第３章では有限温度におけるハミルトニアンの推定を研究した．量子コンピュータが外界の擾乱にさらされると，量子状態は本来あるべき状態から変化してしまう．これをデコヒーレンスという．そのためには量子系を外界から遮断してしまうのが最良の戦略である．一方，量子コンピュータとして動作するには，量子系に外界から制御を加えなければならない．この相反する要求をおおむね満たす方法として，系の大部分を外界から隔離し，一部だけを制御，測定することが考えられる．本研究では，そのような例として，３スピン鎖において，ひとつのスピンだけを制御，測定し，他のスピンにはアクセスできないという状況のもとで，系のハミルトニアンを推定する研究を行った．量子計算のための量子系を作成しても必ずしもその系は最初デザインしたとおりのパラメタを持っているとは限らない．そこで量子系の作成後，このようにハミルトニアンの推定を行うことは，正しい制御を行う上で重要な役割を果たす．

本研究では，スピン 1/2 をもつ ^{13}C 原子核３個をもつアラニン分子のスピン力学を実験的に測定し，それと数値計算で得られたスピン力学を比較することにより，ハミルトニアンの推定を行った．緩和や外場の不均一性がない理想化された場合には，実時間領域で得られたスピン力学のデータをフーリエ変換し，周波数領域におけるピークの位置からハミルトニアンが推定されるが，本研究ではより現実的な状況を想定し緩和や不均一性を取り入れた．そのために周波数領域で J_{12}, J_{23} をフィットするのではなく，実時間領域でフィッテングを行った．この研究の注目すべき点は，結合定数 J_{12}, J_{23} が与えられたときのスピン力学データと実験的に得られたスピン力学データの間に「距離」を定義し，その距離を最短にするように J_{12}, J_{23} のフィッティングを行ったことである．また，データを取得する時間幅を調節することにより，最良の結果が得られる時間幅を決めた．またその物理的理由を考察した．3スピン鎖という簡単な系であるが，ここで開発した手法は，やがて実用的な量子コンピュータが実現したときに必須となるものであろう．

以上，提出された論文の研究成果に対し，慎重に審査を行った結果，本研究で得られた知見は学術的にきわめて有意義であり，博士（理学）の学位論文として十分に価値があるものと認めた．

氏　　名	山﨑 知佳（やまさき ちか）
学位の種類	博　士（理学）
学位記番号	理第７１号
学位授与の日付	平成 24 年 3 月 22 日
学位授与の要件	学位規程第５条第１項該当
学位論文題目	Duality for multiple zeta-star values and generalized hypergeometric functions（等号付き多重ゼータ値の双対性と一般超幾何関数について）

論文審査委員	（主　査）	教授	大野　泰生
	（副主査）	教授	長岡　昇勇
	（副主査）	准教授	知念　宏司

論　文　内　容　の　要　旨

本論文で中心的に取り扱われている対象は、多重ゼータ値および等号付き多重ゼータ値とよばれる、多変数化された Riemann ゼータ関数の特殊値として得られる実数値である。

正整数の組 $\mathbf{k}=(k_1,k_2,\ldots,k_n)$ を index と呼び、$k_1+k_2+\cdots+k_n=k$, n, $h=\sharp\{l|k_l\geq 2\}$ をそれぞれ $\mathbf{k}$ の weight, depth, height と呼ぶ。

depth が n の index $\mathbf{k}=(k_1,\cdots,k_n)$ $(k_1\geq 2)$ に対して、多重ゼータ値は

$$\zeta(\mathbf{k})=\zeta(k_1,\cdots,k_n)=\sum_{m_1>\cdots>m_n>0}\frac{1}{m_1^{k_1}\cdots m_n^{k_n}}$$

等号付き多重ゼータ値は

$$\zeta(\mathbf{k})^{\star}=\zeta^{\star}(k_1,\cdots,k_n)=\sum_{m_1\geq\cdots\geq m_n\geq 1}\frac{1}{m_1^{k_1}\cdots m_n^{k_n}}$$

で定義される。古くは Euler により、これらの実数値がいつ Riemann ゼータ関数の特殊値で書けるか、という問題意識の下に研究され、近年では $\mathbf{P}^1-\{0,1,\infty\}$ の基本群の Galois 表現や結び目の不変量、量子物理学など様々な分野との関連から集中的に研究されている実数値族である。

多重ゼータ値と等号付き多重ゼータ値は、互いに他の有理数係数の線形結合で書き表されるので、それぞれが張る $\mathbf{Q}$-代数は一致する。この代数を、multiple zeta algebra と呼ぶ。基本群の Galois 表現の問題や結び目の不変量等との関わりは、主にこの代数が担っており、それゆえにこの分野では現在、multiple zeta algebra の代数構造を詳らかにすることを目的とする研究が、様々な理論や技術を用いて行われている。

他方、量子コンピュータに関連する研究は物理学を中心に数学・化学等の周辺分野に波及してめまぐるしく進展している。その中で、数学的に重要な研究課題における必要かつ計算困難な数値実験を量子コンピュータの実現により如何に効率的に計算できるようになるか解明することが大きな研究テーマの一つとして存在する。

本論文の主要部分である第一部では、一般超幾何関数 ${}_3F_2$ の特殊値の満たす関係式と等号付き多重ゼータ値の双対的性質についての研究成果が論じられている。等号付き多重ゼータ値全体に、上述の weight, depth, height の概念による類別を適用し、各類のゼータ値和に関する母関数を定義し、この母関数の一般超幾何関数を用いた記述を用いて、${}_3F_2$ の特殊値の満たす関係式から等号付き多重ゼータ値の双対的性質に迫っている。第二部では、3 変数の指数多項式の零点算出において、量子アルゴリズムと古典アルゴリズムの構成を行った後、両アルゴリズムの計算時間評価と比較をおこなっている。以下でより詳しく述べる。

まず、第一部で行われている研究は以下のような背景をもつものである。multiple zeta algebra の構造を解明する上で、双対関係式は非常に重要な対称性の情報を与えている。元来、双対関係式は多重ゼータ値特有の性質であると考えられ、等号付き多重ゼータ値には同様の性質は望めないと考えられていた。他方、multiple zeta algebra の構造を解明するためには、類別された多重ゼータ値の和を係数とする母関数を考え関係式族を構成するという、Borwein, Bradley, Broadhurst, Ohno, Zagier 等の研究を起源とする研究手法がある。特に、weight、depth、height を固定した等号付き多重ゼータ値の和を係数とする母関数が、一般超幾何関数 ${}_3F_2$ の 1 での特殊値を用いて表記できることが、Aoki, Kombu, Ohno の研究よって明らかになっている。

多重ゼータ値における双対関係式を述べる。インデックス $\mathbf{k}$ を

$$\mathbf{k}=(a_1+1,\underbrace{1,\cdots,1}_{b_1-1},a_2+1,\underbrace{1,\cdots,1}_{b_2-1},\cdots,a_s+1,\underbrace{1,\cdots,1}_{b_s-1})$$

(ただし $a_1,b_1,\cdots,a_s,b_s\geq 1$) と書き表したとき、それに対応する双対インデックス $\mathbf{k}'$ を

$$\mathbf{k}'=(b_s+1,\underbrace{1,\cdots,1}_{a_s-1},b_{s-1}+1,\underbrace{1,\cdots,1}_{a_{s-1}-1},\cdots,b_1+1,\underbrace{1,\cdots,1}_{a_1-1})$$

で定める。これらのインデックスに対して、次の定理が知られている。

[多重ゼータ値の双対関係式] インデックス $\mathbf{k}$ とその双対インデックス $\mathbf{k}'$ に対して、次が成り立つ。

$$\zeta(\mathbf{k})=\zeta(\mathbf{k}')$$

このような双対的な関係は等号付き多重ゼータ値においては存在しないと思われていた。しかし 2010 年に Kaneko, Ohno によって、等号付き多重ゼータ値の双対的な性質が初めて示唆された。

$$X_0(n+m-1,n,s)-(-1)^{n+m}X_0(n+m-1,m,s)\in\mathbf{Q}[\zeta(2),\zeta(3),\zeta(5),\cdots].$$

ここで $X_0(k,n,s)$ は weight が k、depth が n、height が s を満たす等号付き多重ゼータ値の和である。この予想は height が 1、つまり $s=1$ の場合は Kaneko, Ohno によって証明され、母関数を用いた別証明を学位申請者の Yamazaki が与えた。height が 1 の場合は具体的に次のように表記される。

自然数 $m,n\geq 2$ に対して

$$\zeta^{\star}(n,\underbrace{1,\cdots,1}_{m-1})-(-1)^{n+m}\zeta^{\star}(m,\underbrace{1,\cdots,1}_{n-1})\in\mathbf{Q}[\zeta(2),\zeta(3),\zeta(5),\cdots]$$

が成り立つ。

この主張は height が 1 の等号付き多重ゼータ値の双対的な性質を表している。height が 1 の多重ゼータ値の双対関係式は、

$$\zeta(n+1,\underbrace{1,\cdots,1}_{m-1})=\zeta(m+1,\underbrace{1,\cdots,1}_{n-1})$$

となり、インデックスの組み合わせが似ているが同じではない。多重ゼータ値間と等号付き多重ゼータ値間に類似に成り立つ関係式は今日までに多く知られており、それらが互いに同値である場合も多いが、双対関係式については一般に独立な関係式になっている。

本論文第一部では Kaneko, Ohno の予想について母関数を用いた研究を行い、得られた結果について述べている。多重ゼータ値及び、等号付き多重ゼータ値の母関数を用いた研究は Ohno, Zagier や Aoki, Kombu, Ohno らの研究により、一般超幾何関数ととても強い関係を持つことが明らかになっている。つまり、母関数を用いた研究は、多重ゼータ値の張る Q-代数の構造解明だけでなく、一般超幾何関数の特殊値の研究にも非常に有効である。実際、一般超幾何関数の様々な特殊値の情報が、母関数の研究によって明らかになっている。

課題となる $X_0(k,n,s)$ の母関数

$$\Phi_0^\star(x,y,z)=\sum_{k,n,s} X_0(k,n,s)x^{k-n-s}y^{n-s}z^{2s-2}$$

は、Aoki, Kombu, Ohno の研究により、次の積分表示を持つことが知られている。

$$\begin{aligned}&\Phi_0^\star(x,y,z)\\&=\int_0^1\left\{s^{-\beta}(1-s)^{y-1}\frac{\Gamma(\beta-\alpha)\Gamma(x-\alpha-\beta+1)}{\Gamma(1-\alpha)\Gamma(x-\alpha+1)}F(\alpha,\alpha-x,\alpha-\beta+1;s)\right.\\&\quad\left.+s^{-\alpha}(1-s)^{y-1}\frac{\Gamma(\alpha-\beta)\Gamma(x-\alpha-\beta+1)}{\Gamma(1-\beta)\Gamma(x-\beta+1)}F(\beta,\beta-x,\beta-\alpha+1;s)\right\}ds,\end{aligned}$$

ただし α,β は $x+y=\alpha+\beta$、$xy-z^2=\alpha\beta$ を満たす。さらに $F(\alpha,\beta,\gamma;s)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha)_n(\beta)_n}{(\gamma)_n n!}s^n$ はガウスの超幾何関数とする。

最近、Li によって Kaneko, Ohno の予想の母関数を用いた証明が与えられた。

$$\begin{aligned}&\frac{1}{y}\Phi_0^\star(-x,y,z)-\frac{1}{x}\Phi_0^\star(-y,x,z)\\&\quad=\pi(\cot\pi y-\cot\pi\beta-\cot\pi x-\cot\pi\alpha)\frac{\Gamma(x+\alpha)\Gamma(x+\beta)}{\Gamma(1+x)\Gamma(1+y)}+\frac{x-y}{\alpha\beta xy}.\end{aligned}$$

ただし、$\alpha+\beta=-x+y$ かつ $\alpha\beta=-xy-z^2$ とする。

右辺に現れる関数はいずれもリーマンゼータ値を係数とする展開を持つため、各項の係数はリーマンゼータ値の多項式として表記でき、係数比較により Kaneko, Ohno の主張を得ることになる。証明には一般超幾何関数の接続公式を巧みに用いているものの強靭な計算力によって乗り越えている場面や微妙な極限操作を行う場面が含まれ、双対的性質が発現する直接的理由を解明したあるいは現象の解説的な証明であるとは言い難い。

これに対し、学位申請者は今回新たに一般超幾何関数 ${}_3F_2$ の特殊値の満たす対称的な関係式を示すことにより、Kaneko, Ohno の予想の再証明を与えた。得られた一般超幾何関数の関係式は以下のものである。

一般超幾何関数 ${}_3F_2$ の 1 における特殊値には次の対称的な関係式が成り立つ。

$$\begin{aligned}&\frac{\Gamma(\beta-\alpha)}{\Gamma(1+\beta)\Gamma(1-\alpha)(\alpha+x)}{}_3F_2\left(\begin{matrix}\alpha,-\beta,\alpha+x\\ \alpha-\beta+1,1+\alpha+x\end{matrix};1\right)\\&+\frac{\Gamma(\alpha-\beta)}{\Gamma(1+\alpha)\Gamma(1-\beta)(\beta+x)}{}_3F_2\left(\begin{matrix}\beta,-\alpha,\beta+x\\ \beta-\alpha+1,1+\beta+x\end{matrix};1\right)\\&=\frac{\Gamma(x+\alpha)\Gamma(x+\beta)}{\Gamma(1+x)\Gamma(1+y)},\end{aligned}$$

ただし、

$$\alpha+\beta=-x+y\ ,\ \alpha\beta=-xy-z^2.$$

つまり、「双対的な」関係にある一般超幾何関数を足し合わせると、ガンマ関数で書き表せることがわかった。この対称的な関数等式を用いることで上述の予想の新たな証明が得られるだけでなく、この研究により等号付き多重ゼータ値の双対的な性質が、一般超幾何関数の対称性に起因していることが明らかになった。

以上で述べた第一部が本論文の主要部分であるが、後半の第二部では、量子アルゴリズムと計算時間評価の問題が取り扱われている。W. van Dam と I. Shparlinski は、2 変数指数多項式の零点算出のアルゴリズムについて、古典アルゴリズムと量子アルゴリズムの双方を構成し、計算時間を比較して、量子アルゴリズムが優位であるという研究成果を提出している。これに対し、変数の個数を増やした場合に同様のアルゴリズム、とりわけ量子アルゴリズムが構成可能であるか。また、構成可能であるとした場合、計算時間の評価は 2 変数の場合と同様に量子アルゴリズムが古典アルゴリズムに比して優位であるのか。これらの疑問について研究を行っている。そして 3 変数の場合について、量子アルゴリズムは 2 変数の場合の技術を拡張することにより構成可能であること、古典アルゴリズムに比して量子アルゴリズムは優位であることを結論として得ている。さらにその中で、2 変数の場合に比べて 3 変数の場合の優位度は減少することも指摘しており、おそらく同様の拡張を続けると変数の個数を増すにつれ優位度は単調に減少していくことが示唆されている。

論文審査結果の要旨

Euler は数論における重要な関数であるゼータ関数を、多変数化して考えることを提案した。その後、この多変数化された関数の正整数点での特殊値、すなわち多重ゼータ値が、いかなる実数をとるのか、その実数の張る有理数体上の代数はいかなる構造をもつのか、などの課題について多くの研究者により多数の研究が行われてきた。このテーマが、基本群の Galois 表現や、結び目の不変量、超幾何関数やゲージ理論など、様々な重要テーマとつながりを持つ、あるいはつながりを持つと予想されることから、現在もあまたの分野を専門とする研究者により、様々な道具や技術を持ち込んで研究がなされている。

この流れの中に、多重ゼータ値をその index に付随して決まるいくつかの parameter に基づいて分類し、各類に含まれる多重ゼータ値の総和の母関数を考えるという研究手法がある。遡ればこれは、多重ゼータ値の和公式を精密化するために、Ohno と Zagier が共同研究の中で取り組んだ課題であり、その研究における類別では、この和が Riemann ゼータ値の有理係数多項式で書かれることを結論付けている。その後、この Ohno と Zagier の研究手法は、2008 年の Li の論文によってより細分化された枠組みで取り扱われた。

Ohno と Zagier の研究では、構成された多重ゼータ値の和の母関数が、Gauss の超幾何関数の特殊値によって表記され、このことからこれら件の多重ゼータ値の和がすべて Riemann ゼータ値の多項式として表記される。これは、Euler が持っていたと考えられる問題意識「多重ゼータ値はいつ (Riemann) ゼータ値の多項式として表記できるか」に沿った成果と言える。これに対し、Li は Ohno と Zagier の設けた類をさらに細かく分類するため、一般化された高さの概念を新たに定義し、結果の拡張を試みた。Li の設けた分類での多重ゼータ値の総和の母関数は、Ohno-Zagier のケースと異なり、その各係数が Riemann ゼータ値の多項式で書けることはもはや期待できないものの、母関数そのものは一般超幾何関数の特殊値を用いて表記されることが明らかになった。

これらの研究と呼応して、Aoki と Ohno は等号付き多重ゼータ値において Ohno と Zagier の研究手法の類似を試み、高さ 1 の総和公式を得るとともに、等号付き多重ゼータ値の和公式の再証明も、この手法によって得られることを示した。さらに、Aoki, Kombu, Ohno によりこの研究は進展され、Ohno, Zagier の分類に基づく等号付き多重ゼータ値の和の母関数は超幾何関数 ${}_3F_2$ の特殊値を用いて表記されることが解明された。

本論文の第一部ではまず、一般超幾何関数 ${}_3F_2$ の特殊値の満たす自己対称的な関係式を導くことを行っている。超幾何関数の接続公式と積分表示を用いての巧みな計算を行い、極めて対称性に富んだ ${}_3F_2$ の特殊値の和がガンマ関数で素朴に記述される公式を得ている。この関係式自体が興味深いものであるが、さらにその応用として先に述べた、Aoki, Kombu, Ohno による等号付き多重ゼータ値の和の母関数を ${}_3F_2$ の特殊値によって記述した公式を経由することで、等号付き多重ゼータ値に関する双対性、すなわち Kaneko, Ohno の予想の証明を得ている。この研究により、等号付き多重ゼータ値の双対的性質は ${}_3F_2$ の特殊値の対称的な関係式に起因していることが明確となった。Kaneko, Ohno の予想については半年ほど早く Z. Li によって証明がなされたが、その証明からは読み取れない対称性の由来を解明した点においても申請者の与えた新たな証明の意義は深い。

第二部で行われている、量子アルゴリズムと古典アルゴリズムの計算時間評価の問題は、量子コンピュータの数学的側面とりわけ数論への量子コンピュータの効用を研究対象とする重要な研究課題である。この研究においては、問題となる計算を挙行するにあたりいかにして量子アルゴリズムを組むか、という問題が第一の関門であり、その次の段階として、合理化を進めた結果の量子アルゴリズムが古典アルゴリズムに比較してどこまで計算時間評価を優位にできるかという問題が現れる。W. van Dam, I. Shparlinsk の 2 変数指数多項式の零点算出のアルゴリズムは、古典アルゴリズムに比較して量子アルゴリズムが圧倒的に優位であることを結論としている。しかし、変数を増やした 3 変数指数多項式の場合になると、量子アルゴリズムは同様に構成可能であるものの、計算時間の評価は 2 変数の場合ほどまでは優位でないことを指摘している。これは重要な事実を指摘しており有意義な研究であると言える。すなわち、変数の増加を考えれば最終的には Grover のアルゴリズムなど重要なアルゴリズムを組み込んだ部分の計算時間短縮のみが本質として残り、それ以外の部分は古典アルゴリズムと量子アルゴリズムの間に大差のないものとなっていくことが示唆されている。

まとめると、第一部では、一般超幾何関数 ${}_3F_2$ の特殊値の満たす対称的関係式を接続公式と巧みな計算技術を駆使して導出し、その応用として M. Kaneko, Y. Ohno により示唆されていた等号付き多重ゼータ値の双対的性質を肯定的に解明している。重さ、深さ、高さの 3 つのインデックスを固定した等号付き多重ゼータ値の和と、その双対にあたる和を足し合わせると、リーマンゼータ値の多項式として書き下せることを、母関数を用いた関係式により証明した。等号付き多重ゼータ値の双対的性質が ${}_3F_2$ の特殊値の対称的関係式に起因していることを高度な計算技術を用いて解明したこの研究の意義は大きい。次に、第二部においては、3 変数の指数多項式の零点計算速度について、古典アルゴリズムに比較して量子アルゴリズムの優位性を証明している。W. van Dam, I. Shparlinsk による 2 変数指数多項式の研究を進展させた場合に、量子アルゴリズムの優位性は保たれるもののその度合いは減少することを指摘したことは大変意義がある。

以上の点から、本論文は博士（理学）の学位論文として相応しいものであると判断される。