1欠陥付非ユニタリ量子ウォークのスペクトル

松本洋平
(信州大学大学院総合理工学研究科工学専攻)

概 要

量子ウォーク (QW) は古典ランダムウォークの量子版として知られる数理モデルであり，量子コンピュータの発展に伴い，近年活発に研究されている．カイラル対称性を有する QW は，トポロジカル相の観点からも重要である．また、開放量子系の観点から，非ユニタリな QW の研究も進められている．本研究では，1 次元格子上のカイラル対称性を持つ 1 欠陥付非ユニタリ QW に対して，母関数法を用いて固有値問題を解き，スペクトルの計算を行った．

1 導入

量子ウォーク（QW）は，古典ランダムウォークの量子版とみなすことができ，最近では，量子コンピュータなどさまざまな分野に関連して，広く研究されている．そうした応用の観点からも，QW の長時間極限における様子を明らかにするのは重要なことである．QW には，「局在化」と「線型的拡散」といった特徴的な漸近的振舞があるが，それらを表す極限定理が 2 種類ある．1 つ目は，局在化に対応する時間平均極限測度である [1]．Konno [2] らが議論したように，この測度は，QW の定常測度とも関連している．2 つ目は，線型的拡散も記述するリスケールされた弱収束極限定理である [3]．QW の主な解析手法として，フーリエ法 [4]，定留位相法 [5]，CGMV 法 [6]，母関数法 [7] などがある．

一方，QW の固有値は，局在化と深く関連し，スペクトル理論の観点からも重要なテーマである．また，スペクトル散乱理論を応用すると，弱収束極限定理を証明できることが知られている [8]．カイラル対称な QW は，トポロジカル相の研究のために導入された [9]. 近年では，現実の物理系における，外界とエネルギーの出入りがある開放量子系を研究するために，QW が用いられている [7]．開放量子系のハミルトニアンはエルミート性を失うが，QW においては，時間発展のユニタリ性が失われる．そのような，非ユニタリ QW のモデルの 1 つとして，Mochizuki-Kim-Obuse モデルがある [10]．このモデルは光ファイバーのループを用いた実験モデルで，時間発展の 1 ステップごとに系にエネルギーのゲインとロスが発生するモデルである．ユニタリ QW では時間発展のスペクトルが単位円周上にあらわれるが，このモデルでは非ユニタリ性のためにスペクトルが単位円周および実軸上にあらわれる．

本研究では，母関数法の 1 つである”the splitted generating function method（SGF 法）” [11] を用いて，1 次元格子上のカイラル対称な 1 欠陥付非ユニタリ QW の固有値問題を解き，スペクトルも求める．従来，SGF 法は，QW の固有値問題を解き，定常測度を見つけるため

に考案された手法である．また，フーリエ解析を用いて，我々のモデルの本質的スペクトルを導出した．本稿では，先行研究として，$\mathbb{Z}$ 上の 1 欠陥付きユニタリ QW の結果を簡単にレビューをし，その後，我々のモデルと主結果を紹介する．

2　モデル

2.1　$\mathbb{Z}$ 上の量子ウォーク

我々のモデルを導入する前に，$\mathbb{Z}$ 上の 2 状態 QW について，簡単なレビューを行う．まず量子系の状態空間として，2 乗総和可能な $\mathbb{Z}$ 上の $\mathbb{C}^2$-値関数全体のなすヒルベルト空間

$$\mathcal{H} = \ell^2(\mathbb{Z};\mathbb{C}^2) = \left\{ \Psi : \mathbb{Z} \to \mathbb{C}^2 \;\middle|\; \sum_{x\in\mathbb{Z}} \|\Psi(x)\|^2_{\mathbb{C}^2} < \infty \right\}, \quad x \in \mathbb{Z} \tag{2.1}$$

を考える．$\mathcal{H}$ のベクトル Ψ を

$$\Psi(x) = \begin{bmatrix} \Psi^L(x) \\ \Psi^R(x) \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^2$$

のようにあらわす．一般に，$\mathbb{Z}$ 上の 2 状態 QW の時間発展作用素は，$\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素であるシフト作用素 S とコイン作用素 C の積 $U = SC$ で与えられる．ここで，シフト作用素 S とコイン作用素 C を

$$S = \begin{bmatrix} L & 0 \\ 0 & L^* \end{bmatrix}, \quad C = \bigoplus_{x\in\mathbb{Z}} C(x) \tag{2.2}$$

で定義する．上式の L は $\ell^2(\mathbb{Z})$ 上の左シフト作用素で $(Lf)(x) = f(x+1)$ で定義されるユニタリ作用素である．また，L^* はその共役で右シフトになる．また，$C(x)$ は 2 次のユニタリ行列であり，$\mathcal{H}$ を $\oplus_{x\in\mathbb{Z}}\mathbb{C}^2$ と同一視している．

2.2　先行結果

ここでは，先行研究 [11] について紹介する．このモデルのコイン作用素は

$$C(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} & (x = \pm 1, \pm 2, \cdots) \\ \dfrac{\omega}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} & (x = 0, \omega = e^{2i\pi\phi}) \end{cases} \tag{2.3}$$

で定義される．

このモデルの固有値問題

$$U\Psi = \lambda\Psi \tag{2.4}$$

を解き，固有ベクトルが

$$\Psi(x) = \begin{cases} (\theta_s)^x \begin{bmatrix} \alpha \\ (\omega-1)\alpha+\omega\beta \end{bmatrix} & (x=1,2,\cdots) \\ \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} & (x=0) \\ (\theta_s)^{|x|} \begin{bmatrix} \omega\alpha+(1-\omega)\beta \\ \beta \end{bmatrix} & (x=-1,-2,\cdots) \end{cases}$$

となることが得られた、ここで，$\alpha = \Psi^L(0)$, $\beta = \Psi^R(0)$ であり，固有値と λ と θ_s は，次のようになる．

(1) $\beta = i\alpha$ のとき

$$\lambda^2 = \frac{\omega(-1+2\omega-\omega^2)-iw(1-\omega+\omega^2)}{1-2\omega+2\omega^2} \tag{2.5}$$

$$\theta_s^2 = \frac{-\omega}{\omega^2-3\omega+1+i(\omega^2-1)} \tag{2.6}$$

(2) $\beta = -i\alpha$ のとき

$$\lambda^2 = \frac{\omega(-1+2\omega-\omega^2)+iw(1-\omega+\omega^2)}{1-2\omega+2\omega^2} \tag{2.7}$$

$$\theta_s^2 = \frac{-\omega}{\omega^2-3\omega+1+i(1-\omega^2)} \tag{2.8}$$

が得られた．

この帰結から，固有値 λ は単位円周上の本質的スペクトルの間を動くことがわかる [12].

2.3 本研究モデル

我々のモデルのシフト作用素とコイン作用素を次のように定義する．

$$S = \begin{bmatrix} 0 & L \\ L^* & 0 \end{bmatrix}, \qquad C(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} & (x=\pm1,\pm2,\cdots) \\ \dfrac{\omega}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} & (x=0,\omega\in\mathbb{R}) \end{cases} \tag{2.9}$$

このモデルは，先行結果と同様に 1 欠陥モデルであるが，以下の点が異なっている．まず,

シフト作用素がユニタリかつ自己共役になっている点である．次に，原点において$\omega \in \mathbb{R}$となっていることにより，$\omega \neq \pm 1$ではコインがユニタリ行列ではなく自己共役になっている点である．これにより，我々のモデルはユニタリ性を失うが，次の意味でカイラル対称性をもつことが示される．

一般に，有界作用素Uがカイラル対称性をもつとは，

$$\Gamma U \Gamma = U^*$$

となるユニタリかつ自己共役な作用素Γが存在することをいう．実際，$\Gamma = S$とおくと，(2.9)のSはユニタリかつ自己共役であり，$\Gamma U \Gamma = S^2 C S = U^*$となる．ここで，$S^2 = SS^* = 1$となることを用いた．

さて，我々のモデルの固有値問題を解くために，各点xで固有方程式を計算すると次のようになる． $x \neq \pm 1$のとき

$$\lambda \begin{bmatrix} \Psi^L(x) \\ \Psi^R(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi^L(x-1) \\ \Psi^R(x-1) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi^L(x+1) \\ \Psi^R(x+1) \end{bmatrix}$$

$x = 1$のとき

$$\lambda \begin{bmatrix} \Psi^L(1) \\ \Psi^R(1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\omega}{\sqrt{2}} & \frac{\omega}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi^L(0) \\ \Psi^R(0) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \frac{\omega}{\sqrt{2}} & -\frac{\omega}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi^L(2) \\ \Psi^R(2) \end{bmatrix}$$

$x = -1$のとき

$$\lambda \begin{bmatrix} \Psi^L(-1) \\ \Psi^R(-1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\omega}{\sqrt{2}} & \frac{\omega}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi^L(-2) \\ \Psi^R(-2) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \frac{\omega}{\sqrt{2}} & -\frac{\omega}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi^L(0) \\ \Psi^R(0) \end{bmatrix}$$

これを用いて，SGF 法により，このモデルの固有値問題を解いていく．そのために，母関数

$$f_+^j(z) = \sum_{x=1}^{\infty} \Psi^j(x) z^x, \quad f_-^j(z) = \sum_{x=-1}^{-\infty} \Psi^j(x) z^x \quad (j = L, R)$$

を定義する．式 (2.8)〜(2.10) を用いると，次の Lemma1 を得る．

Lemma 1 $\boldsymbol{f}_\pm(z) = \begin{bmatrix} f^L_\pm(z) \\ f^R_\pm(z) \end{bmatrix}$ とおくと

$$A\boldsymbol{f}_\pm(z) = \boldsymbol{a}_\pm(z)$$

が成り立つ．ここで,

$$A = \begin{bmatrix} \lambda - \frac{1}{\sqrt{2}z} & -\frac{1}{\sqrt{2}z} \\ -\frac{z}{\sqrt{2}} & \lambda - \frac{z}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{a}_+(z) = \begin{bmatrix} -\lambda\alpha \\ \dfrac{\omega z(\alpha-\beta)}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}, \boldsymbol{a}_-(z) = \begin{bmatrix} \dfrac{\omega(\alpha+\beta)}{\sqrt{2}z} \\ -\lambda\beta \end{bmatrix}$$

ここで，$\omega \in \mathbb{R}$，$\alpha = \Psi^L(0)$，$\beta = \Psi^R(0)$ である.

Lemma1 より,

$$\mathrm{det}A = -\frac{\lambda}{\sqrt{2}z}\left\{z^2 - \sqrt{2}\left(\lambda + \frac{1}{\lambda}\right)z + 1\right\} \tag{2.10}$$

である．いま，θ_s，$\theta_l \in \mathbb{C}$ は.

$$\mathrm{det}A = -\frac{\lambda}{\sqrt{2}z}(z-\theta_s)(z-\theta_l) \tag{2.11}$$

を満たし，$|\theta_s| \leq 1 \leq |\theta_l|$ となるようにとる．また，解と係数の関係より $\theta_s\theta_l = 1$ である.

$\det A \neq 0$ のときは，A の逆行列が存在して，母関数が計算できる.

(1) f^L_+ を考える．Lemma1 より,

$$\begin{aligned} f^L_+(z) &= \frac{1}{\mathrm{det}A}\left\{\left(\frac{z}{\sqrt{2}} - \lambda\right)(\lambda\alpha) - \frac{\omega}{2}(\alpha+\beta)\right\} \\ &= \frac{1}{\mathrm{det}A}\cdot\frac{\lambda\alpha}{\sqrt{2}}\left\{z - \frac{\sqrt{2}}{\lambda\alpha}\left(\lambda^2\alpha + \frac{\omega}{2}(\alpha+\beta)\right)\right\} \end{aligned}$$

ここで，$\theta_s = \frac{\sqrt{2}}{\lambda\alpha}\left(\lambda^2\alpha + \frac{\omega}{2}(\alpha+\beta)\right)$ とおくと,

$$\begin{aligned} f^L_+(z) &= -\frac{\alpha z}{z-\theta_l} = -\frac{\alpha z}{z - \frac{1}{\theta_s}} = \alpha\frac{z\theta_s}{-z\theta_s + 1} \\ &= -\alpha(\theta_s z)\{1 + (\theta_s z) + (\theta_s z)^2 + (\theta_s z)^3 + \cdots \end{aligned}$$

よって，

$$f_+^L(z) = \alpha \sum_{x=1}^{\infty} (\theta_s z)^x \tag{2.12}$$

これにより，

$$\Psi^L(x) = \alpha(\theta_s)^x \quad (x = 1, 2, \cdots)$$

が求められた．このとき，

$$\theta_s = \frac{\sqrt{2}}{\lambda\alpha}\left\{\lambda^2\alpha + \frac{\omega}{2}(\alpha+\beta)\right\} \tag{2.13}$$

である．

(2) f_+^R を考える．

Lemma1 より，

$$\begin{aligned} f_+^R(z) &= \frac{1}{\mathrm{det}A}\left\{-\frac{z}{\sqrt{2}}\lambda\alpha + \frac{\omega z(\alpha+\beta)}{\sqrt{2}}\lambda - \frac{\omega(\alpha+\beta)}{2}\right\} \\ &= \frac{1}{\mathrm{det}A}\cdot\frac{\lambda}{\sqrt{2}}\{(\omega-1)+\omega\beta\}\left\{z - \frac{\sqrt{2}}{2\lambda}\cdot\frac{\omega(\alpha+\beta)}{(\omega-1)\alpha+\omega\beta}\right\} \end{aligned}$$

ここで，$\theta_s = \frac{\omega(\alpha+\beta)}{\sqrt{2}\lambda\{(\omega-1)\alpha+\omega\beta}$ とおくと，

$$\begin{aligned} f_+^R(z) &= -\frac{z\{(\omega-1)\alpha+\omega\beta\}}{z-\theta_l} = -\frac{z\{(\omega-1)\alpha+\omega\beta\}}{z-\frac{1}{\theta_s}} \\ &= \{(\omega-1)\alpha+\omega\beta\}\sum_{x=1}^{\infty}(\theta_s z)^x \end{aligned} \tag{2.14}$$

これにより，

$$\Psi^R(x) = \{(\omega-1)\alpha+\omega\beta\}(\theta_s)^x \quad (x = 1, 2, \cdots)$$

が求められた．このとき，

$$\theta_s = \frac{\omega(\alpha+\beta)}{\sqrt{2}\lambda\{(\omega-1)\alpha+\omega\beta\}} \tag{2.15}$$

である．

(3) f_-^L を考える.
Lemma1 より,

$$f_-^L(z) = \frac{\omega(\alpha-\beta)}{\sqrt{2}\lambda(z-\theta_s)(z-\theta_l)}\left(z - \frac{\sqrt{2}\lambda\{\omega\alpha+(1-\omega)\beta\}}{\omega(\alpha-\beta)}\right)$$

ここで，$\theta_l = \frac{\sqrt{2}\lambda\{\omega\alpha+(1-\omega)\beta\}}{\omega(\alpha-\beta)}$ とおくと,

$$\begin{aligned} f_-^L(z) &= \frac{\omega(\alpha-\beta)}{\sqrt{2}\lambda}\cdot\frac{1}{z-\theta s} = \frac{\omega(\alpha-\beta)}{\sqrt{2}\lambda}\cdot\frac{1}{\theta_s}\cdot\frac{\theta_s}{z}\cdot\frac{1}{1-\frac{\theta_s}{z}} \\ &= \frac{\omega(\alpha-\beta)}{\sqrt{2}\lambda}\cdot\frac{1}{\theta_s}\left\{\frac{\theta_s}{z}+\left(\frac{\theta_s}{z}\right)^2\cdots\right\} \end{aligned}$$

よって,

$$f_-^L(z) = \frac{\omega(\alpha-\beta)}{\sqrt{2}\lambda}\cdot\left(\frac{\theta_s}{z}\right)\sum_{x=-1}^{-\infty} = \{\omega\alpha+(1-\omega)\beta\}\sum_{x=-1}^{-\infty}(\theta_s^{-1}z)^x \tag{2.16}$$

これにより,

$$\Psi^L(x) = \{\omega\alpha+(1-\omega)\beta\}(\theta_s)^{-x}(x=-1,-2,\cdots)$$

が求められた．このとき,

$$\theta_s = \frac{\omega(\alpha-\beta)}{\sqrt{2}\lambda\{\omega\alpha+(1-\omega)\beta\}} \tag{2.17}$$

である.
(4) f_-^R を考える.
Lemma1 より,

$$f_-^R(z) = \frac{\sqrt{2}z}{\lambda(z-\theta_s)(z-\theta_l)}\cdot\frac{(\omega+2\lambda^2)\beta-\omega\alpha}{2z}\cdot\left(z-\frac{2\lambda\beta}{-\sqrt{2}\omega\alpha+\sqrt{2}(\omega+2\lambda^2)\beta}\right)$$

ここで，$\theta_l = \frac{2\lambda\beta}{-\sqrt{2}\omega\alpha+\sqrt{2}(\omega+2\lambda^2)\beta}$ とおくと,

$$\begin{aligned} f_-^R(z) &= \frac{1}{2}\{(\omega+2\lambda^2)\beta-\omega\alpha\}\cdot\frac{2\beta}{(\omega+2\lambda^2)\beta-\omega\alpha}\cdot\frac{\theta_s}{z}\cdot\frac{1}{1-\frac{\theta_s}{z}} \\ &= \beta\cdot\frac{\theta_s}{z}\cdot\frac{1}{1-\frac{\theta_s}{z}} \end{aligned}$$

よって，

$$f_-^R(z) = \beta \sum_{x=-1}^{-\infty} (\theta_s^{-1} z)^x \tag{2.18}$$

これにより，

$$\Psi^R(x) = \beta(\theta_s)^{-x} \quad (x = -1, -2, \cdots)$$

が求められた．このとき，

$$\theta_s = \frac{\sqrt{2}}{\lambda\beta}\Big(-\frac{\omega}{2}\alpha + (\frac{\omega}{2} + \lambda^2)\beta \Big) \tag{2.19}$$

である．

3　主結果

SGF 法を本モデルに適用すると，固有値問題 $U\Psi = \lambda\Psi$ を次のように解くことができる．

Proposition 1 *(固有値問題の解)* $\alpha = \Psi^L(0)$，$\beta = \Psi^R(0)$，$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 (\alpha, \beta \in \mathbb{C})$ とすると，固有値問題

$$U\Psi = \lambda\Psi \quad (\lambda \in \mathbb{C})$$

の解は，以下のようになる．

$$\Psi(x) = \begin{cases} (\theta_s)^x \begin{bmatrix} \alpha \\ (\omega - 1)\alpha + \omega\beta \end{bmatrix} & (x = 1, 2, \cdots) \\ \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} & (x = 0) \\ (\theta_s)^{|x|} \begin{bmatrix} \omega\alpha + (1 - \omega)\beta \\ \beta \end{bmatrix} & (x = -1, -2, \cdots) \end{cases} \tag{3.20}$$

但し，$\beta^2 = -\alpha^2$，つまり $\beta = i\alpha$ または $\beta = -i\alpha$ となる．

また $\omega \neq 1$ のときは，$\Psi \in \mathcal{H}$ であるので，対応する λ は固有値となる．一方，$\omega = 1$ のときは，固有方程式を満たすが，$\Psi \notin \mathcal{H}$ のため，対応する λ は固有値とならない．
さらに，λ と θ_s は次を満たす．

(1)$\beta = i\alpha$ のとき

$$\lambda^2 = \frac{\omega(-1+2\omega-\omega^2) - i\omega(1-\omega+\omega^2)}{1-2\omega+2\omega^2} \tag{3.21}$$

$$\theta_s^2 = \frac{-\omega}{\omega^2-3\omega+1+i(\omega^2-1)} \tag{3.22}$$

(2)$\beta = -i\alpha$ のとき

$$\lambda^2 = \frac{\omega(-1+2\omega-\omega^2) + i\omega(1-\omega+\omega^2)}{1-2\omega+2\omega^2} \tag{3.23}$$

$$\theta_s^2 = \frac{-\omega}{\omega^2-3\omega+1+i(1-\omega^2)} \tag{3.24}$$

最後に，得られた固有値と本質的スペクトルを数値的にプロットしたので，その図を紹介する．ω は，$\omega = (-\infty, \infty)$ かつ $\omega \neq 0, 1$ である．

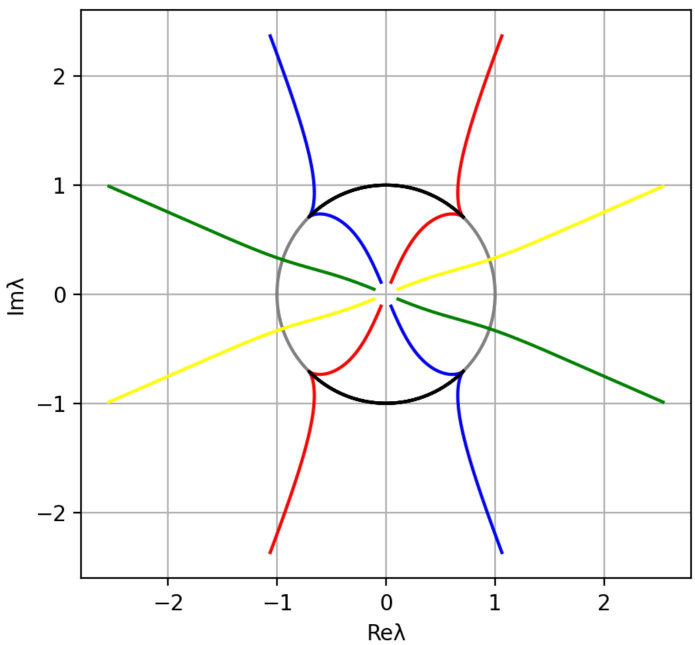

図 1: 固有値 λ，本質的スペクトルのプロット図

青線：(1)　$\beta = i\alpha$，$\omega > 0$
緑線：(2)　$\beta = i\alpha$，$\omega < 0$
赤線：(3)　$\beta = -i\alpha$，$\omega < 0$
黄線：(4)　$\beta = -i\alpha$，$\omega < 0$
黒線：(5)　本質的スペクトル　に対応している．

参考文献

[1] N. Konno: Localization of an inhomogeneous discrete time quantum walk on the line. *Quantum Information Proccessing*,**9**,405-418,(2010)

[2] N. Konno, T. Łuczak and E. Segawa: Limit measures of inhomogeneous discrete-time quantum walks in one dimension. *Quantum Information Processing* **12**,33-35(2013)

[3] N. Konno: Quantum random walks in one dimension. *Quantum Information Proccessing*,**1**,345-354,(2002)

[4] G. Grimmett, S. Janson and P. Scudo: Weak limits for quantum random walks. *Phys. Rev. E*, **69**, 026119 (2004).

[5] C. K. Ko and H. J. Yoo: The generator and quantum Markov semigroup for quantum walks. *Kodai Math. J.*, **36**, 363-385 (2013).

[6] M. J. Cantero, F. A. Grunbaum, L. Moral and L. Velazquez: One-dimensional quantum walks with one defect. *Rev. Math. Phys.*, **24**, 1250002 (2012).

[7] K. Chisaki, M. Hamada, N. Konno and E. Segawa: Limit theorems for discrete-time quantum walks on trees,. *Interdisciplinary Information Sciences*, **15**, 423-429 (2009).

[8] A. Suzuki :Asymptotic velocity of a position-dependent quantum walk. *Quantum Information Proccessing*,**15**,103-119,(2016)

[9] T. Kitagawa: Topological phenomena in quantum walks: elementary introduction to the physics of topological phases. *Quantum Information Proccessing*,**11**, 1107–1148 (2012)

[10] K.Mochisuki,D.Kim and H.Obuse: Explicit definition of PT symmetry for nonunitary quantum walks with gain and loss. *Physical Review A* **93**,062116(2016)

[11] T. Endo and N. Konno: The stationary measure of a space-inhomogeneous quantum walk on the line. *Yokohama Mathematical Journal*,**60**,33-47(2014)

[12] S. Endo, T. Endo,T. Komatsu and N. Konno: Eigenvalues of two-state quantum Walks induced by the hadamard walk. *Entropy*,**127**,22(1)(2020)