする. このときグラフ G とその計量線形空間 $\mathbb{H}$ は (G.4),(G.5) をを満たす.

証明： 補題 2.1, 3.1 の仮定がそれぞれ満たされるので,

$$\max(|N(v)|, |N^{-1}(v)|) \leq \dim(\mathbb{H}_v) \leq \min(|N(v)|, |N^{-1}(v)|)$$

となる. □

補題 3.2 は, ある程度良い性質の量子ウォークを考察する場合, グラフ G はキルヒホッフの法則を満たし, 各頂点のコイン空間 $\mathbb{H}_v$ の次元は頂点の次数に一致しなければならないことを示している. このことは, 逆も成り立つ.

補題 3.3. グラフ G とその計量線形空間 $\mathbb{H}$ は (G.4),(G.5) を満たすとする. このとき, (O.1),(O.2) を満たす $U \in \mathcal{U}_1$ が存在する.

証明： 各 $\mathbb{H}_v$ に正規直交基底をとり, これら全体を $\mathbb{H}$ の正規直交基底とする. $\mathbb{H}_v$ の各基底を $E(v)$ と $E^{-1}(v)$ に 1 対 1 に対応させれば, 基底から基底への対応が 1 つ得られる. この対応を線形拡張して得られる作用素は明らかに題意を満たす. □

4. $\mathcal{U}_1$ の分解

この節では (G.4),(G.5) を仮定し, $U \in \mathcal{U}_1$ を 2 つの作用素の積に分解する.

記号 7. 補題 3.3 で存在を保証された (O.1),(O.2) を満たす $U \in \mathcal{U}_1$ を一つ固定する[*7]. このとき

[*7] U の決め方は補題の証明に従わなくても良い.

(O.1) の $\varphi_{e,U}$ は絶対値 1 の複素数倍を除いて一意に確定する．これを φ_e $(e=(v,w))$ とおく．

注意： グラフの一般論より，

$$|E| = \sum_{v\in V} |E(v)| = \sum_{v\in V} |E^{-1}(v)| = \sum_{v\in V} |N(v)| = \sum_{v\in V} |N^{-1}(v)| \tag{21}$$

は常に成り立つ．

補題 4.1. $\{\varphi_e\}_{e\in E}$, $\{U\varphi_e\}_{e\in E}$ はそれぞれ $\mathbb{H}$ の正規直交基底をなす．
証明： 補題 3.2 より，上の注意で上げた式の各辺は $\dim(\mathbb{H})$ に一致する．ここで，命題 1 を用いれば $\{\varphi_e\}_{e\in E}$ は $\mathbb{H}$ の正規直交基底になる．したがって，U のユニタリ性より $\{U\varphi_e\}_{e\in E}$ も正規直交基底になる． □

系． $\{\varphi_e\}_{e\in E(v)}$, $\{U\varphi_{e'}\}_{e'\in E^{-1}(v)}$ はそれぞれ $\mathbb{H}_v$ の正規直交基底をなす．
証明： それぞれの集合の要素数と $\mathbb{H}_v$ の次元が一致することより従う． □

上の系より，ユニタリ作用素 U によって，$\mathbb{H}_v$ の 2 つの正規直交基底が一意に結びつけられている．これは，係数行列をユニタリ行列とする 1 次結合で表される．このユニタリ行列は行と列の順序交換を除き一意に確定している．各頂点で逆行列を施すことによって基底 $\{U\varphi'_e\}_{e'\in E^{-1}}$ が基底 $\{\varphi_e\}_{e\in E}$ に引き戻される．これに U を施すと，基底はある $w\in N(v)$ の基底にうつる．これを繰り返すことによって，基底 $\{\varphi_e\}_{e\in E}$ の辺に沿った対応が得られる．

定義 4.1. 上述の基底の辺に沿った対応を線形拡張して得られる作用素をシフト作用素という．シフト作用素全体の集合を $\mathcal{S}$ とする．

$\varphi\in\mathbb{H}$ にシフト作用素 S を施した後，先ほどのユニタリ行列で基底変換を行えば，U の作用に戻る．このことから次の定理を得る．

定理 1. 仮定 (O.1),(O.2) を満たす $U\in\mathcal{U}_1$ は $U_0\in\mathcal{U}_0,\ S\in\mathcal{S}$ を用いて

$$U = U_0 S \tag{22}$$

と分解できる．逆に，$U=U_0S$ となるなら $U\in\mathcal{U}_1$ で仮定 (O.1),(O.2) を満たす．

5. 行列表示

この節では，ユニタリ作用素をグラフに関係した行列を使って表す．

$G=(V,E)$ をグラフとする．G に対し，各頂点 $v\in V$ に $\mathbb{H}_v$ が，グラフ全体に $\mathbb{H}$ が定まっているとする．$e=(v,w)\in V\times V$ に対し

$$A_e = A_{v,w} : \dim(\mathbb{H}_w)\times\dim(\mathbb{H}_v)\ \text{行列},\quad A=[A_e] : \dim(\mathbb{H})\ \text{次正方行列}$$

とする．$A=[A_e],\ B=[B_e]$ に対し，積 AB は

$$(AB)_{v,w} = \sum_{v'\in V} A_{v',w}B_{v,v'}$$

となる．

$A=[A_e]$ に対し, 転置行列 ${}^tA$ を $[A_{e^{-1}}]$ とも表す. このとき, 随伴行列 $A^*={}^t\bar{A}$ は $[A_e^*]$ や $[\bar{A}_{e^{-1}}]$ とも表される.

$\mathbb{H}$ 上のユニタリ作用素 U を標準基底で表現した行列を同じく U と表すことにする.

命題 4. $U=[U_e]$ としたとき, U がユニタリ行列である必要十分条件は次の 2 つが成り立つことである.

(1) 任意の $v\in V$ に対し

$$\sum_{o(e)=v,\ e\in V\times V} U_e^*U_e=I$$

となる. ただし I は $\dim(\mathbb{H}_v)$ 次単位行列である.

(2) 任意の $v,\ w\in V,\ v\neq w$ に対し,

$$\sum_{v'\in V} U_{w,v'}^*U_{v,v'}=O$$

となる. ただし, O は $\dim(\mathbb{H}_w)\times\dim(\mathbb{H}_v)$ 零行列である.

証明： $U^*U=I$ をブロックごとに見ればよい.

さらに, $\mathcal{U}_0,\ \mathcal{U}_1$ は次のように特徴づけられる.

命題 5. $U\in\mathcal{U}_0$ であることは, 次の 2 つと同値である.

(1) U はユニタリ行列で, $U=[U_e]$ としたとき, $o(e)\neq t(e)\Rightarrow U_e=O$ である.

(2) $U=[U_e]$ としたとき. $U_{v,w}=O,\ (v\neq w)$ かつ $U_{v,v}$ はユニタリ行列である.

命題 6. $U\in\mathcal{U}_1$ であることは, 次と同値である.

(1) U はユニタリ行列で, $U=[U_e]$ としたとき, $e\notin E\Rightarrow U_e=O$ である.

(2) $U=[U_e]$ としたとき, $e\notin E\Rightarrow U_e=O$ で,

$$\sum_{o(e)=v,\ e\in E} U_e^*U_e=I$$

である.

ここから, G に対し, (G.4) を仮定する. $U\in\mathcal{U}_1$ を固定し, 4 節と同様の記号を用いる.

φ_e を標準基底で表した列ベクトルも同じく φ_e とする. φ_e $(e\in E)$ は $\mathbb{H}$ の正規直交基底をなし, それぞれ点台ベクトルなので, これらを $e\in E(v)$ ごとにまとめて並べたものを U_0 とすると, $U_0\in\mathcal{U}_0$ となる. したがって, $U_0=[U_{0e}]$　としたとき, 各 $U_{0\,v,v}$ はユニタリ行列である.

積 UU_0 を定義に従って計算すると

$$\begin{aligned}(UU_0)_{v,w} &= \sum_{v'\in V} U_{v',w}U_{0\,v,v'} \\ &= \sum_{(v',w)\in E,\ v=v'} U_{v',w}U_{0\,v,v'} \\ &= \begin{cases} U_{v,w}U_{0\,v,v} & ((v,w)\in E) \\ 0 & ((v,w)\notin E)\end{cases}\end{aligned}$$

$e=(v,w)\in E$ のとき, $U\varphi_e$ は w を台とする点台ベクトルなので, このとき, $U_eU_{0\,v,v}$ は e に対応した列を除く成分はすべて 0 になる．すなわち, U_e は 0 固有値に対応して $U_{0\,v,v}$ の $\dim(\mathbb{H}_v)-1$ 個の列ベクトルを固有ベクトルとして持つ．$U_{0\,v,v}$ はユニタリ行列なので, U_e の任意の行ベクトルはそれら固有ベクトルすべてに直交する, すなわち $U_{0\,v,v}$ の e に対応した列の随伴ベクトルの定数倍となっている．命題 6 より, $U=[U_e]$ は $e=(v,w)\notin E$ ならば $U_e=0$ となるので, 次の命題が成り立つ．

命題 7. U の頂点 w に対応する部分の各行は

$$\sum_{i=1}^{\dim(\mathbb{H}_w)} c_i\varphi_{e_i}^* \quad (e_i\in E^{-1}(w)) \tag{23}$$

とすることができる[*8]．ここで

$$\sum_{i=1}^{\dim(\mathbb{H}_w)} |c_i|^2=1 \quad (e_i\in E^{-1}(w)) \tag{24}$$

となる．

証明： 前半は上の説明より成り立つ．後半は, U がユニタリ行列であることと, φ_e $(e\in E)$ が正規直交基底であることより従う． □

6. 終わりに

1 節で述べたように, 通常の量子ウォークの定義は頂点ごとの正準基底をあらかじめ用意し, これらの間の対応と, 頂点内のユニタリ変換[*9]を与えることによって得られる．今回の定理によって, そのような対応付けが可能となるためのグラフやコイン空間に対する必要十分条件を得ることができた．また, 仮定 (O.1),(O.2) を満たす $U\in\mathcal{U}_1$ は一意には決まらず, 同一のグラフ上の量子ウォークにも様々なものがあることが分かる．

5 節では, 量子ウォークを計算するうえで必要となる行列表示について記号を導入した．

「有限グラフ上の量子ウォークについて II」では, 量子ウォークについて, いくつかの例とその性質を見ていく．

参考文献

[1] D. Aharanov, A. Ambainis, J. Kempe & U. V. Vazirani, Quantum walks on graphs. Proc. of the 33rd Annual ACM Symposium on Theory of Computing, 50-59, 2001. quant-ph/0012090.

[2] Y. Aharanov, L. Dvidovich & N. Zagury, Quantum random walks. *Phys. Rev. A*, **48**, 1687-1690, 1993.

[3] J, Kempe, Quantum random walks - an introductory overview. *Contemporary Physics* **44**, 307-327, 2003. quant-ph/080381.

[4] E. Farhi & S. Gutmann, Quantum computation and decision trees. *Phys. Rev. A*, **58**, 915-928, 1998.

[5] G. Grimmett, Probability on Graphs. IMS Textbooks 1. Cambridge Univ. Press. 2010.

[6] S. Gudder, Quantum Probability, CA. Academic Press Inc., 1988

[7] 今野紀雄, 量子ウォークの数理, 産業図書, 2008

[*8] c_i は w に対応する行ごとにも異なる

[*9] アダマール変換やグローバー変換など．

On Quantum Walks on Finite Graphs I: Definition and Conditions

A. Negishi
Faculty of Informatics, Nara Sangyo University, Nara Japan

abstruct

In this paper, we introduce a general definition of quantum walks on finite graphs, without assuming existence of canonical basis.