量子ウォークからランダムウォークへの連続接続

瀬川 悦生
(横浜国立大学)

量子ウォークを紹介するときに, 私もなんとなく便利なのでとりあえず, 「量子ウォークはランダムウォークの量子的拡張モデル」という "枕詞" を使ってきた. このわかったような, わからないような文句について, 初めて聴いた方からは文句が出るように思う. そこで今回はこれに少し向き合ってみたいのでお付き合いください.

対称有向グラフ $G=(X,A)$ 上の量子ウォークの時間発展作用素, $U:\mathbb{C}^A\to\mathbb{C}^A$ は「しりとり」の関係になっているところを移動する歩道 (walk) となるように与えられる, ユニタリ行列である. より正確には任意の有向辺 $a,b\in A$ に対して,

$$\text{``}a\text{ の終点}\neq b\text{ の始点''}\Rightarrow (U)_{b,a}=0$$

となるように定められている. これを 2 つのユニタリ行列の作用素で書き直すと,

$$U=SC$$

となる. ここで, S, C はそれぞれシフト, コイン作用素と呼ばれていて, 任意の $a,b\in A$ に対して,

$$(S)_{a,b}=\begin{cases}1 & : b\text{ は }a\text{ の逆辺}\\ 0 & : \text{それ以外}\end{cases},\ (C)_{a,b}=\begin{cases}(U)_{\bar{a},b} & : a\text{ の終点}=b\text{ の終点}\\ 0 & : \text{それ以外}\end{cases}.$$

特に C は各頂点に刺さっている有向辺で全体の有向辺を分割すると, 各頂点の次数サイズのブロック行列になることに注意. 単位ベクトルで与えられた初期状態 ψ_0, から始めた量子ウォークの時間発展は $\psi_{t+1}=U\psi_t$ となり, 時刻 t で有向辺 a で発見される確率は $\mu_t(a)=|\psi_t(a)|^2$ で与えられる.

これをいつもとはちょっと違った書き方をしてみる. $\rho_t\in\mathbb{C}^{A\times A}$ を $\rho_t=\psi_t\psi_t^*$ で定義し, さらに $\mathcal{L}^{QW}:\mathbb{C}^{A\times A}\to\mathbb{C}^{A\times A}$ を任意の $\nu\in\mathbb{C}^{A\times A}$ に対して, $\mathcal{L}^{QW}\nu=U\nu U^*$ とすると,

$$\rho_{t+1}=\mathcal{L}^{QW}\rho_t$$

となる. すると, 時刻 t で有向辺 a で発見される確率は, 先ほどの非線形な操作を経ることなくそのまま

$$\mu_t(a)=\rho_t(a,a)$$

で与えられる. 実際, 作用素 $\mathcal{L}^{QW}$ は U のユニタリ性により, トレースを保存し, $\mathrm{tr}(\mathcal{L}^{QW}\rho)=\mathrm{tr}(\rho)$ となる.

さて, このような表示にすることで, 実は量子ウォークの時間発展の中に, ランダムウォークが潜んでいることを観てみたい. そのためにまず任意の有向辺集合 A の分割 π: $A=A_1\sqcup\cdots\sqcup A_r$ を考える. 但し $A_i\sqcup A_j=\emptyset$ $(i\neq j)$. 部分集合 A_h に関する射影作用素を Π_h で

定める．このとき, $\mathcal{L}^\pi : \mathbb{C}^{A\times A} \to \mathbb{C}^{A\times A}$ を S と C の間に Π_h を挟み込んで次のように定義する．任意の $\rho \in \mathbb{C}^{A\times A}$ に対して,

$$\mathcal{L}^\pi \rho = \sum_{h\in A/\pi} S\Pi_h C\ \rho\ C^*\Pi_h S.$$

簡単な考察から $\mathcal{L}^\pi$ はトレースを保存する．特に, π として, 自明な最大分割 $\pi_{max} : A \to A$ においては, $\mathcal{L}^{\pi_{max}} = \mathcal{L}^{QW}$ となり, 量子ウォークの時間発展が再現される．一方で, π として, 最小分割 $\pi_{min} : A \to \bigsqcup_{a\in A}\{a\}$ においては, 任意の $a \in A$ に対して, $S\Pi_a = \Pi_{\bar{a}}S$ であるから,

$$\mathcal{L}^{\pi_{min}}\rho = \sum_{a\in A} \Pi_a U\rho U^*\Pi_a.$$

したがって, 任意の $a, b \in A$ に対して,

$$(\mathcal{L}^{\pi_{min}}\rho)(a,b) = \delta_{a,b}\sum_{c\in A} |(U)_{a,c}|^2 \rho_t(c,c)$$

ここで U のユニタリ性から $\sum_{c\in A} |(U)_{a,c}|^2 = 1$ となることに注意すれば, $\{(a,a) : a \in A\}$ において, $\rho_t(a) := \rho_t(a,a)$ とおくと, $\rho_t(a)$ はグラフ上の相関付きランダムウォークそのものを再現していることになる．一方で量子ウォークの時間発展 $\mathcal{L}^{QW}$ は

$$\mathcal{L}^{QW}\rho = \sum_{h,h'\in A/\pi} S\Pi_h C\ \rho\ C^*\Pi_{h'} S$$

となるから,

$$\mathcal{L}^{QW}\rho = \mathcal{L}^\pi\rho + \sum_{h\neq h'} S\Pi_h C\ \rho\ C^*\Pi_{h'} S$$

である．よって, $\mathcal{L}^\pi$ は $h = h'$ の特別なラインとして $\mathcal{L}^{QW}$ に取り込まれていることが見て取れる．このようにして, $\pi = \pi_{min}$ とすれば, 量子ウォークの中に実はランダムウォークの時間発展が隠れていることが観える．つまり, 量子ウォークはランダムウォークの時間発展に上の式の右辺の第 2 項のクロスタームが添加されたという意味で, その拡張モデルなのだ．量子ウォークの私たちの目に映る非直感的に見える挙動は (ランダムウォークとは違って)$h = h'$ のライン以外にも様々な道を巡りに巡って初めて $h = h'$ のラインにたどり着いたときの姿だからである．

そこで, 量子ウォークもランダムウォークも同じ舞台で記述できることがわかったので, これを利用して量子ウォークとランダムウォークを繋ぐ, 次のような時間発展作用素を提案する．$0 \le p \le 1$ に対して,

$$\mathcal{L}_p^\pi := q\mathcal{L}^{QW} + p\mathcal{L}^\pi$$

但し, $q = 1 - p$. これは各時刻独立に, 確率 p で時間発展 $\mathcal{L}^\pi$ を選び, 確率 $1 - p$ で $\mathcal{L}^{QW}$ を選んだときの平均分布を与える．

このようにして量子ウォークとランダムウォークを繋ぐモデルが構成ができたので, 次にその挙動がとても気になる．非自明ですぐに思いつくものとして G として, 1 次元格子上, 量子ウォークとして量子コイン $\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$ で空間一様に駆動する量子ウォークであるので, その結果を紹介して終わりにする．分割 π として, $A =$ “左向き矢印” $\sqcup$ “右向き矢印” を考える．すると, 次のような極限定理が得られる．

Theorem 1 ([1]). 1次元格子において, $X_t^{(p)}$ を μ_t に従う確率変数, Σ_ν を密度関数

$$\nu(s) = \frac{\mathbf{1}_{(\frac{1-q}{1+q}r, \frac{1+q}{1-q}r)}(s)}{\pi\sqrt{(s-\frac{1-q}{1+q}r)(s-\frac{1+q}{1-q}r)}}$$

に従う確率変数とする. 但し, $r = |a|/|b|$ である. すると, $t \to \infty$ で $X_t^{(p)}/\sqrt{t}$ は次のように弱収束する.

$$\frac{X_t^{(p)}}{\sqrt{t}} \sim \mathbb{E}_\nu(N(0, \Sigma_\nu^2))$$

ここで, $\mathbb{E}_\nu$ は ν で平均をとったものである.

パラメータ p はランダムウォークの強さ, q は量子ウォークの強さであることを思い出すと, 上の極限定理で, $q = 0$(ランダムウォーク) のとき, Σ_ν は $s = r$ でのデルタ関数に従い, $X_t^{(1)}/\sqrt{t}$ は相関付きランダムウォークの極限分布に弱収束する. 一方, $q = 1$(量子ウォーク) のとき, Σ_ν のサポートは $(0, \infty)$ となり, 量子ウォークが線形的に拡がることを再現している. グラフの構造, 分割 π への挙動の依存性に関する解析は今後の非常に楽しみな課題の一つである.

References

[1] Saori Yoshino, Honoka Shiratori, Tomoki Yamagami, Ryoichi Horisaki, Etsuo Segawa, Normal variance mixture with arcsine law of an interpolating walk between persistent random walk and quantum walk, Entropy 2025, 27(7), 670; https://doi.org/10.3390/e27070670.