

量子動力学シミュレーション入門 ～量子ウォークを例にして～*

自然科学研究機構 分子科学研究所
チャップマン大学 量子科学研究所
鹿野 豊

2016年7月30日

概要

動的な物理現象への理解に向けた取り組みは、個々の豊かな物性現象を調べるだけでなく、数学的なトイモデルの性質を活かしたトップダウン的アプローチも試みられている。中でも量子現象の動的な性質は理論的には干渉効果をきちんと議論しなければならず、実験的には量子現象だけを純粹に取り出すことが極めて難しい。本ゼミでは、量子動力学現象を記述するための道具である「量子ウォーク」に関して、その理論的性質と実験による実装方法とその困難さに関して解説を行う。量子ウォークとは名前が示す通り、物理現象を説明する道具として使われているランダムウォークを量子力学の公理系の中で定義しようとした際に自然に定義されるものである。だがしかし、シンプルな定義からでは一見想像できないような多彩なダイナミクスを模写することが出来る。Schrödinger 方程式、Dirac 方程式や Klein-Gordon 方程式をトイモデルから統一的に理解することが出来るという点において、「量子動力学シミュレーション」と呼ぶ。また、近年の実験技術の飛躍的な向上により、数学的なトイモデルとして扱われてきた量子ウォークが中性原子・イオン・光の物理系において実装可能となり、量子効果を巧みに組合わせた実験系を構築することで量子情報科学や多体系量子論の問題へのアプローチも試みられている。

はじめに

本集中ゼミでは、量子ウォークという少しテクニカルな話を中心に解説するが、下記の疑問に対して答えるつもりである。

1. 何故、社会的に量子シミュレーションが必要とされているのか？

*第 61 回物性若手夏の学校の集中ゼミのための原稿である。

2. 物理現象を理解するためのシミュレーションの意義は？
3. 光による量子実験はどこが難しく、何故価値があるのか？

1 何故、量子シミュレーションなのか？

昨今、カナダブリティッシュコロンビア州バーナビーを拠点とする D-Wave Systems という会社が話題となっている。その理由は、量子アニーリングと呼ばれる手法を用いることで組み合わせ最適化問題などの計算機科学の問題に対して高速に解くことが出来るかもしれない可能性を見いだすことが出来たからだ。このもともとのアイディアは東京工業大学の門脇氏、西森氏により 1998 年に提唱され [1]、その後、量子情報科学の文脈では量子断熱計算と位置づけられ、今日まで発展を遂げてきた。この問題が高速に解くことが出来るということは社会的な文脈において様々な応用例がある。例えば、物理学においてもある実験において Signal-to-Noise Ratio を向上させるためにパラメータの最適化などが行われている。日常生活においては、ある場所からある場所に移動したい時、電車の乗り換え案内などを用いているかもしれない。知らなくても最適化問題とは日常的に触れあっている。さて、量子アニーリングの原論文 [1] では横磁場イジング模型というものが用いられている。この手続きにおいて、まずイジング模型のハミルトニアン

$$H = - \sum J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z \quad (1)$$

の基底状態を求めるといふ解きたい問題を表現し直す。そして、これに横磁場項を加えた

$$H = - \sum J_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \Gamma(t) \sum \sigma_i^x \quad (2)$$

を初期に用意し、量子ゆらぎの大きさを表す関数 $\Gamma(t)$ を時間 $t = 0$ で非常に大きい値に設定し、 t が増えるとともに 0 に向けて小さくしていく¹。つまり、イジング模型のハミルトニアンを基底状態を求めるといふ問題に組み合わせ最適化問題を置き換えたことが物理的に実装できるようになった背景とも考えることが出来る。この観点を提唱したのが Richard R. Feynman の「量子シミュレーション」という概念である。量子シミュレーションとは、ある計算機で計算するのが困難な問題に対し、自然界に解かせるというアイディアである。量子アニーリングは横磁場の量子ゆらぎ項を巧みに制御し、あとは実装させた物理系のタイムスケールに従い、自然界に解かせている。この意味で、量子シミュレーションの一つであると言える。

しかし、このような社会的・工学的な問題を解くことだけに「量子シミュレーション」という概念が使われているわけではない。物性物理の基本と言っても良いであろう相図を

¹もちろん、無限にゆっくりであればきちんと解が得られるわけであるが、実際、どれくらいの時間スケールが許されるのかという点が物理的な実装を考える面で重要になってくる。

求めることを人工的に模写した物理系の中で自然に解くという概念である。これにより、新しい相が見つかることがあったり、物質材料科学に応用することが期待されている。現在のスーパーコンピュータを駆使しても解くことが出来ない計算物理領域を開拓するために「量子シミュレーション」の出来る自由自在な物理デバイス（例えば、超伝導回路を用いた人工原子系や原子を光ポテンシャル中にトラップさせる光格子）の開発は進められている。今日の量子情報科学の主要な研究テーマの一つとなっている。物理的な実装にはそれぞれ個々の量子系の性質を知る必要があり、様々な分野の知識を融合させる総合科学の研究として位置づけることも出来る。

これまでは基底状態というある意味静的な物理現象に対して、量子シミュレーションが役に立つという例を社会的観点と物理的な観点両方から述べてきた。しかし、まだ変化させていないものがある。それは個々の物理系固有のタイムスケールである。物理系の動的な性質を調べることは化学反応に代表されるように、相変化を伴ったりすることで物理系の機能解明に繋がる大事なステップである。これには Schrödinger 方程式や Dirac 方程式を解くというやり方を忠実に解くことをすれば良いと思われるかもしれない。しかし、これでは物理系にとって大事な「環境と物理系との相互作用」という概念が抜け落ちてしまう。一つのアプローチとしては非平衡統計力学とあわせた開放量子散逸系のダイナミクスに関する理論²を開拓することである。もう一方で、人工的に模写した物理系における時間発展を物理的に実装することで、環境と物理系との相互作用も変化させることにより従来の計算方法では調べることの出来なかった物理系の機能発現を調べるツールとなりうる。これをもって、筆者は「量子動力学シミュレーション」という概念を提唱した [2]。このためには、

物理系の時間発展を模写できること

が必要条件となる。その条件を満たすものの一つとして離散時間量子ウォークというものを筆者は研究している。

2 離散時間量子ウォーク

以下では離散時間量子ウォークの定義を述べよう。まず名前であるが、わざわざ離散時間と強調しているのには訳があり、連続時間量子ウォークというものも定義されている。これは、空間を離散化した Schrödinger 方程式である。両者に関係性がないわけではないが、変換関係などが一義的に定まるものではないので別物として数学的にも物理的にも

²今年の分子科学若手の会 京都大学 (2016年8月22日(月) - 8月26日(金)) の第二分科会 石崎章仁氏の講義ノートが参考になる。また、教科書 [13] も初等的な内容に感じるかもしれないが、具体例が抱負でかつ化学・生物・生化学など様々な分野に立脚した例題が取りそろえられており、非常に興味深い。

考えられている。しかし、どちらも総称して量子ウォークと呼ぶことが多く、離散時間量子ウォークをコイン付量子ウォークと呼んだり、スピン量子ウォークと呼んだりする場合もある。一方、連続時間量子ウォークはコイン無量子ウォークと呼ばれたりする場合もある。定義もモチベーションも様々であったことが知られており [2, Sec. 1]、様々な拡張が考えられるが、ここでは最もシンプルな1次元の場合に限定して考える [3]。この際、ランダムウォークと対比させて考えることで数理的なモデルとしても幅が広がるであろう。そのため、ランダムウォークと対比しながら考える (図 1 を参照)。

まず、ランダムウォークでは最も単純なモデルではコインとランダムウォーカーのための空間 (1次元格子点) が必要であろう。それに伴い、離散時間量子ウォークでは量子コインと量子ウォーカーの位置を表現するための空間を用意しよう。コインの表裏にならって、量子コインには2準位系の空間を用意し、基底を $|L\rangle = (1, 0)^T$, $|R\rangle = (0, 1)^T$ と用意する。また、量子ウォーカーの空間は位置でラベル付けされた基底 $\{|n\rangle\}$ ($n \in \mathbb{Z}$) を用いて貼られる空間であるとしよう。これで合成系をなすので $\mathcal{H}_p \otimes \mathcal{H}_c$ という空間を考える。次に、コインを振り、その結果によりランダムウォーカーが空間を移動することを表現しよう。閉じた量子系として考えているので、その時間発展はユニタリー演算子 $U_t = WC_t$ で表現される。そして、それぞれのユニタリー演算子 C_t を量子コイン演算子、 W をシフト演算子と呼び、以下のように定義する。

$$\begin{aligned} C_t &:= \sum_n [(a_{n,t}|n, L\rangle + c_{n,t}|n, R\rangle)\langle n, L| + (d_{n,t}|n, R\rangle + b_{n,t}|n, L\rangle)\langle n, R|], \quad (3) \\ &= \sum_n \left[|n\rangle\langle n| \otimes \begin{pmatrix} a_{n,t} & b_{n,t} \\ c_{n,t} & d_{n,t} \end{pmatrix} \right] \\ &= \sum_n \left[|n\rangle\langle n| \otimes \hat{C}_{n,t} \right] \\ W &:= \sum_n (|n-1, L\rangle\langle n, L| + |n+1, R\rangle\langle n, R|). \quad (4) \end{aligned}$$

この際、 $|n, \xi\rangle =: |n\rangle \otimes |\xi\rangle \in \mathcal{H}_p \otimes \mathcal{H}_c$ ($\xi = L, R$) と合成系の量子状態を表現しておく。また、ユニタリー演算子である要請から量子コインのパラメータには $|a_{n,t}|^2 + |c_{n,t}|^2 = 1$, $a_{n,t}\bar{b}_{n,t} + c_{n,t}\bar{d}_{n,t} = 0$, $c_{n,t} = -\Delta_{n,t}\bar{b}_{n,t}$, $d_{n,t} = \Delta_{n,t}\bar{a}_{n,t}$ 。ただし、 $\Delta_{n,t} = a_{n,t}d_{n,t} - b_{n,t}c_{n,t}$ with $|\Delta_{n,t}| = 1$ for any t と要請されることに注意する。また、 t ステップ後、位置 n にいる確率分布の計算するためには

$$\Pr[n; t] = \sum_{\xi \in \{L, R\}} \left| \langle n, \xi | \prod_t U_t | 0, \phi_0 \rangle \right|^2. \quad (5)$$

とする。このため、量子コインのパラメータを変えることは非常に用意であり、量子コイ

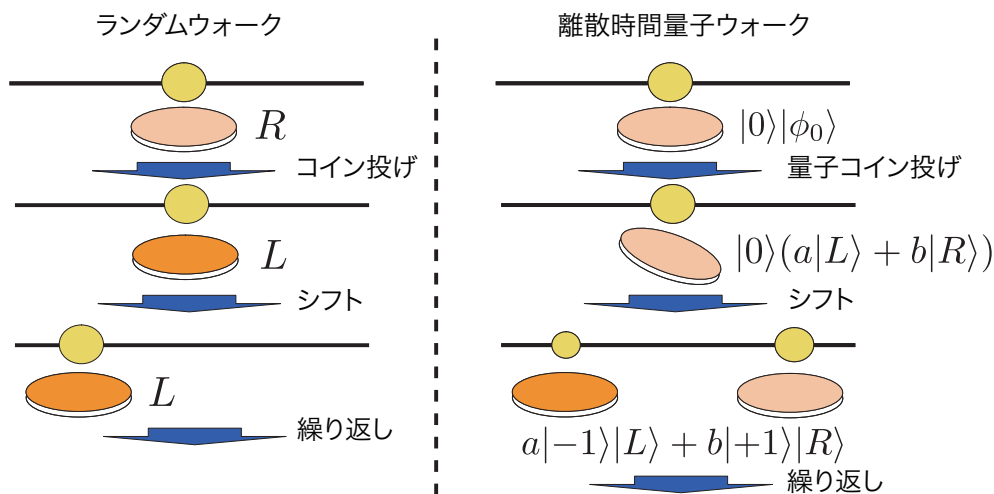


図 1: ランダムウォークと離散時間量子ウォーク

ンを2準位だけでなく拡張することも可能である³。モデルの拡張性の良さが本研究分野の売りであり、また、物理的に(数学的にも?)面白いモデルを提案することが研究者センスを問われており、極めて難しいとも言える。

ここで、数学的な未解決問題に対する注釈をつける。ランダムウォークはコインを振る際に確率が導入されているが、離散時間量子ウォークでは確率分布を計算する際に、コインの空間の自由度を足しあわせてからボルン規則に従い計算しているので、確率的なイベントが起こる箇所が違う。ランダムウォークは既に確率過程として捉えることが出来、そのため、どのような確率空間上の確率過程として捉えれば良いか未だに分かっていない。

具体例として、以下に定義す

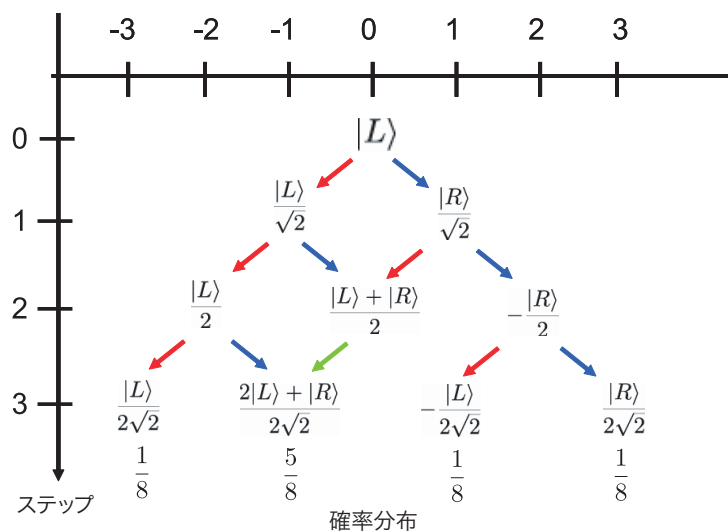


図 2: 3ステップ目までの離散時間量子ウォークダイナミクス

³それに応じて、シフト演算子の定義も変えなくてはならないがパラエティーがたくさんあることは容易に想像できるであろう。

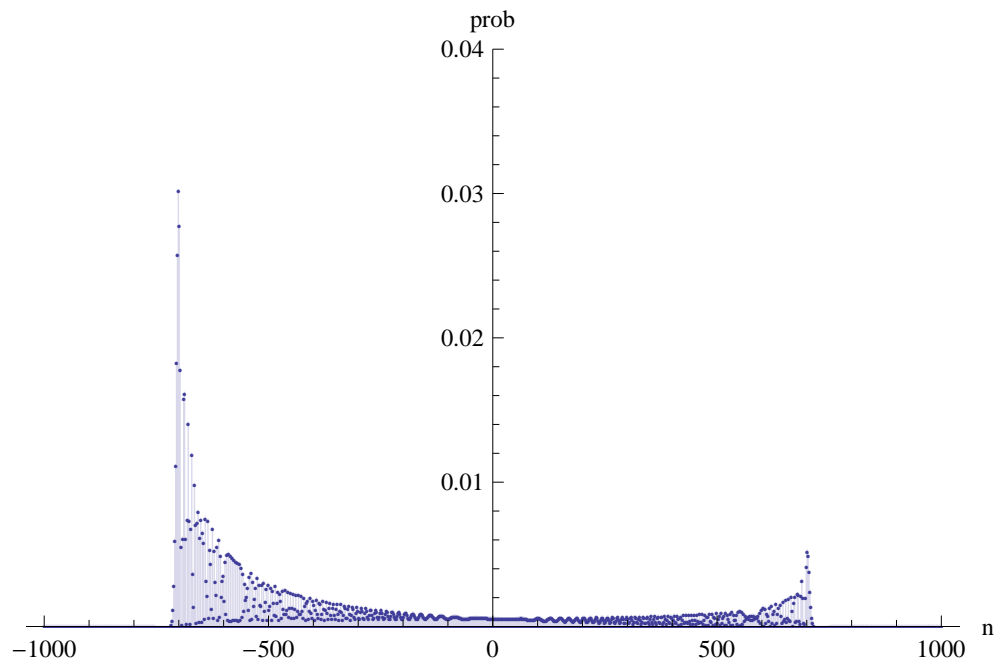


図 3: アダマールコイン (6) の場合の離散時間量子ウォークダイナミクス

るアダマールコインの場合での

$$\hat{C}_{n,t} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (6)$$

初期状態として原点にコイン状態 $|\phi_0\rangle = |L\rangle$ とした場合のダイナミクスは図 2 となる。それを 1000 ステップ続けたダイナミクスを描くと図 3 となる。量子干渉の効果をうまく利用していることが分かるであろう。そして、図 3 のようにランダムウォークの場合である正規分布とは異なる分布となる。

次にどのようなタイムスケールで収束するかを考えてみよう。その際、位置をステップの何乗かで割るという操作をすることにより調べることが出来る。すると、 \sqrt{t} で割っただけでは、1000 ステップ目においても収束する気配がない。しかし、 t で割った場合は何かの分布に収束しようとしていることが分かる。これを数学的に証明したのが今野紀雄氏である [4, 5]。詳細は割愛するが量子コインが時間にも空間にも依存しない場合の 1 次元離散時間量子ウォークの弱収束定理と呼ぶ。ここでランダムウォークで出てくる中心極限定理は弱収束定理の一つであり、正規分布を特徴付ける平均と分散にのみ注目し、確率変数列の収束を調べる。しかし、離散時間量子ウォークでは分布の形が正規分布からは大きく外れてしまっており、全ての次数のモーメントが収束するように定義しなければならない。そのため、モーメント母関数がどのタイムスケールで収束しているかを考えれ

ば良い。その結果、1次元で空間にも時間にも依存しない(量子)コインを用いたランダムウォークの場合はタイムスケール \sqrt{t} で、離散時間量子ウォークの場合はタイムスケール t で確率変数が収束する。

2.1 離散時間量子ウォークは量子力学シミュレーターか？

離散時間量子ウォークは前述の通り、様々なモデルを考えることが出来るが、物理的に意味のあるモデルを提唱することは難しい。そのため、下記では Dirac 方程式とダイナミクスがみなせる離散時間量子ウォークのモデルについて考察する。まず、量子コインとしてパラメータ $\epsilon \in \mathbb{R}$ で特徴付けられたものを以下のように定義する。

$$C(\epsilon) = \begin{pmatrix} \cos \epsilon & -i \sin \epsilon \\ -i \sin \epsilon & \cos \epsilon \end{pmatrix} \quad (7)$$

$\Psi_n(x) \in \mathcal{H}_p \otimes \mathcal{H}_c$ をステップ n 、位置 $x \in \mathbb{R}$ の離散時間量子ウォークのコインを含めた量子状態と定義すると、パラメータ ϵ が極めて小さい時、

$$\begin{aligned} \Psi_n(x) &= Q(\epsilon)\Psi_{n-1}(x - \epsilon) + P(\epsilon)\Psi_{n-1}(x + \epsilon) \\ &= Q(\epsilon) \left(1 - \epsilon \frac{\partial}{\partial x} + O(\epsilon^2) \right) \Psi_{n-1}(x) + P(\epsilon) \left(1 + \epsilon \frac{\partial}{\partial x} + O(\epsilon^2) \right) \Psi_{n-1}(x) \end{aligned} \quad (8)$$

ここで

$$Q(\epsilon) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - i\epsilon \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + O(\epsilon^2) \quad (9)$$

$$P(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - i\epsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + O(\epsilon^2). \quad (10)$$

を用いている。更に、 $t = \epsilon\tau$ とスケール変換を行うと

$$\Psi_\tau(x) \sim e^{-i(\sigma_x + \sigma_z \frac{\partial}{\partial x})t} \Psi_0(x), \quad (11)$$

となり、両辺を t で微分すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi_t(x)}{\partial t} &\sim -i \left(\sigma_x + \sigma_z \frac{\partial}{\partial x} \right) e^{-i(\sigma_x + \sigma_z \frac{\partial}{\partial x})t} \Psi_0(x) \\ &= -i \left(\sigma_x + \sigma_z \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi_t(x). \end{aligned} \quad (12)$$

を得る。これは $1+1$ 次元の Dirac 方程式に他ならない。量子コインがスピノルに対応していることが分かる。この拡張は $2+1$ 次元までは出来るものの、任意の 3 次元格子から $3+1$ 次元の Dirac 方程式に対応する離散時間量子ウォークに対応するものは今のところ分かっていない。

ここでは紙面の都合上この例しか示すことはないが、離散時間量子ウォークから連続時間量子ウォークを模写することも出来ることが知られており、Klein-Gordon 方程式との関係も既に示されている。更には、人工的な電磁場を模写することも出来、重力場の方程式との関係も指摘されている。この意味において、離散時間量子ウォークは量子動力学シミュレーターとして機能を有しているということが分かる。ただ、このような離散時間量子ウォークは物理的に実装可能かどうか問題となる。この点を次節で解説する。

3 偏光を使った量子実験はロバスト？

離散時間量子ウォークのダイナミクスの例である図 2 を見返して欲しい。 $|L\rangle$ と $|R\rangle$ を偏光成分と解釈すると、シフト演算子は偏光ビームスプリッターまたは方解石などの偏光依存で空間的に分離出来る物で表現され、量子コインは波長板で実装される。アダマールコインを実装するには、 22.5° に回転させた半波長板で実装できる。確率分布は空間的に分離されているので、そこにフォトダイオードを置くことで光強度から算出することが可能である。それでは簡単に実装できそうであるが、これが難しい何故だろうか。以下に考察する。

この例では光の干渉効果を離散時間量子ウォークの特徴を産み出す量子干渉と考える。そのため、光の干渉をたくさん作り出さねばならない。これがどれほど難しいかを考察する。図 4 の具体例で考えてみよう。100 fs の光パルスを干渉させるためには、最低でも 2 つの入射パルスが 100 fs 以下の精度で同タイミングに偏光ビームスプリッターに入射しなければならない。そのため、アーム 1 と 2 の長さは $30 \mu\text{m}$ の精度で同じ長さにしなければならない。これはだいたい体内の大きめの細胞の大きさと同じくらいの長さである。しかし、これでは 1 ステッ

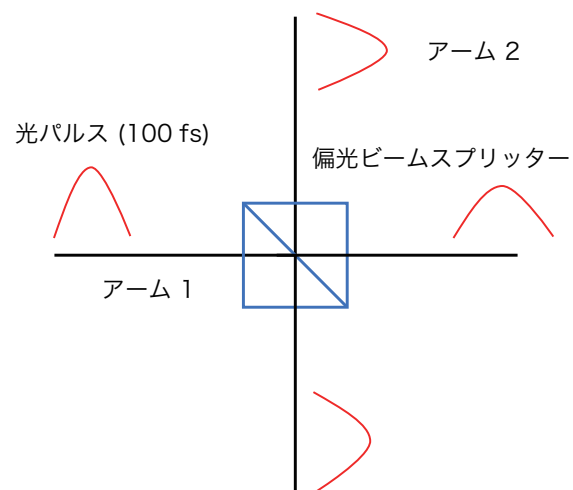


図 4: 量子干渉を引き起こすための光パルス

プも持たない。もし、100ステップを実現させようと思えば、まず、 $\sum_{m=0}^{100} 2^m \simeq 10^{30}$ のアームに対して、そのそれぞれが 300nm 以下の精度で同じ長さにしなければならない。また、 $\sum_{m=0}^{100} m \simeq 10^3$ 個の偏光ビームスプリッターは同じ角度で揃えておかななくてはならない。例えば、5mm 角の偏光ビームスプリッターとアームの長さをそれぞれ 15mm (大抵の光学定盤の 3 ピッチ分) と仮にすると、最低でも 2m の正方形のスペースが必要となる。これが 1000 ステップ実現時には要求精度がもう一桁上がり、更にスペースとしても 20m の正方形スペースが最低でも必要になる。実装させるのがどれくらい難しいことであるか分かってくるであろう。そのため近年、光回路として注目されているのが光導波路技術⁴を用いた設計であるが、温度変化による屈折率の変化が生じ長さが変化してしまうなどの効果を取り込んで計算しなくてはならない。このような方法で実装できるのは 10 ステップもいかない程度が現状であり、精度要求値が極めて高いことを示している。同じことが光量子コンピュータの実装にも当てはまる。ただ、偏光を用いた実装には大いなる利点がある。それは光の輝度温度が極めて高いということである。そのため、外乱からの影響をほぼ受けずにいる。

実際、光の輝度温度を計算してみる。波長 $\lambda = 500 \text{ nm}$ の単一光子を仮定し、エネルギーは $E = hc/\lambda \sim 4 \times 10^{-19} \text{ J}$ となる。これが黒体輻射をしていると仮定すれば、

$$T_{\text{photon}} = \frac{E}{k_B} \sim 4 \times 10^4 \text{ K} \quad (13)$$

となる。これは室温 300 K に比べて 2 桁も大きい。他の量子系 (例えば、スピン系や冷却原子系) は環境の温度が非常に高く、例えば冷凍機で環境自身も低温にするなどの工夫をしなくては孤立量子系としての性質を保つことが出来ない。ただ、光はその点大きく違って来る。対象としている光自身は影響しないが、前述の通り、アライメントする難しさや精度要求値の高さなどが欠点として挙げられる。これらを巧みに組合わせたハイブリッド量子系の研究が現在盛んに行われている。離散時間量子ウォークの実装においても理論提案ではあるもの、ハイブリッド量子系を用いたものが提案されている [6]。ここでは触れなかったが、離散時間量子ウォークの実装に関する研究は、光でも time-bin を用いたもの、光格子を動かすことにより中性原子を用いたもの、イオントラップを用いたものなどが量子情報技術の発展とともに蓄積されている [7]。

4 まとめ

離散時間量子ウォークに関して、その基本的な性質と物理的な実装方法の一部に関して紹介した。本トピックを通じて、様々な量子ダイナミクスを制御した物理的对象から浮き

⁴光ファイバーは光導波路の代表例である。

彫りにさせるために量子シミュレーションの一つとして考えることが出来る量子動力学シミュレーションという概念を紹介した。離散時間量子ウォークの実装は現在、主流としては光を用いたものが多く研究されており、ここでは全く触れていないが多体離散時間量子ウォークというものも既実装されている。また、理論物理的な観点からも研究されており、北川拓也氏らによって導入されたトポロジカル相 [8] や種々の局在化現象がアンダーソン局在 [9] や準周期系 [10] といった物理的側面と関連づけられて研究されている。

本分野はまだまだ発展途上の研究段階にあり、毎年、本分野の研究者が集まって国際会議を開いている (Workshop of Quantum Simulation and Quantum Walk)⁵。数学的な側面を勉強したい際には文献 [11] が良く、包括的なレビューを読みたい場合は文献 [12] が良い。良質なトイモデルを出発点として、様々な数学的な道具を駆使しながら実験に先立つ概念を提示出来ることが本研究トピックの最大の魅力である。

参考文献

- [1] T. Kadowaki and H. Nishimori, *Phys. Rev. E* **58**, 5355 (1998).
- [2] Y. Shikano, *J. Comput. Theor. Nanosci.* **10**, 1558-1570 (2013); arXiv:1307.3384.
- [3] A. Ambainis, E. Bach, A. Nayak, A. Vishwanath, and J. Watrous, in *Proceedings of the 33rd Annual ACM Symposium on Theory of Computing (STOC'01)* (ACM Press, New York, 2001), p. 37.
- [4] N. Konno, *Quantum Inf. Proc.* **1**, 345 (2002).
- [5] N. Konno, *J. Math. Soc. Jpn.* **57**, 1179 (2005).
- [6] A. Ü. C. Hardal, P. Xue, Y. Shikano, Ö. E. Müstecaplıoglu, and B. C. Sanders, *Phys. Rev. A* **88**, 022303 (2013).
- [7] K. Manouchehri and J. Wang, *Physical Implementation of Quantum Walks* (Springer-Verlag, Berlin, 2014).
- [8] T. Kitagawa, *Quant. Inf. Proc.* **11**, 1107 (2012).
- [9] H. Obuse and N. Kawakami, *Phys. Rev. B* **84**, 195139 (2011).
- [10] Y. Shikano and H. Katsura, *Phys. Rev. E* **82**, 031122 (2010); *AIP Conf. Proc.* **1363**, 151 (2011).
- [11] 今野紀雄, *量子ウォーク* (森北出版, 2015).
- [12] S. E. Venegas-Andraca, *Quant. Inf. Proc.* **11**, 1015 (2012).
- [13] K. A. Dill and S Bromberg, *Molecular driving forces: statistical thermodynamics in biology, chemistry, physics, and nanoscience* (Garland Science, London, 2000).

⁵2016年は11月17日-20日にチェコのプラハで開催される。