2008年度 修士論文

1次元量子ウォークとガウスの超幾何関数

One-dimensional quantum walks and Gauss hypergeometric functions

中央大学大学院　理工学研究科
博士課程前期課程　物理学専攻
大谷　諭

目 次

第1章　Introduction

　１次元２状態量子ウォークモデルを考える [1].
ユニタリー行列 $U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in U(2)$ と初期 qubit $\varphi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ が原点に与えられたとき、
時刻 $n \in 0, 1, 2, \cdots$ に格子点 $k \in \mathbf{Z} \equiv \cdots, -2, -1, 0, 1, 2, \cdots$ における粒子の存在確率は

$$P_n(k) = (\Xi_n(k)\varphi)^* \Xi_n(k)\varphi$$

で与えられる. ただし $\Xi_n(k) = \begin{pmatrix} a_n(k) & b_n(k) \\ c_n(k) & d_n(k) \end{pmatrix}$ の各成分は次の漸化式を満たす.

$$\begin{aligned}
a_{n+1}(k) &= aa_n(k+1) + bc_n(k+1) \\
b_{n+1}(k) &= ab_n(k+1) + bd_n(k+1) \\
c_{n+1}(k) &= ca_n(k-1) + dc_n(k-1) \\
d_{n+1}(k) &= cb_n(k-1) + bd_n(k-1)
\end{aligned}$$

初期値は

$$\begin{aligned}
a_1(k) &= a\delta_{-1,k} \\
b_1(k) &= b\delta_{-1,k} \\
c_1(k) &= c\delta_{1,k} \\
d_1(k) &= d\delta_{1,k}
\end{aligned}$$

である. ただし $\delta_{m,n}$ はクロネッカーのデルタである.
本論文ではこの漸化式の解が一般にガウスの超幾何関数で与えられることを示す.
$b_n(k)$ について具体的に例示すると

$$\begin{aligned}
b_n(k) = \quad b \quad & a^{-n/2-k/2-1} d^{n/2+k/2} \begin{pmatrix} n-1 \\ n/2+k/2 \end{pmatrix} \\
\times \quad & F(-n/2-k/2, -n/2+k/2+1; -n+1; \Delta/ad)
\end{aligned}$$

である. ただし $\Delta = \det U = ad - bc$ である.
古典的なランダムウォークには二項係数が対応しているが量子ウォークには上記のように
ガウスの超幾何関数が対応している.

第2章　１次元２状態の量子ウォーク模型

2.1　古典的なランダムウォーク

１次元の格子点上を確率 p で動き確率 q で左に動くランダムウォークはを考える．ステップ数を n、位置を k としたとき, 粒子の存在確率は $P_n(k)$ は、以下のように二項分布によって与えられる.

$$P_n(k) = \binom{n}{k} p^k q^{n-k} \tag{2.1}$$

古典的なランダムウォークにおいて $p = q = \frac{1}{2}$ のときその分布は下のようなパスカルの三角形になる.

$$\begin{array}{ccccccccccc}
 & & & & & 1 & & & & & \\
 & & & & 1 & & 1 & & & & \\
 & & & 1 & & 2 & & 1 & & & \\
 & & 1 & & 3 & & 3 & & 1 & & \\
 & 1 & & 4 & & 6 & & 4 & & 1 & \\
1 & & 5 & & 10 & & 10 & & 5 & & 1
\end{array}$$

表 2.1:

こうして見ると中央に多く存在し早い段階（ステップ数）からガウス分布の様相をなしていることがわかる。次に $n \to \infty$ という極限状態にあたるガウス分布をあげておく。

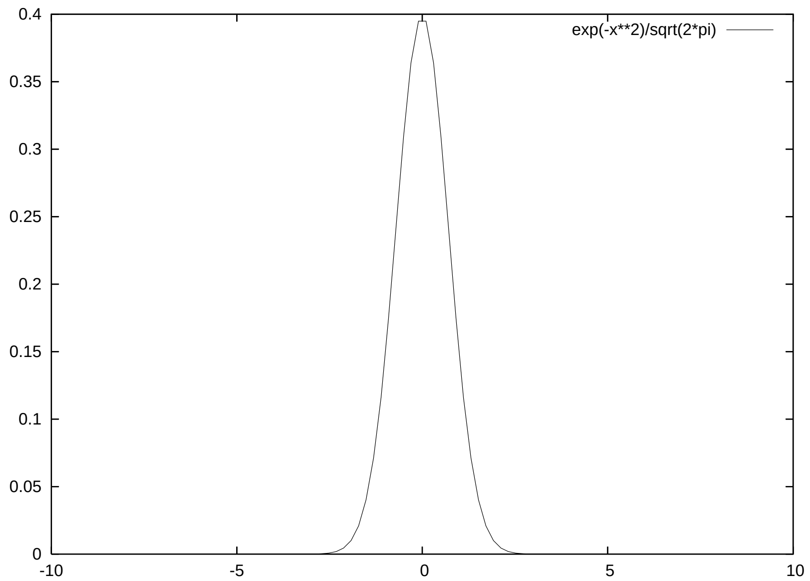

図 2.1: ガウス分布

2.2 量子ウォークの導入

古典的なランダムウォークは各格子点上における粒子の存在の有無という捕らえ方もできる。. 量子ウォークではさらにその点において左向きか右向きかという「状態」を持たせる. こうして粒子に「有るか無いか」「左向きか右向きか」という 2 状態を持たせる. ここで U という以下のようなユニタリー行列を考える.

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in U(2), \tag{2.2}$$

ただし $a, b, c, d \in \mathbf{C}$。この行列 U を以下のように分ける.

$$U = P + Q \tag{2.3}$$

$$P = \begin{pmatrix} a & b \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ c & d \end{pmatrix} \tag{2.4}$$

このとき行列 P と行列 Q は古典的なランダムウォークでは左に行く確率 p と右に行く確率 q にそれぞれ対応するものである. 量子ウォークでは粒子がステップ数 n, 位置 k にある確率 $P_n(k)$ は以下のように表される.

$$P_n(k) = (\Xi_n(k)\varphi)^*\Xi_n(k)\varphi \tag{2.5}$$

*はエルミート共役（共役転置）を表す.$\Xi_n(k)$ と φ は以下のような式で表される.

$$\Xi_n(k) = \begin{pmatrix} a_n(k) & b_n(k) \\ c_n(k) & d_n(k) \end{pmatrix} = \sum_{l_j, m_j} P^{l_1}Q^{m_1}P^{l_2}Q^{m_2}\cdots P^{l_n}Q^{m_n} \tag{2.6}$$

$$\varphi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, (\alpha, \beta \in \mathbf{C} : |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1) \tag{2.7}$$

l と m はそれぞれ右に行く回数と左に行く回数に相当し $l + m = n, -l + m = k$ を満たす. つまりこの $\Xi_n(k)$ はステップ数 n で位置 k に至るまでの経路 (path) の合計を表す式である. 量子ウォークではこの経路の合計に力学でいうところの初期条件に当たる初期キュービット (qubit) をかけることで確率が求められる.

イメージしやすいように具体的な例をあげる. 古典的なランダムウォークでいうところの $p = q = \frac{1}{2}$ に相当するものが

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \tag{2.8}$$

というアダマール行列（Hadamard matrix）である。ここでは初期キュービットを分布が対称になるように

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \tag{2.9}$$

ととる。ただし $i = \sqrt{-1}$ である. この量子ウォークの振る舞いを具体的に書くと

					1					
				1		1				
			1		2		1			
		1		3		3		1		
	1		6		2		6		1	
1		11		4		4		11		1

表 2.2:

というようになる. 最初こそ古典と同じように振舞うがピークが次第に両端に寄っていく様子が確認できる. 200 ステップ後のものを図 2.2 に示した.

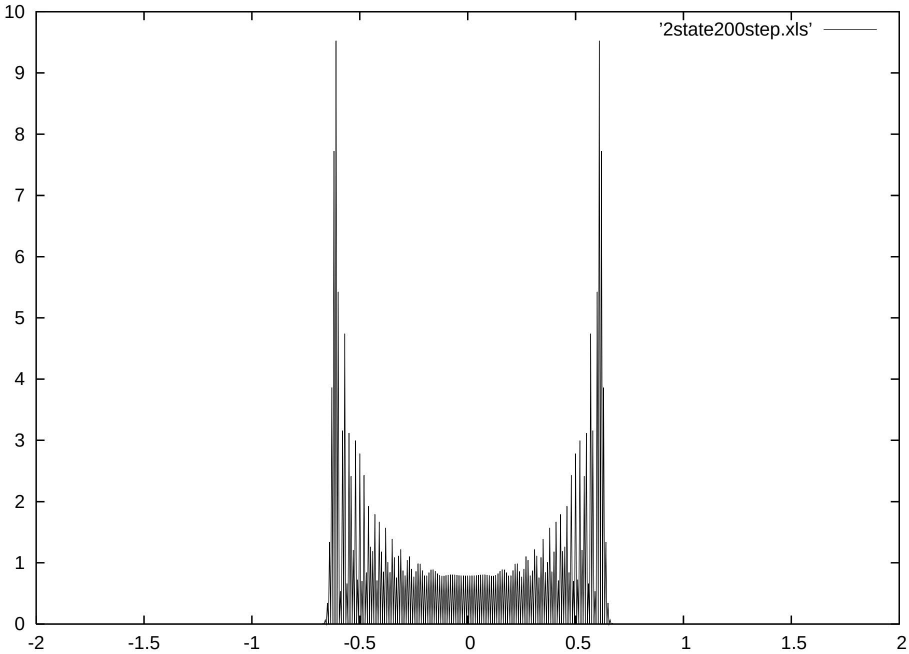

図 2.2: 時刻 200 ステップの量子ウォークの分布

$\Xi_n(k)$ に対して陽な表式が得られればそれに初期キュービット φ をかけることによって (2.5) に従って $\P_n(k)$ が求められる．横浜国立大学の今野紀雄氏によってこの $\Xi_n(k)$ に対して以下のように表式が与えられている．

$$\Xi_n(k) = a^l \bar{a}^m \Delta^m \sum_{\gamma=1}^{l\wedge m} \binom{l-1}{\gamma-1} \binom{m-1}{\gamma-1} \left[\frac{l-\gamma}{a\gamma} P + \frac{m-\gamma}{\Delta\bar{a}\gamma} Q - \frac{1}{\Delta b} R + \frac{1}{b} S \right] \tag{2.10}$$

但し,$l = \frac{1}{2}(n-k)$,$m = \frac{1}{2}(n+k)$,$\Delta = (ad-bc)$ であり,

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \text{として、}$$

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

この式に関しては同氏著の [1]「量子ウォークの数理」（産業図書）に詳しく解説されている．今回私はこの $\Xi_n(k)$ を上記の方法とは違った方法で求めることに成功した. 次のセクション以降でその方法について紹介したい.

2.3 漸化式

$n+1$ ステップ目に位置 k に至るまでの経路の合計は

$$\Xi_{n+1}(k) = P\Xi_n(k+1) + Q\Xi_n(k-1) \tag{2.11}$$

という式を満たすのは明らかである. これは 2×2 の行列に対する両辺の漸化式であるので成分を計算すると以下のようになる.

$$\begin{aligned}
a_{n+1}(k) &= aa_n(k+1) + bc_n(k+1) &(2.12)\\
b_{n+1}(k) &= ab_n(k+1) + bd_n(k+1) &(2.13)\\
c_{n+1}(k) &= ca_n(k-1) + dc_n(k-1) &(2.14)\\
d_{n+1}(k) &= cb_n(k-1) + bd_n(k-1) &(2.15)
\end{aligned}$$

これらから次の式が求められる.

$$\begin{aligned}
a_{n+2}(k) - aa_{n+1}(k+1) - da_{n+1}(k-1) + (ad-bc)a_n(k) &= 0 &(2.16)\\
b_{n+2}(k) - ab_{n+1}(k+1) - db_{n+1}(k-1) + (ad-bc)b_n(k) &= 0 &(2.17)\\
c_{n+2}(k) - ac_{n+1}(k+1) - dc_{n+1}(k-1) + (ad-bc)c_n(k) &= 0 &(2.18)\\
d_{n+2}(k) - ad_{n+1}(k+1) - dd_{n+1}(k-1) + (ad-bc)d_n(k) &= 0 &(2.19)
\end{aligned}$$

なお $a_n(k)$ 等の初期条件は以下のようである.

$$\begin{aligned}
a_1(k) &= a\delta_{-1,k} &(2.20)\\
b_1(k) &= b\delta_{-1,k} &(2.21)\\
c_1(k) &= c\delta_{1,k} &(2.22)\\
d_1(k) &= d\delta_{1,k} &(2.23)
\end{aligned}$$

2.4 漸化式の解の一般形

上記の漸化式は解くことができて解は以下のようになる.

$$a_n(k) = a^{\frac{n}{2}-\frac{k}{2}} d^{\frac{n}{2}+\frac{k}{2}} \binom{n-1}{\frac{n}{2}+\frac{k}{2}} F(-\frac{n}{2}-\frac{k}{2}, -\frac{n}{2}+\frac{k}{2}+1; -n+1; \frac{\Delta}{ad})$$
$$-\Delta \cdot a^{\frac{n}{2}-\frac{k}{2}-1} d^{\frac{n}{2}+\frac{k}{2}-1} \binom{n-2}{\frac{n}{2}+\frac{k}{2}-1} F(-\frac{n}{2}-\frac{k}{2}+1, -\frac{n}{2}+\frac{k}{2}+1; -n+2; \frac{\Delta}{ad}) \quad (2.24)$$

$$b_n(k) = b \cdot a^{\frac{n}{2}-\frac{k}{2}-1} d^{\frac{n}{2}+\frac{k}{2}} \binom{n-1}{\frac{n}{2}+\frac{k}{2}} F(-\frac{n}{2}-\frac{k}{2}, -\frac{n}{2}+\frac{k}{2}+1; -n+1; \frac{\Delta}{ad}) \quad (2.25)$$

$$c_n(k) = c \cdot a^{\frac{n}{2}-\frac{k}{2}} d^{\frac{n}{2}+\frac{k}{2}-1} \binom{n-1}{\frac{n}{2}+\frac{k}{2}-1} F(-\frac{n}{2}-\frac{k}{2}+1, -\frac{n}{2}+\frac{k}{2}; -n+1; \frac{\Delta}{ad}) \quad (2.26)$$

$$d_n(k) = a^{\frac{n}{2}-\frac{k}{2}} d^{\frac{n}{2}+\frac{k}{2}} \binom{n-1}{\frac{n}{2}+\frac{k}{2}-1} F(-\frac{n}{2}-\frac{k}{2}+1, -\frac{n}{2}+\frac{k}{2}; -n+1; \frac{\Delta}{ad})$$
$$-\Delta \cdot a^{\frac{n}{2}-\frac{k}{2}-1} d^{\frac{n}{2}+\frac{k}{2}-1} \binom{n-2}{\frac{n}{2}+\frac{k}{2}-1} F(-\frac{n}{2}-\frac{k}{2}+1, -\frac{n}{2}+\frac{k}{2}+1; -n+2; \frac{\Delta}{ad}) \quad (2.27)$$

ただし $F(\alpha, \beta; \gamma; z)$ は以下で定義されるガウスの超幾何関数である。

$$F(\alpha, \beta; \gamma; z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha+n)\Gamma(\beta+n)}{\Gamma(\gamma+n)} \frac{z^n}{n!}$$

2.5　量子二項分布

古典的なランダムウォークは今回の量子ウォークの表記に対応させると

$$
\begin{aligned}
1 &= (p+q)^n \\
&= \sum_{r,l,r+l=n} \binom{n}{r} p\ rq^l \\
&= \sum_{k=-n}^{n} \binom{n}{\frac{1}{2}(n+k)} p^{\frac{1}{2}(n+k)} q^{\frac{1}{2}(n-k)} \\
&= \sum_{k=-n}^{n} \xi_n(k) \qquad (2.28)
\end{aligned}
$$

と書ける. 一方量子ウォークの方を改めて書くと

$$
\begin{aligned}
U &= (P+Q)^n \\
&= \sum_{l_j,m_j} P^{l_1} Q^{m_1} P^{l_2} Q^{m_2} \cdots P^{l_n} Q^{m_n} \\
&= \sum_{k=-n}^{n} \Xi_n(k) \qquad (2.29)
\end{aligned}
$$

古典における確率 1 が量子の方では $U^*U = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ に対応している.

第3章　証明

この章では2章で示した漸化式の解の一般形の証明を2つの方法でしたい.

3.1　母関数法

(2.12) 式の両辺に $x^n y^k$ を掛け n と k について和をとることによって, 以下のような母関数を導入する.

$$\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{k=-\infty}^{\infty} a_n(k)x^n y^k = G_a(x,y) \tag{3.1}$$

(2.13)(2.14)(2.15) についても同様に母関数をとり整理すると以下のようになる.

$$G_a(x,y) = \frac{-(ad-bc)x^2y+ax}{(ad-bc)x^2y-(a+dy^2)x+y} \tag{3.2}$$

$$G_b(x,y) = \frac{bx}{(ad-bc)x^2y-(a+dy^2)x+y} \tag{3.3}$$

$$G_c(x,y) = \frac{cxy^2}{(ad-bc)x^2y-(a+dy^2)x+y} \tag{3.4}$$

$$G_d(x,y) = \frac{-(ad-bc)x^2y+dxy^2}{(ad-bc)x^2y-(a+dy^2)x+y} \tag{3.5}$$

この母関数を解くと以下が得られた.

$$a_n(k) = a\cdot T\left(\frac{1}{2}(n-1),\frac{1}{2}(k+1)\right)-\Delta\cdot T\left(\frac{1}{2}(n-2),\frac{1}{2}k\right) \tag{3.6}$$

$$b_n(k) = b\cdot T\left(\frac{1}{2}(n-1),\frac{1}{2}(k+1)\right) \tag{3.7}$$

$$c_n(k) = c\cdot T\left(\frac{1}{2}(n-1),\frac{1}{2}(k-1)\right) \tag{3.8}$$

$$d_n(k) = d\cdot T\left(\frac{1}{2}(n-1),\frac{1}{2}(k-1)\right)-\Delta\cdot T\left(\frac{1}{2}(n-2),\frac{1}{2}k\right) \tag{3.9}$$

(3.10)

ただしここで

$$T(n,k) \quad = \quad \sum_{\gamma=|k|}^{n} \binom{n+\gamma}{2\gamma}\binom{2\gamma}{\gamma+k} a^{\gamma-k} d^{\gamma+k} (-\Delta)^{n-\gamma} \tag{3.11}$$

である. この $T(n,k)$ は以下のようにガウスの超幾何関数で表せるのである.

$$T(n,k) = a^{n-k} d^{n+k} \binom{2n}{n+k} F(-n-k, -n+k; -2n; \frac{\Delta}{ad}) \tag{3.12}$$

これを (3.6)(3.7)(3.8)(3.9) に代入すると漸化式の解である (2.24)(2.25)(2.26)(2.27) が得られる.

3.2 超幾何関数の漸化式

超幾何関数の助変数 α, β, γ に関する漸化式 (Gauss の漸化式) を用いることでも証明できる. (2.23) を (2.15) に代入し整理すると以下のようになる.

$$\begin{aligned}\gamma(-\gamma+1)F(\alpha,\beta;\gamma-1;z) \quad &- \quad \gamma(\alpha-\gamma+1)F(\alpha,\beta+1;\gamma;z) \\ +\alpha\gamma F(\alpha+1,\beta;\gamma;z) \quad &+ \quad z(\alpha-\gamma+1)\alpha F(\alpha+1,\beta+1;\gamma+1,z) = 0 \end{aligned} \tag{3.13}$$

ただし $\alpha = -\frac{n}{2} - \frac{k}{2}, \beta = -\frac{n}{2} + \frac{k}{2} + 1, \gamma = -n, z = \frac{\Delta}{ad}$ としている. これは岩波数学公式 [2] にある

$$\gamma[F(\alpha,\beta+1;\gamma;z) - F(\alpha,\beta;\gamma;z)] = \alpha z F(\alpha+1,\beta+1;\gamma+1;z) \tag{3.14}$$

$$(\gamma-\alpha-1)F(\alpha,\beta;\gamma;z) + \alpha F(\alpha+1,\beta;\gamma;z)] = (\gamma-1)F(\alpha,\beta;\gamma-1;z) \tag{3.15}$$

という 2 式の組み合わせに他ならない. 同様にして $c_n(k)$ についても証明できる. (2.11)(2.12) から $b_n(k)$ と $c_n(k)$ がわかれば $a_n(k)$ と $d_n(k)$ についても求められることは明らかである.

参考文献

[1] 今野紀雄：量子ウォークの数理, 産業図書 (2008).

[2] 森口繁一・宇田川*久・一松信：岩波数学公式　　特殊函数, 岩波書店 (1960).

(*) 宇田川氏のお名前の漢字は金偏に圭という字.

謝辞

指導教官である香取眞理先生には言葉にできないほど感謝しています. 自分に甘い私に対して厳しくも優しい姿勢で叱咤激励し続けてくださいました. また研究への議論にはお忙しい中, 時間を惜しまず付き合って下さり, 様々なセミナーに参加する機会を与えて下さりました. 自分の専門という枠組みに囚われず, 多くの物事を自分のものとして吸収し応用しようという姿勢を見ることができたことが何よりも得難い経験だったように思います.

横浜国立大学の今野紀雄先生には, 論文の投稿や研究を進めるにあたり, 最新の研究の報告や助言を数多く頂きました. 感謝いたします. 香取研究室の小林奈央樹さんには, 研究を進めるにあたり, 多くの助言を頂きました. また日頃から様々な相談に乗って頂きました. 感謝いたします. 松下貢先生にはセミナーで非常にお世話になり, そこでは貴重なお話を伺うことができました. 感謝いたします. 香取研究室の和泉南さんにも感謝します. 何かに付けて行動が遅い私に色々と世話を焼いてくれたことは感謝してもしきれません. また香取研究室の佐藤史仁君、山崎純一君にも支えて頂きました. 08 年度の卒研生として共同研究した伊藤塊君と武田聡君にも感謝します. 特に武田聡君との数多く議論は研究内容への理解を深めることに繋がりました. 感謝いたします.

最後になりますが, 私を大学院へ通わせてくれた家族, 特に母には深く感謝いたします.