固有値を使った多次元量子ウォークの局在化の解析について

船川　大樹 [*]

概 要

離散時間で時間発展する多次元量子ウォークを考える．本講演ではまず多次元量子ウォークの時間発展を記述するユニタリ作用素 U を紹介し，U の局在化について考察する．局在化とは無限の時間発展を繰り返した先で，粒子がある位置に残り続ける現象である．本講演では U の固有値の存在についてを調べる．更に U のスペクトルと局在化の関係性について述べ，U が局在化を起こす十分条件を紹介する．尚，本研究は北海道大学の布田徹氏と信州大学の鈴木章斗氏との共同研究である．

1　モデルの定義

まず，次のようにして状態が時間発展する 1 次元 2 状態離散時間量子ウォークを考える：

$$\Psi_{t+1}(x) = P(x+1)\Psi_t(x+1) + Q(x-1)\Psi_t(x-1) + R(x)\Psi(x). \tag{1}$$

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 $\ell^2(\mathbb{Z};\mathbb{C}^2) = \{\Psi : \mathbb{Z} \to \mathbb{C}^2 \mid \sum_{x\in\mathbb{Z}} \|\Psi(x)\|^2_{\mathbb{C}^2} < \infty\}$ の正規化されたベクトルである．任意の $\Psi \in \ell^2(\mathbb{Z};\mathbb{C}^2)$ に対して，$x \in \mathbb{Z}$ における値を $\Psi(x) \in \mathbb{C}^2$ と表す．さて，任意の $f \in \ell^2(\mathbb{Z})$ に対して $\ell^2(\mathbb{Z})$ 上の平行移動 L を $(Lf)(x) := f(x+1)$ として定義し，$\ell^2(\mathbb{Z};\mathbb{C}^2)$ 上のシフト作用素 S を

$$S = \begin{pmatrix} pI & qL \\ \bar{q}L^* & -pI \end{pmatrix}$$

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，コイン作用素 C を行列 $C(x)$ による $\ell^2(\mathbb{Z};\mathbb{C}^2)$ 上の掛け算作用素とする．このとき，状態の時間発展 (1) は

$$U = SC$$

で定義される $\ell^2(\mathbb{Z};\mathbb{C}^2)$ 上のユニタリ作用素を用いて表すことができる．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 1 次元 2 状態の離散時間発展 (1) を満たす．
ここで，$\Psi_0 \in \ell^2(\mathbb{Z};\mathbb{C}^2)$ $(\|\Psi_0\| = 1)$ は初期状態である．

*博 (理) 北海道大学大学院理学研究院数学部門（〒 060-0810 札幌市北区北 10 条西 8 丁目，E-mail:funakawa@math.sci.hokudai.ac.jp）

さて, ここで次の量子ウォークを紹介する:

例 1 $R(\theta)=\begin{pmatrix}\cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2)\\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2)\end{pmatrix}$, $S_+=\begin{pmatrix}L^* & 0\\ 0 & I\end{pmatrix}$, $S_-=\begin{pmatrix}I & 0\\ 0 & L\end{pmatrix}$ とするとき，$\mathcal{H}$ 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 *[2]*.

また，上の定義で，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．

上で定義した 1 次元 2 状態離散時間量子ウォークの時間発展を記述するユニタリ作用素 $U=SC$ は，次の意味で，$U_{\mathrm{ss}}(\theta_1,\theta_2)$ の一般化となることがわかる．まず，パウリ行列 $\sigma_1=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$ を用意する．このとき，$p=\sin(\theta_2/2)$，$q=\cos(\theta_2/2)$，$C(x)=R(\theta_1(x))\sigma_1$ 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，$U_{\mathrm{ss}}(\theta_1,\theta_2)$ のユニタリ変換に等しい．

離散時間で時間発展するこの形の 1 次元量子ウォークを多次元化した，以下の量子ウォークを考える．(以下では U, S, C を多次元量子ウォーク用に定義しなおす．)
まず，状態のヒルベルト空間は

$$\mathcal{H}:=\ell^2(\mathbb{Z}^d;\mathbb{C}^{2d})=\left\{\Psi:\mathbb{Z}^d\to\mathbb{C}^{2d}\ \middle|\ \sum_{\mathbf{x}\in\mathbb{Z}^d}\|\Psi(\mathbf{x})\|^2_{\mathbb{C}^{2d}}\right\}$$

で定義する．コイン作用素，シフト作用素はそれぞれ

$$C:=\bigoplus_{\mathbf{x}\in\mathbb{Z}^d}C(\mathbf{x}),\ \ C(\mathbf{x})\in U(\mathbb{C}^{2d}),$$
$$S:=\bigoplus_{j=1}^{d}S_j,\ \ S_j:=\begin{pmatrix}p_jI & q_jL_j\\ \overline{q_j}L_j^* & -p_jI\end{pmatrix}$$

と定義する．ここで，$L_j:\ell^2(\mathbb{Z}^d)\to\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ は $(L_jf)(\mathbf{x}):=f(\mathbf{x}+\mathbf{e}_j)$ と定義される．$\{\mathbf{e}_j\}_j$ は $\mathbb{R}^d$ の標準基底である．また，任意の $j=1,2,\cdots,d$ に対して $p_j\in\mathbb{R},q_j\in\mathbb{C}$ とは $p_j^2+|q_j|^2=1$ を満たす量である．各 $\mathbf{x}\in\mathbb{Z}^d$ に対して，$C(\mathbf{x})$ は随伴行列であるとする．さて，多次元量子ウォークの時間発展を記述するユニタリ作用素を次で定義する：

$$U:=SC.$$

S,C は $\mathcal{H}$ 上のユニタリな自己共役作用素であるから，U は $\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素である．

今回，コイン作用素 C は one-defect と呼ばれる性質を持つとする：

$$C(\mathbf{x}):=\begin{cases}C(\mathbf{0}), & x=\mathbf{0},\\ C_0, & x\neq\mathbf{0}.\end{cases}$$

また，各 $\mathbf{x}\in\mathbb{Z}^d$ に対して $\dim\ker(C(\mathbf{0})-1)=\dim\ker(C_0-1)=1$ であるとする．

この模型の局在化について調べるのが本講演の目的である．
正規化された初期状態 $\Psi_0 \in \mathcal{H}$ に対して，

$$^{\exists}\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d \text{ s.t. } \limsup_{t\to\infty} \| \left(U^t \Psi_0\right)(\mathbf{x}) \|^2 > 0$$

が成り立つときに，局在化が起こるという．$d = 1$, $p = 0$ のとき，よく知られている 1 次元 2 状態量子ウォークとユニタリ同値となり [4]，局在化に関するいくつかの研究がある [3]．今回は $p \neq 0, d \geq 2$ において量子ウォークの局在化について議論する．

2 局在化と discriminant operator

局在化と U のスペクトルの関係を示す次の命題がある [5]：

命題 2.1 時間発展が U で記述されてる量子ウォークが局在化を起こすことと，初期状態 Ψ_0 と U の固有空間がオーバーラップすることは必要十分である．

特に，もし U に固有値があればその固有空間とオーバーラップするように初期状態を取ってくることができる．よって局在化について調べるためには U が固有値を持つことを調べればよいことが分かる．

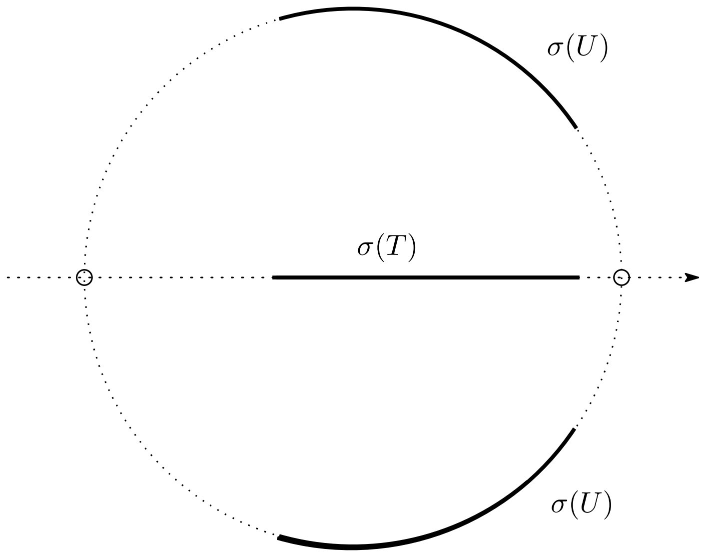
以下で挙げる作用素は U の固有値の有無を調べる際に非常に有用なものである：
各 $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^d$ に対して $\chi(\mathbf{x}) \in \ker(C(\mathbf{x}) - 1)$, $\|\chi(\mathbf{x})\| = 1$ として取る．今は one-defect によって $\chi(\mathbf{x})$ は $\chi(\mathbf{0}) \in \ker(C(\mathbf{0}) - 1)$ と $\chi_0 \in \ker(C_0 - 1)$ の 2 種類である．すると $C(\mathbf{x}) = 2|\chi(\mathbf{x})\rangle\langle\chi(\mathbf{x})| - 1$ が成り立つ．$d : \mathcal{H} \to \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ を $(d\Psi)(\mathbf{x}) := \langle\chi(\mathbf{x}), \Psi(\mathbf{x})\rangle_{\mathbb{C}^{2d}}$ と定義する．このとき，$C = 2d^*d - 1$ が成り立つ．さて，discriminant operator $T:\ \ell^2(\mathbb{Z}^d) \to \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ を次のように定義する：

$$T := dSd^*.$$

discriminant operator は自己共役作用素で $\|T\| \leq 1$ である．この discriminant operator のスペクトルと U のスペクトルには重要な性質がある：

定理 2.2 $\{e^{i \arccos \xi} \mid \xi \in \sigma_{\#}(T)\} \subset \sigma_{\#}(U)$，$\sigma_{\#} = \sigma$ or σ_{p}.

ここで，作用素 A に対して $\sigma(A)$ は A のスペクトルの集合であり，$\sigma_{\mathrm{p}}(A)$ は A の固有値の集合を表す．上の定理は [5, Theorem 3.1] の定理から得られるものである．この関係を図示すると $\sigma(U)$ と $\sigma(T)$ の関係は次のようになる：



以上の定理によって T が固有値を持てば U も固有値を持ち，局在化が起こることが分かった．

3 局在化のための十分条件

本講演では $\chi(\mathbf{x}),\chi(\mathbf{0}),\chi_0 \in \mathbb{C}^{2d}$ を次のように成分表示することにする：

$$\chi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \chi_{1,1}(\mathbf{x}) \\ \chi_{1,2}(\mathbf{x}) \\ \chi_{2,1}(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \chi_{d,2}(\mathbf{x}) \end{pmatrix}, \quad \chi(\mathbf{0}) = \begin{pmatrix} \chi_{1,1}(\mathbf{0}) \\ \chi_{1,2}(\mathbf{0}) \\ \chi_{2,1}(\mathbf{0}) \\ \vdots \\ \chi_{d,2}(\mathbf{0}) \end{pmatrix}, \quad \chi_0 = \begin{pmatrix} \chi_{0,1,1} \\ \chi_{0,1,2} \\ \chi_{0,2,1} \\ \vdots \\ \chi_{0,d,2} \end{pmatrix}.$$

discriminant operator T を計算すると次のような形になる：

$$T = \sum_{j=1}^{d} \Big\{ p_j \left(|\chi_{j,1}|^2 - |\chi_{j,2}|^2 \right) + q_j \overline{\chi_{j,1}} L_j \chi_{j,2} + \left(q_j \overline{\chi_{j,1}} L_j \chi_{j,2} \right)^* \Big\}.$$

ここで，$|\chi_{j,1}|^2$，$|\chi_{j,2}|^2$ とは $|\chi_{j,1}(\mathbf{x})|^2, |\chi_{j,2}(\mathbf{x})|^2$ による掛け算作用素である．
$a(\mathbf{p},\mathbf{x}) := \sum_{j=1}^{d} p_j \left(|\chi_{j,1}(\mathbf{x})|^2 - |\chi_{j,2}(\mathbf{x})|^2 \right)$ とする．ただし，$\mathbf{p} = (p_1, p_2 \cdots, p_d)$ である．T のスペクトルの解析には Feshbach map[1] を使う．$\Pi := |\mathbb{1}_{\{\mathbf{0}\}}\rangle\langle \mathbb{1}_{\{\mathbf{0}\}}|$ とする．T の Feshbach map を次のように定義する：

$$F(\lambda) := \Pi^{\perp} (T - \lambda) \Pi^{\perp} - \Pi^{\perp} T \Pi \left(\Pi (T - \lambda) \Pi \right)^{-1}_{\mathrm{Ran}\Pi} \Pi T \Pi^{\perp}.$$

ただし $F(\lambda)$ は $\lambda \neq a(\mathbf{p},\mathbf{0})$ で well-defined である．Feshbach map には次の重要な特性がある：

定理 3.1 *(V. Bach, J. Fröhlich, I.M. Sigal (1998))*[1, Theorem II.1]
$F(\lambda)\psi = 0$ となるような $\psi \in \mathrm{Ran}\Pi^{\perp} \backslash \{0\} \subset \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ が存在するとき，$\lambda \in \sigma_{\mathrm{p}}(T)$ が成立する．

以上から，定理 3.1 の仮定を満たすような ψ を見つければよい．T が固有値を持つことを示すために次の条件を課す：
任意の $j = 1, 2, \cdots, d$ に対して

$$\begin{cases} \chi_{0,j,1} = \chi_{0,j,2} = 0, \quad \text{or} \\ \chi_{0,j,1} \neq 0,\ \chi_{0,j,2} \neq 0, \quad \dfrac{\chi_{j,1}(\mathbf{0})}{\chi_{0,j,1}} = -\dfrac{\chi_{j,2}(\mathbf{0})}{\chi_{0,j,2}}, \end{cases}$$

が成り立つとする．
　この条件は定理 3.1 での $F(\lambda)\psi = 0$ となる $\psi \in \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ が $\psi \in \mathrm{Ran}\Pi^{\perp} \backslash \{0\}$ を満たすことを保証するものである．

　$a(\mathbf{p},\mathbf{x})$ は今 one-defect によって $\mathbf{x}$ について 2 種類しかない．そこで $a_0(\mathbf{p}) := a(\mathbf{p}, \mathbf{x} \neq \mathbf{0})$ とする．次の主定理は $a(\mathbf{p},\mathbf{0}), a_0(\mathbf{p})$ 及び $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \cdots, q_d)$ に条件を課し, U が局在化を起こすことを述べたものである．

定理 3.2 主定理 *(T.Fuda，D.Funakawa and A.Suzuki (2016))*
次を満たすような $k \in \{1, \cdots, d\}$ が存在すると仮定する*:*

$$\begin{cases} \chi_{0,k,1} \neq 0, \\ \chi_{0,k,2} \neq 0, \end{cases} \qquad \begin{cases} \chi_{k,1}(\mathbf{0}) \neq 0, \\ \chi_{k,2}(\mathbf{0}) \neq 0, \end{cases} \qquad q_k \neq 0.$$

$D := \{(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{C}^d \mid \ p_j^2 + |q_j|^2 = 1, j = 1, 2, \cdots, d, q_k \neq 0\}$ とする．
また，$\mathbf{p}_0 \in \{-1, 1\}^d$ を $a(\mathbf{p}_0, \mathbf{0}) \neq a_0(\mathbf{p})$ を満たすように一つ固定する．
このとき，ある $\delta > 0$ が存在し，$\|(\mathbf{p}, \mathbf{q}) - (\mathbf{p}_0, \mathbf{0})\| < \delta$ を満たす全ての $(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \in D$ に対して，T は固有値を持つ．

参考文献

[1] V. Bach, J. Fröhlich, I.M. Sigal, Renormalization group analysis of spectral problems in quantum field theory, *Adv. Math. 137* (1998) 205298

[2] T. Kitagawa, M. S. Rudner, E. Berg. E. Demler, Exploring topological phases with quantum walks, *Phys. Rev. A* (2010).

[3] 今野 紀雄, 量子ウォーク, 森北出版株式会社 (2014).

[4] H. Ohno, Unitary equivalent classes of one-dimensional quantum walks, *Quantum Inf. Process.* (2016).

[5] E. Segawa, A. Suzuki, Generator of an abstract quantum walk, *Quantum Stud.: Math. Found. 3* (2016) 11-30.