数理解析研究所講究録 第2089巻 2018年 71-83

スペクトル写像を用いた量子ウォークの解析

信州大学・工学基礎教育部門　鈴木　章斗
Akito Suzuki
Division of Mathematics and Physics, Shinshu University

1　はじめに

本稿の目的は，離散時間量子ウォークの時間発展作用素を，スペクトル写像を用いて解析するいくつかの方法を紹介することにある．このような解析手法を最初に導入したのは Szegedy [14] である．彼は，$X \cup Y$ を頂点集合とする 2 部グラフ上のランダムウォークを 量子化 して，時間発展作用素 W を

$$W = \left(2\sum_{y\in Y} |\psi_y\rangle\langle\psi_y| - 1\right)\left(2\sum_{x\in X} |\phi_x\rangle\langle\phi_x| - 1\right) \tag{1.1}$$

と定義した．ここで，

$$\phi_x = \sum_{y\in Y} \sqrt{p_{xy}}\delta_x \otimes \delta_y, \qquad \psi_y = \sum_{x\in X} \sqrt{q_{yx}}\delta_x \otimes \delta_y \tag{1.2}$$

は状態空間 $\mathcal{H} = \ell^2(X) \otimes \ell^2(Y)$ のベクトルで，$|\phi_x\rangle\langle\phi_x|$ は，ϕ_x が張る $\mathcal{H}$ の 1 次元部分空間への射影である．また，$\delta_x \in \ell^2(X)$ は $\delta_x(x) = 1$，$\delta_x(u) = 0$ $(u \neq x)$ で定め，p_{xy} は x から y，q_{yx} は y から x への推移確率で

$$\sum_{y\in Y} p_{xy} = 1, \quad \sum_{x\in X} q_{yx} = 1$$

を満たす．$2\sum_{x\in X} |\phi_x\rangle\langle\phi_x| - 1$ がユニタリかつ自己共役であることは容易に確かめられる．W はそのような作用素の 2 つの積で表されるので，特にユニタリである．時間発展 W によって定まる量子ウォークは，bipartite walk と呼ばれている．X，Y を有限集合とするとき，Szegedy は，W の固有値を行列 $(\langle\phi_x, \psi_y\rangle)_{x,y}$ の特異値で特徴付けた．ここで，$\langle\cdot,\cdot\rangle$ は，$\mathcal{H}$ の内積で，$\langle\phi_x, \psi_y\rangle = \sqrt{p_{xy}q_{yx}}$ となる．この定義では，2 部グラフは単純グラフとしている．

2 部グラフではない $G = (V, E)$ に対しても，

$$X = \{(v, 0) \mid v \in V\}, \quad Y = \{(0, v) \mid v \in V\} \tag{1.3}$$

とおくことで，$X \cup Y$ を頂点集合とする 2 部グラフ上の時間発展 W を定義できる．この場合は，G にループは許されるが，多重辺は許されない．

多重辺を許すためには，2 部グラフの代わりに，次で定まる有向グラフを考えるのが便利だ．$G=(V,E)$ をループや多重辺を許す一般のグラフとする．ただし，G は無限グラフでもよいが，局所有限性は仮定する．すなわち，各点 $x \in V$ に隣接する点の個数 $\deg x$ は有限とする．G の各辺に自然に定まる 2 つの向きを入れた有向辺の集合を A とする．すなわち，A は，G の各辺 $e \in E$ の端点 $u, v \in V$ に対して，u を始点，v を終点とする有向辺 a と v を始点，u を終点とする逆向きの辺 $\bar{a}$ からなる．瀬川 [11] は，A を辺の集合とする有向グラフ $G'=(V,A)$ を考え，$\mathcal{H}=\ell^2(A)$ を状態空間として採用した．さらに，時間発展は $\mathcal{H}$ 上のシフト作用素 S とコイン作用素 C の積

$$U = SC \tag{1.4}$$

で定義した．ここで，シフト作用素は，

$$(S\psi)(a) = \psi(\bar{a}), \quad a \in A, \quad \psi \in \ell^2(A)$$

で定義されるユニタリかつ自己共役な作用素である．コイン作用素は，

$$C = 2\sum_{v \in V} |\phi_v\rangle\langle\phi_v| - 1$$

で定義する．ただし，$\phi_v = \sum_{a \in A : o(a)=v} \sqrt{p_a}\delta_a \in \ell^2(A)$ で，p_a は a の始点 $o(a)$ から終点 $t(a)$ への推移確率で，$\sum_{a \in A : o(a)=v} p_a = 1$ $(v \in V)$ を満たす．U を時間発展とする量子ウォークを Szegedy walk と呼ぶ．瀬川 [11] は，U の固有値を行列 $(\langle\phi_u, S\phi_v\rangle)_{u,v \in V}$ で定義される $\ell^2(V)$ 上の自己共役作用素 T の固有値で特徴づけた．特に，推移確率が $p_a = 1/\deg o(a)$ のとき，Grover walk と呼ぶ．

Segedy walk の時間発展 U と bipartite walk の時間発展 W の間には次の関係がある．G は単純であるとし，(1.3) で X, Y を定める．$\delta_{(v,u)} \in \ell^2(A)$ と $\delta_x \otimes \delta_y \in \ell^2(X) \otimes \ell^2(Y)$ $(x=(v,0), y=(0,u))$ を同一視すれば，$\ell^2(A) \subset \ell^2(X) \otimes \ell^2(Y)$ とみることができる．さらに，$\phi_x := \phi_v$ $(x=(v,0))$，$\psi_y := S\phi_v = \sum_{a \in A : o(a)=v} \sqrt{p_a}\delta_{\bar{a}}$ $(y=(0,v))$ と読み替えれば，

$$U^2 = (SCS)C \simeq W$$

と同一視される [11, 9]．したがって，U の固有値 λ が求まれば，W の固有値は λ^2 と計算できる．この同一視は，G が多重辺をもつ場合には，それに対応する $\ell^2(X) \otimes \ell^2(Y)$ のベクトルが存在しないので，意味をなさない．

以上の考察から，Segedy walk の時間発展 (1.4) は，多重辺をもつグラフを許容し，単純グラフの場合には $U^2 \simeq W$ によって，bipartite walk の時間発展 (1.1) と同一視できることがわかる．その意味で，Segedy walk の時間発展は bipartite walk のそれより汎用的である．また，いずれの場合も，時間発展はユニタリかつ自己共役な作用素の積で定義できる．一般に，ユニタリかつ自己共役な作用素 C は，$C^2=1$ を満たすので，C のスペクトルは，± 1 の固有値しかない．したがって，固有値 1 の固有空間の完全正規直交系を $\{\chi_x\}$ とすると，

$$C = 2\sum_x |\chi_x\rangle\langle\chi_x| - 1 \tag{1.5}$$

と表せる．そこで，本稿では，量子ウォークの時間発展のひとつのクラスとして，次の条件 (1)，(2) を満たすヒルベルト空間上のユニタリ作用素 S と C の積 $U=SC$ を考える：

(1) S はユニタリかつ自己共役である．
(2) ある正規直交系 $\{\chi_x\}$ があって，C は (1.5) と表せる．

このとき，U のスペクトル $\sigma(U)$ を $\langle\chi_x, S\chi_y\rangle$ を行列要素にもつ自己共役作用素 T のスペクトル $\sigma(T)$ を用いて表現することが目標となる．より詳しくは，Joukowsky 変換 $\varphi(z)=(z+z^{-1})/2$ で写像 $\varphi: S^1 \to [-1,1]$ を定めるとき，

$$\sigma(U) = \varphi^{-1}(\sigma(T)) \cup \{1\}^{M_+} \cup \{-1\}^{M_-}$$

と表せる．これを量子ウォークにおけるスペクトル写像定理と呼ぶ．ここで，$M_\pm$ は集合の濃度を表す非負整数で，$M_\pm = 0$ のときは $\{\pm 1\}^{M_\pm} = \emptyset$ と規約する．

次節では，スペクトル写像定理をより一般の形で表現する．それに続く各節では，スペクトル写像を用いて解析できる具体的な模型を紹介する．3 節では，1 次元スプリット・ステップ量子ウォークを導入し，非等方なコインをもつ場合を考える．4 節では，スプリット・ステップ量子ウォークを高次元に拡張し，欠損をもつ量子ウォークのスペクトルを調べる．このような例を通して，スペクトル写像定理の有用性をみていく．

2　スペクトル写像

この節では，2 つの可分なヒルベルト空間 $\mathfrak{H}$ と $\mathfrak{K}$ を考え，$\mathfrak{H}$ 上の作用素 S と有界な作用素 $d: \mathfrak{H} \to \mathfrak{K}$ で次の条件を満たすものを考える：

(S.1) S はユニタリかつ自己共役である．
(S.2) d は余等距離である．

ここで，d が余等距離であるとは，dd^* が $\mathfrak{K}$ 上の恒等作用素となることである．上の仮定の下で，

$$C = 2d^*d - 1$$

とおくと，C は $\mathfrak{H}$ 上のユニタリかつ自己共役な作用素となる．このとき，

$$U = SC$$

を時間発展と呼び，便宜上，S をシフト作用素，C をコイン作用素と呼ぶ．d は境界作用素と呼ぶことがある．また，

$$T = dSd^*$$

で定義される $\mathfrak{K}$ 上の自己共役作用素は，bipartite walk や Szegedy walk における対応物の名称をとって，discriminant と呼ばれるが訳語は定着していない．本稿では，試みに判別子と呼ぶことにする．

Example 2.1. $\mathfrak{H} = \ell^2(X) \otimes \ell^2(Y)$，$\mathfrak{K} = \ell^2(X)$ とし，ϕ_x，ψ_y を (1.2) で定義する．シフト作用素を $S = 2\sum_{y\in Y} |\psi_y\rangle\langle\psi_y| - 1$ とすると，ユニタリかつ自己共役で (S.1) を満たす．境界作用素を

$$(d\psi)(x) = \langle \phi_x, \psi \rangle, \quad x \in X,\ \psi \in \mathfrak{H}$$

で定義すると，d の共役は

$$d^*f = \sum_{x\in X} f(x)\phi_x, \quad f \in \mathfrak{K}$$

で与えられる．$\{\phi_x\}$ は正規直交系なので

$$(dd^*f)(x) = \langle \phi_x, d^*f \rangle = f(x), \quad x \in X$$

となるから，(S.2) を満たす．さらに，$d^*d = 2\sum_{x\in X} |\phi_x\rangle\langle\phi_x|$ なので，$C = 2d^*d - 1$ とおくと，(1.1) で定義される bipartite walk の時間発展は，$W = SC$ と表される．判別子 T は，

$$\begin{aligned}(Tf)(x) &= (dSd^*f)(x) = \langle \phi_x, Sd^*f \rangle = \sum_{\tilde{x}\in X} f(\tilde{x})\langle \phi_x, S\phi_{\tilde{x}} \rangle \\ &= \sum_{\tilde{x}\in X} \left(2\sum_{y\in Y} \langle \phi_x, \psi_y \rangle \langle \psi_y, \phi_{\tilde{x}} \rangle \right) f(\tilde{x}) - f(x)\end{aligned}$$

なので，$(T+1)/2$ の行列要素は，$((T+1)/2)_{x,\tilde{x}} = \sum_{y\in Y} \sqrt{p_{xy}q_{yx}}\sqrt{p_{\tilde{x}y}q_{y\tilde{x}}}$ となる．したがって，X，Y が有限集合の場合には，$(T+1)/2$ の固有値は行列 $(\sqrt{p_{xy}q_{yx}})_{x,y}$ の特異値の平方である．

Example 2.2. グラフ $G=(V,E)$ に対して，$G'=(V,A)$ を 1 節と同様にして定義する．$\mathfrak{H}=\ell^2(A)$，$\mathfrak{K}=\ell^2(V)$ とおいて，$U=SC$ は，(1.4) で与える．1 節でみたように，S は (S.1) を満たす．Example 2.1 と同様に，$(d\psi)(v)=\langle\phi_v,\psi\rangle$ で，境界作用素 d を定義すれば，(S.2) を満たし，$C=2d^*d-1$ となる．また，判別子 T は

$$
\begin{aligned}
(Tf)(u) &= \langle\phi_u, Sd^*f\rangle = \sum_{v\in V} f(v)\langle\phi_u, S\phi_v\rangle \\
&= \sum_{v\in V}\left(\sum_{a\in A:o(a)=u,t(a)=v}\sqrt{p_a p_{\bar{a}}}\right) f(v)
\end{aligned}
$$

なので，T の行列要素は，次のようになる．

$$
T_{u,v} = \sum_{a\in A:o(a)=u,t(a)=v}\sqrt{p_a p_{\bar{a}}}
$$

上の 2 つの例でみたように，ある正規直交系 $\{\chi_x\}$ があって，C が (1.5) と表せる場合は，$(d\psi)(x)=\langle\chi_x,\psi\rangle$ と定義することで，d は余等距離になり，$C=2d^*d-1$ と表現できる．逆に，余等距離な d が与えられるとき，d^*d は $\mathfrak{H}$ 上の射影となる．実際，d^*d は自己共役で，$(d^*d)^2=d^*(dd^*)d=d^*d$ よりべき等である．そこで，$\mathrm{Ran}(d^*d)$ の完全正規直交系をとって，$\{\chi_x\}$ とおけば，$d^*d=\sum_x|\chi_x\rangle\langle\chi_x|$ と表せる．ゆえに，C は (1.5) と表せる．こうして，1 節でのべた S と C に対する条件 (1)，(2) は，(S.1)，(S.2) と同値となる．

次に，スペクトル写像定理について述べる．この定理の原型は，Szegedy[14] によって得られた．彼は，Example 2.1 の模型について，行列 $(\sqrt{p_{xy}q_{yx}})_{x,y}$ の特異値が $\cos\theta$ のとき，時間発展 W の固有値は $e^{\pm 2i\theta}$ となることを示した．これを判別子 T の言葉で考えてみよう．T の固有値を τ とする．Example 2.1 でみたように，特異値の平方 $\cos^2\theta$ は $(T+1)/2$ の固有値に等しいので，$(\tau+1)/2=\cos^2\theta$ が成り立つ．よって，T の固有値は $\tau=\cos 2\theta$ となる．つまり，W の固有値は，T の固有値 τ を用いて

$$
e^{\pm i\arccos\tau}
$$

と表される．同様に，Szegedy walk やその拡張系の twisted Szegedy walk などでも時間発展 U と判別子 T との固有値の関係 $\tau\mapsto e^{\pm i\arccos\tau}$ が示され，次のように精密化された [11, 4]．写像 $\varphi: S^1\to[-1,1]$ を Joukowsky 変換 $\varphi(z)=(z+z^{-1})/2$ で定めると，その逆像は

$$
\varphi^{-1}(\tau)=\{e^{\pm i\arccos\tau}\}
$$

となる．つまり，φ^{-1} は，$[-1,1]$ を S^1 と上半平面の共通部分 $\{e^{i\arccos\tau} \mid -1 \le \tau \le 1\}$ と下半平面の共通部分 $\{e^{i\arccos\tau} | -1 \le \tau \le 1\}$ に移す 2 価の関数となる．[4] では，有限グラフの場合に

$$\sigma(U) = \varphi^{-1}(\sigma(T)) \cup \{1\}^{M_+} \cup \{-1\}^{M_-} \tag{2.1}$$

と表現された．ここで，$M_\pm$ は，$\mathfrak{M}_\pm = \ker d \cap \ker(S \pm 1)$ の次元である．有限グラフの場合は，スペクトルはすべて固有値であることに注意されたい．[4] では，結晶格子上の Grover walk の場合に，固有値以外のスペクトルでも同様の構造をもつことが示された．(2.1) より，U のスペクトルは，T のスペクトルが遺伝する部分 $\varphi^{-1}(T)$ と，$\mathfrak{M}_\pm$ の次元に応じて現れる固有値 $\{\pm 1\}^{M_\pm}$ の部分に分けられる．$\mathfrak{M}_\pm$ は，発生の固有空間と呼ばれている [5].

以下に述べる定理は，2 つのヒルベルト空間 $\mathfrak{H}$ から $\mathfrak{K}$ への余等距離作用素 d と $\mathfrak{H}$ 上のユニタリかつ自己共役な作用素 S について，$U = S(2d^*d - 1)$ と T の間のスペクトル写像定理 (2.1) が成立することを主張する．特に，スペクトル写像定理は，無限グラフ上の Szegedy walk でも成立する．また，スペクトルの性質も遺伝する．σ_{ac}，σ_{sc}，σ_{p} で絶対連続スペクトル，特異連続スペクトル，固有値の全体を表す．

Theorem 2.1 ([7, 12])**.** 仮定 (S.1)，(S.2) の下で，(2.1) と次が成り立つ．

(1) $\sigma_\sharp(U) = \varphi^{-1}(\sigma_\sharp(T))$, $\quad \sharp = \mathrm{ac}, \mathrm{sc}$.
(2) $\sigma_{\mathrm{p}}(U) = \varphi^{-1}(\sigma_{\mathrm{p}}(T)) \cup \{1\}^{M_+} \cup \{-1\}^{M_-}$.

次の定理は，T のスペクトルが遺伝する構造をより精密に表現する．$\mathfrak{H}$ から $\mathfrak{K}$ への 2 つの作用素

$$d_+ = \frac{1}{\sqrt{2(1-T^2)}}(d - e^{-i\arccos(T)}dS), \quad d_- = \frac{1}{\sqrt{2(1-T^2)}}(e^{-i\arccos(T)}d - dS)$$

は，$\mathfrak{H}$ 全体で定義された有界作用素の拡大をもつので，それを同じ記号で表す．このとき，

$$\mathfrak{D}_\pm = \mathrm{Ran}(d_\pm^* d_\pm)$$

とおくと，$d_\pm : \mathfrak{D}_\pm \to \ker(T^2 - 1)^\perp$ はユニタリになる．詳しくは，[12] を参照されたい．$\mathfrak{H}$ を

$$\mathfrak{H} = \ker(U^2 - 1)^\perp \oplus \ker(U - 1) \oplus \ker(U + 1)$$

と分解して考える．

Theorem 2.2 ([12])**.** 仮定 (S.1)，(S.2) の下で次が成り立つ．

(1) $\ker(U^2-1)^{\perp}=\mathfrak{D}_+\oplus\mathfrak{D}_-$.
(2) $\ker(U\mp 1)=d^*\ker(T\mp 1)\oplus\mathfrak{M}_{\pm}$.
(3) U は，$\mathfrak{D}_{\pm}$ を不変にし，U の $\mathfrak{D}_{\pm}$ への制限は

$$U\mid_{\mathfrak{D}_{\pm}} \quad = e^{\pm i\arccos(d_{\pm}^* T d_{\pm})}$$

Theorem 2.2 より，U の連続部分は

$$e^{i\arccos(T)}\oplus e^{-i\arccos(T)}$$

の連続部分とユニタリ同値となることがわかる．これは，Theorem 2.1 のスペクトルの構造を作用素の言葉で精密化した主張である．

松江等 [10] は，判別子 T の代わりに，

$$UL=L\tilde{T}$$

という関係を満たす $\mathfrak{K}\oplus\mathfrak{K}$ 上の作用素 $\tilde{T}=\begin{pmatrix}0 & -I\\ I & 2T\end{pmatrix}$ と $L=(d^*,Sd^*)$ で定義される作用素 $L:\mathfrak{K}\oplus\mathfrak{K}\to\mathfrak{H}$ を用いて, スペクトル写像定理を導いている．

スペクトル写像定理を結晶格子上の Grover walk に応用した結果は [4] に譲る．結晶格子以外の応用例としては，magnifier graph [5]，infinite tree [6]，Sierpiński lattice [7] などがある．

次節以降で，Grover walk や Szegedy walk 以外の $\mathbb{Z}^d$ 上の量子ウォークへのスペクトル写像定理の応用例をみる．

3 スプリット・ステップ量子ウォーク

状態の時間発展が

$$\Psi_{t+1}(x)=P(x+1)\Psi_t(x+1)+Q(x-1)\Psi_t(x-1)+R(x)\Psi(x),\quad z\in\mathbb{Z} \qquad (3.1)$$

で表される 1 次元 2 状態量子ウォークをを考える．ここで，$(x,t)\in\mathbb{Z}\times\mathbb{N}$ で，Ψ_t は時刻 t における量子ウォーカーの状態を表す状態空間

$$\mathcal{H}=\ell^2(\mathbb{Z};\mathbb{C}^2)=\{\Psi:\mathbb{Z}\to\mathbb{C}^2 \mid \sum_{x\in\mathbb{Z}}\|\Psi(x)\|_{\mathbb{C}^2}^2<\infty\}$$

の正規化されたベクトルである．任意の $\Psi \in \mathcal{H}$ に対して，その $x \in \mathbb{Z}$ における値を $\Psi(x) = \begin{pmatrix} \Psi_1(x) \\ \Psi_2(x) \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2$ と表す．$\mathcal{H}$ 上のシフト作用素 S を

$$(S\Psi)(x) = \begin{pmatrix} p\Psi_1(x) + q\Psi_2(x+1) \\ \bar{q}\Psi_1(x-1) - p\Psi_2(x) \end{pmatrix} \tag{3.2}$$

と定義する．ただし，$p \in \mathbb{R}$ と $q \in \mathbb{C}$ は $p^2 + |q|^2 = 1$ を満たすとする．2 行 2 列のユニタリ行列の族 $\{C(x)\}_{x\in\mathbb{Z}} \subset U(2)$ に対し，掛け算作用素

$$(C\Psi)(x) = C(x)\Psi(x)$$

でコイン作用素 C を定義する．このとき，状態の時間発展 (3.1) は $\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素

$$U = SC \tag{3.3}$$

で表すことができる．実際，

$$C(x) = \begin{pmatrix} a(x) & b(x) \\ c(x) & d(x) \end{pmatrix}$$

と表すとき

$$P(x) = q\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a(x) & b(x) \end{pmatrix}, \quad Q(x) = \bar{q}\begin{pmatrix} c(x) & d(x) \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad R(x) = p\begin{pmatrix} a(x) & b(x) \\ -c(x) & -d(x) \end{pmatrix}$$

と定義すると，$\Psi_t = U^t\Psi_0$ は，(3.1) を満たす．ここで，$\Psi_0 \in \mathcal{H}$ ($\|\psi_0\| = 1$) は，初期状態である．

Example 3.1. $\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素 $S_\pm$ を

$$(S_+\Psi)(x) = \begin{pmatrix} \Psi_1(x-1) \\ \Psi_2(x) \end{pmatrix}, \quad (S_-\Psi)(x) = \begin{pmatrix} \Psi_1(x) \\ \Psi_2(x+1) \end{pmatrix}$$

で定義し，$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}$ とおく．このとき，$\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素

$$U_{\mathrm{ss}}(\theta_1, \theta_2) = S_-R(\theta_2)S_+R(\theta_1), \quad \theta_1, \theta_2 \in [0, 2\pi)$$

で定義される量子ウォークをスプリット・ステップ量子ウォークという [8]．この定義で，θ_1，θ_2 を x の関数 $\theta_1 = \theta_1(x)$，$\theta_2 = \theta_2(x)$ で置き換えてもよい．

(3.3) で定義されるユニタリ作用素 U は，次の意味で，$U_{\mathrm{ss}}(\theta_1, \theta_2)$ の一般化となる．$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ をパウリ行列とし，$p = \sin(\theta_2/2)$，$q = \cos(\theta_2/2)$，$C(x) = R(\theta_1(x))\sigma_1$ とすると，

$$U = \sigma_1 U_{\mathrm{ss}}(\theta_1, \theta_2)\sigma_1$$

となる．つまり，この設定の下で，U は，$U_{\mathrm{ss}}(\theta_1, \theta_2)$ のユニタリ同値である．本稿では，U のこともスプリット・ステップ量子ウォークと呼ぶ．

スプリット・ステップ量子ウォークでは，$C(x) = R(\theta_1(x))\sigma_1$ がユニタリかつ自己共役になっている．以下，$C(x)$ はユニタリかつ自己共役であると仮定し，U が固有値をもつための十分条件を与える．この場合，$C(x)$ は ± 1 の固有値のみをもつ．いま，$\dim\ker(C(x) - 1) = 1$ を仮定し

$$\chi(x) = \begin{pmatrix} \chi_1(x) \\ \chi_2(x) \end{pmatrix} \in \ker(C(x) - 1), \quad \|\chi(x)\|_{\mathbb{C}^2} = 1$$

とする．また，自明な場合を避けるために，$|p| \neq 1$，$\chi_1(x)\chi_2(x) \neq 0$ とする．

Theorem 3.1. 次の条件を満たすとき，U は ± 1 の固有値をもつ．

$$\limsup_{x \to +\infty} \left| \frac{(p \pm 1)\chi_2(x)}{q\chi_1(x)} \right| < 1, \quad \limsup_{x \to -\infty} \left| \frac{q\chi_1(x)}{(p \pm 1)\chi_2(x)} \right| < 1.$$

証明の概略．まず，S がユニタリかつ自己共役であることは容易に確かめられる．また，$C(x) = 2|\chi(x)\rangle\langle\chi(x)| - 1$ と表せるので，

$$(d\Psi)(x) = \langle \chi(x), \Psi \rangle, \quad \Psi \in \mathcal{H}$$

とおけば，$d : \mathcal{H} \to \mathcal{K} := \ell^2(\mathbb{Z})$ は，余等距離になる．以上から，(S.1) と (S.2) を満たすので，Theorem 2.1 が使える．よって，$\ker d \cap \ker(S \pm 1)$ が非自明であることを示せばよい．

$\Psi \in \ker(S \pm 1)$ とすると，

$$((S \pm 1)\Psi)(x) = \begin{pmatrix} (p \pm 1)\Psi_1(x) + q\Psi_2(x+1) \\ \bar{q}\Psi_1(x-1) + (\pm 1 - p)\Psi_2(x) \end{pmatrix} = 0$$

なので，$\Psi_1(x) = -\frac{q}{p \pm 1}\Psi_2(x+1)$ となる．ゆえに，

$$\Psi = \begin{pmatrix} -\frac{q}{p \pm 1}\psi(\cdot + 1) \\ \psi \end{pmatrix}$$

と表せる．さらに，$\Psi \in \ker d$ とすると，$(d\Psi)(x) = \langle \chi(x), \Psi(x) \rangle = 0$ なので

$$\psi(x) = -\frac{q\bar{\chi}_1(x)}{(p \pm 1)\bar{\chi}_2(x)}\psi(x+1) \tag{3.4}$$

となる．以上から $\ker d \cap \ker(S \pm 1)$ が非自明であるためには，(3.4) を満たす ψ が $\ell^2(\mathbb{Z})$ であればよい．これは，ダランベールの収束判定法を用いて示せる．実際，仮定より

$$\limsup_{x\to+\infty} \frac{|\Psi(x+1)|}{|\psi(x)|} = \limsup_{x\to\infty} \left| \frac{(p\pm 1)\chi_2(x)}{q\chi_1(x)} \right| < 1,$$
$$\limsup_{x\to-\infty} \frac{|\Psi(x-1)|}{|\psi(x)|} = \limsup_{x\to-\infty} \left| \frac{q\chi_1(x)}{(p\pm 1)\chi_2(x)} \right| < 1$$

なので，

$$\sum_{x\in\mathbb{Z}} |\psi(x)|^2 = \sum_{x\geq 0} |\psi(x)|^2 + \sum_{x<0} |\psi(x)|^2$$

と分解すると，右辺の級数が収束することがわかる． □

Example 3.2. 簡単のため，$p = 0$ とする．この場合，

$$\left| \frac{\chi_2^{(\mathrm{r})}}{\chi_1^{(\mathrm{r})}} \right| < 1, \quad \left| \frac{\chi_1^{(\ell)}}{\chi_2^{(\ell)}} \right| < 1$$

を満たす $\chi^{(\mathrm{r})}$，$\chi^{(\ell)}$ をとり，$\lim_{x\to+\infty} \chi(x) = \chi^{(\mathrm{r})}$，$\lim_{x\to-\infty} \chi(x) = \chi^{(\ell)}$ とおくと，Theorem 3.1 の条件を満たす．

上の例で，

$$C_{\mathrm{r}} = 2|\chi^{(\mathrm{r})}\rangle\langle\chi^{(\mathrm{r})}| - 1, \quad C_\ell = 2|\chi^{(\ell)}\rangle\langle\chi^{(\ell)}| - 1$$

とおくと，

$$\lim_{x\to+\infty} C(x) = C_{\mathrm{r}}, \quad \lim_{x\to-\infty} C(x) = C_\ell$$

を満たす．このような非等方なコイン $C(x)$ をもつ量子ウォークのスペクトルの性質は，[13] で調べられている．

4 欠損をもつ量子ウォーク

まず，前節の模型を高次元に拡張する．$\mathcal{H} = \ell^2(\mathbb{Z}^d; \mathbb{C}^{2d})$ とする．シフト作用素を $\mathcal{H} \simeq \oplus_{j=1}^d \ell^2(\mathbb{Z}^d; \mathbb{C}^2)$ という同一視の下で，$S = \oplus_{j=1}^d S_j$ と定義する．ここで，S_j は $\ell^2(\mathbb{Z}^d; \mathbb{C}^2)$ 上のユニタリ作用素で

$$(S_j\Psi)(x) = \begin{pmatrix} p_j\Psi_1(x) + q_j\Psi_2(x+e_j) \\ \bar{q}_j\Psi(x-e_j) + p_j\Psi_2(x) \end{pmatrix}, \quad x \in \mathbb{Z}^d, \quad \Psi \in \ell^2(\mathbb{Z}^d; \mathbb{C}^2)$$

で定義する．ただし，$p_j^2+|q_j|^2=1$ ($p_j\in\mathbb{R}$, $q_j\in\mathbb{C}$) とする．コイン作用素 C は，$2d$ 次のユニタリ行列の族 $\{C(x)\}_{x\in\mathbb{Z}^d}$ による掛け算作用素とする．次の仮定を置く：

$$C(x)=\begin{cases}C_1, & x\in\mathbb{Z}^d\setminus\{0\}\\ C_0, & x=0\end{cases} \tag{4.1}$$

このように，1 点で異なるコインをもつ量子ウォークを one-defect model という．さらに，スペクトル写像定理を使うために，Φ，$\Omega\in\mathbb{C}^{2d}$ があって，

$$C_1=2|\Phi\rangle\langle\Phi|-1,\quad C_0=2|\Omega\rangle\langle\Omega|-1$$

と表せると仮定する．以上の設定の下で，

$$U=SC \tag{4.2}$$

と定義すると，(S.1) と (S.2) が満たされ，Theorem 2.1 が適用できる．この場合の判別子 T は，離散シュレーディンガー型の作用素になる．実際，T は $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ 上の作用素で

$$T=T_0+W$$

と表せる．ここで，

$$T_0=\sum_{j=1}^d\left(\alpha_j(q)L_j+\bar{\alpha}_j(q)L_j^*\right)+a(p),\quad W=\beta_0\delta_0+\sum_{j=1}^d\left\{\beta_j^+\delta_{e_j}+\beta_j^-\delta_{-e_j}\right\}$$

で，L_j は $\ell^2(\mathbb{Z})$ 上のシフト $(L_j\psi)(x)=\psi(x+e_j)$ である．また，

$$\alpha_j(q)=q_j\langle\Phi_j,\sigma_+\Phi_j\rangle_{\mathbb{C}^2}\in\mathbb{C},\quad a(p)=\sum_{j=1}^d p_j\langle\Phi_j,\sigma_3\Phi_j\rangle_{\mathbb{C}^2}\in\mathbb{R}$$

で，β_0，$\beta_j^\pm\in\mathbb{R}$ は，p_j，q_j と Φ，Ω から定まる．詳しくは，[3] を参照されたい．W は有限階作用素なので，T の真性スペクトルは T_0 のそれと一致する．また，T_0 のスペクトルは，離散フーリエ変換で簡単に計算できて，

$$\sigma_{\mathrm{ess}}(T)=\sigma_{\mathrm{ess}}(T_0)=[a(p)-\lambda(q),a(p)+\lambda(q)]$$

となる．ここで，$\lambda(q)=2\sum_{j=1}|\alpha_j(q)|$ である．

Lemma 4.1. (1) $\lambda(q)=0$ のとき，$\sigma_{\mathrm{ac}}(T)=\emptyset$.

(2) $\lambda(q)\neq 0$ のとき，$\sigma_{\mathrm{ac}}(T)=[a(p)-\lambda(q),a(p)+\lambda(q)]$.

証明. $\lambda(q)=0$ のとき，上の議論より，$\sigma_{\mathrm{ess}}(T)=\{a(p)\}$ となる．よって，T は固有値のみをもつので，(1) が示される．

$\lambda(q)\neq 0$ のとき，直接計算と仮定より，$\sigma_{\mathrm{ac}}(T_0)=[a(p)-\lambda(q),a(p)+\lambda(q)]$ となる．Kato-Roseblum の定理より，T の絶対連続部分と T_0 がユニタリ同値になるので，$\sigma_{\mathrm{ac}}(T_0)=\sigma_{\mathrm{ac}}(T_0)$．よって，(2) が得られる． □

Lemma 4.1 と Theorem 2.1 より，次の定理を得る．

Theorem 4.1. (1) $\lambda(q)=0$ のとき，$\sigma_{\mathrm{ac}}(U)=\emptyset$.
(2) $\lambda(q)\neq 0$ のとき，$\sigma_{\mathrm{ac}}(U)=\{e^{\pm i\arccos\tau}\mid \tau\in[a(p)-\lambda(q),a(p)+\lambda(q)]\}$.

U の固有値問題は，T に Feshbach 変換 [2, 1] を施すことで，作用素

$$F(\lambda)=\Pi^{\perp}\left(T_0-\lambda-\frac{1}{a(p)-\lambda}|\varphi_q\rangle\langle\varphi_q|\right)\Pi^{\perp}$$

の核 $\ker F(\lambda)$ の非自明性の問題に帰着できる．ここで，$\varphi_q\in\ell^2(\mathbb{Z})$ で Π は $\mathrm{supp}\psi=\{0\}$ なる $\psi\in\ell^2(\mathbb{Z})$ 全体のなす部分空間への射影である．詳しくは，[3] を参照されたい．

Acknowledgements 本研究は JSPS 科研費 26800054 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] V. Bach, J. Fröhlich, I. M. Sigal, Renormalization group analysis of spectral problems in quantum eld theory, *Adv. Math.* **137**, 205–298, 1998.

[2] H. Feshbach, Unied theory of nuclear reactions, *Ann. Phys.* **5**, 357–390, 1958.

[3] T. Fuda, D. Funakawa, A. Suzuki, Localization of a multi-dimensional quantum walk with one defect *Quantum Inf. Process.* **16**, 203, 2017.

[4] Yu. Higuchi, N. Konno, I. Sato, E. Segawa, Spectral and asymptotic properties of Grover walks on crystal lattices *J. Funct. Anal.* **267**, 4197 – 4235, 2014.

[5] Yu. Higuchi, E. Segawa, The spreading behavior of quantum walks induced by drifted random walks on some magnifier graph, *Quantum Inf. Process.* **14**, 1539–1558, 2015.

[6] Yu. Higuchi, E. Segawa, Quantum walks induced by Dirichlet random walks on infinite trees, arXiv:1703.01334.

[7] Yu. Higuchi, E. Segawa, A. Suzuki, Spectral mapping theorem of an abstract quantum walk, arXiv:1506.06457.

[8] T. Kitagawa, M. S. Rudner, E. Berg, E. Demler, Exploring topological phases with quantum walks, *Phys. Rev.* **A 82**, 033429, 2010.

[9] F. Magniez, A. Nayak, J. Roland, M. Santha, Search via quantum walk, *Proc. 39th ACM Symposium on Theory of Computing*, 575–584, 2007.

[10] K. Matsue, O. Ogurisu and E. Segawa, A note on the spectral mapping theorem of quantum walk models, *Interdiscip. Inf. Sci.* **23**, 10–114, 2017.

[11] E. Segawa, Localization of quantum walks induced by recurrence properties of random walks, *J Comput Theor Nanosci.* **10**, 1583–1590, 2013.

[12] E. Segawa, A. Suzuki, Genrator of an abstract quantum walk, *Quantum Stud.: Math. Found.* **3**, 11 – 30, 2016.

[13] S. Richard, A. Suzuki, R. Tiedra de Aldecoa, Quantum walks with an anisotropic coin I: spectral theory, *Lett. Math. Phys.*, First Online: 27 September 2017.

[14] M. Szegedy, Quantum speed-up of Markov chain based algorithms, *Proc. 45th IEEE Symposium on Foundations of Coumputer Science* (2004) 32 –41.