量子ウォークの極限分布の舞台裏

瀬川悦生
(横浜国立大学)

一次元上の空間一様な量子ウォークの極限分布が今野分布 [1] として知られてから約 18 年も経過したようです. この分布について考えてみたいと思います. 今回はその時間発展の表現方法を, いつもと比べて少し回りくどく見える方法で表現してみたいと思います. まず各時刻 n でのある 4 次元の複素ベクトルで与えれられる確率振幅 $\psi_n : \mathbb{Z}^2 \to (\mathbb{C}^4)^{\mathbb{Z}}$ が, 次の漸化式で進行するものとします.

$$\begin{aligned}\psi_{n+1}(x,y) = (Q\otimes\bar{Q})\psi_n(x-1,y-1) + (P\otimes\bar{P})\psi_n(x+1,y+1) \\ + (P\otimes\bar{Q})\psi_n(x+1,y-1) + (Q\otimes\bar{P})\psi_n(x-1,y+1) \quad (1)\end{aligned}$$

ここで, $P, Q \in M_2(\mathbb{C})$ (2 次元の行列) は $P+Q$ がユニタリ行列で, $PP^* + QQ^* = I_2$(単位行列) などを満たします. 一次元格子の量子ウォークを語るはずが何故か二次元格子の話を最初にお見せしてしまいましたが, 実はここから次のようにすると一次元量子ウォークの確率分布 $\mu_n(x)$ を与えることができます. $\tilde{\psi}_n(x,y)$ を 4 次元のベクトルから 2 次元の行列へのある適切な同型表現とすると,

$$\mu_n(x) = \mathrm{tr}[\tilde{\psi}_n(x,x)]$$

で表されます. つまり, 一次元の量子ウォーカーの "確率分布" は, ちょうど, トレースがあるのはちょっと目をつぶれば, 大体「斜め 45 度回転させた $\mathbb{Z}^2$ 格子上の量子ウォークの $x=y$ のところの "確率振幅" そのもの」とも言えるし, 「1 次元格子上の 2 体の独立な量子ウォーカーがちょうど衝突したときの "確率振幅" そのもの」とも解釈することができるのです. 時刻 n で一次元上の量子ウォーカーが存在する場所は $-n$ から n にいるわけですが, $F_n(s)$ を量子ウォーカーが場所 $-n$ から ns の場所の間, つまり一番左端から見て大体全体の $10s$ 割のところに見つかる確率 (つまり $F_n(s) = \sum_{x\le ns}\mu_n(x)$) とすると, 例のあの極限定理 [1] は, 適切な初期状態を持ってくれば本質的には

$$\lim_{n\to\infty} F_n(s) = F_*(s) = \int_{-\infty}^{s} \frac{\sqrt{1-r^2}}{\pi(1-u^2)\sqrt{r^2-u^2}}\mathbf{1}_{[-r,r]}(u)du$$

であるということになります. ここで $0<r<1$ は P, Q で定まる定数です. このようにして一次元上の量子ウォークの極限分布は, 背後では 1 つ上の次元で蠢いているもの中から $x=y$ という全体から見て極めて特殊な場所の確率振幅そのものだけを摘まみだし下の次元に落とし込むことではじめて達成されているということが見てとれると思います.

その一方で開放系量子ウォークというものがあります [2]. ここで扱うモデルとして先ほどの P と Q を使って, 各時刻における密度行列 $\rho_n \in (M_2(\mathbb{C}))^{\mathbb{Z}}$ が次のように時間発展します.

$$\rho_{n+1}(x) = Q\rho_n(x-1)Q^* + P\rho_n(x+1)P^* \quad (2)$$

$PP^* + QQ^* = I$ という性質から, トレースが各ステップで保存されるため, やはりこちらも各時刻で確率分布が与えられます. それでは先ほどの量子ウォークと比べてどのような極限分布を持つかというと, $G_n(s)$ を時刻 n において場所 $-n$ から, 今度は先ほどのスケーリングとは異なる $\sqrt{n}s$ の場所の間に見つかる確率とすると, 次のようになります [2].

$$\lim_{n\to\infty} G_n(s) = G_*(s) = \int_{-\infty}^{s} \frac{e^{-u^2/(2\sigma^2)}}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} du$$

ここで σ は P, Q で定まる定数です. スケーリングが拡散的で, 極限分布の形は正規分布になり, 実は一つ前の時刻での行先に依存して現在の行先の確率が決まるある相関付きランダムウォークいうものと同じになります. これと先ほどの量子ウォークとの対応を見るために, この時間発展を次のように書き直すことができます.

$$\phi_n(x) = (Q \otimes \bar{Q})\phi_n(x-1) + (P \otimes \bar{P})\phi_n(x+1) \tag{3}$$

つまり, 量子ウォーク系の時間発展 (1) と開放系量子ウォーク系の時間発展 (3) を比べることによって, ランダムウォークの分布が, (1) 式の量子ウォーク系の時間発展そのものを $x = y$ のみに制限することで, 得られることがわかります.

この全くことなる挙動を示す二者をどうにか連続化できないしょうか？最後に, この研究の進捗状況の一部を未だ途中段階で恐縮ですが, 報告したいと思います. 先ほどの考察から, ドメインを $D_M := \{(x,y) \in \mathbb{Z}^2 \mid |x-y| \leq M\}$ に制限したときの, 時間発展 (1) を考えてみます. すると, 簡単な考察から $M = 0$ のときの開放系量子ウォーク (≒ランダムウォーク≒背後の蠢きを最大限に削ったもの) から始まって, M を大きくしていくにしたがって, $M = \infty$ のときのオリジナルの一次元上の量子ウォーク (≒背後の蠢きが最大限に活かされたもの) の確率分布に近づくことが容易に想像できるかと思います. 実際, $M = 0$ のランダムウォークから一たびはみ出して, $M = 1$ になると拡散的に拡がる (時刻 n に対して $\sqrt{n}$ のオーダーで拡がる) ものが原点の周りに 1 つと, 線形的に拡がる (時刻 n に対して n のオーダーで拡がる) モードが両端に 2 つ早々に現れることがある程度数学的に証明できます. そして M が大きくなるにしたがって, この線形的に拡がるモードがいくつも増えていき, 最終的にこれらの結合で量子ウォークの分布を作り出していることを示唆する数値計算が得られています. また, $M \geq 3$ では現状, 解析は難しいのですが, これらの幾つかが今野分布の両端 $\pm r$ での無限大に跳ね上がりを与えるエアリー関数 [3] で書き表されると予想しています. そしてタイトルにある量子ウォークの極限分布の舞台裏をより詳細に考察することがオフシェル科学へ通じるのではないかと考えています. さらにはドレスト光子の構造の "何者かを拾い上げている" と考えられている量子ウォークとはやはり何者なのかという問題の答えの一つになることを期待しています.

References

[1] N. Konno, Quantum Inf. Process., **1** (2002) pp.345-354, J. Math. Soc. Japan **57** (2005) pp.1179-1195.

[2] S. Attal, F. Petruccione, C. Sabot, I. Sinayskiy, Journal of Statistical Physics **147** (2012) pp.832-852.

[3] T. Sunada, T. Tatsuya, Journal of Functional Analysis **262** (2012) pp.2608–2645.