量子ウォークと電気回路

金子悠人, 瀬川悦生 *(横浜国立大学)

1　はじめに

有限グラフ上の非周期的で既約なランダムウォークは固有値 1 の固有ベクトルで記述される定常状態に収束する．そこで, それに対応するある初期状態からはじめて, 時刻無限大で, 一般にはその初期状態とは異なるある定常状態に収束するような量子ウォークモデルを考案したい．このようなモデルを構成するために, 量子ウォークの時間発展のユニタリ性から、その固有値の絶対値の大きさはすべて 1 なので, 全ての固有空間が同等に主張をして, 一見するとただ単位円周上を回転して収束しないように見えるので, 少し工夫が必要になる．

アイディアは次のようになる．有限で連結なグラフ $G_0=(V_0,A_0)$ を考える．ここで, V_0 は頂点の集合, A_0 は対称有向辺の集合で, $a\in A$ ならばその逆向きの有向辺も $\bar{a}\in A$ である．また, 有向辺 $a\in A$ の終点と始点をそれぞれ $t(a)$, $o(a)\in V_0$ とする．頂点 $u\in V_0$ の次数を $d(u)$ とする．この頂点の中から幾つか適当に選んできて, それぞれから半無限長のパスを伸ばす．この半無限長のパスを "tail" とここでは呼ぶ．選ばれた頂点を外部との境界とみなし, δV_0 と記述する．このようにしてできた半無限グラフを $\tilde{G}=(\tilde{V},\tilde{A})$ と書く．この tail 上ではダイナミクスが自由量子ウォークとなり, 各 tail 上の頂点では常に完全透過が起こる．初期状態はこの tail から有限グラフ G_0 に向かったすべての有向辺上に定数の値が乗っている状態とする．すると, G_0 の立場からすると, 常に外部から量子ウォークが流入してくる．その一方で, 一度 G_0 の外に出してしまうと, tail 上では自由なので, 二度と戻って来られなくなり, 結果として G_0 からの流出が起こる．実際, このような量子ウォーカーの流入と流出が時刻無限大でバランスして, 有限グラフ G_0 に固定してその様子を観察していくと, ある定常状態に収束する [3].

このように量子ウォークがある定常状態に収束することが保障されたので, 次の興味としては, その定常状態がどのようなものなのかがあげられる．特に, 有限グラフの内部構造が量子ウォークでは, どのように反映されているかを考察する．そこで, よく研究がされている Grover walk と呼ばれる特別な量子ウォークのクラスでこのことについて考えることにする．量子ウォークの空間は, tail 付のグラフ $\tilde{G}=(\tilde{V},\tilde{A})$ の対称有向辺でその標準基底がラベル付けされたベクトル空間 $\mathbb{C}^{\tilde{A}}$ とする．時間発展は, 次に定義する $\mathbb{C}^{\tilde{A}}$ 上のユニタリ作用素 U を用いて, 時刻 n での確率振幅を $\psi_n\in\mathbb{C}^{\tilde{A}}$ とすると, $\psi_{n+1}=U\psi_n$ となる．任意の頂点 $u\in\tilde{V}$ において, $\{a\in\tilde{A}\mid t(a)=u\}=\{a_1,\dots,a_\kappa\}$ (κ は $\tilde{G}$ での u の次数) とおくと,

$$\begin{bmatrix}\psi_{n+1}(\bar{a}_1)\\ \vdots \\ \psi_{n+1}(\bar{a}_\kappa)\end{bmatrix}=\mathrm{Gr}(\kappa)\begin{bmatrix}\psi_n(a_1)\\ \vdots \\ \psi_n(a_\kappa)\end{bmatrix}$$

*Email: segawa-etsuo-tb@ynu.ac.jp. This work is partially supported by Grant-in-Aid of Scientific Research (C) Japan Society for the Promotion of Science (Grant No. 19K03616)

ここで, $\mathrm{Gr}(\kappa)=(2/\kappa)J_\kappa-I_\kappa$ で, J_κ, I_κ はそれぞれ全ての成分が 1 の行列, 単位行列である. ここで, 初期状態は tail の本数を r とすると,

$$\psi_0(a)=\begin{cases}\alpha_1 & : a \text{ が } 1 \text{ 番目の tail の } G_0 \text{ に向かっていく有向辺}\\ \vdots & \\ \alpha_r & : a \text{ が } r \text{ 番目の tail の } G_0 \text{ に向かっていく有向辺}\\ 0 & : \text{otherwise}\end{cases}$$

そのときのグラフ表面での散乱は次のようになる.

Theorem 1. [2] *Tail* の本数を r とする. この *tail* からのそれぞれの入力を $\alpha_1,\dots,\alpha_r\in\mathbb{C}$, そして, 時刻無限大での *tail* への 出力を $\beta_1,\dots,\beta_r\in\mathbb{C}$ とすると,

$$\begin{bmatrix}\beta_1\\ \vdots\\ \beta_r\end{bmatrix}=\mathrm{Gr}(r)\begin{bmatrix}\alpha_1\\ \vdots\\ \alpha_r\end{bmatrix}.$$

つまり, 時間が十分に経過したときに, グラフが一点に見えるくらい遠いところで $\tilde{G}$ のダイナミクスを大域的に眺めると, グラフの各頂点で行われている Grover walk の局所的なダイナミクスが再現されていることになる. 特に, 次の節以降考察する tail の本数 $r=2$ のときは, 常に完全透過になる. これ自体も 興味を引くものではあるが, 残念ながら, この散乱の情報からグラフの内部構造に関する情報が得られない. つまり tail がグラフの表面に何本ついていることしか反映されていない. そこでここでは, 量子ウォークの定常状態が電気回路によって記述されること [2] を用いて, この量子ウォークの定常状態からグラフの特徴の抽出を試みる.

2 主結果

グラフの表面での量子ウォーカーの定常状態の様子は Grover walk の場合, Theorem 1 で明らかになった. グラフの内部での量子ウォーカーがどのくらい滞在しているかに焦点を当てる. そもそも量子ウォーカーは内部に存在するのだろうか？

Definition 1. 定常状態を $\psi_\infty:=\lim_{n\to\infty}\psi_n$ とおく. 量子ウォークの内部グラフ G_0 でのエネルギー $\mathcal{E}_{QW}(G_0;\delta V)$ を次のように定める.

$$\mathcal{E}_{QW}(G_0;\delta V):=\frac{1}{2}\sum_{a\in A_0}|\psi_\infty(a)|^2.$$

簡単のため, これ以降, tail の本数 $r=2$ とし, $\delta V=\{u_1,u_2\}$ とする. ここで $u_1\neq u_2$ とする. 内部グラフ G_0 の全域木の個数を $\kappa_1(G_0)$ とする. そして u_1,u_2 をそれぞれ含む, 2 つの木で構成される全域林の個数を $\kappa_2(G_0;\delta V)$ とする. ここで, u_1 と u_2 は同じ木には含まれないことに注意. またここでは 1 頂点のみも木とみなす. G_0 の無向辺の個数を $|E_0|$ とする. すると 量子ウォーカーにとって「居心地の良い」グラフの内部構造と出入り口の付き方は, $\kappa_2(G_0;\delta V)/\kappa_1(G_0)$ が大きくて, 枝の本数が多いものであるという次のような主張が成立する.

Theorem 2. *Tail の本数 $r=2$ とし, $\delta V=\{u_1,u_2\}$ で, それぞれの tail から一定値 α_1,α_2 が常に流入してくるとする．また, この 2 本の tail は異なる頂点に接続しているとする．すると, Grover walk の場合, 次のようになる．*

$$\mathcal{E}_{QW}(G_0;\delta V)=\left|\frac{\alpha_1-\alpha_2}{2}\right|^2\frac{\kappa_2(G_0;\delta V)}{\kappa_1(G_0)}+\left|\frac{\alpha_1+\alpha_2}{2}\right|^2|E_0|.$$

Remark 1. *Theorem 2 より, $\mathcal{E}_{QW}(G_0;\delta V)=0$ ならば, 入力値は, $\alpha_1-\alpha_2=0$ かつ $\alpha_1+\alpha_2=0$ であるが, これを同時に満たす入力値は明らかに 0 以外存在しない．したがって, 0 でないものを入力する限り, 常に $\mathcal{E}_{QW}(G_0;\delta V)>0$ であり, 量子ウォーカーはグラフ内部に必ず存在することになる．*

例：$G_0=C_3$(頂点 3 のサイクル) の場合．
対称有向辺のラベルを次のようにとる．$A_0=\{a_0,a_1,a_2,\bar{a}_0,\bar{a}_1,\bar{a}_2\}$ とし, $t(a_0)=o(a_1)$, $t(a_1)=o(a_2)$, $t(a_2)=o(a_0)$．2 本の tail を $u_0:=o(a_0)$, $u_1:=o(a_1)$ につける．すると, G_0 の全域木は $T_1\cong\{a_0,a_1\}$, $T_2\cong\{a_1,a_2\}$, $T_3\cong\{a_2,a_0\}$ の 3 つがある．よって $\kappa_1(G_0)=3$．一方で, G_0 の u_0, u_1 を含む, 2 つの木で構成される全域林は, 1 点でも木とみなすことに注意すると, $\tau_1\cong\{u_0\}\cup\{a_1\}$, $\tau_2:\cong\{u_1\}\cup\{a_2\}$ の 2 つ．よって $\kappa_2(G_0;\delta V)=2$. ($\tau_3\cong\{o(a_2)\}\cup\{a_0\}$ は u_0,u_1 が部分木 $\{a_0\}$ に同時に含まれるので, 除外.) C_3 の辺の本数は 3 なので, $|E_0|=3$．したがって,

$$\mathcal{E}_{QW}(C_3;\delta V)=\frac{2}{3}\left|\frac{\alpha_1-\alpha_2}{2}\right|^2+3\left|\frac{\alpha_1+\alpha_2}{2}\right|^2.$$

同様な考え方で, 一般に $C_N(N\geq 3)$ で頂点 $o(a_0)$, $o(a_j)$ $(j\neq 0)$ に tail が付いている場合は,

$$\mathcal{E}_{QW}(C_N;\delta V)=\frac{j(N-j)}{N}\left|\frac{\alpha_1-\alpha_2}{2}\right|^2+N\left|\frac{\alpha_1+\alpha_2}{2}\right|^2.$$

このようにして, ある意味グラフを注意深くよく眺めて 2 つの特徴量を数え上げることで, 量子ウォークの内部グラフでのエネルギーを計算できることがわかった. ところで, 量子ウォークにとって居心地の良い $\kappa_2(G_0;\delta V)/\kappa_1(G_0)$ が大きなグラフとはどのようなものだろうか？これを量子ウォークのときと同じグラフ上で, 均等な確率で各ステップで隣接頂点に推移するランダムウォークの立場から考察する. 頂点 u_1 から出るランダムウォーカーが, 頂点 u_1 に再び戻ってくる前に, 頂点 u_2 に到達する確率を $P_{esc}(G_0;u_1,u_2)$ とする．これをランダムウォークの脱出確率と呼ぶ. すると, 次のような $\mathcal{E}_{QW}(G_0;\delta V)$ の別表現が与えられる.

Corollary 1. *Theorem 2 と同じ設定で, 次が成立する.*

$$\mathcal{E}_{QW}(G_0;\delta V)=\left|\frac{\alpha_1-\alpha_2}{2}\right|^2\frac{1}{d(u)P_{esc}(G_0;u_1,u_2)}+\left|\frac{\alpha_1+\alpha_2}{2}\right|^2|E_0|.$$

Proof. Theorem 2 の右辺の第 1 項は次の節で明らかになるように, u_1 を入り口, u_2 を出口とし, $q_1:=(\alpha_1-\alpha_2)/2$ がその入り口から流れ込む, 各枝に抵抗値 1 の抵抗が配置された電気回路の消費エネルギー $\mathcal{E}_{EC}$ に相当する．そこで, 頂点 u_1 から q_1 の電流が流れて, u_2 から出ていく電気回路 G_0 の有効抵抗を R_{eff} とすると, その電気消費エネルギは $\mathcal{E}_{EC}=|q_1|^2R_{eff}$ と書き表される．さらに, 脱出確率と, 有効抵抗の間には回路の抵抗値がすべて 1 のとき, $P_{esc}(G_0;u_1,u_2)=1/(d(u_1)R_{eff})$ となることが知られている [1]．したがって, $\mathcal{E}_{EC}=|q_1|^2/(d(u_1)P_{esc}(G_0;u_1,u_2))$. これを Theorem 2 の右辺に代入すれば結果が得られる． $\square$

このことから, 量子ウォークにとって居心地のよいグラフは, ランダムウォークにとっては出口の見つかりにくいグラフということになる. また, 電気回路で文脈で言えば、有効抵抗の大きな電流が流れにくいグラフともいえる. このような量子ウォークの挙動と背後にあるランダムウォークの挙動との比較に関して, 例えばその再帰性について [3] でも議論している.

3 主結果の証明

Tail が r 本あるとする. 各 Tail で, G_0 の頂点が終点である有向辺を $e_1, \dots, e_r$ とする. 量子ウォークの入力として, それぞれの tail から $\alpha_1, \dots, \alpha_r$ が流れ込んでくるとする. そしてこの算術平均を $\mathrm{ave}(\alpha_1, \dots, \alpha_r)$ とおく. すると次の定理が本質的である. この証明は [2] を参照.

Theorem 3. [2] 内部グラフ G_0 の各辺に抵抗値 1 を配置した電流 $\mathrm{j}(\cdot) : \tilde{A} \to \mathbb{C}$ を考える. つまり,

(1) 任意の頂点 $v \in \tilde{V}$ に対して,

$$\sum_{a \in \tilde{A} \,:\, t(a)=u} \mathrm{j}(a) = 0 \quad \text{(キルヒホッフ電流則)}$$

(2) 任意のサイクル $c = (a_1, \dots, a_k)$ に対して,

$$\sum_{k=1}^{s} \mathrm{j}(a_k) = 0 \quad \text{(キルヒホッフ電圧則)}$$

を満たす. ただし, G_0 の 境界においては $\mathrm{j}(e_k) = \alpha_k - \mathrm{ave}(\alpha_1, \dots, \alpha_r)$ $(k = 1, \dots, r)$ とする. このとき, 量子ウォークの定常状態 ψ_∞ は次のように書き表される.

$$\psi_\infty(a) = \mathrm{j}(a) + \mathrm{ave}(\alpha_1, \dots, \alpha_r).$$

そこで, これを利用して $r = 2$ の場合に, $\mathcal{E}_{QW}(G_0, \delta V)$ を以下で計算する.

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}_{QW}(G_0; \delta V) &= \frac{1}{2} \sum_{a \in A_0} |\psi_\infty(a)|^2 \\
&= \frac{1}{2} \sum_{a \in A_0} \left| \mathrm{j}(a) + \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2} \right|^2 \\
&= \frac{1}{2} \sum_{a \in A_0} |\ \mathrm{j}(a)\ |^2 + |E_0| \ \left| \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2} \right|^2 + \mathrm{Re} \sum_{a \in A_0} \overline{(\alpha_1 + \alpha_2)} \mathrm{j}(a) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{a \in A_0} |\ \mathrm{j}(a)\ |^2 + |E_0| \ \left| \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2} \right|^2 \\
&= \frac{\kappa_2(G_0; \delta V)}{\kappa_1(G_0)} \left| \frac{\alpha_1 - \alpha_2}{2} \right|^2 + |E_0| \ \left| \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2} \right|^2
\end{aligned}$$

ここで, 二番目の等式は Theorem 3 を用い, 四番目の等式はキルヒホッフの電流則を用いた. そして, 最後の等式はこの電気回路の消費するエネルギーであることから導かれる (例えば [1, 6, 7]). このことについては知られたことだとは思うが、以下で簡単に説明する.

(最後の等式の証明)
各頂点 u での電位を $\phi(u)$ とおく. 外部から各頂点 $u \in V_0$ に入ってくる電流を $q(u)$ とする. つまり,

$$q(u) = \begin{cases} q_1 & : u = u_1 \\ -q_1 & : u = u_2 \\ 0 & : \text{otherwise} \end{cases}$$

但し, $q_1 = \alpha_1 - \mathrm{ave}(\alpha_1, \alpha_2) = (\alpha_1 - \alpha_2)/2$. すると, 以下のポアソン方程式が成立.

$$L\phi = -q$$

ただし, L は G_0 上のラプラシアン行列で $(Lf)(u) = d(u)f(u) - \sum_{t(a)=u} f(o(a))$. いま、$u_2$ を接地, つまり $\phi(u_2) = 0$ とおいて, L の u_2 に関する行ベクトルと列ベクトルを除去した行列を L' とする. 同様に ϕ, q の u_2 に関する成分を除去したものをそれぞれ ϕ', q' とすれば,

$$\phi' = -{L'}^{-1} q'$$

が成立. クラーメルの公式から $q' = (1\ 0\ \ldots\ 0)^\top$ だから,

$$\phi(u_1) = \phi'(u_1) = -\frac{\det L''}{\det L'} q_1.$$

ここで, L'' は L の u_1, u_2 に関する行ベクトル列ベクトルを除去した行列である. ビネ-コーシーの公式による行列と木に関する定理 (例えば [7] 参照) の帰結より $\det L'' = \kappa_2(G_0; \delta V)$, $L' = \kappa_1(G_0)$ となり,

$$\phi(u_1) = -\frac{\kappa_2(G_0; \delta V)}{\kappa_1(G_0)} q_1,\ \phi(u_2) = 0.$$

全ての抵抗値が 1 のときの電気回路の消費エネルギー $\mathcal{E}_{EC} := (1/2) \sum_{a \in A_0} |\mathrm{j}(a)|^2$ は, $\mathcal{E}_{EC} = \langle \phi, L\phi \rangle$ と書き直せるので,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{EC} &= \langle \phi, L\phi \rangle = \langle \phi, -q \rangle = -\overline{\phi(u_1)} q_1 + \phi(u_2) q_1 \\ &= \frac{\kappa_2(G_0; \delta V)}{\kappa_1(G_0)} |q_1|^2 \end{aligned}$$

となり, 最後の式が導出される. □

4 今後の課題

一定値の流入を受ける, グラフ G_0 上の Grover walk から誘導される電気回路は, 全ての辺に抵抗値が 1 を配置したものである. 逆に, 抵抗値を任意に配置したものを誘導する量子ウォー

クはどのようなものだろうか?実はそれは, Grover walk を拡張した Szegedy walk と呼ばれるものになる [2]. この量子ウォークは電気回路から誘導される可逆なランダムウォークによって構成される.

この量子ウォークモデルにおいて, 現在考察中の今後の課題を次に挙げておく.

(1) 非可逆なランダムウォークから誘導される量子ウォークの定常状態の詳細な性質*

(2) この量子ウォークから誘導される成長するネットワークの構成と解析†

(3) 外部からの流入値が時間変動する場合

(4) この量子ウォークを光学素子である半波長板と偏向ビームスプリッタを用いて実装する実験装置のデザイン

この報告は, 2020 RIMS 共同研究 (公開型)「量子場の数理とその周辺」における講演内容でです. 有益なコメントを頂いた樋口雄介さん (学習院大学), Mohamed Sabri さん (東北大学) にお礼を申し上げます.

References

[1] Doyle, G. and Snell, L.: Random Walks and Electric Networks, Carus Mathematical Monographs, Book 22, Mathematical Association of America(1984).

[2] Higuchi, Yu., Mohamed, S., Segawa, E.: Electric circuit induced by quantum walks, Journal of Statistical Physics **181** (2020) pp.603—617

[3] Higuchi, Yu., Segawa, E.: Dynamical system induced by quantum walks, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **52** (39) (2019)

[4] Higuchi, Yu., Segawa, E.: The spreading behavior of quantum walks induced by drifted random walks on some magnifier graph, Quantum Information and Computation **17** (2017) 0399–0414.

[5] 金子 悠人: 「量子ウォークによって誘導される成長ネットワークの構成」, 横浜国立大学 理工学部 数理科学 EP 卒業研究論文 (2021)

[6] 熊谷 隆: 確率論 (新しい解析学の流れ), 共立出版 (2003)

[7] 高崎 金久: 線形代数とネットワーク, 日本評論社 (2017)

*グラフ表面における散乱は [2] で得られており, さらにこの論文の最後の節の中などで, 具体例で考察している.

†[5] でこの構成方法を提案し, 数値計算を行っている