数理解析研究所講究録
第2023巻 2017年 86-108

量子ウォークの弱収束定理とスペクトル・散乱理論

信州大学・工学基礎教育部門　鈴木　章斗
Akito Suzuki
Division of Mathematics and Physics, Shinshu University

1 はじめに

この稿では，スペクトル・散乱理論の視点に立って，量子ウォークにおける弱収束定理の概説を試みる．量子ウォークには，大きく分けて，連続時間のものと離散時間のものの2種類がある．連続時間の場合は，グラフ上のラプラシアンをハミルトニアンにもつ量子力学系に他ならず，離散シュレディンガー作用素の研究の射程に入る [6]．離散時間の場合は，時間発展がハミルトニアンから定まらないので，それ特有の扱いが必要になる．この稿では，離散時間量子ウォークに焦点を絞り，単にそれを量子ウォークという．

量子ウォークの起源については諸説あるが，古くは 1960 年代の Feynman と Hibbs による経路積分の教科書 [10] にその原型がみらる．80 年代には，Gudder の著書 [15] の中で，Dirac 方程式の離散版として登場する．その後，2000 年に前後して，量子アルゴリズムへの応用 [14, 1, 32] の道が開かれると，量子ウォークの研究はいよいよ盛んになる．2002 年，今野 [20] が量子ウォークに対する弱収束定理をはじめて証明すると，多くの数学者が研究に加わるようになる．量子ウォークの理論やアルゴリズムへの応用に関する比較的最近までの結果については，[22, 27, 33] などが参考になる．量子ウォークが実験室レベルで実現できていることは，特筆すべき点である．しかも，さまざまな実現方法があり，それらをまとめたものが，既に成書として出版されている [24].

以下，本稿のテーマである弱収束定理を少し詳しくみていこう．量子ウォーカーの時間発展は，状態のヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素 U を用いて表される．量子ウォーカーの初期状態を $\Psi_0 \in \mathcal{H}$ とするとき，時刻 t における量子ウォーカーの位置 X_t の分布は

$$P(X_t = x) = \|\Psi_t(x)\|^2_{\mathbb{C}^2}, \quad x \in \mathbb{Z} \tag{1.1}$$

で与えられる．ここで，$\Psi_t := U^t\Psi_0$ は時刻 t における量子ウォーカーの状態を表す．量子ウォークの弱収束定理は，X_t/t の分布の $t \to \infty$ における弱収束をいうものである．言い換えれば，X_t/t が法則収束するような確率変数 V を見つけることで，特性関数の言葉

でいえば

$$\lim_{t\to\infty}\mathbb{E}(e^{i\xi X_t/t})=\mathbb{E}(e^{i\xi V}),\quad \xi\in\mathbb{R}$$

となる．これが，ランダムウォークにおける de Moivre-Laplace の定理，または中心極限定理の量子版とみなせることを 2 節で説明する．

今野が最初に示した弱収束定理 [20, 21] では，空間一様なコインをもつ 1 次元量子ウォークを考え，量子ウォーカーは初期時刻で原点にのみ存在すると仮定された．証明は，組合せ論的手法を用いて行われた．この場合は，状態のヒルベルト空間は $\mathcal{H}=\ell^2(\mathbb{Z};\mathbb{C}^2)$ で与えられ，時間発展のユニタリ作用素は

$$U=SC$$

と表せる．ここで，S はシフト作用素，C はコイン作用素と呼ばれるユニタリ作用素である．一般に，コイン作用素は，ユニタリ行列値の関数 $\mathbb{Z}\ni x\mapsto C(x)\in U(2)$ による掛け算作用素である．空間一様なコインとは，あるユニタリ行列 $C_0\in U(2)$ が存在して

$$C(x)\equiv C_0,\quad x\in\mathbb{Z}$$

となるものをいう．この場合は，$U=SC_0$ となる．空間一様なコインをもつと，U は並進対称性をもつ．従って，U はフーリエ表示でき，そのスペクトルは（一部の例外をのぞき）純粋に絶対連続となることが示せる．一方，(1.1) より，X_t/t の特性関数が，位置作用素 $\hat{x}$ のハイゼンベルグ作用素 $\hat{x}(t)=U^{-t}\hat{x}U^t$ を用いて

$$\mathbb{E}(e^{it\xi X_t/t})=\langle\Psi_0,e^{i\xi\hat{x}(t)/t}\Psi_0\rangle,\quad \xi\in\mathbb{R}$$

と表せる．Grimmett，Janson，Scudo ら [12] は，$e^{i\xi\hat{x}(t)/t}$ の $t\to\infty$ の極限で得られるユニタリ群の生成子 $\hat{v}$ の分布を，フーリエ表示で求めた．$\hat{v}$ は速度作用素とか漸近速度作用素と呼ばれる．このとき，X_t/t の弱極限分布は，漸近速度 $\hat{v}$ のスペクトル測度をもちいて，$\|E_{\hat{v}}(\cdot)\Psi_0\|^2$ と表せる．彼らが用いた手法は，GJS 法と呼ばれ，今野の定理の証明の簡略化に貢献した．また，今野の定理 [20, 21] における初期状態に関する制限も除かれた．GJS 法については，本稿でも重要な地位を占めるので，3 節でやや詳しく触れる．GJS 法の肝は，“時間スケールされた位置作用素 $\hat{x}(t)/t$ は，$t\to\infty$ のとき，フーリエ変換によって，漸近速度 $\hat{v}$ に対角化される” ということである．

コインが空間に依存する場合は，並進対称性が失われるので，GJS 法はうまく機能しない．原点でのみでコインが異なる one defect モデルや，原点を境に右と左でコインが異なる 2 相系の量子ウォークでは，母関数法を用いた弱収束定理の証明法が開発されている

[23, 7, 8]．より一般の空間依存があるコインに対しては，スペクトル・散乱理論の考え方が有効である [31]．そのために，あるユニタリ行列 $C_\infty \in U(2)$ が存在して

$$\lim_{x\to\infty} C(x) = C_\infty, \quad x \in \mathbb{Z} \tag{1.2}$$

となる場合を考える．先に紹介した one defect モデルや，有限の点でのみコインが異なる量子ウォークは，当然この範疇に入る．量子ウォークにおけるスペクトル・散乱理論の有効性を概説するのが，本稿の主目的である．

本稿ではさらに，(1.2) の収束のオーダーが $|x|^{-1}$ より速いと仮定する．すなわち，正の定数 c_1，$\epsilon > 0$ が存在して

$$\|C(x) - C_\infty\| \le c_1|x|^{-1-\epsilon}, \quad x \in \mathbb{Z}\setminus\{0\} \tag{1.3}$$

が成り立つとする．このとき，Asch, Bourget, Joye らによるユニタリ作用素版の Mourre の定理 [2, Proposition 4.1] が適用できて，U は特異連続スペクトルをもたないことが示される．従って，

$$e^{i\xi\hat{x}(t)/t} = e^{i\xi\hat{x}(t)/t}\Pi_{\mathrm{p}}(U) + e^{i\xi\hat{x}(t)/t}\Pi_{\mathrm{ac}}(U)$$

と分解して極限を考えればよい．ここで，$\Pi_{\mathrm{p}}(U)$ は，U のすべての固有空間の直和への射影で，$\Pi_{\mathrm{ac}}(U)$ は，U の絶対連続部分空間 $\mathcal{H}_{\mathrm{ac}}(U)$ への射影である．

量子ウォークの弱収束定理がその古典版である中心極限定理と違うのは，線形的広がりと局在化といわれるの 2 つの性質が表れる点にある．弱収束定理により，X_t/t が V に法則収束することがいえると，$t\to\infty$ で，形式的に

$$X_t \sim tV$$

と表せる．このことを，線形的広がりという．定義によって，V の分布は，$t\to\infty$ における量子ウォーカーの速度分布と考えるのが自然である．従って，量子ウォークの弱収束定理は，量子ウォークの時間漸近的な速度分布の存在定理といえる．一方，局在化とは，V の分布が原点に台をもつ Dirac 測度をもつことをいう．すなわち，

$$P(V=0) > 0$$

である．つまり，“$t\to\infty$ では，速度ゼロになる確率 $P(V=0)$ は，ゼロでない”．

線形的広がりには，絶対連続部分 $e^{i\xi\hat{x}(t)/t}\Pi_{\mathrm{ac}}(U)$ が寄与する．条件 (1.3) の下では，加藤-Rosenblum の定理 [28, Theorem XI.8] の離散版 [18, 19, 31] を考えると，ユニタリ作用素 $U = SC$ と $U_\infty = SC_\infty$ に対する波動作用素

$$\text{s-}\lim_{t\to\infty} U^{-t}U_\infty^t\Pi_{\mathrm{ac}}(U_\infty), \quad \text{s-}\lim_{t\to\infty} U_\infty^{-t}U^t\Pi_{\mathrm{ac}}(U) \tag{1.4}$$

が存在する．波動作用素に対する一般論によって，(1.4) の最初の極限を W_+ とおくと，2 番目の極限は W_+^* に等しい．また，W_+ は $\mathcal{H}_{\mathrm{ac}}(U_\infty)$ から $\mathcal{H}_{\mathrm{ac}}(U)$ へのユニタリ作用素になる．以上のことから，$t \to \infty$ のとき，

$$e^{i\xi\hat{x}(t)/t}\Pi_{\mathrm{ac}}(U) \sim W_+ e^{i\xi\hat{x}_\infty(t)/t} W_+^*$$

が成り立つ．ここで，$\hat{x}_\infty(t)$ は，U_∞ によるハイゼンベルグ作用素 $U_\infty^{-t}\hat{x}U_\infty$ である．U_∞ は並進対称性をもつので，GJS 法に帰着される．U_∞ を時間発展としたときの，漸近速度を $\hat{v}_\infty$ として，$\hat{v} = W_+\hat{v}_\infty W_+^*$ とおくと

$$\text{s-}\lim_{t\to\infty} e^{i\xi\hat{x}(t)/t}\Pi_{\mathrm{ac}}(U) = e^{i\xi\hat{v}}\Pi_{\mathrm{ac}}(U)$$

が成り立つ．波動作用素とフーリエ変換の積で定義される作用素を一般化されたフーリエ変換と呼ぶことがあるが，いま説明した方法で，“$\hat{x}(t)/t$ は，$t \to \infty$ のとき，一般化されたフーリエ変換によって対角化された”といえる．

局在化には，$e^{i\xi\hat{x}(t)/t}\Pi_{\mathrm{p}}(U)$ が寄与する．実際，

$$\text{s-}\lim_{t\to\infty} e^{i\hat{x}(t)/t}\Pi_{\mathrm{p}}(U) = \Pi_{\mathrm{p}}(U)$$

が成り立つ．前段の議論と合わせると，次の定理を得る．

Theorem 1.1. 仮定 (1.3) の下で

$$\text{s-}\lim_{t\to\infty} e^{i\xi\hat{x}(t)/t} = \Pi_{\mathrm{p}}(U) + e^{i\xi\hat{v}}\Pi_{\mathrm{ac}}(U), \quad \xi \in \mathbb{R}$$

が成り立つ．

これを用いると，X_t/t の弱極限分布が得られる．δ_0 は原点における Dirac 測度とし，$E_{\hat{v}}$ を $\hat{v}$ のスペクトル測度とする．

Corollary 1.2. X_t/t の分布は，$t \to \infty$ のとき，確率分布

$$\mu = \|\Pi_{\mathrm{p}}(U)\Psi_0\|^2\delta_0 + \|E_{\hat{v}}(\cdot)\Pi_{\mathrm{ac}}(U)\Psi_0\|^2 \tag{1.5}$$

に弱収束する．

4 節では，仮定 (1.3) の下で，量子ウォークのスペクトル・散乱理論を説明し，Theorem 1.1 を証明する．また，Theorem 1.1 の系として，弱収束定理も証明する．

5 節では，分布のより具体的な形を計算する．Corollary 1.2 により，X_t/t は (1.5) を分布にもつ確率変数 V に法則収束するので

$$P(V = 0) = \|\Pi_{\mathrm{p}}(U)\Psi_0\|^2 \tag{1.6}$$

となる．したがって，局在化が起きるための必要十分条件は，初期状態が U の固有空間とオーバーラップすることである．局在化は既に様々なモデルで示されているが，それらの多くでは，弱極限分布は典型的に，次のようになることが報告されている (詳しくは，[22, Sec. 5.6])：

(1) $P(V=0)$ は，X_t の分布の長時間平均 $\lim_{T\to\infty}\sum_{t=0}^{T-1} P(X_t=x)$ の総和に等しい．

(2) 弱極限分布の絶対連続部分には今野関数が現れる．

5.1 節では，Wiener の定理または RAGE の定理 [28, Theorem XI.114, 115] の離散版 [30, Appendix] によって，(1.6) の表式と (1) とが整合することとみる．5.2 節では，(2) を確かめるために，弱極限分布の絶対連続部分 $\|E_{\hat{v}}(\cdot)\Pi_{\mathrm{ac}}(U)\Psi_0\|^2$ の密度関数の計算を行う．

2 ランダムウォーク vs 量子ウォーク

量子ウォークは，ランダムウォークの量子版といわれることがある．ランダムウォークでは，単位時間当たりに，左に確率 p，右に確率 q で 1 次元格子 $\mathbb{Z}$ 上を移動するランダムウォーカーが，時刻 t で位置 $x\in\mathbb{Z}$ にいる確率 $\nu_t^{(\mathrm{cl})}(x)$ は

$$\nu_{t+1}^{(\mathrm{cl})}(x)=p\nu_t^{(\mathrm{cl})}(x+1)+q\nu_t^{(\mathrm{cl})}(x-1) \tag{2.1}$$

に従う． ここで，p，q は $p+q=1$ を満たす非負実数である．一方で，量子ウォークでは，時刻 t で位置 x にいる確率 $\nu_t(x)$ は，量子ウォーカーの状態によって定まる．1 次元格子上を，やはり左または右に運動する典型的な量子ウォークの場合，状態は，2 乗総和可能な $\mathbb{Z}$ 上の $\mathbb{C}^2$ 値関数の全体のなす状態のヒルベルト空間

$$\mathcal{H}=\ell^2(\mathbb{Z};\mathbb{C}^2)\equiv\left\{\Psi:\mathbb{Z}\to\mathbb{C}^2 \;\middle|\; \sum_{x\in\mathbb{Z}}\|\Psi(x)\|_{\mathbb{C}^2}^2<\infty\right\} \tag{2.2}$$

の正規化したベクトルによって表される．時刻 t での量子ウォーカーの状態が Ψ_t のとき，便宜上，$\Psi_t(x)$ も時刻 t，位置 x における量子ウォーカーの状態ということにする．このとき，状態 $\Psi_t(x)$ の時間発展は

$$\Psi_{t+1}(x)=P\Psi_t(x+1)+Q\Psi_t(x-1) \tag{2.3}$$

と表される．ここで，P，$Q\in M_2(\mathbb{C})$ である．この状態の時間発展 (2.3) をランダムウォークの時間発展 (2.1) の量子力学的拡張とみて，量子ウォークは，ランダムウォーク

の量子版というのである．また，量子ウォーカーが時刻 t で位置 x にいる確率は，

$$\nu_t(x) = \|\Psi_t(x)\|_{\mathbb{C}^2}^2 \tag{2.4}$$

で定義される．任意の t で，ν_t が $\mathbb{Z}$ 上の確率であることを保証するために，

$$(U\Psi)(x) = P\Psi(x+1) + Q\Psi(x-1) \tag{2.5}$$

で定義される $\mathcal{H}$ 上の作用素 U がユニタリであるとする．時刻 $t=0$ における状態（初期状態）を，$\Psi_0 \in \mathcal{H}$ とすれば，(2.3) から

$$\Psi_t = U^t \Psi_0, \quad t \geq 1$$

と表される．この意味で，U を時間発展という．

Remark 2.1 (No-go lemma). ここまでの議論で，状態のヒルベルト空間を $\ell^2(\mathbb{Z};\mathbb{C}^2)$ と取っているが，$\ell^2(\mathbb{Z})$ でもよいのではないかという疑問が生じるかもしれない．Meyer の no-go lemma [25]（Grössing と Zeilinger による結果 [13] も参照）はこの疑問に対する解答を与える．もし，(2.5) で定義される作用素 U が $\ell^2(\mathbb{Z})$ 上のユニタリ作用素だったとすると，no-go lemma によって，U は自明なもの以外は許されない．

Remark 2.2 (カイラリティ). $\Psi_t(x) = \begin{pmatrix} \Psi_{t,1}(x) \\ \Psi_{t,2}(x) \end{pmatrix}$ と表すことにして，添え字 1，2 が量子ウォーカーのもつ内部自由度であると解釈する．この内部自由度をカイラリティということがある．今考えているような 1 次元量子ウォーク場合，例えば，添え字 1，2 を左，右に対応させると，(2.4) の右辺

$$\|\Psi_t(x)\|_{\mathbb{C}^2}^2 = |\Psi_{t,1}(x)|^2 + |\Psi_{t,2}(x)|^2$$

は，時刻 t で位置 x にいる量子ウォーカーが左を向いている確率 $|\Psi_{t,1}(x)|^2$ と右を向いている確率 $|\Psi_{t,2}(x)|^2$ の和と解釈できる．また，(2.3) は，量子ウォーカーが左に進むときは行列 P で，右に進むときは行列 Q で，それぞれカイラリティを変化させながら，確率的に進むことを表すと考えられる．

では，ランダムウォークと量子ウォークの性質にはどんな違いがあるかを考察していこう．そのために，時刻 t におけるランダムウォーカーの位置と量子ウォーカーの位置をそれぞれ，$X_t^{(\mathrm{cl})}$ と X_t で表す．すなわち，$X_t^{(\mathrm{cl})}$ と X_t は，次の分布をもつ確率変数である：

$$\begin{aligned} P(X_t^{(\mathrm{cl})} = x) &= \nu_t^{(\mathrm{cl})}(x), \quad x \in \mathbb{Z}, \\ P(X_t = x) &= \|\Psi_t(x)\|_{\mathbb{C}^2}^2, \quad x \in \mathbb{Z}. \end{aligned} \tag{2.6}$$

まず，ランダムウォークの場合は，$X_t^{(\mathrm{cl})}$ の分布の時間漸近的振る舞いは，de Moivre-Laplace の定理，または中心極限定理によって理解される．簡単のため，$p=q=1/2$ とし，ランダムウォーカーは初期時刻 $t=0$ で原点にいるとする．

Theorem 2.1 (de Moivre-Laplace theorem). 確率変数 $X_t^{(\mathrm{cl})}/\sqrt{t}$ の分布は，$t \to \infty$ のとき，標準正規分布に弱収束する．

一方，量子ウォークの場合は，今野 [20, 21] により，以下の弱収束定理が証明されている．初期状態 $\Psi_0(x)$ を

$$\Psi_0(x) = \begin{cases} \varphi, & x = 0, \\ 0, & x \neq 0 \end{cases}$$

と仮定する．ここで，$\varphi \in \mathbb{C}^2$ は単位ベクトルである．この条件は，初期時刻 $t = 0$ で，量子ウォーカーが原点から出発することに対応する．また，

$$P = \begin{pmatrix} a & b \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ c & d \end{pmatrix} \tag{2.7}$$

とおいて，$C_0 := P + Q \in U(2)$ と仮定する．ここでは，ユニタリ行列 C_0 のことをコインという．この場合，時間発展 U はユニタリになる．(2.7) から定義される時間発展 U を Ambainis 型という．

Remark 2.3. 条件 $C_0 \in U(2)$ と (2.7) は，U がユニタリであるための十分条件のひとつに過ぎないが，このように仮定しても一般性を失わない．なぜなら，1 次元量子ウォークの場合，$(\tilde{U}\Psi)(x) = (\tilde{P}\Psi)(x+1) + (\tilde{Q}\Psi)(x-1)$ で定義される $\tilde{U}$ がユニタリになるような $\tilde{P}$, $\tilde{Q} \in M_2(\mathbb{C})$ が存在すれば，$\tilde{P} + \tilde{Q} \in U(2)$ であり，$\tilde{U}$ は，(2.7) の形の P, Q によって，(2.5) で定義されるユニタリ作用素 U とよい意味でユニタリ同値になるからである．このことは，大野 [26] により，かなり一般的な条件の下で証明されている．

$|a| = 0, 1$ の場合は，自明なものになっていまうので，[22] などを参照してもらいたい．以後，$0 < |a| < 1$ を仮定する．

Theorem 2.2 (今野の弱収束定理 [20, 21]). 確率変数 X_t/t の分布は，$t \to \infty$ のとき，確率分布

$$\mu(dv) = (1 - cv) f_K(v; |a|) dv, \tag{2.8}$$

に弱収束する．ここで，$c = c(a, b, \varphi)$ は定数である．また，f_K は今野関数と呼ばれる次の関数である．

$$f_K(v; r) = \begin{cases} \dfrac{\sqrt{1 - r^2}}{\pi(1 - v^2)\sqrt{r^2 - v^2}}, & v \in (-r, r), \\ 0, & \text{その他}. \end{cases} \tag{2.9}$$

Remark 2.4. $c = c(a, b, \varphi)$ の具体形は，原著論文 [20] などを参照せよ．

Theorem 2.2 の証明は次節で行う．オリジナルの証明は，[21] をみてもらうことにして，本稿では以降で用いる GJS 法によるものを紹介する．

Theorem 2.1 と Theorem 2.2 を比較すると，ランダムウォーカーが $\sqrt{t}$ のオーダーで広がるのに対し，量子ウォーカーは t のオーダーで線形的広がりを示し，両者の違いは鮮明である．また，その分布に注目すれば，前者は正規分布であるから，その密度関数は $e^{v^2}/\sqrt{2\pi}$ であるから，後者の今野関数 ($\pm|a|$ 付近で発散) と比べると大きく異なっている．また，Theorem 2.2 より，(2.8) に従う確率変数 V は，$P(V=0)=0$ を満たすので，この量子ウォークのモデルでは，局在化は起きない．局在化は，U の固有空間と関係があるので，一般に，並進対称性をもつ空間一様なコインのモデルでは局在化が起きないと考えるかもしれない．しかし，空間一様でも 3 状態以上の量子ウォークを考えると，局在化が起きることがある（最初に発見されたのは，3 状態で [17]．[22, Sec. 5.6, Sec. 5.7] には，多くの実例が列挙されている）．

3 GJS 法

Theorem 2.2 の今野の定理を Grimmett ら [12] による GJS 法に基づいて行う．まず，前節でも取り扱ったモデルを厳密に定義しておこう．状態のヒルベルト空間は，前節同様，(2.2) で定義する．$\Psi \in \mathcal{H}$ の，x における値を $\Psi(x)=\begin{pmatrix}\Psi_1(x)\\ \Psi_2(x)\end{pmatrix}$ と表すと，$\mathcal{H}$ 上のシフト作用素 S は，

$$(S\Psi)(x)=\begin{pmatrix}\Psi_1(x+1)\\ \Psi_2(x-1)\end{pmatrix},\quad x\in\mathbb{Z}$$

で定義される．S がユニタリであることは容易に確かめられる．空間一様なコインを

$$C_0=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix}\in U(2)$$

とおく．このとき，$\mathcal{H}$ 上の時間発展作用素 U を

$$U=SC_0$$

と定義する．C_0 を (2.7) のように分解すると，U の作用が前節の (2.5) に一致することは容易に確かめられる．S と C_0 がともにユニタリなので，その積 U もユニタリである．初期状態 $\Psi_0\in\mathcal{H}$ を $\|\Psi_0\|=1$ となるようにとり，時刻 t における状態を $\Psi_t:=U^t\Psi_0$ とする．このとき，時刻 t における量子ウォーカーの位置 X_t の分布は (2.6) で与えられる．

Lemma 3.1. $P(X_t=x)$ は $\mathbb{Z}$ 上の確率分布である．

Proof. 確率分布であることは，U のユニタリ性によって保証される．実際，$\|\Psi_0\|=1$ なので

$$\sum_{x\in\mathbb{Z}} P(X_t=x)=\sum_{x\in\mathbb{Z}}\|\Psi_t(x)\|^2_{\mathbb{C}^2}=\|\Psi_t\|^2=\|U^t\Psi_0\|^2=1$$

である． □

次に，X_t/t の特性関数を，$\mathcal{H}$ 上の作用素の言葉で翻訳する．$\mathcal{H}$ 上の位置作用素 $\hat{x}$ を

$$(\hat{x}\Psi)(x)=x\Psi(x),\quad x\in\mathbb{Z}$$

と定義し，$\hat{x}$ のハイゼンベルグ作用を

$$\hat{x}(t)=U^{-t}\hat{x}U^t$$

とする．1 点 $x\in\mathbb{Z}$ にのみ，台をもつ $\Psi\in\mathcal{H}$ のなす部分空間への射影を Π_x とする．すなわち，

$$(\Pi_x\Psi)(y)=\begin{cases}\Psi(x), & y=x\\ 0, & \text{その他}\end{cases}$$

である．X_t/t の特性関数は，次のように，初期状態とハイゼンベルグ作用素を用いて表される．

Lemma 3.2. X_t/t の特性関数は

$$\mathbb{E}(e^{i\xi X_t/t})=\langle\Psi_0, e^{i\xi\hat{x}(t)/t}\Psi_0\rangle,\quad \xi\in\mathbb{R}$$

と表せる．

Proof. X_t/t の分布は

$$P(X_t=x)=\|\Psi_t(x)\|^2_{\mathbb{C}^2}=\|\Pi_xU^t\Psi_0\|^2=\langle U^t\Psi_0,\Pi_xU^t\Psi_0\rangle$$

と表せる．X_t/t の特性関数の定義より

$$\mathbb{E}(e^{i\xi X_t/t})=\sum_{x\in\mathbb{Z}}e^{i\xi x/t}P(X_t=x)=\left\langle U^t\Psi_0,\left(\sum_{x\in\mathbb{Z}}e^{i\xi x/t}\Pi_x\right)U^t\Psi_0\right\rangle$$

と表せる．位置作用素は自己共役で，$\hat{x}=\sum_{x\in\mathbb{Z}}x\Pi_x$ とスペクトル分解できるので，ユニタリ共変性から $e^{i\xi\hat{x}(t)/t}=U^{-t}e^{i\xi\hat{x}/t}U^t=U^{-t}\left(\sum_{x\in\mathbb{Z}}e^{i\xi x/t}\Pi_x\right)U^t$ となり，補題が証明できた． □

GJS 法の説明に移ろう．Grimmett たちがした最も重要なことは，

$$\lim_{t\to\infty}\left\langle \Psi_0, e^{i\xi\hat{x}(t)/t}\Psi_0\right\rangle = \left\langle \Psi_0, e^{i\xi\hat{v}}\Psi_0\right\rangle, \quad \xi\in\mathbb{R} \tag{3.1}$$

を満たす自己共役作用素 $\hat{v}$ を見つけたことである．$\hat{v}$ は速度作用素とか漸近速度と呼ばれる．漸近速度 $\hat{v}$ のスペクトル測度 $E_{\hat{v}}$ から定まる確率分布 $\|E_{\hat{v}}(\cdot)\Psi_0\|^2$ に従う確率変数を V とおく．このとき，Lemma 3.2 とスペクトル定理より

$$\begin{aligned}\lim_{t\to\infty}\mathbb{E}(e^{i\xi X_t/t}) &= \langle \Psi_0, e^{i\xi\hat{v}}\Psi_0\rangle \\ &= \int_{\sigma(\hat{v})} e^{i\xi v} d\|E_{\hat{v}}(v)\Psi_0\|^2 = \mathbb{E}(e^{i\xi V})\end{aligned}$$

となる．これは，X_t/t が V に法則収束することおよび，X_t/t の弱極限分布は $\|E_{\hat{v}}(\cdot)\Psi_0\|^2$ であることを意味する．要するに，GJS 法による量子ウォークの弱収束定理の証明では，漸近速度 $\hat{v}$ を見つけさえすればよいことになる．

以下では，GJS 法の核心部である，$\hat{v}$ の構成法を説明していく．まず，時間発展 U をフーリエ変換で対角化する．フーリエ空間を $\mathcal{K} = L^2\left([0,2\pi], \frac{dk}{2\pi}\right)$ と定義し，フーリエ変換 $\mathscr{F}:\mathcal{H}\to\mathcal{K}$ を

$$\mathscr{F}\Psi(k) \equiv \hat{\Psi}(k) := \sum_{x\in\mathbb{Z}} e^{-ikx}\Psi(x), \quad k\in[0,2\pi]$$

で定義する．このとき，U のフーリエ変換 $\mathscr{F}U\mathscr{F}^{-1}$ は

$$\hat{U}(k) = \begin{pmatrix} e^{ik} & 0 \\ 0 & e^{-ik}\end{pmatrix} C_0 \in U(2)$$

による $\mathcal{K}$ 上の掛け算作用素になる．$\hat{U}(k)$ の固有値 $\lambda_j(k)$ $(j=1,2)$ に対する固有ベクトルを $|u_j(k)\rangle$ $(j=1,2)$ とおくと

$$\hat{U}(k) = \sum_{j=1}^{2}\lambda_j(k)|u_j(k)\rangle\langle u_j(k)|, \quad k\in[0,2\pi]$$

と対角化される．ファイバー直積分の言葉で書けば

$$\mathscr{F}U\mathscr{F}^{-1} = \int_{[0,2\pi]}^{\oplus}\left(\sum_{j=1}^{2}\lambda_j(k)|u_j(k)\rangle\langle u_j(k)|\right)\frac{dk}{2\pi} \tag{3.2}$$

と表せる．いま，$\hat{v}_j(k) = i\lambda_j'(k)/\lambda_j(k)$ $(j=1,2)$ として，エルミート行列 $\hat{v}(k)\in M_2(\mathbb{C})$ を

$$\hat{v}(k) = \sum_{j=1}^{2} v_j(k)|u_j(k)\rangle\langle u_j(k)|, \quad k\in[0,2\pi]$$

で定義する．

Remark 3.1. $\hat{v}(k)$ のエルミート性は，その表示から，固有値 $\hat{v}_j(k)$ が実数であることによる．いまの場合，$\lambda_j(k)$ はユニタリ行列の固有値なので，$\lambda_j(k) = e^{i\eta_j(k)}$ $(\eta_j(k) \in [0, 2\pi])$ と表せるから，$\hat{v}_j(k) = -\eta_j'(k) \in \mathbb{R}$ となる．

さて，$\hat{v}(k)$ による $\mathcal{K}$ 上の掛け算作用素をフーリエ変換にもつ自己共役作用素を $\hat{v}$ とする．すなわち，

$$\mathscr{F}\hat{v}\mathscr{F}^{-1} = \int_{[0,2\pi]}^{\oplus} \left(\sum_{j=1}^{2} v_j(k)|u_j(k)\rangle\langle u_j(k)| \right) \frac{dk}{2\pi}$$

とする．この $\hat{v}$ が漸近速度になる．実は，(3.1) より強い次の事実が成り立つ．

Lemma 3.3 ([31]). $U = SC_0$ とするとき，

$$\text{s-}\lim_{t\to\infty} e^{i\xi\hat{x}(t)/t} = e^{i\xi\hat{v}}, \quad \xi \in \mathbb{R}$$

となる．

Sketch of the proof. 詳しい証明は，[31] を参照してもらうことにして，アイディアだけ述べる．求めるべき極限は

$$\text{s-}\lim_{t\to\infty} (\hat{x}(t)/t - z)^{-1} = (\hat{v} - z)^{-1}, \quad z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$$

と同値だが，極限議論とレゾルベント公式より，適当な部分空間で

$$\lim_{t\to\infty} \left\| \left(\hat{v} - \frac{\hat{x}(t)}{t} \right) \Psi \right\| = 0$$

をいえば十分である．フーリエ変換すると，固有ベクトルの直交性から

$$\begin{aligned} \left(\mathscr{F} \frac{\hat{x}_0(t)}{t} \Psi \right)(k) &= \hat{U}_0(k)^{-t} \left(\frac{i}{t} \frac{d}{dk} \right) \hat{U}_0(k)^t \hat{\Psi}(k) \\ &= \frac{i}{t} \sum_{j=1}^{2} \lambda_j(k)^{-t} \left(\frac{d}{dk} \lambda_j(k)^t \right) |u_j(k)\rangle\langle u_j(k)|\hat{\Psi}(k) + O(t^{-1}) \end{aligned}$$

のように展開でき，適当に部分空間と固有ベクトルを選べば，主要項以外は k について一様に $O(t^{-1})$ 評価できる．また，$(i/t)\lambda_j(k)^{-t}\left(\frac{d}{dk}\lambda_j(k)^t\right) = v_j(k)$ と計算できるから，主要項は，$\hat{v}(k)\Psi(k)$ に等しい．よって，

$$\left\| \left(\hat{v} - \frac{\hat{x}(t)}{t} \right) \Psi \right\|^2 = \int_0^{2\pi} \frac{dk}{2\pi} \left\| \hat{v}(k)\hat{\Psi}(k) - \left(\mathscr{F} \frac{\hat{x}_0(t)}{t} \Psi \right)(k) \right\|^2 = O(t^{-2})$$

となり，$t \to \infty$ とすれば，結論を得る．　□

後は，弱極限分布 $\|E_{\hat{v}}(\cdot)\Psi_0\|^2$ から，密度関数をもとめれば，Theorem 2.2 の証明が完了する．密度関数の計算は，5.2 節で行う．

4 量子ウォークのスペクトル・散乱理論

前節までは，空間一様なコイン C_0 をもつ量子ウォークを考えた．ここからは，空間依存するコインを考える．そのために，ユニタリ行列の族 $\{C(x)\}_{x\in\mathbb{Z}} \subset U(2)$ をとり，コイン作用素 C を，$C(x)$ による $\mathcal{H}$ 上の掛け算作用素として定義する．すなわち，任意の $\Psi \in \mathcal{H}$ に対して

$$(C\Psi)(x) = C(x)\Psi(x), \quad x \in \mathbb{Z}$$

とする．このとき，

$$U = SC$$

によって，時間発展の作用素を定義する．U を時間発展とする量子ウォークの弱収束定理を，スペクトル・散乱理論によって証明するのが本節の目標である．仮定は，Theorem 1.1 と同じである．

(H) ある $C_\infty \in U(2)$ が存在して

$$\|C(x) - C_\infty\| \le c_1|x|^{-1-\epsilon}, \quad x \in \mathbb{Z}\setminus\{0\} \tag{1.3}$$

となる．ここで，$c_1 > 0$，$\epsilon > 0$ は x に依存しない定数である．

Example 4.1 (one defect model)．$C(x)$ を次のように定める．$C_0, C_\infty \in U(2)$ とするとき，

$$C(x) := \begin{cases} C_0, & x = 0, \\ C_\infty, & \text{その他} \end{cases}$$

とする．明らかに，$\|C(x) - C_\infty\| = 0$ $(x \ne 0)$ となり，(H) を満たす．

Example 4.2 (infinite defects)．次に，無限に defect をもつものを考えよう．C_∞ を Hadamard 行列

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

に等しいとし，

$$C(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \sqrt{1+|x|^{-2-2\epsilon}} & \sqrt{1-|x|^{-2-2\epsilon}} \\ \sqrt{1-|x|^{-2-2\epsilon}} & -\sqrt{1+|x|^{-2-2\epsilon}} \end{pmatrix}, \quad x \ne 0.$$

とおくと，(H) を満たす．

以後，この稿では，常に (H) が仮定されているものとする．このとき，

$$U_\infty = SC_\infty \tag{4.1}$$

とすると，U_∞ は並進対称性をもち，(3.2) のようにファイバー分解可能になる．また，U_∞ に対する位置作用素のハイゼンベルグ作用素

$$\hat{x}_\infty(t) = U_\infty^{-t}\hat{x}U_\infty^t$$

に対しても，漸近速度 $\hat{v}_\infty$ が 3 節同様

$$\mathscr{F}\hat{v}_\infty\mathscr{F}^{-1} = \int_{[0,2\pi]}^{\oplus}\left(\sum_{j=1}^{2} v_j(k)|u_j(k)\rangle\langle u_j(k)|\right)\frac{dk}{2\pi}$$

と定義できる．ここで，記号を節約するため

$$C_\infty = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

と C_∞ の要素も C_0 と同じ記号で表し，$v_j(k) = i\lambda_j(k)/\lambda_j(k)$，$\lambda_j(k)$，$u_j(k)$ も U_0 のときと同じ記号を使った．また，1 節同様，$0 < |a| < 1$ の仮定をおく．これは，$v_j(k)$ が定数にならないための条件で，これにより，$\hat{v}_\infty$ は純粋に絶対連続スペクトルをもつ．（詳しくは，5.2 節をみよ．）Lemma 3.3 より

$$\text{s-}\lim_{t\to\infty} e^{i\xi\hat{x}_\infty(t)/t} = e^{i\xi\hat{v}_\infty} \tag{4.2}$$

となる．

4.1 ユニタリ作用素に対する Mourre の定理

ここでは，Asch, Bourget, Joye らによる特異連続スペクトルの非存在定理 [2, Theorem 3.4, Proposition 4.1] を概観する．彼らのアイディアは，[3, 9, 4] にあるような，ユニタリ作用素の Mourre の定理を応用するものである．ユニタリ作用素 U に対するの Mouure の不等式は

$$E_U(\Theta)U^*[A,U]E_U(\Theta) \geq E_U(\Theta) + K \tag{4.3}$$

である．ここに現れる自己共役作用素 A が U の conjugate operator と呼ばれるものである．また，Θ は複素平面内の単位円周に含まれるボレル集合，E_U は U のスペクトル測度，K はコンパクト作用素である．ここで

$$U^*[A,U] = U^*AU - A$$

は適当な意味の有界拡張である．Mourre の不等式を示せば，Θ における特異連続スペクトルの非存在が一般論より従う．

Asch らは，まず，Mourre の不等式を示すために，(4.1) で定義される U_∞ に対する conjugate operator A 構成した．構成法は，Gérard と Nier[11] が，ファイバー分解された自己共役作用素に対する Mourre の不等式の conjugate operator を構成したのと同様の仕方で，U_∞ の各ファイバーの固有空間でうまく作用を構成する．次に，A が U に対しても conjugate operator になることをいうのだが，U を U_∞ に対する摂動としてみると，条件 (H) のおかげでコントロールできる．

Theorem 4.1. U は特異連続スペクトルをもたない．

詳しい証明は，原論文 [2, Proposition 4.1] を参照してもらいたい．

4.2 散乱理論

この節では，量子ウォークの時間発展 U と U_∞ に対する波動作用素の構成について概観する．まず，仮定 (H) からの重要な帰結は，次の補題である．

Lemma 4.1. $U - U_\infty$ は，トレースクラス作用素である．

Proof. 直接計算より，

$$\begin{aligned}|U-U_\infty| &= ((U-U_\infty)^*(U-U_\infty))^{1/2} = ((C-C_\infty)^*(C-C_\infty))^{1/2}\\ &= \bigoplus_{x\in\mathbb{Z}}((C(x)-C_\infty)^*(C(x)-C_\infty))^{1/2} = \bigoplus_{x\in\mathbb{Z}}|C(x)-C_\infty|\end{aligned}$$

となるので，仮定 (H) より，$\mathrm{Tr}|U-U_\infty| < \infty$ がいえる． □

次の補題は，Kato-Rosenblum の定理の離散時間版もしくはユニタリ版である．証明は，[18, 19, 31] などを参照してほしい．

Lemma 4.2. U_1, U_2 をユニタリ作用素とし，$U_1 - U_2$ がトレ—スクラス作用素とする．このとき，

$$\text{s-}\lim_{t\to\infty} U_1^{-t}U_2^t\Pi_{\mathrm{ac}}(U_2)$$

が存在する．

Lemma 4.1 より，$U-U_\infty$ と $U_\infty - U$ はトレースクラス作用素なので，Lemma 4.2 よ

り，次の２つの極限

$$\text{s-}\lim_{t\to\infty} U^{-t}U_\infty^t \Pi_{\mathrm{ac}}(U_\infty), \quad \text{s-}\lim_{t\to\infty} U_\infty^{-t}U^t\Pi_{\mathrm{ac}}(U).$$

が存在する．よって，次を得る．

Theorem 4.2. $W_+ = \text{s-}\lim_{t\to\infty} U^{-t}U_\infty^t\Pi_{\mathrm{ac}}(U_\infty)$ は，$\mathcal{H}_{\mathrm{ac}}(U_\infty)$ から $\mathcal{H}_{\mathrm{ac}}(U)$ へのユニタリ作用素で，その共役は $W_+^* = \text{s-}\lim_{t\to\infty} U_\infty^{-t}U^t\Pi_{\mathrm{ac}}(U)$ である．

いま，$\hat{v}_\infty$ をこの節の冒頭で定義したものとし，

$$\hat{v} = W_+\hat{v}_\infty W_+^*$$

とおく．この稿の主定理である Theorem 1.1 を示すためには次を示せばよい．

Proposition 4.1.

(1) $\text{s-}\lim_{t\to\infty} e^{i\xi\hat{x}(t)/t}\Pi_{\mathrm{p}}(U) = \Pi_{\mathrm{p}}(U), \quad \xi \in \mathbb{R}.$

(2) $\text{s-}\lim_{t\to\infty} e^{i\xi\hat{x}(t)/t}\Pi_{\mathrm{ac}}(U) = e^{i\xi\hat{v}}\Pi_{\mathrm{ac}}(U), \quad \xi \in \mathbb{R}.$

まず，Propsotion 4.1 を使って，主定理の証明をしてしまおう．

Proof of Theorem 1.1. Theorem 4.1 より，$\Pi_{\mathrm{p}}(U)+\Pi_{\mathrm{ac}}(U) = 1$ である．よって，Proposition 4.1 より

$$\begin{aligned}\text{s-}\lim_{t\to\infty} e^{i\xi\hat{x}(t)/t} &= \text{s-}\lim_{t\to\infty} e^{i\xi\hat{x}(t)/t}\Pi_{\mathrm{p}}(U) + \text{s-}\lim_{t\to\infty} e^{i\xi\hat{x}(t)/t}\Pi_{\mathrm{ac}}(U) \\ &= \Pi_{\mathrm{p}}(U) + e^{i\xi\hat{v}}\Pi_{\mathrm{ac}}(U)\end{aligned}$$

となり，証明が完了する．□

Proposition 4.1 の証明をすれば，主定理は完成する．

Proof of Proposition 4.1. まず，(1) は $\mathcal{H}$ 上の任意のユニタリ作用素で成り立つことを注意しておく．極限議論により，U の有限個の固有ベクトル η_n $(n = 1, \ldots, N)$ の線形結合 $\Psi = \sum_{n=1}^N \alpha_n\eta_n$ について $\lim_{t\to\infty} e^{i\xi\hat{x}(t)/t}\Psi = \Psi$ を示せばよい．実際，λ_n を η_n に対応する固有値とすると

$$\begin{aligned}\|e^{i\xi\hat{x}(t)/t}\Psi - \Psi\| &= \|(e^{i\xi\hat{x}/t} - 1)U^t\Psi\| \\ &= \left\|\sum_{n=1}^N \alpha_n\lambda_n^t(e^{i\xi\hat{x}/t} - 1)\eta_n\right\| \le \sum_{n=1}^N |\alpha_n|\|(e^{i\xi\hat{x}/t} - 1)\eta_n\|\end{aligned}$$

となる．ここで，優収束定理を使えば

$$\lim_{t\to\infty}\|(e^{i\xi\hat{x}/t}-1)\eta_n\|^2=\lim_{t\to\infty}\sum_{x\in\mathbb{Z}}|e^{i\xi x/t}-1|^2\|\eta_n(x)\|^2=0$$

となるから，(1) が証明できた．

(2) を示す．Theorem 4.2 より，$e^{i\xi v}=W_+e^{i\xi v_\infty}W_+^*$ となる．$W_t=U^{-t}U_0^t$ とおくと

$$\begin{aligned}I(t):&=e^{i\xi\hat{x}(t)/t}\Pi_{\mathrm{ac}}(U)-e^{i\xi\hat{v}}\Pi_{\mathrm{ac}}(U)\\&=W_te^{i\xi\hat{x}_\infty(t)/t}(W_t^*-W_+^*)\Pi_{\mathrm{ac}}(U)\\&\quad+W_t\left(e^{i\xi\hat{x}_\infty(t)/t}-e^{i\xi\hat{v}_\infty}\right)W_+^*\Pi_{\mathrm{ac}}(U)\\&\quad+(W_t-W_+)e^{i\xi\hat{v}_\infty}W_+^*\Pi_{\mathrm{ac}}(U)\\&=:I_1(t)+I_2(t)+I_3(t)\end{aligned}$$

と分けられる．Theorem 4.2 と (4.2) より，$\text{s-}\lim_{t\to\infty}I_1(t)=\text{s-}\lim_{t\to\infty}I_2(t)=0$ となる．また，$[U_\infty,e^{i\xi v_\infty}]=\text{s-}\lim_{t\to\infty}U_\infty\left(e^{i\xi\hat{x}_\infty(t)/t}-e^{i\xi\hat{x}_\infty(t+1)/t}\right)=0$ なので，$[\Pi_{\mathrm{ac}}(U_\infty),e^{i\xi v_\infty}]=0$ が成り立つ．$\mathrm{Ran}(W_+^*)=\mathcal{H}_{\mathrm{ac}}(U_\infty)$ なので

$$I(t)=I_3(t)+o(1)=(W_t-W_+)\Pi_{\mathrm{ac}}(U_\infty)e^{i\xi\hat{v}_\infty}W_+^*\Pi_{\mathrm{ac}}(U)+o(1)$$

となるので，Theorem 4.2 より，結論を得る．□

4.3 弱収束定理

この節では，Corollary 1.2 を証明する．空間依存するコインをもつ時間発展 U に対する量子ウォーカーの位置を X_t で表し，確率分布

$$\mu_V=\|\Pi_{\mathrm{p}}(U)\Psi_0\|^2\delta_0+\|E_{\hat{v}}(\cdot)\Pi_{\mathrm{ac}}(U)\Psi_0\|^2. \tag{4.4}$$

に従う確率変数を V とする．μ_V が確率測度であることは，

$$\mu_V(\mathbb{R})=\|\Pi_{\mathrm{p}}(U)\Psi_0\|^2+\|\Pi_{\mathrm{ac}}(U)\Psi_0\|^2$$

と，Theorem 4.1 から確かめられる．Corollary 1.2 は次と同値である．

Corollary 4.3. X_t/t は V に法則収束する．すなわち，

$$\lim_{t\to\infty}\mathbb{E}(e^{i\xi X_t/t})=\mathbb{E}(e^{i\xi V}),\quad \xi\in\mathbb{R}$$

が成り立つ．

Proof. まず，Theorem 4.1 と Theorem 4.2 より

$$\langle\Psi_0,(\Pi_{\mathrm{p}}(U)+e^{i\xi\hat{v}}\Pi_{\mathrm{ac}}(U))\Psi_0\rangle=\|\Pi_{\mathrm{p}}(U)\Psi_0\|^2+\langle\Psi_{\mathrm{ac}}(U)\Psi_0,e^{i\xi\hat{v}}\Pi_{\mathrm{ac}}(U))\Psi_0\rangle$$

である．よって，Theorem 1.1 とスペクトル分解定理から

$$\begin{aligned}\lim_{t\to\infty}\mathbb{E}(e^{i\xi X_t/t})&=\lim_{t\to\infty}\left\langle\Psi_0,e^{i\xi\hat{x}(t)/t}\Psi_0\right\rangle\\&=e^{i\xi 0}\|\Pi_{\mathrm{p}}(U)\Psi_0\|^2+\int e^{i\xi v}d\|E_{\hat{v}}(v)\Pi_{\mathrm{ac}}(U)\Psi_0\|^2\\&=\mathbb{E}(e^{i\xi V})\end{aligned}$$

となり証明が完了する． □

5 弱極限分布

この節では，前節で得られた弱極限分布 μ_V を詳しく調べていく．

5.1 局在化

(4.4) より

$$P(V=0)=\|\Pi_{\mathrm{p}}(U)\Psi_0\|^2$$

が成り立つ．$P(V=0)>0$ のとき，局在化が起きるので，局在化が起きるための必要十分条件は，初期状態が固有空間とオーバーラップをもつことである．ここでは，$P(V=0)$ の別の表示を求めよう．まず，X_t の分布の長時間平均を

$$\bar{\nu}_\infty(x)=\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\sum_{t=0}^{T-1}P(X_t=x)$$

と表す．

Theorem 5.1.

$$P(V=0)=\sum_{x\in\mathbb{Z}}\bar{\nu}_\infty(x).$$

Proof. Wiener の定理または RAGE の定理の離散版 (たとえば，[30]) を考えると

$$\bar{\nu}_\infty(x)=\|(\Pi_{\mathrm{p}}(U)\Psi_0)(x)\|^2$$

となるから，両辺の和をとると結論を得る． □

Remark 5.1 (ユニヴァーサリティ・クラス). Theorem 5.1 は，$P(V=0)$ と長時間平均の総和が等しくなることを意味する．これは，多くのモデルで確認されていた事実 [22, Sec. 5.6] の一般的証明になっている．

Remark 5.2 (局在化). 量子ウォークでは，x に局在化することの定義を

$$\limsup_{t\to\infty} P(X_t = x) > 0 \tag{5.1}$$

とすることがある．グラフ上の量子ウォークやかならずしも弱収束定理が得られていない場合は，有用な定義である．いまの場合，Theorem 4.1 と Theorem[30, Proposition 2.4] から，$P(V=0)>0$ と (5.1) が同値となり，2 つの定義が整合する．

5.2 密度関数

極限分布 μ_V の絶対連続部分 $\|E_{\hat{v}}(\cdot)\Psi_0\|^2$ を計算する．まず，$\hat{v}_\infty$ のスペクトルを計算しよう．$C_\infty \in U(2)$ の一般形は

$$C_\infty = \begin{pmatrix} |a|e^{i\alpha} & b \\ -\bar{b}e^{i\delta} & |a|e^{i(\delta-\alpha)} \end{pmatrix}$$

である．ただし，

$$|a|^2 + |b|^2 = 1, \quad \det C_\infty = e^{i\delta}, \quad (\alpha, \delta \in [0, 2\pi))$$

とした．4 節同様，$0 < |a| < 1$ を仮定する．このとき，$U_\infty = SC_\infty$ のフーリエ変換を行列 $\hat{U}_\infty(k)$ による掛け算作用素だとすると

$$\hat{U}_\infty(k) = \begin{pmatrix} e^{ik} & 0 \\ 0 & e^{-ik} \end{pmatrix} C_\infty = \begin{pmatrix} |a|e^{i(\alpha+k)} & be^{ik} \\ -\bar{b}e^{i(\delta-k)} & |a|e^{i(\delta-\alpha-k)} \end{pmatrix}$$

となり，その固有値は

$$\lambda_\pm(k) = (\tau(k) \pm i\sqrt{1-\tau(k)^2})e^{i\delta/2},$$

となる．ここで，$\tau(k) = |a|\cos(k+\alpha-\delta/2)$ とおいた．そうすると

$$v_\pm(k) := \frac{i\lambda'_\pm(k)}{\lambda_\pm(k)} = \frac{\mp|a|\sin(k+\alpha-\delta/2)}{\sqrt{1-\tau(k)^2}}$$

となる．よって

$$\sigma(\hat{v}_\infty) = \{v_\pm(k) \mid k \in [0, 2\pi)\} = [-|a|, |a|]$$

となる．また，[29, Theorem XIII.86] から，$\hat{v}_\infty$ のスペクトルは純粋に絶対連続である．

次に，$\|E_{\hat{v}_\infty}(\cdot)\Psi_0\|^2$ の密度関数を求める．以後，簡単のため，$\alpha-\delta/2=0$ として

$$v_\pm(k)=\frac{\mp|a|\sin k}{\sqrt{1-|a|^2\cos^2 k}}$$

で計算するが，一般の場合も同様に計算できる．このとき，$v_\pm$ の微分は

$$\frac{dv_\pm}{dk}=\frac{\mp\mathrm{sgn}(\cos k)}{\pi f_K(v_\pm(k);|a|)} \tag{5.2}$$

と計算できる．ここで，f_K は (2.9) で定義される今野関数である．(5.2) より，各 $v\in[0,|a|]$ に対して

$$v=v_-(k)$$

を満たす $k\in[0,\pi/2]$ は一意に定まるので，それを $k(v)$ と表す．

Lemma 5.1. $P_\pm^{\Psi_0}(k)=|\langle\hat{u}_\pm(k),\hat{\Psi}_0(k)\rangle|^2$ とおいて

$$\begin{aligned}w(\pm|v|;\Psi_0)=\frac{1}{2}\Big\{&P_\mp^{\Psi_0}(k(|v|))+P_\mp^{\Psi_0}(\pi-k(|v|))\\&+P_\pm^{\Psi_0}(\pi+k(|v|))+P_\pm^{\Psi_0}(2\pi-k(|v|))\Big\}\end{aligned}$$

とするとき

$$d\|E_{\hat{v}_\infty}(v)\Psi_0\|^2=w(v;\Psi_0)f_K(v;|a|)dv \tag{5.3}$$

と表せる．

Proof. $\hat{v}_\infty$ の定義と (5.2) を用いて，$v=v_\pm(k)$ と変数変換すると

$$\begin{aligned}\langle\Psi_0,e^{i\xi\hat{v}_\infty}\Psi_0\rangle&=\sum_{j=\pm}\int_0^{2\pi}\frac{dk}{2\pi}e^{i\xi v_j(k)}P_j^{\Psi_0}(k)\\&=\int_{[-|a|,|a|]}e^{i\xi v}w(v;\Psi_0)f_K(v;|a|)dv\end{aligned}$$

が任意の $\xi\in\mathbb{R}$ で成り立つ．スペクトル定理から，左辺は $\|E_{\hat{v}_\infty}(\cdot)\Psi_0\|^2$ の特性関数に等しいので結論を得る．

□

以上から，$\|E_{\hat{v}}(\cdot)\Pi_{\mathrm{ac}}(U)\Psi_0\|^2$ の密度関数が求まる．

Theorem 5.2. $\Psi_+ = W_+^* \Psi_0$ とおくと

$$d\|E_{\hat{v}}(v)\Pi_{\mathrm{ac}}(U)\Psi_0\|^2 = w(v;\Psi_+)f_K(v;|a|)dv.$$

となる.

Proof. Theorem 4.2 と，スペクトル測度のユニタリ共変性から

$$\|E_{\hat{v}}(\cdot)\Pi_{\mathrm{ac}}(U)\Psi_0\|^2 = \|W_+E_{\hat{v}_\infty}(\cdot)W_+^*\Pi_{\mathrm{ac}}(U)\Psi_+\|^2 = \|E_{\hat{v}_\infty}(\cdot)\Psi_+\|^2$$

となる．(5.3) で，Ψ_0 に Ψ_+ を代入すれば結論を得る． □

Remark 5.3 (ユニヴァーサリティ・クラス)．Theorem 5.2 より，極限分布の絶対連続部分は，Ψ_+ と $u_\pm(k)$ から定まる関数 $w(v;\Psi_+)$ と今野関数 $f_K(v;|a|)$ の積で表せることが分かった．[22, Sec. 5.6] では，この性質と Remark 5.1 の性質を合わせもつ量子ウォークの全体をユニヴァーサリティ・クラスの 1 つとしている．仮定 (H) を満たす 1 次元量子ウォークは，すべてこのクラスに含まれることになる．

6 おわりに

本稿では，主に 1 次元 2 状態量子ウォークの弱収束定理についての結果を中心に，空間一様なコインと，遠方で極限をもつ空間依存型コインだけを扱った．その他にも，3 状態以上のものや，$x \to \pm\infty$ で極限が異なるコインをもつもの，コインが時間依存するもの，空間や時間に関してランダムなものなど多種多様なモデルが存在し，それぞれについて一定の成果が得られている．また，高次元のものやグラフ上の量子ウォークについても一部では既に弱収束定理が証明されている．これらの結果は，[22, 27, 33] やその参考文献を参照していただきたい．

本稿で扱ったスペクトル・散乱理論を用いたアプローチは，上に述べたようなモデルではまだ応用されていが，有効に機能する場合も多い．たとえば，高次元や他状態でもコインが空間遠方で極限をもち，収束のオーダーが $|x|^{-1-\epsilon}$ $(\epsilon > 0)$ の場合は，ほぼ同様に弱収束定理が証明できる．また，$x \to \pm\infty$ で極限が異なるコインをもつ場合についても，同様の議論が可能である．これについては，別の機会に報告したい．一方で，コインの収束のオーダーが $|x|^{-1}$ の場合や，特異連続スペクトルがあるような場合の弱収束定理については，数学的に厳密な結果はまだないようである．

本稿では，局在化の有無については議論しなかったが，1 次元 2 状態の one defect モデルでは，コインによって局在化の有無を分類した決定的結果 [5] が存在する．また，グラ

フ上の Szegedy ウォークでは，[16] によって，局在化がグラフの構造から特徴づけられている．しかし，そのような一部のモデルを除いては，局在化の有無や判定条件などは，明らかになっていないので，研究の余地が大いに残されている．

Acknowledgements 研究集会で講演した際に，離散時間の波動作用素の構成 (本稿の Lemma 4.2 に当たる部分) について，文献 [18, 19] があることを，中村周氏からご指摘いただきました．筧知之氏には，本稿執筆の遅れにも関わらず，寛容に対応していただきました．両氏に対して，ここに謝意を表します．本研究は JSPS 科研費 26800054 の助成を受けたものです．

参考文献

[1] A. Ambainis, Quantum walks and their algorithmic applications, *International Journal of Quantum Information* **1**, 507 – 518, 2003 (arXiv: quant-ph/0403120v3).

[2] J. Asch, O. Bourget, A. Joye, Spectral stability of unitary network models, *Rev. Math. Phys.* **27**, 1530004, 22pp., 2015.

[3] M. A. Astaburuaga, O. Bourget, V. H. Cortés, C. Fernández, Floquet operators without singular continuous spectrum, *J. Funct. Anal.* **238**, 489 – 517, 2006.

[4] M. A. Astaburuaga, O. Bourget, V. H. Cortés, Commutation relations for unitary operators I, *J. Funct. Anal.* **268**, 2188 – 2230, 2015.

[5] M. J. Cantero, F. A. Grünbaum, L. Moral, L. Velázquez, One-dimensional quantum walks with one defect, *Rev. Math. Phys.* **24**, 52pp., 2012.

[6] A. M. Childs, E. Farhi, S. Gutmann, An example of the difference between quantum and classical random walks, *Qauntum Inf. Process.* **1**, 35 – 43, 2002.

[7] T. Endo, N. Konno, Weak convergence of the Wojcik model, *Yokohama Math. J.* **61**

[8] S. Endo, T. Endo, N. Konno, E. Segawa, M. Takei, Weak limit theorem of a two-phase quantum walk with one defect, *Interdiscip. Inform. Sci.*, 2016.

[9] C. Fernández, S. Richard, R. Tiedra de Aldecoa,

[10] R. P. Feynman, Hibbs, A. R., Quantum Mechanics and Path Integrals, McGraw-Hill, Inc., New York, 34 – 36, 1965.

[11] Gérard, F. Nier, The Mourre theory for analytically fibered operators, *J. Funct.*

Anal. **152**, 202 – 219, 1998.

[12] G. Grimmett, S. Janson, P. Scudo, Weak limits for quantum random walks, *Phys. Rev. E* **69**, 026119, 2004.

[13] G. Grössing, A. Zeilinger, Quantum cellular automata, *Complex Systems* **2**, 197 – 208, 1988.

[14] L. Grover, A fast quantum mechanical algorithm for database search, *Proceeding of the 28th ACM Symposium on Theory of Computing*, 212 – 219, 1996.

[15] S. P. Gudder, Quantum Probability, *Academic Press Inc.*, 1988.

[16] Yu. Higuchi, N. Konno, I. Satoc, E. Segawa, Spectral and asymptotic properties of Grover walks on crystal lattices *J. Funct. Anal.* **267**, 4197 – 4235, 2014.

[17] N. Inui, N. Konno, E. Segawa, One-dimensional three-state quantum walk, *Phys. Rev.* **E 72**, 056112, 2005.

[18] T. Kato, S. T. Kuroda, Theory of simple scattering and eigenfunction expansions, *Functional analysis and related fields* (Proc. Conf. for M. Stone, Univ. Chicago, Chicago, Ill., 1968), 99 – 131, Springer, New York, 1970.

[19] T. Kato, S. T. Kuroda The absract theory of scattering, *Rocky Mountain J. Math.* **1**, 127 – 172, 1971.

[20] N. Konno, Quantum random walks in one dimension, *Quantum Inf. Process.* **1**, 345–354, 2002.

[21] N. Konno, A new type of limit theorems for the one-dimensional quantum random walk, *J. Math. Soc. Japan* **57**, 1179–1195, 2005.

[22] 今野紀雄，量子ウォーク，森北出版，2014.

[23] N. Konno, T. Łuczak, E. Segawa, Limit measureof inhomogeneous discrete-time quantum walks in one dimension, *Quantum Inf. Process.* **12**, 33 – 53, 2013.

[24] K. Manoucheri, J. Wang, Physical implementation of quantum walks, Springer, 2013.

[25] D. Meyer, From quantum cellular automata to quantum lattice gases, *J. Stat. Phys.* **85**, 551 –574, 1996.

[26] H. Ohno, Unitary equivalent classes of one-dimensional quantum walks, arXiv:1603.05778.

[27] R. Portugal, Quantum walks and search algorithms, Springer, 2013.

[28] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics Vol. III*, Academic Press, New York, 1978.

[29] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics Vol. IV*, Academic Press, New York, 1977.

[30] E. Segawa, A. Suzuki, Genrator of an abstract quantum walk, *Quantum Stud.: Math. Found.* **3**, 11 – 30, 2016.

[31] A. Suzuki, Asymptotic velocity of a position-dependent quantum walk, *Quantum Inf. Process.* **15**, 103 – 119, 2016.

[32] M. Szegedy, Quantum speed-up of Markov chain based algorithms, *Proc. 45th IEEE Symposium on Foundations of Coumputer Science* (2004) 32 –41.

[33] S. E. Venegas-Andraca, Quantum walks: a comprehensive review, *Quantum Inf. Process.* **11**, 1015–1106, 2012.