

決定論的拡散と量子酔歩

行木孝夫

北海道大学 大学院理学研究院 数学部門
nami@math.sci.hokudai.ac.jp

1 概要

量子酔歩（量子ウォーク）は通常の酔歩に相当する量子系である。当初は量子ランダムウォークと呼ばれていたものが量子ウォークと呼ばれるようになった。本稿では通常のランダムウォークとの関連を与えるためにあえて量子酔歩と呼んでいる。

量子酔歩の歴史を調べると 2000 年代初頭の Ambainis 等による先駆的な研究を嚆矢とする。筆者は Konno 等と共同で Hadamard walk の初期条件と対称性に関する結果 [2] を得た。Konno [1] による極限定理は通常の酔歩に対する大数の法則と中心極限定理に相当する。大偏差原理に相当する結果は Sunada and Tate [3] によって得られ、レートの評価には Airy 関数が現れる。通常の酔歩とは異なる量子確率論的対象としても重要性は増している。

一方で、通常の酔歩を量子酔歩として与えた例は知られていない。本稿では、量子酔歩によって通常の酔歩を実現する例を挙げ、古典近似に相当する量子酔歩の族を与え、主結果の概要を示す。

2 量子酔歩

例として 1 次元格子上の量子酔歩を考える。1 次元格子上に複素数成分 2 次元ベクトル $v = (v_k)_{k \in \mathbb{Z}}, v_k \in \mathbb{C}^2$ を与える。初期状態 $v^0 = (v_k^0)$ を $v_0^0 = {}^t(\alpha, \beta)$, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, $v_k^0 = {}^t(0, 0)$ ($k \neq 0$) とおく。次のようにユニタリな時間発展を定義する。

U を 2×2 のユニタリ行列とする。 U は $a, b \in \mathbb{C}$, $|a| = |b| = 1$ によって $U = \begin{pmatrix} a & \bar{b} \\ b & -\bar{a} \end{pmatrix}$ または $U = \begin{pmatrix} a & -\bar{b} \\ b & \bar{a} \end{pmatrix}$ と書ける。

U から派生する P, Q を次のように与える。

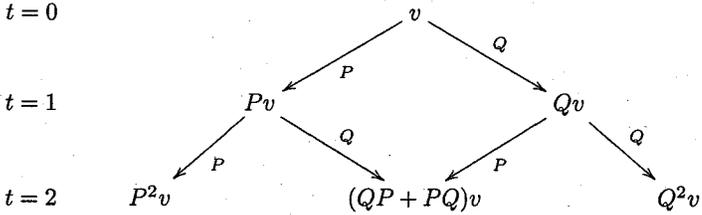
$$P := U \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & 0 \\ b & 0 \end{pmatrix}, Q := U \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

P, Q によって初期状態 v^0 の時間発展を次で定める。

$$v_k^{t+1} := P v_{k+1}^t + Q v_{k-1}^t.$$

各 t について X_t を $Prob(X_t = k) := |v_k^t|^2$ と定める。この X_t を U が駆動する (1次元格子上の内部自由度 2 の) 量子酔歩とよぶ。初期状態と P, Q の構成から $\sum_k |v_k^{t+1}|^2 = \sum_k |v_k^t|^2$ が成立し、時刻 t で確率変数 X_t を定義していることは直ちに確かめられる。

実際、次のように時間発展を記述できる。 P と Q の非可換性から通常の酔歩とは異なる挙動が現れる。



以上の量子酔歩の定義は、通常の酔歩 $p_k^{t+1} = pp_{k+1}^t + (1-p)p_{k-1}^t$ に相当するユニタリなモデルである。この意味で量子酔歩と呼ぶ。一方、定義の中にランダムな項は入っていないことに注意してほしい。量子酔歩はユニタリなダイナミクスによって定義されるものである。

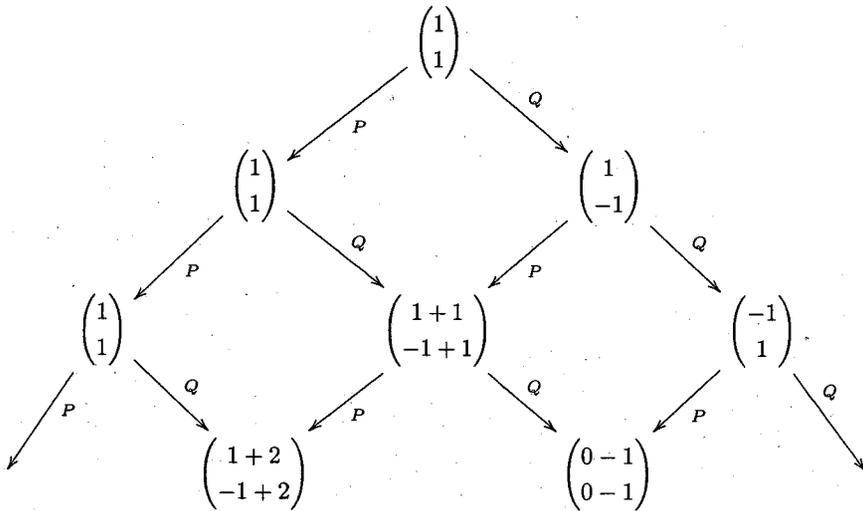
具体的に U を Hadamard 行列として実際の量子酔歩のダイナミクスを観察しよう。

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

とし、 P, Q は

$$P = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, Q = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

と書ける。初期条件は $v_0^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ とする。 P, Q による量子酔歩を 3 ステップ走らせると次図のように時間発展する。



さらに長時間の挙動を観察すると図1のように通常の酔歩とは全く異なっている。二箇所密度関数の発散する点が見られ、その間は振動項が現れる。発散する点の外側は指数関数的に減衰しているように見える。

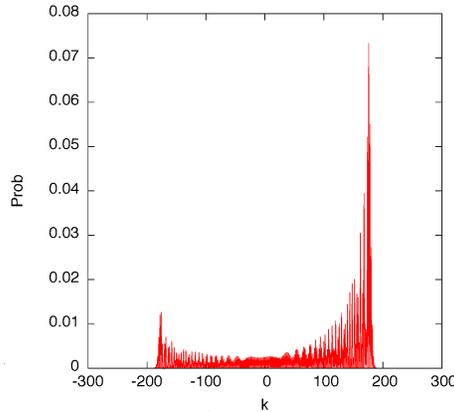


図1: Hadamard 行列による量子酔歩を初期条件 $t(1, 1)$ として 256 ステップ走らせた後に観察できる確率密度関数。縦軸は $Prob(X_t = k)$ を表す。

このような量子酔歩の長時間経過した挙動に関しては内部自由度が2の場合について一般のユニタリ行列 U に対する次の形の極限定理が Konno [1] によって得られている。通常の大数の法則、中心極限定理とは異なるスケーリングによる極限定理である。

3 問題と動機

前節で見た通り、量子酔歩とはあるヒルベルト空間上のユニタリなダイナミクスである。そこにランダムな構成要素は存在しない。では、ヒルベルト空間を何らかの相空間の上に定義される関数空間として、相空間上のダイナミクスが量子酔歩を定めることはできるだろうか。同時に、ヒルベルト空間を上のように与えることで、通常の酔歩を実現する量子酔歩を定義できるだろうか。さらに、これらの問題を解決したとして古典近似に相当する量子酔歩の族は存在するだろうか。本稿では、この3つの問題を事例を与えることで肯定的に解決する。

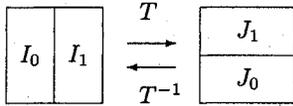
3.1 パイこね変換の誘導する量子酔歩と単純酔歩

まず、カオスの力学系（一様双曲的力学系）の一つであるパイこね変換を定義する。パイこね変換とは I^2 上の可逆変換 T を次のように定義して定まる力学系である。

定義 3.1 (パイこね変換) 次で与える $T: I^2 \rightarrow I^2$ をパイこね変換とよぶ。

$$T(x, y) = \begin{cases} (2x, y/2) & (x \in I_0 = [0, 1/2]) \\ (2x - 1, (y + 1)/2) & (x \in I_1 = [1/2, 1]) \end{cases}$$

パイこね変換が I^2 に作用する様子は I^2 を下図のように分割して $J_0 = TI_0, J_1 = TI_1, J_0 = T^{-1}J_0, J_1 = T^{-1}J_1$ となっている。 x 方向については2倍に拡大的、 y 方向については $1/2$ で縮小的である。



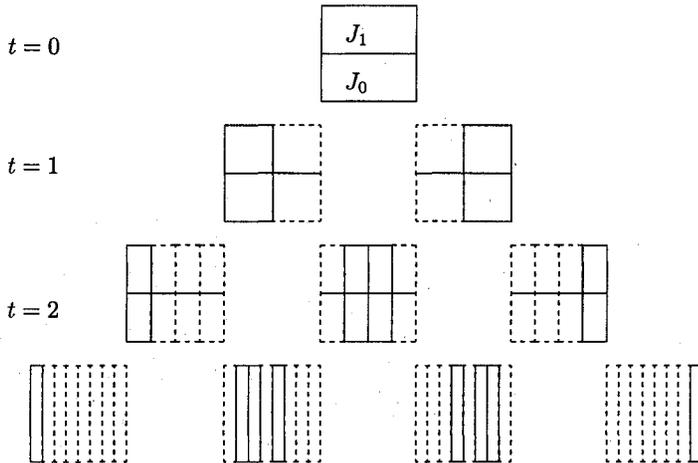
パイこね変換はルベグ測度を保存するから、通常の内積のもとに $L^2(I^2)$ 上のユニタリ変換を $U_T f(x) := f(Tx)$ で定義することができる。従って、量子酔歩の定義に必要な P_T および Q_T を U_T から $P_T f := U_T(1_{J_0} f), Q_T f := U_T(1_{J_1} f)$ として与えられる。

初期条件を $v_0^0 = 1_{I^2}$ および $v_k^0 = 0 (k \neq 0)$ とすることで量子酔歩の基本的な定義に従って次の時間発展を定めることができる。

$$v_k^{t+1} := P_T v_{k+1}^t + Q_T v_{k-1}^t$$

確率変数 X_t は L^2 ノルム $|\cdot|$ により $\text{Prob}(X_t = k) = |v_k^t|^2$ で定義しよう。

U_T の定める量子酔歩によって、 I^2 を分割した長方形 J_0, J_1 は P_T, Q_T の作用によって細分された長方形に変換される。



$\text{Prob}(X_t = k)$ は次の通り具体的に求めることができる。

$$\begin{aligned} |v_k^{t+1}|^2 &= |P_T v_{k+1}^t + Q_T v_{k-1}^t|^2 = |P_T v_{k+1}^t|^2 + |Q_T v_{k-1}^t|^2 \\ &= \frac{1}{2} |v_{k+1}^t|^2 + \frac{1}{2} |v_{k-1}^t|^2. \end{aligned}$$

$\text{Prob}(X_t = k) = \binom{t}{k} 2^{-t}$ であり、これは通常の酔歩から得られる二項分布に他ならない。つまり、通常の酔歩を実現する量子酔歩を与えている。

定理 3.1 U_T の誘導する量子酔歩は通常の酔歩を実現する。

このモデルは決定論的拡散のモデルとして Tasaki の導入した多重パイこね変換 ([5]) と本質的に同じモデルである。

3.2 内部自由度の離散化

パイこね変換の誘導する量子酔歩は内部自由度が I^2 であるが、フーリエ級数を利用することで離散化することができる。 $f_{k,l}$ を $f \in L^2(I^2)$ のフーリエ係数とする。 $f(x) = \sum_{k,l} f_{k,l} e^{2\pi i(kx+ly)}$ から $P_T f$ と $Q_T f$ をフーリエ係数によって記述することができる。

$$\begin{aligned} (P_T f)_{k',l'} &= \int_{I^2} e^{-2\pi i(k'x+l'y)} \mathbf{1}_{T^{-1}J_0} \sum_{k,l} e^{2\pi i(k2x+l y/2)} f_{k,l} dx dy \\ &= \sum_{k,l} f_{k,l} \int_{I_0} e^{-2\pi i(k'x+l'y)} e^{2\pi i(k2x+l y/2)} dx dy \\ &= \sum_{k,l} f_{k,l} \int_{I_0} e^{2\pi i x(2k-k') + y(l/2-l')} dx dy \end{aligned}$$

これらを U_T (あるいは P_T, Q_T) の行列要素 $U_{(k',l'),(k,l)}$ などと呼ぶことにする。

4 古典近似

前節の最後に得られた行列要素を有限列とできれば古典近似に相当する量子酔歩の族を決めたといえるだろう。 U_T の各行列要素の定積分を区分求積の形に変形し、極限をとらずに $2N$ 項までの有限和にとどめておくと内部自由度有限のユニタリ行列を得る ($2N$ 項とした理由は技術的なものである)。つまり、フーリエ係数を有限次元の離散フーリエ変換で近似する。この行列を P_N, Q_N と書くことにする。

$(P_N)_{(k',l'),(k,l)}$ については次の通り。まず k, k' について区分求積の形から

$$\int_0^{1/2} e^{2\pi i(2k-k')x} dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2N} \sum_{x=0}^{N-1} e^{2\pi i(2k-k')x/2N}$$

有限和にとどめることで次の形を得る。

$$\frac{1}{2N} \sum_{x=0}^{N-1} e^{2\pi i(2k-k')x/2N} = \begin{cases} 1/2 & (2k = k') \\ 0 & (2k \neq k', k' : \text{even}) \\ \frac{e^{2\pi i(2k-k')} - 1}{2N(e^{2\pi i(2k-k')/N} - 1)} & (k' : \text{odd}) \end{cases}$$

l, l' についても同様に、 $\int_0^1 e^{2\pi i y(l'-l/2)} dy = 2 \int_0^{1/2} e^{2\pi i(l-2l')y} dy$ と書き換えて次を得る。

$$\int_0^{1/2} e^{2\pi i(l-2l')y} dy = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2N} \sum_{y=0}^{N-1} e^{2\pi i(l-2l')y/2N}$$

$$\frac{1}{2N} \sum_{y=0}^{N-1} e^{2\pi i(l-2l')y/2N} = \begin{cases} 1/2 & (l = 2l') \\ 0 & (l \neq 2l', l : \text{even}) \\ \frac{e^{2\pi i(l-2l')/N} - 1}{2N(e^{2\pi i(l-2l')/N} - 1)} & (l : \text{odd}) \end{cases}$$

これらを用いて、有限の N について N 次正方行列 P_N と Q_N が次のように定まる。

$$(P_N)_{(l,k),(l',k')} = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{x=0}^{N-1} e^{2\pi i(2k-k')x/2N} \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{y=0}^{N-1} e^{2\pi i(l-2l')y/2N}$$

$$(Q_N)_{(l,k),(l',k')} = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{x=N}^{2N-1} e^{2\pi i(2k-k')x/2N} \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{y=0}^{N-1} e^{2\pi i(l-2l')y/2N + l\pi i}$$

さらに、 F_N を離散フーリエ変換行列、行列要素を $(F_N)_{k,x} = e^{-2\pi i k x} / \sqrt{N}$ とする。

$$V_N = F_{2N} \begin{pmatrix} F_N^{-1} & 0 \\ 0 & F_N^{-1} \end{pmatrix}$$

とおけば、

$$P_N = F_{2N} \begin{pmatrix} F_N^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes {}^t V_N$$

$$Q_N = F_{2N} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & F_N^{-1} \end{pmatrix} \otimes {}^t V_N$$

$U_N = P_N + Q_N$ はユニタリ行列だから U_N は $\mathbb{C}^{2N} \otimes \mathbb{C}^{2N}$ に作用して、量子酔歩を駆動する。

行列 V_N は [4] において quantized baker's transformation と称されている行列と全く同じものである。

以上をまとめると、下記の定理を得る。

定理 4.1 U_T の行列成分を決めると U_N の行列成分で近似できる。

$N = 1$ の場合に U_N は Hadamard 行列となり、その誘導する量子酔歩は前節で観測した挙動 (図 1) の通りである。 N を次第に大きくした量子酔歩の挙動のスナップショットは図 2 の通り、通常の酔歩に近くなっていくように観察される。

5 議論

本稿ではパイこね変換を用いて量子酔歩を構成し、通常の酔歩を実現する量子酔歩になっていることを示した。また、有限次元近似による古典近似を実現する有限自由度の量子酔歩を得ることができた。ここで示したものは確率 $1/2$ で左右に動く単純酔歩との同値性であるが、パイこね変換を変形することで確率 $1/3$ と $2/3$ で左右に動く酔歩を実現すること、およびその有限自由度近似も数値的に観測できている。この確率は有理数であれば実現できる。

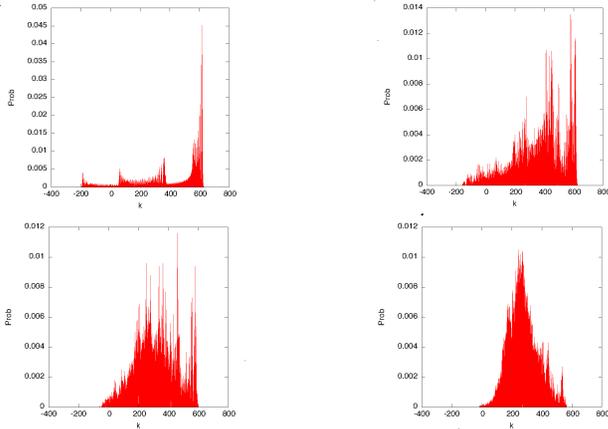


図 2: $N = 4$ (上段左), $N = 16$ (上段右), $N = 64$ (下段左), $N = 128$ (下段右) として U_N の与える量子酔歩を 1024 ステップ走らせたスナップショット。 N が大きくなると通常の酔歩の挙動に近くなる。

参考文献

- [1] Norio Konno, *A new type of limit theorems for the one-dimensional quantum random walk*. J. Math. Soc. Japan 57 (2005), no. 4, 1179-1195. MR2183589
- [2] Norio Konno, Takao Namiki and Takahiro Soshi, *Symmetry of distribution for the one-dimensional Hadamard walk*. Interdiscip. Inform. Sci. 10 (2004), no. 1, 11-22. MR2062188
- [3] Toshikazu Sunada and Tatsuya Tate, *Asymptotic behavior of quantum walks on the line*. J. Funct. Anal. 262 (2012), no. 6, 2608-2645.
- [4] N. L. Balazs and A. Voros, *The quantized baker's transformation*. Ann. Physics 190 (1989), no. 1, 1-31.
- [5] Shuichi Tasaki, *Fick's Law and Fractality of Nonequilibrium Stationary States in a Reversible Multibaker Map*, Journal of Statistical Physics, 81(1995), 935-987, MR1361303