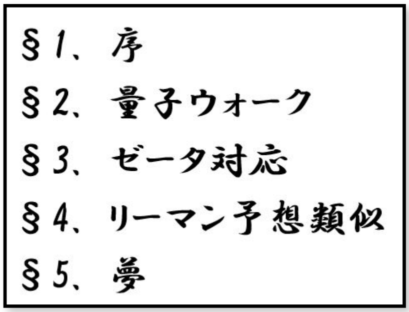
量子世界の新しい歩き方

―量子ウォーク，ゼータ対応，そして，リーマン予想へ―

横浜国立大学大学院工学研究院
今野　紀雄

本稿は，日本数学会 2022 年度秋季総合分科会の市民講演会（9 月 17 日，北海道大学）にもとづいています．市民講演会の趣旨は，一般市民の方々を対象に，やさしい数学の講演会をとのことでしたので，なるべく複雑な数式を使わないことを心掛けました．また，この原稿は，そのときの講演の雰囲気が伝わるように書きたいと思います．

さて講演は，以下の［スライド１］のように 5 つの節から構成されていましたので，これ以降，講演会で使ったスライドの中から，主だったものをそのまま用い紹介します．



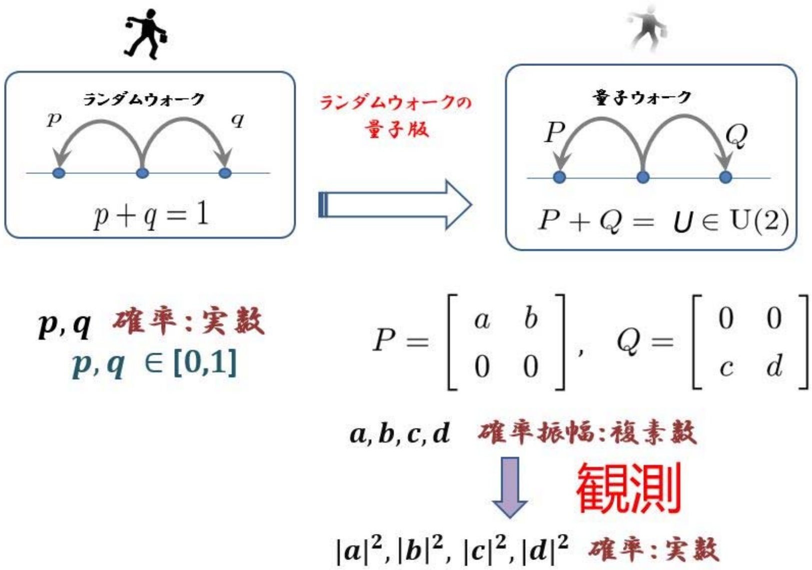
［スライド１］

第 1 節の「序」では，講演の導入として，簡単な自己紹介の後，「直感とずれる」事象が起こり得る量子の世界の入口を意識し，そのような話題に触れました．具体的には，錯視の図形（渦巻き状の図形のように見えるのですが，実は同心円から成る図形）や確率の問題などを紹介しました．これからの話には直接関係してこないので，この部分は割愛します．

第 2 節ではランダムウォークの量子版と言われる「量子ウォーク」について簡単に説明しました（詳しくは [1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9] を参照して下さい）．量子ウォークは 1960 年代からファインマン，アハロノフ，メイヤーなど何人かの物理学者によって提案されました．そして 2000 年頃アンバイニスらによって，量子アルゴリズムとして定式化されたことにより多くの注目を集め，それ以後，広い分野で精力的に研

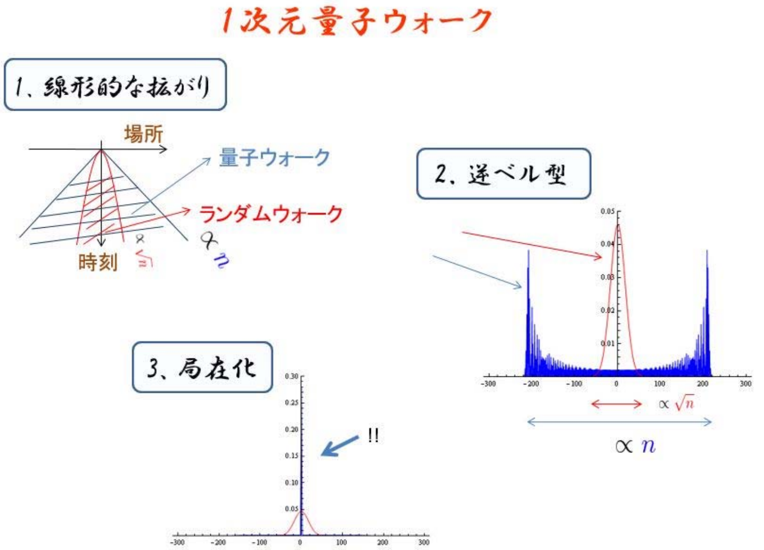
究がなされています．量子ウォークは，様々な現象を新たな側面から解析するための有効なモデルとして研究されています．例えば，第 4 節以降でも登場する「今野・佐藤の定理」は，グラフ上の量子ウォークの特性多項式に対するグラフゼータの伊原型表示で，量子ウォークの固有値とランダムウォークの固有値との関係を明らかにします．また，応用としては，トポロジカル絶縁体，同位体分離，強相関電子系，量子探索，量子テレポーテーション，量子鍵配送，光合成などがあります．

さて，量子ウォークの定義を 1 次元格子の場合に，［スライド２］で簡単に紹介しておきましょう．ランダムウォークの場合，左に動く確率を p とし，右に動く確率を q とします．このとき， p と q は確率なので [0,1] の実数で，左か右にしか移動しないので p+q=1 です．一方，量子ウォークの場合は，確率 p と q の代わりに，2 次の正方行列 P と Q を考えます（例えば，具体的な形の一つがスライドのような場合です）．ただし，何でもよいわけではなく，P＋Q はユニタリ行列になる条件を課します．そのことにより，1 次元格子上の時間発展を定める行列もユニタリ行列となります．



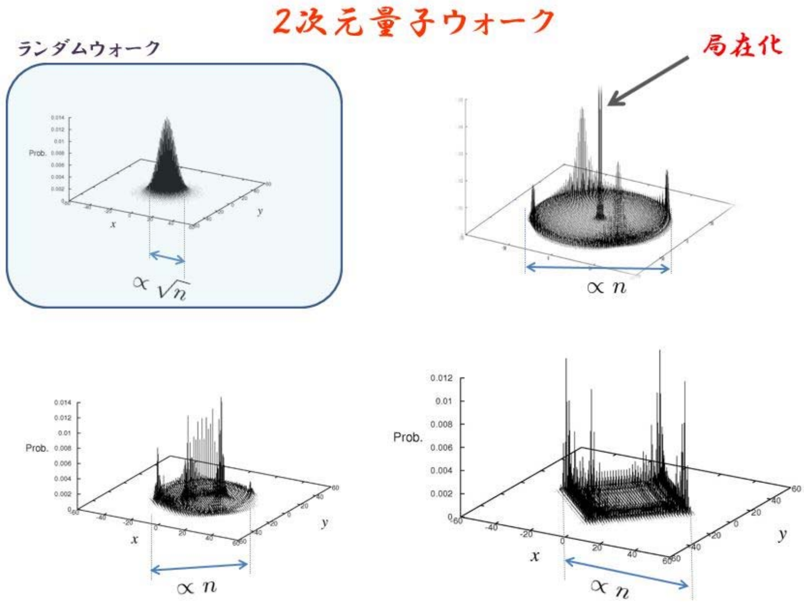
［スライド２］

１次元の量子ウォークの特徴として，［スライド３］では，以下の３つをあげておきました．まず，拡がる様子は，標準偏差が時刻に比例する「1．線形的な拡がり」であり（ランダムウォークは時刻の平方根），分布の形が「2．逆ベル型」になり（ランダムウォークはベル型），さらに，場合によっては出発点に留まり続けるという意味での「3．局在化」が起こることもあり得ます．



［スライド３］

一方，2 次元の場合は［スライド４］のように色々な分布が現れます．最も典型的なモデルは，グローヴァーの量子探索アルゴリズムに対応するグローヴァーウォークです（[スライド４]では右上です）．この２次元でも「線形的な拡がり」や「局在化」の特徴が見て取れます．左上のランダムウォークの分布と全く異なる形をしていることも分かると思います．

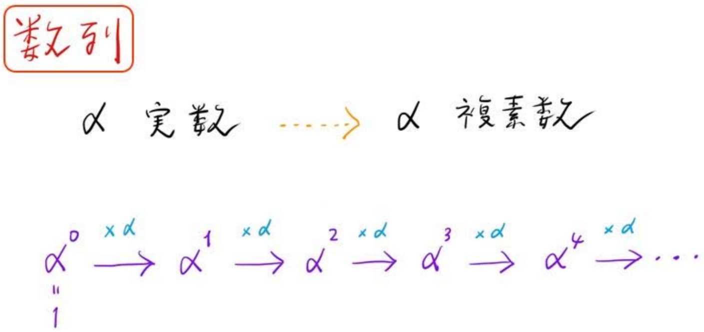


［スライド４］

さて第 3 節では講演会のメインである「ゼータ対応」の解説をします（詳しくは参考文献 [5] をご覧下さい）．ここからは数式が少なからず出てきますが，丁寧に説明していきましょう．ただし，収束性などの微妙なところは大らかに扱います．

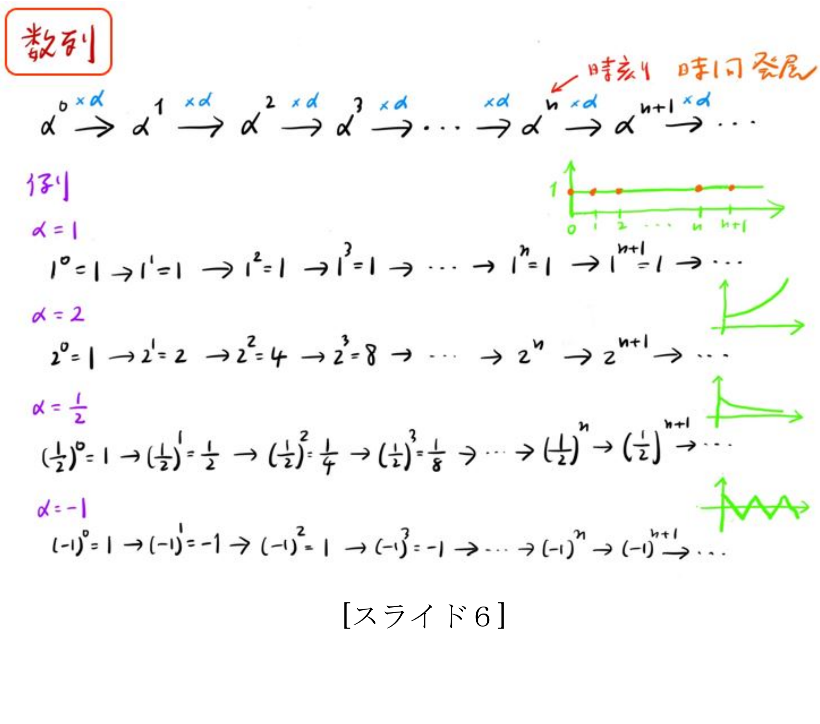
まず肩慣らしとして，数列を考えます．最初は，α を実数としますが，後で複素数も扱います．ここでは，ランダムウォークが「実数」の場合，量子ウォークが「複素数」の場合に対応すると考えて頂いて構いません．

また，数列といっても，α をただ掛けていくだけの単純な数列だけを扱います．ただ，初期値は α の「0」乗としますので，どんな数列でも初期値は「1」です．



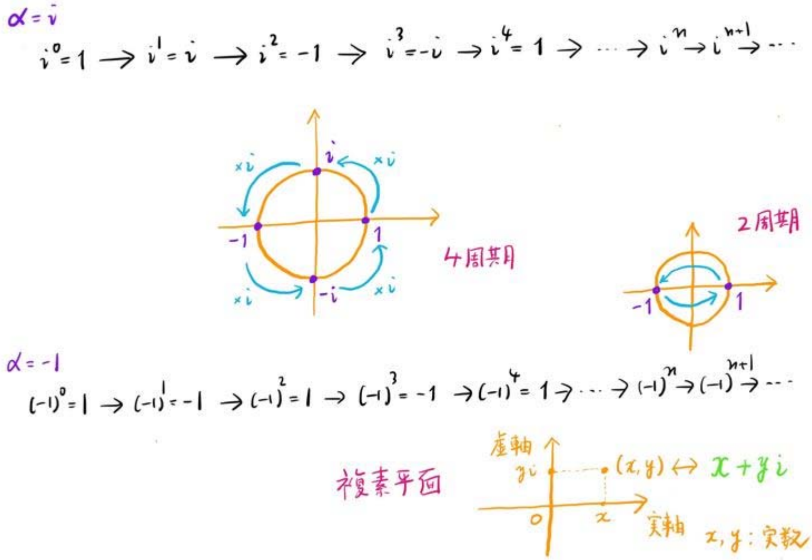
[スライド５]

次の［スライド６］で，数列に慣れて頂くように，α が実数の場合に幾つかの例（α=1, 2, 1/2, −1）を挙げておきました．肩の「n」を時刻と思えば，数列を時間発展のようにも思えます．このような考え方は，後の量子ウォークの時間発展の理解につながります．



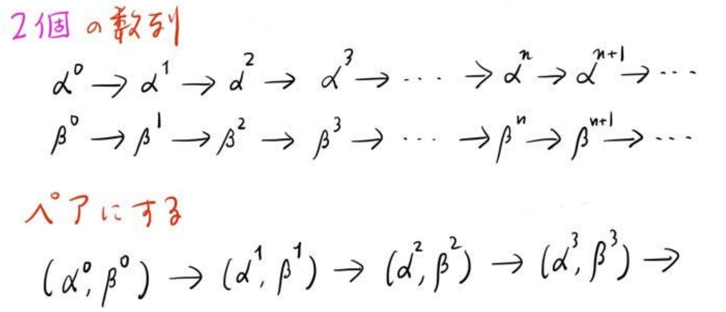
[スライド６]

さて，［スライド７］では，α が複素数の場合について扱います．典型的な例として，α が虚数単位の「i」の場合を考えてみましょう． このときは，スライドのように，時刻 n が 4 の倍数のときに初期値の 1 に戻る「4 周期」となります．一方，複素平面でみると「i」を掛ける作用は，時計の針の向きと逆の 90 度回転に対応するので，4 回作用すると 90×4＝360 度となり，出発点の初期値に戻ることが一目瞭然です．実は，α が実数の「－1」の場合にも複素平面で考えると「2 周期」になることも分かります．



［スライド７］

今度は［スライド８］のように，2 つの数列を同時に考えてみましょう．すなわち，一方の数列が，α を掛け続け，他方が β を掛け続ける数列です．次に，それをペアにします．



［スライド８］

そして，[スライド９] では，まず３つの数列を同時に考えます．　さらに，一般のM 個の数列の場合も同様に扱います．このとき，M 個の数列を今度はαの下添え字で区別しているので注意して下さい．このように，M 個の成分がベクトルのようにひとまとまりの組とみなして，同時に作用していきます．

3個の数列

$$(\alpha^0, \beta^0, \gamma^0) \to (\alpha^1, \beta^1, \gamma^1) \to (\alpha^2, \beta^2, \gamma^2) \to (\alpha^3, \beta^3, \gamma^3)$$

$$\cdots \to (\alpha^n, \beta^n, \gamma^n) \to (\alpha^{n+1}, \beta^{n+1}, \gamma^{n+1}) \to \cdots$$

M個の数列

$$(\alpha_1^0, \alpha_2^0, \alpha_3^0, \ldots, \alpha_M^0) \to (\alpha_1^1, \alpha_2^1, \alpha_3^1, \ldots, \alpha_M^1)$$

$$\to (\alpha_1^2, \alpha_2^2, \alpha_3^2, \ldots, \alpha_M^2) \to (\alpha_1^3, \alpha_2^3, \alpha_3^3, \ldots, \alpha_M^3)$$

$$\cdots \to (\alpha_1^n, \alpha_2^n, \alpha_3^n, \ldots, \alpha_M^n) \to (\alpha_1^{n+1}, \alpha_2^{n+1}, \alpha_3^{n+1}, \ldots, \alpha_M^{n+1}) \to \cdots$$

[スライド９]

さて，[スライド１０] のように，M 個の成分をひとまとまりの組とみなして， A とおきましょう．そして，各成分を n 乗したひとまとまりの組を A の n 乗とします．実は，行列をご存じの方は， M 個の成分を対角成分に並べ，それ以外の成分（非対角成分）を「 0 」とした，対角行列の場合に対応していることに気がつかれた方も多いでしょう．具体的に，M が３の場合の例を書いておきました．

$$A = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \ldots, \alpha_M)$$

$$A^0 \xrightarrow{\times A} A^1 \xrightarrow{\times A} A^2 \xrightarrow{\times A} A^3 \xrightarrow{\times A} \cdots \to A^n \xrightarrow{\times A} A^{n+1} \to \cdots$$

$$(\alpha_1^0, \alpha_2^0, \alpha_3^0, \ldots, \alpha_M^0) \to (\alpha_1^1, \alpha_2^1, \alpha_3^1, \ldots, \alpha_M^1) \to (\alpha_1^2, \alpha_2^2, \alpha_3^2, \ldots, \alpha_M^2) \to$$

行列

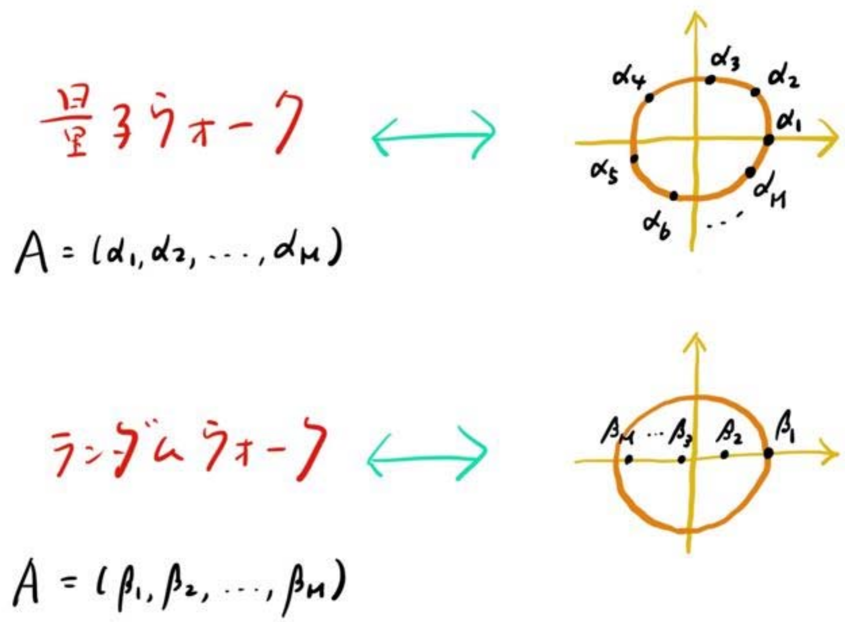
$$A^n = (\alpha_1^n, \alpha_2^n, \alpha_3^n, \ldots, \alpha_M^n) \longleftrightarrow A^n = \begin{bmatrix} \alpha_1^n & & & & 0 \\ & \alpha_2^n & & & \\ & & \alpha_3^n & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & \alpha_M^n \end{bmatrix}$$

$M=3$

$$A^n = \begin{bmatrix} \alpha_1^n & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_2^n & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_3^n \end{bmatrix}$$

[スライド１０]

いよいよ，［スライド１１］では，量子ウォークとランダムウォークについて考えます．この節の「ゼータ対応」を理解するには，実は，量子ウォークの固有値を考えれば十分です（固有ベクトルは必要ありません）．従って，その M 個の固有値の組を A とおきましょう．量子ウォークの場合にはユニタリ性から，固有値は［スライド１１］の右上の図のように，複素平面の単位円周上にあります．同じように，対応するランダムウォークの固有値は，今度は実軸の上にあることが分かります．この場合，ランダムウォークは対称なため（［スライド２］の p=q=1/2 に対応します），時間発展を定める行列は対称行列になるからです．



［スライド１１］

以上の準備のもとで，「ゼータ対応」の説明に入ります．この［スライド１２］が今回の講演の中では，数式が一番多いスライドとなっています．詳細は，一行ずつ追って頂ければと思いますが，鍵となるのは上から 7 行目の式です．この式の左辺は，有名なリーマンのゼータ関数の式（右下の右辺）と形が似ています．ただ，この式では固有値の数が有限個ですが，リーマンのゼータ関数の場合は無限個の素数が，2, 3, 5, 7, ⋯ のように順次現れます．

$$\log\left(\frac{1}{(1-\alpha_1)(1-\alpha_2)\cdots(1-\alpha_M)}\right) \quad \longleftarrow \log\left(\frac{1}{a}\right) = -\log a$$

$$= -\log\left((1-\alpha_1)(1-\alpha_2)\cdots(1-\alpha_M)\right) \quad \longleftarrow \log(ab) = \log a + \log b$$

$$= -\left\{\log(1-\alpha_1) + \log(1-\alpha_2) + \cdots + \log(1-\alpha_M)\right\}$$

$$= -\log(1-\alpha_1) - \log(1-\alpha_2) - \cdots - \log(1-\alpha_M) \quad \longleftarrow -\log(1-a) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{a^n}{n}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty}\frac{\alpha_1^n}{n} + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{\alpha_2^n}{n} + \cdots + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{\alpha_M^n}{n}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty}\frac{\alpha_1^n + \alpha_2^n + \cdots + \alpha_M^n}{n}$$

$$\frac{1}{(1-\alpha_1)(1-\alpha_2)\cdots(1-\alpha_M)} = e^{\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\alpha_1^n + \alpha_2^n + \cdots + \alpha_M^n}{n}}$$

リーマンのゼータ関数

$$\zeta(s) = \frac{1}{(1-2^{-s})(1-3^{-s})(1-5^{-s})(1-7^{-s})\cdots}$$

[スライド１２]

さて前のスライドの鍵となる式は，行列の対角成分の和を取る作用であるトレースの記号 Tr を導入すると（[スライド１３] の上から 2 行目です）スッキリと表せます．この Tr を使って表した式が上から 3 行目の式です．これをさらに変形していくと，上から 5 行目の式が導かれます．行列式をご存じの方は，行列式の記号 det を用いると，そのすぐ下の別の表現が得られることが分かると思います．

$$A = (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_M) \longrightarrow A^n = (\alpha_1^n, \alpha_2^n, \ldots, \alpha_M^n)$$

$$\longrightarrow \mathrm{Tr}(A^n) = \alpha_1^n + \alpha_2^n + \cdots + \alpha_M^n$$

和

$$\frac{1}{(1-\alpha_1)(1-\alpha_2)\cdots(1-\alpha_M)} = e^{\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\mathrm{Tr}(A^n)}{n}}$$

$$\text{左辺} = \prod_{\alpha\in S(A)}\frac{1}{1-\alpha} = \prod_{\alpha\in S(A)}\left\{(1-\alpha)^{-1}\right\} = \left\{\prod_{\alpha\in S(A)}(1-\alpha)\right\}^{-1}$$

$$S(A) = \{\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_M\}$$

以上より

$$\left\{\prod_{\alpha\in S(A)}(1-\alpha)\right\}^{-1} = e^{\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\mathrm{Tr}(A^n)}{n}}$$

$$= \left\{\underbrace{\det}_{\text{行列式}}(I-A)\right\}^{-1}$$

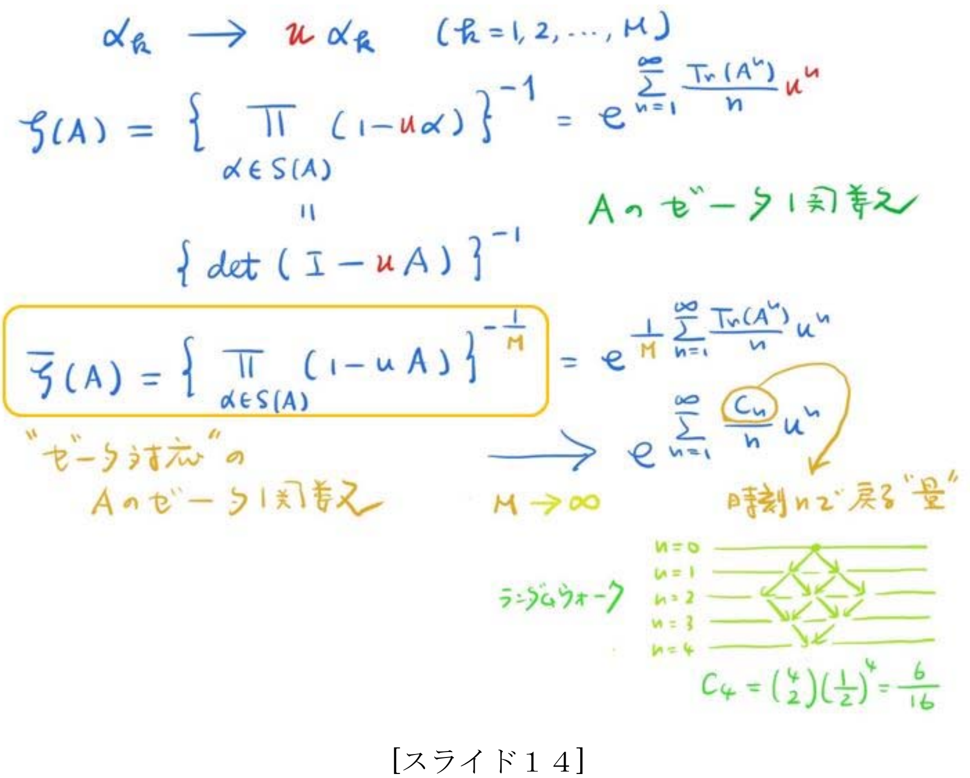
$$\text{但し，} I = (\overbrace{1, 1, \ldots, 1}^{M\text{個}}) = \begin{bmatrix} 1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1 \end{bmatrix} \quad \text{単位行列}$$

[スライド１３]

そしてついに，第３節最後の［スライド１４］でゼータ対応の説明に入ります．

まず，「A のゼータ関数」を上から２行目で定義します．その際に，α を u 倍します．この u は実数だと思って結構です．次に，「ゼータ対応の A のゼータ関数」を新たに導入します．違いは，固有値の個数 M，あるいは，ランダムウォークや量子ウォークが動くグラフの総頂点数 M，を用いて，全体を「－1 乗」ではなく，「－1/M 乗」している点です．

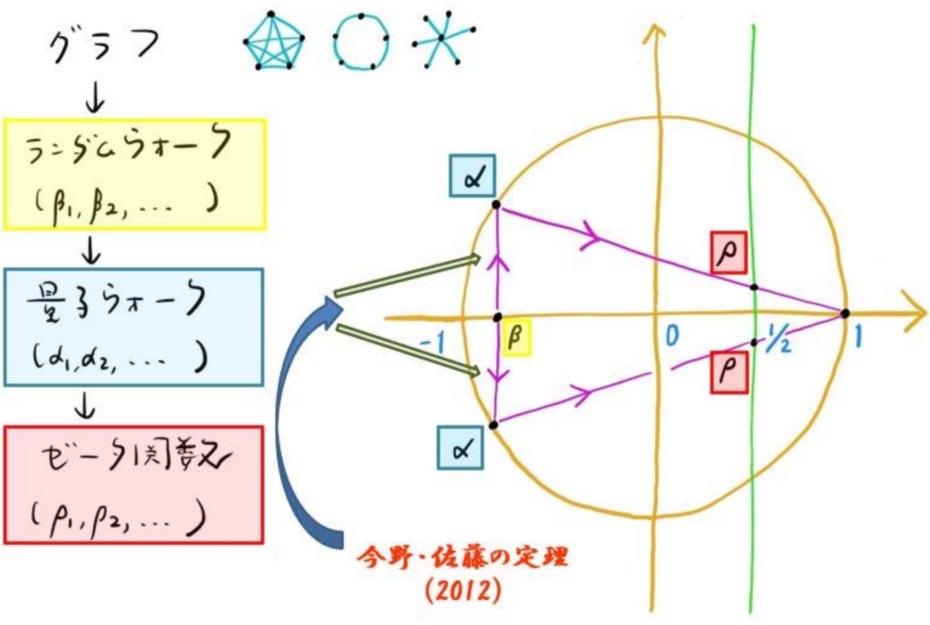
このような設定のもとで，M を無限大に飛ばすと（収束するかなどの詳細はここでは気にしないこととしましょう），C_n という量が出てきます．これは，総頂点数が無限のグラフ上を動く，ランダムウォークや量子ウォークが時刻 n で戻ってくる（ある種の）量を表します．例えば，総頂点数が M のサイクル上を移動する（対称な）ランダムウォークの場合には，C_n は１次元格子の（対称な）ランダムウォークが時刻 n で戻ってくる確率そのものです．具体的に，時刻 4 の場合にはスライドの右下に書かれているように，6/16=3/8 となります．また，配置を点と思えば，確率セルオートマトンの場合も扱えます．M を無限大に飛ばしているので，無限系ではじめて現れる相転移現象を上手くとらえられる可能性があります．



［スライド１４］

第 4 節では，前節で紹介したゼータ対応の考え方にヒントを得て，有限グラフに対して，リーマン予想に対応する「ゼータ関数類似」を構成した最近の私の結果 [7] について［スライド１５］を用いて紹介します．尚，グラフごとに得られるゼータ関数類似の具体的な表式は論文 [7] にありますので，そちらをご覧下さい．

さて，「リーマンのゼータ関数 ζ(s)」を変形した「リーマンの完備ゼータ関数 ξ(s) 」を用いると，関数等式が「ξ(s) = ξ(1－s)」のように簡潔な形で成り立ちます．そして，有名なリーマン予想も「ξ(s) の零点の実数部分は 1/2」とこちらも簡単な形で表現できます．この 2 つの性質が成り立つように，最初に有限グラフの上を移動するランダムウォークの固有値 β を考えます．次に，第 2 節でも少し触れた「今野・佐藤の定理」を用いて同じグラフ上の量子ウォークの固有値 α を求めます．図形的には「β を通り虚軸に平行な直線」と「単位円周上」との交点（通常は 2 個）が求めたい α です．さらに，「その α と点 (1,0) を結んだ直線」と「実部が 1/2 の直線」との交点 ρ が最終的に求めたかった零点に対応するものです．このような構成から，当然実部は 1/2 になるのですが，「グラフ→ランダムウォーク→量子ウォーク→ゼータ関数類似の零点」のような流れで進んで行くのが面白いと思ったので，紹介しました．本家のリーマン予想の解決のちょっとしたヒントにでもなれば幸いです．



［スライド１５］

最後の節は「夢」です．昨年（2022 年），葛飾北斎の展覧会に行き，北斎の集大成の一つの形ともいえる，彼の 70 代の生命力あふれる作品「神奈川沖浪裏」や最晩年である 88 歳の悟り澄みきったような作品「流水に鴨図」を見る機会を得ました．65 歳になった現在，私もこのような数学の作品を創りたいという気持ちを紹介し，講演会の締めとしました．

参考文献（拙著の量子ウォークの関連本は，その表紙の色による呼称があるので，それを付しました）

[1] [黄本] 今野紀雄『量子ウォークの数理』産業図書 (2008).

[2] [青本] 今野紀雄『量子ウォーク』森北出版 (2014).

[3] [緑本] 今野紀雄『量子ウォークによる時系列解析』日本評論社 (2020).

[4] [黒本] 今野紀雄『量子探索－量子ウォークが拓く最先端アルゴリズム』近代科学社 (2021).

[5] [赤本] 今野紀雄『量子ウォークからゼータ対応へ－ゼータ関数を通して眺める数理モデル』日本評論社 (2022).

[6] [白本] 今野紀雄，井手勇介（共編著）『量子ウォークの新展開』培風館 (2019).

[7] N. Konno, An analogue of the Riemann Hypothesis via quantum walks, Quantum Stud.: Math. Found., 9, pp.367–379 (2022).

[8] 町田拓也『図で解る量子ウォーク入門』森北出版 (2015).

[9] 町田拓也『量子ウォーク－基礎と数理』裳華房 (2018).