

量子ウォーク – ダイナミクスと幾何構造

松江 要^{*†}, 小栗栖 修^{‡§}, 瀬川 悦生^{¶||}

平成 27 年 9 月 5 日

キーワード: 量子ウォーク, 単体複体, 繋がれた量子ウォーク.

1 始めに

量子ウォークは古典的ランダムウォークの量子版として提案されている [1]. 最も基本的なものは \mathbb{Z} 上の離散時間量子ウォークで, ファインマンのチェッカーボードにてその原型が観察される [2]. 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り, 量子ウォークが注目されるようになる要因の 1 つとなっている [3]. このような興味深い考察と, 量子探索アルゴリズムに応用された事を機に, 量子ウォークの量子情報理論への応用 [4, 5, 6] をはじめ, 諸科学・産業への応用が爆発的に広がっている [7, 8, 9, 10, 11].

理論的には, グラフ上の Grover ウォーク [12] が量子情報理論, スペクトルグラフ理論, 散乱理論の視点から最も考察されているものの一つとして有名である. その後, Grover ウォークの一般化として, 量子探索アルゴリズムへの応用を意識した抽象的議論として Szegedy ウォークが考案された [13]. 今日, Szegedy ウォークは巨大複雑ネットワーク上の量子 PageRank アルゴリズムへの適用が試みられている [14, 15]. グラフ上の Szegedy ウォークの本質は, ウォークを定義するユニタリ行列の固有値が 2 つに分解される事にある. 一つは, グラフ上のランダムウォークの情報から遺伝する固有値の族であり, もう一つは量子ウォークに特有の, 一般に多重度を持つ固有値の族である. 特に, 後者はグラフのサイクル構造を反映するものであり, 長時間極限下でも正の確率が 1 点に集中する **局在化**を引き起こす. これは, 結晶格子上的 Grover ウォークにおいて数学的に議論されている [16].

本稿は, 量子ウォークの幾何学的性質, 特に量子ウォークのダイナミクスが底空間の幾何をどの程度反映するかを考察するものである. 従来の量子ウォークは, 全てグラフ上で議論されている. グラフ上の量子ウォークは, 辺の上を走る 1 次元の波の透過と反射を記述する. もし同様の議論を単体複体など高次元の幾何学的対象の上で行えるならば, 高次元の波の透過と反射を記述するモデルが出来上がるだろう. またそのダイナミクスは, グラフ上では現れなかった量子ウォークの幾何学的側面を反映すると期待される. 本稿で議論する単体的量子ウォークはその第 1 歩である. 単体的量子ウォークは, Szegedy ウォークのアナロジーとして構成される. そのダイナミクスは, 上で述べた局在化と単体複体の位相構造を対応づけ, グラフ上では見られなかったより強い局在化, 単体複体の向きの有無の影響, 繋がれている量子ウォークの存在など, 様々な現象を生み, 新たな問題を提起する.

なお, 本稿は著者らによる論文 [17] の概要を述べたものである. 特に数値計算のための実装法は, こちらを参照されたい.

*統計数理研究所 統計思考院

†kmatsue@ism.ac.jp

‡Division of Mathematical and Physical Sciences, 金沢大学

§ogurisu@staff.kanazawa-u.ac.jp

¶東北大学大学院情報科学研究科

||e-segawa@m.tohoku.ac.jp

2 単体的量子ウォーク

2.1 Szegedy ウォーク：クイックレビュー

本稿で議論の中心となる単体的量子ウォークは、グラフ上の Grover ウォーク, Szegedy ウォークの拡張版として提案されるものである。まず本節にて Grover ウォーク, Szegedy ウォークを簡単におさらいする [16]。単体的量子ウォークの考察の際、比較対象として格子上の Szegedy ウォークが出てくるので、そちらも参考にされたい。端的に言えば、量子ウォークはグラフなどの幾何学的対象に適切な関数空間を設定し、波の反射と透過を表す関数空間上のユニタリ作用素の時間発展を考える概念である。

G を単純連結グラフとする。 $E(G)$ を辺の集合, $V(G)$ を頂点の集合とする。 $e \in E(G)$ に対して、 $o(e)$ を e の始点, $t(e)$ を e の終点とする。また、 \bar{e} を e の逆向きの辺とし、 $D(G)$ をこのように有向化した G 内の辺の集合とする。さて、 G 上の量子ウォークを定義するために、適切な関数空間を設定する。まず、 \mathbb{C} -線型空間 $\ell^2(D(G))$ を以下で定義する：

$$\ell^2(D(G)) := \{f : D(G) \rightarrow \mathbb{C} \mid \|f\|_{D(G)} < \infty\}.$$

ここで、 $\ell^2(D(G))$ 上の内積として標準的内積を入れる。すなわち、 $\langle f, g \rangle_{D(G)} := \sum_{\sigma \in D(G)} \overline{f(\sigma)} g(\sigma)$ 。 $\|\cdot\|_{D(G)}$ を付随するノルムとする： $\|f\|_{D(G)} := \langle f, f \rangle_{D(G)}^{1/2}$ 。ここで、特性関数

$$\delta_e(e') := \begin{cases} 1 & \text{if } e' = e \\ 0 & \text{if } e' \neq e \end{cases}$$

を導入し、 $\ell^2(D(G))$ の標準基底とする。この時、内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{D(G)}$ を入れた \mathbb{C} -線型空間 $\ell^2(D(G))$ はヒルベルト空間となる。同様の手続きで、頂点集合 $V(G)$ 上のヒルベルト空間 $\ell^2(V(G))$ も定義する。つぎに、 G 上のウエイトを複素数値関数 $w : D(G) \rightarrow \mathbb{C}$ で、

$$w(e) \neq 0, \forall e \in D(G), \quad \sum_{e: o(e)=u} |w(e)|^2 = 1, \forall u \in V(G)$$

なるものとする。これを用いて、 $d_A : \ell^2(D(G)) \rightarrow \ell^2(V(G))$ とその随伴 $d_A^* : \ell^2(V(G)) \rightarrow \ell^2(D(G))$ を以下で定義する： $\phi \in \ell^2(D(G)), f \in \ell^2(V(G))$ に対して、

$$(d_A \phi)(v) := \sum_{e: o(e)=v} \overline{w(e)} \phi(e), \quad (d_A^* f)(e) := w(e) f(o(e)).$$

この定義により、 $\langle \phi, d_A^* f \rangle_{D(G)} = \langle d_A \phi, f \rangle_{V(G)}$ が成立する。また、 $d_A(\ell^2(D(G))) = \ell^2(V(G))$ が成立する事が知られている [16]。これで、Szegedy ウォークを定義する準備ができた。

定義 2.1 (Szegedy ウォーク). ウエイト w を持つ G 上の Szegedy ウォークは以下で構成される：

1. 全空間 $H = \ell^2(D(G))$.
2. 時間発展を定めるユニタリ作用素 $U^{(w)} := SC^{(w)}$. ここに、 $C^{(w)} := 2d_A^* d_A - I$ はコイン作用素と呼ばれ、 $(Sf)(e) := f(\bar{e})$ はシフト作用素と呼ばれる。
3. 発見確率. $\Psi_n \in \ell^2(D(G))$ を $\Psi_n = U^{(w)} \Psi_{n-1}$, $\Psi_0 \in \ell^2(D(G))$, $\|\Psi_0\|_{D(G)} = 1$ により帰納的に定義する。そして、時刻 n , 頂点 u における発見確率を $\mu_n(u) := \sum_{e: o(e)=u} \|\Phi_n(e)\|_{D(G)}^2$ で定義する。

特に、ウエイトを $w(e) = 1/\sqrt{\deg(o(e))}$ ($e \in D(G)$) としたものを G 上の Grover ウォークと呼ぶ。

2.2 単体的量子ウォークの構成

本節では、新たに単体複体の上で量子ウォーク：単体的量子ウォークの構成を試みる。以下の構成法により、単体的量子ウォークが2.1節の Szegedy ウォークの自然な一般化である事がわかるだろう。 \mathcal{K} を n 次元単体複体、 $K_k = K_k(\mathcal{K})$ を \mathcal{K} に属する全ての k 単体の集まりとする。本稿を通して、以下のクラスの単体複体のみを考える。

定義 2.2. n 次元単体複体 $\mathcal{K} = \{K_k\}_{k=0}^n$ は、次を満たす時許容的であると定義する：

- \mathcal{K} は強連結。
- 各 $k = 0, \dots, n-1$ に対して、全ての $|\tau| \in K_k$ はある $|\sigma| \in K_{k+1}$ の面となっている。このような $(k+1)$ -単体 $|\sigma|$ が一意である事は仮定しない。さらに、ある正の数 M で、各 $k = 0, \dots, n-1$ と任意の $|\tau| \in K_k$ に対して、以下を満たす物が存在する：

$$\#\{|\sigma| \in K_{k+1} \mid |\sigma| \text{ は } |\tau| \text{ を面に持つ}\} \leq M < \infty$$

さて、本稿では次の意味での K_k に付随する“有向” k 単体の集まり \tilde{K}_k ($k = 0, \dots, n-1$) を考える。これは、我々の量子ウォークの定義の中核を成すものである：

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

ここに、 \mathcal{S}_{k+1} は $(k+1)$ 次元置換群である。例えば、2-単体 $|abc| \in K_2$ は \tilde{K}_2 内の6つの相異なる元： $|abc|, |bca|, |cab|, |acb|, |cba|, |bac|$ を生成する。この記号により、 $|abc|$ と $|bca|, |acb|$ 等を常に区別する。他方、 $|abc|$ は $|bca|, |bac|$ 等と同一視する。これは有向単体の台 (support) と解釈する事もできる。

ここから、単体複体 \mathcal{K} 上の量子ウォークを定義する。まず、 \mathbb{C} -線型空間 $\ell^2(\tilde{K}_k)$ を以下で定義する：

$$\ell^2(\tilde{K}_k) := \left\{ f : \tilde{K}_k \rightarrow \mathbb{C} \mid \|f\|_{\tilde{K}_k} < \infty \right\}.$$

ここで、 $\ell^2(\tilde{K}_k)$ 上の内積として標準的内積を入れる。すなわち、

$$\langle f, g \rangle_{\tilde{K}_k} := \sum_{\sigma \in \tilde{K}_k} \overline{f(\sigma)} g(\sigma).$$

$\|\cdot\|_{\tilde{K}_k}$ を付随するノルムとする。すなわち、 $\|f\|_{\tilde{K}_k} := \langle f, f \rangle_{\tilde{K}_k}^{1/2}$ とする。ここで、特性関数

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

を導入し、 $\ell^2(\tilde{K}_k)$ の標準基底とする。この時、内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\tilde{K}_k}$ を入れた \mathbb{C} -線型空間 $\ell^2(\tilde{K}_k)$ はヒルベルト空間となる。

さて、次数 $n+1$ の置換 $\pi \in \mathcal{S}_{n+1}$ を一つ固定する。例として、

$$\pi[a_0a_1 \cdots a_{n-1}a_n] = [a_1a_2 \cdots a_na_0] \quad (2.1)$$

とする。簡単のため、特に断りのない限り本稿を通して (2.1) のみを考える。この置換に、線型空間 $\ell^2(\tilde{K}_n)$ 上の線型作用素

$$S_{\pi} \delta_{\sigma}^{(n)} := \delta_{\pi\sigma}^{(n)}, \quad \sigma \in \tilde{K}_n$$

を付随させる。

定義 2.3 (全空間). ヒルベルト空間 $(\ell^2(\tilde{K}_n), \langle \cdot, \cdot \rangle_{\tilde{K}_n})$ を, 以下で定義する \mathcal{K} 上の単体的量子ウォークの全空間と呼ぶ. ここに, $n = \dim \mathcal{K}$ である.

次に, 量子ウォークを定める全空間上の線型作用素と, その共役作用素を定義する.

定義 2.4. $i \in \{0, 1, \dots, n\}$ とし, 写像 $\tilde{d}_i^{(n)} : \tilde{K}_n \rightarrow \tilde{K}_{n-1}$ を次で定義する:

$$\tilde{d}_i^{(n)}[a_0 a_1 \cdots a_n] := [a_{i+1} a_{i+2} \cdots a_n a_0 a_1 \cdots a_{i-1}].$$

さらに, 写像 $d_i^{(n)} : \ell^2(\tilde{K}_n) \rightarrow \ell^2(\tilde{K}_{n-1})$ を次の対応の \mathbb{C} -線型拡張として定義する:

$$d_i^{(n)} \delta_\sigma^{(n)} = \overline{w(\pi^i \sigma)} \tilde{d}_i^{(n)} \delta_\sigma^{(n-1)}.$$

ここに, $w(\sigma) \in \mathbb{C}$ は $\sigma \in \tilde{K}_n$ に依存する定数で, \bar{w} は $w \in \mathbb{C}$ の複素共役である.

例として, $n = 2$, $\sigma = [abc]$ を考える. このとき,

$$\tilde{d}_0^{(2)}([abc]) = [bc], \quad \tilde{d}_1^{(2)}([abc]) = [ca], \quad \tilde{d}_2^{(2)}([abc]) = [ab],$$

となり, よって次が成立する:

$$d_0^{(2)} \delta_{[abc]}^{(2)} = \overline{w([abc])} \delta_{[bc]}^{(1)}, \quad d_1^{(2)} \delta_{[abc]}^{(2)} = \overline{w([bca])} \delta_{[ca]}^{(1)}, \quad d_2^{(2)} \delta_{[abc]}^{(2)} = \overline{w([cab])} \delta_{[ab]}^{(1)}.$$

また, $d_i^{(n)} = d_0^{(n)} \circ S_\pi^i$ が $i = 0, \dots, n$ が容易に示される.

定義 2.5. 線型作用素 $d_i^{(n)*} : \ell^2(\tilde{K}_{n-1}) \rightarrow \ell^2(\tilde{K}_n)$ を, 次の対応の \mathbb{C} -線型拡張として定義する:

$$d_i^{(n)*} \delta_\tau^{(n-1)} := \sum_{\sigma: \tilde{d}_i^{(n)} \sigma = \tau} w(\pi^i \sigma) \delta_\sigma^{(n)}.$$

注意 2.6. S_π のユニタリ転置 S_π^* は S_π^{-1} と一致するので, 簡単な計算により以下が従う:

$$S_\pi d_1^{(n)*} = d_0^{(n)*}, \quad S_\pi d_2^{(n)*} = d_1^{(n)*}, \quad \dots, \quad S_\pi d_n^{(n)*} = d_{n-1}^{(n)*}, \quad S_\pi d_0^{(n)*} = d_n^{(n)*}.$$

線型作用素 $d_i^{(n)*}$ は, 次の補題が成り立つ意味で $d_i^{(n)}$ の共役となっている.

補題 2.7 ([17]). d_i の定義に現れる関数 $w : \tilde{K}_n \rightarrow \mathbb{C}$ が有界であると仮定すると, 各 $i = 0, \dots, n$ に対して, 以下の等式が成り立つ:

$$\langle d_i^{(n)} \psi, \phi \rangle_{\tilde{K}_{n-1}} = \langle \psi, d_i^{(n)*} \phi \rangle_{\tilde{K}_n}, \quad \forall \psi \in \ell^2(\tilde{K}_n), \phi \in \ell^2(\tilde{K}_{n-1}).$$

定義 2.8. 関数 $w : \tilde{K}_n \rightarrow \mathbb{C}$ は, 次を満たすとき \mathcal{K} 上のウエイトと呼ぶ: 全ての $\sigma \in \tilde{K}_n$ に対して $w(\sigma) \neq 0$, かつ

$$\sum_{\sigma \in \tilde{K}_n: \tilde{d}_i^{(n)} \sigma = \tau} |w(\pi^i \sigma)|^2 = 1$$

が全ての $\tau \in \tilde{K}_{n-1}$ に対して成立する. $i = 0, 1, \dots, n$ は任意.

定義により, 許容的単体複体 \mathcal{K} 上のウエイト w は補題 2.7 の仮定を満たす. ウエイトを導入する事により, 以下の命題が従い, 量子ウォークの構成が可能となる.

命題 2.9 ([17]). \mathcal{K} を許容的 n 次元単体複体で, ウエイト w を有すると仮定する. このとき, 各 $i = 0, \dots, n$ に対して, 線型作用素 $C_i := 2d_i^{(n)*} d_i^{(n)} - I$ は $\ell^2(\tilde{K}_n)$ 上のユニタリ作用素となる.

定義 2.10 (単体的量子ウォーク). \mathcal{K} を n 次元単体複体で, ウェイト w を有するものとする. このとき, 命題 2.9 で定まるユニタリ作用素 C_i を \mathcal{K} 上 (局所) **量子コイン** と呼び, ユニタリ作用素 S_π を置換 $\pi \in \mathcal{S}_{n+1}$ に付随する **シフト作用素** と呼ぶ. $\|f\|_{\tilde{K}_n} = 1$ を満たす元 $f \in \ell^2(\tilde{K}_n)$ を (\mathcal{K} 上の) **状態** と呼ぶ. ユニタリ作用素 $U := S_\pi C_0$ と状態 $f \in \ell^2(\tilde{K}_n)$ に対して, 初期状態 f に関する時刻 m , 位置 $|\sigma| \in K_n$ における (量子ウォークの) **発見確率** を以下で定義する:

$$\mu_m^{(f)}(|\sigma|) := \sum_{\tau:|\tau|=|\sigma|} \|U^m f(\tau)\|_{\tilde{K}_n}^2.$$

最後に, 三つ組 $(U, \ell^2(\tilde{K}_n), \{\mu_m\}_{m \geq 0})$, あるいは単に U を, \mathcal{K} 上の **単体的量子ウォーク**, あるいは簡単に **S-量子ウォーク** と呼ぶ.

この定義が “量子ウォーク” として自然な振る舞いをする事を, 簡単な例で確認する. $n = 2$ とする. S-量子ウォーク U は, ある 2-単体 $|\sigma|$ 上の状態を, 同一の単体上を回転する状態と, $|\sigma|$ と隣り合う単体上へ透過する状態の線型結合へ移す. 得られる状態は, 2次元波の **反射** (前者) と **透過** (後者) の重ね合わせと考えられる. この様子を図示しているのが図 1 である. これは, グラフ上の量子ウォーク (図 2) の自然な一般化である.

ここで, $\sum_{|\sigma| \in K_n} \mu_m^{(f)}(|\sigma|) = 1$ は, 任意の状態 f と時刻 m で成立する. これは, $\|f\|_{\tilde{K}_n} = 1$ かつ U がユニタリである事から従う.

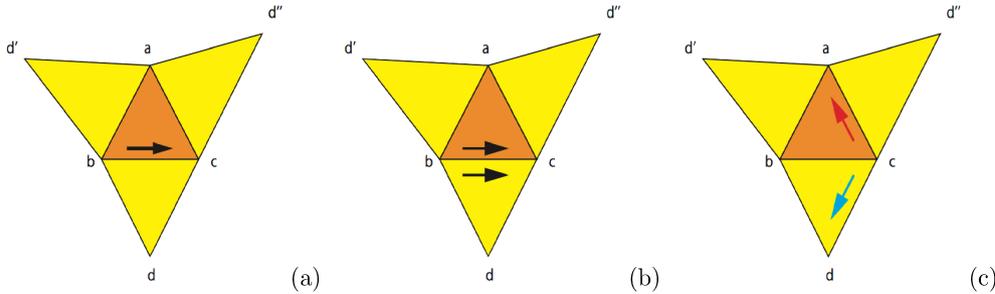


図 1: S-量子ウォーク U .

(a). 初期状態 $\delta_{[abc]}^{(2)}$.

(b). 量子コイン C_0 . この図は, 状態 $C_0 \delta_{[abc]}^{(2)} = (2|w([abc])|^2 - 1)\delta_{[abc]}^{(2)} + 2\overline{w([abc])}w([dbc])\delta_{[abc]}^{(2)}$ を表す.

(c). S-量子ウォーク $U = S_\pi C_0$.

この図は, 状態 $U \delta_{[abc]}^{(2)} = (2|w([abc])|^2 - 1)\delta_{[bca]}^{(2)} + 2\overline{w([abc])}w([dbc])\delta_{[bcd]}^{(2)}$ を表す. 2-単体 $|\sigma| = [abc]$ 上の状態で, 赤い矢印で表されるものは $|\sigma|$ 上の初期状態の “反射” を表す. 同様に, 青い矢印で表される単体 $[bcd]$ 上の状態は, $|\sigma|$ から $[bcd]$ への状態の “透過” を表す.

注意 2.11. $(n-1)$ 単体 $\tau \in K_{n-1}$ を面に持つ n -単体 σ がただ一つだけ定まり, $\tilde{d}_i \sigma = \tau$ が成り立つときでも, $C_i \delta_\sigma^{(n)} = \delta_\sigma^{(n)}$ という定義は意味を持つ. この場合は, S-量子ウォーク U は $|\sigma|$ において波の透過を起こさず, 反射のみを引き起こすと考える事ができる.

注意 2.12. $n = 1$ の時, \mathcal{K} 上の S-量子ウォークは, Szegedy ウォークに他ならない. さらに, 任意の辺 $e \in \tilde{K}_1$ に対して $w(e) = 1/\sqrt{\deg(\tilde{d}_1^{(1)}e)}$ を仮定すると, 対応する \mathcal{K} 上の S-量子ウォークは, グラフ \mathcal{K} 上の Grover ウォークに他ならない.



図 2: グラフ上の量子ウォーク

(a). 辺上の 1 次元量子ウォークの初期状態.

(b). グラフ上量子ウォークの振る舞い. (a) における初期状態は, 反射 (赤い矢印) と透過 (青い矢印) を通して次の時刻における状態へ移る. 図 1 における \mathcal{K} 上 S-量子ウォークは, この振る舞いの高次元化とみなせる.

2.3 量子ウォークの定義再考: 繋がれている量子ウォーク

ここで, 単体的量子ウォークの構成法に戻る. S-量子ウォークの定義では, 位数が $n+1$ 未満の置換 $\pi \in \mathcal{S}_{n+1}$ をとり, 構成する事も可能である. しかし, この場合は以下の意味で量子ウォークが自明なものになりうる.

例 2.13. $n = 2$ とし, \mathcal{K} を図 1 で与えられる単体複体とする. また, 置換 $\pi' \in \mathcal{S}_3$ を $\pi'[abc] = [acb]$ とする. 置換 π' は, あるウエイト w の存在のもとで, \mathcal{K} 上の S-量子ウォーク U' を定める. ここで, U' による状態 $\delta_{[abc]}^{(2)}$ の時間発展を考える. 簡単な計算により, $\delta_{[abc]}$ は任意のウエイトに対して $|abd'|$ と $|abd''|$ 上の状態へ透過しない事がわかる. 言い換えれば, 状態は $|abc|$ と $|dbc|$ 上にしか透過せず, 量子ウォークとしての動き (全体への透過) を観察できない.

この例は次の問題を与える: **どの置換 $\pi \in \mathcal{S}_{n+1}$ が, 非自明な振る舞いをする S-量子ウォークを定めるか?** これを数学的に議論するため, 以下の定義を与える.

定義 2.14 (繋がれている量子ウォーク). $\sigma = [a_0 a_1 \cdots a_n] \in \tilde{K}_n$ に対して, 付随する頂点集合を $\{\sigma\} := \{a_0, a_1, \dots, a_n\}$ とする. ここで, 置換 $\pi \in \mathcal{S}_{n+1}$ は以下を満たすとき \mathcal{K} 上で**繋がれている (S-) 量子ウォークを誘導する**と定義する: \mathcal{K} 上の任意のウエイトと付随する量子ウォーク $U = S_\pi C_0$ に対して, 頂点 $a_j \in \{\sigma\}$ で, 任意の $m \in \mathbb{N}$ に対して以下が同値となるものが存在する:

1. $\tau \in \tilde{K}_n$ は $\langle \delta_\tau^{(n)}, U^m \delta_\sigma^{(n)} \rangle_{\tilde{K}_n} \neq 0$ を満たす.
2. $a_j \in \{\tau\}$.

逆に, $\pi \in \mathcal{S}_{n+1}$ が繋がれている量子ウォークを誘導しない時, π は**動ける S-量子ウォークを誘導する**と定義する.

例 2.13 における置換 $\pi' : [abc] \mapsto [acb]$ は, 繋がれている S-量子ウォークを定める. 例 2.13 においては, 定義 2.14 での頂点 a_j は $\{b\}, \{c\}$ に対応する. 量子ウォーク $U_{\pi'}$ は, 時間発展に対して初期地点から離れる事ができず, 常に“繋がれている”. このため, 次節では (2.1) で与えられる置換 $\pi \in \mathcal{S}_3$ を考える. U_π の定義により, この置換 π は常に動ける量子ウォークを誘導すると期待される. 次節の数値シミュレーション結果を見る限り, それは正しそうである. より一般に, 量子ウォークの構成に関して, “動ける量子ウォークを誘導する置換のクラス”を決定する問題が生じる.

他方, 動ける量子ウォークが常に非自明な振る舞いをするとも限らない. 特に, 量子ウォークが透過と反射の両方を発現するかは非自明な問題である. これは, 量子ウォークの別の分類問題である.

定義 2.15 (相互作用しない量子ウォーク). \mathcal{K} 上の単体的量子ウォーク U は以下を満たす時, **相互作用しない**という: 任意の $\sigma \in \tilde{K}_n$ と任意の $n \in \mathbb{N}$ に対して, $\langle \delta_\tau^{(n)}, U^m \delta_\sigma^{(n)} \rangle_{\tilde{K}_n} \neq 0$ を満たす元 $\tau \in \tilde{K}_n$ が一意に存在する.

逆に, U が相互作用しない量子ウォークとならない時, U は**相互作用する**という.

一般に、量子ウォークの相互作用性はその構成法に依存する。これは、Meyer の No-go lemma にて示唆されている [18]。この問題は、与えられた単体複体上の量子ウォークの構成についても非自明な問題となる。S-量子ウォークの場合、相互作用の有無はウエイトが決める。本稿では、反射を起こさず透過のみを起こす例が2つ出てくる (図 4-(a), 7-(a))。次節での数値シミュレーションは、適切にウエイトを選ぶ事でS-量子ウォークは相互作用する事を示唆する。

繋がれている量子ウォーク、相互作用しない量子ウォークは、量子ウォークの適切な構成法に関する問題を投げかける。特に、置換 $\pi \in S_{n+1}$ と与えられた複体 \mathcal{K} 上のウエイトで、相互作用し、動ける量子ウォークを誘導するものの存在問題が生じる。例 2.13 は、動ける量子ウォークの問題が置換の選び方、すなわちシフト作用素の選び方に関連する問題である事を示唆する。次節のウエイト (3.1) を持つ \mathbb{R}^2 上の S-量子ウォークの数値シミュレーションは、相互作用しない量子ウォークがウエイトの選び方、特にコイン作用素の定義に関連する問題である事を示唆する。

3 数値計算

本節では、単体的量子ウォーク U の振る舞い方を数値的に考察する。詳しい実装方法は [17] を参照せよ。本稿では $n = 2$ の場合のみ調べる。特に、単体複体 \mathcal{K} の幾何構造と、その上の量子ウォーク U の局在化などの非自明ダイナミクスの関連を見ていく。サンプルとして、次の4つの単体複体を扱う：

3.1 節： \mathbb{R}^2 . 対応する単体複体は \mathcal{K}_0 . 数値例は図 4.

3.2 節： 無限シリンダー. 対応する単体複体は \mathcal{K}_1 . 数値例は図 7-(a), (b) と図 8-(b).

3.3 節： 四面体 (空洞あり) 付き無限シリンダー. 対応する単体複体は \mathcal{K}_2 . 数値例は図 7-(c).

3.4 節： メビウス帯. 対応する単体複体は \mathcal{K}_3 . 数値例は 8-(a).

3.1 \mathbb{R}^2 上 S-量子ウォーク・格子上量子ウォークとの比較

まず、 \mathbb{R}^2 上の S-量子ウォークを考察する。その実装方法は [17] を参照せよ。さらに、高次元空間の離散化と考えられる格子上の量子ウォーク (Grover ウォーク) との違いを比較する。

3.1.1 \mathbb{R}^2 上 S-量子ウォーク

\mathcal{K}_0 を適切に有限近似した \mathbb{R}^2 の三角形分割とし、三角形 $|abc| \in K_2$ を \mathcal{K}_0 の中心におく。初期状態を $\Psi_0 = \sum_{i=0}^2 \varphi_{\pi^i[abc]} \delta_{\pi^i[abc]}^{(2)} + \sum_{i=0}^2 \varphi_{\pi^i[acb]} \delta_{\pi^i[acb]}^{(2)} \in \ell^2(\tilde{K}_2)$ とする。ここに、

$$\varphi_{\pi^i[abc]} = \varphi_{\pi^i[acb]} = 1/\sqrt{6}, \quad i = 0, 1, 2.$$

まず、ウエイトを以下のように置く：

$$w(\sigma) \equiv 1/\sqrt{2}, \quad \forall \sigma \in \tilde{K}_2, \quad (3.1)$$

この時のダイナミクスが、図 4-(a) に示されている。次に、ウエイトを以下のように取り替える：

$$\begin{aligned} w(\sigma_1) &\equiv \sqrt{1/3}, & |\sigma_1| \text{ が下三角形になる全ての } \sigma_1 \in \tilde{K}_2 \text{ に対して,} \\ w(\sigma_2) &\equiv \sqrt{2/3}, & |\sigma_2| \text{ が上三角形になる全ての } \sigma_2 \in \tilde{K}_2 \text{ に対して.} \end{aligned} \quad (3.2)$$

計算結果は図 4(b) に示されている。加えて、次のウエイトも考える：

$$\begin{aligned} w(\sigma_1) &\equiv \sqrt{1/10}, \quad |\sigma_1| \text{ が下三角形になる全ての } \sigma_1 \in \tilde{K}_2 \text{ に対して,} \\ w(\sigma_2) &\equiv \sqrt{9/10}, \quad |\sigma_2| \text{ が上三角形になる全ての } \sigma_2 \in \tilde{K}_2 \text{ に対して.} \end{aligned} \quad (3.3)$$

この時の計算結果は図 4(c) に示されている。

いずれの場合も、状態は六芒星を描きながら散乱する。図 4(a) により、ウエイト (3.1) に対する \mathcal{K}_0 上 S-量子ウォークは相互作用しない事が示唆される (定義からも伺える)。これらの図は、一様ウエイトを持つ S-量子ウォークが弾道的広がりを発現する事を示唆する。これは、 \mathbb{Z} 上の Grover ウォークと類似した振る舞いである。ウエイト (3.1) が相互作用しない量子ウォークであるのと対照的に、(3.2) や (3.3) などの適切なウエイトの選び方により、相互作用する S-量子ウォークも構成する事ができる。これらの図から、 $w(\sigma_1)$ と $w(\sigma_2)$ (の絶対値) の値の差が大きければ大きいほど、同じステップ数に対する六芒星の大きさが小さくなる事が伺える。

3.1.2 三角格子上量子ウォークとの比較

本パートでは、 \mathbb{R}^2 上の量子ウォークの振る舞いと、三角格子上の Grover ウォークの振る舞いを比較する。格子上の量子ウォーク、特に Grover ウォークについては、数值的にだけでなく [19], 数学的にも解析されている [16]。格子と \mathcal{K}_0 のような単体複体は、ともにユークリッド空間の“離散化”と考えられる。ここでの関心は、空間の離散化の違いが量子ウォークの振る舞いへ与える影響であり、量子ウォークの一つの幾何学的側面を抽出する考察である。

ここでの考察を判定するための概念は、量子ウォークにおいて本質的な性質である局在化と線型的広がりである。これらは、格子上の量子ウォークで典型的に見られる現象である。

注意 3.1. 格子 L 上における量子ウォークの局在化と線型的広がりをおさらいする。

1. 格子 L 上の量子ウォークは次を満たすとき局在化を起こすという：ある点 $\mathbf{x} \in L$ が存在して、次を満たす：

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \mu_n(\mathbf{x}) > 0.$$

ここに、 $\mu_n(\mathbf{x})$ は時刻 n における L 上の量子ウォーク Ψ_n の、地点 $\mathbf{x} \in L$ における発見確率である。定義 2.1 を参照せよ。

2. 格子 L 上の量子ウォークは次を満たすとき線型的広がりを示すという：

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{V_n}{n^2} \in (0, \infty). \quad (3.4)$$

ここに、 V_n は時刻 n における量子ウォーク Ψ_n の動径分散であり、次式で与えられる：

$$V_n := \left\{ \sum_{\mathbf{x} \in L} \|\mathbf{x}\|^2 \mu_n(\mathbf{x})^2 - \left(\sum_{\mathbf{x} \in L} \|\mathbf{x}\| \mu_n(\mathbf{x}) \right)^2 \right\}. \quad (3.5)$$

$\|\mathbf{x}\|$ は \mathbf{x} のユークリッドノルムである。

(3.4) は確率変数 Ψ_n/n の弱収束に対応している。分母 n が広がりの線型性を表しており、古典的ランダムウォークとの違いを表している (ランダムウォークの収束は \sqrt{n} のオーダー)。

[16] において、三角格子上の Grover ウォークは局在化と線型的広がりの両方を発現する事が示されている。局在化については、図 6 に数値例を示しているので参照されたい。対して、数値シミュレーション (図 4) によると、単体複体 \mathcal{K}_0 上の S-量子ウォークは局在化を起こさない。これは三角格子、

\mathcal{K}_0 上の量子ウォークの間の決定的な違いである。この現象の違いは、格子上の量子ウォークで知られているトポロジカルな側面から示唆される。[16] では、有限グラフ G が (ホモロジーの意味で) サイクルを持つとき、局在化を引き起こす事が示されている。より正確には、グラフ G のサイクルから、 G 上の量子ウォークの表現行列 U の固有対で、局在化に対応するものが構成できる。言い換えれば、 G の非自明 1 次ホモロジー類は、 G 上の量子ウォークの局在化を誘導する。この視点のもとで、単体複体 \mathcal{K}_0 を考える。 \mathcal{K}_0 はリングや空洞のような位相的サイクルを一切持たない。この事から、 \mathcal{K}_0 上の S-量子ウォークは局在化を引き起こさない事が示唆される。より一般に、単体複体のトポロジーが、その上の量子ウォークの振る舞いに多大な影響を及ぼす事が想定される。この想定は、次節以降でも確認できる。

次に、 \mathcal{K}_0 上の量子ウォークの広がりレートを調べる。そのために、格子上の量子ウォークと同様、動径分散を次式で定義する。これは (3.5) に対応するものである：

$$V_n = V_n^{(f)} := \left\{ \sum_{|\sigma| \in \mathcal{K}_2} \sum_{\mathbf{x}=(x,y) \in |\sigma|} \|\mathbf{x}\|^2 \mu_n^{(f)}(|\sigma|)^2 - \left(\sum_{|\sigma| \in \mathcal{K}_2} \sum_{\mathbf{x}=(x,y) \in |\sigma|} \|\mathbf{x}\| \mu_n^{(f)}(|\sigma|) \right)^2 \right\}. \quad (3.6)$$

ここに f は量子ウォークの初期状態であるが、簡単のため、特に断らない限り “(f)” は省略する。実際の数値計算は、各単体上の状態の密度と発見確率 μ_n がある 1 点 (例えば単体の頂点) に集中していると仮定して行っている。 \mathcal{K}_0 上の S-量子ウォークに対して、 V_n/n^2 を計算したものが図 5-(a) である。 V_n/n^2 の値はある値に漸近している事が観察される。これは \mathcal{K}_0 上の S-量子ウォークが線型的広がりを持つ事を示唆しており、S-量子ウォークが格子上における従来の量子ウォークと同様の性質を有する事を示している。

3.2 無限シリンダー上 S-量子ウォーク

次に、無限シリンダー $S^1 \times \mathbb{R}$ 上の S-量子ウォークを考える。まず、(無限) シリンダーは非自明な 1 次ホモロジー類を有する事に注意する。前節の考察でも述べた通り、グラフ上の Grover ウォーク (より一般に、Szegedy ウォーク) は、グラフが非自明なサイクルを持つ時、局在化を起こす事が知られている [16]。この事実が単体複体上の S-量子ウォークでも観察されるかを考察するのが、本節の目的である。数値的考察のため、 \mathbb{R}^2 の場合と同様、まずは無限シリンダーに対応する (有限) 単体複体 \mathcal{K}_1 を構成する。詳細は [17] を参照せよ。

さて、 $[abc]$ を \mathcal{K}_1 の中心に位置する 2-単体とし、初期状態を $\Psi_0 = \sum_{i=0}^2 \varphi_{\pi^i[abc]} \delta_{\pi^i[abc]}^{(2)} + \sum_{i=0}^2 \varphi_{\pi^i[acb]} \delta_{\pi^i[acb]}^{(2)} \in \ell^2(\tilde{\mathcal{K}}_2)$ とする。ここに、

$$\varphi_{\pi^i[abc]} = \varphi_{\pi^i[acb]} = 1/\sqrt{6}, \quad i = 0, 1, 2 \quad (3.7)$$

である。まず、一様ウエイト $w(\sigma) \equiv 1/\sqrt{2}$ に対する S-量子ウォークを計算した結果を図 7-(a) に示している。次に、ウエイトを (3.2) のように取り替える。すなわち、

$$\begin{aligned} w(\sigma_1) &\equiv \sqrt{1/3}, & |\sigma_1| \text{ が下三角形になる全ての } \sigma_1 \in \tilde{\mathcal{K}}_2 \text{ に対して,} \\ w(\sigma_2) &\equiv \sqrt{2/3}, & |\sigma_2| \text{ が上三角形になる全ての } \sigma_2 \in \tilde{\mathcal{K}}_2 \text{ に対して.} \end{aligned}$$

この場合の計算結果を図 7-(b) に示している。

動画にしないと確認しづらいが、どちらの場合も、初期状態の台 $[abc]$ を含む中心円にて、正の確率密度が局在している様子が観察される。これらの図から、無限シリンダー $S^1 \times \mathbb{R}$ (の単体分割 \mathcal{K}_1) 上

の S-量子ウォークは、局在化を起こす事が示唆される。実際に局在化が起こっている事を別の視点から確認するため、初期状態 f に対する S-量子ウォークの時間平均確率を次式で定義し、計算する：

$$\bar{\mu}_T(|\sigma\rangle) \equiv \bar{\mu}_T^{(f)}(|\sigma\rangle) := \frac{1}{T} \sum_{m=0}^{T-1} \mu_m^{(f)}(|\sigma\rangle), \quad |\sigma\rangle \in K_2. \quad (3.8)$$

これは、単体 $|\sigma\rangle$ 上の全ての状態の存在確率の、時間に対する平均を取ったものである。単体 $|abc\rangle$ に対する $\bar{\mu}_T(|abc\rangle)$ の計算結果は、図 9 に示している。時間平均確率 $\bar{\mu}_T(|abc\rangle)$ は、 $T \rightarrow \infty$ の時ある正の値に漸近していく。これは、S-量子ウォークが初期状態の台 $|abc\rangle$ において局在化を起こす事を示唆している。格子における局在化の定義(注意 3.1)も参照せよ。

K_0 上の S-量子ウォークと同様にして、動径分散 V_n/n^2 の時間発展を異なるウエイトで計算したものを図 5-(c), (d) に示している。ここに、 V_n は (3.6) で与えられるものである。これらの結果から、 K_1 上の S-量子ウォークについても V_n/n^2 の値はある正の値に漸近する事が示唆される。すなわち、シリンダー上の S-量子ウォークは線型的広がりを示す。

注意 3.2. シリンダー $S^1 \times \mathbb{R}$ の場合、量子ウォークはそのダイナミクスが $S^1 \times \mathbb{R}$ のあるコンパクト部分集合上に制限されるような方向を持つ。これはシリンダーの有界リング構造、とくに非自明な 1 次ホモロジー群 $H_1(S^1 \times \mathbb{R}; \mathbb{Z}) \cong \mathbb{Z}$ を反映するものである。

3.3 空洞付き四面体を付加したシリンダー上 S-量子ウォーク

3 番目の例として、無限シリンダーの単体分割 (の有界領域への制限) K_1 に、空洞を持つ四面体を一つ付加した単体複体を考える。得られる単体複体を K_2 とする。 K_2 およびその上の S-量子ウォークは、 K_1 の場合と同様、直接的な方法で構成できる。詳細は [17] を参照せよ。単体複体 K_2 は空洞を有し、特に非自明な 2 次ホモロジー類を持つ。本節では、この 2 次ホモロジー類が S-量子ウォークに及ぼす影響を考察する。

初期状態 $\Psi_0 \in \ell^2(\tilde{K}_2)$ を (3.7) で定める。ここに、初期状態の台となる 2-単体 $|abc\rangle$ は、 K_2 内の四面体の一面をなすものとする。詳しくは図 3 を参照せよ。

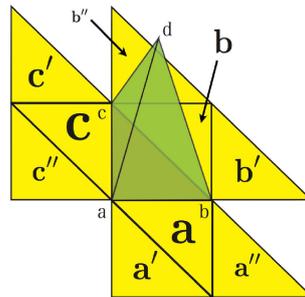


図 3: K_2 内の四面体のラベリング

単体複体 K_1 に、四面体を追加する。2-単体 $|abc\rangle$ を底面にして構成している。残りの三角形の記号は [17] にて詳細を述べている。

次に、ウエイトを以下のように定める：

$$w(\sigma) \equiv 1/\sqrt{\deg(\tilde{a}_0^{(2)}\sigma)}, \quad \text{where } \deg(\tilde{a}_0^{(2)}\sigma) := \#\{\tau \in \tilde{K}_1 : \tilde{a}_0^{(2)}\sigma = \tau, \sigma \in \tilde{K}_2\}. \quad (3.9)$$

これは、グラフ上 Grover ウォークのウエイトに対応する (定義 2.1 参照).

ウエイト (3.9) に対して, Ψ_0 を初期状態とした \mathcal{K}_2 上の S-量子ウォークの数値シミュレーション結果を図 7-(c) に示している. この例では, \mathcal{K}_1 にて示されたような中心円に沿って観察される局在化は起こらない. そのかわり, 四面体に対応する “こぶ” の上で局在化を起こす事が確認できる. 実際, 短時間の発展ではシリンダーの円の上で正の確率密度を持つ事が観察されるが, 充分時間が経った後では, これらの存在確率は四面体に吸収されてしまう.

この現象は, (3.8) で与えられる時間平均確率 $\bar{\mu}_T$ でも確認できる. 四面体の面をなしている単体 $|abc\rangle$ から発展する量子ウォークの時間平均確率は, $T \rightarrow \infty$ のときある正の値に収束する. 他方で, シリンダーの中心円にあり, 四面体の面でない別の単体において時間平均確率を計算すると, 0 に漸近する. 前節での考察で示されている通り, \mathcal{K}_1 上の S-量子ウォークの場合は, 対応する単体における時間平均確率は正の値に漸近する事に注意されたい. 図 9 におけるグラフ “tetra-off” と “cylinder-transmit-adjacent” も参照せよ.

これらの考察から, 高次のホモロジー類は, 低次ホモロジー類の代表サイクルの上を走る状態を吸収する事が示唆される. 言い換えれば, **高次ホモロジー類はより強い局在化を引き起こし得る**. これは, 従来の量子ウォークでは観察されなかった現象である.

3.4 メビウス帯上 S-量子ウォーク

最後の例では, メビウス帯上の S-量子ウォークを考察する. これまでの単体複体 $\mathcal{K}_0, \mathcal{K}_1, \mathcal{K}_2$ と同様の方法で, メビウス帯の単体分割 \mathcal{K}_3 を得る事ができる. 一般に, 無限メビウス帯は無限ストリップ $[0, 1] \times \mathbb{R}$ において, $(0, t) \in [0, 1] \times \mathbb{R}$ と $(1, -t) \in [0, 1] \times \mathbb{R}$ を同一視する事で得られる. この事に注意して, メビウス帯上の S-量子ウォークも構成できる. 詳しくは [17] を参照せよ. 既存の事実として, メビウス帯は可微分多様体あるいはベクトル束の意味で向き付け不可能な図形である. しかし, 無限シリンダーと同じホモロジー類を持つ (ホモロジーの観点によるシリンダーとの区別は, シュティーフエル・ホイットニー類を導入して初めて可能となる. 詳しくは [20] を参照せよ). 本節では, 単体複体の向き付け可能性が量子ウォークに及ぼす影響を考察する.

\mathcal{K}_3 の中心に位置する単体 $|abc\rangle$ 上に初期状態 $\Psi_0 = \sum_{i=0}^2 \varphi_{\pi^i[abc]} \delta_{\pi^i[abc]}^{(2)} + \sum_{i=0}^2 \varphi_{\pi^i[acb]} \delta_{\pi^i[acb]}^{(2)} \in \ell^2(\tilde{\mathcal{K}}_2)$ を設定する. ただし, $\varphi_{\pi^i[abc]} = \varphi_{\pi^i[acb]} = 1/\sqrt{6}$, $i = 0, 1, 2$ とする. ウエイト $w(\sigma)$ は, 比較をしやすくするために以下のように設定する:

$$\begin{aligned} w(\sigma_1) &\equiv \sqrt{0.9/2}, & |\sigma_1| &\text{が下三角形になる全ての } \sigma_1 \in \tilde{\mathcal{K}}_2 \text{ に対して,} \\ w(\sigma_2) &\equiv \sqrt{1.1/2}, & |\sigma_2| &\text{が上三角形になる全ての } \sigma_2 \in \tilde{\mathcal{K}}_2 \text{ に対して.} \end{aligned} \quad (3.10)$$

このウエイトに対する \mathcal{K}_3 上の S-量子ウォークは図 8-(a) に示されている. 計算結果から, 量子ウォークはスパイラルを描きながら中心から離れていく事が観察される. 特に, \mathcal{K}_3 上の S-量子ウォークでは局在化が起こらない. 時間平均確率からもこの事は確認できる (図 9).

比較のため, 図 8 には同じウエイトを持つ \mathcal{K}_1 : 無限シリンダー上の S-量子ウォークの結果も掲載している ((b) を参照). \mathcal{K}_1 上の S-量子ウォークは y 軸方向の中心にて局在化が起こっているのに対し, \mathcal{K}_3 上の S-量子ウォークは量子ウォーカーが y 軸方向の中心からずれている事が観察できる.

格子上の量子ウォーク, また $\mathcal{K}_0, \mathcal{K}_1, \mathcal{K}_2$ 上の S-量子ウォークでは, 非自明なホモロジー類が局在化を引き起こすと考えられてきた. メビウス帯のホモロジーは無限シリンダーのホモロジーと同型であるが, 本節の考察はホモロジーよりも詳細な単体複体の幾何学的情報 (向きなど) も, 量子ウォークのダイナミクスに反映されている事を示唆している.

4 考察と展望

本稿では、格子あるいはグラフ上の量子ウォークの一般化として、単体複体上の量子ウォークを提案し、その構築と数値シミュレーションによるダイナミクスを論じた。特に、量子ウォークのダイナミクスとそれを定義する図形の間を幾何学視点から考察した。本稿での考察は、以下が示唆される：

- 従来の量子ウォークと同様、S-量子ウォークは線型的広がりと同様に局在化を発現する。局在化は単体複体 \mathcal{K} のホモロジーや幾何構造を反映する。特に、 \mathcal{K}_0 ：高次元空間の単体分割では局在化を起ささない。 $\mathcal{K}_1, \mathcal{K}_2$ ：非自明ホモロジーを有する複体上では局在化が起こる。さらに局在化にはホモロジーの次数に対応する階層性がある。しかし \mathcal{K}_3 上では局在化が起こらない事から、単体複体の向きも量子ウォークのダイナミクスに反映される。
- 初期状態に繋がれている量子ウォーク、相互作用をせず単調に透過するだけの量子ウォークも存在し、透過と反射の両方を有する量子ウォークの存在・分類は非自明な問題である。

これらの考察をもとに、以下で今後の本課題の展望を述べて結論とする。

4.1 極限分布：単体的量子ウォークの別の定義

量子ウォークの数学解析の出発点は、その極限分布を求める事である。量子ウォークにおける極限分布は、ランダムウォークの極限分布と大きく異なることが知られている (e.g. [3])。本稿において、線型的広がりや局在化など、格子上的量子ウォークで見られる現象が数値的に確認された。数値計算結果は、極限分布が格子上的量子ウォークと類似したものとなる事を期待させる。しかし、本研究で提案した単体的量子ウォークは単体間を移動するダイナミクスを扱うため、解析が非常にしづらい。例えば、格子上的量子ウォークの極限分布で用いられたフーリエ変換などの手法が適用できないなどの難点がある。よって、高次元の幾何学的対象の上に定義された量子ウォークとして、より解析しやすいものを別に考察し、その振る舞いを調べる事が考えられる。例えば、著者らは単体複体のかわりに**方体集合**の上の量子ウォークの構築も試みている [21]。方体が基本要素となるため、各辺・各面がユークリッド空間の座標軸に平行になるように集合を組み立てる事が可能となり、解析がしやすくなると期待される。

単体的量子ウォークの別の定義は、数値計算の側面からも重要である。本稿で考察した単体的量子ウォークは、一つの単体上に多くの状態を有し得る。実際、 n -単体 $|\sigma|$ 上の状態は $(n+1)!$ だけ存在する。ここには、量子ウォークの振る舞いを記述するために不必要に多くの計算をしている可能性をばらんでいる。よって、本当に必要な情報だけを抜き出して、状態数をなるべく少なくできるような単体的量子ウォークの再定義を期待するのは自然であろう。しかし、様々な構成を試みて、現時点で成功した（単体複体上の量子ウォークとして然るべきユニタリ作用素を作れた）例は、どういうわけか本稿の議論のみである。より本質のみを抽出した単体的量子ウォークの出現が待たれる。なお、単体的量子ウォークの別の構成法にも、繋がれている量子ウォーク、相互作用しない量子ウォーク (2.3 節) など、量子ウォークの構成の根幹をなす問題がつきまとう可能性がある事に注意する。

4.2 量子ウォークの量子力学的意味付け：連続極限

量子ウォークは、その名の通り量子力学にそのアイデアの根幹がある。よって、量子ウォークのダイナミクスが量子力学的意味を有すると期待するのは自然である。実際、マスレスディラック方程式やシュレディンガー方程式で記述される物理現象の近似として、量子ウォークを議論する向きもある [22, 23]。 \mathbb{Z} 上の適切な確率振幅を持つ量子ウォークに対しては、格子点間距離と時間ステップ幅を適

切にスケールリングして連続極限をとる事で、マスレスディラック方程式やシュレディンガー方程式を得る事ができる。よって、量子ウォークはこれらの方程式のある種の離散化とみなす事もできる。

この考え方を単体的量子ウォークに向けるのは自然であろう。例えば、3節で議論した K_0 上の単体的量子ウォークに何らかの意味での連続極限を施す事で、 \mathbb{R}^2 上のマスレスディラック方程式・シュレディンガー方程式を得られると期待される。これを一般化する事で、単体的量子ウォークを高次元空間における上記の方程式系の離散近似と位置づける事ができるだろう。

4.3 ラブラシアン

シュレディンガー方程式における自由ハミルトニアンが、1-パラメータユニタリ群を生成する事はよく知られている。逆に、ユニタリ群の生成作用素としてラブラシアンなどに代表される自己共役作用素が得られる(ストーンの定理)。この対応の“離散版”として、ユニタリ作用素で与えられる量子ウォークを“生成”するラブラシアンのようなものは考えられないだろうか？

[16]では、有限グラフ G 上の量子ウォーク U の固有値解析において、ランダムウォークから遺伝する固有値がある対称(よって、自己共役)作用素 T で特徴づけられる事を示している。特に、スペクトル写像定理を経由して、自己共役作用素 T は量子ウォーク U の“生成作用素”とみなせ、ラブラシアンに相当するものが構成できる。この考え方を単体的量子ウォークに適用すると、量子ウォークを経由して単体複体上の“ラブラシアン”に相当するものが構成できると期待される。ラブラシアンそのものの重要性は、ランダムウォーク、グラフの構造解析、多様体学習 [24] などにおける統計的手法等々で広く知られるところである。量子ウォークの“生成作用素”としての“ラブラシアン”の構成は、既存のラブラシアンにまつわる理論や応用を、量子ウォークの視点とその特性を生かせる形で構築するための出発点となるだろう。

Acknowledgements

松江は文部科学省委託事業「数学協働プログラム」、小栗栖はJSPS 科研費(No. 24540208)、瀬川はJSPS 科研費若手研究(B, No. 25800088)の助成を受けている。また、本研究の展望に関して、白井朋之氏(九州大学)と平尾将剛氏(愛知県立大学)に非常に有益な助言をいただいた。この場を借りて厚く御礼申し上げる。

参考文献

- [1] Stanley P. Gudder. *Quantum probability*. Probability and Mathematical Statistics. Academic Press, Inc., Boston, MA, 1988.
- [2] Richard P. Feynman and Albert R. Hibbs. *Quantum mechanics and path integrals*. Dover Publications, Inc., Mineola, NY, emended edition, 2010. Emended and with a preface by Daniel F. Styer.
- [3] Norio Konno. Quantum random walks in one dimension. *Quantum Inf. Process.*, Vol. 1, No. 5, pp. 345–354 (2003), 2002.
- [4] Andris Ambainis. Quantum walk algorithm for element distinctness. *SIAM J. Comput.*, Vol. 37, No. 1, pp. 210–239 (electronic), 2007.

- [5] Andris Ambainis, Julia Kempe and Alexander Rivosh. Coins make quantum walks faster. In *Proceedings of the Sixteenth Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms*, pp. 1099–1108 (electronic). ACM, New York, 2005.
- [6] Neil Shenvi, Julia Kempe and K Birgitta Whaley. Quantum random-walk search algorithm. *Physical Review A*, Vol. 67, No. 5, p. 052307, 2003.
- [7] Michal Karski, Leonid Förster, Jai-Min Choi, Andreas Steffen, Wolfgang Alt, Dieter Meschede and Artur Widera. Quantum walk in position space with single optically trapped atoms. *Science*, Vol. 325, No. 5937, pp. 174–177, 2009.
- [8] Leo Matsuoka and Keiichi Yokoyama. Physical implementation of quantum cellular automaton in a diatomic molecule. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, Vol. 10, No. 7, pp. 1617–1620, 2013.
- [9] F Zähringer, G Kirchmair, R Gerritsma, E Solano, R Blatt and CF Roos. Realization of a quantum walk with one and two trapped ions. *Physical review letters*, Vol. 104, No. 10, p. 100503, 2010.
- [10] Jingbo Wang and Kia Manouchehri. *Physical implementation of quantum walks*. Springer, 2013.
- [11] Scott D Berry, Paul Bourke and Jingbo B Wang. qwviz: Visualisation of quantum walks on graphs. *Computer Physics Communications*, Vol. 182, No. 10, pp. 2295–2302, 2011.
- [12] John Watrous. Quantum simulations of classical random walks and undirected graph connectivity. In *Computational Complexity, 1999. Proceedings. Fourteenth Annual IEEE Conference on*, pp. 180–187. IEEE, 1999.
- [13] Mario Szegedy. Quantum speed-up of markov chain based algorithms. In *Foundations of Computer Science, 2004. Proceedings. 45th Annual IEEE Symposium on*, pp. 32–41. IEEE, 2004.
- [14] Giuseppe Davide Paparo and MA Martin-Delgado. Google in a quantum network. *Scientific reports*, Vol. 2, , 2012.
- [15] Giuseppe Davide Paparo, Markus Müller, Francesc Comellas and Miguel Angel Martin-Delgado. Quantum google in a complex network. *Scientific reports*, Vol. 3, , 2013.
- [16] Yusuke Higuchi, Norio Konno, Iwao Sato, and Etsuo Segawa. Spectral and asymptotic properties of Grover walks on crystal lattices. *J. Funct. Anal.*, Vol. 267, No. 11, pp. 4197–4235, 2014.
- [17] Kaname Matsue, Osamu Ogurusu and Etsuo Segawa. Quantum walks on simplicial complexes. *arXiv preprint arXiv:1507.01194*, 2015.
- [18] David A. Meyer. From quantum cellular automata to quantum lattice gases. *J. Statist. Phys.*, Vol. 85, No. 5-6, pp. 551–574, 1996.
- [19] Ben Tregenna, Will Flanagan, Rik Maile and Viv Kendon. Controlling discrete quantum walks: coins and initial states. *New Journal of Physics*, Vol. 5, No. 1, p. 83, 2003.

- [20] John W. Milnor and James D. Stasheff. *Characteristic classes*. Princeton University Press, Princeton, N. J.; University of Tokyo Press, Tokyo, 1974. *Annals of Mathematics Studies*, No. 76.
- [21] Kaname Matsue, Osamu Ogurusu, and Etsuo Segawa. Quantum walks on cubical sets : Construction and asymptotic behavior on \mathbb{R}^2 , in preparation.
- [22] CM Chandrashekar, Subhashish Banerjee and R Srikanth. Relationship between quantum walks and relativistic quantum mechanics. *Physical Review A*, Vol. 81, No. 6, p. 062340, 2010.
- [23] Frederick W. Strauch. Relativistic effects and rigorous limits for discrete- and continuous-time quantum walks. *J. Math. Phys.*, Vol. 48, No. 8, pp. 082102, 27, 2007.
- [24] Mikhail Belkin and Partha Niyogi. Laplacian eigenmaps for dimensionality reduction and data representation. *Neural computation*, Vol. 15, No. 6, pp. 1373-1396, 2003.

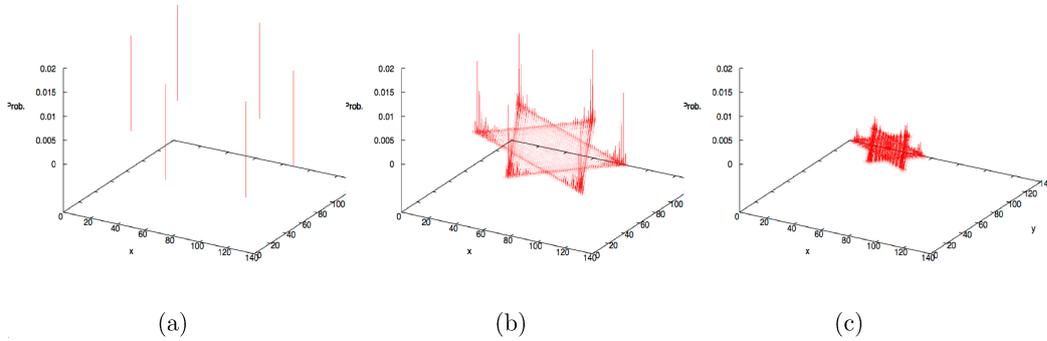


図 4: \mathcal{K}_0 上 S-量子ウォーク : 六芒星

- (a). ウェイト (3.1) に対する S-量子ウォークを, 120 ステップ進めた時の確率密度分布. 2-単体 $|abc|$ ($a = (0, 0) \in \mathbb{R}^2, b = (1, 0) \in \mathbb{R}^2, c = (0, 1) \in \mathbb{R}^2$) 上においた初期状態は, 単調に振る舞う. 特に, 相互作用しない量子ウォークとなっている.
- (b). ウェイト (3.2) に対する S-量子ウォークを, 120 ステップ進めた時の確率密度分布. $|abc|$ 上においた初期状態は, 六芒星を描きながら散乱する.
- (c). ウェイト (3.3) に対する S-量子ウォークを, 120 ステップ進めた時の確率密度分布. $|abc|$ 上においた初期状態は, 六芒星を描きながら散乱するが, (b) と比べると散乱スピードが遅いことが六芒星の大きさより伺える.

いずれの場合も, \mathcal{K}_0 上の S-量子ウォークは局在化を起こさない. これは結晶格子上の量子ウォーク [16] との大きな違いであり, 複体のトポロジーを反映していると考えられる.

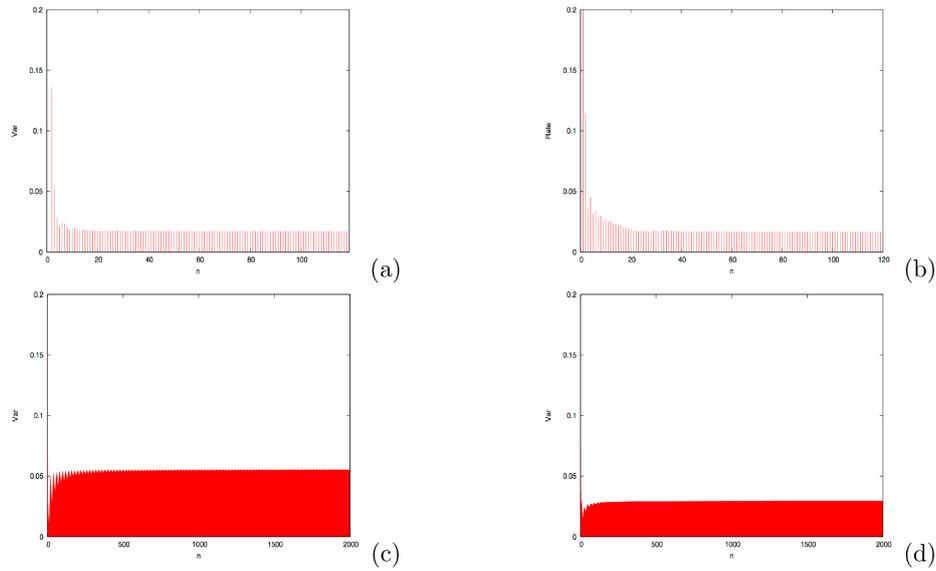


図 5: (3.6) で定義した分散 V_n/n^2 のグラフ : S-量子ウォーク Ψ_n に対する Ψ_n/n の 2 次モーメントの漸近挙動を表す. 横軸は時刻 n , 縦軸は V_n/n^2 の値を表し, V_n/n^2 の正の値への収束が量子ウォークの線型的広がり示唆する.

- (a). \mathbb{Z}^2 上の量子ウォークの典型例であるアダマールウォーク (e.g. [3]) に関する V_n/n^2 . 値は ≈ 0.01719 に収束している.
- (b). ウェイト (3.2) を持つ \mathcal{K}_0 上の S-量子ウォークに関する V_n/n^2 . 値は ≈ 0.01671 に収束している.
- (c). ウェイト (3.1) を持つ \mathcal{K}_1 上の S-量子ウォークに関する V_n/n^2 . 値は ≈ 0.05545 に収束している.
- (d). ウェイト (3.2) を持つ \mathcal{K}_1 上の S-量子ウォークに関する V_n/n^2 . 値は ≈ 0.02941 に収束している.

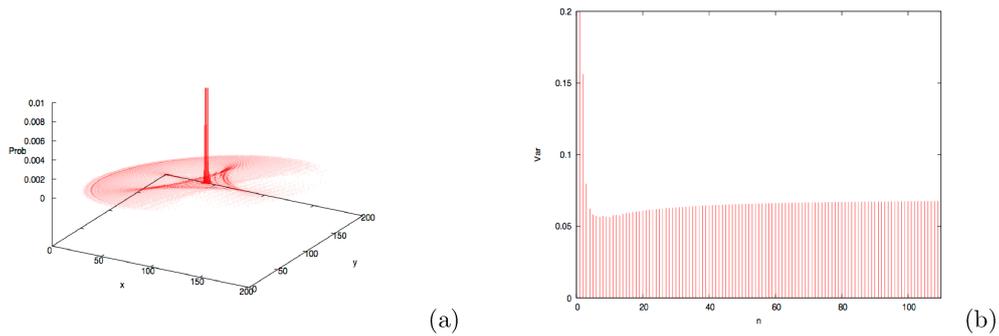


図 6: 三角格子上の量子ウォーク Ψ_n . 図 4 と比較せよ.

- (a): 原点にて局在化を起こす. これは三角格子のサイクル構造を反映している.
- (b): Ψ_n/n の分散の収束. 見方は図 5 を参照せよ.

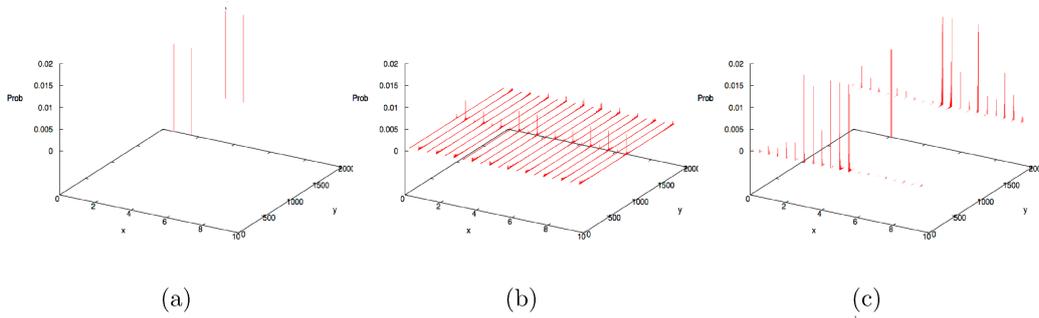


図 7: (a), (b) : \mathcal{K}_1 上 S-量子ウォーク. (c) : \mathcal{K}_2 上 S-量子ウォーク.

(a) と (b) は、それぞれウエイト (3.1) と (3.2) を持つ \mathcal{K}_1 上の S-量子ウォークを 2000 ステップ進めた時の確率分布を表す. (c) は、ウエイト (3.9) を持つ \mathcal{K}_2 上の S-量子ウォークを 2000 ステップ進めた時の確率分布を表す. いずれの場合も、初期状態 Ψ_0 は (3.7) にて与えている (図 3 も参照せよ).

(a). 初期状態 Ψ_0 は 2 つの無限遠方向 (= y 軸方向) と、正の確率を持つ初期単体を含むサイクルの方向に進んでいく. 図 9 内の “cylinder-transmit” も参照せよ. なお、これは相互作用しない量子ウォークの例にもなっている.

(b). (a) の場合と同様、初期状態 Ψ_0 は 2 つの無限遠方向と、正の確率を持つ初期単体を含むサイクルの方向に進んでいく. 図 9 内の “cylinder-hetero” も参照せよ. こちらは、相互作用する量子ウォークの例となっている. (a), (b) とともに、中心円にて局在化が起こっている.

(c). 局在化が四面体上で起こるが、 \mathcal{K}_1 上の量子ウォークで確認された中心円上の局在化が四面体に吸収されている. この様子は、図 9 の “tetra-on” と “tetra-off” でも観察できる.

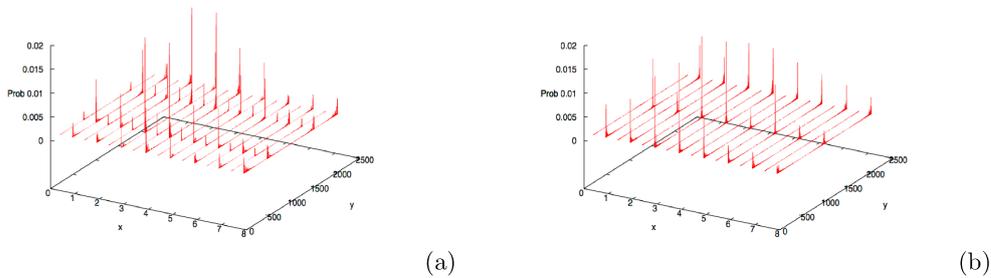


図 8: メビウス帯 \mathcal{K}_3 上の S-量子ウォーク (a) : \mathcal{K}_1 上の S-量子ウォーク (b) との比較

(a). ウエイト (3.10) を持つ \mathcal{K}_3 上の S-量子ウォークを、2100 ステップ進めた時の確率分布. 初期状態は \mathcal{K}_3 の中心にあるが、量子ウォークは y 方向の中心から次第に離れていく. これは \mathcal{K}_3 上の S-量子ウォークが局在化を引き起こさない事を示唆し、メビウス帯が向き付け不可能である事を反映していると考えられる.

(b). 比較対象: ウエイト (3.10) を持つ \mathcal{K}_1 上の S-量子ウォークの確率分布. 初期状態は (a) と同一のもの. この場合は、図 7 でも見たように、局在化が起こる.

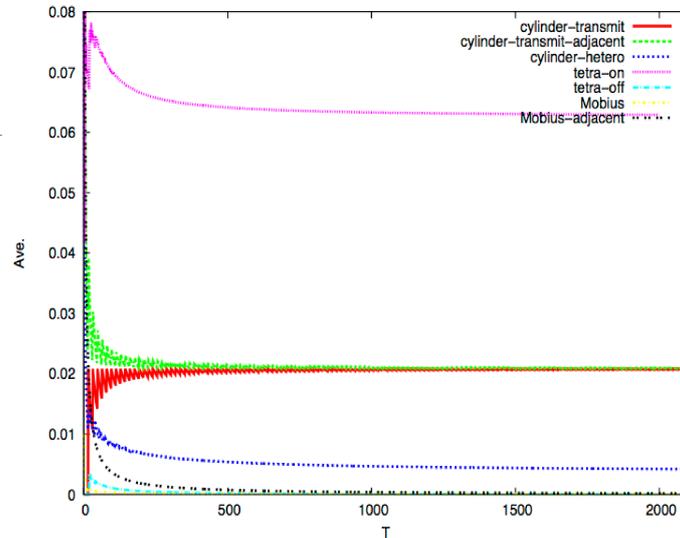


図 9: S-量子ウォークのある単体における時間平均確率

各グラフは、ある $|\sigma| \in K_2$ 、時刻 T における S-量子ウォークの時間平均確率 $\bar{\mu}_T(|\sigma|)$ の時間発展を表す。 $|\sigma_0|$ を 3 節で議論した初期状態 Ψ_0 の台とする。

- “cylinder-transmit” : ウェイト (3.1) を持つ \mathcal{K}_1 上の S-量子ウォークに関する $\bar{\mu}_T^{(\Psi_0)}(|\sigma_0|)$ 。0 から 0.02 の間を振動しながら、最終的に 0.02 に収束する。
- “cylinder-transmit-adjacent” : ウェイト (3.1) を持つ \mathcal{K}_1 上の S-量子ウォークに関する $\bar{\mu}_T^{(\Psi_0)}(|\sigma|)$ 。ただし、 $|\sigma|$ は $|\sigma_0|$ を含む中心円上において、 $|\sigma_0|$ の隣にある単体である。0.02 から 0.04 の間を振動しながら、最終的に 0.02 に収束する。
- “cylinder-hetero” : ウェイト (3.2) を持つ \mathcal{K}_1 上の S-量子ウォークに関する $\bar{\mu}_T^{(\Psi_0)}(|\sigma_0|)$ 。初期時刻から単調減少し、0.005 付近に収束する。
- “tetra-on” : ウェイト (3.9) を持つ \mathcal{K}_2 上の S-量子ウォークに関する $\bar{\mu}_T^{(\Psi_0)}(|\sigma_0|)$ 。 $|\sigma_0|$ は \mathcal{K}_2 で四面体の一部をなす事に注意せよ。時間平均確率は、0.062 付近に収束している。
- “tetra-off” : ウェイト (3.9) を持つ \mathcal{K}_2 上の S-量子ウォークに関する $\bar{\mu}_T^{(\Psi_0)}(|\sigma|)$ 。 $|\sigma|$ は $|\sigma_0|$ を含む中心円で、 $|\sigma_0|$ の隣にある単体。この単体は、四面体の外にある。初期状態直後に 0.003 付近まで値が急激に下がり、その後、単調に 0 に漸近する。
- “Mobius” : ウェイト (3.10) を持つ \mathcal{K}_3 上の S-量子ウォークに関する $\bar{\mu}_T^{(\Psi_0)}(|\sigma_0|)$ 。初期状態直後に、値はいきなり 0 に非常に近くなり、その後単調に 0 に漸近している。
- “Mobius-adjacent” : ウェイト (3.10) を持つ \mathcal{K}_3 上の S-量子ウォークに関する $\bar{\mu}_T^{(\Psi_0)}(|\sigma|)$ 。 $|\sigma| \in K_2(\mathcal{K}_3)$ は $|\sigma_0|$ を含む中心円上において、 $|\sigma_0|$ の隣にある単体である。時間平均確率は単調に 0 に漸近していくが、その動きは “Mobius” より緩やかである。

局在化が起こる全ての場合において、 $\bar{\mu}_T^{(\Psi_0)}(|\sigma|)$ は $T \rightarrow \infty$ の時に正の値に収束している。局在化が起こらない場合は、0 に漸近する。時間平均確率の計算は局在化の有無を判定するのに有用である。