

Stationary measure of quantum walk with electric circuit

学習院大学理学部 樋口 雄介 *
YUSUKE HIGUCHI (GAKUSHUIN UNIVERSITY)*

0. 序.

酔歩の量子版として扱われる量子ウォークは、酔歩よりも伝播が速いと言われる一方で局在化しやすい、という違った顔を見せることから、昨今様々な研究者がその不思議な魅力に惹きよせられ、そして様々なアプローチで解析がなされている。ここでは、酔歩の粒子性・量子ウォークの波動性という対比を仄めかすような、量子ウォークの持つ独特な挙動に光が当てられることが多い。なお量子ウォークの表現や種類も多岐に渡っているが、ここではグラフ上の酔歩から誘導される量子ウォークである Szegedy walk のみを扱う。

さて、有限グラフ上の既約な酔歩は長時間挙動として定常状態に収束をするというのは良く知られた事実であるが、量子ウォークに関しては、その時間発展作用素がユニタリー作用素であることから、一般に定常状態の存在すら期待できない。そこで我々は有限グラフの何箇所かに、毎時一定量の波を打ち込むモデルを考え、その条件の下で長時間経過後に観測される「定常状態」の存在性から議論する。結論としてはこの類の定常状態は存在することが確認でき、さらにその定常状態の持つ特性は“電気回路”の言葉で説明できる。また、その一方で基となる酔歩とのとの関連性、とくに可逆性非可逆性によって全く異なる様相をみせることなどについて報告する。

1. 準備：グラフおよび作用素.

1.1. グラフ.

グラフ $G = (V(G), E(G))$ は連結かつ局所有限で、 $V(G)$ は頂点集合、 $E(G)$ は無向辺集合を表す。本講演では $V(G)$ は必ずしも有限集合ではなく、より一般に可算集合であるもの、つまりグラフ G が無限グラフのものも扱う。便宜上、 $E(G)$ の各辺に対して2通りの有向辺を対応させて得られる有向辺集合を $A(G)$ で表し、また各有向辺 $e \in A(G)$ に対して、 e の始点、終点をそれぞれ $o(e)$ と $t(e)$ で、さらに e の逆辺を e^{-1} で表す。量子酔歩 (量子ウォーク) のように有向辺が舞台のときにはグラフ $G = (V(G), E(G))$ の代わりに $G = (V(G), A(G))$ と書くこともある。ここでグラフ G の頂点 x に対して、 $A_x(G) = \{e \in A(G); o(e) = x\}$ と置くと、 $\deg_G(x) = \#A_x(G)$ はいわゆる頂点 x の“次数”となる。

1.2. 推移確率.

有向辺 $A(G)$ 上の関数として p を考えるが、 $p(e) \in (0, 1]$ および各頂点 x において $\sum_{e \in A_x(G)} p(e) = 1$ をみたすものとする。ここで、 $A_x = \{e \in A(G); o(e) = x\}$ としている。この p はいわば酔歩 (古典酔歩) の有向辺 e に沿った $o(e)$ から $t(e)$ に1-step でジャンプする推移確率を表現するものである。

この推移確率 p がグラフの各点の次数から定まるとき、すなわち、

$$p(e) = \frac{1}{\deg_G(o(e))}$$

であるとき、この p から定まる古典酔歩を単純酔歩 (simple random walk) もしくは等方的酔歩 (isotropic random walk) と呼ぶことが多い。

1.3. 可逆性.

この推移確率 p が与えられることから酔歩の推移作用素や離散ラプラシアンが定義されるが、ここでは自己共役性を担保するために、 p が以下のような「可逆性 (reversibility)」を

* e-mail: yusuke.higuchi@gakushuin.ac.jp

This work was partially supported by JSPS Grant-in-Aid for Scientific Research (C) 18K03401.

満たすことが要請されている： $V(G)$ 上の正值関数 m が存在して、任意の有向辺 $e \in A(G)$ に対して

$$m(o(e))p(e) = m(t(e))p(e^{-1}).$$

この値を $\omega(e)$ ($= \omega(e^{-1})$) と有向辺上の重みとして扱うことも多く、逆にこの有向辺上の重み ω を用いて、可逆な推移確率を

$$p(e) = \frac{\omega(e)}{\sum_{f \in A_{o(e)}} \omega(f)}$$

で与えることもある。なお、もし p が単純酔歩の推移確率であるならば、 m として各頂点の次数を選べるので、自動的に可逆性を満たすことになるが、より一般の古典酔歩 (random walk) に附随するスペクトル解析を行うときには、上述した作用素の自己共役性のためにも p の可逆性を仮定することが多い、

一方、後に述べるこの報告の主役でもある量子酔歩 (quantum walk) の一つである Szegedy walk は、基礎にある古典酔歩の推移確率 p から誘導されるものであるが、その古典酔歩においてはかならずしも可逆性は仮定されない。それゆえ当該報告の主結果で見られるように、基礎となる古典酔歩が「可逆」なときと「可逆でない」ときでの量子酔歩の挙動の違いを観測することができる。

1.4. 古典酔歩に附随する作用素.

さて $V(G)$ 上の関数空間として

$$C^0(G) = \{f : V(G) \rightarrow \mathbf{C}\}$$

を、さらに可逆な推移確率 p を用いて、グラフ上の作用素として次で定義される 推移作用素 T_G および 離散ラプラシアン Δ_G を考える (I は単位作用素)： $f \in C^0(G)$ に対して

$$T_G f(x) = \sum_{e \in A_x(G)} p(e) f(t(e)), \quad \Delta_G f(x) = (T_G - I) f(x).$$

ここで内積を

$$\langle f_1, f_2 \rangle_V = \sum_{x \in V(G)} f_1(x) \overline{f_2(x)} m(x)$$

とし、ヒルベルト空間を

$$\ell^2(V(G)) = \{f \in C^0(G) \mid \langle f, f \rangle_V < \infty\},$$

と定めると、 T_G および $-\Delta_G$ は $\ell^2(V(G))$ においてともに有界作用素であり、 T_G および $-\Delta_G$ の ℓ^2 -スペクトル集合をそれぞれ $\text{Spec}(T_G)$ および $\text{Spec}(-\Delta_G)$ で表すと、 $\text{Spec}(T_G) \subset [-1, 1]$ および $\text{Spec}(-\Delta_G) \subset [0, 2]$ であることはすぐ確認できる。

なお、

$$S_G f(x) = \sum_{e \in A_x(G)} \sqrt{p(e)p(e^{-1})} f(t(e))$$

と定義すると、この作用素 S_G は標準的な内積

$$\langle f_1, f_2 \rangle_V = \sum_{x \in V(G)} f_1(x) \overline{f_2(x)}$$

によるヒルベルト空間において自己共役作用素になり、しかも上記で可逆な p に対して定義した推移作用素 T_G とユニタリ同値になることもすぐ確認できる。ちなみに、 p の可逆性にかかわらずこの作用素 S_G は定義でき、かつ $\text{Spec}(S_G) \subset [-1, 1]$ となるが、これが後述する「量子酔歩 (quantum walk)」のスペクトル記述と深く関係しており、しばしば「Quantum wak の判別作用素 (discriminant)」と言われる。

1.5. 量子酔歩に附随する作用素.

一般の量子酔歩 (量子ウォーク) に関しては昨今ではいろいろな著作があるのでそれを適宜参考していただく (例えば [5]) として, この報告では, 古典酔歩を定める推移確率 p から誘導される量子酔歩, いわゆる Szegedy walk と呼ばれるもの, に制限することとする. 一般の量子ウォークでは, “量子コイン” と呼ばれるユニタリ作用素と “移動” を記述するユニタリ作用素の積で発展作用素が記述されるが, Szegedy walk においては, 各頂点の周りで定義される “量子コイン” と有向辺の向きを反転させる “移動” のユニタリ作用素を合成した発展作用素 U_G が以下のように定義および表現されている:

定義 1.1 (Szegedy walk の 発展作用素). 与えられた推移確率 p から誘導される Szegedy walk の発展作用素 U_G は以下のように定義される: $\phi: A(G) \rightarrow \mathbf{C}$ に対して

$$U_G\phi(e) = -\phi(e^{-1}) + \sum_{f \in A_{o(e)}} 2\sqrt{p(e)p(f^{-1})}\phi(f).$$

古典的酔歩のように有向辺 f から e への推移の重み $(U_G)_{e,f}$ で見るなら

$$(U_G)_{e,f} = \begin{cases} 2\sqrt{p(e)p(f^{-1})}, & \text{if } o(e) = t(f) \text{ and } f \neq e^{-1}, \\ 2p(e) - 1, & \text{if } f = e^{-1}, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

古典酔歩が頂点から頂点への推移, いわばある時刻に頂点 x にいる “粒子” が $o(e) = x$ なる有向辺ごとに確率 $p(e)$ という重みをもって頂点 $t(e)$ へジャンプするのに対して, 量子酔歩は有向辺から有向辺への推移, いわばある時刻に有向辺 f に沿って存在する “波” が $o(e) = t(f)$ なる有向辺 e ごとに, $f \neq e^{-1}$ なら “振幅を $2\sqrt{p(e)p(f^{-1})}$ 倍” して “透過” し, $f = e^{-1}$ なら “振幅を $2p(e) - 1$ 倍” して “反射” するという描像で, いわば散乱してゆく様を示していると考えられることもできよう. なお, Szegedy walk のグラフ G 上での函数空間は,

$$C^1(G, \mathbf{C}) = \{\phi : A(G) \rightarrow \mathbf{C}\}$$

で, 標準的な内積

$$\langle \phi_1, \phi_2 \rangle = \sum_{e \in A(G)} \phi_1(e) \overline{\phi_2(e)}$$

の下での Hilbert 空間

$$\ell^2(A(G)) = \{\phi \in C^1(G, \mathbf{C}); \langle \phi, \phi \rangle < \infty\}$$

を考えるものである.

発展作用素 U_G は, 量子酔歩の要請通りユニタリ作用素 (成分が実数なので直交行列だが) となっていることは直接確認することもできる. なお, 単純酔歩 $p(e) = 1/\deg_G(o(e))$ のときの Szegedy walk を 「Grover walk」 と呼ぶことが多い.

1.6. 古典酔歩と量子酔歩を繋ぐもの.

ここで扱っている量子酔歩は, いわば古典酔歩から誘導されているものであるため, 両者の作用素の間になんらかの関係が期待されるところである. 実際, 俗に「量子ウォークのスペクトル写像定理」と言われる主張によって, 前述した「quantum walk の判別作用素 (discriminant)」 S_G と「Szegedy walk の発展作用素 U_G 」のスペクトルの間には以下のような関係が与えられている. なおこのようなスペクトルの関係に関しては各所で述べられているが, より一般の量子ウォークとその判別作用素の間関係, さらにその正確な記述やより詳細な性質については [9] などを参照されたい.

命題 1.2 (QW での「スペクトル写像定理」). 与えられた確率 p から定まる S_G と U_G のスペクトルの間には以下のような関係がある:

$$\text{“Spec}(U_G) = J^{-1}(\text{Spec}(S_G)) \cup \{\pm 1\}\text{”}.$$

ここで $J(z)$ は Joukowski 変換 $J(z) = (z + z^{-1})/2$ で定義されるもの.

なお, 当然のことであるが, 「可逆な」 p に対しては古典酔歩 T_G と量子酔歩 U_G のスペクトルの間には

$$\text{“Spec}(U_G) = J^{-1}(\text{Spec}(T_G)) \cup \{\pm 1\}\text{”}$$

という関係が成立していることになる.

2. 定常状態 (stationary state).

グラフ G を有限連結グラフとする. ある頂点から出発して頂点上を渡り歩く「古典酔歩」に関しては, 長時間経つとその「存在確率」は「定常分布」に収束することが良く知られている. 正確には「2部グラフ」を避けるべきであるが, その時でも lazy random walk (グラフとしては自己ループを考えたもの) を考えることによって, “定常分布” への収束が保証される. これは, 連結なグラフでの可逆な酔歩に対して, その推移作用素 T_G のスペクトル $\text{Spec}(T_G)$ の絶対値最大の固有値が 1 でしかも多重度が 1 であること, 附随する固有関数が正值なものがとれること, そして確率の測り方が ℓ^1 的であることが効果的に利いている. さて同じように有限グラフ G 上で「量子酔歩」, たとえばある頂点 x_0 での存在確率

$$\sum_{e:t(e)=x_0} |\phi_0(e)|^2$$

が 1 であるような“初期状態” ϕ_0 , ただし $\|\phi_0\| = 1$, に対して Szegedy walk を考えてみる. $\phi_n = U_G^n \phi_0$ と置くと, 自然に時刻 n , 位置 $x \in V(G)$ での存在確率 $\mu(x)$ は

$$\mu(x) = \sum_{e:t(e)=x} |\phi_n(e)|^2$$

と ℓ^2 の意味で表現される, ところで, 長時間経ったときに $\phi_n = U_G^n \phi_0$ が何かに収束するのか, という古典酔歩との類推による問い掛けに対しては, 一般には必ずしも収束しない, というのが答えとなる. というのも量子酔歩の U_G はユニタリ作用素であるがゆえに, 古典酔歩の T_G とは異なりすべての固有値の大きさは 1 となっていることが大きく関係してからである. そして「存在確率 μ 」も一般には必ずしも収束しない. そこで, 有限・無限グラフの設定で, (上記のようなある頂点でしか存在確率がない, という初期状態でなく) 一般の初期状態 ϕ_0 を考えることによって, なんらかの定常状態 ϕ (例えばある固有値 λ に附随する固有関数 ϕ_λ を初期状態にすれば, 当然のように $\lambda\phi_\lambda = U_G\phi_\lambda$ より, 頂点での測度 μ は「定常分布」となる) を考えることができ, その定常分布 μ の性質を特徴づけることもテーマとなる: 定常分布が一様分布なのかそうでないのか; 固有関数でない「状態」で定常分布となるものが存在するのか, など. 様々な研究があるが, 例えば [6,7] などを参照されたい.

では当該報告において, 与えられたグラフに関して, どのような定常状態 ϕ もしくは定常測度 μ を考えていくのか, という点に関しては, 次節にて述べることにする.

3. モデルと設定.

3.1. モデル. まず, $G_0 = (V_0, A_0)$ として有限グラフを考える. さらに $P = \{P_r; r = 1, \dots, k\}$ という半無限 Path の集合を考え, 各 path P_r の端点は G_0 の頂点 $x_r \in V_0$ と同一視する. その操作から得られるグラフ G は無限グラフとなるが, 簡易に $G = G_0 + P$ と書くことにする.

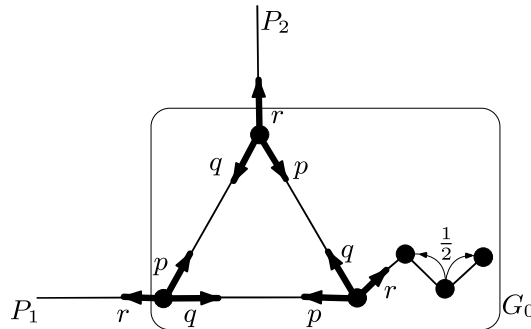


図 3.1. $G = G_0 + P$ (図では $k = 2$).

では, このモデルの意味合いを説明しよう. 有限グラフ G_0 は, いわば散乱で各種性質を探ろうとしている「ターゲットの物体」を, 一方, $P = \{P_r; r = 1, \dots, k\}$ という半無限 Path の集合は, いわば“波”を打ち込んだり, 散乱したものを逃がす「入射透過経路」を意識している.

3.2. モデルに対する設定.

無限グラフ $G = G_0 + P$ に対して推移確率 p を与える必要があるが, 以下のように設定する:

定義 3.1. (設定: $G = (V(G), A(G))$ における推移確率の与え方).

- 1) ターゲットの物体 G_0 に対して: 各頂点 $x \in V_0$ において, $\sum_{e \in A_x} p(e) = 1$ を満たす 推移確率 $p(p(e) \in (0, 1])$ であれば良い. 可逆性は問わない.
- 2) 入射透過経路 $P = \{P_r\}$ に対して: 各 Path P_r 上の頂点 $x \in V(P_r) \setminus V_0$ において単純酔歩とする: つまり任意の $o(e) \in V(G) \setminus V_0$ なる 有向辺 $e \in A(G)$ に対して $p(e) = \frac{1}{2}$ とする.

1) に関しては, 推移確率に対して非常に自由度が高い設定であり, 一般のターゲットを相手にしているとも言えよう.

一方 2) に関しては“制限し過ぎではないか”との指摘を受けそうであるが, あくまでも P は波の通過経路であることを考えると, 実は自然な設定となっている. ここで「Szegedy walk の発展作用素」の定義 (定義 1.1) を見てみると, path 上での p が単純酔歩 ($p(e) = 1/2$) であることは, 誘導される Szegedy walk の path 上での“波”は, 各頂点で“反射”することなく ($f = e^{-1}$ ならば $(U_G)_{e,f} = 0$) “完全透過” ($o(e) = t(f)$ かつ $f \neq e^{-1}$ ならば $(U_G)_{e,f} = 1$) する. つまり各ステップで, 向きで繋がる有向辺に振幅をそのまま“すり抜ける”こととなる. これはすなわち P 上の G_0 に向いた有向辺 e (正確には $dist(t(e), V_0) < dist(o(e), V_0)$ なる有向辺 $e \in A(G) \setminus A_0$) 上の波は, $t(e) \notin V_0$ ならば 次のステップでより G_0 に近い有向辺 $f \in A$ ($o(f) = t(e)$) にそのまま移動し, もし $t(e) \in V_0$ ならば次のステップでは U_G に従って $t(e) \in V(G)$ での散乱の結果が反映される. また P 上の G_0 から遠ざかる向きに向いた有向辺 e (正確には $dist(t(e), V_0) > dist(o(e), V_0)$ なる有向辺 $e \in A(G) \setminus A_0$) 上の波は, 次のステップではより G_0 から有向辺 $f \in A$ ($o(f) = t(e)$) にそのまま移動する,

つまり, G_0 に向いた波は 1 ステップごとに G_0 に近づき, G_0 から遠のく向きの波, または散乱によって一旦 G_0 から出てしまった波は 1 ステップごとに G_0 から遠ざかり, 二度と G_0 に戻ることはない.

3.3. モデルに対して考えたいこと, そして実現に向けた適切な初期状態.

$P = \{P_r\}$ を波の入射透過経路として毎時刻各経路で振幅一定の波を G_0 に打ち込み続けて, ターゲットの物体 G_0 にて内部への浸透を含む散乱をさせ, 長時間経ち“落ち着いた”状態での経路上の“散乱波”を観測することでターゲット G_0 の各種性質, そして (存在すれば) G_0 に制限した定常状態や定常測度の分布を探るというのが, このモデルに対して考えたいことである. よって, モデルに対して与える条件としては:

- ・各入射経路 P_r からは ターゲット G_0 に各時刻常に 振幅 α_r の波を入射しつづける;
- ・初期状態では G_0 内や G_0 から経路から出ていく波はない.

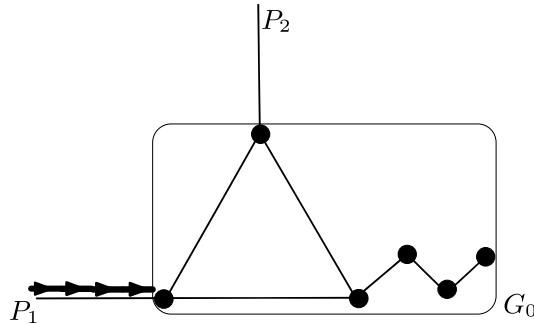


図 3.2. 経路 P_1 から G_0 に波を入射し続ける.

このことを実現するための条件は以下の通りとなる. ところで, この初期条件は $l^2(A(G))$ の範疇から溢れているが, ターゲットである有限グラフ G_0 における定常状態とその特性を調べるという意味では (各経路において定常状態の support は無限になったとしても, 経路上の有向辺での状態の値の種類は有限; 節 3.2 を参照) なんら問題がない.

初期条件 3.2. モデル $G = G_0 + P$ ($P = \{P_r; r = 1, \dots, k\}$) に対する初期状態 Φ_0 を

- ・ $\Phi_0(e) = \alpha_r$: $e \in A(P_r)$ かつ $dist(o(e), V_0) > dist(t(e), V_0)$ のとき
- ・ $\Phi_0(e) = 0$: それ以外の有向辺 $e \in A(G)$.

と置く.

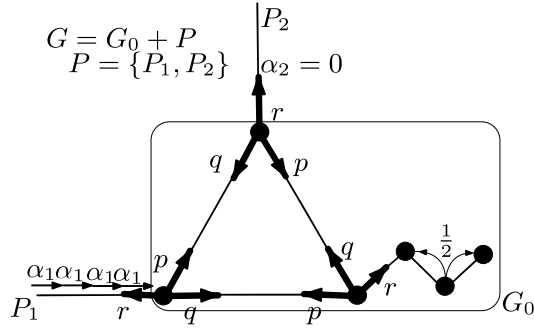


図 3.3. $k = 2$ and $\alpha_2 = 0$. p, q, r は推移確率のパラメータ.

各時刻でつねに振幅 α_r の波を打ち込むことを、定義 3.1 2) の設定を使って P_r 上の “ G_0 に向かった” 有向边上の波の振幅をすべて α_r にすることで実現している. ここでようやく舞台が整った.

では上記モデル (3.1 および 定義 3.1) と初期状態 (初期条件 3.2) に対する具体的な問い掛けを以下に掲げ、それに対する現在のところ得られている回答を次節で述べることにする.

問題 3.3.

(1) 長時間経ったときに G に定常状態はあるか: $\Phi_n = U_G^n \Phi_0$ としたとき $\Phi_\infty := \lim_{n \rightarrow \infty} \Phi_n$ が存在して $U_G \Phi_\infty = \Phi_\infty$ となっているか;

(2) 定常状態 Φ_∞ が存在したとき、その G_0 での表面散乱状態はどのようなになっているか: 有向辺 e_r を $e_r \in A(P_r)$ かつ $t(e_r) \in V_0$ としたとき、入射 $\{\Phi_\infty(e_r)\}_{r=1}^k = \{\alpha_r\}_{r=1}^k$ に対して、反射 $\{\Phi_\infty(e_r^{-1})\}_{r=1}^k$ はどのように記述できるのか;

(3) 定常状態 Φ_∞ から得られる G_0 内部の各頂点に対する測度: $x \in V_0$ に対する $\mu_\infty(x) = \sum_{e:t(e)=x} |\Phi_\infty(e)|^2$ はどのように特徴付けられ、またどのように記述できるのか.

4. 主結果: Szegedy walk と電気回路.

まずは前節 問題 3.3 の回答といえる主定理をざっと述べる. 証明については [3] を参照していただくことにして、定理内の主張 (1) から (3) の補助的な説明を、それぞれ 節 4.1 から 節 4.3 にて論じることとする:

主結果 ([3]). モデル 「3.1 および 定義 3.1」 および初期状態 「初期条件 3.2」 に対して:

(1) $U_G \Phi_\infty = \Phi_\infty$ を満たす定常状態 Φ_∞ は一意に存在;

(2) Φ_∞ の G_0 の表面散乱状態については、 G_0 内部の構造には依存せず以下ようになる:

(2-1) 基となる推移確率 p が可逆のとき: G_0 を 1 点に縮約したグラフ G/G_0 における “Szegedy 発展状態”,

(2-2) 基となる推移確率 p が非可逆のとき: 各 P_r で入射 α_r に対して $-\alpha_r$ の “完全反射”;

(3) Φ_∞ のよる G_0 内部の各頂点での測度の値は:

(3-1) 基となる推移確率 p が可逆のとき: キルヒホッフ第 1 および第 2 法則を満たす 「電流」と推移確率 p の 「可逆測度」 で定まる;

(3-2) 基となる推移確率 p が非可逆のとき: 「変形された電流」 のみで定まる.

4.1 定常状態の存在.

本質的には [2,4] でも語っているように、有限グラフ G_0 に制限した作用素を考え、その力学系によって定常状態を求める (cf.[8]), という自然な方法を用いる. G_0 の有向辺集合 A_0 上の関数を、 $A(G) \setminus A_0$ では “0” かつ $A_0 \subset A(G)$ ではそのままという関数へ引き上げる作用素を χ_{G_0} とし、一方で $A(G)$ 上の関数を A_0 に制限する作用素を $\chi_{G_0}^*$ とし、有限行列 $\chi_{G_0}^* U_G \chi_{G_0}$ と各時刻で G_0 に入ってくる有限次元 “流入量ベクトル” で表記される “力学系” を相手にすればよい.

具体例として、図 4.1 で表わされたモデル $G = G_0 + \{P_1, P_2\}$ に対して、推移確率 p を単純酔歩とした Szegedy walk, したがって Grover walk からなる dynamics, および $\alpha_1 = 1$ および $\alpha_2 = 0$ という初期状態の下での記述を与えておく.

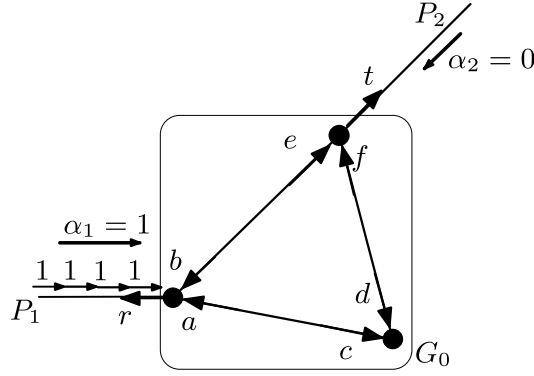


図 4.1. Grover dynamics での例： $k = 2$, $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 0$.

図 4.1 の中で、 a, b, c, d, e, f, r, t は有向辺の名前であり、今、推移確率 p は単純酔歩なので、 $p(a) = p(f) = 1/2$ および $p(b) = p(c) = p(d) = p(e) = p(r) = p(t) = 1/3$ となる。初期状態 Φ_0 に対する時刻 n での状態 Φ_n の G_0 の各有向辺集合 A_0 での値を $\Phi_n(a) = a_n, \dots, \Phi_n(f) = f_n$ と略記する。すると単純酔歩から誘導される Grover walk の初期状態 $\alpha_1 = 1, \alpha_2 = 0$ での dynamics は

$$\begin{pmatrix} a_{n+1} \\ b_{n+1} \\ c_{n+1} \\ d_{n+1} \\ e_{n+1} \\ f_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} \\ \frac{2}{3} & -\frac{1}{3} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \\ c_n \\ d_n \\ e_n \\ f_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{2}{3} \\ 0 \\ \frac{2}{3} \\ 0 \end{pmatrix}$$

および $\Phi_{n+1}(r) = \frac{2}{3}(a_n + b_n)$, $\Phi_{n+1}(t) = \frac{2}{3}(e_n + f_n)$ となる。この表現と、 U_G に G_0 における Dirichlet 境界条件を課した $\chi_{G_0}^* U_G \chi_{G_0}$ を相手に解析をすれば期待された結果、つまり、定常状態 Φ_∞ の存在と一意性が得られることになる。図 4.1 の例においては、定常状態 Φ_∞ の G_0 での値は

$$(\Phi_\infty(a), \Phi_\infty(b), \Phi_\infty(c), \Phi_\infty(d), \Phi_\infty(e), \Phi_\infty(f)) = (1/3, 1/6, 2/3, 1/3, 5/6, 2/3)$$

となる。なお、 $\Phi_\infty(r) = 0$ および $\Phi_\infty(t) = 1$ も計算から得られるが、この“表面散乱状態”に関しては、基となる推移確率 p が可逆である Grover walk の例であることから、主定理の (2-1) より直ちに得られることにも注意されたい。

4.2 表面散乱状態.

「主結果」の (2) で見られるように、 G_0 の内部の幾何構造には依存しないが、与えられた基となる推移確率の可逆性には大きく依存する。大袈裟に言ってしまうと（言い過ぎとの誇りを受けることは勿論覚悟の上で）、波をターゲットに打ち込み続けて定常状態になったときの表面散乱状態を見ることで、 G_0 内部に与えられた推移確率 p の可逆性の判定ができるのである。

4.2.1 推移確率 p が可逆のとき.

図 4.2 でも示したように、 G_0 の境界を形成する有向辺として、 b_i を $b_i \in A(P_i)$ かつ $t(b_i) \in V_0$ とする。境界で入射透過経路 P_i に沿った入力はずねに α_i であるので、

$$\Phi_\infty(b_i) = \alpha_i$$

であるが、それに対して $\Phi_\infty(b_i^{-1})$ がどう表現されるのかを具体的に示していく。

可逆な推移確率 p が与えられているので、節 1.3 でも示したように、 G での推移確率 p は、有向辺上の重み ω を用いて

$$p(e) = \frac{\omega(e)}{\sum_{f \in A_o(e)} \omega(f)}$$

と表現される。さて、「主結果」では「 G_0 を1点に縮約したグラフ G/G_0 における“Szegedy 発展状態”」と記載したが、その意味をより正確に伝えよう。図 4.2 の右のグラフは、 G において部分グラフ G_0 を1点に縮約した G/G_0 を表している。ここで縮約された G_0 に対応する頂点から近傍への推移確率がそれぞれ G で与えられていた可逆な推移確率 p から得られる b_i 上の重み ω を用いて ($\omega(e) = \omega(e^{-1})$) にも留意する)

$$p_s(b_i^{-1}) = \frac{\omega(b_i^{-1})}{\sum_{i=1}^r \omega(b_i^{-1})}$$

と“自然”に与えてみる。また G/G_0 の他の有向辺の推移確率の値に関しては、 G での値がそのまま誘導されるとする。こうして定めた G/G_0 の推移確率を改めて p_s とし、それを基に定まる G/G_0 の Szegedy walk の発展作用素を U_{G/G_0} とおく。 G/G_0 において、 b_i での値が α_i であるが、他の有向辺上では値が 0 であるような状態を Ψ_0 とする：もちろん Ψ_0 は G における G_0 への入射状態を、自然に G/G_0 に射影したものである。

主定理の主張はより正確に言うると：定常状態 Φ_∞ の G_0 の境界での値は、入力 $\Phi_\infty(b_i) = \alpha_i$ ($i = 1, \dots, r$) に対して、出力は

$$\Phi_\infty(b_i^{-1}) = (U_{G/G_0} \Psi_0)(b_i^{-1})$$

と表現される。長時間経って定常状態になった波は、実際には G_0 内部にも浸透しているものの、 G_0 の表面では、あたかも遠目で G_0 が1点に潰れているようなグラフでの Szegedy walk を見ているようなもの、という描像ともいえよう。

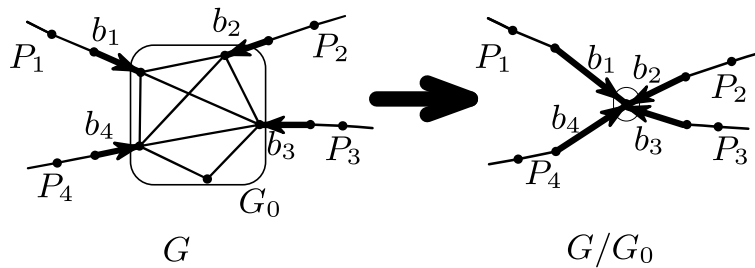


図 4.2. p が可逆のときの ϕ_∞ の表面散乱状態.

4.2.2 推移確率 p が非可逆のとき.

Szegedy walk の基となる推移確率 p が非可逆なときの、 G 中の G_0 の境界での入力 $\Phi_\infty(b_i) = \alpha_i$ に対する $\beta_i = \Phi_\infty(b_i^{-1})$ の表現であるが、各 i ($i = 1, \dots, r$) で $\beta_i = -\alpha_i$, つまり

$$\Phi_\infty(b_i^{-1}) = -\Phi_\infty(b_i)$$

と、振幅の大きさは変えず (これをもって“完全反射”と称した) 正負反転したものとなる。図 4.3 も参照されたい。実際には定常状態は G_0 内部に浸透しているが、いわば遠目には G_0 にぶつかった波が位相反転して反射している、という描像ともいえよう。

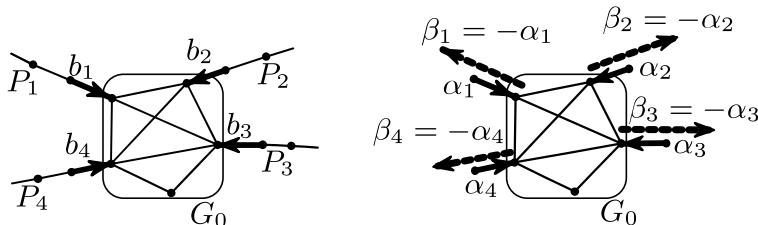


図 4.3. p が非可逆のときの ϕ_∞ の表面散乱状態.

4.3 ターゲット内部の測度の値.

やはり推移確率 p の可逆/非可逆性によって定常状態の特徴付けに違いがでてくる。ただし率直に言うならば、可逆なときは古典的電気回路の言葉ですっきり表現できるが、非可逆なときはあまりすっきりとした表現が(まだ)とれていない、というのが現状である。

4.3.1 推移確率 p が可逆のとき.

節 4.2 でも用いたように, G_0 の境界を形成する有向辺 b_i を用いる: $b_i \in A(P_i)$ かつ $t(b_i) \in V_0$. また, 境界で入射透過経路 P_i に沿った入力 $\Phi_\infty(b_i) = \alpha_i$ であるので, G_0 の境界での流入量ベクトルを

$$\vec{\alpha} = {}^t(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r)$$

で表す. 今は $G = G_0 + P$ に与えられた推移確率 p は可逆なので, 各有向辺 $e \in A(G)$ 上に重み $\omega(e) = \omega(e^{-1}) > 0$ が誘導されるので, それを用いて G_0 の境界の“体積”を

$$\omega(\delta G_0) = \sum_{i=1}^r \omega(b_i)$$

で表し, 加えて G_0 の境界での (規格化された) 辺の重さベクトルを

$$\vec{m}_{\delta E} = {}^t(\sqrt{\omega(b_1)}, \sqrt{\omega(b_2)}, \dots, \sqrt{\omega(b_r)}) / \sqrt{\omega(\delta G_0)}$$

で表わす. ここで

$$j(e) = \sqrt{\omega(e)} \Phi_\infty(e) - \frac{\omega(e)}{\sqrt{\omega(\delta G_0)}} \cdot \langle \vec{m}_{\delta E}, \vec{\alpha} \rangle$$

と置いたとき, この $j(e)$ の持つ性質を列挙しよう. なおこの節で登場する内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ は標準的内積である.

キルヒホッフの法則. 上記のような定常状態 Φ_∞ から誘導される j は以下の「電流則」と「電圧則」を満たす:

- ・ キルヒホッフ第1法則 「電流則」: 各頂点 $x \in V(G)$ において

$$\sum_{e:t(e)=v} j(e) = \sum_{o(e)=v} j(e) = 0$$

および, 各有向辺 $e \in A(G)$ において

$$j(e) + j(e^{-1}) = 0$$

が成立;

- ・ キルヒホッフ第2法則 「電圧則」: G の任意のサイクル $C = e_1 e_2 \dots e_m$ において

$$\sum_{i=1}^m \frac{j(e_i)}{\omega(e_i)} = 0$$

が成立.

古典酔歩でも, この類の性質を持つ“電流”が 1-form または 調和解析の文脈から議論され, 結局は古典酔歩の持つポテンシャル (頂点上で定義される函数) の議論へと繋がること知られている (cf. [1]) が, ここ量子酔歩では直接“有向边上”の函数として表舞台に出てくることになる.

ここで「キルヒホッフの法則」を満たすことから $j(\cdot)$ を電流と呼ぶのは許されるであろう. そこでさらに $1/\omega(e)$ を抵抗と置けば, オームの法則より $j(e)/\omega(e)$ を電圧と呼ぶことも許されると信じている. では改めて定常状態 Φ_∞ を j を用いて表現してみると

$$\Phi_\infty(e) = \frac{j(e)}{\sqrt{\omega(e)}} + \sqrt{\frac{\omega(e)}{\omega(\delta G_0)}} \cdot \langle \vec{m}_{\delta E}, \vec{\alpha} \rangle$$

となり, ここから各頂点 $v \in V(G)$ における「存在“測度”」 $\mu(v)$ を計算してみると

$$\mu(v) := \sum_{e:t(e)=v} |\Phi_\infty(e)|^2 = W(v) + \frac{|\langle \vec{m}_{\delta E}, \vec{\alpha} \rangle|^2}{\omega(\delta G_0)} m(v)$$

となる。ここで $W(v) = \sum_{e:t(e)=v} j(e) \cdot j(e)/\omega(e)$ であり、いわゆる エネルギー「電力」 W は「電流」 j と「電圧」 j/ω の積となっている。

以上をまとめると、可逆な推移確率 p から誘導された Szegedy walk (量子酔歩) の頂点 v の定常測度の値は、「電力エネルギー」と、基となる古典酔歩の「定常測度 m 」の和で表現されているといえる。

なお $\vec{m}_{\delta E} \perp \vec{\alpha}$ のときは $\mu(v) = W(v)$ と電力のみで表現されることは上記から直ちに分かるが、 $\vec{m}_{\delta E} \parallel \vec{\alpha}$ のときは

$$\mu(v) = \frac{|\langle \vec{m}_{\delta E}, \vec{\alpha} \rangle|^2}{\omega(\delta G_0)} m(v)$$

と定常測度のみで表現されることも分かる。

4.3.2 推移確率 p が非可逆のとき.

$G = G_0 + P$ に与えられた推移確率 p が非可逆のときは、主定理の中では「変形された電流」のみで定まる、と表現したが、実際には p が可逆などのような目覚ましい特徴付けが出来ているわけではない。定常状態 Φ_∞ が持つ性質として陽に表されているのは：

$$\Phi_\infty(e) = -\Phi_\infty(e^{-1})$$

が全ての有向辺 $e \in A(G)$ に対して成立する (Φ_∞ が 1-form っぽいところが「電流」と言える) こと；および

$$\sum_{e \in A(G); t(e)=v} \sqrt{p(e^{-1})} \Phi_\infty(e) = 0$$

が全ての頂点 $v \in V(G)$ において成立することである。キルヒホッフの第1法則のようであるが、重み p が付いていること、さらに一般には

$$\sum_{e \in A(G); o(e)=v} \sqrt{p(e^{-1})} \Phi_\infty(e) = 0$$

が成立しないことなどが「すっきり」しないところである。このことから単に「電流」と言うには躊躇われるので、(それでも適切な言葉ではないと思うが)「変形された電流」と称している。ただ、 p が可逆のときの定常測度 Φ_∞ は「電流」と「可逆測度」から構成されているのに対し、 p が非可逆のときの定常測度 Φ_∞ は「電流」のみから構成され他の要素がないことが大きな相違である。

5. 例：具体的な計算，そして可逆と非可逆性.

図 3.3 に掲げた例で Φ_∞ を具体的に計算した結果を考察してみよう。図 5.1 も参照されたい。

まずグラフとしては、 $G = G_0 + P$ での P は $k = 2$ で $P = \{P_1, P_2\}$ となっており、ターゲットの有限グラフ G_0 は、長さ3のサイクル C_3 と長さ3のパスの“tail”から構成されている。

基となる推移確率 p に関しては、入射透過経路 P においては定義 3.1 の 2) で定まっているが、 G_0 の C_3 の各頂点に関しては、図中のパラメータ p, q, r (ただし $p + q + r = 1$) で自由度を与えている。さらに G_0 の“tail”の各頂点では単純酔歩としている。このとき、 $p = q$ のとき推移確率は可逆、 $p \neq q$ のときは非可逆となるのは容易に確認できる。

初期状態に関しては、 $\alpha_1 = 1$ かつ $\alpha_2 = 0$ とする。

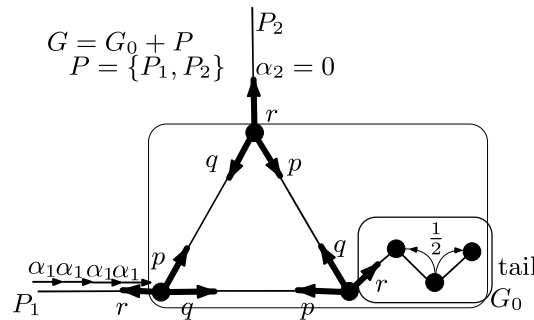


図 5.1. $k = 2$ and $\alpha_2 = 0$.

Φ_∞ の細かい値に関しては, [3] を参照していただくことにしてその特徴の概略を以下に述べる. なお, パラメータ p, q, r に関しては, r を任意に固定して, p を適宜変化させることとする ($q = (1 - r) - p$).

5.1. 定常状態 Φ_∞ .

まず基となる推移確率 p が可逆のとき (パラメータ $p = q$ のとき) は, G_0 のどの有向辺においても, 定常状態 Φ_∞ は 0 ではない: $e \in A(G_0)$ に対して, $\Phi_\infty(e) \neq 0$. つまり, G_0 全体に「浸透」していると解釈できる.

一方, 基となる推移確率 p が非可逆のとき (パラメータ $p \neq q$ のとき) は, G_0 の “tail” での定常状態 Φ_∞ の値は 0 となる: つまり, G_0 の “tail” には「浸透しない」と解釈できる. この状況は次数 1 の頂点の存在が利いていることは計算過程で分かるのだが, 「浸透しない部分」に関するより詳細な特徴付けも興味ある課題である.

5.2. ターゲットでの全測度 $M = \sum_{e:t(e) \in V_0} |\Phi_\infty|^2$.

この例と初期設定において, 5.1 にて主張したように, 定常状態 Φ_∞ が存在する. よって, $V(G)$ 上で測度 μ_∞ が定義できる: G の各頂点 $x \in V(G)$ における測度 μ_∞ の値 $\mu_\infty(x) = \sum_{e:t(e)=x} |\Phi_\infty(e)|^2$ が計算できる. さて, ここでは, パラメータ p, q, r に関しては, $r \in (0, 1)$ を任意に固定した上で, $q = (1 - r) - p$ という関係を考慮して, ターゲットの物体 G_0 での全測度

$$M = \sum_{x \in V_0} \mu_\infty(x) = \sum_{e:t(e) \in V_0} |\Phi_\infty(e)|^2$$

を $p \in (0, 1 - r)$ と $r \in (0, 1)$ の関数で表現してみよう.

(5.2.1) 推移確率 p が可逆 (パラメータ $p = q$ のとき):

$$M = M_{rev}(r) = \frac{13}{12} + \frac{2}{3(1-r)} + \frac{3}{4r};$$

(5.2.2) 推移確率 p が非可逆 (パラメータ $p \neq q$ のとき)

$$M = M_{nonrev}(p; r) = \frac{2r(p^2 + pq + q^2)}{(p^{3/2} - q^{3/2})^2} + 1.$$

素朴には, 固定したパラメータ r に対して, パラメータ p と q の値が近づくにつれて $M_{nonrev}(p; r)$ の値は, パラメータ $p = q$ での値 $M_{rev}(r)$ に近づき, $p = q$ で連続というイメージを抱いていたが, 上記の計算結果を自明だがまとめて書くと

$$M = \begin{cases} M_{nonrev}(p; r) = \frac{2r(p^2 + pq + q^2)}{(p^{3/2} - q^{3/2})^2} + 1, & \text{if } p \neq q, \\ M_{rev}(r) = \frac{13}{12} + \frac{2}{3(1-r)} + \frac{3}{4r}, & \text{if } p = q. \end{cases}$$

というパラメータ p, r の関数表現がとれ, つまり

$$M_{rev}(r) \neq \lim_{p \rightarrow q} M_{nonrev}(p; r) = \infty$$

ということが分かる.

パラメータ p の値を q の値に寄せれば寄せるほど, G_0 での全測度は増加し発散するが, ぴったり一致した瞬間 ($p = q$) には有限の値に落ち着く, といった, チューニングの妙, のような現象が見てとれる. この現象を「LC回路」の「レゾナンス」のようだ, と言ってくれる物理関係者の方もいるので, (それを心の支えにしながら) その数学的正当化を実行するとともに, 数学での共鳴現象との繋りも模索していくことも今後の大きな課題である.

6. おわりに.

古典酔歩 (Random Walk) が電気回路 (Electric Networks) と深く関係していることは, 調和解析などを通して古くから [1] などで詳細に語られている. その両者が, オームの法則やキルヒホッフの法則などの古典的事実を通して結びつけられる以上, どちらも “古典的” であるとするのは, 非常に直感的ではあるものの, 自然と受け入れられよう. 一方, “量子” を謳った量子酔歩 (Quantum Walk) は, その登場時から古典酔歩よりも伝播速度が “速い” という

のが売りであり (cf. [5]), そして各所で古典酔歩との性質の違いをみせてきたが, はからずもこの報告では Szegedy walk と電気回路の親和性を示すことになった. これは, Szegedy walk が古典酔歩を基とした量子酔歩であるが故の “古典近似” のような特性を露わにしているためなのか, それとも実は昨今量子酔歩と呼んでいる Quantum Walk 全体が実は古典酔歩である Random Walk とそれほどの差異がないことを意味しているのか. いずれにしてもこれらの疑問を解決することが量子ウォークの未来のためにも必要不可欠なことであろう.

当該報告は, 2020 RIMS 共同研究 (公開型) 「スペクトル散乱理論とその周辺」における講演内容であり, Mohamed Sabri 氏 (東北大), 瀬川 悦生 氏 (横浜国大) との共同研究 [3] に基いている. 講演の機会を与えてくださった京都大学数理解析研究所および研究代表者の廣島文生氏 (九大), また有益なコメントをいただくなど広い意味で支えていただいた小倉浩氏 (昭和) には厚く御礼申し上げる次第である.

REFERENCES

- [1] Doyle, G. and Snell, L., *Random Walks and Electric Networks*, Carus Mathematical Monographs, Book 22, Mathematical Association of America, 1984.
- [2] Feldman, E. and Hillery, M., *Modifying quantum walks: A scattering theory approach*, J. Phys. A **40** (2007), 11319.
- [3] Higuchi, Yu., Sabri, M. and Segawa, E., *Electric Circuit Induced by Quantum Walk*, J. Stat. Phys. **181** (2020), 603–617.
- [4] Higuchi, Yu and Segawa, E., *Dynamical system induced by quantum walk*, J. Phys. A **52** (2019), 395202.
- [5] Konno, N., *Quantum Walks*, Lecture Notes in Math. **1954** (2008), 309–452.
- [6] 今野紀雄, 量子探索 量子ウォークが拓く最先端アルゴリズム, 近代科学社, 2021.
- [7] Kawai, H., Komatsu, T. and Konno, N., *Stationary measure for two-state space-inhomogeneous quantum walk in one dimension*, Yokohama Math. J. **64** (2018), 111–130.
- [8] Robinson, M., *Dynamical Systems: Stability, Symbolic dynamics, and Chaos*, CRC Press, 1995.
- [9] Segawa, E. and Suzuki, A., *Spectral mapping theorem of an abstract quantum walk*, Quantum Inf. Process. **18** (2019), 333 (24 pages).