有限グラフ上の量子ウォークについてⅢ：Propagator Set の次元
On Quantum Walks on Finite Graphs III：Dimension of Propagator Set

根岸　章
Akira Negishi

要旨（Abstract）

量子ウォークの Propagator Set の定義を与え、実パラメータの自由度を次元として Propagator Set の次元を与える定理を示し、いくつかの実例で計算する。あわせて、瀬川－鈴木［10］と根岸［８］の定義の違いについて考察する。

キーワード：量子ウォーク、Propagator Set、有限グラフ

Ⅰ　抽象的量子ウォーク再考

1　瀬川－鈴木の定義

瀬川－鈴木［10］では、 次のように抽象的量子ウォークが導入されている。

可算集合 V に対し、$\{\mathcal{H}_v\}_{v\in V}$ を可分なヒルベルト空間の族とし、$\mathcal{H}=\bigoplus_{v\in V}\mathcal{H}_v$ とし、$\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素を U とする。$(U,\{\mathcal{H}_v\}_{v\in V})$ を QW（量子ウォーク）の一つの時間発展といい、$(U,\{\mathcal{H}_v\}_{v\in V})\in\mathscr{F}_{QW}$ と表す。さらに、P_v を $\mathcal{H}$ から $\mathcal{H}_v$ への正射影としたとき、作用素 $U_{uv}:\mathcal{H}_v\to\mathcal{H}_u$ $(u, v\in V)$ を

$$U_{uv}=P_uUP_v$$

で定義する。

時間発展 $(U,\{\mathcal{H}_v\}_{v\in V})\in\mathscr{F}_{QW}$ を一つ固定した時、有向グラフ $G_U=(V_U, D_U)$ を次のように定義する。

⑴　$V_U=V.$

⑵　$U_{uv}\neq 0 \Leftrightarrow e=(v,u)\in D_U$

すなわち、ユニタリ作用素 U によって、グラフ G_U の有向辺集合 D_U が定められているのである。

2　根岸の定義

一方、根岸［８］では、量子ウォークを次のように導入している [1]。

グラフ $G=(V, D)$ と、$v\in V$ 毎に対応したヒルベルト空間 $\mathcal{H}_v$ があって、$\mathcal{H}=\bigoplus_{v\in V}\mathcal{H}_v$ となっている。また、P_v を $\mathcal{H}_v$ への正射影とする。$\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素 U に対し、$U_{uv}:=P_uUP_v$ としたとき、$(v,u)\notin D \Rightarrow U_{uv}=0$ となる U を速さ 1 のユニタリ作用素と呼ぶ。$\mathcal{H}$ の単位ベクトル φ を状態ベクトルとし、$U^t\varphi$ $(t\in\mathbb{N})$

(1) 見やすさのため記号等を瀬川－鈴木［10］に揃える

を速さ 1 の量子ウォークとした。すなわち、グラフが先にあって、そのグラフに沿って状態が伝わるユニタリ作用素を定めている。

この 2 つの定義には一見大きな差はないように思える [2] が、次の疑問が生じる。

問　頂点集合 V が確定し、ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ が固定されたとき、$\mathcal{H}$ 上の任意のユニタリ作用素 U はそこから定義されるグラフ G_U の速さ 1 のユニタリ作用素であるのか。

Ⅱ　Propagator Set とその次元

1　コイン空間と Propagator Set

ここからは、根岸の定義に従って考察を行う。すなわち、グラフ $G=(V, D)$ は所与とする。ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ に対し、

定義 1　$\mathcal{C} := \{U \in \mathcal{U}(\mathcal{H}) \mid u \neq v \Rightarrow U_{uv} = 0\}$

をコイン空間 [3] といい、コイン空間の要素をコインという。ただし、$\mathcal{U}(\mathcal{H})$ は $\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素全体を表す。コイン空間 $\mathcal{C}$ は作用素の合成で乗法群を成している。

また、前節での速さ 1 のユニタリ作用素をここからは、Propagator と呼ぶことにする。さらに、

定義 2　$\mathcal{P} := \{U \in \mathcal{U}(\mathcal{H}) \mid (v, u) \notin D \Rightarrow U_{uv} = 0\}$

を Propagator Set と呼ぶ。Propagator Set $\mathcal{P}$ は作用素の合成や和で閉じていない。

コイン空間 $\mathcal{C}$ はグラフの頂点集合 V のみに依存するが、Propagator Set $\mathcal{P}$ はグラフ G に依存する。

2　$\mathcal{H}$ の次元

さて、根岸［8］では次の 2 つの条件を考察している。

(O.1) 任意の $e=(v, w) \in D$ に対し、ある $\varphi \in \mathcal{H}_v,\ \varphi \neq 0$ が存在して $P_w U \varphi = U\varphi$. が成り立つ。

(O.2) 任意の $e=(v, w) \in D$ に対し $\dim(\mathrm{Ran}(U_{v,w})) \leq 1$。

(O.1) は任意の辺に対して、その辺のみを通過する状態があるという条件である。すなわち、グラフ上を伝わる情報が辺で分離されるという条件である。また、(O.2) は逆に、1 つの辺を伝わる状態は高々 1 つであるという条件である。すなわち、1 つの辺を伝わる情報を高々 1 次元に制限するという条件である。

根岸［8］では (O, 1), (O, 2) を満たす Propagator の存在と、グラフ G が次の 2 つの条件を満たすこと同値であることを示している。

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

(G.2) 任意の $v \in V$ に対し $\dim(\mathcal{H}_v) = |N(v)|$

ここで、$N(v)$ は頂点 v に隣接する、すなわち、$(v, w) \in D$ となる頂点 w の集合、$N^{-1}(v)$ は頂点 v が隣接する、すなわち、$(w, v) \in D$ となる頂点 w の集合を表す。グラフ G が仮定 (G, 1), (G, 2) を満たすとき、

$$\dim(\mathcal{H}) = \sum_{v \in V} |N(v)| = |D|$$

が成り立つ。ただし、次元は複素線形空間としての次元の意味である。

---

[2] (2)に相当する条件が必要十分でないため、ユニタリ作用素に対する条件としては根岸の定義の方が緩い

[3] 根岸［8］では、速さ 0 のユニタリ作用素全体の集合 $\mathcal{U}_0$ とした。

3　各集合の次元

グラフ $G=(V,D)$ を有限グラフとし、$V=\{v_1,v_2,\ldots,v_m\}$ とする。$\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素 U に対し、

$$U_{ij}:=U_{v_iv_j}=P_{v_i}UP_{v_j}$$

とし、これを $\mathcal{H}_{v_j}\to\mathcal{H}_{v_i}$ の作用素と同一視する。

$\dim(\mathcal{H})=n<\infty$ とし、$\mathcal{H}$ の正規直交基底で、その部分集合が $\mathcal{H}_{v_i}$ $(i=1,2,\ldots,m)$ の正規直交基底にこの順序でなるようなものを一つ取り固定する。このとき、$\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素の表現行列は n 次ユニタリ行列と1対1に対応する。ユニタリ作用素 U の表現行列も U と表すことにする。$U(\mathcal{H})$ は n 次ユニタリ群 $U(n)$ と同一視できる。さらにユニタリ群 $U(n)$ は、実リー群としての次元は n^2 である。このことを

$$\dim_r(\mathcal{U}(\mathcal{H}))=n^2$$

と表すことにする。

作用素 U_{ij} $(1\le i,j\le m)$ の表現行列は $d_i\times d_j$ 行列となる。これも U_{ij} と表すことにする。ただし、$d_i:=\dim(\mathcal{H})$ $(i=1,2,\ldots,m)$ とする。U_{ii} は $\mathcal{H}_{v_i}$ 上のユニタリ作用素、もしくは d_i 次ユニタリ行列である。コイン空間 $\mathcal{C}$ に対し、$C\in\mathcal{C}$ もしくは、その表現行列 C は定義1より、

$$\mathrm{C}=\bigotimes_{i=1}^{m}U_{ii}$$

となる。これより次の命題が成り立つ。

命題1　$\mathcal{C}$ の実リー群としての次元を $\dim_r(\mathcal{C})$ と表すと

$$\dim_r(\mathcal{C})=\sum_{i=1}^{m}d_i^2$$

となる。

証明：U_{ii} は d_i 次ユニタリ群 $U(d_i)$ に属することから明らかである。

さて、Propagator Set $\mathcal{P}$ は群構造を持たないが、その表現行列全体は、空間 $\mathbb{C}^{n^2}$ 内である種の制約条件を持つ図形と同一視できる。その図形の実パラメータの自由度を $\mathcal{P}$ の次元といい、$\dim_r(\mathcal{P})$ と表すことにする。以下、これについて考察する。

$U\in\mathcal{P}$ とする。定義2より、$U_{ij}\neq 0\Rightarrow(v_j,v_i)\in D$ であるから、各 i に対し、必ずしも0にならない U_{ij} は $v_j\in N^{-1}(v_i)$ のときのみであり、その複素成分の総数は

$$d_i\sum_{v_i\in N^{-1}(v_i)}d_j=d_i\sum_{j=1}^{m}a_{ij}d_j$$

となる。ただし、$A=(a_{ij})$ はグラフ G の隣接行列であり

$$a_{ij}=\begin{cases}1 & ((v_j,v_i)\in D)\\ 0 & ((v_j,v_i)\notin D)\end{cases}$$

で定義される。したがって、U の必ずしも0でない複素成分の総数は $\sum_{i=1}^{m}d_i\sum_{j=1}^{m}a_{ij}d_j=(\mathrm{d},A\mathrm{d})$ となる。ただし、$(\cdot,\cdot)$ は $\mathbb{R}^m$ の内積で、$\mathrm{d}={}^t(d_1,d_2,\ldots,d_m)$ である。

次に、上の条件に追加される U に対する制約条件は、U がユニタリ作用素であること、すなわち、$U^*U=I$ となることである。ただし、$U^*={}^t\bar{U}$ は、U の随伴行列で、I は n 次単位行列である。$U^*U=I$ の条件は、対角成分

では複素数の絶対値の 2 乗の和が 1 であるという条件なので、実パラメータの自由度を 1 下げる。非対角成分では、複素数の積の和が 0 という条件なので、実パラメータの自由度を 2 下げる。しかし、非対角成分の対称の位置は共役複素数になっているため重複した条件となるので自由度を下げない。したがって、U^*U の値の定まっていない成分 1 つにつき実パラメータの自由度が 1 下がることになる。

$U=(U_{ij})$ とブロック行列で表すと、

$$\{U^*U\}_{ij}=\sum_{k=1}^{m}\{U^*\}_{ik}\{U\}_{kj}=\sum_{k=1}^{m}(U_{ki})^*U_{kj}$$

となる。ただし、$\{A\}_{ij}$ はこのブロック化の行列 A の (i,j) ブロックを表す。$(U_{ki})^*U_{kj}$ が必ずしも 0 にならないのは、$(v_i,v_k)\in D$ かつ $(v_j,v_k)\in D$ のときのみである。その複素成分の総数は

$$\sum_{i=1}^{m}d_i\sum_{j=1}^{m}a_{2,ij}d_j=(\mathrm{d},A_2\mathrm{d})$$

となる。ただし、

定義 3　$A_2=(a_{2,ij}),\ a_{2,ij}=\begin{cases}1 & (\{{}^tAA\}_{ij}\neq 0)\\ 0 & (\{{}^tAA\}_{ij}=0)\end{cases}$

とする。A_2 を第 2 隣接行列と呼ぶことにする。

以上より、次の定理を得る。

定理 1　有限グラフ G とヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ に対し、その Propagator Set の次元は

$$\dim_r(\mathcal{P})=2(\mathrm{d},A\mathrm{d})-(\mathrm{d},A_2\mathrm{d})$$

で与えられる。

Ⅲ　Example

以下の例では、グラフ G はすべて無向グラフ、あるいは $(u,v)\in D\Rightarrow(v,u)\in D$ を満たすものとし、ループや平行辺は存在しないとする。したがって、$|D|=2n$ として考える。また、(G,1), (G,2) を仮定する。

1　完全グラフ K_m

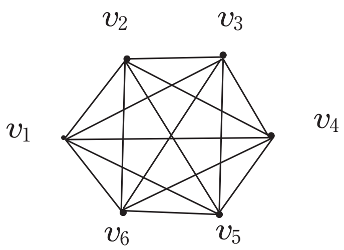

図 1　完全グラフ K_6

頂点数 m の完全グラフでは、$|D|=m(m-1),\ d_i=m-1\ (i=1,2,...,m)$ となっている。また、A は対角成分がすべて 1 で、非対角成分がすべて 1 の行列、A_2 はすべての成分が 1 の行列である。したがって

$$\dim_r(\mathcal{U}(\mathcal{H}))=m^2(m-1)^2,\ \dim_r(\mathcal{C})=m(m-1)^2,\ \dim_r(\mathcal{P})=m(m-1)^2(m-2)$$

となる。$\dim_r(\mathcal{C})+\dim r(\mathcal{P})=m(m-1)^3$ なので、完全グラフであっても $C\in\mathcal{C}$ と $P\in\mathcal{P}$ の 1 次結合で表せないユニタリ作用素が存在する。

2　完全 2 部グラフ K_{m_1, m_2}

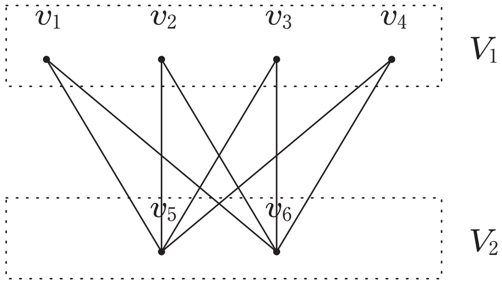

図 2　完全 2 部グラフ $K_{4,2}$

$V = V_1 \cup V_2, V_1 \cap V_2 = \emptyset, |V_1| = m_1, |V_2| = m_2$ の完全 2 部グラフでは、$i=1, \ldots, m_1$ までを V_1 の頂点、$i = m_1+1, \ldots, m_1+m_2$ までを V_2 の頂点とすると、$|D| = 2m_1m_2, d_i = m_2 (i=1, \ldots, m_1)$, $d_i = m_1 (i = m_1 + 1, \ldots, m_1+m_2)$ となっている。A は $a_{ij+m_1} = 1\,(1 \leq i \leq m_1, 1 \leq j \leq m_2)$ と $a_{i+m_1j} = 1\,(1 \leq i \leq m_2, 1 \leq j \leq m_1)$ でそれ以外の成分がすべて 0 となる。また、A_2 は $a_{ij} = 1\,(1 \leq i, j \leq m_1)$ と $a_{i+m_1j+m_1} = 1\,(1 \leq i, j \leq m_2)$ でそれ以外の成分がすべて 0 となる。したがって

$$\dim_r(\mathcal{U}(\mathcal{H})) = 4m_1^2m_2^2,\ \dim_r(\mathcal{C}) = m_1m_2(m_1+m_2),\ \dim_r(\mathcal{P}) = 2m_1^2m_2^2$$

となる。

Ⅳ　両定義に関する考察

もともとの量子ウォークでは、量子ウォークを与えるユニタリ作用素はシフト作用素とコインの積に分解される。ここで、シフト作用素とは、隣接する頂点の基底間の成分のやり取りを表す作用素で、表現行列がどの行、列も 1 となる成分が 1 つと他は 0 となる成分になっているという特徴を持つ。仮定（O,1），(O,2）はユニタリ作用素がこのような積の分解を持つための必要十分条件となっている。一方、この仮定は（G,1），(G,2）を通じて、ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ とその部分空間 $\mathcal{H}_v$ の次元を規定している。各 $\dim(\mathcal{H}_v)$ を固定し、したがって $\dim(\mathcal{H})$ を固定したとき、瀬川－鈴木の定義に従ってグラフを構成した場合、$U_{vv} \neq 0$ となる場合を当然含む、すなわち、ループのあるグラフを扱うことになる。またそういった場合を排除したとしても、$\dim(\mathcal{H}_v) = 1\,(\forall v \in V)$ でも完全グラフになったり、逆に $\dim(H_v) > |N(v)|$ となり、頂点の内部自由度が冗長になるといった場合を含むことになる。従来の量子ウォークを抽象化し拡張するという意味では、瀬川－鈴木の定義でも根岸の定義でも達成されているが、拡張性の大きさという意味では前者の方が優れ、従来との関係性の継続という意味では後者の方が優れていると考える。

Ⅴ　終わりに

本論文では瀬川－木［10］で導入された抽象的量子ウォークの定義と［８］で導入した量子ウォークの定義の違いを述べた。また、その違いを強調するための道具として量子ウォークの Propagator Set を定義し、その次元の計算方法を示した。両定義の違いとして、瀬川－鈴木の方がより多くの場合を含んだ拡張となっていること、一方、根岸の方はシフト作用素とコインの積に分解できるという特徴を残しつつ最大限の拡張を行っていることを述べた。

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, 2001, 50-59, quant-ph/0012090.

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

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

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

［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］根岸章，有限グラフ上の量子ウォークについて Ⅰ：定義と条件，奈良産業大学情報学フォーラム紀要第８巻，2013，99-108.

［9］根岸章，有限グラフ上の量子ウォークについて Ⅱ：例と性質，奈良産業紀要第30集，2013，57-63.

［10］E. Segawa & A. Suzuki, Generator of an abstract quantum walk. Quantum Stud.: Math. Found., 3: 2016, 11-30.