Caminhando em vértices e arestas com o passeio quântico a tempo contínuo

<WECIQ|2022>

Cauê F. Teixeira da Silva
Daniel Posner
Renato Portugal

Laboratório Nacional de Computação Científica

11 de agosto de 2022

Sumário

Sumário

Passeios quânticos são a versão quântica de passeios aleatórios.[1] Eles servem como base de vários algoritmos quânticos.[2] Os passeios quânticos podem ser a tempo discreto[3] ou contínuo[4], já a estrutura espacial é sempre discreta. Uma propriedade importante é a localidade, que garante que a partícula só pode locomover-se para uma posição vizinha a atual em uma única etapa.

---

[1] Y. Aharonov, and L. Davidovich, and N. Zagury. *Quantum random walks, Phys. Rev. A,* 1687:1690, 1993. DOI:10.1103/PhysRevA.48.1687.

[2] R. Portugal *Quantum Walks and Search Algorithms*, Springer, 2018.

[3] D. Aharonov and A. Ambainis and J. Kempe and U. Vazirani *Quantum walks on graphs Proc. 33th STOC,* 50:59, New York, 2001.

[4] E. Farhi, and S. Gutmann. *Quantum computation and decision trees*, *Phys. Rev. A*, 915:928, 1998. DOI:10.1103/PhysRevA.58.915.

Existem diversos tipos de estrutura espacial na literatura: (1) o conjunto de vértices no passeio quântico a tempo contínuo[5] e no passeio quântico escalonado[6]; (2) o conjunto de arcos no passeio quântico com moeda[7]; (3) o conjunto de arestas no modelo de Szegedy[8]; (4) arestas conectando vertices e faces no passeio quântico em imersões[9]; entre outros exemplos.

---

[5] E. Farhi, and S. Gutmann. *Quantum computation and decision trees*, *Phys. Rev. A*, 915:928, 1998. DOI:10.1103/PhysRevA.58.915.

[6] R. Portugal, and R. A. M. Santos, and T. D. Fernandes, and D. N. Gonçalves,, *The staggered quantum walk model*, *Quantum Information Processing*, 85:101, 2016, DOI:10.1007/s11128-015-1149-z

[7] Y. Higuchi and N. Konno and I. Sato and E. Segawa , *Spectral and asymptotic properties of Grover walks on crystal lattices*, *J. Funct. Anal.*, 4197:4235, 2014.

[8] M. Szegedy *Quantum speed-up of Markov chain based algorithms*, *45th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science*, 32:41, 2004, DOI:10.1109/FOCS.2004.53

[9] H. Zhan,. *Quantum walks on embeddings*, *Journal of Algebraic Combinatorics*, 1187:1213, 2021. DOI:10.1007/s10801-020-00958-z.

Introdução

Um algoritmo de busca espacial através de passeios quânticos a tempo contínuo foram introduzidos por Childs e Goldstone [10]. A evolução no tempo é guiada por um hamiltoniano que é obtido a partir da matriz de adjacência perturbada por um termo que depende da localização do vértice marcado. Implementações experimentais de algoritmos de busca através de passeio quântico a tempo contínuo são descritas por diverso artigos[11,12].

[10] A. M. Childs, and J. Goldstone. *Spatial search by quantum walk*, *Phys. Rev. A* 2004. DOI:10.1103/PhysRevA.70.022314.

[11] M. Delvecchio and C. Groiseau and F. Petiziol and G. S. Summy and S. Wimberger, *Quantum search with a continuous-time quantum walk in momentum space*, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 2020. DOI:10.1088/1361-6455/ab63ad.

[12] D. Qu, and S. Marsh, and K. Wang, and L. Xiao, and J. Wang, and P. Xue, Peng. *Deterministic Search on Star Graphs via Quantum Walks*, *Phys. Rev. Lett.*, 2022. DOI: 10.1103/PhysRevLett.128.050501.

Introdução

Neste trabalho, definimos consistentemente um modelo de passeio quântico a tempo contínuo que permite a partícula andar de um vértice para uma aresta e vice-versa. Chamaremos esse novo modelo de passeio quântico total. Como uma aplicação, analisamos o algoritmo de busca espacial no grafo bipartido completo através do passeio quântico total. Neste modelo, estamos interessados não apenas em determinar a complexidade computacional de achar um vértice marcado, mas também de uma aresta marcada. Mostramos que o tempo ótimo para encontrar ambos no grafo bipartido completo é $O(\sqrt{N_e})$ com probabilidade de sucesso $1 + o(1)$, onde N_e é o número de arestas de G.

Sumário

Grafo total

Definição 2.1

O **grafo linha** $L(G)$ é o grafo gerado a partir de um grafo G de tal forma que $V(L(G)) = E(G)$ e dois vértices de $L(G)$ são adjacentes se as respectivas arestas de G são adjacentes.

Definição 2.2

O **grafo total** $T(G)$ é o grafo gerado a partir de um grafo G de tal forma que $V(T(G)) = V(G) \cup E(G)$ e dois vértices de $T(G)$ são adjacentes se eles são adjacentes em G(no caso de termos dois vértices de G ou duas arestas de G) ou são incidentes em G(no caso de termos um vértice e uma aresta de G).

Grafo total

Definição 2.3

A **matriz de adjacência** A_G de um grafo G é definida por

$$(A_G)_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } v_i v_j \in E(G), \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

A **matriz de incidência** R_G de um grafo G é definida por

$$(R_G)_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } v_i \in e_j, \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Grafo total

A matriz de adjacência do grafo total $T(G)$ é dada pela seguinte matriz de blocos

$$H := A_{T(G)} = \begin{bmatrix} A & R \\ R^T & B \end{bmatrix}, \tag{1}$$

onde $A = A_G$, $R = R_G$ e $B = A_{L(G)}$.

São válidas as seguintes relações

$$RR^T = A_G + rI, \tag{2}$$
$$R^T R = A_{L(G)} + 2I. \tag{3}$$

A seguinte proposição foi provada por Cvetković[13].

Proposição 2.1 (Cvetković)

Sejam G um grafo regular com m arestas e n vértices de grau r e λ_i os autovalores de G, para $i \in \{1, ..., n\}$. Os autovalores de $T(G)$ são -2 com multiplicidade $m - n$ e $2n$ autovalores dados por

$$\theta_i^{\pm} = \frac{1}{2}(2\lambda_i + r - 2 \pm \sqrt{4\lambda_i + r^2 + 4}), i \in \{1, ..., n\}. \tag{4}$$

[13] D. M. Cvetković, *Spectrum Of The Total Graph Of A Graph,Publications de l'Institut Mathématique*, 49:52, 1973.

Proposição 2.2

Sejam G um grafo conexo bipartido r-regular com n vértices, m arestas e $r \geq 2$, sendo $V(G) = V_1 \cap V_2$ suas partições. Suponhamos que os autovalores de G são dados por $r = \lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_n$ e seus autovetores ortonormais são $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_n$. Definimos $\theta_i^{\pm}$ como na proposição anterior e

$$\mathbf{X}_i^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{c}} \begin{pmatrix} (2 - r - \lambda_i + \theta_i^{\pm})\mathbf{v}_i \\ R_G^T \mathbf{v}_i \end{pmatrix}, \ para\ i \in \{1, \ldots, n\} \qquad (5)$$

onde $c = (2 - r - \lambda_i + \theta_i^{\pm})^2 + \lambda_i + r$. Temos que os autovalores de $T(G)$ são dados por $\theta_i^{\pm}$, com $i \in \{2, \ldots, n\}$, $-r$ e -2 com multiplicidade $m - n + 1$ com os respectivos autovetores dados por

$$\mathbf{X}_i^{\pm},\ \mathbf{Z} = \begin{pmatrix} \mathbf{J}_1 \\ -\mathbf{J}_2 \\ 0 \end{pmatrix} \ e\ \mathbf{Y}_j = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{y}_j \end{pmatrix}, j \in \{1, \ldots, m - n + 1\}$$

onde $\mathbf{J}_i$ é o vetor de dimensão $|V_i|$ com todas entradas iguais a 1 e $\{\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_{m-n}\}$ é uma base ortonormal do núcleo de R_G.

Sumário

Passeio quântico a tempo contínuo em vértices e arestas

Seja G o grafo com conjunto de vértices $V(G)$ e conjunto de arestas $E(G)$. Associamos a esse grafo um espaço de Hilbert $(|V(G)| + |E(G)|)$-dimensional gerado por $\left\{ \left| v \right\rangle : v \in V(E) \cup E(G) \right\}$. Da matriz de adjacência do grafo total $T(G)$ obtemos o operador de evolução

$$U(t) = e^{-i\gamma Ht},$$

onde γ é um parâmetro real positivo e $H = A_{T(G)}$.

Método para análise de busca quântica

Seja H definido como

$$H = -\gamma A - |w\rangle\langle w|. \tag{6}$$

O objetivo do método é encontrar valores ótimos de t e γ de tal forma que a probabilidade de sucesso seja maximizada.
Um método para analisar uma busca quântica a tempo contínuo com múltiplos vértices marcados foi desenvolvido.[14][15]

[14] P. H. G. Lugão, and R. Portugal, and M. Sabri, and H. Tanaka. *Multimarked Spatial Search by Continuous-Time Quantum Walk*, *ArXiv:2203.14384*, 2022. DOI:10.48550/ARXIV.2203.14384.

[15] G. A. Bezerra, and P. H. G. Lugão, and R. Portugal, *Quantum-walk-based search algorithms with multiple marked vertices*, *Phys. Rev. A*, 2021. DOI:10.1103/PhysRevA.103.062202.

Resumindo, temos que a probabilidade de sucesso

$$t_{\text{run}} = \frac{\pi}{2\epsilon}, \tag{7}$$

onde

$$\epsilon = \pm \frac{S_1 \left\| P_0 \middle| w \right\rangle \|}{\sqrt{S_2}}. \tag{8}$$

A probabilidade de sucesso é

$$p_{\text{succ}} = 4 \left| \left\langle \lambda^+ \middle| \psi(0) \right\rangle \right|^2 \left| \left\langle w \middle| \lambda^+ \right\rangle \right|^2 + o(1), \tag{9}$$

onde

$$\left\langle w \middle| \lambda^\pm \right\rangle = \frac{S_1}{\sqrt{S_2}}, \tag{10}$$

$$\left\langle \psi(0) \middle| \lambda^\pm \right\rangle = \mp \frac{1}{\sqrt{N} \left\| P_0 | w \rangle \right\|}, \tag{11}$$

Um vetor unitário associado ao autovalor n é dado por

$$|v_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2n}} \left(\sum_{i=1}^{n} |i\rangle + |i'\rangle \right). \tag{12}$$

Uma base ortonormal do 0-autoespaço é $\{|v_k\rangle, |v_{k'}\rangle\}$ para $k \in \{1, ..., n-1\}$, onde

$$|v_k\rangle = \sqrt{\frac{k}{k+1}} \left(|k+1\rangle - \sum_{i=1}^{k} \frac{1}{k} |i\rangle \right) \tag{13}$$

e

$$|v_{k'}\rangle = \sqrt{\frac{k}{k+1}} \left(|(k+1)'\rangle - \sum_{i=1}^{k} \frac{1}{k} |i'\rangle \right). \tag{14}$$

Um autovetor unitário associado com o autovalor $(-n)$ é dado por

$$|v_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2n}} \left(\sum_{i=1}^{n} |i\rangle - |i'\rangle \right). \tag{15}$$

Uma base ortonormal para o kernel da matriz de incidência $R_{K_{n,n}}$ é

$$\left|w_{i,j}\right\rangle = \sqrt{h_{i,j}} \sum_{k_2=1}^{j+1} \sum_{k_1=1}^{i+1} \frac{(-i)^{\delta_{k_1,i+1}}(-j)^{\delta_{k_2,j+1}}}{ij} \left|e_{k_1,k_2}\right\rangle, \tag{16}$$

onde $h_{i,j} = \dfrac{ij}{ij+i+j+1}$ e $i, j \in \{1, ..., (n-1)\}$.

Usando esses autovetores de $K_{n,n}$, Proposição 2.2, e definindo

$$\theta_0^{\pm} := \frac{n - 2 \pm \sqrt{n^2+4}}{2} \tag{17}$$

e

$$\Delta_n^{\pm} := \frac{n^2 + 4 \pm (2-n)\sqrt{n^2+4}}{2}, \tag{18}$$

temos que os autovalores de $T(K_{n,n})$ em ordem decrescente são $\phi_0 = 2n$, $\phi_1 = \theta_0^+$, $\phi_2 = n-4$, $\phi_3 = \theta_0^-$, $\phi_4 = -2$ e $\phi_5 = -n$ com multiplicidades 1, $2(n-1)$, 1, $2(n-1)$, $(n-1)^2$ e 1, respectivamente.

Busca quântica através do passeio quântico total no $K_{n.n}$

Um autovetor unitário de autovalor $2n$ é

$$\big|X_n^+\big\rangle = \frac{1}{\sqrt{4+2n}}\left(2\big|v_n\big\rangle + R^T_{K_{n,n}}\big|v_n\big\rangle\right). \tag{19}$$

Um autovetor unitário de autovalor $(n-4)$ é

$$\big|X_n^-\big\rangle = \frac{1}{\sqrt{n^2+6n+4}}\left((-2-n)\big|v_n\big\rangle + R^T_{K_{n,n}}\big|v_n\big\rangle\right). \tag{20}$$

Uma base ortonormal para o $\theta_0^\pm$-autoespaço é dado por $\left\{\big|X_{0,k}^\pm\big\rangle, \big|X_{0,k'}^\pm\big\rangle : k=1,\ldots,n-1\right\}$, onde

$$\big|X_{0,k}^\pm\big\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta_n^\pm}}\left(\theta_n^\mp\big|v_k\big\rangle + R^T_{K_{n,n}}\big|v_k\big\rangle\right). \tag{21}$$

Um autovetor unitário de autovalor $(-n)$ é

$$\big|Z\big\rangle = \big|v_0\big\rangle. \tag{22}$$

Uma base ortonormal para (-2)-autoespaço é

$$\left\{\big|Y_{i,j}\big\rangle = \big|w_{i,j}\big\rangle : i,j=1,\ldots,n-1\right\}. \tag{23}$$

Busca quântica através do passeio quântico total no $K_{n.n}$

Substituindo os autovetores de $T(K_{n,n})$ nas definições de S_1 e S_2 com $q = 5$, obtemos

$$S_1^v = \frac{1}{2n} + \frac{5}{12n^2} + O\left(\frac{1}{n^3}\right), \tag{24}$$

$$S_1^e = \frac{1}{2n} + \frac{1}{2n^2} + O\left(\frac{1}{n^3}\right), \tag{25}$$

e

$$S_2^v = S_2^e = \frac{1}{4n^2} + O\left(\frac{1}{n^3}\right). \tag{26}$$

Usando a definição de ϵ, obtemos

$$\epsilon^v = \left(1 - \frac{7}{9n} + O\left(\frac{1}{n^2}\right)\right) \frac{1}{\sqrt{N}} \tag{27}$$

e

$$\epsilon^e = \left(1 - \frac{1}{n} + O\left(\frac{1}{n^2}\right)\right) \frac{1}{\sqrt{N}}. \tag{28}$$

Busca quântica através do passeio quântico total no $K_{n.n}$

Usando a expressão de t_{run}, o tempo ótimo nos dois casos é

$$t_{\text{run}} = \frac{\pi\sqrt{N}}{2} \tag{29}$$

e usando a expressão de p_{succ}, a probabilidade de sucesso de achar um vértice marcado é

$$p^{v}_{\text{succ}} = 1 - \frac{14}{9n} + O\left(\frac{1}{n^2}\right) \tag{30}$$

e de achar uma aresta marcada é

$$p^{e}_{\text{succ}} = 1 - \frac{2}{n} + O\left(\frac{1}{n^2}\right). \tag{31}$$

Sumário

Conclusão

- Nós definimos uma versão de passeio quântico a tempo contínuo em um grafo G que permite ao caminhante pular de vértice para aresta e vice versa.
- No nosso modelo, o caminhante pula de (1) vértice para vértice, (2) vértice para aresta, (3) aresta para vértice e (4) aresta para aresta.
- Usando este modelo de passeio quântico, mostramos que a o algoritmo de busca quântica no grafo bipartido completo pode encontrar um elemento marcado em $O(\sqrt{N})$ passos com probabilidade de sucesso $o(1)$.