三角形分割上の量子ウォークのスペクトル構造

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
齋藤渓 (Kei SAITO)

1 導入

量子ウォークはランダムウォークの量子版として定義された数理モデルの一種であり，量子アルゴリズムへの活用や量子動力学的な自然現象の記述，さらには時系列解析による金融工学への応用など，応用数学分野で幅広く活躍している．近年においてはグラフ上の量子ウォークが定式化され，ランダムウォーク同様に Hitting time や Mixing time の解析に加え，量子系特有である周期性，Perfect state transfer の解析，さらにはグラフゼータとの関係やグラフ同型判定問題といった既知の問題へのアプローチも試みられている [1, 2, 3, 4, 5, 6].

これらの解析を行うにあたって肝要となるのは量子ウォークの時間発展作用素における固有値ないしはスペクトル構造である．初めに述べた通り，量子ウォークはランダムウォークの量子版であり，古典系とは次元の異なるモデルとして大きく挙動が異なる[*1]が，スペクトルという観点に立つと強い繋がりが見られる．すなわち，古典ランダムウォークにおけるスペクトル構造を複素単位円上へと射影することにより量子ウォークのスペクトルが記述され，この関係は量子ウォークのスペクトル写像定理（SMT）として定式化された [9, 10].

SMT は非常に強力な手法であり，研究界隈を大いに賑わせたブレイクスルーではあるが，定理を適用可能なモデルが限定的であるため，これを一般化することは近年における大きな研究テーマの 1 つである．SMT が適用する上での仮定の 1 つとして，量子ウォークのダイナミクスを司るシフト作用素 S の平方が恒等であるという仮定が存在するが，本研究の目的はこれを越えたところで SMT を構成することである．

本稿はグラフ上の一般的な量子ウォークの構成法を 2 章で述べ，3 章では Grover walk と呼ばれるモデルにおける SMT の紹介を行う．4 章において，我々の得られた結果である S の立法が 1 となる設定の下で得られた新たな SMT を主結果として述べ，その証明の概略を紹介する．最後に 5 章で今回得られた結果の幾何的応用を述べて本稿の締めとする．

[*1] 先に述べた周期性などに加え，線形的拡散・局在化といった性質は量子ウォーク特有のものとして有名である [7, 8].

2　有限グラフ上の量子ウォーク

まず初めに，有限単純グラフ[*2] $G=(V,E)$ を与える．V,E はそれぞれ頂点集合，辺集合であり，特に $u,v\in V$ に対し $uv\in E$ といった表記を用いる．さらに，対称な有向辺の集合 $\mathcal{A}$ を以下で与える．

$$\mathcal{A}=\{(u,v),(v,u)\,|\,uv\in E\}.$$

また，有向辺 e の始点と終点を $o(e),t(e)$ で記述する．すなわち，$e=(u,v)$ に対し，$o(e)=u,t(e)=v$ である．後に定義するが，量子ウォークのダイナミクスは各有向辺上に与えられた複素数が隣り合う有向辺へと推移していく過程であることを注意しておく．すなわち，量子の状態空間を

$$\mathcal{H}:=\mathbb{C}^{\mathcal{A}}$$

により与える．次に時間発展作用素を $\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素

$$U=SC$$

によって定義する．すなわち，初期状態 $\Psi\in\mathcal{H}$ $(\|\Psi\|^2=1)$ に対し，時刻 $n\in\mathbb{N}\cup\{0\}$ における量子状態が $U^n\Psi$ で記述されることを意味する．また，S,C はそれぞれシフト作用素，コイン作用素と呼ばれる $\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素であり，以下でこれらの定義を与える．

2.1　シフト作用素 S の定義

シフト作用素は有向辺上に与えられた値が隣接する有向辺へと推移する作用を与える．これを準備するため，適当な $r\in\mathbb{N}$ を定め，$\mathcal{A}$ の分割

$$\Pi=\{C_1,C_2,\cdots,C_r\}$$

を与える．ただし，$C_i\subset\mathcal{A}$ は次を満たす:

(1)　C_i は素な閉路 i.e., $C_i=\{e_0^i,e_1^i,\cdots,e_{n-1}^i\}$ に対し $o(e_j^i)=t(e_{j+1\mod n}^i)$ かつ $e_j^i\neq e_k^i$ $(j\neq k)$.

(2)　$\displaystyle\bigcup_{i=1}^{r}C_i=\mathcal{A}$,

(3)　$C_i\cap C_j=\emptyset$　$(i,j=1,2,\dots r,\ i\neq j)$.

任意のグラフにおいて，$|C_i|=2$，すなわち全ての $e_i=uv\in E$ に対して $C_i=\{(u,v),(v,u)\}$ とした分割を与えることができることを注意しておく．この分割を与えた場合は俗に **flip-flop shift** と呼ばれるモデルであり，最も頻繁に研究されている量子ウォークの 1 つである．

さて，本研究の目的は flip-flop shift を越えたモデルの解析にあるため，次の仮定を導入する．

[*2] 単純性については取り除いても構わないが，ここでは記号の簡単化のために単純グラフに限定する．また，無限グラフを扱い，固有値のみならずスペクトルの議論まで発展させることは可能であるが本稿では省略する．

仮定 1. 全ての $i = 1, 2, \ldots, r$ に対し $|C_i| = 3$ であり，G はこの分割を可能とするグラフである[*3]．

C_i の定義より任意の $e \in \mathcal{A}$ に対し $e = e^i_j \in C_i$ を満たす $i = 0, 1, \ldots, r$ と $j = 0, 1, 2$ の組が一意に存在するため，以下のように $\mathcal{A}$ 上の線形作用素 τ を与えることができる:

$$\tau(e^i_j) = e^i_{j+1 \mod 3}.$$

これを用いてシフト作用素を定める．

定義 2.1. シフト作用素 S : 上述の分割 Π および τ に対し，

$$(S\Psi)(e) = \Psi(\tau^{-1}(e)), \quad \Psi \in \mathcal{H}.$$

注意 2.2. flip-flop shift の場合は $S^2 = 1$ であるのに対し，本研究の設定では $S^3 = 1$ である．

2.2 コイン作用素 C の定義

コイン作用素はランダムウォークにおけるウォーカーの推移確率に対応するものであり，量子ウォークのダイナミクスを決定する上で重要な役割を持つ．まず，一般的な定義を記述する．$\Psi \in \mathcal{H}$ に対し，頂点 $v \in V$ を固定し，$t(e) = v$ を満たす $e \in \mathcal{A}$ 上の値 $\Psi(e)$ を並べて与えられたベクトルを形式的に$\Psi(v)$ と記述する[*4] ．このとき $\Psi(v)$ は $\deg(v)$ 次のベクトルとなる．各 $v \in V$ に対して，$\deg(v)$ 次のユニタリ行列 C_v を用意し，これを作用させることで C は定義される:

$$(C\Psi)(v) = C_v\Psi(v), \quad v \in V.$$

さて，本研究では俗に Grover walk と呼ばれるモデルを扱うため次の仮定を導入する．

仮定 2. Grover walk :

$$C_v = C_v^{\mathrm{Gr}} := \frac{2}{N} J_{\deg(v)} - I_{\deg(v)}.$$

ただし，$J_{\deg(v)}$ は全ての成分が 1 である $\deg(v)$ 次の正方行列，$I_{\deg(v)}$ は単位行列を表す．

有向辺を引数とした表記へと直すことで，C の作用は以下でまとめられる．

定義 2.3. コイン作用素 C（Grover walk） :

$$(C\Psi)(e) = \sum_{e' \mid t(e')=t(e)} \left(\frac{2}{\deg(t(e))} - \delta_e(e') \right) \Psi(e'), \quad \Psi \in \mathcal{H}.$$

定義 2.1 および定義 2.3 をまとめることで, 量子ウォークの時間発展作用素 $U = SC$ が以下のように計算される．

[*3] 球面・トーラス・射影平面といった閉曲面の三角形分割は，各領域を C_i と対応させることで実現できる．ただし，この分割が可能なグラフはその限りではない．

[*4] もちろん並べ方は一意ではないため，厳密には有向辺にラベル付けをする必要がある．しかし，本研究で扱う Grover walk は並べ方に依存しないモデルであるためここでは議論を省く．

系 2.4. Grover walk の時間発展： 仮定 1, 仮定 2 の下で, 量子ウォークの時間発展作用素 $U = SC$ は以下で与えられる.

$$(U\Psi)(e) = \sum_{e' \,|\, t(e')=o(e)} \left(\frac{2}{\deg(o(e))} - \delta_{\tau^{-1}(e)}(e') \right) \Psi(e'), \quad \Psi \in \mathcal{H}.$$

すなわち, 有向辺 e' から e へと推移する重みを $U_{e,e'}$ とすると

$$U_{e,e'} = \begin{cases} \frac{2}{\deg(o(e))} - 1, & \tau^{-1}(e) = e', \\ \frac{2}{\deg(o(e))}, & \tau^{-1}(e) \neq e',\ o(e) = t(e'), \\ 0, & \text{それ以外の場合.} \end{cases}$$

Proof. $(SC\Psi)(e) = C\Psi(\tau^{-1}(e))$ および $t(\tau^{-1}(e)) = o(e)$ であることから示される. □

本研究においては扱わないが，量子ウォークの確率分布は初期状態 $\Psi \in \mathcal{H}$ ($\|\Psi\|^2 = 1$) に対し，$P(X_n = v) = \sum_{e \,|\, t(e)=v} |(U^n\Psi)(e)|^2$ ($v \in V$) で与えられる．ただし，X_n は時刻 n で量子ウォーカーの存在する頂点を示す確率変数である.

3 量子ウォークのスペクトル写像定理

導入でも述べた通り，量子ウォークのスペクトル写像定理（SMT）は近年における量子ウォーク解析の代表的手法の 1 つであるが,

(1) $S^2 = 1$ である, i.e. flip-flop shift である.
(2) C の固有値が 2 種類である（特に ± 1 を持つ場合が典型的）.

といった 2 つの条件が課されたモデルのみが対象となる．本研究においては，仮定 1 の下，(1) の条件を $S^3 = 1$ へと修正した場合における SMT を導出し，時間発展作用素 U の固有値解析を行う.

準備のために，いくつかの記号を導入する．まず,

$$\mathcal{K} := \mathbb{C}^V$$

を定める．$\mathcal{H}$ が量子ウォークにおける状態空間であったのに対し，$\mathcal{K}$ はランダムウォークにおける状態空間であると捉えて差し支えない．次に，境界作用素 d を以下で与える[*5] :

$$d : \mathcal{H} \to \mathcal{K},\ \text{s.t.}\ (d\Psi)(v) = \frac{1}{\sqrt{\deg(v)}} \sum_{e \,|\, t(e)=v} \Psi(e), \quad \Psi \in \mathcal{H}.$$

また，その共役作用素は

$$d^* : \mathcal{K} \to \mathcal{H},\ \text{s.t.}\ (d^*f)(e) = \frac{1}{\sqrt{t(e)}} f(t(e)), \quad f \in \mathcal{K}.$$

したがって，次の補題が導かれる.

[*5] 一般には端点 v を持つ有向辺を集めたベクトル $\Psi(v)$ と C_v のいずれかの固有ベクトルの内積によって与えられる．現在，仮定 2 の Grover walk を扱っているので C_v^{Gr} の $+1$ 固有ベクトルの内積によりこの形となる.

補題 3.1. 以下が成り立つ*:*

(1) $dd^* = I.$
(2) $(d^*d\Psi)(v) = \frac{1}{N} J_{\deg(v)} \Psi(v), \quad \Psi \in \mathcal{H},\ v \in V.$

ここで，補題 3.1 の (2) より，コイン作用素が次の形で表現される．

補題 3.2. 定義 2.3 で与えられたコイン作用素 C に対し以下が成り立つ．[*6]

$$C = 2dd^* - I.$$

次に，SMT の肝となる $\mathcal{K}$ 上の作用素 T を以下で定める:

$$T := dSd^*.$$

定義に従い，具体的な作用を確認すると

$$\begin{aligned}(Tf)(v) &= \sum_{e \,|\, t(e)=v} \frac{1}{\sqrt{\deg(t(e))}\sqrt{\deg(t(\tau^{-1}(e)))}} f(t(\tau^{-1}(e))) \\ &= \sum_{e \,|\, t(e)=v} \frac{1}{\sqrt{\deg(v)}\sqrt{\deg(o(e))}} f(o(e)), \\ &= \sum_{u \,|\, uv \in E} \frac{1}{\sqrt{\deg(v)}\sqrt{\deg(u)}} f(u), \quad f \in \mathcal{K}.\end{aligned}$$

さらに，

$$T_2 := dS^2d^*$$

と置き，これも具体的な作用を確認する．

$$\begin{aligned}(T_2 f)(v) &= \sum_{e \,|\, t(e)=v} \frac{1}{\sqrt{\deg(t(e))}\sqrt{\deg(t(\tau^{-2}(e)))}} f(t(\tau^{-2}(e))) \\ &= \sum_{e \,|\, t(e)=v} \frac{1}{\sqrt{\deg(v)}\sqrt{\deg t(\tau(e))}} f(t(\tau(e))), \\ &= \sum_{u \,|\, uv \in E} \frac{1}{\sqrt{\deg(v)}\sqrt{\deg(u)}} f(u), \quad f \in \mathcal{K}.\end{aligned}$$

ただし，上式の 1 行目から 2 行目の変形は仮定 1 より $\tau^3(e) = e$ であることを用いている．したがって，これらの議論から

$$T = T_2$$

であることがわかった．次に，上式を用いて T を行列形式で記述する．頂点 u から v へ推移する重みを T_{uv} と表すと，

$$T_{vu} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\deg(v)}\sqrt{\deg(u)}}, & uv \in E, \\ 0, & uv \notin E. \end{cases} \tag{1}$$

[*6] 一般の場合，補題 3.1 の (2) は C_v の d を定めた固有ベクトルに対応する固有空間への射影となるため，補題 3.2 は C の固有値が 2 種類であるという仮定の下で成り立つ．

このとき，G の隣接行列 $A \in \mathbb{C}^{V\times V}$, および次数行列 $D \in \mathbb{C}^{V\times V}$，すなわち

$$A_{vu} = \begin{cases} 1, & vu \in E, \\ 0, & vu \notin E, \end{cases} \qquad D_{vu} = \begin{cases} \deg(v), & v = u, \\ 0, & v \neq u, \end{cases}$$

に対し，$T = D^{-\frac{1}{2}} A D^{-\frac{1}{2}}$ が成り立つ．さらに，分割に含まれる頂点集合を $\overline{C_i} = \{v = t(e) \,|\, e \in C_i\}$ と定め，$M \in \mathbb{C}^{V\times\Pi}$ を以下で与える:

$$M_{v,C_i} = \begin{cases} 1, & v \in \overline{C_i}, \\ 0, & v \notin \overline{C_i}. \end{cases}$$

このとき

$$(M\,{}^tM)_{vu} = \left|\{i \,|\, v, u \in \overline{C_i}\}\right| = \begin{cases} 2, & vu \in E, \\ \deg(v), & v = u, \\ 0, & \text{その他の場合.} \end{cases}$$

であるため，$M\,{}^tM = 2A + D$ が成り立つ．これらの関係を用いると，次の補題が導かれる．

補題 3.3. 以下が成り立つ．

$$\sigma(T) \subset [-\tfrac{1}{2},\ 1].$$

ただし，$\sigma(\cdot)$ は固有値の集合を意味する．

Proof. まず，(1) から T は自己共役であり，$\|T\| \leq 1$ である．したがって，$\sigma(T) \subset [-1,\ 1]$. 次に，$T = D^{-\frac{1}{2}} A D^{-\frac{1}{2}}$ および $M\,{}^tM = 2A + D$ から，

$$T = D^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{M\,{}^tM - D}{2}\right) D^{-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\left(D^{-\frac{1}{2}}M\right)\,{}^t\left(D^{-\frac{1}{2}}M\right) - \frac{1}{2}I.$$

上式の $\left(D^{-\frac{1}{2}}M\right)\,{}^t\left(D^{-\frac{1}{2}}M\right)$ は半正定値行列なので，$\sigma(t) \subset [-\frac{1}{2},\ 1]$ である．特に D は対角行列であり非自明な核を持たないため，$\ker(T + \frac{1}{2}) = \ker({}^tM)$ であることもわかる． □

4 主結果

定理 4.1. $\sigma(U) = \sigma(U_{\mathfrak{I}}) \cup \sigma(U_{\mathfrak{B}})$ であり，

$$\sigma(U_{\mathfrak{I}}) = \left\{\phi^{-1}\left(\lambda - \tfrac{1}{2}\right)\right\} \cup \{+1\}^{|V|} \cup \{-1\}^{\dim\ker {}^tM}, \quad \lambda \in \sigma(T) \setminus \{-\tfrac{1}{2}, 1\},$$
$$\sigma(U_{\mathfrak{B}}) = \{-1\}^{\dim \mathcal{B}_{\omega^0}} \cup \{-\omega\}^{\dim \mathcal{B}_{\omega}} \cup \{-\omega^2\}^{\dim \mathcal{B}_{\omega^2}}.$$

ただし上付き添え字は固有値の重複度を表しており，ϕ^{-1} はジューコフスキー変換 $\phi(z) = \frac{z+z^{-1}}{2}$ の逆関数となる二価関数であり，$\mathcal{B}_{\omega^j} = \ker(d) \cap \ker(S - \omega^j)$ $(j = 0, 1, 2)$ である．特に，

$$\dim \mathcal{B}_{\omega^0} = \dim\ker {}^tM + |\Pi| - |V|,$$
$$\dim \mathcal{B}_{\omega^1} = \dim \mathcal{B}_{\omega^2} = \frac{|A| - 2|V| - |\Pi| + 2}{2}.$$

Proof. 本稿では主定理の一部である，$\lambda \in \sigma(T) \setminus \{-\frac{1}{2}, 1\}$ に対し

$$\left\{\phi^{-1}\left(\lambda - \tfrac{1}{2}\right)\right\} \cup \{+1\}^{|V|} \in \sigma(U)$$

であることの証明の概略を紹介する．まず，$\Psi = d^*f + Sd^*g + S^2d^*h,\ f, g, h \in \mathcal{K}$ と置く．補題 3.2 より

$$U = S(2dd^* - I_{\mathcal{H}})$$

であり，$T = dSd^*,\ T_2 = dS^2d^*,\ T = T_2$ であったことを思い出すと

$$\begin{aligned} U\Psi &= U(d^*f + Sd^*g + S^2d^*h) \\ &= Sd^*f + (2Sd^*T - S^2d^*)g + (2Sd^*T - d^*)h \\ &= -d^*h + Sd^*(f + 2Tg + 2Th) - S^2d^*g. \end{aligned}$$

したがって，固有値 Λ ($|\Lambda| = 1$) に対し

$$(1)\ \Lambda f = -h, \qquad (2)\ \Lambda g = f + 2Tg + 2Th, \qquad (3)\ \Lambda h = -g$$

が成り立つとき，$U\Psi = \Lambda\Psi$ が満たされることがわかる．(1)(3) を (2) に代入すると

$$(\Lambda - 1)\{\Lambda^2 - (1 - 2T)\Lambda + 1\}g = 0$$

が得られる．ここで，$\Lambda = 1$ である場合は上式が自動的に成立することがわかる．このとき $g \in \mathcal{K}$ は任意に与えられるため，$\{+1\}^{|V|} \in \sigma(U)$ である．また，$Tg = \lambda g$ であることを仮定する．このとき

$$\Lambda^2 - (1 - 2\lambda)\Lambda + 1 = 0$$

が成立すればよいので

$$\Lambda = (\lambda - \tfrac{1}{2}) \pm i\sqrt{1 - (\lambda - \tfrac{1}{2})^2}$$

が得られる．補題 3.3 より $\lambda \subset [-\frac{1}{2}, 1]$ が保証されているため，確かに $|\Lambda| = 1$ であることが確認できる．したがって，T の固有値 λ より U の固有値 Λ が与えられるスペクトル写像定理の一部が得られるが，実は $\lambda = -\frac{1}{2}$ または $\lambda = 1$ の場合のみ $\Psi = \mathbf{0}$ となり自明な解となる．このことから，$\lambda \in \sigma(T) \setminus \{-\frac{1}{2}, 1\}$ に対して，$\phi^{-1}(\lambda - \frac{1}{2}) \in \sigma(U)$ が得られる． □

5　今後の展開と応用

本稿では詳細について述べなかったが，定理 4.1 における発生の固有空間 $\mathcal{B}_{\omega^j}$ $(j = 0, 1, 2)$ は幾何的な性質を直接反映する．グラフ G として球面・トーラス・射影平面といった閉曲面に埋め込まれた三角形分割を考え，領域 F に対して $|F| = |\Pi|$ となるよう分割を与える．このとき，平曲円の種数を g とすると，オイラーの定理を用いることで

$$\begin{aligned} \dim \mathcal{B}_{\omega^0} &= \dim \ker {}^tM + V + 4(g - 1), \\ \dim \mathcal{B}_{\omega^1} &= \dim \mathcal{B}_{\omega^2} = 1 + V + 4(g - 1) \end{aligned}$$

が得られる．このことから量子ウォークの固有値分析により閉曲面の種数を特定することが可能となり，量子アルゴリズムによる幾何的性質の表出が見込まれる．

また，$\dim\ker {}^tM$ についてもグラフ構造と密接な関りがあり，例えばグラフ G の彩色数が 3 であることと $\dim\ker {}^tM = 2$ が同値であることが既に調べられている．

参考文献

[1] Yu. Higuchi, N. Konno, I. Sato and E. Segawa, Quantum graph walks I: mapping to quantum walks, *Yokohama Mathematical Journal*, **59**, 33–56 (2013).

[2] Yu. Higuchi, N. Konno, I. Sato, E. Segawa, Periodicity of the discrete-time quantum walk on finite graph, *Interdisciplinary Information Sciences*, **23**, 75–86 (2017).

[3] Yu. Higuchi, N. Konno, I. Sato, E. Segawa, Spectral and asymptotic properties of Grover walks on crystal lattices. *Journal of Functional Analysis*, **267**, 4197–4235 (2014).

[4] D. M. Emms, E. R. Hancock, S. Severini, R. C. Wilson, A matrix representation of graphs and its spectrum as a graph invariant, *Electronic Journal Combinatorics*, **13**, R34 (2006).

[5] N. Konno, I. Sato, On the relation between quantum walks and zeta functions, *Quantum Information Processing*, **11**, 341–349 (2011).

[6] R. Portugal, Quantum Walks and Search Algorithms, Springer-Verlag, New York,(2013).

[7] N. Konno, Quantum random walk in one dimension, *Quantum Information Processing*, 345–354 (2002).

[8] N. Konno, A new type of limit theorem for the one-dimensional quantum random walk, *Journal of the Mathematical Society of Japan*, **57**, 1179–1195 (2005).

[9] E. Segawa, A. Suzuki, Spectral mapping theorem of an abstract quantum walk. *Quantum Information and Processing*, **18**, 333 (2019).

[10] K. Matsue, O. Ogurisu, E. Segawa, A note on the spectral mapping theorem of quantum walk models, *Interdisciplinary Information Sciences*, **23**, 105–114 (2017).