博士論文

有限グラフ上の量子ウォークの解析
（Analysis of quantum walks on finite graphs）

横浜国立大学大学院
理工学府

齋藤 渓
（SAITO KEI）

学位授与 2020 年・3 月

目 次

1　序文

量子ウォークの起源は諸説があるが，20 世紀の終わりごろに量子コンピューターに代表される科学技術の発展と共に脚光を浴び始めたことは確かである．種々の量子アルゴリズムへの応用，とりわけ Grover のアルゴリズムを模倣した量子探索は量子ウォークの主たる活躍の舞台であり，現在もなお様々な研究が行われている [1, 2, 3, 4, 5, 6]．量子ウォークはランダムウォークの量子版とも呼ばれる数理モデルであり，シンプルな量子動力学を表すモデルとして量子計算や量子情報科学などといった分野への応用研究もまた盛んである．

量子ウォークのモデルは大きく分けて離散時間・連続時間のものが存在するが，本稿においては離散時間のモデルのみを取り扱う．特に，離散時間の量子ウォークの中でもコイン型モデル，bipartite モデル，staggered モデルなど様々なモデルが提唱されているが，本稿においては最も広く知られているコイン型モデルのみを扱う．

ここで，Konno [7] などで定められる整数格子 $\mathbb{Z}$ 上の量子ウォークのモデルを 1 つ紹介する．まず，量子ウォークが作用する量子系の状態空間を次のような二乗総和可能な関数からなるヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ で与える．

$$\mathcal{H} = \ell^2(\mathbb{Z};\mathbb{C}^2) = \left\{ \Psi : \mathbb{Z} \to \mathbb{C}^2 \mid \sum_{x\in\mathbb{Z}} \|\Psi(x)\|^2 < \infty \right\}.$$

次に 2×2 のユニタリ行列 C_{loc} を与え，これを各行ごとに分割したものを P, Q とする．すなわち，以下のように定める．

$$C_{loc} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \in \mathrm{U}(2), \quad P = \begin{bmatrix} a & b \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad Q = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c & d \end{bmatrix}.$$

ただし，$\mathrm{U}(n)$ は $n \times n$ のユニタリ行列全体の集合を意味する．時刻 $t \in \mathbb{Z}_{\geq}$ における量子状態を $\Psi_t \in \mathcal{H}$ とし，その時間発展を

$$\Psi_{t+1}(x) = P\Psi_t(x+1) + Q\Psi_t(x-1), \qquad \forall x \in \mathbb{Z} \tag{1}$$

によって定義する．このように時間発展により隣接頂点へと値を移す $\Psi_t(x)$ はランダムウォークとの対応から量子ウォーカーの持つ状態ベクトルと呼ばれ，行列 P, Q は量子ウォーカーが隣接する頂点へと推移する際の重み行列と捉えられる．ここで (1) 式の時間発展を $\mathcal{H}$ 上の 2 つのユニタリ作用素 S, C によって分割する．任意の $\Psi \in \mathcal{H},\ x \in \mathbb{Z}$ に対し S, C の作用を

$$(S\Psi)(x) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \Psi(x+1) + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \Psi(x-1), \qquad (C\Psi)(x) = C_{loc}\Psi(x)$$

のように定めれば，確かに $(SC\Psi)(x)$ が (1) 式の左辺における $\Psi_{t+1}(x)$ に対応することがわかる．このように，時間発展がシフトオペレーター S とコインオペレーター C の積によって与えられるもの，すなわち時間発展作用素 $U = SC$ で定められる量子ウォークが一般にコイン型モデルと呼ばれるものである．

もう 1 つ，典型的な量子ウォークのモデルである Grover walk を紹介する．Grover walk はその拡張も含め，一般の対称グラフ $G = (V, E)$ 上を量子ウォーカーが推移するモデルとして頻繁に研究されている [11, 12, 13, 14, 15, 16, 17]．このモデルにおいて，辺集合 E から導出される対称な有向辺全体の集合 $\mathcal{A}$ としたとき，すなわち

$$\mathcal{A} = \{(u, v),\ (v, u) \mid uv \in E\}$$

としたとき，Grover walk における状態空間を与えるヒルベルト空間は

$$\mathcal{H} = \ell^2(\mathcal{A})$$

によって与えられる．ここで，$e \in \mathcal{A}$ に対し $t(e)$ で有向辺 e の終点，$o(e)$ で e の始点を与えるものとし，$\bar{e}$ で逆辺を表す．そして，Grover walk における時間発展作用素 U は $\Psi \in \mathcal{H}$ に対し

$$(U\Psi)(e) = \sum_{f \ | \ t(f)=o(e)} \left(\frac{2}{\deg(t(f))} - \delta_{\bar{e},f} \right) \Psi(f) \tag{2}$$

によって定められる．ただし，$\deg(\cdot)$ は頂点の次数であり，$\delta_{e,f}$ はクロネッカーのデルタである．

実は (2) 式で与えた Grover walk も S と C の積により書き表すことができるコイン型モデルの一種である．また，最初に紹介した $\mathbb{Z}$ 上の量子ウォークは頂点上に値を取るヒルベルト空間の上で定義されたのに対し，Grover walk は有向辺の上に値を取る空間の上で定義された．これも実は，頂点上に値を取るモデルと有向辺の上に値を取るモデルはある対応を与えることで本質的に同値なものとして解釈することができる．そのような対応関係も含め，本論文の導入として一般的な有限グラフ上におけるコイン型量子ウォークの構成を第 2 章にて与える．なお，この構成法については Higuchi, Konno, Sato, Segawa [9] を参考に本論文にて必要となる種々の記号を付け加え拡張したものである．

第 2 章以降は，グラフ上の量子ウォークについていくつかのトピックを単発的に取り扱う．
まず，第 3 章においては量子ウォークの周期性についての研究を紹介する．周期性とは一定時刻ごとに量子状態が初期状態へと完全に再帰する性質であり，古典系であるランダムウォークには存在しえない量子ウォーク特有の性質である[1]．量子ウォークの周期によるグラフの特徴づけを用いたグラフ同型問題への応用や，完全状態遷移（perfect state transfer）といった現象との関連なども研究されている [18, 19, 20, 21, 22, 23, 24]．特に筆者により得られた Fourier walk と呼ばれるモデルにおける結果（定理 3.3）は隣接行列という代数的グラフ理論の道具を用いて量子ウォークの周期性の有無を判定することを可能とした定理であり，既存の周期性の研究とは全く異なるアプローチにより得られたことからも本論文の主定理の 1 つとして大きな意義を持つ．

第 4 章は Suzuki, Segawa [25, 26] などで与えられる量子ウォークのスペクトル写像定理の導入を行う．スペクトル写像定理はいくつかの条件が課されたモデルに対して適用可能な定理であり，量子ウォークが作用するヒルベルト空間よりも低次元の空間上で与えられる自己共役作用素 T のスペクトルから時間発展作用素 U のスペクトルを導き出す定理である．特に，Grover walk においては T は対応するグラフ上の対称ランダムウォークと一致するため，量子系と古典系を繋ぐ非常に重要な定理として知られている．また，スペクトル写像定理の強力な点は，定理を適用可能となる条件を満たした上であれば，頂点に依存したダイナミクスを持つ量子ウォークの解析も可能となる点である．一般にそのようなモデルは Fourier 解析を用いることができないなど，よく知られた研究手法によって解析することは難しい．続く第 5 章においては，このスペクトル写像定理を用いることにより，サイクル上の量子ウォークの二相系の固有値解析を行う．

[1] 量子ウォークの時間発展作用素はユニタリであるため，多くのランダムウォークと違い収束することがない．したがって状態が周期的に再帰することも有り得る．

2 有限グラフ上の量子ウォークの構成

本章では有限グラフ上の一般的なコイン型量子ウォーク[2] の定義を記す．ここで記す量子ウォークモデルの構成法は，Higuchi, Konno, Sato, Segawa [9] で与えられた方法を基にし，本論文において必要となる記号を付け加えたものである．

本稿では，多重辺を持たない有限な無向グラフを対象とする．すなわち，グラフ $G=(V,E)$ に対し，

(1) 任意の頂点 $u,v\in V$ に対して，$uv\in E$ であれば辺 $e=uv\in E$ が一意に定まる．
(2) 頂点数が有限である．すなわち $|V|<\infty$.

を満たし，辺が指向性を持たない場合を考える[3]．ここで，辺集合 E から導出される対称な有向辺（arc）全体の集合 $\mathcal{A}$ を以下で与える．

$$\mathcal{A}:=\{(u,v),(v,u)\,|\,uv\in E,\ u\neq v\}\cup\{(u,v)\,|\,uv\in E,\ u=v\}.$$

さらに，有向辺 $e=(u,v),\ u,v\in V$ に対し，始点（origin）と終点（terminus）をそれぞれ

$$o(e)=v,\quad t(e)=u$$

とし，逆辺を $\bar{e}=(v,u)$ と表記する．これらについては第 1 章にて記述したものと同じ記号である．

多くの先行研究においてグラフ上の量子ウォークは各有向辺上に複素数値を与える関数空間上のダイナミクスとして定義されるが，多次元正方格子，半直線などといった対称性の良いグラフに対しては頂点上にベクトル値を与える形で記述されることが多い．後述するようにこれらは同一のモデルとして対応付けられるが，扱う問題や設定に応じて使い分けることが重要である．まず初めにこれらの対応を与える写像について記述する．

量子ウォークを有向辺上のダイナミクスとして考える場合は以下のヒルベルト空間 $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ を量子系の状態空間とする．

$$\mathcal{H}_{\mathcal{A}}=\ell^2(\mathcal{A})=\left\{\Psi:\mathcal{A}\to\mathbb{C}\ \Big|\ \sum_{e\in\mathcal{A}}|\Psi(e)|^2<\infty\right\}. \tag{3}$$

これに対し，各頂点毎にそれを終点とする有向辺上の値を並べることで各頂点上にベクトル値を与えることができる．ここで，ベクトルの定め方に一意性を与えるため次のラベリング L を与える．

定義 2.1. ラベリング L：

$$L:\mathcal{A}\to\mathbb{Z}_{\geq 0}$$

ただし，L は以下を満たす．

(i) 任意の $e,f\in\mathcal{A}$ $(e\neq f)$ に対し $t(e)=t(f)$ であれば $L(e)\neq L(f)$.
(ii) 任意の $v\in V$ に対し $\bigcup_{e\,|\,t(e)=v}\{L(e)\}=\{0,1,\cdots,\deg(v)-1\}$.

[2] 序文で述べたように，時間発展が $U=SC$ によるシフト・コインオペレーターの積で定義されるモデルのことを指す．
[3] 多重辺については許容したモデルを考えることもできるがここでは扱わない．また，無限グラフを扱う場合は以後の議論における固有値を一般的なスペクトルへと分類する必要があるなどいくつかの修正を要する．

$\deg(v)$ は頂点 v の次数[4]，すなわち頂点 v から出る辺の総本数である．したがって，L とは各頂点ごとに，それを終点とする有向辺それぞれに 0〜$\deg(v)-1$ の番号付けを与えるものである．

次に，量子ウォークを頂点上のダイナミクスとして考える場合は以下のヒルベルト空間 $\mathcal{H}_V$ を量子系の状態空間とする．

$$\mathcal{H}_V = \bigoplus_{v\in V} \ell^2(v\,;\mathbb{C}^{\deg(v)}). \tag{4}$$

このとき，上で定めたラベリングを用いることで次の対応が与えられる．

定義 2.2. 有向辺ベース ↔ 頂点ベースの対応： 定義 2.1 で与えられた L に対し，作用素 $\iota : \mathcal{H}_\mathcal{A} \to \mathcal{H}_V$ を以下で与える．

$$(\iota\tilde{\Psi})(v) = \sum_{e\,|\,t(e)=v} \tilde{\Psi}(e)\,|L(e)\rangle, \quad \forall\tilde{\Psi}\in\mathcal{H}_\mathcal{A},\ v\in V.$$

ただし，$|L(e)\rangle$ は $\mathbb{C}^{\deg(t(e))}$ の標準基底ベクトルとして定める．すなわち，

$$|L(e)\rangle = {}^T\Big[\ \overbrace{0}^{0\text{ 行目}}\ \ \overbrace{0}^{1\text{ 行目}}\ \cdots\ 0\ \ \overbrace{1}^{L(e)\text{ 行目}}\ \ 0\ \cdots\ \ \overbrace{0}^{\deg t(e)-1\text{ 行目}}\ \Big] \in \mathbb{C}^{\deg(t(e))}.$$

また，ベクトルの左上添え字の T は転置を意味する．このとき逆作用 ι^{-1} は以下となる．

系 2.3. 定義 2.2 で与えられた ι に対し，逆作用 $\iota^{-1} : \mathcal{H}_V \to \mathcal{H}_\mathcal{A}$ は以下となる．

$$(\iota^{-1}\Psi)(e) = \langle L(e)|\Psi(t(e)), \quad \forall\Psi\in\mathcal{H}_V,\ e\in\mathcal{A}.$$

証明. まず，$\Psi\in\mathcal{H}_V$ に対し，

$$\begin{aligned}(\iota\iota^{-1}\Psi)(v) &= \sum_{e\,|\,t(e)=v} |L(e)\rangle(\iota^{-1}\Psi)(e)\\ &= \sum_{e\,|\,t(e)=v} |L(e)\rangle\langle L(e)|\Psi(t(e))\end{aligned}$$

であり，L の定義から $\bigcup_{e\,|\,t(e)=v}\{L(e)\} = \{0,1,\cdots,\deg(v)-1\}$ であるので $\sum_{e\,|\,t(e)=v}|L(e)\rangle\langle L(e)| = I$ である．ただし，I は単位行列を表す[5]．したがって

$$(\iota\iota^{-1}\Psi)(v) = \Psi(v)$$

が成り立つ．次に，$\tilde{\Psi}\in\mathcal{H}_\mathcal{A}$ に対し，

$$\begin{aligned}(\iota^{-1}\iota\tilde{\Psi})(e) &= \langle L(e)|(\iota\tilde{\Psi})(t(e))\\ &= \langle L(e)|\sum_{f\,|\,t(f)=t(e)} \tilde{\Psi}(f)|L(f)\rangle\\ &= \sum_{f\,|\,t(f)=t(e)} \langle L(e),L(f)\rangle\tilde{\Psi}(f).\end{aligned}$$

[4] 本論文では自己ループについては次数を 1 本分と計上する．

[5] 本論文中においては I を単位行列の意味でも，恒等作用素の意味でも同一な記号を使用するが，これらは本質的に同じものである．また，その行列のサイズ，および定義域については適宜文脈によって判断されたい．

これも L の定義から $t(e)=t(f)$，$e\neq f$ であれば $L(e)\neq L(f)$ であるため，$\langle L(e),L(f)\rangle=\delta_{e,f}$ である．ただし，$\delta_{e,f}$ はクロネッカーのデルタ，すなわち $\delta_{e,f}=1\ (e=f)$，$=0\ (e\neq f)$ である．したがって

$$(\iota^{-1}\iota\tilde{\Psi})(e)=\tilde{\Psi}(e).$$

□

このように ι は全単射であるため，確かに $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ と $\mathcal{H}_V$ は同型であることがわかる．本稿では $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ 上で与えられるダイナミクスを有向辺ベース，$\mathcal{H}_V$ 上で与えられるダイナミクスを頂点ベースと記述する．

本稿にて扱う離散時間コイン型量子ウォークとは時間発展作用素が $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ あるいは $\mathcal{H}_V$ 上のユニタリ作用素であるシフトオペレーターとコインオペレーターの積によって与えられるモデルを指す．頂点ベースの表記として，$\mathcal{H}_V$ 上の時間発展作用素 U を同じく $\mathcal{H}_V$ 上の作用素であるシフトオペレーター S とコインオペレーター C の積で定める．すなわち

$$U=SC.$$

これに対し，有向辺ベースの記述として，$\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ 上の時間発展作用素 $\tilde{U}$ を同様にシフトオペレーター $\tilde{S}$ とコインオペレーター $\tilde{C}$ の積で定める．ただし，

$$\tilde{S}=\iota S\iota^{-1},\quad \tilde{C}=\iota C\iota^{-1}, \tag{5}$$

すなわち

$$S=\iota^{-1}\tilde{S}\iota,\quad C=\iota^{-1}\tilde{C}\iota, \tag{6}$$

の関係で与えられるものとする．これらを以下にまとめておく．

定義 2.4. 時間発展作用素：

- 頂点ベース $\mathcal{H}_V$ 上の時間発展作用素：　$U=SC.$
- 有向辺ベース $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ 上の時間発展作用素：　$\tilde{U}=\tilde{S}\tilde{C}.$

ただし，$\tilde{X}=\iota^{-1}X\iota\ (X=U,S,C)$ であり，$S,\tilde{S},C,\tilde{C}$ はそれぞれ定義 2.10，定義 2.7，定義 2.11，定義 2.12 で与えられる．

以下，シフトオペレーター及びコインオペレーターの定義をそれぞれ記述する．特に，シフトオペレーターについては有向辺ベースのシフトオペレーター $\tilde{S}$ の定義を初めに与え，(6) の関係を用いることで頂点ベースのシフトオペレーター S の定義を与える．また，それとは逆に，コインオペレーターについては頂点ベースのコインオペレーター C の定義を先に与え，(5) の関係から有向辺ベースのコインオペレーター $\tilde{C}$ を定める．

- シフトオペレーター

グラフ上の量子ウォークは後述する flip-flop shift と呼ばれるシフトオペレーターを定めるのが典型的だが，一般の場合におけるシフトオペレーターは次のような有向辺の集合 $\mathcal{A}$ の分割 Π によって構成される．

定義 2.5. 有向辺の分割 Π：

$$\Pi=\{\Pi_1,\Pi_2,\cdots,\Pi_r\},\quad r\in\mathbb{N},\quad \Pi_i\subset\mathcal{A}.$$

ただし，これは以下を満たす：

(i) $\bigcup_{i=1}^{r} \Pi_i = \mathcal{A}$.

(ii) $\Pi_i \cap \Pi_j = \emptyset, \quad i \neq j$.

(iii) $\Pi_i = \{e_0^i, e_1^i, \cdots, e_{n-1}^i\}$ に対し，$t(e_j^i) = o(e_{j+1 \bmod n}^i)$ かつ $j \neq k$ のとき $e_j^i \neq e_k^i$.

ここで (iii) の条件は各 Π_i が素な向き付きの閉歩道であることを意味している[6]．(i) および (ii) の条件から，Π が与えられたとき任意の $e \in \mathcal{A}$ はいずれかの Π_i に含まれ，それも一意であることがわかる．したがって，以下のような全単射が自然に定義される．

定義 2.6. 定義 2.5 で与えられた Π に対し，任意の $e \in \mathcal{A}$ に対し，$e = e_j^i \in \Pi_i = \{e_0^i, e_1^i, \cdots, e_{|\Pi_i|}^i\}$ を満たす i, j が一意に存在する．このとき，全単射 $\tau : \mathcal{A} \to \mathcal{A}$ を以下で定める．

$$\tau(e) = e_{j+1 \bmod |\Pi_i|}^i, \qquad \forall e = e_j^i \in \Pi_i. \tag{7}$$

これを用いて，有向辺ベースのシフトオペレーター $\tilde{S}$ を次で定める．

定義 2.7. シフトオペレーター（有向辺ベース）： 定義 2.5，定義 2.6 で定められた Π, τ に対し $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ 上のユニタリ作用素 $\tilde{S}$ を以下で定める．

$$(\tilde{S}\tilde{\Psi})(e) = \tilde{\Psi}(\tau^{-1}(e)), \quad \forall \tilde{\Psi} \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}},\ e \in \mathcal{A}.$$

このように分割 Π を与えることで自動的にシフトオペレーターが定められるが，任意のグラフに対して “自然な”量子ウォークモデルを構成するためにはどのように Π を与えればよいか？という問題に直面する．その解答の 1 つとしては，各辺ごとに Π_i を与える分割が考えられる．すなわち，$r = |\Pi| = |E|$ であり，任意の辺 e_i の端点を $u_i, v_i \in V$ $(u_i \neq v_i)$ としたとき

$$\Pi_i = \{(u_i, v_i), (v_i, u_i)\}, \quad e_i = u_i v_i \in E, \quad u_i \neq v_i \tag{8}$$

を与え，$u_i = v_i$，すなわち e_i が自己ループである場合は

$$\Pi_i = \{(u_i, v_i)\}, \quad e_i = u_i v_i \in E, \quad u_i = v_i \tag{9}$$

として与える．この分割は任意のグラフに対して与えることができ，しかも一意であることから自然な分割であると言える．この分割の下では任意の $e \in \mathcal{A}$ に対し $\tau(e) = \tau^{-1}(e) = \bar{e}$ が成り立ち，これにより定義されるシフトは flip-flop shift と呼ばれる．

定義 2.8. flip-flop shift： (8)(9) で定められた Π に対し，定義 2.7 で与えられる有向辺ベースのシフトオペレーターを $\tilde{S} = \tilde{S}_{\mathrm{ff}}$ と記述する．このとき

$$(\tilde{S}_{\mathrm{ff}}\tilde{\Psi})(e) = \tilde{\Psi}(\bar{e}), \quad \forall \tilde{\Psi} \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}},\ e \in \mathcal{A}.$$

また，頂点ベースの flip-flop シフトについても $S_{\mathrm{ff}} = \iota \tilde{S}_{\mathrm{ff}} \iota^{-1}$ で定める．

系 2.9. $\tilde{S}_{\mathrm{ff}}^2 = I,\ S_{\mathrm{ff}}^2 = I$.

証明. 任意の $\tilde{\Psi} \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ に対し，$(\tilde{S}_{\mathrm{ff}}^2\tilde{\Psi})(e) = (\tilde{S}_{\mathrm{ff}}\tilde{\Psi})(\bar{e}) = \tilde{\Psi}(e)$ であるため，$\tilde{S}_{\mathrm{ff}}^2 = I$ である．したがって，$S_{\mathrm{ff}}^2 = \iota \tilde{S}_{\mathrm{ff}}^2 \iota^{-1} = I$ も明らかである． □

[6] 無限グラフを扱う場合は素な無限長のパスも許容する．例えばパスグラフ（整数格子 $\mathbb{Z}$）上の moving-shift と呼ばれる典型的な量子ウォークは正方向・負方向の 2 本の長さ無限長のパスによって分割される．

他にも自然な分割の与え方としては，向き付け可能な閉曲面に埋め込まれたグラフに対して，各領域毎に Π_i を対応させるなど考えられる．

定義 2.7 により有向辺ベースのシフトオペレーターが与えられたことで，これを用いて頂点ベースのシフトオペレーター S が以下で与えられる．

定義 2.10. シフトオペレーター（頂点ベース）： 定義 2.7 で与えられた $\tilde{S}$ に対し，$\mathcal{H}_V$ 上のユニタリ作用素 $S = \iota\tilde{S}\iota^{-1}$ を定める．このとき，S は以下によって与えられる．

$$(S\Psi)(v) = \sum_{u \mid uv \in E} |L(v,u)\rangle\langle L(\tau^{-1}(v,u))| \ \Psi(u), \quad \forall\Psi \in \mathcal{H}_V,\ v \in V.$$

証明. $\Psi \in \mathcal{H}_V$ に対し，系 2.3 から任意の $e \in \mathcal{A}$ に対して

$$(\iota^{-1}\Psi)(e) = \langle L(e)|\Psi(t(e))$$

であり，$\tilde{S}$ の定義から $(\tilde{S}\iota^{-1}\Psi)(e) = (\iota^{-1}\Psi)(\tau^{-1}(e))$ であるので

$$(\tilde{S}\iota^{-1}\Psi)(e) = \langle L(\tau^{-1}(e))|\Psi(t(\tau^{-1}(e))).$$

したがって，任意の $v \in V$ に対して

$$\begin{aligned}(S\Psi)(v) &= (\iota\tilde{S}\iota^{-1}\Psi)(v) \\ &= \sum_{e \mid t(e)=v} |L(e)\rangle(S\iota^{-1}\Psi)(e) \\ &= \sum_{e \mid t(e)=v} |L(e)\rangle\langle L(\tau^{-1}(e))|\Psi(t(\tau^{-1}(e))).\end{aligned}$$

ここで，$v \in V$ を任意に固定したとき，集合 $\{e \in \mathcal{A} \mid t(e) = v\}$ と $\{u \in V \mid uv \in E\}$ の間には一対一の対応があり，また，

$$\{u \in V \mid uv \in E\} = \{t(\tau^{-1}(e)) \in V \mid t(e) = v,\ e \in \mathcal{A}\}$$

であるため，上式において $u = t(\tau^{-1}(e))$ とすると $e = (v,u)$ である．したがって，

$$(S\Psi)(v) = \sum_{u \mid uv \in E} |L(v,u)\rangle\langle L(\tau^{-1}(v,u))| \ \Psi(u).$$

□

ここで，$|L(e)\rangle$ の定義から上式における $|L(v,u)\rangle$ は $\deg(t(v,u)) = \deg(v)$ 次の列ベクトルであり，$\langle L(\tau^{-1}(v,u))|$ は $\deg(t(\tau^{-1}(v,u))) = \deg(u)$ 次の行ベクトルであることを注意しておく．

- <u>コインオペレーター</u>

コインオペレーターはランダムウォークにおけるウォーカーの推移確率に対応するものであり，量子ウォークのダイナミクスを定める上で非常に重要な役割を持つ．シフトオペレーターが有向辺上のダイナミクスを基準として与えられたのに対し，コインオペレーターは頂点上のダイナミクスを基準として与えられる．

定義 2.11. コインオペレーター（頂点ベース）： 任意のユニタリ行列の列 $\{C_v\}_{v\in V}$，$C_v \in \mathrm{U}(\deg(v))$ に対し $\mathcal{H}_V$ 上のユニタリ作用素 C を以下で定める．

$$(C\Psi)(v) = C_v\Psi(v), \quad \forall\Psi \in \mathcal{H}_V,\ v \in V.$$

また，これを用いて有向辺ベースのコインオペレーター $\tilde{C}$ は以下で定められる．

定義 2.12. コインオペレーター（有向辺ベース）： 定義 2.11 で与えられた C に対し，$\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ 上のユニタリ作用素 $\tilde{C} = \iota^{-1}C\iota$ を定める．このとき，$\tilde{C}$ は以下によって与えられる．

$$(\tilde{C}\tilde{\Psi})(e) = \sum_{f\,|\,t(f)=t(e)} \langle L(e)|C_{t(e)}|L(f)\rangle\ \tilde{\Psi}(f), \quad \forall\tilde{\Psi} \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}},\ e \in \mathcal{A}.$$

証明. 任意の $\tilde{\Psi} \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ および $v \in V$ に対し

$$(\iota\tilde{\Psi})(v) = \sum_{f\,|\,t(f)=v} \tilde{\Psi}(f)|L(f)\rangle$$

であり，C の定義から

$$(C\iota\tilde{\Psi})(v) = \sum_{f\,|\,t(f)=v} C_v|L(f)\rangle\ \tilde{\Psi}(f)$$

である．したがって，系 2.3 より任意の $e \in \mathcal{A}$ に対して

$$\begin{aligned}(\tilde{C}\tilde{\Psi})(e) = (\iota^{-1}C\iota\tilde{\Psi})(e) &= \langle L(e)|(C\iota\tilde{\Psi})(t(e))\rangle \\ &= \sum_{f\,|\,t(f)=t(e)} \langle L(e)|C_{t(e)}|L(f)\rangle\ \tilde{\Psi}(f).\end{aligned}$$

□

各 C_v は量子コインと呼ばれ，これらの設定により量子ウォークのモデルの名称を与える場合が多い．例えば，C_v としてそれぞれの大きさに対応する Grover 行列，離散 Fourier 変換行列を与えたモデルはそれぞれ Grover walk，Fourier walk と呼ばれる．

定義 2.13. Grover walk： 全ての $v \in V$ に対し $C_v = \mathrm{Gr}(\deg(v))$ により与えられる量子ウォークを Grover walk と定める．ただし，Grover 行列 $\mathrm{Gr}(n)$ は n 次のユニタリ行列であり以下で定められる．

$$\mathrm{Gr}(n) = 2|\mathbf{1}_n\rangle\langle\mathbf{1}_n| - I.$$

ここで $|\mathbf{1}_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}{}^T\left[1, 1, \cdots, 1\right] \in \mathbb{C}^n$ である．

定義 2.14. Fourier walk： 全ての $v \in V$ に対し $C_v = \mathrm{F}(\deg(v))$ により与えられる量子ウォークを Fourier walk と定める．ただし，離散 Fourier 変換行列 $\mathrm{F}(n)$ は n 次のユニタリ行列であり各成分は以下で与えられる．

$$(\mathrm{F}(n))_{a,b=0,1,\ldots,n-1} = \frac{\omega_n^{ab}}{\sqrt{n}}, \quad \omega_n = e^{\frac{2\pi}{n}i}.$$

グラフ上の量子ウォークの研究において，Grover walk はもっとも典型的なモデルの 1 つである．その理由は次の系が示すようにラベリング L の与え方にコインオペレーターが依存しないからである．

系 2.15. Grover walk における有向辺ベースのコインオペレーター $\tilde{C}$ は以下で記述される．

$$(\tilde{C}\tilde{\Psi})(e) = \sum_{f \mid t(f)=t(e)} \left(\frac{2}{\deg(t(e))} - \delta_{e,f} \right) \tilde{\Psi}(f), \quad \forall \tilde{\Psi} \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}},\ e \in \mathcal{A}.$$

ダイナミクスがラベリングに依存しないため有向辺ベースの記述がわかりやすく，flip-flop shift（定義 2.8）と併せたモデルは後述するスペクトル写像定理の観点からも盛んに研究が行わている．

● 時間発展作用素

最後に定義 2.4 で与えられる量子ウォークの時間発展作用素 $U = SC$ および $\tilde{U} = \tilde{S}\tilde{C}$ についてまとめておく．まず，有向辺ベースの時間発展については以下によって記述される．

系 2.16. 時間発展作用素 $\tilde{U} = \tilde{S}\tilde{C}$（有向辺ベース）：

$$(\tilde{U}\tilde{\Psi})(e) = \sum_{f \mid t(f)=o(e)} \langle L(\tau^{-1}(e))|C_{o(e)}|L(f)\rangle\ \tilde{\Psi}(f), \quad \forall \tilde{\Psi} \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}},\ e \in \mathcal{A}.$$

証明. 定義 2.7 および定義 2.12 より，任意の $\tilde{\Psi} \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}},\ e \in \mathcal{A}$ に対して

$$\begin{aligned}(\tilde{U}\tilde{\Psi})(e) &= (\tilde{S}\tilde{C}\tilde{\Psi})(e) = (\tilde{C}\tilde{\Psi})(\tau^{-1}(e)) \\ &= \sum_{f \mid t(f)=t(\tau^{-1}(e))} \langle L(\tau^{-1}(e))|C_{t(\tau^{-1}(e))}|L(f)\rangle\ \tilde{\Psi}(f).\end{aligned}$$

ここで，$t(\tau^{-1}(e)) = o(e)$ であるので，これを上式に代入することで題意が得られる． □

系 2.17. flip-flop shift（定義 2.8）の Grover walk（定義 2.13）の場合，$\tilde{U}$ は以下で表される．

$$(\tilde{U}\tilde{\Psi})(e) = \sum_{f \mid t(f)=o(e)} \left(\frac{2}{\deg(o(e))} - \delta_{\bar{e},f} \right) \Psi(f), \quad \forall \tilde{\Psi} \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}},\ e \in \mathcal{A}.$$

証明. flip-flop shift であるため $\tau^{-1}(e) = \bar{e}$ であり，系 2.15 から直ちに示される． □

次に，頂点ベースの時間発展については以下によって記述される．

系 2.18. 時間発展作用素 $U = SC$（頂点ベース）：

$$(U\Psi)(v) = \sum_{u \mid uv \in E} |L(v,u)\rangle\langle L(\tau^{-1}(v,u))|C_u\ \Psi(u), \quad \forall \Psi \in \mathcal{H}_V,\ v \in V.$$

証明. 定義 2.10 より，任意の $\Psi \in \mathcal{H}_V,\ v \in V$ に対して

$$(U\Psi)(v) = (SC\Psi)(v) = \sum_{u \mid uv \in E} |L(v,u)\rangle\langle L(\tau^{-1}(v,u))|\ (C\Psi)(u).$$

定義 2.11 より $(C\Psi)(u) = C_u\Psi(u)$ であるので題意が得られる． □

特に，頂点 $v, u \in V$ に対して

$$P(v,u) = |L(v,u)\rangle\langle L(\tau^{-1}(v,u))|C_u \tag{10}$$

と定めると，系 2.18 は

$$(U\Psi)(v) = \sum_{u \mid uv \in E} P(v,u)\Psi(u), \quad \forall \Psi \in \mathcal{H}_V,\ v \in V$$

と表される．すなわち，$P(v,u)$ は量子ウォーカーが頂点 u から v へと推移する重み行列として捉えられる．また，$|L(v,u)\rangle$ は $\deg(v)$ 次の行ベクトルであり，$\langle L(\tau^{-1}(v,u))|$ は $\deg(t(\tau^{-1}(v,u))) = \deg(u)$ 次の列ベクトルであったので，$P(v,u)$ は $\deg(v)\times\deg(u)$ 行列である．

ここで，$\mathbb{W}_t(v,u)$ を長さ $t\in\mathbb{N}$ の頂点 u から頂点 v へと向かう歩道全体の集合とする．すなわち，

$$\mathbb{W}_t(v,u) = \{(v_t, v_{t-1}, \cdots, v_1, v_0) \in V^{t+1} \mid v_0 = u,\ v_t = v,\ v_{i+1}v_i \in E\ (i = 0, 1, \ldots, t-1)\}. \tag{11}$$

このとき，系 2.18 の拡張として次の補題が得られる．

補題 2.19. 任意の $t\in\mathbb{N}$ に対し，以下が成り立つ．

$$(U^t\Psi)(v) = \sum_{u\in V} \Xi_t(v,u)\Psi(u), \quad \forall\Psi\in\mathcal{H}_V,\ v\in V.$$

ただし，$\Xi_t(v,u)$ は長さ t の頂点 u から v へと向かう歩道に付随する重み行列の総和，すなわち

$$\begin{aligned}\Xi_t(v,u) &= \sum_{(v_t,v_{t-1},\cdots,v_1,v_0)\in\mathbb{W}_t(v,u)} P(v_{j+1},v_j)P(v_j,v_{j-1})\cdots P(v_1,v_0)\\ &= \sum_{(v_t,v_{t-1},\cdots,v_1,v_0)\in\mathbb{W}_t(v,u)} \prod_{j=0}^{t-1} P(v_{j+1},v_j).\end{aligned}$$

$\Xi_t(v,u)$ は Konno [7] により $\mathbb{Z}$ 上の量子ウォークを解析するために導入されたアイデアであり，これをグラフ上へと拡張したものが上記の表現である．

例 2.20. **n 頂点サイクル C_n 上の量子ウォーク ($n>1$)：**

$V=\{0,1,\cdots,n-1\}$, $E=\{uv \mid v-u\equiv\pm1 \bmod n,\ u,v\in V\}$ で与えられる n 頂点サイクルを考える．このとき $\mathcal{H}_V=\ell^2(V;\mathbb{C}^2)$ となる．分割を $\Pi=\{\Pi_+,\Pi_-\}$ および

$$\begin{aligned}\Pi_+ &= \{(1,0),\ (2,1),\ \cdots,\ (n-1,n-2),\ (0,n-1)\},\\ \Pi_- &= \{(n-2,n-1),\ (n-3,n-2),\ \cdots,\ (0,1),\ (n-1,0)\},\end{aligned}$$

で定める．また，ラベリングを

$$L(e) = \begin{cases} 0, & e\in\Pi_+,\\ 1, & e\in\Pi_-,\end{cases}$$

で与える．このとき，系 2.18 は以下となる．

$$(U\Psi)(v) = |0\rangle\langle0|C_{v+1 \bmod n}\Psi(v+1 \bmod n) + |1\rangle\langle1|C_{v-1 \bmod n}\Psi(v-1 \bmod n).$$

また，V は $\mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$ と同一視されるため，改めて $\mathcal{H}=\mathcal{H}_V=\ell^2(\mathbb{Z}/n\mathbb{Z};\mathbb{C}^2)$ と与えなおすと上式は次のように表される．

$$(U\Psi)(x) = |0\rangle\langle0|C_{x+1}\Psi(x+1) + |1\rangle\langle1|C_{x-1}\Psi(x-1), \quad \forall x\in\mathbb{Z}/n\mathbb{Z}.$$

さらに，量子コイン C_x を頂点に依らず $C_x=C_{loc}$ と与え， $P=|0\rangle\langle0|C_{loc}$, $Q=|1\rangle\langle1|C_{loc}$ といった表記をすることで，序文でも述べた典型的な 1 次元上のモデルの有限次元版が与えられる．

例 2.21. n 頂点サイクル C_n 上の自己ループ付き量子ウォーク $(n>1)$：

$V=\{0,1,\cdots,n-1\}$, $E=\{uv \mid v-u\equiv \pm 1 \bmod n$ または $u=v,\ u,v\in V\}$ で与えられる *3* 正則グラフである自己ループ付き n 頂点サイクルを考える．例 2.20 で与えられた通常のサイクルの場合と同じように，あらかじめ頂点集合 V を $\mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$ と同一視しておく．このとき $\mathcal{H}_V=\ell^2(V;\mathbb{C}^3)$ となる．分割を $\Pi=\bigcup_{x\in\mathbb{Z}/n\mathbb{Z}}\{\Pi_o(x)\}\cup\{\Pi_+,\Pi_-\}$ とする．ただし，

$$
\begin{aligned}
\Pi_o(x)&=\{(x,x)\},\quad x\in\mathbb{Z}/n\mathbb{Z},\\
\Pi_+&=\{(1,0),\ (2,1),\ \cdots,\ (n-1,n-2),\ (0,n-1)\},\\
\Pi_-&=\{(n-2,n-1),\ (n-3,n-2),\ \cdots,\ (0,1),\ (n-1,0)\},
\end{aligned}
$$

で定める．また，ラベリングを

$$
L(e)=\begin{cases}0, & e\in\Pi_+,\\ 1, & e\in\Pi_o(x),\ x\in\mathbb{Z}/n\mathbb{Z}.\\ 2, & e\in\Pi_-,\end{cases}
$$

で与える．このとき，系 2.18 は以下となる．

$$
(U\Psi)(x)=|0\rangle\langle 0|C_{x+1}\Psi(x+1)+|1\rangle\langle 1|C_x\Psi(x)+|2\rangle\langle 2|C_{x-1}\Psi(x-1),\quad \forall x\in\mathbb{Z}/n\mathbb{Z}.
$$

2.1　有限グラフ上の split-step 量子ウォーク

本章では，前章にて与えたグラフ上の量子ウォークの拡張となる，グラフ上の split-step 量子ウォークを構成する．

まず初めに，例 2.20 と同じく，n 頂点サイクルグラフ上のモデルにおいて，異なる挙動を持つ 2 ステップを 1 つにまとめた時間発展を持つ量子ウォークを考える．すなわち，量子ウォークの状態空間となるヒルベルト空間を

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_V = \ell^2(\mathbb{Z}/n\mathbb{Z}; \mathbb{C}^2)$$

とし，$\mathcal{H}$ 上の時間発展作用素を $U = U_1 U_2$ で与える．ただし，任意の $\Psi \in \mathcal{H}$, $x \in \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$ に対し

$$\begin{aligned}(U_1\Psi)(x) &= P_{x+1,1}\Psi(x+1) + Q_{x,1}\Psi(x), \\ (U_2\Psi)(x) &= P_{x,2}\Psi(x) + Q_{x-1,2}\Psi(x-1),\end{aligned}$$

であり，$P_{x,j}$，$Q_{x,j}$ はそれぞれ 2 次ユニタリ行列 $C_{x,j} \in \mathrm{U}(2)$ の各行の分割として以下のように与える．

$$C_{x,j} = \begin{bmatrix} a_{x,j} & b_{x,j} \\ c_{x,j} & d_{x,j} \end{bmatrix}, \qquad P_{x,j} = |0\rangle\langle 0|C_{x,j}, \qquad Q_{x,j} = |1\rangle\langle 1|C_{x,j}.$$

すなわち，U_1 はウォーカーを重み $P_{x,1}$ で負の方向へ推移させ，重み $Q_{x,1}$ でその場に留める作用素である．U_2 はその逆であり，重み $P_{x,2}$ でその場に留め，重み $Q_{x,2}$ で正の方向へとウォーカーを推移させる．したがって，

$$(U\Psi)(x) = (P_{x,2}Q_{x,1} + Q_{x-1,2}P_{x+1,1})\Psi(x) + P_{x,2}P_{x+1,1}\Psi(x+1) + Q_{x-1,2}Q_{x,1}\Psi(x-1). \tag{12}$$

このように，一定の重みによりウォーカーをその場へ留まらせながら隣接頂点へと推移させる量子ウォークのモデルをsplit-step 量子ウォークと呼ぶ[7]．特に，

$$\begin{aligned}P_{x,2}Q_{x,1} + Q_{x-1,2}P_{x+1,1} &= |0\rangle\langle 0|C_{x,2}|1\rangle\langle 1|C_{x,1} + |1\rangle\langle 1|C_{x-1,2}|0\rangle\langle 0|C_{x+1,1} \\ &= b_{x,2}|0\rangle\langle 1|C_{x,1} + c_{x-1,2}|1\rangle\langle 0|C_{x+1,1},\end{aligned}$$

であり，

$$\begin{aligned}P_{x,2}P_{x+1,1} &= |0\rangle\langle 0|C_{x,2}|0\rangle\langle 0|C_{x+1,1} \\ &= a_{x,2}P_{x+1,1}, \\ Q_{x-1,2}Q_{x,1} &= |1\rangle\langle 1|C_{x-1,2}|1\rangle\langle 1|C_{x,1} \\ &= d_{x-1,2}Q_{x,1},\end{aligned}$$

であることから，任意の x に対して $(a_{x,2}, b_{x,2}, c_{x,2}, d_{x,2}) = (1,0,0,1)$ と与えることで (12) は

$$(U\Psi)(x) = P_{x+1,1}\Psi(x+1) + Q_{x,1}\Psi(x-1)$$

[7] 時間発展によりウォーカーが停留するモデルは Lazy（ものぐさ）量子ウォークと呼ばれるモデルである．Lazy 量子ウォークは例 2.21 のように，自己ループを付与することでウォーカーを停留させるモデルを含むが，(12) のようにグラフ構造を変化させない，つまり状態数を増やさずにウォーカーの停留を定式化したモデルを区別して split-step 量子ウォークと呼称する．

となり，適当に重みを取りなおすことで典型的な 1 次元上のモデル（例 2.20）の時間発展と一致する．

次に，このような一定の重みで停留する split-step 量子ウォークモデルを有限グラフ上へと拡張することを目指す．ただし，本章においては自己ループを持たない場合のグラフのみを扱う．すなわち，以下の仮定を課す．

仮定 1. 任意の $e \in \mathcal{A}$ に対し，$e \neq \bar{e}$ である．

まず，シフトオペレーター（定義 2.7）を次のように拡張するところから始める．

$$(\tilde{S}\tilde{\Psi})(e) = \sum_{f \mid t(f)=t(e)} \alpha_{e,f}\tilde{\Psi}(f) + \beta_{e,\tau^{-1}(e)}\tilde{\Psi}(\tau^{-1}(e)), \quad \forall\tilde{\Psi} \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}},\ e \in \mathcal{A}. \tag{13}$$

ただし，任意の $e, f \in \mathcal{A}$ に対し $\alpha_{e,f}, \beta_{e,f} \in \mathbb{C}$, $\beta_{e,f} \neq 0$ であり，これらはそれぞれ有向辺 f から e へと推移する重みを表す．このとき，$\alpha_{e,f} = 0$, $\beta_{e,f} = 1$ と与えることにより上式は定義 2.7 と一致することが確かめられる．

量子ウォークはユニタリな時間発展で与えられる必要性があるため，(13) で与えた $\tilde{S}$ もユニタリ作用素でなくてはならない．したがって，$\tilde{S}$ がユニタリとなる $\alpha_{e,f}, \beta_{e,f}$ の特徴づけについて以下で議論する．

補題 2.22. (13) で与えられた $\tilde{S}$ に対し，その共役作用素 $\tilde{S}^*$ は以下となる．

$$(\tilde{S}^*\tilde{\Psi})(e) = \sum_{f \mid, t(f)=t(e)} \bar{\alpha}_{f,e}\tilde{\Psi}(f) + \bar{\beta}_{\tau(e),e}\tilde{\Psi}(\tau(e)), \quad \forall\tilde{\Psi} \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}},\ e \in \mathcal{A}.$$

証明. 任意の $\tilde{\Phi}, \tilde{\Psi} \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ に対し，

$$\langle\tilde{\Phi}, \tilde{S}\tilde{\Psi}\rangle = \sum_{e\in\mathcal{A}} \left(\sum_{f \mid t(f)=t(e)} \alpha_{e,f}\bar{\tilde{\Phi}}(e)\tilde{\Psi}(e) + \beta_{e,\tau^{-1}(e)}\bar{\tilde{\Phi}}(e)\tilde{\Psi}(\tau^{-1}(e)) \right). \tag{14}$$

ここで，

$$\sum_{e\in\mathcal{A}} \sum_{f \mid t(f)=t(e)} \alpha_{e,f}\bar{\tilde{\Phi}}(e)\tilde{\Psi}(f) = \sum_{e\in\mathcal{A}} \sum_{f \mid t(f)=t(e)} \alpha_{f,e}\bar{\tilde{\Phi}}(f)\tilde{\Psi}(e) \tag{15}$$

および

$$\sum_{e\in\mathcal{A}} \beta_{e,\tau^{-1}(e)}\bar{\tilde{\Phi}}(e)\tilde{\Psi}(\tau^{-1}(e)) = \sum_{e\in\mathcal{A}} \beta_{\tau(e),e}\bar{\tilde{\Phi}}(\tau(e))\tilde{\Psi}(e) \tag{16}$$

であるので，(14) に (15)，(16) を代入することで

$$\begin{aligned}\langle\tilde{\Phi}, \tilde{S}\tilde{\Psi}\rangle &= \sum_{e\in\mathcal{A}} \left(\sum_{f \mid t(f)=t(e)} \alpha_{f,e}\bar{\tilde{\Phi}}(f) + \beta_{\tau(e),e}\bar{\tilde{\Phi}}(\tau(e)) \right) \tilde{\Psi}(e) \\ &= \langle\tilde{S}^*\tilde{\Phi}, \Psi\rangle\end{aligned}$$

が得られる． □

これを用いて $\tilde{S}$ がユニタリであること，すなわち $\tilde{S}\tilde{S}^* = \tilde{S}^*\tilde{S} = I$ となる条件を求める．まず初めに，補題 2.22 から，任意の $\tilde{\Psi} \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}}$，$e \in \mathcal{A}$ に対して以下が成り立つ．

$$\begin{aligned}
(\tilde{S}\tilde{S}^*\tilde{\Psi})(e) &= \sum_{f \mid t(f)=t(e)} \alpha_{e,f}(\tilde{S}^*\tilde{\Psi})(f) + \beta_{e,\tau^{-1}(e)}(\tilde{S}^*\tilde{\Psi})(\tau^{-1}(e)) \\
&= \sum_{f \mid t(f)=t(e)} \left\{\alpha_{e,f}\left(\sum_{g \mid t(g)=t(f)} \bar{\alpha}_{g,f}\tilde{\Psi}(g) + \bar{\beta}_{\tau(f),f}\tilde{\Psi}(\tau(f))\right)\right\} \\
&\qquad + \beta_{e,\tau^{-1}(e)}\left(\sum_{g \mid t(g)=t(\tau^{-1}(e))} \bar{\alpha}_{g,\tau^{-1}(e)}\tilde{\Psi}(g) + \bar{\beta}_{e,\tau^{-1}(e)}\tilde{\Psi}(e)\right) \\
&= \sum_{f \mid t(f)=t(e)} \sum_{g \mid t(g)=t(f)} \alpha_{e,f}\bar{\alpha}_{g,f}\tilde{\Psi}(g) \;+\; \sum_{f \mid t(f)=t(e)} \alpha_{e,f}\bar{\beta}_{\tau(f),f}\tilde{\Psi}(\tau(f)) \\
&\qquad + \sum_{g \mid t(g)=t(\tau^{-1}(e))} \bar{\alpha}_{g,\tau^{-1}(e)}\beta_{e,\tau^{-1}(e)}\tilde{\Psi}(g) \;+\; |\beta_{e,\tau^{-1}(e)}|^2\tilde{\Psi}(e).
\end{aligned} \tag{17}$$

ここで，(17) の各項毎に $\tilde{S}\tilde{S}^*\tilde{\Psi}$ が値を持つ有向辺を確かめる．まず，第 1 項

$$\sum_{f \mid t(f)=t(e)} \sum_{g \mid t(g)=t(f)} \alpha_{e,f}\bar{\alpha}_{g,f}\tilde{\Psi}(g)$$

については，$t(e) = t(f) = t(g)$ であることから，e と終点を共有する有向辺，すなわち

$$A_1 = \{g \mid t(g) = t(e)\} \tag{18}$$

の上に値を持つ．次に，第 2 項

$$\sum_{f \mid t(f)=t(e)} \alpha_{e,f}\bar{\beta}_{\tau(f),f}\tilde{\Psi}(\tau(f))$$

については，$\tau(f) \to g$ と変数変換を行うと，$t(f) = t(\tau^{-1}(g))$ より

$$\sum_{g \mid o(g)=t(e)} \alpha_{e,\tau^{-1}(g)}\bar{\beta}_{g,\tau^{-1}(g)}\tilde{\Psi}(g)$$

となるため，e の終点を始点とする有向辺上，すなわち

$$A_2 = \{g \mid o(g) = t(e)\} \tag{19}$$

上に値を持つ．また，第 3 項

$$\sum_{g \mid t(g)=t(\tau^{-1}(e))} \bar{\alpha}_{g,\tau^{-1}(e)}\beta_{e,\tau^{-1}(e)}\tilde{\Psi}(g)$$

については，$t(\tau^{-1}(e)) = o(e)$ であることから

$$\sum_{g \mid t(g)=o(e)} \bar{\alpha}_{g,\tau^{-1}(e)}\beta_{e,\tau^{-1}(e)}\tilde{\Psi}(g)$$

となるため，e の始点を終点とする有向辺上，すなわち

$$A_3 = \{g \mid t(g) = o(e)\} \tag{20}$$

上に値を持つ．最後に第 4 項は明らかに e 自身の上に値を持つため，

$$A_4 = \{e\} \tag{21}$$

とする．$\tilde{S}\tilde{S}^* = I$ を満たすことは任意の $\tilde{\Psi} \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}}$, $e \in \mathcal{A}$ に対し $(\tilde{S}\tilde{S}^*\tilde{\Psi})(e) = \tilde{\Psi}(e)$ を満たすことと同値である．ここで，(18)(19)(20)(21) から

$$\begin{aligned} &A_1 \cap A_2 = A_1 \cap A_3 = A_2 \cap A_4 = A_3 \cap A_4 = \emptyset. \\ &A_1 \cap A_4 = \{e\}, \qquad A_2 \cap A_3 = \{\bar{e}\}. \end{aligned}$$

したがって，

(i) $\sum_{f \mid t(f)=t(e)} \alpha_{e,f}\bar{\alpha}_{g,f} = 0, \quad \forall g \in A_1 \setminus \{e\}$.

(ii) $\alpha_{e,\tau^{-1}(g)} = 0, \quad \forall g \in A_2 \setminus \{\bar{e}\}$.

(iii) $\bar{\alpha}_{g,\tau^{-1}(e)} = 0, \quad \forall g \in A_3 \setminus \{\bar{e}\}$.

これらに加え，

(iv) $\alpha_{e,\tau^{-1}(\bar{e})}\bar{\beta}_{\bar{e},\tau^{-1}(\bar{e})} + \bar{\alpha}_{\bar{e},\tau^{-1}(e)}\beta_{e,\tau^{-1}(e)} = 0$.

(v) $\sum_{f \mid t(f)=t(e)} |\alpha_{e,f}|^2 + |\beta_{e,\tau^{-1}(e)}|^2 = 1$.

任意の $e \in \mathcal{A}$ に対し上記の条件全てを満たすことが $\tilde{S}\tilde{S}^* = I$ となる必要十分条件である．このとき，(ii) は任意の $e \in \mathcal{A}$ について成り立つことから (iii) と同値である．また，これが成り立つとき $f \neq \tau^{-1}(\bar{e})$ であれば $\alpha_{e,f} = 0$ なので (i) は

$$\sum_{f \mid t(f)=t(e)} \alpha_{e,f}\bar{\alpha}_{g,f} = \alpha_{e,\tau^{-1}(\bar{e})}\bar{\alpha}_{g,\tau^{-1}(\bar{e})} = 0, \quad \forall g \in A_1 \setminus \{e\}$$

となり，(ii) が成り立つとき (i) もまた満たされる．同様にして (ii) が成り立つとき (v) は以下と同値となる．

(v') $|\alpha_{e,\tau^{-1}(\bar{e})}|^2 + |\beta_{e,\tau^{-1}(e)}|^2 = 1$.

したがって，(ii)(iv)(v') の条件をそれぞれ満たすことが $\tilde{S}\tilde{S}^* = I$ と同値となる．特に，(iv)(v') を同時に満たすことは，以下で定義される 2 次正方行列の列 $\{\varepsilon_e\}_{e \in \mathcal{A}}$ がユニタリ行列の列となることと同値である．

$$\varepsilon_e = \begin{bmatrix} \alpha_{e,\tau^{-1}(\bar{e})} & \beta_{e,\tau^{-1}(e)} \\ \beta_{\bar{e},\tau^{-1}(\bar{e})} & \alpha_{\bar{e},\tau^{-1}(e)} \end{bmatrix}. \tag{22}$$

また，このとき同様にして $\tilde{S}^*\tilde{S} = I$ も成り立つため，これらの議論をまとめ，グラフ上の split-step 量子ウォークのシフトオペレーターを以下で定義する．

定義 2.23. split-step シフトオペレーター（有向辺ベース）： 仮定 1 の下で，(22) で定められるユニタリ行列の列 $\{\varepsilon_e\}_{e \in \mathcal{A}}$ に対し，$\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ 上のユニタリ作用素 $\tilde{S}$ を以下で定める．

$$(\tilde{S}\tilde{\Psi})(e) = \alpha_{e,\tau^{-1}(\bar{e})}\tilde{\Psi}(\tau^{-1}(\bar{e})) + \beta_{e,\tau^{-1}(e)}\tilde{\Psi}(\tau^{-1}(e)), \quad \forall \tilde{\Psi} \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}},\ e \in \mathcal{A}.$$

系 2.24. flip-flop shift： (8) で与えられた分割，すなわち任意の $e \in \mathcal{A}$ に対し $\tau^{-1}(e) = \bar{e}$ を満たす場合，定義 2.23 で与えられるシフトオペレーターを $\tilde{S} = \tilde{S}_{\mathrm{ff}}$ と記す．このとき

$$(\tilde{S}_{\mathrm{ff}}\tilde{\Psi})(e) = \alpha_{e,e}\tilde{\Psi}(e) + \beta_{e,\bar{e}}\tilde{\Psi}(\bar{e}), \quad \forall \tilde{\Psi} \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}},\ e \in \mathcal{A}.$$

特に，$\tilde{S}_{\mathrm{ff}}^2 = I$ は任意の $e \in \mathcal{A}$ に対し $\varepsilon_e^2 = I$ を満たすことと同値である．

また，頂点ベースのシフトオペレーターは定義 2.10 と同様に $S = \iota\tilde{S}\iota^{-1}$ で定められる．

定義 2.25. split-step シフトオペレーター（頂点ベース）： 仮定 1 の下で，定義 2.23 で与えられた $\tilde{S}$ に対し $\mathcal{H}_V$ 上のユニタリ作用素 $S = \iota\tilde{S}\iota^{-1}$ を定める．このとき，S は以下によって与えられる．

$$
\begin{aligned}
(S\Psi)(v) = \sum_{u \mid uv \in E} \Bigg(& \alpha_{(v,u),\tau^{-1}(u,v)} |L(v,u)\rangle\langle L(\tau^{-1}(u,v))|\Psi(v) \\
& + \beta_{(v,u),\tau^{-1}(v,u)} |L(v,u)\rangle\langle L(\tau^{-1}(v,u))|\Psi(u) \Bigg), \qquad \forall\Psi \in \mathcal{H}_V,\ v \in V.
\end{aligned}
$$

3　量子ウォークの周期性

量子ウォークには古典系であるランダムウォークには存在しない周期性と呼ばれる性質が存在する．周期性とはすなわち，ある一定時刻毎に量子状態が完全に復元する性質であり，グラフ上の量子ウォークにおける研究対象の 1 つとしてよく知られている．

定義 3.1. 時間発展作用素 U に対し，$U^N = I$ を満たす有限の自然数 $N(<\infty)$ が存在するとき量子ウォークは周期的であり，これを満たす最小の N を量子ウォークの周期と呼ぶ．すなわち

$$\mathcal{N} = \{n \in \mathbb{N} \mid U^n = I,\ n < \infty\}$$

としたとき，$\mathcal{N} \neq \emptyset$ であれば量子ウォークは周期的であり $N = \min \mathcal{N}$ がその周期である．また，$\mathcal{N} = \emptyset$ である場合は量子ウォークは周期的でなく，このとき周期 $N = \infty$ と表す．

周期性の研究における主な研究目標は以下の 2 点が挙げられる．

1. 周期的な量子ウォークを与えるグラフの特徴づけ．
2. 具体的な周期の解析．

まず，1 つ目のグラフの特徴づけについては，後述する先行研究や定理からもわかるように，殆ど多くのグラフ上の量子ウォークが周期的でないことが知られている．特に頂点数の大きなグラフや，非自明である周期的な量子ウォークを与えるグラフ系列は知られていない．2 つ目は量子ウォークの周期性から観点から特徴づけられるグラフの分類，すなわちグラフ同型問題への量子アルゴリズム的アプローチとしての背景を持つ．

いずれの研究にしても，シフトオペレーター S やコインオペレーター C を固定した特定のモデルについて解析が行われることが主である．本稿では，flip-flop shift（定義 2.8）による Grover walk（定義 2.13）における先行研究を始めに紹介し，その後に任意のシフトオペレーターを持つ Fourier walk（定義 2.14）における諸定理を紹介する．

3.1　Grover walk における周期性

U の固有分解を考えることにより量子ウォークが周期 N を持つことは以下が成り立つことと必要十分であるとわかる．

$$\lambda^N = 1, \qquad \forall \lambda \in \sigma(U). \tag{23}$$

すなわち，U の固有値の構造を明らかにすることで周期の有無を判定することが可能となる．5 章でも述べるように flip-flop shift による Grover walk はスペクトル写像定理（定理 4.26）により，グラフ上の対称ランダムウォークの固有値を用いて時間発展作用素 U の固有値は記述される．このような “良い” 性質を用いることにより，様々なグラフ上における Grover walk の周期性についての結果が知られている．以下，先行研究よりいくつかの例を紹介する．

定理 3.2. (Higuchi, Konno, Sato, Segawa [22])： Grover walk（flip-flop shift）の周期は以下の通りである．

(1) サイクル C_n : $N = n$.

(2) 完全グラフ K_n :

頂点数 n	2	3	$\neq 2, 3$
周期 N	2	3	∞

(3) 完全二部グラフ $K_{m,n}$ $(m+n \geq 3)$: $N = 4$

(4) 強正則グラフ $\mathrm{SRG}(n, k, \lambda, \mu)$:

(n, k, λ, μ)	$(5, 2, 0, 1)$	$(2k, k, 0, k)$	$(3\lambda, 2\lambda, \lambda, 2\lambda)$	その他
N	5	4	12	∞

3.2 Fourier walk における周期性

本節においては，Saito [18] で得られた正則グラフ上の Fourier walk における周期性に関する定理と，その拡張について述べる．したがって，本節においては以下の仮定を課した量子ウォークを扱う．

仮定 2. Fourier walk : $C_v = \mathrm{F}(\deg(v))$, $\forall v \in V$ である．ただし，$\mathrm{F}(n)$ は n 次の離散 Fourier 変換行列であり，$\mathrm{F}(n) = (\omega_n^{ab}/\sqrt{n})_{a,b=0,1,\ldots,n-1}$，すなわち以下のように与えられる行列である．

$$\mathrm{F}(n) = \frac{1}{\sqrt{n}} \begin{bmatrix} \omega_n^{0\times 0} & \omega_n^{0\times 1} & \cdots & \omega_n^{0\times(n-1)} \\ \omega_n^{1\times 0} & \omega_n^{1\times 1} & \cdots & \omega_n^{1\times(n-1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega_n^{(n-1)\times 0} & \omega_n^{(n-1)\times 1} & \cdots & \omega_n^{(n-1)\times(n-1)} \end{bmatrix}, \quad \omega_n = e^{\frac{2\pi}{n}i}.$$

仮定 3. p^n-正則グラフ： ある素数 p と自然数 n に対し，$\deg(v) = p^n$, $\forall v \in V$ を満たす．

本節の目的は Saito [18] の主結果である次の定理を証明することである．

定理 3.3. 仮定 2，仮定 3 の下で，自然数 N に対し $U^N = I$ が成り立つとき，任意の $u, v \in V$ に対して以下が成り立つ．

$$|\mathbb{W}_N(v, u)| \equiv 0 \bmod p.$$

ただし $\mathbb{W}_N(v, u)$ は (11) で定められた，長さ N の頂点 u と v を結ぶ歩道全体の集合であり，したがって $|\mathbb{W}_N(v, u)|$ はそのような歩道の総数を意味する．

定理 3.3 を示すため，いくつかの補題を用意する．まず，補題 2.19 より，任意の $\Psi \in \mathcal{H}$, $v \in V$ に対し，

$$(U^N\Psi)(v) = \sum_{v \in V} \Xi_N(v, u)\Psi(u)$$

が成り立つ．$U^N = I$ が成り立つことは，任意の $\Psi \in \mathcal{H}$ および $v \in V$ に対して $(U^N\Psi)(v) = \Psi(v)$ が成り立つことと同値であるため，以下の補題が得られる．

補題 3.4. 自然数 N に対し $U^N = I$ を満たすことは，任意の $v, u \in V$ に対し以下を満たすことと同値である．

$$\Xi_N(v,u) = \begin{cases} I, & v = u, \\ O, & v \neq u. \end{cases}$$

ここで，O は零行列である．

また，$\Xi_N(v,u)$ は定義より

$$\Xi_N(v,u) = \sum_{(v_N, v_{N-1}, \cdots, v_1, v_0) \in \mathbb{W}_N(v,u)} \prod_{j=0}^{N-1} P(v_{j+1}, v_j)$$

であった．また，頂点 v_j から v_{j+1} へと量子ウォーカーが推移する重み行列 $P(v_{j+1}, v_j)$ は以下であった．

$$P(v_{j+1}, v_j) = |L(v_{j+1}, v_j)\rangle\langle L(\tau^{-1}(v_{j+1}, v_j))| C_{v_j}.$$

このとき，次の補題が成り立つ．

補題 3.5. $t \in \mathbb{N}(>1)$，$(v_t, v_{t-1}, \cdots, v_1, v_0) \in \mathbb{W}_t(v_t, v_0)$ に対し，以下が成り立つ．

$$\prod_{j=0}^{t-1} P(v_{j+1}, v_j) = \left(\prod_{j=1}^{t-1} \langle L(\tau^{-1}(v_{j+1}, v_j))| C_{v_j} |L(v_j, v_{j-1})\rangle \right) |L(v_t, v_{t-1})\rangle\langle L(\tau^{-1}(v_1, v_0))| C_{v_0}.$$

証明. 上式の () の中身は複素数であるので，

$$\begin{aligned}
&\left(\prod_{j=1}^{t-1} \langle L(\tau^{-1}(v_{j+1}, v_j))| C_{v_j} |L(v_j, v_{j-1})\rangle \right) |L(v_t, v_{t-1})\rangle\langle L(\tau^{-1}(v_1, v_0))| C_{v_0} \\
&= |L(v_t, v_{t-1})\rangle \left(\prod_{j=1}^{t-1} \langle L(\tau^{-1}(v_{j+1}, v_j))| C_{v_j} |L(v_j, v_{j-1})\rangle \right) \langle L(\tau^{-1}(v_1, v_0))| C_{v_0} \\
&= \prod_{j=0}^{t-1} P(v_{j+1}, v_j).
\end{aligned}$$

□

また，本節で扱う設定においては次の系が得られる．

系 3.6. 仮定 2，仮定 3 の下で，$t \in \mathbb{N}(>1)$，$(v_t, v_{t-1}, \cdots, v_1, v_0) \in \mathbb{W}_t(v_t, v_0)$ に対し，以下が成り立つ．

$$\prod_{j=0}^{t-1} P(v_{j+1}, v_j) = \frac{\omega_{p^n}^{\sum_{j=1}^{t-1} L(\tau^{-1}(v_{j+1}, v_j)) L(v_j, v_{j-1})}}{\sqrt{p^{n(t-1)}}} |L(v_t, v_{t-1})\rangle\langle L(\tau^{-1}(v_1, v_0))| \mathrm{F}(p^n).$$

証明. 仮定 2，仮定 3 より，

$$\langle L(\tau^{-1}(v_{j+1}, v_j))| \mathrm{F}(p^n) |L(v_j, v_{j-1})\rangle = \frac{\omega_{p^n}^{L(\tau^{-1}(v_{j+1}, v_j)) L(v_j, v_{j-1})}}{\sqrt{p^n}}$$

であるので，補題 3.5 より直ちに題意が得られる． □

系 3.6 より

$$\Xi_N(v,u) = \sum_{(v_N,v_{N-1},\cdots,v_1,v_0)\in\mathbb{W}_N(v,u)} \frac{\omega_{p^n}^{\sum_{j=1}^{N-1} L(\tau^{-1}(v_{j+1},v_j))L(v_j,v_{j-1})}}{\sqrt{p^{n(N-1)}}} |L(v_N,v_{N-1})\rangle\langle L(\tau^{-1}(v_1,v_0))|\mathrm{F}(p^n)$$

である．$|j\rangle \in \mathbb{C}^{p^n}$ $(j=0,1,\ldots,p^n-1)$ を $\mathbb{C}^{p^n}$ 上の標準基底とし，$|\mathbf{1}\rangle = \sum_{j=0}^{p^n-1}|j\rangle$ とする．このとき，$F(p^n)|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{p^n}}|\mathbf{1}\rangle$ であるので，

$$\langle \mathbf{1}, L(v_N,v_{N-1})\rangle = 1, \qquad \langle L(\tau^{-1}(v_1,v_0))|\mathrm{F}(p^n)|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{p^n}}\langle L(\tau^{-1}(v_1,v_0)),\mathbf{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{p^n}}$$

が成り立つことから，

$$\langle \mathbf{1}|\Xi_N(v,u)|0\rangle = \sum_{(v_N,v_{N-1},\cdots,v_1,v_0)\in\mathbb{W}_N(v,u)} \frac{\omega_{p^n}^{\sum_{j=1}^{N-1} L(\tau^{-1}(v_{j+1},v_j))L(v_j,v_{j-1})}}{\sqrt{p^{nN}}}$$

が導かれる．上式を補題 3.4 と併せることで以下の系が得られる．

系 3.7. 仮定 2，仮定 3 の下で $N\in\mathbb{N}$ に対し，$U^N = I$ を満たすとき，任意の $u,v\in V$ に対し以下が成り立つ．

$$\sum_{(v_N,v_{N-1},\cdots,v_1,v_0)\in\mathbb{W}_N(v,u)} \omega_{p^n}^{\sum_{j=1}^{N-1} L(\tau^{-1}(v_{j+1},v_j))L(v_j,v_{j-1})} = \begin{cases} \sqrt{p^{nN}}, & v=u, \\ 0, & v\neq u. \end{cases}$$

ここで，$v,u\in V$, $t\in\mathbb{N}$ (>1) および $k=0,1,\ldots,p^n-1$ に対して $M_k(v,u;t)$ を以下で定める．

$$M_k(v,u;t) = \left| \left\{ (v_t,v_{t-1},\cdots,v_1,v_0)\in\mathbb{W}_t(v,u) \;\middle|\; \sum_{j=1}^{t-1} L(\tau^{-1}(v_{j+1},v_j))L(v_j,v_{j-1}) \equiv 0 \bmod k \right\} \right|. \tag{24}$$

このとき，

$$\sum_{k=0}^{p^n-1} M_k(v,u;t) = |\mathbb{W}_t(v,u)| \tag{25}$$

であり，また

$$\sum_{(v_t,v_{t-1},\cdots,v_1,v_0)\in\mathbb{W}_t(v,u)} \omega_{p^n}^{\sum_{j=1}^{t-1} L(\tau^{-1}(v_{j+1},v_j))L(v_j,v_{j-1})} = \sum_{k=0}^{p^n-1} M_k(v,u;t)\omega_{p^n}^k \tag{26}$$

である．これらを用いることで，以下の補題が得られる．

補題 3.8. 仮定 2，仮定 3 の下で $N\in\mathbb{N}$ に対し，$U^N = I$ を満たすとき，任意の $u,v\in V$ に対し以下が成り立つ．

$$\sum_{k=0}^{p^n-1}\left(\sum_{j=0}^{p^n-1} M_k(v,u;N)M_{k-j}(v,u;N) - p^{nN}\delta_{v,u}\delta_{0,k}\right)\omega_{p^n}^k = 0.$$

証明. まず，系 3.7 および (26) より，

$$\sum_{k=0}^{p^n-1} M_k(v,u;N)\omega_{p^n}^k = \delta_{v,u}\sqrt{p^{nN}}.$$

両辺の平方を取ることで，

$$\sum_{k=0}^{p^n-1}\left(\sum_{j=0}^{p^n-1} M_k(v,u;N)M_{k-j}(v,u;N)\right)\omega_{p^n}^k = p^{nN}\delta_{v,u}$$

が得られ，右辺は $p^{nN}\delta_{v,u} = \sum_{k=0}^{p^n-1} p^{nN}\delta_{v,u}\delta_{0,k}\omega_{p^n}^k$ であることから題意が示される． □

この補題 3.8 と，以下の補題を組み合わせることで定理 3.3 の証明が得られる．

補題 3.9. 素数 p および $n \in \mathbb{N}$ に対し，整数係数多項式 $f(x) = \sum_{j=0}^{p^n-1} z_j x^j$，$z_j \in \mathbb{Z}$ を定める．このとき，$f(\omega_{p^n}) = 0$ であれば $\sum_{j=0}^{p^n-1} z_j \equiv 0 \bmod p$ が成り立つ．

補題 3.9 を示すためにいくつかの準備を行う．

定義 3.10. 円分多項式： $t \in \mathbb{N}$ に対し，t 次の円分多項式 $\Phi_t(x)$ を以下で定める．

$$\Phi_t(x) = \prod_{\substack{1\le j\le t\\ \gcd(j,t)=1}} (x-\omega_t).$$

ただし，$\gcd(\cdot,\cdot)$ は最大公約数を表す．

円分多項式については，様々な性質が知られているが，補題 3.9 の証明に必要となるいくつかの基本的な性質を下に記しておく．

(1) $\Phi_t(x)$ は既約な有理係数多項式である．すなわち，$\Phi_t(x) = A(x)B(x)$ となるような非自明な有理係数多項式 $A(x), B(x)$ は存在しない．
(2) 素数 p に対し，$\Phi_p(x) = \sum_{j=1}^{p-1} x^j$ である．
(3) 素数 p および $n \in \mathbb{N}$ に対し，$\Phi_{p^n}(x) = \Phi_p(x^{p^{n-1}})$ である．

補題 3.9 の証明. まず，$f(x)$ が $\Phi_{p^n}(x)$ で割り切れないことを仮定する．このとき，ユークリッドの互除法から以下を満たす有理数係数多項式 $A(x), B(x)$ が存在する．

$$f(x)A(x) + \Phi_{p^n}(x)B(x) = 1.$$

ここで，$\Phi_{p^n}(\omega_{p^n}) = 0$ であるため，$f(\omega_{p^n}) = 0$ であるとき上式は成り立たず矛盾する．したがって，$f(\omega_{p^n}) = 0$ が成り立つとき $f(x)$ は $\Phi_{p^n}(x)$ によって割り切られる．これに加え，$\Phi_{p^n}(x) = \Phi_p(x^{p^{n-1}}) = \sum_{j=0}^{p-1} x^{p^{n-1}}$ であり，$f(x)$ は整数係数多項式であることから，以下を満たすような整数係数多項式 $C(x)$ が存在する．

$$f(x) = C(x)\Phi_{p^n}(x).$$

最後に $f(1) = \sum_{j=0}^{p^n-1} z_j$ であり，$\Phi_{p^n}(1) = \Phi_p(1) = p$，$C(1) \in \mathbb{Z}$ であることから，上式に $x = 1$ を代入することで題意が得られる． □

これらの補題 3.8，補題 3.9 を用いることで定理 3.3 が示される．

定理 3.3 の証明． まず，

$$\sum_{j=0}^{p^n-1} M_k(v,u;N)M_{k-j}(v,u;N) - p^{nN}\delta_{v,u}\delta_{0,k} \in \mathbb{Z}$$

であるため，補題 3.8 と補題 3.9 により

$$\sum_{k=0}^{p^n-1}\left(\sum_{j=0}^{p^n-1} M_k(v,u;N)M_{k-j}(v,u;N) - p^{nN}\delta_{v,u}\delta_{0,k}\right) \equiv 0 \bmod p.$$

が成り立つ．したがって

$$\sum_{k=0}^{p^n-1}\sum_{j=0}^{p^n-1} M_k(v,u;N)M_{k-j}(v,u;N) = \left(\sum_{k=0}^{p^n-1} M_k(v,u;N)\right)^2 \equiv 0 \bmod p$$

が得られ，(25) より $\sum_{k=0}^{p^n-1} M_k(v,u;N) = |\mathbb{W}_N(v,u)|$ であるため，$|\mathbb{W}_N(v,u)|^2 \equiv 0 \bmod p$ が成り立つ．このとき p は素数であることから題意が導かれる，　□

定理 3.3 を用いることで，様々な典型的な正則グラフ上の Fourier walk が周期を持たないことを示すことができる．以下，いくつかの例を取り上げ量子ウォークが周期的でないことを示すが，そのための準備として次の隣接行列 A_G を定める．

定義 3.11．隣接行列： グラフ $G=(V,E)$ の隣接行列 A_G を以下で定める．

$$A_G = (a_{v,u})_{u,v\in V}, \quad a_{u,v} = \begin{cases} 0, & vu \notin E, \\ 1, & vu \in E. \end{cases}$$

この定義から，任意の自然数 t に対し，$(A_G^t)_{v,u}$ は長さ t の頂点 u を頂点 v を結ぶ歩道の総本数を表すことがわかる．すなわち，$|\mathbb{W}_t(v,u)| = (A_G^t)_{v,u}$ であるため，定理 3.3 の主張は隣接行列を用いて表される．

定理 3.3 の主張は，p^n-正則グラフ上の Fourier walk において，$N\in\mathbb{N}$ が $U^N = I$ を満たすならば，任意の $v,u\in V$ に対し $|\mathbb{W}_N(v,u)| = (A_G^N)_{v,u} \equiv 0 \bmod p$ であるというものであった．この定理の対偶を考えれば，ある $v,u\in V$ に対して $|\mathbb{W}_N(v,u)| = (A_G^N)_{v,u} \not\equiv 0 \bmod p$ が成り立つならば $U^N \neq I$ であることがわかる．したがって，$N\in\mathbb{N}$ を任意に固定したとき，$(A_G^N)_{v,u} \not\equiv 0 \bmod p$ を満たす頂点 $v,u\in V$ の存在を示すことができれば量子ウォークが周期的でないことが示される．

また，次の命題で示すように，隣接行列の固有値によって周期性の有無を判別することが出来る．

命題 3.12． 仮定 2, 仮定 3 の下で，$\lambda \not\equiv 0 \bmod p$ を満たす隣接行列 A_G の整数固有値 $\lambda\in\mathbb{Z}\cap\sigma(A_G)$ が存在するとき，量子ウォークは周期的ではない．

証明． 任意に固定された $N\in\mathbb{N}$ に対し，$U^N = I$ を仮定する．このとき，定理 3.3 より

$$(A_G^N)_{u,v} \equiv 0 \bmod p, \quad \forall v,u\in V$$

が成り立つ．ここで，$\nu\in\ker(A_G-\lambda)$ を与える．$\lambda\in\mathbb{Z}$ であるとき，ν は整数ベクトルであり，特にいずれ

かの成分が p の倍数ではないように与えることができる[8]．このとき，

$$A_G^N \nu = \lambda^N \nu$$

である．上式の左辺は仮定から全ての成分が p の倍数であるベクトルであるが，$\lambda \not\equiv 0 \bmod p$ であるとき，右辺のベクトルのいずれかの成分は p の倍数ではない．したがって，背理法から任意の $N \in \mathbb{N}$ に対し $U^N = I$ が満たされることはなく，量子ウォークは周期的ではない． □

● 完全グラフ

頂点数 $p^n + 1$ の完全グラフ K_{p^n+1} は各頂点が自身を除く全ての頂点に接続する p^n 正則グラフである．すなわち，K_{p^n+1} の隣接行列 $A_{K_{p^n+1}}$ は次のように表される．

$$A_{K_{p^n+1}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & \ddots & 1 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \ddots & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 \end{bmatrix}, \qquad a_{v,u} = \begin{cases} 0, & u = v, \\ 1, & u \neq v. \end{cases}$$

対称性から，任意の $t \in \mathbb{N}$ に対して $A_{K_{p^n+1}}^t$ の成分は対角成分と非対角成分ごとに分けられるため，以下のように対角成分を α_t，非対角成分を β_t とする．

$$A_{K_{p^n+1}}^t = \begin{bmatrix} \alpha_t & \beta_t & \beta_t & \cdots & \beta_t & \beta_t \\ \beta_t & \alpha_t & \beta_t & \cdots & \beta_t & \beta_t \\ \beta_t & \beta_t & \alpha_t & \ddots & \beta_t & \beta_t \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \beta_t & \beta_t & \beta_t & \ddots & \alpha_t & \beta_t \\ \beta_t & \beta_t & \beta_t & \cdots & \beta_t & \alpha_t \end{bmatrix}.$$

このとき，

$$\alpha_{t+1} = (n-1)\beta_t, \qquad \beta_{t+1} = \alpha_t + (n-2)\beta_t$$

が成り立つので，

$$\alpha_{t+1} - \beta_{t+1} = -(\alpha_t - \beta_t) = (-1)^t(\alpha_1 - \beta_1) = (-1)^t \not\equiv 0 \bmod p.$$

したがって，任意の $t \in \mathbb{N}$ に対して対角成分，非対角成分共に p で割り切られることは無いため，以下の命題が得られる．

命題 3.13. 仮定 2 の下，完全グラフ K_{p^n+1} 上の量子ウォークは周期的ではない．

[8] A_G の成分および λ が有理数であることから，$A_G\nu = \lambda\nu$ から得られる連立方程式の解となる ν の各成分は有理数である．固有ベクトルは定数倍してもその性質を保つため，各成分の分母の公倍数を乗することで ν は整数ベクトルとして与えられる．同様に，適当に除することで，いずれかの成分が p の因数とならない固有ベクトルが得られる．

● 自己ループ付きサイクルグラフ

頂点数 n であり，各頂点に自己ループを付与したサイクルグラフ C_n^{loop} を考える．C_n^{loop} は 3 正則グラフであり，その隣接行列 $A_{C_n^{loop}}$ は以下によって表される．

$$A_{C_n^{loop}} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

ここで，$\alpha_t \in \ell^2(\mathbb{Z}/n\mathbb{Z})$ を以下で定める．

$$\alpha_t(x) = (A_{C_n^{loop}}^t)_{x,0}.$$

このとき，以下の補題が成り立つ．

補題 3.14. 任意の $x \in \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$ に対し，$\alpha_t(x+3^m) \equiv \alpha_t(x) \bmod 3$ を満たす $m, t \in \mathbb{N}$ が存在するならば以下が成り立つ．

$$\alpha_{t-1}(x+3^{m+1}) \equiv \alpha_{t-1}(x) \bmod 3, \quad \forall x \in \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}.$$

証明． ある $m, t \in \mathbb{N}$ が任意の $x \in \mathbb{Z}$ に対し $\alpha_t(x+3^m) \equiv \alpha_t(x) \bmod 3$ を満たすことを仮定する．このとき，

$$\begin{aligned} &\sum_{j=0}^{3^m-1} (\alpha_t(x+1+3j) - \alpha_t(x+3j)) \\ &\qquad = \sum_{j=0}^{3^{m-1}-1} \big\{ (\alpha_t(x+1+3j) + \alpha_t(x+1+3j+3^m) + \alpha_t(x+1+3j+2\cdot 3^m)) \\ &\qquad\qquad - (\alpha_t(x+3j) + \alpha_t(x+3j+3^m) + \alpha_t(x+3j+2\cdot 3^m)) \big\}. \end{aligned}$$

仮定より，$\alpha_t(x+1+3j)$，$\alpha_t(x+1+3j+3^m)$，$\alpha_t(x+1+3j+2\cdot 3^m)$ および $\alpha_t(x+3j)$，$\alpha_t(x+3j+3^m)$，$\alpha_t(x+3j+2\cdot 3^m)$ はそれぞれ 3 を法として合同なので，

$$\begin{aligned} \alpha_t(x+1+3j) + \alpha_t(x+1+3j+3^m) + \alpha_t(x+1+3j+2\cdot 3^m) &\equiv 0 \bmod 3, \\ \alpha_t(x+3j) + \alpha_t(x+3j+3^m) + \alpha_t(x+3j+2\cdot 3^m) &\equiv 0 \bmod 3. \end{aligned}$$

したがって，

$$\sum_{j=0}^{3^m-1} (\alpha_t(x+1+3j) - \alpha_t(x+3j)) \equiv 0 \bmod 3. \tag{27}$$

また，定義より任意の $x \in \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$ について $\alpha_t(x) = \alpha_{t-1}(x-1) + \alpha_{t-1}(x) + \alpha_{t-1}(x+1)$ であるため，

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{3^m-1} (\alpha_t(x+1+3j) - \alpha_t(x+3j)) &= \sum_{j=0}^{3^m-1} (\alpha_{t-1}(x+2+3j) - \alpha_{t-1}(x-1+3j)) \\ &= \alpha_{t-1}(x-1+3^{m+1}) - \alpha_{t-1}(x-1). \end{aligned} \tag{28}$$

(27) と (28) を合わせることで題意が得られる． □

この補題を用いることで，次の命題が得られる．

命題 3.15. 仮定 2 の下で，頂点数 n の自己ループ付きサイクルグラフ C_n^{loop} $(n \neq 3^t,\ t \in \mathbb{N})$ 上の量子ウォークは周期的ではない．

証明. 任意に固定した $N \in \mathbb{N}$ に対し $U^N = I$ が成り立つことを仮定する．このとき，定理 3.3 から $A^N_{C_n^{loop}}$ の各成分は 3 の倍数となるため，全ての $x \in \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$ に対し $\alpha_n(x) \equiv 0 \bmod 3$ が成り立つ．したがって任意の $x \in \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$ および $m \in \mathbb{N}$ に対し $\alpha_N(x+3^m) \equiv \alpha_N(x) \bmod 3$ が成り立つため，補題を繰り返し用いることで次の合同式が得られる．

$$\alpha_1(x+3^{m+N-1}) \equiv \alpha_1(x) \bmod 3, \quad \forall x \in \mathbb{Z}/n\mathbb{Z},\ m \in \mathbb{N}.$$

定義から $\alpha_1(x) = 1\ (x = 0, 1, n-1),\ = 0\ (x \neq 0, 1, n-1)$ であるので，頂点数 n が 3 のべき乗でない場合は上式は成り立たず矛盾する． □

• Hamming グラフ

Hamming グラフ $H(d,q)$ は頂点数 $q\ (>1)$ の完全グラフ K_q の d 回のデカルト積（cartesian product）で構成されるグラフである．

$$H(d,q) = \overbrace{K_q \,\square\, K_q \,\square\, \cdots \,\square\, K_q \,\square\, K_q}^{d\text{ 個}}.$$

特に $H(1,q)$ は完全グラフ K_q に一致し，$H(d,2)$ は超立方体（hyper cube）グラフに一致するなど，様々な典型的なグラフを包含している．ここで，デカルト積 $\square$ とはグラフ積の一種であり，任意の対称グラフ $G = (V_G, E_G),\ H = (V_H, E_H)$ に対して $G \,\square\, H = (V, E)$ は次のように定義される．

(1) $V = V_G \times V_H$.
(2) $(v, v'), (u, u') \in V$ に対し，以下の (i)(ii) のいずれかを満たすとき $(v,v')(u,u') \in E$ と定める．

$$\text{(i) } v = u \text{ かつ } v'u' \in E_H. \qquad \text{(ii) } v' = u' \text{ かつ } vu \in E_G.$$

デカルト積はグラフ同型の意味で結合法則，交換法則が成り立つことが知られている．すなわち，グラフ F, G, H に対し

$$(F \,\square\, G) \,\square\, H \ \simeq\ F \,\square\, (G \,\square\, H), \qquad G \,\square\, H \ \simeq\ H \,\square\, G,$$

が成り立つ．また，デカルト積の隣接行列については以下の関係が成り立つことが知られている．

$$A_{G \square H} = A_G \otimes I_{|V_H|} + I_{|V_G|} \otimes A_H. \tag{29}$$

したがって，Hamming グラフの隣接行列は以下のように d に関する漸化式によって表される．

$$A_{H(d,q)} = A_{H(d-1,q)} \otimes I_q + I_{q^{d-1}} \otimes A_{K_q}. \tag{30}$$

ここで，j 行目のみが 1 で他の成分が 0 である q 次の列ベクトルを $|j\rangle \in \mathbb{C}^q$ $(j = 0, 1, \ldots, q-1)$ と置く．

$$|j\rangle = {}^T\left[\begin{array}{ccccccccc} 0 & 0 & \cdots & 0 & \overbrace{1}^{j\text{ 行目}} & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{array}\right] \in \mathbb{C}^q.$$

このとき $v_0 = \sum_{j=0}^{q} |j\rangle$，$v_j = |0\rangle - |j\rangle$ $(j = 1, 2, \ldots, q-1)$ とすると，

$$A_{K_q} v_0 = (q-1)v_0, \qquad A_{K_q} v_j = -v_j$$

が成り立つ．さらに，$v \in \ker(A_{H(d,q-1)} - \lambda)$ とすると (30) から

$$A_{H(d,q)}(v \otimes v_0) = (\lambda + q - 1)(v \otimes v_0), \qquad A_{H(d,q)}(v \otimes v_j) = (\lambda - 1)(v \otimes v_j)$$

が得られる．したがって，

$$\sigma(A_{H(d,q)}) = \{\lambda + d - 1 \mid \lambda \in \sigma(A_{H(d-1,q)})\} \cup \{\lambda - 1 \mid \lambda \in \sigma(A_{H(d-1,q)})\}^{d-1}.$$

実際に，この関係式を用いて

$$\begin{aligned}
\sigma(A_{H(1,q)}) &= \{q-1\} \cup \{-1\}^{q-1}, \\
\sigma(A_{H(2,q)}) &= \{2(q-1)\} \cup \{q-2\}^{2(q-1)} \cup \{-2\}^{(q-1)^2}, \\
\sigma(A_{H(3,q)}) &= \{3(q-1)\} \cup \{2q-3\}^{3(q-1)} \cup \{q-3\}^{2(q-1)^2} \cup \{-3\}^{(q-1)^3}, \\
&\ \ \vdots
\end{aligned}$$

のように隣接行列の固有値が与えられる．これを一般の d について書き記すと，以下の補題が得られる．

補題 3.16. Hamming グラフの隣接行列 $A_{H(d,q)}$ の固有値 $\sigma(A_{H(d,q)})$ について以下が成り立つ．

$$\sigma(A_{H(d,q)}) = \bigcup_{j=0}^{d} \{jq - d\}^{\binom{d}{j}(q-1)^{d-j}}$$

定理 3.3 および命題 3.12 は仮定 2 および仮定 3 の下で成立する主張であるため，以下，素数 p，$n \in \mathbb{N}$ に対し p^n-正則となる Hamming グラフを考える．すなわち，Hamming グラフはその定義より $d(q-1)$ 正則なグラフとなるため，

$$d(q-1) = p^n$$

を仮定する．

命題 3.17. 仮定 2 の下，$d(q-1) = p^n$ を満たす Hamming graph 上の量子ウォークは，$H(2^n, 2)$ の場合を除き周期的でない．

証明. 命題 3.12 により，量子ウォークが周期的であるならば，隣接行列のすべての整数固有値が p の倍数である必要がある．したがって，補題 3.16 より，周期的であるならば

$$jq - d \equiv 0 \bmod p, \qquad \forall j = 0, 1, \ldots, d \tag{31}$$

が満たされなければならない．また，$d(q-1) = p^n$ であるため

$$q - 1 \equiv 0 \bmod p \quad \text{または} \quad q - 1 = 1$$

かつ

$$d \equiv 0 \bmod p \quad \text{または} \quad d = 1$$

が成り立つ．ただし，(31) における $j=0$ の場合を考えると，$d \equiv 0 \bmod p$ を満たさなければならないため，$d=1$ の場合を考える必要はない．したがって，$d \equiv 0 \bmod p$ であるため (31) は

$$jq \equiv 0 \bmod p, \qquad \forall j = 0, 1, \ldots, d$$

となる．特に $j=1$ の場合を考えれば $q \equiv 0 \bmod p$ が得られるが，これを満たすのは $q-1=1$ かつ $p=2$ の場合に限る．したがって，それ以外の場合においては p の倍数ではない整数固有値が存在するため，量子ウォークは周期的でない． □

3.3 自己ループ付きサイクルグラフ上の量子ウォーク

Kajiwara, Konno, Koyama, Saito [19] による，自己ループ付き n 頂点サイクルグラフ上の量子ウォークにおける周期についての定理を本節では紹介する．特にその中でも，例 2.21 で定義された moving shift により与えられるモデルにおいて，C_x を頂点に依存せず与えた場合，すなわち 3×3 ユニタリ行列 C_{loc} に対し

$$C_x = C_{lox}, \quad \forall x \in \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$$

で与えられた場合を考える．また，

$$P = |0\rangle\langle 0| C_{loc}, \quad R = |1\rangle\langle 1| C_{loc}, \quad Q = |2\rangle\langle 2| C_{loc},$$

と定めると，時間発展は以下によって記述される．

$$(U\Psi)(x) = P\Psi(x+1) + R\Psi(x) + Q\Psi(x-1).$$

このような，空間に一様なダイナミクスが与えられた場合においては，Fourier 変換を用いた解析手法が非常に有効である．任意の $\Psi \in \mathcal{H}$ に対し，Fourier 変換 $\mathcal{F}$ を以下で定める．

$$(\mathcal{F}\Psi)(k) = \sum_{x \in \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}} e^{-\frac{2\pi i}{n}kx} \Psi(x) \in \mathbb{C}^3.$$

このとき，任意の $x \in \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$ に対し逆 Fourier 変換は以下となる．

$$\Psi(x) = \frac{1}{n} \sum_{k \in \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}} e^{\frac{2\pi i}{n}kx} (\mathcal{F}\Psi)(k).$$

さらに，

$$\hat{U}(k) = \omega_n^k P + R + \bar{\omega}_n^k Q \tag{32}$$

と定める．$\omega_n = e^{\frac{2\pi i}{n}}$ であったことに注意すると，Fourier 変換による波数空間上での時間発展が $\hat{U}(k)$ によって表されることがわかる．すなわち，任意の $t \in \mathbb{Z} \geq 0$ に対して

$$\mathcal{F}U^t\Psi = \hat{U}^t(k)\mathcal{F}\Psi, \qquad \forall \Psi \in \mathcal{H} \tag{33}$$

が成り立つ．(23) でも記述したように，$U^N = I$ を満たすことは，任意の $\lambda \in \sigma(U)$ に対して

$$\lambda^N = 1$$

を満たすことが必要十分であった．(33) は U と $\hat{U}(k)$ が Fourier 変換 $\mathcal{F}$ によりユニタリ同値であることを示しているので

$$\bigcup_{k=0}^{n-1} \sigma(\hat{U}(k)) = \sigma(U)$$

が成り立つことを示している．これらをまとめると次の補題が得られる．

補題 3.18. $N \in \mathbb{N}$ に対し，$U^N = I$ を満たすことは全ての $k = 0, 1, \ldots, n-1$ に対し以下を満たすこと同値である．

$$\lambda^N(k) = 1, \quad \forall \lambda(k) \in \sigma(\hat{U}(k)).$$

次に，Kajiwara, Konno, Koyama, Saito [19] の定理を導く，周期性の解析において強力な補題を与えるため，いくつかの代数系を導入する．

定義 3.19. 代数的整数 $\mathbb{A}$： ある整数係数多項式 f が存在し，$f(x) = 0$ を満たすとき x を代数的整数とし，これら全体の集合を $\mathbb{A}$ とする．

定義 3.20. n 次円分体 $\mathbb{Q}[\omega_n]$： 有理数体に 1 の原子 n 乗根 ω_n を添加した代数体を n 次円分体 $\mathbb{Q}[\omega_n]$ とする．また，代数的整数は環を成す．

定義 3.21. n 次円分体の整数環 $\mathbb{Z}[\omega_n]$： n 次円分体に含まれるすべての代数的整数からなる環を n 次円分体の整数環 $\mathbb{Z}[\omega_n]$ とする．すなわち，$\mathbb{Z}[\omega_n] = \mathbb{Q}[\omega_n] \cap \mathbb{A}$ である．

ここで，円分体の整数環においては次の重要な性質が成り立つことが知られている．

補題 3.22. $x \in \mathbb{Z}[\omega_n]$ であるとき，

$$x = \sum_{j=0}^{\phi(n)-1} z_j \omega_n^j$$

を満たす整数列 $\{z_j\}_{j=0,1,\ldots,\phi(n)-1}$ が一意に存在する．ただし，$\phi(n)$ は Euler のトーシェント関数であり，n と素となる n 未満の自然数の個数を与える関数である．すなわち

$$\phi(n) = |\{m \in \mathbb{N} \mid m < n,\ \gcd(m, n) = 1\}|.$$

この補題 3.22 と，次の補題 3.23 を併せることにより定理が導かれる．

補題 3.23. 自己ループ付き n 頂点サイクルグラフ上の量子ウォークにおいて，ある $t \in \mathbb{N}$ に対し $\langle j|C_{loc}|j\rangle \in \mathbb{Q}[\omega_t]$ $(j = 0, 1, 2)$ である場合，$N \in \mathbb{N}$ に対し $U^N = I$ を満たすならば任意の $k = 0, 1, \ldots, n-1$ に対して以下が成り立つ．

$$\mathrm{tr}(\hat{U}(k)) \in \mathbb{Z}[\omega_{\mathrm{lcm}(n,t)}].$$

ただし，$\mathrm{lcm}(\cdot, \cdot)$ は最小公倍数を意味する．

証明. $U^N = I$ を満たすとき，補題 3.18 から任意の $\lambda(k) \in \sigma(\hat{U}(k))$ に対して $1 - \lambda^N(k) = 0$ を満たすため，$\lambda(k) \in \mathbb{A}$ である．したがって，

$$\mathrm{tr}(\hat{U}(k)) = \sum_{\lambda(k) \in \sigma(\hat{U}(k))} \lambda(k) \in \mathbb{A} \tag{34}$$

である．また，$\langle j|C_{loc}|j\rangle \in \mathbb{Q}[\omega_t]$ $(j = 0, 1, 2)$ であるとき (32) から

$$\mathrm{tr}(\hat{U}(k)) = \omega_n^k \langle 0|C_{loc}|0\rangle + \langle 1|C_{loc}|1\rangle + \bar{\omega}_n^k \langle 2|C_{loc}|2\rangle \in \mathbb{Q}[\omega_{\mathrm{lcm}(n,t)}] \tag{35}$$

が成り立つ．(34)(35) より $\mathrm{tr}(\hat{U}(k)) \in \mathbb{Z}[\omega_{\mathrm{lcm}(n,t)}]$. が成り立つ． □

• Grover walk

まず，Grover walk の場合，すなわち

$$C_{loc} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{bmatrix}$$

の場合を考える．

定理 3.24. n 頂点自己ループ付きサイクル上の Grover walk（moving shift）において，周期 N は以下である．

$$N = \begin{cases} 6, & n = 3, \\ \infty, & n \neq 3. \end{cases}$$

証明. Grover walk においては

$$\langle 0|C_{loc}|0\rangle = \langle 1|C_{loc}|1\rangle = \langle 2|C_{loc}|2\rangle = -\frac{1}{3} \in \mathbb{Q}[\omega_1]$$

なので，$U^N = I$ を仮定したとき，補題 3.23 の $k = 1$ の場合より

$$\mathrm{tr}(\hat{U}(1)) = -\frac{1}{3}\left(\omega_n + 1 + \bar{\omega}_n\right) \in \mathbb{Z}[\omega_n]$$

が成り立つ．このとき

$$1 + \omega_n + \omega_n^2 \in 3\mathbb{Z}[\omega_n]$$

である．もし，頂点数 n が $\phi(n) > 2$ を満たす場合，上式の $1 + \omega_n + \omega_n^2$ は補題 3.22 より $\mathbb{Z}[\omega_n]$ の一意な表現であるが，これは $3\mathbb{Z}[\omega_n]$ に含まれないので矛盾が生じる．したがって，$\phi(n) \leq 2$ の場合のみを考えれば良く，それは $n = 2, 3, 4, 6$ の場合に限られる．このとき，

$$\begin{aligned} &\text{(i)} \quad n = 2 \text{ の場合：} \omega_2^0 + \omega_2^1 + \omega_2^2 = \omega_2^0 \ \notin 3\mathbb{Z}[\omega_2] \\ &\text{(ii)} \quad n = 4 \text{ の場合：} \omega_4^0 + \omega_4^1 + \omega_4^2 = \omega_4^1 \ \notin 3\mathbb{Z}[\omega_4] \\ &\text{(iii)} \quad n = 6 \text{ の場合：} \omega_6^0 + \omega_6^1 + \omega_6^2 = 2\omega_6^1 \ \notin 3\mathbb{Z}[\omega_6] \end{aligned}$$

であるので，これらにおいても矛盾が生じる．$n = 3$ においては直接計算することにより

$$\sigma(\hat{U}(k)) = \begin{cases} \{1,\ [-1]^2\}, & k = 0, \\ \{1,\ e^{\frac{2\pi}{3}i},\ e^{-\frac{2\pi}{3}i}\}, & k = 1, 2 \end{cases}$$

が得られるため，量子ウォークの周期は $\mathrm{lcm}(2, 3) = 6$，すなわち $U^6 = I$ である． □

• Fourier walk

次に，Fourier walk の場合，すなわち

$$C_{loc} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & \omega_3 & \omega_3^2 \\ 1 & \omega_3^2 & \omega_3 \end{bmatrix}$$

の場合を考える．

定理 3.25. n 頂点自己ループ付きサイクル上のに Fourier walk（moving shift）において，周期 N は以下である．

$$N = \begin{cases} 12, & n = 3, \\ \infty, & n \neq 3. \end{cases}$$

証明. 命題 3.15 より，頂点数 $n = 3^t$ $(t \in \mathbb{N})$ の場合のみしか量子ウォークは周期を持たないため，まず頂点数 $n = 3$ $(t = 1)$ の場合を考える．このとき，直接計算することにより

$$\sigma(\hat{U}(k)) = \begin{cases} (i,\ 1,\ -1), & k = 0, 1, \\ (\omega_3,\ \omega_3^2,\ \omega_{12}^7) & k = 2, \end{cases}$$

が得られるため，周期 $N = 12$ であることが直ちに示される．次に，$n = 9$ $(t = 2)$ の場合に量子ウォークが周期を持たないことを示す．補題 3.18 から，$n = 3^t$ $(t > 2)$ における U の固有値の集合は $n = 9$ $(t = 2)$ における固有値を包含するため，この場合のみ示せば十分である．まず，$\sqrt{3} = \omega_{12} + \bar{\omega}_{12}$ であることに注意すると Fourier walk においては

$$\langle 0|C_{loc}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} = \frac{1}{3}(\omega_{12} + \bar{\omega}_{12}), \tag{36}$$

$$\langle 1|C_{loc}|1\rangle = \langle 2|C_{loc}|2\rangle = \frac{\omega_3}{\sqrt{3}} = \frac{\omega_3}{3}(\omega_{12} + \bar{\omega}_{12}) = \frac{1}{3}(\omega_{12}^3 + \omega_{12}^5) \tag{37}$$

であるため，

$$\langle 0|C_{loc}|0\rangle,\ \langle 1|C_{loc}|1\rangle,\ \langle 2|C_{loc}|2\rangle \in \mathbb{Q}[\omega_{12}]$$

である．したがって，$U^N = I$ を仮定したとき，(36) および補題 3.23 の $k = 1$ の場合より

$$\mathrm{tr}(\hat{U}(1)) = \frac{1}{3}\left\{\omega_9(\omega_{12} + \bar{\omega}_{12}) + (\omega_{12}^3 + \omega_{12}^5) + \bar{\omega}_9(\omega_{12}^3 + \omega_{12}^5)\right\} \in \mathbb{Z}[\omega_{\mathrm{lcm}(9,12)}]$$

が成り立つ．ここで，$\mathrm{lcm}(9, 12) = 36$ であることを踏まえ上式を変形すると

$$\mathrm{tr}(\hat{U}(1)) = \frac{1}{3}\left(\omega_{36}^1 - \omega_{36}^3 + \omega_{36}^5 + \omega_{36}^7 + 2\omega_{36}^9 + \omega_{36}^{11}\right) \in \mathbb{Z}[\omega_{36}]$$

となるため，

$$\omega_{36}^1 - \omega_{36}^3 + \omega_{36}^5 + \omega_{36}^7 + 2\omega_{36}^9 + \omega_{36}^{11} \in 3\mathbb{Z}[\omega_{36}]$$

である．$\phi(36) = 12$ であるため，上式の $\omega_{36}^1 - \omega_{36}^3 + \omega_{36}^5 + \omega_{36}^7 + 2\omega_{36}^9 + \omega_{36}^{11}$ は補題 3.22 より $\mathbb{Z}[\omega_{36}]$ の一意な表現であるが，これはあきらかに $3\mathbb{Z}[\omega_{36}]$ に含まれないので矛盾が生じる．したがって，$n = 9$ の場合は量子ウォークは周期を持たず，題意が示される． □

4 量子ウォークのスペクトル写像定理

量子ウォークのスペクトル写像定理（定理 4.26）は，量子ウォークの時間発展作用素 U のスペクトル構造[9]が，低次元の空間上の離散シュレディンガー型作用素のスペクトル構造により記述されることを示す定理である．すなわち，対応するグラフ上のランダムウォーク的な作用素を解析することにより量子ウォークのスペクトル解析が可能となる．

本章においては頂点ベースのダイナミクスを基準とするため，量子系の状態空間を $\mathcal{H} = \mathcal{H}_V$ と下添え字を省略する．また，本章では作用素論的表記に従い，恒等作用素（単位行列）I を省略した形で記述する．すなわち，係数 $c \in \mathbb{C}$ に対し $cI = c$ といった形で記述する．

スペクトル写像定理は先に述べた通り非常に強力な定理であるが，この定理を用いることができるのはシフトオペレーター，コインオペレーターにそれぞれ次の仮定が課された場合に限定される．

仮定 4． シフトオペレーター S は $S^2 = 1$ を満たす．すなわち flip-flop shift （定義 2.8）やその拡張となる系 2.24 で与えられる split-step 量子ウォークの場合を含む．

仮定 5． コインオペレーター C は定義 2.11 より任意の $\Psi \in \mathcal{H}, v \in V$ に対し $(C\Psi)(v) = C_v\Psi(v)$ で定められ，特に以下で与えられるものである．

$$C_v = 2|\chi_v\rangle\langle\chi_v| - 1.$$

ただし，

$$|\chi_v\rangle = {}^T\begin{bmatrix}\chi_0^v & \chi_1^v & \cdots & \chi_{\deg v-1}^v\end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{\deg v}$$

は正規なベクトル，すなわち $\|\chi_v\|^2 = 1$ である．

仮定 5 は，各量子コイン C_v が重複度 1 で固有値 $+1$ を持ち，それ以外の $\deg v - 1$ 個の固有値は全て -1 であることを意味している[10]．特に，$|\chi_v\rangle = |\mathbf{1}_{\deg(v)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\deg(v)}}\begin{bmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\end{bmatrix}$ を与えた場合は，Grover walk (定義 2.13) が与えられる．

スペクトル写像定理を導出する準備として，まず初めにヒルベルト空間 $\mathcal{K}$ を以下で与える．

$$\mathcal{K} = \ell^2(V).$$

いま，量子系の状態空間が (4) より $\mathcal{H} = \bigoplus_{v\in V} \ell^2(v; \mathbb{C}^{\deg v})$ であったことを考えると，各頂点毎にベクトル値が与えられる $\mathcal{H}$ が量子ウォークの状態空間であり，各頂点毎に複素数値が与えられる $\mathcal{K}$ はランダムウォークの状態空間と捉えられる．

次に，境界作用素 $d : \mathcal{H} \to \mathcal{K}$ を以下で与える．

定義 4.1．境界作用素 d ： 仮定 5 で与えられた $|\chi_v\rangle$ に対し，以下で $d : \mathcal{H} \to \mathcal{K}$ を定める．

$$(d\Psi)(v) = \langle\chi_v, \Psi(v)\rangle, \quad \forall\Psi \in \mathcal{H},\ v \in V.$$

[9] 今回は有限次元のモデルを扱うため固有値のみが存在する．

[10] 本質的には固有値は $+1, -1$ に限らず任意の異なる 2 つの複素数でも構わない．ただし，片方の重複度が 1 である必要がある．すなわち，異なる $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$ に対し $C_v = (\lambda_1 - \lambda_2)|\chi_v\rangle\langle\chi_v| - \lambda_2$ でもスペクトル写像定理は得られる．

このとき，d の共役作用素 $d^* : \mathcal{K} \to \mathcal{H}$ は以下である．

系 4.2. 定義 4.1 で与えられた d に対し，以下が成り立つ．

$$(d^* f)(v) = f(v)|\chi_v\rangle, \quad \forall f \in \mathcal{K},\ v \in V.$$

証明． 任意の $\Psi \in \mathcal{H},\ f \in \mathcal{K}$ に対し $\langle f, d\Psi\rangle = \sum_{v\in V} \overline{f(v)}\langle \chi_v, \Psi(v)\rangle = \langle d^* f, \Psi\rangle$ が成り立つため題意が得られる． □

さらに系 4.2 より，次の d に関する性質が直ちに確認される．

系 4.3. 定義 4.1 で与えられた d に対し，以下が成り立つ．

(1) $dd^* = 1$.

(2) $(d^* d\Psi)(v) = |\chi_v\rangle\langle\chi_v|\Psi(v), \quad \forall \Psi \in \mathcal{H},\ v \in V.$

また，仮定 5 より $C_v = 2|\chi_v\rangle\langle\chi_v| - 1$ であったので，系 4.3 の (2) を用いることでコインオペレーター C が d により表される．

補題 4.4. 仮定 5 の下で，定義 2.11 で与えられた C は以下で表される．

$$C = 2d^* d - 1.$$

したがって，時間発展作用素は

$$U = S(2d^* d - 1) \tag{38}$$

と表される．次に $\mathcal{K}$ 上の作用素 T を以下で定める．これは判別作用素（discriminant operator）と呼ばれる作用素であり，本章の冒頭で述べた低次元の空間上の離散シュレディンガー型作用素とはこの T のことを指す．すなわち，スペクトル写像定理より T のスペクトルを解析することで U のスペクトルが得られる．

定義 4.5. 判別作用素 T ： 定義 2.10 および定義 4.1 で与えられる S, d に対し，$\mathcal{K}$ 上の自己共役作用素 T を以下で定める．

$$T = dSd^*.$$

直観的には T の作用を読み取りづらいので，split-step ではない通常のシフトオペレーター（定義 2.10）における T の作用を具体的に確認しておく．まず，任意の $f \in \mathcal{K}$ に対し，

$$(Tf)(v) = (dSd^* f)(v) = \langle \chi_v,\ (Sd^* f)(v)\rangle.$$

ここで定義 2.10 より

$$\begin{aligned}(Sd^* f)(v) &= \sum_{u\,|\,uv\in E} |L(v,u)\rangle\langle L(\tau^{-1}(v,u))|(d^* f)(u) \\ &= \sum_{u\,|\,uv\in E} |L(v,u)\rangle\langle L(\tau^{-1}(v,u)),\ \chi_u\rangle\, f(u).\end{aligned}$$

したがって，

$$(Tf)(v) = \sum_{u\,|\,uv\in E} \langle \chi_v,\ L(v,u)\rangle\,\langle L(\tau^{-1}(v,u)),\ \chi_u\rangle\, f(u).$$

いま，$S^2=1$ を仮定しているので $\tau^{-1}(u,v)=\tau(v,u)$ であるので，

$$\begin{aligned}(Tf)(v) &= \sum_{u \mid uv\in E} \langle \chi_v,\ L(v,u)\rangle \langle L(u,v),\ \chi_u\rangle f(u) \\ &= \sum_{u \mid uv\in E} \overline{\chi^v_{L(v,u)}} \chi^u_{L(u,v)} f(u).\end{aligned}$$

すなわち，T は確かに隣接頂点から重み $\overline{\chi^v_{L(v,u)}}\chi^u_{L(u,v)}$ を伴って推移するランダムウォーク的な作用素であることが確認できる．ここでは通常のシフトオペレーターを与えた場合を考えたが，split-step 量子ウォークの場合も同様の作用であり，また，一般に T のスペクトルに関して以下が成り立つ．

補題 4.6. 仮定 4 および仮定 5 の下で，定義 4.5 で与えられた T に対し $\sigma(T)\subset[-1,1]$ が成り立つ．

証明. まず，$S^2=1$ であるため $S=S^*$ であり，したがって $T=T^*$ が成り立つ．すなわち T は自己共役作用素であり，その一般論から $\sigma(T)\subset\mathbb{R}$ である．次に，ある $f\in\mathcal{K}$ および $\lambda\in\mathbb{R}$ に対し $Tf=\lambda f$ を仮定する．このとき，

$$0\le|\lambda|^2\|f\|^2=\|Tf\|^2 \tag{39}$$

である．ここで，系 4.3 の (2) および $|\chi_v\rangle$ は正規なベクトルであることから，dd^* の作用によりベクトルのノルムは増大しないため以下が得られる．

$$\|Tf\|^2=\langle dSd^*f,\ dSd^*f\rangle=\langle Sd^*f,\ d^*dSd^*f\rangle\le\|Sd^*f\|^2=\|f\|^2. \tag{40}$$

(39) と (40) と併せることで $0\le|\lambda|^2\le1$ が得られる．特に $\lambda\in\mathbb{R}$ であったので題意が得られる． □

ここで，任意の $f_1,f_2\in\mathcal{K}$ に対して，系 4.3 および (38) より

$$\begin{aligned}Ud^*f_1 &= S(2d^*d-1)d^*f_1\\ &= S(2d^*f_1-d^*f_1)\\ &= Sd^*f_1\end{aligned} \tag{41}$$

であり，さらに $S^2=1$ であることを用いると

$$\begin{aligned}USd^*f_2 &= S(2d^*d-1)Sd^*f_2\\ &= 2Sd^*dSd^*f_2-S^2d^*f_2\\ &= 2Sd^*Tf_2-d^*f_2.\end{aligned} \tag{42}$$

これらの式が意味するところは，$f_1,f_2\in\mathcal{K}$ を T の固有ベクトルとして与えたとき，d^*f_1 と Sd^*f_2 の線形和により U の作用を記述できるということである．この議論を厳密化するため，作用素 $R:\mathcal{K}^2\to\mathcal{H}$ を以下で定める．

定義 4.7. 任意の $F={}^T(f_1,f_2)\in\mathcal{K}^2$ 対し，$R:\mathcal{K}^2\to\mathcal{H}$ を以下で定める．

$$RF=d^*f_1+S_{\rm ff}d^*f_2.$$

また，$\mathcal{R}=\mathrm{img}R=d^*\mathcal{K}+Sd^*\mathcal{K}\subset\mathcal{H}$ とする．

(41) と（42）より $F = {}^T(f_1, f_2) \in \mathcal{K}^2$ とすると

$$URF = Sd^* f_1 + 2Sd^* T f_2 - d^* f_2 \tag{43}$$

が成り立つ．ここで $\mathcal{K}^2$ 上の作用素行列

$$\tilde{T} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 2T \end{bmatrix} \tag{44}$$

を用いて整理すると

$$URF = R\tilde{T}F \tag{45}$$

が得られる．このとき以下の性質が成り立つ．

補題 4.8. $\tilde{T}$ は全単射である．

証明. 任意の $F = {}^T(f_1, f_2) \in \mathcal{K}^2$ に対し，

$$\tilde{T} \begin{bmatrix} 2Tf_1 + f_2 \\ -f_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 2T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2Tf_1 + f_2 \\ -f_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{bmatrix}$$

であるため $\tilde{T}$ は全射である．また，$\tilde{T}F = 0$ であるとき $F = {}^T(f_1,\ f_2) = 0$ が成り立つため $\tilde{T}$ は単射である． □

また (45) より次の補題が直ちに成り立つ．

補題 4.9. $\mathcal{R}$ は U の不変部分空間である．すなわち，$U\mathcal{R} \subset \mathcal{R}$ である．

U を不変部分空間で分割することは，固有値解析を行う上で非常に重要である．すなわち，$\mathcal{V}_j$ $(j = 1, 2, \cdots, n)$ をそれぞれ線形独立な U の不変部分空間とし，そこに含まれる非零なベクトルを $v_j \in \mathcal{V}_j \setminus \{0\}$ とする．このとき，$\lambda \in \mathbb{C}$ に対して

$$U \sum_{j=1}^{n} v_j = \lambda \sum_{j=1}^{n} v_j$$

が成り立つことは，各 $j = 1, 2, \cdots, n$ に対して

$$Uv_j = \lambda v_j$$

が成り立つことと同値である．したがって，以後，U の固有値解析をするために，

1. $\mathcal{R}$ に含まれる U の固有ベクトル．
2. $\mathcal{R}$ の直交補空間 $\mathcal{R}^\perp$ に含まれる U の固有ベクトル．

のそれぞれに対して議論を行う．特に，前者に含まれる固有ベクトル，すなわち $\{\Psi \in \mathcal{H} \cap \mathcal{R} \setminus \{0\} \mid \exists \Lambda \in \mathbb{C},\ U\Psi = \Lambda\Psi\}$ の元を**遺伝の固有ベクトル**と呼び，後者の元を**発生の固有ベクトル**と呼ぶ．また，これらに対応する固有値の集合をそれぞれ遺伝の固有値 $\mathcal{S}$，発生の固有値 $\mathcal{B}$ とする．$\mathcal{H}$ は $\mathcal{R}$ と $\mathcal{R}^\perp$ により分割されるため以下が成り立つ．

$$\sigma(U) = \mathcal{S} \cup \mathcal{B}.$$

● 遺伝の固有ベクトル

ある $F \in \mathcal{K}^2$ および $\Lambda \in \mathbb{C}$ の組が

$$URF = \Lambda RF$$

を満たす場合，すなわち $RF \in \mathcal{R}$ が U の固有値 Λ に対応する固有ベクトルである場合を考える[11]．ただし，$F \in \ker R$ の場合は RF は自明な解となるため，$F \notin \ker R$ を仮定する．ここで (45) より，上式は以下と同値となる．

$$R(\tilde{T} - \Lambda)F = 0.$$

したがって，F が上式を満たすとき，

$$F \in \ker(\tilde{T} - \Lambda), \quad F \notin \ker R.$$

あるいは

$$F \in \ker R(\tilde{T} - \Lambda), \quad F \notin \ker(\tilde{T} - \Lambda), \quad F \notin \ker R.$$

のいずれかが成り立つ．これらをまとめ，次の補題が得られる．

補題 4.10. $\Psi \in \ker(U - \Lambda) \setminus \{0\}$ であるとき，以下の Case 1, Case 2 のいずれかを満たす．

- Case 1 : $\Psi \in \mathcal{C}_1 = \{RF \in \mathcal{R} \mid F \in \ker(\tilde{T} - \Lambda),\ F \notin \ker R,\ \Lambda \in \mathbb{C}\}$,
- Case 2 : $\Psi \in \mathcal{C}_2 = \{RF \in \mathcal{R} \mid F \in \ker R(\tilde{T} - \Lambda),\ F \notin \ker(\tilde{T} - \Lambda),\ F \notin \ker R,\ \Lambda \in \mathbb{C}\}$.

特に，$\Psi \in \mathcal{C}_1 \cap R\ker(\tilde{T} - \Lambda)$，または $\Psi \in \mathcal{C}_2 \cap R\ker R(\tilde{T} - \Lambda)$ であるとき $\Psi \in \ker(U - \Lambda)$ である．

補題 4.10 から，$\mathcal{C}_1$ および $\mathcal{C}_2$ を特徴づけることにより遺伝の固有ベクトルは記述される．これらを明らかにするため，次の補題を用意する．

補題 4.11. $F = {}^T(f_1, f_2) \in \ker R$ であることと以下の (1)(2) は同値である．

(1) $f_1 + Tf_2 = 0, \quad Tf_1 + f_2 = 0.$
(2) $f_1 \in \ker(T^2 - 1) = \ker(T - 1) \oplus \ker(T + 1), \quad f_2 = -Tf_1.$

証明. $F = {}^T(f_1, f_2) \in \ker R$ が成り立つとき，すなわち

$$d^* f_1 + Sd^* f_2 = 0 \tag{46}$$

が成り立つとき，上式に左から d^*, Sd^* をそれぞれ作用させることで

$$f_1 + Tf_2 = 0, \quad Tf_1 + f_2 = 0 \tag{47}$$

が得られる．これは

$$f_1 \in \ker(T^2 - 1) = \ker(T - 1) \oplus \ker(T + 1), \quad f_2 = -Tf_1 \tag{48}$$

[11] U はユニタリ作用素であるので，固有値 Λ の絶対値は 1 である．

の両式を満たすこと同値である．また，(46) は

$$\|d^* f_1 + Sd^* f_2\|^2 = \|f_1\|^2 + \|f_2\|^2 + \langle f_1, Tf_2\rangle + \langle Tf_1, f_2\rangle = 0$$

と同値である．したがって (47) が成り立つとき

$$\langle f_1, Tf_2\rangle + \langle Tf_1, f_2\rangle = \langle f_1, -f_1\rangle + \langle -f_2, f_2\rangle = -\|f_1\|^2 - \|f_2\|^2$$

であるため (46) が満たされる．これらにより $F \in \ker R$ であることは (47)(48) と同値である． □

補題 4.12. $F = {}^T(f_1, f_2) \in \ker(\tilde{T} - \Lambda)$ であることは以下と同値である．

$$f_1 \in \ker\left(T - \frac{\Lambda + \bar{\Lambda}}{2}\right), \quad f_2 = -\Lambda f_1.$$

証明. まず，$F \in \ker(\tilde{T} - \Lambda)$ を満たすことは

$$-\Lambda f_1 - f_2 = 0, \qquad f_1 + (2T - \Lambda) f_2 = 0.$$

と同値である．このとき，左の式から $f_2 = -\Lambda f_1$ であり，これを右の式に代入することで以下が得られる．

$$(\Lambda^2 - 2\Lambda T + 1) f_1 = 0.$$

さらに，式変形により上式は

$$\left(T - \frac{\Lambda + \bar{\Lambda}}{2}\right) f_1 = 0$$

と同値となるため，題意が得られる． □

これらの補題 4.11 および補題 4.12 より，Case 1 は以下によってまとめられる．

補題 4.13. Case 1： 補題 4.10 で与えられた $\mathcal{C}_1$ に対し，以下が成り立つ．

$$\mathcal{C}_1 = \{(1 - \Lambda S) d^* f \in \mathcal{R} \mid f \in \ker(T - \tfrac{\Lambda + \bar{\Lambda}}{2}) \setminus \{0\},\ \Lambda \in \mathbb{C} \setminus \{\pm 1\}\}.$$

特に，補題 4.10 より $f \in \ker(T - \frac{\Lambda + \bar{\Lambda}}{2})$, $\Lambda \neq \pm 1$ に対して，$(1 - \Lambda S) d^* f \in \ker(U - \Lambda)$ である．

証明. $F = {}^T(f_1, f_2) \in \mathcal{K}^2$ とする．まず，補題 4.12 より $F \in \ker(\tilde{T} - \Lambda)$ であることは，

$$f_1 \in \ker(T - \tfrac{\Lambda + \bar{\Lambda}}{2}), \quad f_2 = -\Lambda f_1$$

と同値であった．このとき $f_1, f_2 \neq 0$ かつ $\Lambda \neq \pm 1$ の場合は $f_1 \notin \ker(T^2 - 1)$ であるため補題 4.11 より $F \notin \ker R$ である．また，$\Lambda = \pm 1$ の場合は

$$f_1 \in \ker(T^2 - 1), \qquad f_2 = \mp f_1 = -Tf_1$$

が成り立つため補題 4.11 より $F \in \ker R$ となる． □

系 4.14. $f_j \in \ker(T - \frac{\Lambda_j + \bar{\Lambda}_j}{2})$, $\Lambda_j \neq \pm 1$, $j = 1, 2$ が互いに直交するならば， $(1 - \Lambda S) d^* f_j \in \mathcal{C}_1$ もまた互いに直交する．また，$\dim \mathcal{C}_1 = 2(|V| - \dim\ker(T + 1) - \dim\ker(T - 1))$ である．

証明． まず，$f_j \in \ker(T - \frac{\Lambda_j + \bar{\Lambda}_j}{2})$，$\Lambda_j \neq \pm 1$，$j = 1, 2$ が互いに直交するとき，

$$\begin{aligned}
\langle\,(1 - \Lambda_1 S)f_1,\ (1 - \Lambda_2 S)f_2\,\rangle &= \langle d^* f_1, d^* f_2\rangle + \langle \Lambda_1 S d^* f_1, \Lambda_2 S d^* f_2\rangle \\
&\qquad - \langle d^* f_1, \Lambda_2 S d^* f_2\rangle - \langle \Lambda_1 S d^* f_1, f_2\rangle \\
&= (1 + \bar{\Lambda}_1 \Lambda_2)\langle f_1, f_2\rangle - \Lambda_2 \langle f_1, T f_2\rangle - \bar{\Lambda}_1 \langle T f_1, f_2\rangle \\
&= (1 + \bar{\Lambda}_1 \Lambda_2 - \Lambda_2^2 - \bar{\Lambda}_1^2)\langle f_1, f_2\rangle \\
&= 0.
\end{aligned}$$

であるため題意の前半が示される．

また，$f \in \ker(T - \frac{\Lambda + \bar{\Lambda}}{2})$ に対し，共役の対称性から $(1 - \bar{\Lambda} S) d^* f$ もまた $\mathcal{C}_1$ に含まれる．特に，補題 4.10 より $(1 - \Lambda S) d^* f \in \ker(U - \Lambda)$ なおかつ $(1 - \bar{\Lambda} S) d^* f \in \ker(U - \bar{\Lambda})$ であるため，

$$\dim \mathcal{C}_1 = 2(\dim T - \dim\ker(T + 1) - \dim\ker(T - 1))$$

が成り立ち，$\dim T = |V|$ であることから題意が得られる． □

次に Case 2 について議論するが，まず $\mathcal{C}_1 \cap \mathcal{C}_2 \neq \emptyset$ であることに注意する．つまり，U の独立な固有ベクトルを得るためには，$\mathcal{C}_2$ の元の中で $\mathcal{C}_1$ に直交するベクトルのみを求める必要がある．したがって，まず初めに $\mathcal{C}_1$ の直交補空間

$$\mathcal{C}_1^{\perp} = \{\Psi \in \mathcal{R} \mid \langle \Psi, \Phi\rangle = 0,\ \forall \Phi \in \mathcal{C}_1\} \tag{49}$$

を考える．定義より一般に $\Psi \in \mathcal{R}$ は

$$\Psi = d^* f_1 + S d^* f_2, \quad f_1, f_2 \in \mathcal{K}$$

の形で記述される．補題 4.13 より，$\Phi \in \mathcal{C}_1$ は

$$\Phi = (1 - \Lambda S) d^* g, \quad g \in \ker(T - \tfrac{\Lambda + \bar{\Lambda}}{2}) \setminus \{0\}, \quad \Lambda \neq \pm 1$$

により与えられるため，

$$\begin{aligned}
\langle \Psi, \Phi\rangle &= \langle d^* f_1, (1 - \Lambda S) d^* g\rangle + \langle S d^* f_2, (1 - \Lambda S) d^* g\rangle \\
&= \langle f_1, (1 - \Lambda T) g\rangle + \langle f_2, (T - \Lambda) g\rangle \\
&= \langle f_1, \tfrac{1 - \Lambda^2}{2} g\rangle + \langle f_2, \tfrac{-\Lambda + \bar{\Lambda}}{2} g\rangle \\
&= \tfrac{1 - \Lambda^2}{2}\langle f_1 + \Lambda f_2, g\rangle.
\end{aligned}$$

いま $\Lambda \neq \pm 1$ であるので，$\Psi \in \mathcal{C}_1^{\perp}$ であるためには任意の $g \in \ker(T - \frac{\Lambda + \bar{\Lambda}}{2}) \setminus \{0\}$，$\Lambda \neq \pm 1$ に対し $\langle f_1 + \Lambda f_2, g\rangle = 0$ を満たす必要がある．T は自己共役作用素であるため，異なる固有値の属する固有ベクトルは互いに直交し，それらが $\mathcal{K}$ の基底を張ることを考えると

$$f_1 + \Lambda f_2 \in \ker(T^2 - 1) = \ker(T - 1) \oplus \ker(T + 1) \tag{50}$$

でなければならない．ただし，上式は任意の Λ について成り立つ必要があることから，

$$f_1, f_2 \in \ker(T^2 - 1)$$

と同値となる．したがって，次の補題が得られる．

補題 4.15. (49) で定められる $\mathcal{C}_1^\perp$ は以下で表される．

$$\begin{aligned}\mathcal{C}_1^\perp &= d^* \ker(T^2-1) + Sd^* \ker(T^2-1)\\ &= \{d^* f_1 + Sd^* f_2 \in \mathcal{R} \mid f_1, f_2 \in \ker(T^2-1)\}.\end{aligned}$$

以下，$\Psi = RF \in \ker(U-\Lambda) \cap \mathcal{C}_2 \cap \mathcal{C}_1^\perp$，$F = {}^T(f_1, f_2) \in \mathcal{K}^2$ がどのように表されるかを議論する．また，$\mathcal{C}_2$ の定義および補題 4.15 より，$\Psi \in \ker(U-\Lambda) \cap \mathcal{C}_2 \cap \mathcal{C}_1^\perp$ であることは

(1) $F \in \ker R(\tilde{T} - \Lambda)$.

(2) $F \notin \ker R, \quad F \notin \ker(\tilde{T} - \Lambda)$.

(3) $f_1, f_2 \in \ker(T^2-1)$.

を全て満たすことと同値である．まず，

$$(\tilde{T} - \Lambda)F = \begin{bmatrix} -\Lambda f_1 - f_2 \\ f_1 + (2T - \Lambda) f_2 \end{bmatrix}$$

であるため，$F \in \ker R(\tilde{T} - \Lambda)$，すなわち $(\tilde{T} - \Lambda)F \in \ker R$ は補題 4.11 の (1) より以下の 2 式を満たすことと同値である．

$$(T-\Lambda) f_1 + (2T^2 - \Lambda T - 1) f_2 = 0, \tag{51}$$

$$(-\Lambda T + 1) f_1 + (T - \Lambda) f_2 = 0. \tag{52}$$

このとき，式変形により

$$(1-\Lambda^2) f_1 = -\{2\Lambda T^2 + (1-\Lambda^2) T - 2\Lambda\} f_2 \tag{53}$$

が得られる．このことから，次の補題が導かれる．

補題 4.16. $\Psi \in \ker(U-\Lambda) \cap \mathcal{C}_2 \cap \mathcal{C}_1^\perp$ であるならば $\Lambda = \pm 1$ である．すなわち，$\Psi \in \ker(U \mp 1)$ である．

証明. $\Lambda \neq \pm 1$ を仮定したとき，(51)(53) から

$$(T^2 - 1)\left(T - \frac{\Lambda + \bar{\Lambda}}{2}\right) f_2 = 0$$

が得られる．したがって，$f_2 \in \ker(T+1) \oplus \ker(T-1) \oplus \ker(T - \frac{\Lambda+\bar{\Lambda}}{2})$ であるので，一般性を失うことなく $f_2 = f^+ + f^- + f^{\frac{\Lambda+\bar{\Lambda}}{2}}$ と表される．ただし，$f^\pm \in \ker(T \pm 1)$ であり，$f^{\frac{\Lambda+\bar{\Lambda}}{2}} \in \ker(T - \frac{\Lambda+\bar{\Lambda}}{2})$ である．このとき，(53) より

$$f_1 = -\bar{\Lambda} f^{\frac{\Lambda+\bar{\Lambda}}{2}} + f^+ - f^-.$$

いま，$\Psi \in \mathcal{C}_1^\perp$ であることから補題 4.15 より $f_1 \in \ker(T^2-1)$ であるため，$f^{\frac{\Lambda+\bar{\Lambda}}{2}} = 0$ でなくてはならない．したがって，

$$f_1 = f^+ - f^-, \qquad f_2 = f^+ + f^-$$

であるが，$f_1 \in \ker(T^2-1)$ かつ $f_2 = -Tf_1$ を満たすため，補題 4.11 の (2) より $F \in \ker R$ となるため $\Psi \in \mathcal{C}_2$ に矛盾する． □

補題 4.16 より，$\Lambda=\pm 1$ の場合のみを考える．このとき (53) より

$$(T^2-1)f_2=0$$

すなわち，$f_2\in\ker(T^2-1)$ が導かれる．このとき (51) と (52) は同値であるため，$\Lambda=\pm 1$ のとき $F\in\ker R(\tilde{T}-\Lambda)$ は

$$(T\mp 1)(f_1\mp f_2)=0$$

と同値となる．また，$\Psi\in\mathcal{C}_1^\perp$ であることから $f_1\in\ker(T^2-1)$ であり，$\Lambda=\pm 1$ とした補題 4.11 の (2) および補題 4.12 から $\ker(\tilde{T}\mp 1)\subset\ker R$，すなわち $F\notin\ker R$ ならば $F\notin\ker(\tilde{T}-\Lambda)$ が成り立つ．これらの議論をまとめると，以下が得られる．

$$\mathcal{C}_2\cap\mathcal{C}_1^\perp=\{d^*f_1+Sd^*f_2\in\mathcal{R}\mid f_1,f_2\in\ker(T^2-1),\ f_1-\Lambda f_2\in\ker(T-\Lambda),\ f_2\neq -Tf_1,\ \Lambda=\pm 1\}. \tag{54}$$

すなわち，$\Psi=d^*f_1+Sd^*f_2\in\mathcal{C}_2\cap\mathcal{C}_1^\perp$ に対し，$f_1\mp f_2\in\ker(T\mp 1)$ であれば $\Psi\in\ker(U\mp 1)$ が成り立つ．しかし，この表記のままでは各ベクトルの直交性，および $\mathcal{C}_2\cap\mathcal{C}_1^\perp$ の次元を議論するには見通しが悪い．したがって，$\mathcal{C}_2\cap\mathcal{C}_1^\perp$ の部分空間として以下の $\mathcal{C}_2'$ を定める．

$$\mathcal{C}_2'=\{d^*f\in\mathcal{R}\mid f\in\ker(T-\Lambda)\setminus\{0\},\ \Lambda=\pm 1\}\subset\mathcal{C}_2\cap\mathcal{C}_1^\perp. \tag{55}$$

(54) において $f_2=0$ と置くことで $\mathcal{C}_2'\subset\mathcal{C}_2\cap\mathcal{C}_1^\perp$ であることは確認できる．このとき，次の補題が成り立つ．

補題 4.17.

$$\dim\mathcal{C}_2\cap\mathcal{C}_1^\perp=\dim\mathcal{C}_2'=\dim\ker(T-1)+\dim\ker(T+1).$$

証明. まず，$f,g\in\ker(T\mp 1)$ が直交するとき，$d^*f,d^*g\in\mathcal{C}_2'$ もまた直交する．このことから直ちに

$$\dim\mathcal{C}_2'=\dim\ker(T-1)+\dim\ker(T+1)$$

が従う．次に，$\dim\mathcal{C}_2\cap\mathcal{C}_1^\perp=\dim\mathcal{C}_2'$ を示す．各 $j=1,2,\dots,\dim\ker(T\pm 1)$ に対して $g_j^\pm\in\ker(T\pm 1)$ を適当に定め，$\mathcal{C}_2'$ の基底として，

$$d^*g_j^\pm\in\mathcal{C}_2'$$

を与える．このとき，任意の $\Psi=d^*f_1+Sd^*f_2\in\mathcal{C}_2\cap\mathcal{C}_1^\perp$ に対して

$$\langle d^*g_j^\pm,\Psi\rangle=0,\qquad j=1,2,\dots,\dim\ker(T\pm 1)$$

が成り立たないことを示せば十分である．

$$\begin{aligned}\langle d^*g_j^\pm,\Psi\rangle&=\langle d^*g_j^\pm,d^*f_1\rangle+\langle d^*g_j^\pm,Sd^*f_2\rangle\\&=\langle g_j^\pm,f_1\rangle+\langle Tg_j^\pm,f_2\rangle\\&=\langle g_j^\pm,f_1\mp f_2\rangle.\end{aligned}$$

上式が全ての $j=1,2,\dots,\dim\ker(T\pm 1)$ について成り立つことから以下が得られる．

$$f_1-f_2\in\ker(T+1)^\perp,\quad f_1+f_2\in\ker(T-1)^\perp. \tag{56}$$

いま，$\Psi \in \mathcal{C}_2 \cap \mathcal{C}_1^{\perp}$ であるので (54) より $f_1, f_2 = \ker(T^2-1) = \ker(T-1) \oplus \ker(T+1)$ である．したがって，(56) は

$$f_1 - f_2 \in \ker(T-1), \quad f_1 + f_2 \in \ker(T+1).$$

と同値である．このとき，$(T-1)(f_1-f_2) + (T+1)(f_1+f_2) = 0$ より，$f_2 = -Tf_1$ が従うが，これは (54) より $\Psi \in \mathcal{C}_2 \cap \mathcal{C}_1^{\perp}$ であることに矛盾する． □

最後に Case 2 の議論における結論として，次の補題を与える．

補題 4.18. **Case 2：** $\mathcal{C}_2 \cap \mathcal{C}_1^{\perp}$ の部分空間 $\mathcal{C}_2'$ を以下で与える．

$$\mathcal{C}_2' = \{d^* f \in \mathcal{R} \mid f \in \ker(T-\Lambda) \setminus \{0\},\ \Lambda = \pm 1\}.$$

このとき $\dim \mathcal{C}_2 \cap \mathcal{C}_1^{\perp} = \dim \mathcal{C}_2' = \dim\ker(T-1) + \dim\ker(T+1)$ である．また，補題 4.10 より，$f \in \ker(T-\Lambda),\ \Lambda = \pm 1$ であれば，$d^* f \in \ker(U-\Lambda)$ である．

さて，補題 4.10，補題 4.13 そして補題 4.18 より，$\mathcal{R}$ に包含される U の固有ベクトルは全て記述することができた．

これらをまとめ，遺伝の固有ベクトルについての結論が次の定理となる．

定理 4.19. **遺伝の固有ベクトル：** $f \in \ker(T - \frac{\Lambda+\bar{\Lambda}}{2})$ に対し，以下が成り立つ．

- $\Lambda = \pm 1$ の場合： $d^* f \in \ker(U \mp 1)$.
- $\Lambda \neq \pm 1$ の場合： $(1-\Lambda S) d^* f \in \ker(U-\Lambda)$.

特に，$f_j \in \ker(T - \frac{\Lambda_j+\bar{\Lambda}_j}{2}),\ j = 1, 2.$ が互いに直交するとき，上式で得られた U の固有ベクトル $d^* f_j$ または $(1-\Lambda S) d^* f_j$ もまた互いに直交する．

補題 4.10 および，系 4.14，補題 4.17 より，遺伝の固有値の数は

$$|\mathcal{S}| = \dim \mathcal{C}_1 + \dim \mathcal{C}_2' = 2|V| - \dim\ker(T-1) - \dim\ker(T+1)$$

であることがわかる．特に，系 4.14 の証明中でも述べた通り，T の固有値 $\frac{\Lambda+\bar{\Lambda}}{2},\ \Lambda \neq \pm 1$ に対して，$\Lambda,\ \bar{\Lambda}$ が U の固有値として与えられる．すなわち，T の ± 1 以外の固有値を複素単位円上に射影することにより U の固有値が与えられるため，次の補題が得られる．

系 4.20. **遺伝の固有値：**

$$\sigma(U) \supset \mathcal{S} = \left\{\phi^{-1}(\lambda) \,|\, \lambda \in \sigma(T) \setminus \{\pm 1\}\right\} \cup \{+1\}^{\dim\ker(T-1)} \cup \{-1\}^{\dim\ker(T+1)}.$$

ただし，$z \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ に対し，$\phi^{-1}(z)$ は Joukowsky 変換 $\phi(z) = \frac{z+z^{-1}}{2}$ の引き戻しであり，上式の $\{\pm 1\}$ の上付き文字は固有値の重複度を意味する．また，$|\mathcal{S}| = 2|V| - \dim\ker(T-1) - \dim\ker(T+1)$ である．

- 発生の固有ベクトル

次に，$\mathcal{R} = \mathrm{img}R = d^*\mathcal{K} + Sd^*\mathcal{K}$ の直交補空間 $\mathcal{R}^\perp$ の属する U の固有ベクトルについて議論する．$\mathcal{R}^\perp$ は以下によって定められる．

$$\mathcal{R}^\perp = \{\Psi \in \mathcal{H} \mid \langle \Psi, \Phi \rangle = 0,\ \forall \Phi \in \mathcal{R}\}.$$

このとき，$\mathcal{R}$ の定義に従い計算することで，$\mathcal{R}^\perp$ は以下の補題によって表されることがわかる．

補題 4.21. $\mathcal{R}^\perp = \ker d \cap \ker dS$.

証明. $\Phi = d^* f_1 + Sd^* f_2 \in \mathcal{R}$ に対し，$\Psi \in \mathcal{R}^\perp$ は直交するため

$$\begin{aligned}\langle \Psi, \Phi \rangle &= \langle \Psi, d^* f_1 \rangle + \langle \Psi, Sd^* f_2 \rangle \\ &= \langle d\Psi, f_1 \rangle + \langle dS\Psi, f_2 \rangle\end{aligned}$$

であり．ここで，任意の $f_1, f_2 \in \mathcal{K}$ に対して $\langle \Psi, \Phi \rangle = 0$ を満たすため $\Psi \in \ker d \cap \ker dS$ である． □

補題 4.21 および (38) より，$\Psi \in \mathcal{R}^\perp$ に対して

$$U\Psi = S(2d^*d - 1)\Psi = -S\Psi \tag{57}$$

である．ここで $S^2 = 1$ であることから，$d(-S\Psi) = dS(-S\Psi) = 0$ であるため，$U\Psi \in \mathcal{R}^\perp$ である．したがって，以下が成り立つ．

補題 4.22. $\mathcal{R}^\perp$ は U の不変部分空間である．すなわち，$U\mathcal{R}^\perp \subset \mathcal{R}^\perp$ である．

また，(57) および $\sigma(S) = \{\pm 1\}$ から次の補題が得られる．

補題 4.23. $\Psi \in \mathcal{R}^\perp$ に対し，$\Psi \in \ker(U - \Lambda) \setminus \{0\}$ であることは以下と同値である．

$$\Psi \in \ker(S \pm 1), \qquad \Lambda = \pm 1.$$

明らかに $\ker d \cap \ker(S \pm 1) \subset \ker dS$ であることから，これらの議論をまとめ，発生の固有ベクトルについての結論として次の定理を得る．

定理 4.24. 発生の固有ベクトル： $\Psi \in \mathcal{R}^\perp$ に対し，$\Psi \in \ker(U - \Lambda) \setminus \{0\}$ であることは以下と同値である．

$$\Psi \in \ker d \cap \ker(S \pm 1) \setminus \{0\}, \quad \Lambda = \pm 1.$$

系 4.25. 発生の固有値：

$$\sigma(U) \supset \mathcal{B} = \{-1\}^{\dim \mathcal{B}_-} \cup \{+1\}^{\dim \mathcal{B}_+}.$$

ただし，$\mathcal{B} = \mathcal{B}_+ \cup \mathcal{B}_-$ であり，$\mathcal{B}_\pm = \ker d \cap \ker(S \pm 1)$ とする．

- まとめ

最終的に，定理 4.19，定理 4.24 および系 4.20，系 4.25 をまとめることで，次のように量子ウォークのスペクトル写像定理が得られる．

定理 4.26. 量子ウォークのスペクトル写像定理： 仮定 4，仮定 5 の下で，$\mathcal{H}$ 上の時間発展作用素 U の固有値は定義 4.5 で与えられる $\mathcal{K}$ 上の自己共役作用素 T の固有値を用いて以下のように与えられる．

$$\sigma(U) = \{\phi^{-1}(\lambda) \mid \lambda \in \sigma(T) \setminus \{\pm 1\}\} \cup \{+1\}^{m_+ + M_+} \cup \{-1\}^{m_- + M_-}.$$

ただし，$\phi(z) = \frac{z+z^{-1}}{2}$，$m_\pm = \dim\ker(T \mp 1)$，$M_\pm = \dim \mathcal{B}_\pm$，および $\mathcal{B}_\pm = \ker d \cap \ker(S \pm 1)$ である．また，固有ベクトルについては以下で与えられる．

- ± 1 以外の固有ベクトル：　$(1 - \phi^{-1}(\lambda)S)d^* f \in \ker(U - \phi^{-1}(\lambda))$,　$f \in \ker(T - \lambda)$.
- ± 1 固有ベクトル：　$d^* f,\ \Psi \in \ker(U \mp 1)$,　$f \in \ker(T \mp 1),\ \Psi \in \mathcal{B}_\pm$.

また，± 1 固有値に関する記述を簡単にしたものとして，定理 4.26 における $m_\pm$, $\mathcal{B}_\pm$ の表記を書き改めることで以下のような形でもスペクトル写像定理は記述できる．

定理 4.27. 量子ウォークのスペクトル写像定理（別表現）： 仮定 4，仮定 5 の下，以下が成り立つ．

$$\sigma(U) = \{\phi^{-1}(\lambda) \mid \lambda \in \sigma(T) \setminus \{\pm 1\}\} \cup \{+1\}^{m_+ + M_+} \cup \{-1\}^{m_- + M_-}.$$

ただし，$m_\pm = \dim \mathcal{T}_\pm$, $M_\pm = \dim \mathcal{B}_\pm$，および $\mathcal{T}_\pm = \ker(C-1) \cap \ker(S \mp 1)$, $\mathcal{B}_\pm = \ker(C+1) \cap \ker(S \pm 1)$ である．また，固有ベクトルについては以下で与えられる．

- ± 1 以外の固有ベクトル：　$(1 - \phi^{-1}(\lambda)S)d^* f \in \ker(U - \phi^{-1}(\lambda))$,　$f \in \ker(T - \lambda)$.
- ± 1 固有ベクトル：　$\Psi_T,\ \Psi_B \in \ker(U \mp 1)$,　$\Psi_T \in \mathcal{T}_\pm,\ \Psi_B \in \mathcal{B}_\pm$.

証明. 定理 4.26 の表現をいくつか書き改めることにより導かれる．具体的には定理 4.26 で定められた $\mathcal{B}_\pm = \ker d \cap \ker(S \pm 1)$, $m_\pm = \dim\ker(T \mp 1)$ に対し，新たに $\mathcal{T}_\pm = \ker(C-1) \cap \ker(S \mp 1)$ を定め，

(1) $\mathcal{B}_\pm = \ker(C+1) \cap \ker(S \pm 1)$.
(2) $d^* f \in \mathcal{T}_\pm$,　$f \in \ker(T \mp 1)$.
(3) $m_\pm = \dim \mathcal{T}\pm$

の 3 つが成り立つことを示す．

まず，$\Psi \in \mathcal{H}$ に対し，補題 4.4 から $C = 2d^*d = 1$ であったため

$$(C+1)\Psi = 2d^* d\Psi$$

が従うため，$\ker d = \ker(C+1)$ が直ちに得られる．したがって，$\mathcal{B}_\pm = \ker d \cap \ker(S \pm 1) = \ker(C+1) \cap \ker(S \pm 1)$ が成り立つ．

次に，$d^* \ker(T \mp 1) = \ker(C+1) \cap \ker(S \mp 1)$ を示す．これが成り立つとき定理 4.26 における U の ± 1 固有ベクトル $d^* f$, $f \in \ker(T \mp 1)$ が $\Psi_T \in \mathcal{T}_\pm = \ker(C+1) \cap \ker(S \mp 1)$ に書き改められる．まず，任意の $f \in \ker(T \mp 1)$ に対し，系 4.3 の (1) を用いると

$$(C-1)d^* f = 2(d^* d - 1)d^* f = 0$$

が得られるため $d^* f \in \ker(C-1)$ であり，さらに

$$\|(S \mp 1)d^* f\|^2 = \langle (S \mp 1)d^* f,\ (S \mp 1)d^* f\rangle = \langle f, d(S \mp 1)^2 d^* f\rangle.$$

いま，仮定 4 より $S^2=1$ であるため

$$\|(S\mp 1)d^*f\|^2 = 2\langle f, d(1\mp S)d^*f\rangle = 2\langle f, (1\mp T)f\rangle = 0.$$

したがって，$d^*f\in\ker(C-1)\cap\ker(S\mp 1)$ であり，

$$d^*\ker(T\mp 1)\subset\ker(C-1)\cap\ker(S\mp 1) \tag{58}$$

が成り立つ．この逆も示すため，任意の $\Psi\in\ker(C-1)\cap\ker(S\mp 1)$ が $\Psi\in d^*\ker(T\mp 1)$ を満たすことも確認する．まず，$\Psi\in\ker(C-1)$ であるため

$$(C-1)\Psi = 2(d^*d-1)\Psi = 0.$$

したがって $\Psi = d^*d\Psi$ が成り立つ．また同様に $\Psi\in\ker(S\mp 1)$ であるため

$$(S\mp 1)\Psi = (S\mp 1)d^*d\Psi = 0,$$

すなわち $Sd^*d\Psi = \pm d^*d\Psi$ が成り立つ．このとき

$$(T\mp 1)d\Psi = (dSd^*\mp 1)d\Psi = d(Sd^*d\mp 1)\Psi = 0$$

が成り立つため $d\Psi\in\ker(T\mp 1)$ である．したがって $\Psi = d^*d\Psi\in d^*\ker(T\mp 1)$ が導かれ，

$$d^*\ker(T\mp 1)\supset\ker(C-1)\cap\ker(S\mp 1) \tag{59}$$

が成り立つ．(58) と（59）より，$d^*\ker(T\mp 1) = \ker(C-1)\cap\ker(S\mp 1) = \mathcal{T}_\pm$ である．

最後に $m_\pm = \dim\ker(T\mp 1) = \dim d^*\ker(T\mp 1) = \dim\mathcal{T}_\pm$ であることから題意が得られる．

□

4.1 量子ウォークの長時間平均分布

時刻 t において量子ウォーカーの存在する頂点を表す確率変数を X_t とすると，確率分布は $\Psi \in \mathcal{H}_V$，$v \in V$ に対して

$$P(X_t = v) = \|(U^t\Psi)(v)\|^2$$

で定められる．有向辺ベースの場合で記述するならば，$\tilde{\Psi} \in \mathcal{H}_{\mathcal{A}}$ に対して

$$P(X_t = v) = \sum_{e \mid t(e)=v} \|(\tilde{U}^t\tilde{\Psi})(e)\|^2$$

によって与えられる．有限グラフ上の単純ランダムウォークの確率分布は一部の例外を除き収束するのに対し，量子ウォークの確率分布はそのユニタリ性から基本的に収束することはない．したがって，量子ウォークのダイナミクスを表す 1 つの指標として，次の長時間平均分布を用いられる．

定義 4.28. 長時間平均分布： 初期状態 $\Psi_0 \in \mathcal{H}_V$ に対し，時間発展作用素 U から与えられる長時間平均分布 $\bar{\nu}_\infty$ を以下で定める．

$$\bar{\nu}_\infty(v) = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \sum_{n=0}^{t-1} \|U^n\Psi_0(v)\|^2.$$

以下，$\frac{1}{t}\sum_{n=0}^{t-1} \|U^n\Psi(v)\|^2$ が収束し，このような関数が確かに存在することを確認していく．まず，U は有限次元のユニタリ作用素であることから，以下の形によって固有分解が得られる．

$$U = \sum_{\Lambda\in\sigma(U)} \sum_{j=1}^{\dim\ker(U-\Lambda)} \Lambda |\Psi_\Lambda^j\rangle\langle\Psi_\Lambda^j|.$$

ただし，$|\Psi_\Lambda^j\rangle \in \ker(U-\Lambda)$，$\|\Psi_\Lambda^j\|^2 = 1$ であり，それぞれ異なる添え字に対して直交するものとする．直交性から，そのべき乗は

$$U^n = \sum_{\Lambda\in\sigma(U)} \sum_{j=1}^{\dim\ker(U-\Lambda)} \Lambda^n |\Psi_\Lambda^j\rangle\langle\Psi_\Lambda^j|$$

となるため，

$$(U^n\Psi_0)(v) = \sum_{\Lambda\in\sigma(U)} \sum_{j=1}^{\dim\ker(U-\Lambda)} \Lambda^n \langle\Psi_\Lambda^j|\Psi_0\rangle\,|\Psi_\Lambda^j(x)\rangle$$

が得られる．したがって，以下が成り立つ．

$$\begin{aligned}
\bar{\nu}_\infty(v) &= \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \sum_{n=0}^{t-1} \|(U^n\Psi_0)(v)\|^2 \\
&= \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \sum_{n=0}^{t-1} \sum_{\Lambda,\Lambda'\in\sigma(U)} \sum_{j=1}^{\dim\ker(U-\Lambda)} \sum_{j'=1}^{\dim\ker(U-\Lambda')} (\bar{\Lambda}'\Lambda)^n \overline{\langle\Psi_{\Lambda'}^{j'},\Psi_0\rangle}\langle\Psi_\Lambda^j,\Psi_0\rangle\langle\Psi_{\Lambda'}^{j'}(v),\Psi_\Lambda^j(v)\rangle. \qquad (60)
\end{aligned}$$

ここで，$\Lambda \neq \Lambda'$ の場合，

$$\frac{1}{t}\sum_{n=0}^{t-1}(\bar{\Lambda}'\Lambda)^n = \frac{1-(\bar{\Lambda}'\Lambda)^t}{1-\bar{\Lambda}'\Lambda}$$

であり，$\lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}|1-(\bar{\Lambda}'\Lambda)^t| \leq 0$ であるため

$$\lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\sum_{n=0}^{t-1}(\bar{\Lambda}'\Lambda)^n = \begin{cases} 1, & \Lambda = \Lambda' \\ 0, & \Lambda \neq \Lambda' \end{cases}$$

である．このことから (60) は $\Lambda = \Lambda'$ の項のみ値を持つため以下となる．

$$\bar{\nu}_\infty(v) = \lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\sum_{n=0}^{t-1}\|U^n\Psi_0\|^2 = \sum_{\Lambda\in\sigma(U)}\sum_{j,j'=1}^{\dim\ker(U-\Lambda)}\overline{\langle\Psi_\Lambda^{j'},\Psi_0\rangle}\langle\Psi_\Lambda^j,\Psi_0\rangle\langle\Psi_\Lambda^{j'}(v),\Psi_\Lambda^j(v)\rangle. \tag{61}$$

したがって，長時間平均分布 $\bar{\nu}_\infty$ が存在することが確かめられる．

仮定 4，仮定 5 を満たす量子ウォークのモデルにおいては，スペクトル写像定理（定理 4.27）より U の固有値は判別作用素 T（定義 4.5）の ±1 以外の固有値の射影，および $\dim\mathcal{B}_\pm + \dim\mathcal{T}_\pm$ の重複度を持つ ±1 固有値によって与えられる事が示された．すなわち，このようなモデルにおいては U の ±1 固有値とそれ以外の固有値は本質が異なるものと捉えられるため，長時間平均分布を次のように分解する．

$$\bar{\nu}_\infty = \bar{\nu}_\infty^L + \bar{\nu}_\infty^S.$$

ただし，

$$\bar{\nu}_\infty^L(v) = \sum_{\Lambda\in\sigma(U)\cap\{\pm1\}}\sum_{j,j'=1}^{\dim\ker(U-\Lambda)}\overline{\langle\Psi_\Lambda^{j'},\Psi_0\rangle}\langle\Psi_\Lambda^j,\Psi_0\rangle\langle\Psi_\Lambda^{j'}(v),\Psi_\Lambda^j(v)\rangle, \tag{62}$$

$$\bar{\nu}_\infty^S(v) = \sum_{\Lambda\in\sigma(U)\setminus\{\pm1\}}\sum_{j,j'=1}^{\dim\ker(U-\Lambda)}\overline{\langle\Psi_\Lambda^{j'},\Psi_0\rangle}\langle\Psi_\Lambda^j,\Psi_0\rangle\langle\Psi_\Lambda^{j'}(v),\Psi_\Lambda^j(v)\rangle. \tag{63}$$

これらを，スペクトル写像定理に対応した形で表すと次の補題が得られる．

命題 4.29. 仮定 4，仮定 5 の下で，以下が成り立つ．

$$\bar{\nu}_\infty^L(v) = \sum_{\sharp\in\{-,+\}}\Bigg(\sum_{j,j'=1}^{\dim\mathcal{B}_\sharp}\overline{\langle\Psi_{\mathcal{B}_\sharp}^{j'},\Psi_0\rangle}\langle\Psi_{\mathcal{B}_\sharp}^j,\Psi_0\rangle\langle\Psi_{\mathcal{B}_\sharp}^{j'},\Psi_{\mathcal{B}_\sharp}^j\rangle + \sum_{j,j'=1}^{\dim\mathcal{B}_\sharp}\overline{\langle\Psi_{\mathcal{B}_\sharp}^{j'},\Psi_0\rangle}\langle\Psi_{\mathcal{B}_\sharp}^j,\Psi_0\rangle\langle\Psi_{\mathcal{B}_\sharp}^{j'},\Psi_{\mathcal{B}_\sharp}^j\rangle\Bigg).$$

ただし，$\Psi_{\mathcal{B}_\sharp}^j \in \mathcal{B}_\sharp$，$\Psi_{\mathcal{T}_\sharp}^j \in \mathcal{T}_\sharp$，$\sharp \in \{-,+\}$ は各 j に対しそれぞれ互いに直交するベクトルであり，$\|\Psi_{\mathcal{B}_\sharp}^j\|^2 = \|\Psi_{\mathcal{T}_\sharp}^j\|^2 = 1$ である．

証明． $\Psi_{\mathcal{B}_\pm}^j \in \mathcal{B}_\pm$, および $\Psi_{\mathcal{T}_\pm}^j \in \mathcal{T}_\pm$ に対し, $\mathcal{B}_\pm = \ker(C+1)\cap\ker(S\pm1)$ であり $\mathcal{T}_\pm = \ker(C-1)\cap\ker(S\mp1)$ であることから $\langle\Psi_{\mathcal{B}_\pm}^j,\Psi_{\mathcal{T}_\pm}^j\rangle = 0$ である．したがって，(62) から直ちに題意が得られる． □

$\bar{\nu}^S_\infty(v)$ については，スペクトル写像定理を用いることが出来る 2 状態モデル，すなわち，正規で互いに直交するベクトル $|\chi(v)\rangle$, $|\chi^\perp(v)\rangle \in \mathbb{C}^2$ に対し

$$C_v = |\chi(v)\rangle\langle\chi(v)| - |\chi^\perp(v)\rangle\langle\chi^\perp(v)| = 2|\chi(v)\rangle\langle\chi(v)| - 1$$

で与えられるモデルを考える際には次の命題が有用である．

命題 4.30. 仮定 4，仮定 5 の下で，任意の $\alpha, \beta \in \mathcal{K}$ に対して初期状態 $\Psi_0 \in \mathcal{H}$ を $\Psi_0(v) = \alpha(v)|\chi(v)\rangle + \beta(v)|\chi^\perp(v)\rangle$ で与える．このとき以下が成り立つ．

$$\bar{\nu}^S_\infty(v) = \sum_{\lambda\in\sigma(T)\setminus\{\pm1\}} \sum_{j,j'=1}^{\dim\ker(T-\lambda)} \frac{1}{2\|f^j_\lambda\|^2\|f^{j'}_\lambda\|^2(1-\lambda^2)^2} \left\{(1-\lambda^2)\overline{\langle f^{j'}_\lambda, \alpha\rangle}\,\langle f^j_\lambda, \alpha\rangle + \overline{\langle g^{j'}_\lambda, \beta\rangle}\,\langle g^j_\lambda, \beta\rangle\right\}$$
$$\left\{(1-\lambda^2)\overline{f^{j'}_\lambda(v)} f^j_\lambda(v) + \overline{g^{j'}_\lambda(v)} g^j_\lambda(v)\right\}.$$

ただし，$f^j_\lambda \in \ker(T-\lambda)$ であり，$g^j_\lambda \in \mathcal{K}$ は $g^j_\lambda(v) = \langle\chi^\perp(v), (Sd^* f^j_\lambda)(v)\rangle$ により与えられる．

証明． $\lambda \in \sigma(T)\setminus\{\pm1\}$ に対し，$f^j_\lambda \in \ker(T-\lambda)$, $j = 1, 2, \ldots, \dim\ker(T-\lambda)$ とする．また，スペクトル写像定理（定理 4.27）から U の ±1 以外の固有値は一般に

$$\Lambda_\pm = \lambda \pm i\sqrt{1-\lambda^2} \in \sigma(U)\setminus\{\pm1\}$$

と書き表される．また，同様にして U の正規な固有ベクトルは以下で表される．

$$\Psi^j_{\Lambda_\pm} = \frac{1}{\sqrt{2(1-\lambda^2)\|f^j_\lambda\|^2_{\mathcal{K}}}}(1-\Lambda_\pm S)d^* f^j_\lambda \in \ker(U-\Lambda_\pm). \tag{64}$$

これらを用いて (63) を書き直すと，

$$\bar{\nu}^S_\infty(v) = \sum_{\lambda\in\sigma(T)\setminus\{\pm1\}} \sum_{\sharp\in\{-,+\}} \sum_{j,j'=1}^{\dim\ker(T-\lambda)} \overline{\langle\Psi^{j'}_{\Lambda_\sharp}, \Psi_0\rangle}\langle\Psi^j_{\Lambda_\sharp}, \Psi_0\rangle\ \langle\Psi^{j'}_{\Lambda_\sharp}(v), \Psi^j_{\Lambda_\sharp}(v)\rangle. \tag{65}$$

ここで，(64) より

$$\langle\Psi^j_{\Lambda_\sharp}, \Psi_0\rangle = \sum_{v\in V} \frac{1}{\sqrt{2(1-\lambda^2)\|f^j_\lambda\|^2_{\mathcal{K}}}}\langle(1-\Lambda_\sharp S)d^* f^j_\lambda(v), \Psi_0(v)\rangle \tag{66}$$

であり，

$$\begin{aligned}
\langle(1-\Lambda_\sharp S)d^* f^j_\lambda(v), \Psi_0(v)\rangle &= \langle(d^* f^j_\lambda)(x),\, \Psi_0(v)\rangle\ - \overline{\Lambda_\sharp}\ \langle(Sd^* f^j_\lambda)(v),\, \Psi_0(v)\rangle \\
&= \left\langle f^j_\lambda(x)\chi(v),\, \Big(|\chi(v)\rangle\langle\chi(v)| + |\chi^\perp(v)\rangle\langle\chi^\perp(v)|\Big)\Psi_0(v)\right\rangle \\
&\quad - \overline{\Lambda_\sharp}\ \left\langle(Sd^* f^j_\lambda)(v),\, \Big(|\chi(v)\rangle\langle\chi(v)| + |\chi^\perp(v)\rangle\langle\chi^\perp(v)|\Big)\Psi_0(v)\right\rangle \\
&= \overline{f^j_\lambda(v)}\langle\chi(v),\, \Psi_0(v)\rangle - \overline{\Lambda_\sharp}\{\ \langle(Sd^* f^j_\lambda)(v),\, \chi(v)\rangle\ \langle\chi(v),\, \Psi_0(v)\rangle \\
&\qquad + \langle(Sd^* f^j_\lambda)(v),\, \chi^\perp(v)\rangle\ \langle\chi^\perp(v),\, \Psi_0(v)\rangle\ \}.
\end{aligned} \tag{67}$$

さらに，

$$\langle (Sd^* f_\lambda^j)(v),\, \chi(v)\rangle = \overline{\langle \chi(v),\, (Sd^* f_\lambda^j)(v)\rangle} = \overline{(dSd^* f_\lambda^j)(v)} = \lambda \overline{f_\lambda^j(v)} \tag{68}$$

であり，$\Psi_0(x) = \alpha(v)|\chi(v)\rangle + \beta(v)|\chi^\perp(v)\rangle$，$g_\lambda^j(v) = \langle \chi^\perp(v), (Sd^* f_\lambda^j)(v)\rangle$ および (68) を代入することで (67) は以下となる．

$$\langle (1-\Lambda_\sharp S)d^* f_\lambda^j(v), \Psi_0(v)\rangle = \overline{f_\lambda^j(v)}\alpha(v) - \overline{\Lambda_\sharp}\ \left(\lambda \overline{f_\lambda^j(v)}\alpha(v) + \overline{g_\lambda^j(v)}\beta(v)\right). \tag{69}$$

したがって，(66)(69) より，$\Lambda_\sharp - \lambda = \sharp i\sqrt{1-\lambda^2}$ であることに注意すると，

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_{\Lambda_\sharp}^j, \Psi_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2(1-\lambda^2)\|f_\lambda^j\|^2}} \sum_{v\in V} \left\{ \overline{f_\lambda^j(v)}\alpha(x) - \overline{\Lambda_\sharp}\left(\lambda\overline{f_\lambda^j(v)}\alpha(v) + \overline{g_\lambda^j(v)}\beta(v)\right)\right\} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2(1-\lambda^2)\|f_\lambda^j\|^2}} \left\{ (1-\overline{\Lambda_\sharp}\lambda)\langle f_\lambda^j,\, \alpha\rangle - \overline{\Lambda_\sharp}\langle g_\lambda^j,\, \beta\rangle \right\} \\
&= \frac{\overline{\Lambda_\sharp}}{\sqrt{2(1-\lambda^2)\|f_\lambda^j\|^2}} \left\{ (\Lambda_\sharp - \lambda)\langle f_\lambda^j,\, \alpha\rangle - \langle g_\lambda^j,\, \beta\rangle \right\} \\
&= \frac{\overline{\Lambda_\sharp}}{\sqrt{2(1-\lambda^2)\|f_\lambda^j\|^2}} \left(\sharp i\sqrt{1-\lambda^2}\langle f_\lambda^j,\, \alpha\rangle - \langle g_\lambda^j,\, \beta\rangle \right).
\end{aligned} \tag{70}$$

同様にして，

$$\overline{\langle \Psi_{\Lambda_\sharp}^{j'}, \Psi_0\rangle} = \frac{\Lambda_\sharp}{\sqrt{2(1-\lambda^2)\|f_\lambda^{j'}\|^2}} \left(-\sharp i\sqrt{1-\lambda^2}\,\overline{\langle f_\lambda^j,\, \alpha\rangle} - \overline{\langle g_\lambda^j,\, \beta\rangle} \right). \tag{71}$$

次に，(64) から

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_{\Lambda_\sharp}^{j'}(v),\, \Psi_{\Lambda_\sharp}^j(v)\rangle = &\frac{1}{2(1-\lambda^2)\sqrt{\|f_\lambda^j\|^2\,\|f_\lambda^{j'}\|^2}} \times \\
&\left\langle (d^* f_\lambda^{j'})(v) - \Lambda_\sharp(Sd^* f_\lambda^{j'})(v),\, (d^* f_\lambda^j)(v) - \Lambda_\sharp(Sd^* f_\lambda^j)(v)\right\rangle.
\end{aligned} \tag{72}$$

ここで，

$$\begin{aligned}
&\left\langle (d^* f_\lambda^{j'})(v) - \Lambda_\sharp(Sd^* f_\lambda^{j'})(v),\, (d^* f_\lambda^j)(v) - \Lambda_\sharp(Sd^* f_\lambda^j)(v)\right\rangle \\
&\qquad = \left\langle (d^* f_\lambda^{j'})(v),\, (d^* f_\lambda^j)(v)\right\rangle \ - \ \overline{\Lambda_\sharp}\ \left\langle (Sd^* f_\lambda^{j'})(v),\, (d^* f_\lambda^j)(v)\right\rangle \\
&\qquad\qquad - \Lambda_\sharp\ \left\langle (d^* f_\lambda^{j'})(v),\, (Sd^* f_\lambda^j)(v)\right\rangle \ + \ \left\langle (Sd^* f_\lambda^{j'})(v),\, (Sd^* f_\lambda^j)(v)\right\rangle \\
&\qquad = (1 - \overline{\Lambda_\sharp}\lambda - \Lambda_\sharp\lambda)\overline{f_\lambda^{j'}(v)} f_\lambda^j(v) + \langle (Sd^* f_\lambda^{j'})(v),\, (Sd^* f_\lambda^j)(v)\rangle. \\
&\qquad = (1-2\lambda^2)\overline{f_\lambda^{j'}(v)} f_\lambda^j(v) + \langle (Sd^* f_\lambda^{j'})(v),\, (Sd^* f_\lambda^j)(v)\rangle.
\end{aligned} \tag{73}$$

さらに，

$$\begin{aligned}
&\langle (Sd^* f_\lambda^{j'})(v),\, (Sd^* f_\lambda^j)(v)\rangle \\
&\qquad = \langle (Sd^* f_\lambda^{j'})(v),\, \chi(v)\rangle\,\langle \chi(v),\, (Sd^* f_\lambda^j)(v)\rangle + \langle (Sd^* f_\lambda^{j'})(v),\, \chi^\perp(v)\rangle\langle \chi^\perp(v),\, (Sd^* f_\lambda^j)(v)\rangle \\
&\qquad = \lambda^2\ \overline{f_\lambda^{j'}(v)} f_\lambda^j(v) + \overline{g_\lambda^{j'}(v)} g_\lambda^j(v)
\end{aligned}$$

であるため，これを (73) に代入すると

$$
\begin{aligned}
&\Big\langle (d^* f_\lambda^{j'})(v) - \Lambda_\sharp (S d^* f_\lambda^{j'})(v),\, (d^* f_\lambda^{j})(v) - \Lambda_\sharp (S d^* f_\lambda^{j})(v) \Big\rangle \\
&\qquad\qquad = (1-2\lambda^2)\overline{f_\lambda^{j'}(v)} f_\lambda^j(v) + \lambda^2\ \overline{f_\lambda^{j'}(v)} f_\lambda^j(v) + \overline{g_\lambda^{j'}(v)} g_\lambda^j(v) \\
&\qquad\qquad = (1-\lambda^2)\overline{f_\lambda^{j'}(v)} f_\lambda^j(v) + \overline{g_\lambda^{j'}(v)} g_\lambda^j(v). \qquad (74)
\end{aligned}
$$

(72)(74) より，

$$
\langle \Psi_{\Lambda_\sharp}^{j'}(v),\, \Psi_{\Lambda_\sharp}^{j}(v) \rangle = \frac{1}{2(1-\lambda^2)\sqrt{\|f_\lambda^j\|^2\, \|f_\lambda^{j'}\|^2}} \Big\{ (1-\lambda^2)\overline{f_\lambda^{j'}(v)} f_\lambda^j(v) + \overline{g_\lambda^{j'}(v)} g_\lambda^j(v) \Big\}. \qquad (75)
$$

最後に，(65) に (70)(71)(75) を代入することで，命題 4.30 が得られる． □

5　サイクル上の量子ウォークの二相系

前章で紹介したスペクトル写像定理の応用として，サイクル上の量子ウォークの二相系と呼ばれるモデルにおける固有値解析を行う．

● モデルの設定

まず，本章においては頂点ベースのダイナミクスにより N 頂点サイクル上の量子ウォークを記述するため，ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ を以下で与える．

$$\mathcal{H} = \ell^2(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}; \mathbb{C}^2) = \left\{ \Psi : \mathbb{Z}/N\mathbb{Z} \to \mathbb{C}^2 \mid \sum_{x=0}^{N-1} \|\Psi(x)\|^2 < \infty \right\}.$$

ただし，頂点数 N については，ある $n \in \mathbb{N}$ に対し

$$N = 2^n$$

で与えられる場合のみを扱う．このとき，頂点集合 V は $\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$ に同一視されるため，対称な有向辺全体の集合 $\mathcal{A}$ は

$$\mathcal{A} = \{(x, x-1), (x, x+1) \mid x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}\}$$

と表される．ラベリング L については

$$L(x, x-1) = 0, \qquad L(x, x+1) = 1, \qquad \forall x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z} \tag{76}$$

を与え，分割 $\Pi = \{\Pi_0,\ \Pi_1,\ \cdots, \Pi_{x-1}\}$ は

$$\Pi_x = \{(x, x+1),\ (x+1, x)\}, \quad \forall x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z} \tag{77}$$

によって与える場合，すなわち flip-flop shift を扱う．

以後，量子ウォークのスペクトル写像定理を用いて解析を行うためシフトオペレーター S，コインオペレーター C については仮定 4 および仮定 5 を満たすモデルを設定する必要がある．

まず，コインオペレーター C については定義 2.11 により $\Psi \in \mathcal{H}$ に対し $(C\Psi)(x) = C_x\Psi(x)$ で定められ，$\theta_1(x) \in (-\pi, \pi) \setminus \{-\frac{\pi}{2}, 0, \frac{\pi}{2}\}$ に対して以下で与えられるモデルを扱う．

$$C_x = \begin{bmatrix} \sin\theta_1(x) & \cos\theta_1(x) \\ \cos\theta_1(x) & -\sin\theta_1(x) \end{bmatrix}, \quad x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}. \tag{78}$$

ここで，

$$|\chi(x)\rangle = \begin{bmatrix} \chi_1(x) \\ \chi_2(x) \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2(1-\sin\theta_1(x))}} \begin{bmatrix} \cos\theta_1(x) \\ 1-\sin\theta_1(x) \end{bmatrix} \in \ker(C_x - 1), \tag{79}$$

$$|\chi^\perp(x)\rangle = \begin{bmatrix} \chi_1^\perp(x) \\ \chi_2^\perp(x) \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2(1+\sin\theta_1(x))}} \begin{bmatrix} -\cos\theta_1(x) \\ 1+\sin\theta_1(x) \end{bmatrix} \in \ker(C_x + 1). \tag{80}$$

とすると，

$$C_x = |\chi(x)\rangle\langle\chi(x)| - |\chi^\perp(x)\rangle\langle\chi^\perp(x)| = 2|\chi(x)\rangle\langle\chi(x)| - 1$$

であるため，仮定 5 を満たしている．

次に，シフトオペレーター S については仮定 4，すなわち $S^2 = 1$ を満たすモデルを定める必要がある．本章においては，flip-flop shift S の拡張として，$\theta_2(x) \in\in (-\pi, \pi] \setminus \{-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\}$ に対して与えられる次の S_{ss} を採用する．

$$(S_{\mathrm{ss}}\Psi)(x) = \big(-\sin\theta_2(x)|0\rangle\langle 0| + \sin\theta_2(x+1)|1\rangle\langle 1|\big)\Psi(x) + \cos\theta_2(x)|0\rangle\langle 1|\Psi(x-1) + \cos\theta_2(x+1)|1\rangle\langle 0|\Psi(x+1). \tag{81}$$

定義 2.10 に従い (76)(77) の下で S_{ff} を計算すると

$$(S_{\mathrm{ff}}\Psi)(x) = |0\rangle\langle 1|\Psi(x-1) + |1\rangle\langle 0|\Psi(x+1)$$

となるため，全ての $x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$ に対し $\theta_2(x) = 0$ とした場合に S_{ss} は S_{ff} へと一致することが確認できる．また，$\ell^2(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z})$ 上の線形作用素 L_s を以下で与える．

$$(L_s f)(x) = f(x+1), \qquad \forall f \in \ell^2(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}),\ x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}.$$

このとき，その共役作用素は以下となる．

$$(L_s^* f)(x) = f(x-1), \qquad \forall f \in \ell^2(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}),\ x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}.$$

これを用いると (81) は以下のように作用素行列を用いた形で表される．

$$(S_{\mathrm{ss}}\Psi)(x) = \begin{bmatrix} -\sin\theta_2(x) & \cos\theta_2(x)L_s^* \\ \cos\theta_2(x+1)L_s & \sin\theta_2(x+1) \end{bmatrix}\Psi(x), \qquad \forall\Psi \in \mathcal{H},\ x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}. \tag{82}$$

このとき，

$$\begin{bmatrix} -\sin\theta_2(x) & \cos\theta_2(x)L_s^* \\ \cos\theta_2(x+1)L_s & \sin\theta_2(x+1) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -\sin\theta_2(x) & \cos\theta_2(x)L_s^* \\ \cos\theta_2(x+1)L_s & \sin\theta_2(x+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

となるため，$S_{\mathrm{ss}}^2 = 1$ となり仮定 4 を満たす．(81) からわかるように，このシフトオペレーターは隣接頂点へ値を動かす一方，一定の割合で値を自身に留まらせる．このようなシフトオペレーターを与えたモデルは split-step 量子ウォーク[12] と呼ばれる．また，以後は $S = S_{\mathrm{ss}}$ とし，下添え字を省略して記述する．

これらの (78)，(81) で与えられた S, C により，量子ウォークの時間発展作用素 $U = SC$ が定められる．ただし，$(\theta_1(x), \theta_2(x))$ について以下で与えられるものとする．

$$(\theta_1(x), \theta_2(x)) = \begin{cases} (\theta_1^-, \theta_2^-), & 0 \le x < \frac{N}{2}, \\ (\theta_1^+, \theta_2^+), & \frac{N}{2} \le x < N. \end{cases} \tag{83}$$

このように，二分された領域ごとに異なる挙動を振る舞う量子ウォークは<u>二相系</u>と呼ばれるモデルである．これらをまとめ，本章で扱う量子ウォークは以下となる．

定義 5.1. サイクル上の量子ウォークの二相系： $N(= 2^n,\ n > 1)$ 頂点サイクル上の量子ウォークの時間発展作用素 $U = SC$ は $\mathcal{H} = \ell^2(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z}; \mathbb{C}^2)$ 上で与えられ，同じく $\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素 S, C は任意の $\Psi \in \mathcal{H}$, $x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}$ に対し以下で定められる．

$$(C\Psi)(x) = \begin{bmatrix} \sin\theta_1(x) & \cos\theta_1(x) \\ \cos\theta_1(x) & -\sin\theta_1(x) \end{bmatrix}\Psi(x), \quad (S\Psi)(x) = \begin{bmatrix} -\sin\theta_2(x) & \cos\theta_2(x)L_s^* \\ \cos\theta_2(x+1)L_s & \sin\theta_2(x+1) \end{bmatrix}\Psi(x).$$

[12] 定義 2.23 から与えられる量子ウォークの特別な場合となる．

ただし，

$$(\theta_1(x),\theta_2(x)) = \begin{cases} (\theta_1^-,\theta_2^-), & 0 \le x < \frac{N}{2}, \\ (\theta_1^+,\theta_2^+), & \frac{N}{2} \le x < N, \end{cases} \qquad \theta_1^\pm \in (-\pi,\pi) \setminus \{-\tfrac{\pi}{2}, 0, \tfrac{\pi}{2}\}, \quad \theta_2^\pm \in (-\pi,\pi] \setminus \{-\tfrac{\pi}{2}, \tfrac{\pi}{2}\}.$$

• U の ± 1 固有値

スペクトル写像定理（定理 4.27）により，時間発展作用素 U の ± 1 固有値は

$$\mathcal{B}_\pm = \ker(C+1) \cap \ker(S \pm 1), \qquad \mathcal{T}_\pm = \ker(C-1) \cap \ker(S \mp 1),$$

の次元により重複度が求まり，対応する固有ベクトルはそれぞれの元によって記述される．以下，定義 5.1 で定められたモデルに対してこれらを具体的に計算する．

まず，$\Psi_\pm^{\mathcal{B}} \in \mathcal{B}_\pm$ を仮定する．このとき，$\Psi_\pm^{\mathcal{B}} \in \ker(C+1)$ であるため，(80) および $f \in \ell^2(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z})$ を用いて

$$\Psi_\pm^{\mathcal{B}}(x) = f(x)|\chi^\perp(x)\rangle, \quad \forall x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z} \tag{84}$$

によって記述される．このとき，$\Psi_\pm^{\mathcal{B}} \in \ker(S \pm 1)$ であるので，(82) から

$$\begin{bmatrix} -\sin\theta_2(x) \pm 1 & \cos\theta_2(x) L^* \\ \cos\theta_2(x+1) L & \sin\theta_2(x+1) \pm 1 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2(1+\sin\theta_1(x))}} \begin{bmatrix} -\cos\theta_1(x) \\ 1+\sin\theta_1(x) \end{bmatrix} f(x) = 0, \quad \forall x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z},$$

であり，これは以下と同値である．

$$f(x+1) = \frac{\sqrt{\sin\theta_1(x)+1}\sqrt{\sin\theta_1(x+1)+1}}{\cos\theta_1(x+1)} \frac{\sin\theta_2(x+1) \pm 1}{\cos\theta_2(x+1)} f(x), \quad \forall x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}. \tag{85}$$

ここで，周期境界条件 $f(x+N) = f(x)$ を満たす必要があるため，(85) より

$$\prod_{x=0}^{N-1} \frac{\sqrt{\sin\theta_1(x)+1}\sqrt{\sin\theta_1(x+1)+1}}{\cos\theta_1(x+1)} \frac{\sin\theta_2(x+1) \pm 1}{\cos\theta_2(x+1)} = 1$$

であり，これは以下と同値である．

$$\prod_{x=0}^{N-1} \frac{\sin\theta_1(x)+1}{\cos\theta_1(x)} \frac{\sin\theta_2(x) \pm 1}{\cos\theta_2(x)} = 1. \tag{86}$$

いま，(83) で定義される二相系を考えており，$N = 2^n$ $(n > 1)$ であることを考慮すると (86) は以下となる．

$$\left| \left(\frac{\sin\theta_1^- + 1}{\cos\theta_1^-} \right) \left(\frac{\sin\theta_2^- \pm 1}{\cos\theta_2^-} \right) \left(\frac{\sin\theta_1^+ + 1}{\cos\theta_1^+} \right) \left(\frac{\sin\theta_2^+ \pm 1}{\cos\theta_2^+} \right) \right| = 1. \tag{87}$$

すなわち，(87) が満たされない場合は矛盾が生じるため $\mathcal{B}_\pm =$ である．また，(84)(85) より $\Psi_\pm^{\mathcal{B}}$ の自由度は 1 である．これらをまとめ，次の補題が得られる．

補題 5.2. 定義 5.1 で与えられるサイクル上の量子ウォークの二相系において，$\mathcal{B}_\pm = \ker(C+1) \cap \ker(S \pm 1)$ に対し，(87) を満たすときに限り $\dim \mathcal{B}_\pm = 1$ であり，そうでない場合は $\dim \mathcal{B}_\pm = 0$ である．

また，$D_\pm, B_{\mathcal{B},\pm}$ を以下で与える．

$$D_\pm = \frac{\sin\theta_1^- + 1}{\cos\theta_1^-}\frac{\sin\theta_2^- \pm 1}{\cos\theta_2^-}, \qquad B_{\mathcal{B},\pm} = \frac{\sqrt{\sin\theta_1^- + 1}\sqrt{\sin\theta_1^+ + 1}}{\cos\theta_1^+}\frac{\sin\theta_2^+ \pm 1}{\cos\theta_2^+}. \tag{88}$$

このとき (87) は

$$\left(\frac{\sin\theta_1^- + 1}{\cos\theta_1^-}\right)\left(\frac{\sin\theta_2^- \pm 1}{\cos\theta_2^-}\right)\left(\frac{\sin\theta_1^+ + 1}{\cos\theta_1^+}\right)\left(\frac{\sin\theta_2^+ \pm 1}{\cos\theta_2^+}\right) = s.$$

と同値であるため，以下が得られる．

$$\frac{\sin\theta_1^+ + 1}{\cos\theta_1^+}\frac{\sin\theta_2^+ \pm 1}{\cos\theta_2^+} = \frac{s}{D_\pm} \tag{89}$$

ただし，

$$s = \mathrm{sgn}(\cos\theta_1^- \cos\theta_1^+ \cos\theta_2^- \cos\theta_2^+) \tag{90}$$

であり，$\mathrm{sgn}(\cdot)$ は符号関数である．このとき，(85)(88)(89) から

$$f(x) = \begin{cases} D_\pm^x f(0), & 0 \le x < \frac{N}{2}, \\ s^x B_{\mathcal{B},\pm} D_\pm^{N-1-x} f(0), & \frac{N}{2} \le x < N. \end{cases}$$

これを (84) に代入し，$\|\Psi_\pm^{\mathcal{B}}\|^2 = 1$ を満たすよう $f(0)$ を与えることで，正規化された固有ベクトルが得られる．

補題 5.3. 定義 5.1 で与えられる量子ウォークにおいて，(87) を満たすとき $\Psi_\pm^{\mathcal{B}} \in \mathcal{B}_\pm$ は以下で記述される．

$$\Psi_\pm^{\mathcal{B}}(x) = \begin{cases} \dfrac{D_\pm^x}{\sqrt{C_{\mathcal{B},\pm}}}|\chi_-^\perp\rangle, & 0 \le x < \frac{N}{2}, \\ s^x \dfrac{B_{\mathcal{B},\pm} D_\pm^{N-1-x}}{\sqrt{C_{\mathcal{B},\pm}}}|\chi_+^\perp\rangle, & \frac{N}{2} \le x < N, \end{cases}$$

ただし，$D_\pm, B_{\mathcal{B},\pm}$ および s はそれぞれ (88)(90) で与えられ，$C_{\mathcal{B},\pm}$ は以下である．

$$C_{\mathcal{B},\pm} = (1 + B_{\mathcal{B},\pm}^2)\frac{1 - D_\pm^N}{1 - D_\pm^2}.$$

同様の計算を $\Psi_\pm^{\mathcal{T}} \in \mathcal{T}_\pm$ に対しても行う．$\Psi_\pm^{\mathcal{T}} \in \ker(C-1)$ であるため，(79) および $f \in \ell^2(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z})$ を用いて

$$\Psi_\pm^{\mathcal{T}}(x) = f(x)|\chi(x)\rangle, \quad \forall x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z} \tag{91}$$

によって記述される．このとき，$\Psi_\pm^{\mathcal{T}} \in \ker(S \mp 1)$ であるので，(82) から

$$\begin{bmatrix} -\sin\theta_2(x) \mp 1 & \cos\theta_2(x)L^* \\ \cos\theta_2(x+1)L & \sin\theta_2(x+1) \mp 1 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2(1-\sin\theta_1(x))}} \begin{bmatrix} \cos\theta_1(x) \\ 1 - \sin\theta_1(x) \end{bmatrix} f(x) = 0, \quad \forall x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z},$$

であり，これは以下と同値である．

$$f(x+1) = \frac{\sqrt{\sin\theta_1(x) - 1}\sqrt{\sin\theta_1(x+1) - 1}}{\cos\theta_1(x+1)}\frac{\sin\theta_2(x+1) \mp 1}{\cos\theta_2(x+1)} f(x), \quad \forall x \in \mathbb{Z}/N\mathbb{Z}. \tag{92}$$

周期境界条件 $f(x+N)=f(x)$ を満たす必要があるため，(92) より

$$\prod_{x=0}^{N-1}\frac{\sqrt{\sin\theta_1(x)-1}\sqrt{\sin\theta_1(x+1)-1}}{\cos\theta_1(x+1)}\frac{\sin\theta_2(x+1)\mp 1}{\cos\theta_2(x+1)}=1$$

を満たす必要があり，これは

$$\prod_{x=0}^{N-1}\frac{\sin\theta_1(x)-1}{\cos\theta_1(x)}\frac{\sin\theta_2(x)\mp 1}{\cos\theta_2(x)}=1$$

と同値であり，さらに両辺が (86) の逆数と一致することから (87) とも同値となる．したがって，$\mathcal{B}_\pm$ の場合と同様の議論で，以下の補題が得られる．

補題 5.4. 定義 5.1 で与えられるサイクル上の量子ウォークの二相系において，$\mathcal{T}_\pm=\ker(C-1)\cap\ker(S\mp 1)$ に対し，(87) を満たすときに限り $\dim\mathcal{T}_\pm=1$ であり，そうでない場合は $\dim\mathcal{T}_\pm=0$ である．

また，$B_{\mathcal{T},\pm}$ を以下で与える．

$$B_{\mathcal{T},\pm}=-\frac{\sqrt{1-\sin\theta_1^-}\sqrt{1-\sin\theta_1^+}}{\cos\theta_1^+}\frac{\mp 1+\sin\theta_2^+}{\cos\theta_2^+}. \tag{93}$$

このとき，(92) を用いて $\mathcal{B}_\pm$ の場合と同様の議論を行うことで，次の補題が得られる．

補題 5.5. 定義 5.1 で与えられる量子ウォークにおいて，(87) を満たすとき $\Psi_\pm^{\mathcal{T}}\in\mathcal{T}_\pm$ は以下で記述される．

$$\Psi_\pm^{\mathcal{T}}(x)=\begin{cases}\dfrac{D_\pm^{-x}}{\sqrt{C_{\mathcal{T},\pm}}}|\chi_-\rangle, & 0\le x<\frac{N}{2},\\[2ex] s^x\dfrac{B_{\mathcal{T},\pm}D_\pm^{-(N-1-x)}}{\sqrt{C_{\mathcal{T},\pm}}}|\chi_+\rangle, & \frac{N}{2}\le x<N,\end{cases}$$

ただし，$D_\pm, B_{\mathcal{T},\pm}$ および s はそれぞれ (88)(90)(93) で与えられ，$C_{\mathcal{T},\pm}$ は以下である．

$$C_{\mathcal{B},\pm}=(1+B_{\mathcal{T},\pm}^2)\frac{1-D_\pm^N}{1-D_\pm^2}.$$

これらの議論をまとめ，U の ±1 固有値についての結論を得る．

定理 5.6. U **の** ±1 **固有値：** 定義 5.1 で与えられるサイクル上の量子ウォークの二相系において，

$$\left|\left(\frac{\sin\theta_1^-+1}{\cos\theta_1^-}\right)\left(\frac{\sin\theta_2^-\pm 1}{\cos\theta_2^-}\right)\left(\frac{\sin\theta_1^++1}{\cos\theta_1^+}\right)\left(\frac{\sin\theta_2^+\pm 1}{\cos\theta_2^+}\right)\right|=1$$

を満たす場合に限り $\dim\mathcal{B}_\pm=\dim\mathcal{T}_\pm=1$ であり，そうでない場合 $\dim\mathcal{B}_\pm=\dim\mathcal{T}_\pm=0$ である．また，このとき $\Psi_\pm^{\mathcal{B}}\in\mathcal{B}_\pm$，$\Psi_\pm^{\mathcal{T}}\in\mathcal{T}_\pm$ は以下で記述される．

$$\Psi_\pm^{\mathcal{B}}(x)=\begin{cases}\dfrac{D_\pm^{x}}{\sqrt{C_{\mathcal{B},\pm}}}|\chi_-^\perp\rangle, & 0\le x<\frac{N}{2},\\[2ex] s^x\dfrac{B_{\mathcal{B},\pm}D_\pm^{N-1-x}}{\sqrt{C_{\mathcal{B},\pm}}}|\chi_+^\perp\rangle, & \frac{N}{2}\le x<N,\end{cases}\quad \Psi_\pm^{\mathcal{T}}(x)=\begin{cases}\dfrac{D_\pm^{-x}}{\sqrt{C_{\mathcal{T},\pm}}}|\chi_-\rangle, & 0\le x<\frac{N}{2},\\[2ex] s^x\dfrac{B_{\mathcal{T},\pm}D_\pm^{-(N-1-x)}}{\sqrt{C_{\mathcal{T},\pm}}}|\chi_+\rangle, & \frac{N}{2}\le x<N.\end{cases}$$

ただし，

$$s = \mathrm{sgn}(\cos\theta_1^- \cos\theta_1^+ \cos\theta_2^- \cos\theta_2^+), \qquad D_\pm = \frac{\sin\theta_1^- + 1}{\cos\theta_1^-}\frac{\sin\theta_2^- \pm 1}{\cos\theta_2^-},$$

$$B_{\mathcal{B},\pm} = \frac{\sqrt{1+\sin\theta_1^-}\sqrt{1+\sin\theta_1^+}}{\cos\theta_1^+}\frac{\pm 1 + \sin\theta_2^+}{\cos\theta_2^+}, \qquad B_{\mathcal{T},\pm} = -\frac{\sqrt{1-\sin\theta_1^-}\sqrt{1-\sin\theta_1^+}}{\cos\theta_1^+}\frac{\mp 1 + \sin\theta_2^+}{\cos\theta_2^+},$$

であり，正規化定数 $C_{\mathcal{B},\pm}, C_{\mathcal{T},\pm}$ はそれぞれ以下である．

$$C_{\mathcal{B},\pm} = (1+B_{\mathcal{B},\pm}^2)\frac{1-D_\pm^N}{1-D_\pm^2}, \qquad C_{\mathcal{T},\pm} = (1+B_{\mathcal{T},\pm}^2)\frac{1-D_\pm^{-N}}{1-D_\pm^{-2}}.$$

● U の ± 1 以外の固有値

定理 4.27 により，U の ± 1 以外の固有値は定義 4.5 で与えられる $\mathcal{K} = \ell^2(\mathbb{Z}/N\mathbb{Z})$ 上の作用素 $T = dSd^*$ の ± 1 以外の固有値より得られる．

いま，コインオペレーター C は (78) により与えられているので，定義 4.1 による境界作用素 $d : \mathcal{H} \to \mathcal{K}$ は (79) で与えられる $|\chi(x)\rangle$ との内積により計算され，$d^* : \mathcal{K} \to \mathcal{H}$ は $|\chi(x)\rangle$ とのかけ算である．また，シフトオペレーター S は (82) によって与えられているので，これらを用いて T を計算する．

$$\begin{aligned}
(Tf)(x) &= \left\langle \chi(x),\ \begin{bmatrix} -\sin\theta_2(x) & \cos\theta_2(x)L_s^* \\ \cos\theta_2(x+1)L_s & \sin\theta_2(x+1)\end{bmatrix} \chi(x)f(x) \right\rangle \\
&= \left\langle \chi(x),\ \begin{bmatrix} \dfrac{-\cos\theta_1(x)\sin\theta_2(x)}{\sqrt{2(1-\sin\theta_1(x))}}f(x) + \dfrac{(1-\sin\theta_1(x-1))\cos\theta_2(x)}{\sqrt{2(1-\sin\theta_1(x-1))}}f(x-1) \\ \dfrac{\cos\theta_1(x+1)\cos\theta_2(x+1)}{\sqrt{2(1-\sin\theta_1(x+1))}}f(x+1) + \dfrac{(1-\sin\theta_1(x))\sin\theta_2(x+1)}{\sqrt{2(1-\sin\theta_1(x))}}f(x) \end{bmatrix} \right\rangle \\
&= \frac{(1-\sin\theta_1(x))\sin\theta_2(x+1) - (1+\sin\theta_1(x))\sin\theta_2(x)}{2}f(x) \\
&\qquad + \frac{\sqrt{1-\sin\theta_1(x-1)}\sqrt{1+\sin\theta_1(x)}\cos\theta_2(x)}{2}f(x-1) \\
&\qquad\qquad + \frac{\sqrt{1-\sin\theta_1(x)}\sqrt{1+\sin\theta_1(x+1)}\cos\theta_2(x+1)}{2}f(x).
\end{aligned}$$

したがって，

$$\begin{aligned}
V(x) &= \frac{(1-\sin\theta_1(x))\sin\theta_2(x+1) - (1+\sin\theta_1(x))\sin\theta_2(x)}{2}, \\
\mu(x) &= \frac{\sqrt{1-\sin\theta_1(x-1)}\sqrt{1+\sin\theta_1(x)}\cos\theta_2(x)}{2}
\end{aligned}$$

としたとき，

$$(Tf)(x) = V(x)f(x) + \mu(x-1)f(x-1) + \mu(x)f(x+1) \tag{94}$$

と表される．ただし，(83) で定義される二相系を扱うため，

$$(V(x),\ \mu(x)) = \begin{cases} (V_{-,-},\ \ \mu_{-,-}), & 0 \le x < \frac{N}{2}-1, \\ (V_{-,+},\ \ \mu_{-,+}), & x = \frac{N}{2}-1, \\ (V_{+,+},\ \ \mu_{+,+}), & \frac{N}{2} \le x < N-1, \\ (V_{+,-},\ \ \mu_{+,-}), & x = N-1, \end{cases} \tag{95}$$

であり，$\sharp, \natural \in \{-, +\}$ に対し

$$V_{\sharp,\natural} = \frac{(1-\sin\theta_1^{\sharp})\sin\theta_2^{\natural} - (1+\sin\theta_1^{\sharp})\sin\theta_2^{\sharp}}{2}, \qquad \mu_{\sharp,\natural} = \frac{\sqrt{(1-\sin\theta_1^{\sharp})(1+\sin\theta_1^{\natural})}\cos\theta_2^{\natural}}{2}. \tag{96}$$

ここで，$f \in \ker(T-\lambda)$ を仮定する．このとき (94)(95) より，

$$\begin{aligned} &(V_{-,-}-\lambda)f(0) &&+\mu_{+,-}f(N-1) &&+\mu_{-,-}f(1) &&= 0, && (97)\\ &(V_{-,+}-\lambda)f(\tfrac{N}{2}-1) &&+\mu_{-,-}f(\tfrac{N}{2}-2) &&+\mu_{-,+}f(\tfrac{N}{2}) &&= 0, && (98)\\ &(V_{+,+}-\lambda)f(\tfrac{N}{2}) &&+\mu_{-,+}f(\tfrac{N}{2}-1) &&+\mu_{+,+}f(\tfrac{N}{2}+1) &&= 0, && (99)\\ &(V_{+,-}-\lambda)f(N-1) &&+\mu_{+,+}f(N-2) &&+\mu_{+,-}f(0) &&= 0, && (100) \end{aligned}$$

であり，

$$(V_{-,-}-\lambda)f(x) + \mu_{-,-}f(x-1) + \mu_{-,-}f(x+1) = 0, \qquad 0 < x < \tfrac{N}{2}-1, \tag{101}$$

$$(V_{+,+}-\lambda)f(x) + \mu_{+,+}f(x-1) + \mu_{+,+}f(x+1) = 0, \qquad \tfrac{N}{2} < x < N-1. \tag{102}$$

これらの方程式の解を与えるため，次の仮定を導入する．

仮定 6. $4\mu_{-,-}^2 - (V_{-,-}-\lambda)^2 > 0$ かつ $4\mu_{+,+}^2 - (V_{+,+}-\lambda)^2 > 0$.

この仮定 6 の下で，(101)(102) の解は以下で与えられる．

$$\sin\omega_- f(x) = \sin(x\omega_-)f(1) - \sin((x-1)\omega_-)f(0), \qquad 0 < x < \tfrac{N}{2}-1, \tag{103}$$

$$\sin\omega_+ f(x) = \sin((x-\tfrac{N}{2})\omega_+)f(\tfrac{N}{2}+1) - \sin((x-1-\tfrac{N}{2})\omega_+)f(\tfrac{N}{2}), \qquad \tfrac{N}{2} < x < N-1, \tag{104}$$

ただし，$\omega_\pm \in (-\pi,\pi)\setminus\{0\}$ であり

$$\cos\omega_\pm = -\frac{V_{\pm,\pm}-\lambda}{2\mu_{\pm,\pm}}, \qquad \sin\omega_\pm = \frac{\sqrt{4\mu_{\pm,\pm}^2 - (V_{\pm,\pm}-\lambda)^2}}{2\mu_{\pm,\pm}}. \tag{105}$$

(103)(104) を (97) から (100) に代入する．このとき，(97) から (100) を満たすことは，

$$\tilde{T}(\lambda) = \begin{bmatrix} \tilde{T}_1^- & \tilde{T}_2^- \\ \tilde{T}_2^+ & \tilde{T}_1^+ \end{bmatrix}, \tag{106}$$

に対し ${}^T\!\begin{bmatrix} f(0) & f(1) & f(\frac{N}{2}) & f(\frac{N}{2}+1) \end{bmatrix} \in \ker\tilde{T}(\lambda)$ であることと同値である．ただし，

$$\tilde{T}_1^\pm = \begin{bmatrix} -\frac{\mu_{\pm,\mp}}{\mu_{\mp,\mp}}\sin((\frac{N}{2}-2)\omega_\pm) & \frac{\mu_{\pm,\mp}}{\mu_{\mp,\mp}}\sin((\frac{N}{2}-1)\omega_\pm) \\ \tilde{t}_\pm(2) & -\tilde{t}_\pm(1) \end{bmatrix}, \quad \tilde{T}_2^\pm = \begin{bmatrix} -2\sin\omega_\pm\cos\omega_\mp & \sin\omega_\pm \\ \frac{\mu_{\pm,\mp}}{\mu_{\pm,\pm}}\sin\omega_\pm & 0 \end{bmatrix},$$

$$\tilde{t}^\pm(1) = \frac{(1-\sin\theta_1^\pm)(\sin\theta_2^\pm - \sin\theta_2^\mp)}{2\mu_{\pm,\pm}}\sin((\tfrac{N}{2}-1)\omega_\pm) + \sin(\tfrac{N}{2}\omega_\pm),$$

$$\tilde{t}^\pm(2) = \frac{(1-\sin\theta_1^\pm)(\sin\theta_2^\pm - \sin\theta_2^\mp)}{2\mu_{\pm,\pm}}\sin((\tfrac{N}{2}-2)\omega_\pm) + \sin((\tfrac{N}{2}-1)\omega_\pm). \tag{107}$$

すなわち，仮定 6 の下で $\det\left(\tilde{T}(\lambda)\right)=0$ が満たされることが，λ が T の固有値となる必要十分条件である．したがって，これを具体的に計算すると

$$\det\left(\tilde{T}(\lambda)\right)=\sin(\omega_-)\sin(\omega_+)\left(2P_1(\lambda)+\frac{\sin\theta_2^+-\sin\theta_2^-}{4\mu_{-,-}^2\mu_{+,+}^2}P_2(\lambda)\right). \tag{108}$$

であり，

$$\begin{aligned}P_1(\lambda)=\ &\sin\omega_+\sin\omega_-\left(1-\cos(\tfrac{N}{2}\omega_-)\cos(\tfrac{N}{2}\omega_+)\right)\\&-\cos\omega_-\cos\omega_+\sin(\tfrac{N}{2}\omega_-)\sin(\tfrac{N}{2}\omega_+)+\frac{\mu_{+,-}^2\mu_{-,+}^2}{\mu_{-,-}\mu_{+,+}}\sin(\tfrac{N}{2}\omega_-)\sin(\tfrac{N}{2}\omega_+),\end{aligned} \tag{109}$$

$$\begin{aligned}P_2(\lambda)=\ &(\sin\theta_2^+-\sin\theta_2^-)\mu_{-,-}\mu_{+,+}\sin(\tfrac{N}{2}\omega_-)\sin(\tfrac{N}{2}\omega_+)\\&+2(1-\sin\theta_1^+)\mu_{-,-}\left\{\mu_{-,+}^2\sin(\tfrac{N}{2}\omega_-)\sin((\tfrac{N}{2}-1)\omega_+)-\mu_{-,-}\mu_{+,+}\sin((\tfrac{N}{2}+1)\omega_-)\sin(\tfrac{N}{2}\omega_+)\right\}\\&-2(1-\sin\theta_1^-)\mu_{+,+}\left\{\mu_{+,-}^2\sin((\tfrac{N}{2}-1)\omega_-)\sin(\tfrac{N}{2}\omega_+)-\mu_{-,-}\mu_{+,+}\sin(\tfrac{N}{2}\omega_-)\sin((\tfrac{N}{2}+1)\omega_+)\right\}.\end{aligned} \tag{110}$$

一般の場合にこの方程式の解を得ることは難しいが，例えば

$$\sin(\tfrac{N}{2}\omega_+)=\sin(\tfrac{N}{2}\omega_-)=0,\quad \cos(\tfrac{N}{2}\omega_+)\cos(\tfrac{N}{2}\omega_+)=1,$$

を満たすような λ が存在するモデルであれば固有値を解析することができる．したがって，以後，以下の仮定 7 を課した (θ,ϕ)-モデルに対して解析を行う．

仮定 7. (θ,ϕ)**-モデル：**

$$(\theta_1^-,\theta_1^+)=(-\theta,\theta),\quad (\theta_2^-,\theta_2^+)=(\phi+\pi,\phi),\quad \theta\in(-\pi,\pi)\setminus\{0,\pm\tfrac{\pi}{2}\},\quad \phi\in(-\pi,\pi]\setminus\{\pm\tfrac{\pi}{2}\}.$$

このとき，次の補題が成り立つ．

補題 5.7. 仮定 7 の下で以下が成り立つ．

$$\sigma(T)\setminus\{\pm1\}\supset\left\{\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_{\frac{N}{2}-2},\lambda_{\frac{N}{2}-1}\right\}.$$

ここで，λ_n $(n=1,2,\dots,\frac{N}{2}-1)$ は以下である:

$$\lambda_n=-\sin\theta\sin\phi+\cos\theta\cos\phi\cos(\tfrac{2\pi n}{N}).$$

証明. まず，仮定 7 の下では各パラメーターは以下となる．

$$\begin{aligned}&\mu_{\pm,\pm}=\pm\frac{1}{2}|\cos\theta|\cos\phi, && \mu_{\mp,\pm}=\pm\frac{1}{2}(1\pm\sin\theta)\cos\phi,\\&V_{+,+}=V_{-,-}=-\sin\theta\sin\phi, && V_{\mp,\pm}=\pm\sin\phi.\end{aligned} \tag{111}$$

ここで，$\lambda=\lambda_n$ とし，仮定 6 が満たされているかを確認する．(111) を用いて仮定 6 の条件式を計算すると，

$$4\mu_{\pm,\pm}^2-(V_{\pm,\pm}-\lambda_n)^2=\cos^2\theta\cos^2\phi\left(1-\cos^2(\tfrac{2\pi n}{N})\right)>0,\quad n=1,2,\dots,\tfrac{N}{2}-1,$$

であるので，仮定 6 が満たされていることが確認された．

次に $\det\left(\tilde{T}(\lambda_n)\right)=0$ が成り立つことを確認する．(105) および (111) より

$$\cos\omega_\pm = \pm\mathrm{sgn}(\cos\theta)\cos(\tfrac{2\pi n}{N}), \qquad \sin\omega_\pm = \pm\mathrm{sgn}(\cos\phi)\sqrt{1-\cos^2(\tfrac{2\pi n}{N})}, \tag{112}$$

である．このとき，$\cos(\frac{N}{2}\omega_\pm)=(-1)^n$，$\sin(\frac{N}{2}\omega_\pm)=0$ が得られ，これを (109)(110) に代入することで，(108) から $\det\left(\tilde{T}(\lambda_n)\right)=0$ が成り立つため $\lambda_n\in\sigma(T)$ である．

最後に，$\lambda_n\neq\pm1$ であることを確認する．$\lambda_n=\pm1$ であると仮定したとき，定義から以下が成り立つ．

$$\cos(\tfrac{2\pi n}{N}) = \frac{\pm1+\sin\theta\sin\phi}{\cos\theta\cos\phi}.$$

このとき

$$|\pm1+\sin\theta\sin\phi| - |\cos\theta\cos\phi| = 1\pm\sin\theta\sin\phi - |\cos\theta\cos\phi|$$

であるが，$\pm\sin\theta\sin\phi-|\cos\theta\cos\phi|$ は三角関数の合成により $\cos(\theta-\phi)$ または $\cos(\theta+\phi)$ に一致するため $|\pm1+\sin\theta\sin\phi|-|\cos\theta\cos\phi|\geq0$ が成り立つ．このとき

$$|\cos(\tfrac{2\pi n}{N})|\geq1$$

であるが，いま $n=1,2\ldots,\frac{N}{2}-1$ から $|\cos(\frac{2\pi n}{N})|<1$ であるため矛盾する．したがって，$\lambda_n\in\sigma(T)\setminus\{\pm1\}$ が導かれる． □

また，${}^T\left[f(0) \quad f(1) \quad f(\frac{N}{2}) \quad f(\frac{N}{2}+1)\right]\in\ker\tilde{T}(\lambda)$ であることが λ が T の固有値となる必要十分条件だったことを思い返すと，固有値 λ の重複度は $\dim\ker(\tilde{T}(\lambda))$ と等しくなることがわかる．補題 5.7 によって得られた固有値 λ_n $(n=1,2,\ldots,\frac{N}{2}-1)$ の重複度は次の定理によって得られる．

補題 5.8. 仮定 7 の下で，補題 5.7 で与えられた $\lambda_n\in\sigma(T)\setminus\{\pm1\}$ に対し以下が成り立つ．

$$\sigma(T)\setminus\{\pm1\}\supset\bigcup_{n=1}^{\frac{N}{2}-1}\{\lambda_n\}^2.$$

証明． 各 $n=1,2,\ldots,\frac{N}{2}-1$ に対して，$F={}^T\left[F^- \quad F^+\right]={}^T\left[f(0) \quad f(1) \quad f(\frac{N}{2}) \quad f(\frac{N}{2}+1)\right]\in\ker\tilde{T}(\lambda_n)$ の自由度を求めることで補題を導く．まず，(106) より $F\in\ker(\tilde{T}(\lambda_n))$ であることは

(i) $\tilde{T}_1^-F^-+\tilde{T}_2^-F^+=0.$
(ii) $\tilde{T}_2^+F^-+\tilde{T}_1^+F^+=0.$

の両式を満たすことと同値である．このとき，(i) が成り立つとき (ii) も同時に成り立つことが示されれば，F の自由度，すなわち固有値 λ_n の重複度 $\dim\ker(\tilde{T}(\lambda_n))\geq2$ が導かれる．ここで，(107) および $\sin\omega_\pm\neq0$ より $\tilde{T}_2^\pm$ は正規行列であるため，(i) が成り立つとき

$$F^+=-\left(\tilde{T}_2^-\right)^{-1}\tilde{T}_1^-F^-$$

であり，これを (ii) に代入すると

$$\left[\tilde{T}_2^+-\tilde{T}_1^+\left(\tilde{T}_2^-\right)^{-1}\tilde{T}_1^-\right]F^-=\tilde{T}_2^+\left[1-\left(\tilde{T}_2^+\right)^{-1}\tilde{T}_1^+\left(\tilde{T}_2^-\right)^{-1}\tilde{T}_1^-\right]F^-=0.$$

したがって，$\left(\tilde{T}_2^{+}\right)^{-1}\tilde{T}_1^{+}\left(\tilde{T}_2^{-}\right)^{-1}\tilde{T}_1^{-}=1$ を示せばよい．まず，$\lambda=\lambda_n$ の場合，(112) より以下が得られる．

$$\sin(\tfrac{N}{2}\omega_\pm)=0,\quad \sin((\tfrac{N}{2}-1)\omega_\pm)=-\sin\omega_\pm\cos(\tfrac{N}{2}\omega_\pm),\quad \sin((\tfrac{N}{2}-2)\omega_\pm)=-2\sin\omega_\pm\cos\omega_\pm\cos(\tfrac{N}{2}\omega_\pm).$$

これらを (107) に代入すると

$$\tilde{T}_1^{\pm}=\sin\omega_\pm\cos(\tfrac{N}{2}\omega_\pm)\begin{bmatrix}\dfrac{2\mu_{\pm,\mp}}{\mu_{\mp,\mp}}\cos\omega_\pm & -\dfrac{\mu_{\pm,\mp}}{\mu_{\mp,\mp}}\\ -\dfrac{(1-\sin\theta_1^{\pm})(\sin\theta_2^{\pm}-\sin\theta_2^{\mp})}{\mu_{\pm,\pm}}\cos\omega_\pm-1 & \dfrac{(1-\sin\theta_1^{\pm})(\sin\theta_2^{\pm}-\sin\theta_2^{\mp})}{2\mu_{\pm,\pm}}\end{bmatrix},$$

$$\tilde{T}_2^{\pm}=\sin\omega_\pm\begin{bmatrix}-2\cos\omega_\mp & 1\\ \dfrac{\mu_{\pm,\mp}}{\mu_{\pm,\pm}} & 0\end{bmatrix},\qquad \left(\tilde{T}_2^{\pm}\right)^{-1}=\frac{1}{\sin\omega_\pm}\frac{\mu_{\pm,\pm}}{\mu_{\pm,\mp}}\begin{bmatrix}0 & 1\\ \dfrac{\mu_{\pm,\mp}}{\mu_{\pm,\pm}} & 2\cos\omega_\mp\end{bmatrix},$$

が得られこれらを用いて計算することで $\left(\tilde{T}_2^{+}\right)^{-1}\tilde{T}_1^{+}\left(\tilde{T}_2^{-}\right)^{-1}\tilde{T}_1^{-}=1$ が示される． □

補題 5.8 より，$2(\frac{N}{2}-1)$ 個の ±1 以外の固有値が得られ，スペクトル写像定理よりこれらを複素単位円上に射影したものが U の固有値となる．したがって，$2\times2(\frac{N}{2}-1)=2N-4$ 個の U の固有値が得られた．ここで，仮定 7 の下では定理 5.6 の条件を満たすため $\dim\mathcal{B}_\pm=\dim\mathcal{T}_\pm=1$ であり，合計 4 個の ±1 固有値が得られる．いま，$\dim\mathcal{H}=2N$ であるのでこれらの議論により全ての固有値が得られた．

定理 5.9. 仮定 7 の下で，定義 5.1 で与えられた量子ウォークの時間発展作用素 U の固有値は以下である．

$$\sigma(U)=\bigcup_{n=1}^{\frac{N}{2}-1}\{\lambda_n\}^2\cup\{+1\}^2\cup\{-1\}^2.$$

ただし，$\lambda_n=-\sin\theta\sin\phi+\cos\theta\cos\phi\cos(\frac{2\pi n}{N})$ である．

参考文献

[1] N. Shenvi, J. Kempe, K. B. Whaley, Quantum random-walk search algorithm, *Physical Review A*, **67**, 052307 (2003).

[2] A. Ambainis, J. Kempe, A. Rivosh, Coins make quantum walks faster, *SODA '05: Proceedings of the sixteenth annual ACM-SIAM symposium on Discrete algorithms*, 1099–1108 (2005).

[3] A. Ambainis, Quantum walks and their algorithmic applications, *International Journal of Quantum Information*, **1**, 507–518 (2003).

[4] A. Ambainis, Quantum walk algorithm for element distinctness, *SIAM Journal on Computing*, 37 **1**, 210–239 (2007).

[5] F. Magniez, A. Nayak, J. Roland, M. Santha, Search via quantum walk, *SIAM Journal on Computing*, 40 **1**, 142–164 (2011).

[6] M. Szegedy, Quantum speed-up of Markov chain based algorithms, *45th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science*, 32–41 (2004).

[7] N. Konno, Quantum random walks in one dimension, *Quantum Information Processing*, **1**, 345–354 (2002).

[8] N. Konno, A new time of limit theorems for the one-dimensional quantum random walk, *Journal of the Mathematical Society of Japan*, **57**, 1179–1195 (2005).

[9] Y. Higuchi, N. Konno, I. Sato, E. Segawa, Quantum graph walks I: mapping to quantum walks, *Yokohama Mathematical Journal*, **59**, 33–56 (2013).

[10] D. Aharonov, A. Ambainis, J. Kempe, U. Vazirani, Quantum walks on graphs, *Proceedings of ACM Symposium on Theory of Computation*, 50–59 (2001).

[11] E. Segawa, Localization of quantum walks induced by recurrence properties of random walks, *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience: Special Issue: Theoretical and Mathematical Aspects of the Discrete Time Quantum Walk*, **10**, 1583–1590 (2013).

[12] Y. Higuchi, N. Konno, I. Sato, E. Segawa, Spectral and asymptotic properties of Grover walks on crystal lattice, *Journal of Functional Analysis*, **11**, 4197–4235 (2014).

[13] Y. Higuchi, E. Segawa, The spreading behavior of quantum walks induced by drifted random walks on some magnifier graph, *Quantum information and computation*, **5**, (2018).

[14] Y. Higuchi, N. Konno, I. Sato, E. Segawa, A note on the discrete-time evolutions of quantum walk on a graph, *Journal of Math-for-Industry* **5**, 103–109 (2013).

[15] N. Konno, N. Obata, E. Segawa, Localization of the Grover walks on spidernets and free Meixner laws, *Communications in Mathematical Physics*, 667–695 (2013).

[16] K. Chisaki, M. Hamada, N. Konno, E. Segawa, Limit theorems for discrete-time quantum walks on trees, *Interdisciplinary Information Sciences*, **15**, No 3, 423–429 (2009).

[17] Y. Higuchi, E. Segawa, Quantum walks induced by Dirichlet random walks on infinite trees, *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, **51**, 075303 (2018).

[18] K. Saito, Periodicity for the Fourier quantum walk on regular graphs, *Quantum Information and Computation*, **19**, No 1&2, 23–34 (2019).

[19] T. Kajiwara, N. Konno, S. Koyama, K. Saito, Periodicity for the 3-state quantum walk on cycles, *Quantum information and computation*, **19**, 1081–1088 (2019).

[20] Y. Yoshie, A characterization of the graphs to induce periodic Grover walk, *Yokohama Mathematical Journal*, **63**, 9–23 (2017).

[21] N. Konno, Y. Shimizu, M. Takei, Periodicity for the Hadamard walk on cycles, *Interdisciplinary Information Sciences*, **1**, 1–8 (2017).

[22] Y. Higuchi, N. Konno, I. Sato, E. Segawa, Periodicity of the discrete-time quantum walk on a finite graph, *Interdisciplinary Information Sciences*, **1**, 75–86 (2017).

[23] Y. Yoshie, Periodicity of Grover walks on distance-regular graphs, *Graphs and Combinatorics*, **35**, 1305–1321 (2019).

[24] S. Kubota, E. Segawa, T. Taniguchi, Y. Yoshie Periodicity of Grover walks on generalized Bethe trees, *Linear Algebra and its Applications*, **1**, 371–391 (2018).

[25] E. Segawa, A. Suzuki, Generator of an abstract quantum walk, *Quantum Studies: Mathematics and Foundations*, **3**, 11–30 (2016).

[26] E. Segawa, A. Suzuki, Spectral mapping theorem of an abstract quantum walk, *Quantum Information Processing* **11**, (2019).

[27] K. Matsue, O. Ogurisu, E. Segawa, A note on the spectral mapping theorem of quantum walk models, *Interdisciplinary Information Sciences*, **1**, 105–114 (2017).

[28] T. Fuda, D. Funakawa, A. Suzuki, Localization of a multi-dimensional quantum walk with one defect, *Quantum Information and Processing*, **16**, 203–226 (2017).

[29] 今野紀雄， 量子ウォークの数理， 産業図書， (2008).

[30] 今野紀雄， 量子ウォーク， 森北出版， (2014).

[31] 今野紀雄， 井手勇介， 量子ウォークの新展開， 培風館， (2019).

[32] 町田拓也， 図で解る量子ウォーク入門， 森北出版， (2015).

[33] 町田拓也， 量子ウォーク：基礎と数理， 裳華房， (2018).

[34] Renato Portugal, Quantum Walks and Search Algorithms 2nd Ed., Springer, (2018).

[35] Chris Godsil, Gordon Royle, Algebraic Graph Theory, Springer, (2001).

[36] Andries E. Brouwer, Willem H. Haemers, Spectra of Graphs, (2011).

[37] 石田信著， 代数的整数論， 森北出版， (1974).

[38] 青木昇， 素数と 2 次体の整数論， 共立出版， (2012).

[39] 新井朝雄， ヒルベルト空間と量子力学（改訂増補版）， 共立出版， (2015).

[40] 新井朝雄， 量子現象の数理， 朝倉書店， (2006).

[41] 中村周， 量子力学のスペクトル理論， 共立出版， (2012).

謝辞

2012 年 4 月に横浜国立大学に入学し，早くも将来に思い悩み迷走しながらも過ごす毎日，量子ウォークに初めて出会ったのは指導教員である今野紀雄先生の確率モデルの授業でした．その頃の私は不遜にも，単純な時間発展で与えられる直線上の量子ウォークを与し易しと捉え，夢中になって授業課題に取り掛かったことを記憶しています．当時 2015 年春学期，先生の魅力的な授業も相まり，量子ウォークという不思議な数理モデルの虜になったことが私の研究生活のスタートラインとなりました．

それ以来，初めての学会発表，論文投稿，セミナーやディスカッションを通して様々な知識を得るたびに好奇心は膨らみ，量子ウォークに感じる楽しさは指数関数的に増大していき，ついに修了を迎える時となりました．その過程の中で，お世話になり，また，ご迷惑をおかけしてきました多くの方々にこの場を借りて謝辞を述べさせていただきます．

まず，指導教員の今野先生にはどれだけ御礼を述べても足りません．英論文の添削を始め，学会の発表練習や就職活動の面接対策など，時には休日であるにも関わらず何度も夜遅くまでお付き合いしていただき本当にありがとうございました．また，外部の先生方を招いて毎週開催されるセミナーなど，様々な研究者の方々と交わる機会を与えていただきました．これは新たな知見を広める掛け替えのない時間であり，私にとって最も大きな財産の 1 つとなりました．御恩を挙げれば尽きることはありませんが，8 年間ご指導をいただいた今野先生に心より感謝いたします．

竹居正登先生には授業やセミナーを通して確率論のいろはから口頭発表の姿勢まで様々なご指導をいただきました．最後の最後まで立派な学生に成れたとは言い難いのですが，頂戴しましたご指導を今後とも忘れず精進していきたくあります．

また，根上生也先生には学部 1 年の頃よりゼミにもお邪魔させていただき，グラフ理論やプログラミングのいろはを教わるなどお世話になりました．現在の私の研究テーマの 1 つとなるグラフ上の量子ウォークは先生の下で学んだ知識が大きな下地となっております．

梶原健先生には整数論や円分体を用いた理論によるアプローチの手法を丁寧に教えてくださり，また，最新の論文においては今野先生と共に共著者となり多くのアドバイスを頂いたことを感謝いたします．また，学部生時代より事務手続きで何かとお世話になりましたことも御礼申し上げます．

今野研究室出身の先輩でもある瀬川悦生先生には，東北大学でお勤めされていた頃より，量子ウォークに関する様々な研究のアドバイスや参考になる論文などを教えていただき，また，時には私のつたない発案にも議論に付き合っていただき，本当にお世話になりました．

同じく研究室の先輩となる金沢工業大学の井手勇介先生，日本大学の町田拓也先生にも大きくお世話になりました．特に井手先生には就職活動の相談にも乗っていただき，何かと助けていただきました．心から感謝いたします．

信州大学の鈴木章斗先生には，今となっては量子ウォークを解析する上で欠かせない作用素・スペクトル理論の基礎から応用まで，本当に多くのことを学ばせていただきました．学振の書類についても丁寧に面倒を見ていただき，また，種々の学会へと招待いただき研究発表の場を与えていただいたことにも感謝いたします．特に，共同研究にもお誘いいただき，スキルアップの機会を与えてくださりありがとうございました．未だに結果がまとまらず申し訳ありません．

今野研究室の先輩・後輩たちや，卒業していった同期の皆とも，セミナーの準備や研究についての話題で盛り上がったり，時には鍋をつつきあったりするなど楽しい思い出を作ることができたことに感謝いたします．また，小松尭さん，遠藤隆子さんとは量子ウォークのみならず学術的な様々な話題についてご意見をいただき，大いに知見を広めることができました．今後の研究室の発展へのお祈りと，皆様への感謝をここで述べさせていただきます．

初めて授業課題として量子ウォークを計算したときに感じた楽しさは，いまだ色褪せることはありません．いつの日にか今野先生にお酒の席で頂いた言葉，常に攻めの姿勢で楽しいことをどんどんやれ，とはまさに私自身の人生の指針であります．この先の人生，何度となく艱難辛苦に直面することとは思いますが，この言葉を頼りにきっと楽しくやっていけるでしょう．

挙げれば尽きることはありませんが，これまで本当に多くの方から支えられ，刺激を受け，ここまでやってくることができました．最後に皆様への心からの感謝の気持ちと御礼を申し上げたく，謝辞にかえさせていただきます．