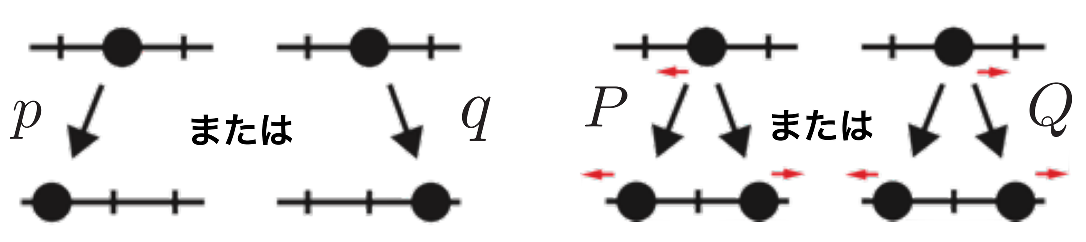
量子ウォーク -- ダイナミクスと幾何構造 --

松江　要 (統計思考院 / 数学協働プログラム) kmatsue@ism.ac.jp

1. はじめに -- 量子ウォークとは？

量子ウォーク（QW）はランダムウォーク（RW）の量子版として提案されるものである。典型的な例は $\mathbb{Z}$ 上の離散時間QWで、ファインマンのチェッカーボードにその原型が観察される。



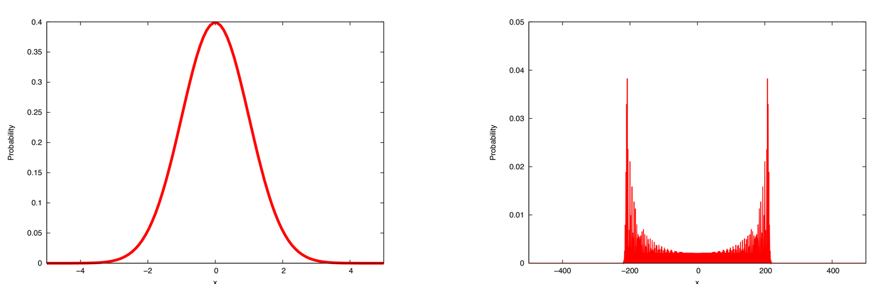
$p>0, q>0, p+q=1$

$P+Q=U\in U(2),$

$P=\begin{pmatrix} a & 0 \\ c & 0 \end{pmatrix},\ Q=\begin{pmatrix} 0 & b \\ 0 & d \end{pmatrix}$

RW（左図）とQW（右図）。QWは確率振幅を成分に持つユニタリ行列で遷移する。各点でウォーカーは「カイラリティ」をもち、遷移により次時刻での位置とカイラリティが決まる。カイラリティは、磁性体イジングモデルにおける「自由度」に対応する。

QWは“確率”の替わりにユニタリ行列によるダイナミクスを考える。その極限分布は従来の中心極限定理で得られるものと全く異なるものとなる[2]。



RWの正規分布の密度（左図）とアダマールウォークの確率分布（右図）。

さらに分布の広がり方は**時間に対して線型**であり、さらに**局在化**を引きおこし得る事から、QWの振る舞いはRWと大きく異なる[2]。この性質を利用した**量子探索アルゴリズム、産業界**や**物質材料科学**へのQWの応用、また**ディラック、シュレディンガー方程式の近似**としての見方など、数理物理へのQWの応用も広がっている。

2. 単体複体上量子ウォークの構成

ここでは**単体複体上の量子ウォークの構築**を行う。QWは通常グラフ上で定義される。[1]ではグラフ上のQWであるSzegedyウォークのスペクトル解析がなされた。そのスペクトルはグラフ上RWから遺伝するものとQW固有のものに分かれ、特に後者は局在化に寄与し、さらに固有関数がグラフの**ホモロジー**に付随するものである事が示唆されている。本研究は「高次元量子ウォーク」を提案し、そのダイナミクスと幾何構造の関連を調べる試みである。

単体複体とは、辺や三角形を一般化した**単体**の集まりで、全ての単体の境界と共通部分をまた構成要素に持つものである。$\mathcal{K}$ を単体複体とする。単体は頂点でラベル付けされ、 通常その順序には依らないが、ここでは順序の違いにより単体を区別する：

$$\tilde{K}_k := \{S|\sigma| := |S(a_0)S(a_1)\cdots S(a_k)| \mid \sigma=[a_0a_1\cdots a_k]\in K_k,\ S\in \mathcal{S}_{k+1}\}$$

ただし、K_k は $\mathcal{K}$ 内のk-単体全体の集合、$\mathcal{S}_{k+1}$ は(k+1)次元置換群である。そして、$\tilde{K}_k$ 上の関数空間を次で定義する： $\ell^2(\tilde{K}_k) := \left\{ f=\tilde{K}_k\to\mathcal{C} \mid \|f\|_{\tilde{K}_k}<\infty \right\}.$

ここで、$\langle f,g\rangle_{\tilde{K}_k} := \sum_\sigma \overline{f(\sigma)}g(\sigma)$ を内積、$\|\cdot\|_{\tilde{K}_k}$ を付随するノルムとし、基底を次の関数で定義する：

$$\delta_\sigma^{(k)}(\sigma') := \begin{cases} 1 & \text{if } \sigma'=\sigma \\ 0 & \text{if } \sigma'\neq\sigma \end{cases}.$$

この時、$(\ell^2(\tilde{K}_k), \langle\cdot,\cdot\rangle_{\tilde{K}_k})$ はヒルベルト空間となる。

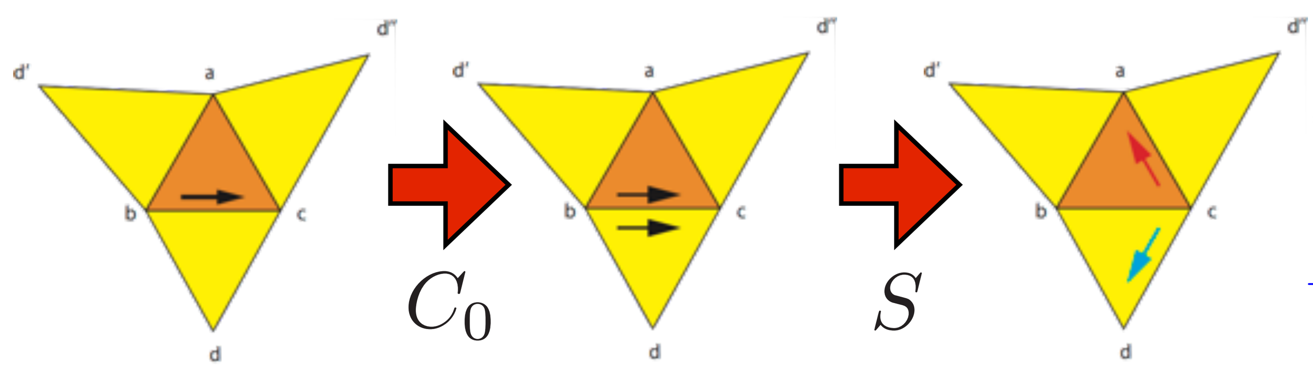
さて、位数 n+1 の置換 S を固定し、$\ell^2(\tilde{K}_n)$ の上の線型作用素を定義する。ただし、n は $\mathcal{K}$ の次元とする。

定義　写像 $\tilde{d}_i^{(n)}:\tilde{K}_n\to\tilde{K}_{n-1}$ を $\tilde{d}_i^{(n)}(|a_0a_1\cdots a_n|) := |a_{i+1}a_{i+2}\cdots a_na_0a_1\cdots a_{i-1}|,\ i=0,\cdots,n$ で定義し、$d_i^{(n)}:\ell^2(\tilde{K}_n)\to\ell^2(\tilde{K}_{n-1})$ を次の対応の $\mathbb{C}$-線型拡張として定義する：
$d_i^{(n)}\delta_\sigma^{(n)} = \overline{w(S^i\sigma)}\delta_{\tilde{d}_i^{(n)}(\sigma)}^{(n-1)}.$ さらに、任意の $\tau\in\tilde{K}_{n-1}$ に対して

$\sum_{\sigma\in\tilde{K}_n:\tilde{d}_0^{(n)}(\sigma)=\tau} |w(S^i\sigma)|^2=1$ が成り立つ時、関数 $w:\tilde{K}_n\longrightarrow\mathbb{C}$ を**ウエイト**と呼ぶ。 □

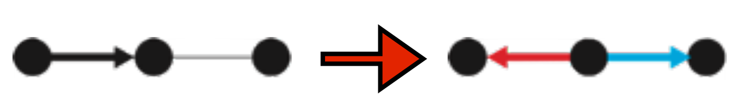
命題　$\ell^2(\tilde{K}_n)$ の上にウエイト w の存在を仮定する。このとき、$C_i := 2{d_i^{(n)}}^* d_i^{(n)} - I$ は $\ell^2(\tilde{K}_n)$ 上のユニタリ作用素である。ただし、${d_i^{(n)}}^*$ は $d_i^{(n)}$ の随伴である。 □

定義　ユニタリ作用素 $U=SC_0$ と自然に定義される確率の組を単体複体 $\mathcal{K}$ 上の **S-量子ウォーク** と呼ぶ。 □



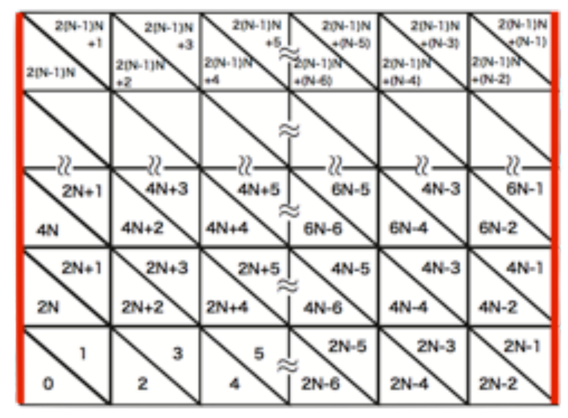
$$U\delta_{|abc|}^{(2)} = (2|w(|abc|)|^2-1)\delta_{|bca|}^{(2)} + 2\overline{w(|abc|)}w(|dbc|)\delta_{|bcd|}^{(2)}$$

2次元S-量子ウォーク。グラフ上のQW（右図）のように、波の「透過」(青)と「反射」(赤)が表現されている。



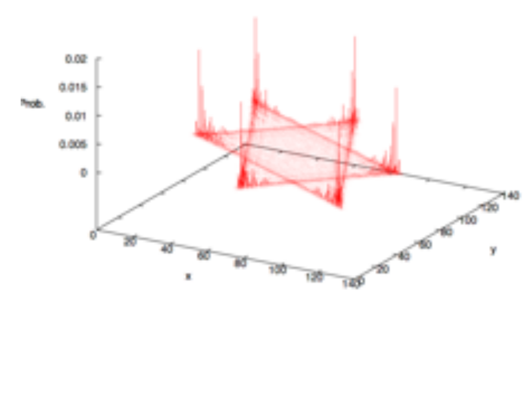
3. 単体複体上量子ウォーク：数値計算

様々な単体複体上で、前節で定義したQWのダイナミクスを観察する。簡単のため、2次元単体複体で、以下の単体分割を基準に考える。

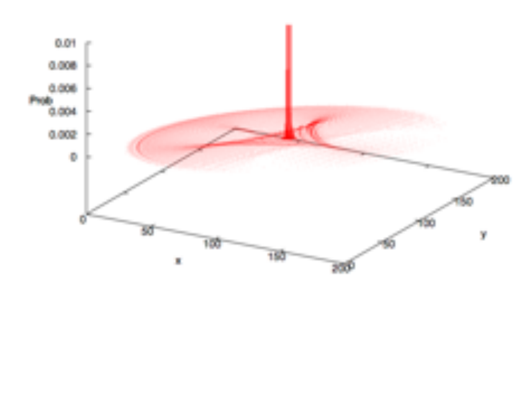


$\mathbb{R}^2$ の単体分割。数値シミュレーションの際は、充分大きなNに対し、$2N^2$ 個の三角形を用意すれば充分である。ここでは有限要素法でも用いられる一様な三角形分割を用い、図のようにラベルを付ける。
このラベルのもと、基底関数を次のように書く： $\delta_{2(iN+j)+k,l}$
$(i,j\in\{1,\cdots,N\},\ k=0,1,\ l\in\{0,1,\cdots,5\})$
シリンダーやメビウス帯を構成する際は、境界（例えば赤線）に周期境界条件、あるいはねじれ境界条件を課す。

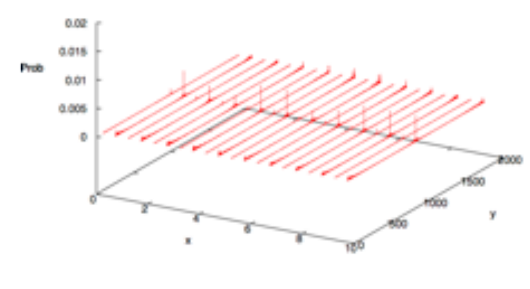
以下のグラフは (x,y,Prob.) 軸を持ち、Prob. は位置 (x,y) にある単体におけるQWの存在確率を表すとする。さらに、初期状態を $\Psi_0=\frac{1}{\sqrt{6}}\sum_{l=0}^{5}\delta^{(2)}_{N\times N+N,l}$ とする。



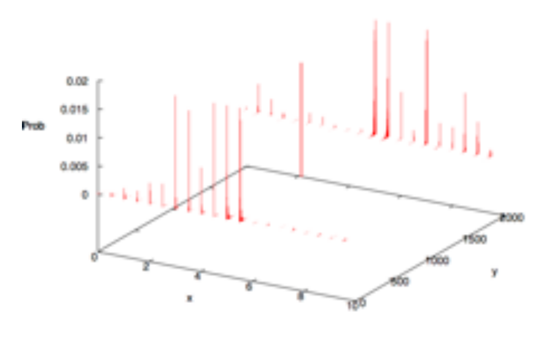
$\mathbb{R}^2$ 上QW. ウエイトは
$w_{2(iN+j),l}=1/\sqrt{3},$
$w_{2(iN+j)+1,l}=\sqrt{2/3}.$
存在確率は六芒星を描きながら広がる。三角格子上QWと異なり、局在化は起こらない。



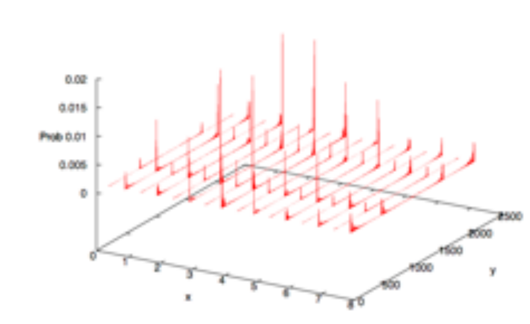
三角格子上QW. ウエイトは一様。存在確率は円状に広がると同時に、原点にて局在する。これは原点周りのサイクルが効いている [1]。



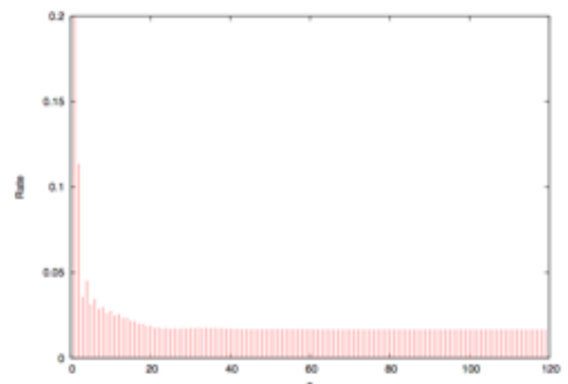
無限シリンダー上QW. ウエイトは $\mathbb{R}^2$ の時と同様。存在確率は広がると同時に、原点を含む円周上に局在する。



無限シリンダーに四面体（空洞あり）を付けた複体の上のQW. ウエイトは一様. 円周上に局在していた存在確率は、四面体の周りに吸収されてしまう。



メビウス帯上のQW. ウエイトは
$w_{2(iN+j),l}=1/\sqrt{10},$
$w_{2(iN+j)+1,l}=\sqrt{9/10}.$
円周上の確率分布も、螺旋を描きながら広がる。とくに、局在化は起こらない。



$\mathbb{R}^2$ 上QWの“分散”. 横軸は時間、縦軸は V_n/n^2 を表す。時間とともに収束する事から、S-QWも線型的広がりを持つ事が示唆される。

以上より、「ホモロジー」「向き」など、単体複体の幾何学的構造が量子ウォークのダイナミクスと関連がある事が示唆される。

4. 極限分布概観

ここでは複体上量子ウォークの極限分布の数学的考察を行う。その一つの方針は、ユニタリ作用素 U のスペクトルを調べる事にある。基本的なモデルは $\mathbb{R}^2$ 上のQWである。ここでは計算の都合上**方体集合上の量子ウォーク**を提案し、解析を行う。その構成法は、単体複体の時と同様である（下図参照）。なお、**方体集合**とは $I=I_1\times I_2,$ $I_j=[l_j,l_j+1]$ or $[l_j],\ l_j\in\mathbb{Z}$ の形で表される基本方体の和集合として表される集合である。今、方体集合としての $\mathbb{R}^2$ 上の量子ウォークを考える。

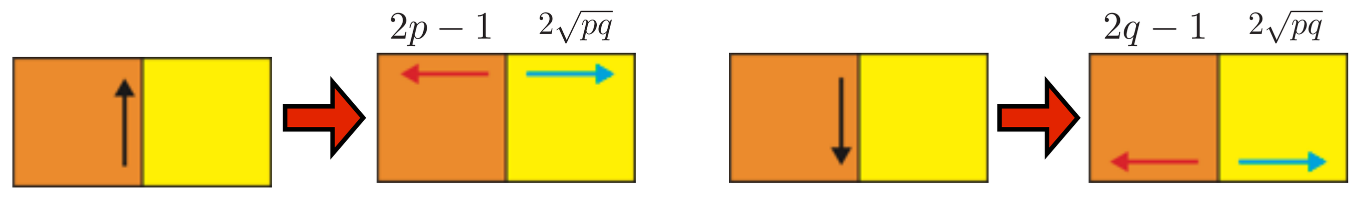
方体集合の場合は、グラフ上のQWと同様に**カイラリティ**を定める事ができる。基本方体上の状態は、状態を表す矢印が基本方体の境界に沿って正の向きをもつ時、**正のカイラリティ(+)**を持つと定義する。**負のカイラリティ (-)** も同様に定める。よって $\mathbb{R}^2$ の場合は、各正方形上に“+”を持つ状態4つ、“ー”を持つ状態4つの合計8状態が定まる。QWを定める関数空間の作り方は、単体複体の場合と同様である。

p, q > 0をp+q=1なる数とし、カイラリティの符号に対応させてウエイトを次で定める：

$w(\sigma)=\sqrt{p}$ **（σが正のカイラリティを持つ時）**, $w(\sigma)=\sqrt{q}$ **（σが負のカイラリティを持つ時）**.

これにより、単体複体の場合と同様に方体集合上のユニタリ作用素を構成できる。

方体集合上QW。数字は状態遷移の重み。単体複体のQWの図を参照。他の状態についても同様。



特に $\mathbb{R}^2$ の場合はフーリエ変換を用いた議論を適用でき、次が示される。

定理 [松江-小栗栖-瀬川]　方体集合としての $\mathbb{R}^2$ 上2ステップQWの固有値は、1次元2状態QWの2つのテンソル積の固有値と一致する。 □

この結果からも、単体あるいは方体を用いた我々のQWは、従来のQWの自然な高次元化である事が伺える。

参考文献

[1] Y. Higuchi, N. Konno, I. Sato and E. Segawa, Spectral and asymptotic properties of Grover walks on crystal lattices, J. Func. Anal., **267**(2014), 4197--4235.
[2] 今野 紀雄, 量子ウォーク, 森北出版 (2014).