

# Time operators for quantum walks

北海道大学理学部 寺面 功哲

Noriaki Teranishi

Department of Mathematics, Hokkaido University

e-mail: teranishi@math.sci.hokudai.ac.jp

## 1 序文

当研究は信州大学の佐々木格 氏, 信州大学の鈴木章斗 氏, 信州大学の松澤泰通 氏, 北海学園大学の船川大樹 氏との共同研究 [FMSST20] に基づくものである.

本稿では, 離散量子ウォークの時間発展を記述しているユニタリ作用素の事を念頭に置いているので, 主にユニタリ作用素に対して定義される時間作用素の性質について述べるものである. 時間作用素にはユニタリ作用素に対する時間作用素と関係の深い自己共役作用素に対する時間作用素もある. 先ずは, 従来 of 時間作用素の定義を確認しておきたい.

**定義 1.1.**  $\mathcal{H}$  をヒルベルト空間,  $H$  を  $\mathcal{H}$  上の自己共役作用素,  $T$  を  $\mathcal{H}$  上の対称作用素とする. ことのき,

- (1)  $T$  が自己共役作用素  $H$  に対する時間作用素であるとは, 非自明な部分空間  $D \subseteq \mathcal{H}$  が存在して

$$[T, H] = i \text{ on } D \quad (1)$$

が成立することである. ここで,  $[T, H] := TH - HT$  とする.

- (2)  $T$  が自己共役作用素  $H$  に対する強時間作用素であるとは, 任意の実数  $t \in \mathbb{R}$  に対して

$$e^{itH} T e^{-itH} = T + t$$

が成立することである.

次に離散時間で発展する量子ウォークを念頭にユニタリ作用素に対する時間作用素の定

義を確認する．離散量子ウォークの時間発展はユニタリ作用素  $U$  で記述される．このユニタリ作用素には 1 変数強連続ユニタリ群のように，生成子として自然な自己共役作用素が定義できない．そこで，強時間作用素の定義に於ける  $e^{itH}$  を一般のユニタリ作用素  $U$  に， $t = 1$  としたものを定義するのが自然にみえる．従ってユニタリ作用素に対する時間差要素の定義は次のものとする．

**定義 1.2.**  $\mathcal{H}$  をヒルベルト空間， $H$  を  $\mathcal{H}$  上の自己共役作用素， $U$  を  $\mathcal{H}$  上のユニタリ作用素とする．このとき，

- (1)  $T$  がユニタリ作用素  $U$  に対する時間作用素であるとは，非自明な部分空間  $D \subseteq \mathcal{H}$  が存在して

$$[T, U] = U \text{ on } D$$

が成立することである．

- (2)  $T$  がユニタリ作用素  $U$  に対する強時間作用素であるとは，作用素等式として

$$[T, U] = U$$

が成立することである．

以下，時間作用素の存在と性質を見ていきたい．

## 2 自己共役作用素に対する時間作用素

正準交換関係 (1) が成立する領域  $D$  に稠密性を要請する場合は Galapon の時間作用素なる，非常に性質の良い時間作用素の構成方法が知られている．Galapon による時間作用素の構成方法は [AM08, AH17, Ara20] 及びその参考文献に詳しいので，ここでは詳細を割愛して条件のみを確認しておく．

**定理 2.1.** [AM08, Theorem 2.5]  $H$  をヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  上の非負な自己共役作用素で，次を満たすとする．

- (1)  $H$  のスペクトル  $\sigma(H)$  は離散固有値のみからなる．従って， $\sigma(H) = \{E_n\}_{n \in \mathbb{N}}$  と表せる．
- (2) 各  $n \in \mathbb{N}$  に対して，固有空間の次元は 1 である :  $\ker(H - E_n) = \langle e_n \rangle$ .
- (3)  $\sum E_n^{-2} < \infty$ .

次で定義される対称作用素を  $T$  とする.

$$D(T) := \left\{ f \in \mathcal{H} \mid \sum_{n \in \mathbb{N}} \left| \sum_{m \neq n} \frac{\langle e_m, f \rangle}{E_n - E_m} \right|^2 \right\}$$

$$Tf := i \sum_{n \in \mathbb{N}} \left( \sum_{m \neq n} \frac{\langle e_m, f \rangle}{E_n - E_m} \right) e_n, \quad (f \in D(T))$$

このとき, ある稠密な部分空間  $D$  が存在して

$$[T, H] = i \quad \text{on } D$$

を満たす.

上記の定理によって構成される時間作用素を Galapon の時間作用素と呼ぶ. 正準交換関係を満たす領域  $D$  が稠密である場合, 現在は, この時間作用素の構成法に依っているところが大きい. この定理の条件は非常に強いが, 次の定理まで条件を弱められることが知られている.

**定理 2.2.** [Ter16]  $H$  をヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  上の非有界な自己共役作用素で, そのスペクトルは重複度を込めて高々加算個の固有値のみからなるとする. このとき, 稠密な部分空間  $D$  と対象作用素  $T$  が存在して

$$[T, H] = i \quad \text{on } D$$

を満たすものが存在する.

条件が弱められたとはいえ, Galapon の方法を援用して連続スペクトルを持つ自己共役作用素に対して時間作用素を構成することは無理そうである. そこで非自明な自己共役作用素が時間作用素を持ちうるかという問題が気になる. 正準交換関係に関しては, 次の古典的な定理が知られている. ([新江 99] を参照のこと.)

**定理 2.3.**  $A, B$  をヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  上の作用素で, 稠密な部分空間  $D \subseteq D(AB) \cap D(BA)$  が存在して,  $D$  上で交換関係

$$[A, B] = \lambda$$

を満たすとす. 但し,  $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$  である. このとき,  $A, B$  の少なくとも一方は非有界作用素である.

この定理から稠密な部分空間上で正準交換関係を満たす有界作用素の組  $(T, H)$  は存在しない事がわかる. 従って非有界作用素を取り扱う必要が出てくる. しかし, 正準交換関

係を満たしながら非有界作用素を構成することは大変難しい。しかし、時間作用素が正準交換関係を満たす領域  $D$  が稠密でなければならぬ理由は特に無いので、自己共役作用素に対して時間作用素を構成することができる。

**定理 2.4.** [Ter16] ヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  上の自己共役作用素  $H$  とする。このとき、非自明な部分空間  $D \subseteq \mathcal{H}$  と (有界な) 対称作用素  $T$  が存在して

$$[T, H] = i \text{ on } D$$

となるものが存在する。

この定理は先の定理と矛盾するように見えるかもしれないが、上記の定理で作られる時間作用素  $T$  は部分空間  $D$  の閉包を不変にしないので矛盾することはない。これにより、任意の非自明な自己共役作用素に対して時間作用素が存在することがわかった。しかしながら、ここで示された時間作用素はあまり良い性質を持っていない可能性が高い。何故ならば、この構成法で時間作用素を非可算無限個作ることが可能だが、それら全てが良い性質を持っているとは考え難いからである。また、正準交換関係が満たされる領域  $D$  が稠密でないという事も理由の一つである。

時間作用素が直接に時間的な意味合いを持っているか現在のところ不明である。しかし、[Ara05] により強時間作用素は減衰時間と関わりがあることが知られている。

**定理 2.5.**  $H$  をヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  上の自己共役作用素、 $T$  を  $H$  に対する強時間作用素とする。このとき、任意の  $\phi, \psi \in D(T^n)$  と任意の  $t \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$  に対し、 $t$  と独立な正の定数  $C_n(\phi, \psi)$  が存在して

$$|\langle \phi, e^{-itH} \psi \rangle| \leq \frac{C_n(\phi, \psi)}{|t|^n}$$

が成立する。

### 3 ユニタリ作用素に対する時間作用素

ユニタリ作用素に対する時間作用素も、先ずは存在するかが気になるところである。自己共役作用素に対する強時間作用素が存在するためには、強い条件がつく事が知られている。

**定理 3.1.** [Miy01, Cororally 4.3]  $H$  をヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  上の自己共役作用素、 $H$  に対する強時間作用素  $T$  が存在するならば、 $H$  は固有値を持たない、すなわち、 $\sigma_p(H) = \emptyset$ 。

これに対し、ユニタリ作用素に対する時間作用素の条件は自己共役作用素に対する強時間作用素の条件に比べて非常に弱い。従って、殆どのユニタリ作用素に対して時間差他所の存在を保証できる。

**定理 3.2.** 非自明なユニタリ作用素  $U$  は時間作用素  $T$  を持つ。

証明の概略.  $U$  を適当に回転させた後に、ケーリー変換を通じて自己共役作用素  $H$  に変換する：

$$U = e^{-i\theta}(H - i)(H + i)^{-1}.$$

定理 2.4 により  $H$  は時間作用素  $T'$  をもつ。このとき

$$T := -\frac{1}{2}(H - i)T'(H + i)$$

とすると、適切な領域上で

$$\begin{aligned} [T, U]\psi &= e^{-i\theta}[T, (H - i)(H + i)^{-1}]\psi \\ &= \frac{-e^{-i\theta}}{2} \left( (H - i)T'(H + i)(H - i)(H + i)^{-1} \right. \\ &\quad \left. - (H - i)(H + i)^{-1}(H - i)T'(H + i) \right) \psi \\ &= \frac{-e^{-i\theta}}{2} \left( (H - i)T'(H - i) - (H - i)(H + i)^{-1}(H - i)T'(H + i) \right) \psi \\ &= \frac{-e^{-i\theta}}{2} (H - i)(H + i)^{-1} \left( (H + i)T'(H - i) - (H - i)T'(H + i) \right) \psi \\ &= \frac{-e^{-i\theta}}{2} (H - i)(H + i)^{-1} (-2iHT' + 2iT'H) \psi \\ &= -ie^{-i\theta}(H - i)(H + i)^{-1}[T', H]\psi \\ &= e^{-i\theta}(H - i)(H + i)^{-1}\psi \\ &= U\psi. \end{aligned}$$

となる。従って、 $T$  が  $U$  に対する時間作用素となる。 ■

また、定理 2.5 の類似がユニタリ作用素に対する時間作用素の場合にも成立する。

**定理 3.3.**  $U$  をヒルベルト空間  $\mathcal{H}$  上のユニタリ作用素、 $T$  を  $U$  に対する強時間作用素とする。このとき、任意の  $\phi, \psi \in D(T^n)$  と任意の  $t \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}$  に対し、 $t$  と独立な正の定数  $C_n(\phi, \psi)$  が存在して

$$|\langle \phi, U^t \psi \rangle| \leq \frac{C_n(\phi, \psi)}{|t|^n}$$

が成立する。

ここからは、(1次元)量子ウォークの時間発展を記述するユニタリ作用素に話を限ることにする。ヒルベルト空間  $\mathcal{H} = \ell^2(\mathbb{Z}; \mathbb{C}^2) \cong \ell^2(\mathbb{Z}) \oplus \ell^2(\mathbb{Z})$ , 左シフト作用素  $L: \ell^2(\mathbb{Z}) \rightarrow \ell^2(\mathbb{Z})$  を

$$(L\psi)(n) := \psi(n+1) \quad (\psi \in \ell^2(\mathbb{Z}), n \in \mathbb{Z})$$

としたとき,

$$S := \begin{pmatrix} L & 0 \\ 0 & L^* \end{pmatrix}, \quad C := \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in \mathcal{U}(\mathcal{H}) \quad (2)$$

に対して  $U := SC$  により定まるユニタリ作用素を考える。このユニタリ作用素に対して良い性質を持っていそうな時間作用素を探す事にする。まず、フーリエ変換  $\mathcal{F}_0: \ell^2(\mathbb{Z}) \rightarrow L^2([0, 2\pi], dk/2\pi)$ ,

$$(\mathcal{F}_0\psi)(k) := \sum_{x \in \mathbb{Z}} \psi(x)e^{-ixk}, \quad k \in [0, 2\pi]$$

により  $\mathcal{H}$  上に誘導されるユニタリ変換  $\mathcal{F}$  を考える。このとき、 $U$  は  $\mathcal{F}$  により次の掛け算作用素  $\hat{U}(k)$  に変換される：

$$\hat{U}(k) := \begin{pmatrix} e^{ik} & 0 \\ 0 & e^{-ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik}a & e^{ik}b \\ e^{-ik}c & e^{-ik}d \end{pmatrix}, \quad k \in [0, 2\pi].$$

各  $k \in [0, 2\pi]$  に対して、 $\hat{U}(k)$  は適当な行列  $W(k)$  により対角化可能である。 $\hat{U}(k)$  の固有値を  $\lambda_1(k)$  と  $\lambda_2(k)$  とすれば、

$$W(k)^{-1}\hat{U}(k)W(k) = \begin{pmatrix} \lambda_1(k) & 0 \\ 0 & \lambda_2(k) \end{pmatrix}, \quad k \in [0, 2\pi].$$

と表すことができる。従って、若しもユニタリな掛け算作用素  $\lambda_i(k)$  に対する良い時間作用素  $\hat{T}_i$  が存在すれば、

$$\hat{T} := \begin{pmatrix} \hat{T}_1 & 0 \\ 0 & \hat{T}_2 \end{pmatrix}$$

の引き戻し  $T := \mathcal{F}^{-1}W\hat{T}W^{-1}\mathcal{F}$  が求める時間作用素である。あとはユニタリな掛け算作用素に対して時間作用素を探せばよい。次の定理により、ユニタリな掛け算作用素  $\lambda(k)$  は適当な条件下で強時間作用素を持つことがわかる。

**定理 3.4.**  $\lambda: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{T}$  を 2 回連続微分可能な周期  $2\pi$  の周期関数で、導関数  $\lambda'$  の零点は  $[0, 2\pi)$  の中に高々有限個とする。このとき、

$$T = \frac{i}{2} \left( \frac{\lambda(k)}{\lambda'(k)} P + P \frac{\lambda(k)}{\lambda'(k)} \right)$$

はユニタリ作用素  $\lambda(k)$  に対する強時間作用素となる。但し、 $P$  は  $L^2([0, 2\pi], dk/2\pi)$  上の自己共役作用素で、定義域

$$D(P) := \{f \in AC[0, 2\pi] \mid f' \in L^2([0, 2\pi], dk/2\pi), f(0) = f(2\pi)\}$$

をもち、作用が  $Pf := -if'$  となる作用素である。

次に、定理 3.4 の強時間作用素  $T$  のスペクトルと不足指数を求めてみる。作用素  $T$  の不足指数  $d_{\pm}(T)$  とは  $\dim \ker(T^* \mp i)$  の事であり、作用素  $T$  の自己共役拡大の有無の判定に使われる重要な数である。掛け算作用素  $\lambda(k)$  はユニタリなので、適当な関数  $g: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  により  $\lambda(k) = e^{ig(k)}$  と表現できる。更に、 $\lambda(k)$  の回転数を  $m$  とおく。この設定のもとで、次の定理から掛け算作用素  $\lambda(k)$  とその時間作用素  $T$  は性質のよく分かっている作用素の直和にユニタリ同値になる。これにより時間作用素  $T$  のスペクトルを求めることが可能となる。詳しくは [FMSST20] を参照していただきたい。

**定理 3.5.**  $\lambda: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{T}$  を 2 回連続微分可能な周期  $2\pi$  の周期関数で、導関数  $\lambda'$  の零点は  $[0, 2\pi)$  の中に高々有限個とする。更に、 $m$  を  $\lambda$  の回転数  $T$  を定理 3.4 で述べられている強時間作用素、 $g$  を  $\lambda(k) = e^{ig(k)}$  となるものとする。

- (1)  $\lambda'$  が零点を持たないならば、 $m \neq 0$  かつ  $T$  は自己共役作用素である。更に、ユニタリ作用素  $V: L^2([0, 2\pi], dk/2\pi) \rightarrow \bigoplus_{j=0}^{|m|-1} L^2([0, 2\pi], dk/2\pi)$  が存在して

$$VTV^{-1} = \bigoplus_{j=0}^{|m|-1} \left( P + \frac{j}{|m|} \right), \quad V\lambda(k)V^{-1} = \bigoplus_{j=0}^{|m|-1} e^{ik}$$

が成立する。

- (2)  $\lambda'$  が零点を持つとき、ユニタリ作用素  $V: L^2([0, 2\pi], dk/2\pi) \rightarrow \bigoplus_{j=1}^n L^2(g(\bar{I}_j), dE)$  で

$$V\bar{T}V^{-1} = \bigoplus_{j=1}^n P_j, \quad V\lambda(k)V^{-1} = \bigoplus_{j=1}^n e^{iE}$$

を満たすものが存在する。ここで、 $0 \leq a_1 < a_2 < \dots < a_n < 2\pi$  は  $\lambda'$  の  $[0, 2\pi)$  における零点、 $a_{n+1} := 2\pi + a_1$ 、各  $j = 1, \dots, n$  に対して  $I_j := (a_j, a_{j+1})$ 、 $P_j$  は  $L^2(g(\bar{I}_j), dE)$  上の作用素で

$$D(P_j) := \{f \in AC(g(\bar{I}_j)) \mid f' \in L^2(g(\bar{I}_j), dE), f(g(a_j)) = f(g(a_{j+1})) = 0\}, \\ P_j f := -if' \quad (f \in D(P_j)).$$

となるものである。

- (3) 強時間作用素  $T$  の不足指数  $d_{\pm}(T)$  はどちらも  $\lambda'$  の  $[0, 2\pi)$  中の零点の個数に等しい。従って、 $T$  は自己共役拡大を持つ。

この定理を用いて式 (2) により定義されるユニタリ作用素  $U = SC$  に対する時間作用素の性質を述べたものが次である。

**定理 3.6.**  $U = SC$  を式 (2) により定まるユニタリ作用素、 $T$  を定理 3.4 を用いて構成される  $U$  に対する強時間作用素とする。このとき、

- (1)  $0 < |a| < 1$  ならば、強時間作用素  $T$  の不足指数は  $d_{\pm}(T) = 4$  でありスペクトルは  $\sigma(T) = \mathbb{C}$  となる。特に、 $T$  は自己共役拡大を持つ。更に、 $T$  の自己共役拡大は  $U$  に対する時間作用素であるが、 $U$  に対する強時間作用素とはならない。
- (2)  $|a| = 1$  のときは、 $T$  は自己共役な強時間作用素で、スペクトルは  $\sigma(T) = \mathbb{Z}$  となる。

式 (2) により定義されるユニタリ作用素  $U = SC$  の回転数  $m$  は 0 なので、上記の定理ではあまり面白いことが見えてこない。そこで、回転数が常に 0 とならない別の量子ウォークのモデルを考えることにする。ここでは three-step 量子ウォークと呼ばれる量子ウォークのモデルを考える。このモデルの時間発展を記述するユニタリ作用素  $U_3$  は  $\ell^2(\mathbb{Z}; \mathbb{C}^2)$  で次により定められる：

$$U_3 := S \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} S \begin{pmatrix} b & a \\ -a & b \end{pmatrix} S \begin{pmatrix} b & -a \\ a & b \end{pmatrix}, \quad S := \begin{pmatrix} L & 0 \\ 0 & L^* \end{pmatrix}, \quad a^2 + b^2 = 1.$$

$U_3$  に対する時間作用素  $T$  を求めるわけだが、 $U = SC$  の場合と同様に、フーリエ変換と対角化により現れるユニタリな掛け算作用素に対して求めれば良い。従って、定理 3.4 から強時間作用素  $T$  の存在が示され、定理 3.5 により強時間作用素  $T$  の不足指数やスペクトルの性質が分かる。纏めたものが次の定理である。

**定理 3.7.**  $T$  を定理 3.4 を用いて得られる時間作用素とする。

- (1)  $0 \leq b^2 < 1/4$  のとき、 $T$  は自己共役作用素であり、 $\sigma(T) = \mathbb{Z}$  となる。
- (2)  $b^2 = 1/4$  のとき、 $T$  の不足指数は  $d_{\pm}(T) = 4$  であり、 $\sigma(T) = \mathbb{C}$  となる。
- (3)  $1/4 < b^2 < 1$  のとき、 $T$  の不足指数は  $d_{\pm}(T) = 8$  であり、 $\sigma(T) = \mathbb{C}$  となる。

$U_3$  のパラメータ  $b$  のとり方により、強時間作用素  $T$  の性質が大きく変わることが見て取れる。これは量子ウォークの物理的な性質が変わっていることを反映したものだと思うが、それは今後の研究に期待したい。



## 参考文献

- [新江 99] 新井朝雄・江沢洋, 量子力学の数学的構造 II, 朝倉書店, 1999.
- [AH17] A. Arai and F. Hiroshima. Ultra-weak time operators of Schrödinger operators. *Ann. Henri Poincaré* **18** (2017), no. 9. 2995–3033.
- [AM08] A. Arai and Y. Matsuzawa. Time operators of a Hamiltonian with purely discrete spectrum. *Rev. Math. Phys.* **20** (2008), no. 8. 951–978.
- [Ara05] A. Arai. Generalized weak Weyl relation and decay of quantum dynamics. *Rev. Math. Phys.* **17** (2005), no. 9. 1071–1109.
- [Ara20] A. Arai, *Inequivalent representations of canonical commutation and anti-commutation relations*, Mathematical Physics Studies, Springer, Singapore, 2020. Representation-theoretical viewpoint for quantum phenomena.
- [FMSST20] D. Funakawa, Y. Matsuzawa, I. Sasaki, A. Suzuki, and N. Teranishi. Time operators for quantum walks. *Lett. Math. Phys.* **110** (2020), no. 9. 2471–2490.
- [Miy01] M. Miyamoto. A generalized Weyl relation approach to the time operator and its connection to the survival probability. *J. Math. Phys.* **42** (2001), no. 3. 1038–1052.
- [Ter16] N. Teranishi. A note on time operators. *Lett. Math. Phys.* **106** (2016), no. 9. 1259–1263.