

量子ウォーク 2.0

今野 紀雄 (横浜国立大学)*

1. はじめに

量子ウォーク (quantum walk) をはじめて知ったのは、2002年1月の正月休みに、検索サイトに偶然打ち込んだ「quantum random walk」(当時はそう呼ばれていた)により、ネット上に数編しかなかった論文がヒットしたことがきっかけである。ダウンロードした論文を眺めるうちに、このランダムウォークの量子版といわれるモデルは、様々な分野を横断的に関連付ける広大な研究テーマに発展すると直感的に思った。まさに、巨大な金鉱を偶然発見した瞬間である¹。

さて、量子ウォークへのアイデアを提案した文献として頻繁に引用されるのは、1993年の Aharonov et al. の論文である [1]²。しかし、2001年の Ambainis et al. の論文 [3] によって、量子ウォークの研究が開花したといって過言ではない。実は、それらの文献の前後に、例えば、1988年の Gudder による著書『Quantum Probability』[9] では、量子ウォークのモデルが定義され、簡単な性質を紹介している。同様に、1996年頃に 量子ゲームの提案者としても有名である Meyer も同じモデルを量子セルオートマトンとして提案し [37]、2年ほど関連の論文が出たが進展はなかった。このように現れては消えていった量子ウォークは、最終的には量子コンピュータの研究が追い風となり、上記 2001年の Ambainis et al. の本格的な研究論文などで、多数の目に留まるようになった。

私に関しては、初めにも触れたように、2002年1月に、数編程しか arXiv で入手できなかった量子ウォーク関連の論文を偶然見つけたのが、量子ウォークとの出会いである。単純そうではあるが、一見するとわかりづらい定義の‘量子ウォーク’なるものに興味を持った。何故なら、ランダムウォークの量子版と言われて導入されたこのモデルが、ランダムウォークと異なる性質を持っていたからだ。

1 番目は、ランダムウォークの確率測度が 2 項分布で表され、出発点の確率が高い単峰型であるのに対し、量子ウォークの確率測度は、粗く言うとその逆の、出発点の確率が最も低く、2つの端点に近い場所の確率が高い逆釣鐘型であること。そして、2 番目は、ランダムウォークの分散が時刻に比例するのに対して、量

2010 Mathematics Subject Classification: 60F05, 60G50

キーワード: 量子ウォーク, 極限定理, 局在化

* 〒241-8501 神奈川県横浜市保土ヶ谷区常盤台 79-5 横浜国立大学 大学院工学研究院

e-mail: konno-norio-bt@ynu.ac.jp

¹ 量子ウォークは、量子モデルとしては簡単に定義できるモデルなので、Feynman をはじめとし、おそらく多くの人達によって同様のモデルが提案されてきたと思われる。Feynman and Hibbs [8] で量子ウォークの原型となるモデルに触れられている。尚、名称は、量子ウォークに落ち着いてきたが、以前は、量子ランダムウォーク (quantum random walk) も使用された。実は、量子ウォークには、離散時間と連続時間の 2 種類あるが、本講演では、離散的にユニタリ作用素によって逐次状態を遷移させる離散時間のモデルに絞る。

² Y. Aharonov は、アハロノフ・ボーーム効果、弱測定の研究でも有名である。

量子ウォークの場合は時刻の 2 乗に比例することだ。

2002 年当時、まだ本格的な研究が始まった時期だけに、確率測度の明示的な表現やランダムウォークの中心極限定理に対応する弱収束極限は知られていなかった。今や 1 次元系の基本的な結果となったが、組合せ論的な手法で弱収束極限を得ることに成功し、2002 年の 6 月には第一報を投稿することができ [18]、その後まとまった論文を完成した [19]³。

現在では理論的な側面だけでなく、量子ウォークの実現方法の様々な提案 [34] や応用、例えば、強相関電子系 [40]、トポロジカル絶縁体 [16, 39]、放射性廃棄物低減 [11, 35, 36]、光学 [12] など盛んに研究されている。

量子ウォークに関するレビュー、あるいは、本はすでに幾つかあり、例えば、Venegas-Andraca [46]、Konno [20]、Cantero et al. [6]、Manouchehri and Wang [34]、Portugal [41]。特に日本語の本としては、連続時間まで扱った量子ウォーク最初の成書（今野 [21]）と、最近までの離散時間量子ウォーク研究の解説書（今野 [23]）がある。ごく最近、フーリエ解析にもとづいた専門書が出版された（町田 [33]）。さらに、初心者向けの入門書として町田 [32] が出版されている。

また、近年の主に巨大 IT 企業⁴による量子コンピュータの急速なハード開発により、量子ウォークに基づくプログラムが量子コンピュータ上で動くことが現実のものとなりつつあり、まさに表題のような「量子ウォーク 2.0」ともいえる新しい局面に入ってきた。特に、小さなサイズの量子ウォークであれば、無料のクラウド上の量子コンピュータにアクセスして動かすことが可能である⁵。本講演では、量子ウォークの短い歴史を概観しつつ、このようなごく最近の動向まで解説したい。

以下、私見であるが、なぜ量子ウォークが注目され続けているのかについて、理論的側面に主に絞り、いくつかの転機をリストアップしてみた⁶。

- (1) 2000 年頃 Ambainis 達の論文 [3]
- (2) 2002 年 弱収束極限定理 (K [18])
- (3) 2004 年 局在化の証明 (Inui, Konishi, K [13])
- (4) 2005 年 局在化と弱収束極限定理 (Inui, K, Segawa [14])
- (5) 2010 年 CGMV 法の誕生 (Cantero, Grunbaum, Moral, Velazquez [4])
- (6) 2010 年 新たな局在化の発見（一欠陥モデル）(K [22])
- (7) 2012 年 グラフゼータ関数との関連 (K, Sato [30])

³ 今では、フーリエ解析、停留位相法、母関数法など様々な手法で求められている。

⁴ 具体的には、IBM、グーグル、インテル、マイクロソフト、アリババなど。

⁵ 例えば、IBM の量子コンピュータ実機「IBM Q」。

⁶ 2002 年から約 16 年刊行されている量子情報科学系の雑誌「Quantum Information Processing」の twitter で、第 1 巻（2002 年）に掲載された私が単著で書いた最初の量子ウォークの論文（弱収束極限定理）[18] が「Fine Fifteen」の 3 番目に選出。さらに、選出された全 15 編の論文のうち、4 編、すなわち、1, 3, 11, 15 番目が量子ウォーク関連論文であり、これは量子ウォークが量子情報科学の分野で非常に重要であることを示すものである。一方、量子ウォークを主とした国際会議が 2011 年より、毎年度開催されている。また、RIMS や IMI でも関連する研究会が継続的に行われている。

- (8) 2014 年 定常測度の本格的な解析 (K [24])
- (9) 2014 年 スペクトル写像定理とグラフの幾何構造の関係 (Higuchi, K, Sato, Segawa [10])
- (10) 2016 年 スペクトル散乱理論による解析 (Suzuki [45])
- (11) 2016 年 量子ウォークのグラフ理論的構成法の提案 (Portugal [42])

さて、紙面が限られているので、本稿では量子ウォークの特徴的な性質である、線形的拡がりと局在化について簡単な 1 次元系モデルで解説する。まず、次節では線形的広がりについて、代表的な例である $\mathbf{Z}$ 上の最近接点に移動する 2 状態量子ウォークにより説明する。但し、 $\mathbf{Z}$ は整数全体の集合である。引き続き、3 節では、局在化について述べる。扱えなかった話題の一部は、講演中に適宜補足したい。

2. $\mathbf{Z}$ 上の 2 状態量子ウォーク

最初に、以下の量子コイン (quantum coin) とも呼ばれるユニタリ行列を与える。

$$U = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

但し、 $a, b, c, d \in \mathbf{C}$ 。ここで、 $\mathbf{C}$ は複素数全体の集合である。特に、量子ウォークの中で研究が最も多くされているモデルは、アダマールウォーク (Hadamard walk) で、そのユニタリ行列 U は以下のアダマールゲートで決まる。

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

この量子ウォーカーは、‘左向き’ $|L\rangle$ と ‘右向き’ $|R\rangle$ の 2 つの ‘カイラリティ (chirality)’ をもち、それぞれ、量子ウォーカーの動く向きに対応していると解釈できる。ここでは、 $|L\rangle = {}^T[1, 0]$, $|R\rangle = {}^T[0, 1]$ とおく。但し、 T は転置を表す。古典のランダムウォークの確率 p (左に移動), q (右に移動) に対して、次の行列 P, Q を与える。

$$P = \begin{bmatrix} a & b \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad Q = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c & d \end{bmatrix}.$$

ここで、 $U = P + Q$ の関係に注意。逆に、最初に与えられたユニタリ行列 U を $U = P + Q$ のように分解することによって、 P, Q を定義するともいえる。時刻 n での量子ウォークの状態 Ψ_n を次で与える。

$$\begin{aligned} \Psi_n &= {}^T[\cdots, \Psi_n(-1), \Psi_n(0), \Psi_n(1), \cdots], \\ &= {}^T\left[\cdots, \begin{bmatrix} \Psi_n^L(-1) \\ \Psi_n^R(-1) \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \Psi_n^L(0) \\ \Psi_n^R(0) \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \Psi_n^L(1) \\ \Psi_n^R(1) \end{bmatrix}, \cdots\right]. \end{aligned}$$

但し、時刻 n で場所 x での状態 $\Psi_n(x)$ は $\Psi_n(x) = {}^T [\Psi_n^L(x), \Psi_n^R(x)]$ とおく．右肩の L, R がそれぞれ $|L\rangle$ と $|R\rangle$ の状態を表す．このとき、量子ウォークの時間発展を

$$\Psi_{n+1}(x) = P\Psi_n(x+1) + Q\Psi_n(x-1)$$

で定める．従って、量子ウォークの系全体のダイナミクスを与える行列表示 $U^{(s)}$ が、以下で得られる．

$$U^{(s)} = \begin{bmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \cdots & O & P & O & O & O & \cdots \\ \cdots & Q & O & P & O & O & \cdots \\ \cdots & O & Q & O & P & O & \cdots \\ \cdots & O & O & Q & O & P & \cdots \\ \cdots & O & O & O & Q & O & \cdots \\ \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}, \quad \text{但し, } O = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

故に、 n ステップ後の状態 Ψ_n は、 $\Psi_n = (U^{(s)})^n \Psi_0$ である．

さて、このような準備の下で、時刻 n 、場所 x に対する “ $X_n = x$ ” の確率を、 $P(X_n = x) = \|\Psi_n(x)\|^2 = |\Psi_n^L(x)|^2 + |\Psi_n^R(x)|^2$ で定義する．但し、量子ウォークは、時刻 n ごとの確率測度の列 $\{P(X_n = \cdot) : n = 0, 1, 2, \dots\}$ が与えられているだけで、確率過程として定義されてはいないことに注意．

さらに、次の写像 $\phi : (\mathbf{C}^2)^{\mathbf{Z}} \rightarrow \mathbf{R}_+^{\mathbf{Z}}$ を導入する．ここで、 $\mathbf{R}_+ = [0, \infty)$ ．具体的には、

$$\Psi = {}^T \left[\cdots, \begin{bmatrix} \Psi_n^L(-1) \\ \Psi_n^R(-1) \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \Psi_n^L(0) \\ \Psi_n^R(0) \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \Psi_n^L(1) \\ \Psi_n^R(1) \end{bmatrix}, \cdots \right] \in (\mathbf{C}^2)^{\mathbf{Z}}$$

に対して、 $\phi(\Psi) \in \mathbf{R}_+^{\mathbf{Z}}$ を以下で与える．

$$\phi(\Psi) = {}^T [\dots, |\Psi^L(-1)|^2 + |\Psi^R(-1)|^2, |\Psi^L(0)|^2 + |\Psi^R(0)|^2, |\Psi^L(1)|^2 + |\Psi^R(1)|^2, \dots].$$

即ち、任意の $x \in \mathbf{Z}$ に対して、 $\phi(\Psi)(x) = |\Psi^L(x)|^2 + |\Psi^R(x)|^2$ ．しばしば、 $\phi(\Psi(x))$ と $\phi(\Psi)(x)$ を同一視する．そして、場所 x での測度を $\mu(x) = \phi(\Psi(x))$ で定める．ここで、量子ウォークの定常測度全体の集合 $\mathcal{M}_s$ を導入する．

$$\mathcal{M}_s = \left\{ \mu \in \mathbf{R}_+^{\mathbf{Z}} \setminus \{\mathbf{0}\} : \text{任意の } n \geq 0 \text{ に対して, } \phi((U^{(s)})^n \Psi_0) = \mu \right. \\ \left. \text{が成り立つような初期状態 } \Psi_0 \in (\mathbf{C}^2)^{\mathbf{Z}} \text{ が存在する} \right\}.$$

ここで、 $\mathbf{0}$ は全ての成分が 0 のベクトルである．また、 $\mathcal{M}_s$ の元を定常測度という．即ち、時刻 n の測度 $\mu_n = \phi((U^{(s)})^n \Psi_0)$ が時刻 $n(\geq 0)$ に依存しない測度のことをいう．通常マルコフ過程と違い、 $\mu_1 = \mu_0$ から $\mu_n = \mu_0$ ($n \geq 0$) が導けず、実際 $\mu_1 = \mu_0$ で、 $\mu_2 \neq \mu_1$ の例もある [31]．

次に、場所 x , 時刻 n での測度を $\mu_n(x)$ とおく. つまり, $\mu_n(x) = \phi(\Psi_n(x)) (x \in \mathbf{Z})$. そして、極限測度 $\mu_\infty(x)$ を $\mu_\infty(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \mu_n(x)$ で (右辺が存在するとき) 定める. さらに、時間平均極限測度を、右辺が存在するときに、以下で定義する.

$$\bar{\mu}_\infty(x) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{n=0}^{T-1} \mu_n(x) \quad (x \in \mathbf{Z}).$$

初期状態 Ψ_0 を明記するときは、 $\mu_\infty^{\Psi_0}$, $\bar{\mu}_\infty^{\Psi_0}$ と表す.

さて、 $\Psi_0^{\{0\}} = \Psi_0^{\{0\}}(\alpha, \beta)$ を、原点での量子ビット状態が $\varphi = {}^T[\alpha, \beta] (|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1)$, その他の場所では ${}^T[0, 0]$ の初期状態とする. このとき、原点での φ を初期量子ビットと呼ぶこともある. さらに、以下の測度の集合を導入する.

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_\infty^{\{0\}} &= \left\{ \mu_\infty = \mu_\infty^{\Psi_0^{\{0\}}} \in \mathbf{R}_+^{\mathbf{Z}} \setminus \{0\} : \Psi_0^{\{0\}} = \Psi_0^{\{0\}}(\alpha, \beta) \in \mathbf{C}^{\mathbf{Z}}. \text{ 但し, } |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \right\}, \\ \bar{\mathcal{M}}_\infty^{\{0\}} &= \left\{ \bar{\mu}_\infty = \bar{\mu}_\infty^{\Psi_0^{\{0\}}} \in \mathbf{R}_+^{\mathbf{Z}} \setminus \{0\} : \Psi_0^{\{0\}} = \Psi_0^{\{0\}}(\alpha, \beta) \in \mathbf{C}^{\mathbf{Z}}. \text{ 但し, } |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \right\}, \\ \mathcal{M}^{(w, \{0\})} &= \left\{ w\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{X_n}{n} : \Psi_0^{\{0\}} = \Psi_0^{\{0\}}(\alpha, \beta) \in \mathbf{C}^{\mathbf{Z}}. \text{ 但し, } |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \right\}. \end{aligned}$$

ここで、 $w\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} X_n/n$ は、 X_n/n に対する弱収束極限測度 (が存在したとき) とする. 様々な量子ウォークに対して、上記の $\mathcal{M}_s$, $\mathcal{M}_\infty^{\{0\}}$, $\bar{\mathcal{M}}_\infty^{\{0\}}$, $\mathcal{M}^{(w, \{0\})}$ を求め、それらの間の関係を明らかにすることが、最近の我々グループの研究テーマの一つとなっている.

次に、組合せ論的手法により、原点から出発した場合の量子ウォーク X_n の確率測度が求まるので、それについて触れる. $l+m=n$ かつ $-l+m=x$ を満たす非負整数 l, m に対して、次の量を導入する. $\Xi_n(l, m) = \sum_{l_j, m_j} P^{l_1} Q^{m_1} P^{l_2} Q^{m_2} \dots P^{l_n} Q^{m_n}$. 但し、式の和は $l_1 + \dots + l_n = l$, $m_1 + \dots + m_n = m$, $l_j + m_j = 1$ を満たす全ての $l_j, m_j \in \{0, 1\}$ に関する和とする. 例えば、 $\Xi_4(3, 1) = QP^3 + PQP^2 + P^2QP + P^3Q$ となる. また、初期状態として、原点での量子ビット状態が $\varphi = {}^T[\alpha, \beta] (|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1)$, その他の場所では ${}^T[0, 0]$ としたときの、時刻 n での量子ウォーク X_n を考えると、定義より、 $\Psi_n(x) = \Xi_n(l, m)\varphi$ が成立していることが分かる. この関係を用い、量子ウォーク X_n の確率測度が得られるが、形が煩雑なので割愛する (例えば、今野 [23] の補題 2.2 を参照).

そして、確率測度の具体的な組合せ論的表現とヤコビ多項式に関する漸近挙動の結果を用いると、 X_n に対する弱収束の極限定理が得られる (Konno [18, 19]). この $\mathbf{Z}$ 上の 2 状態量子ウォークの弱収束極限定理は、対応するランダムウォークの中心極限定理に比する重要な結果である⁷.

定理 1 $abcd \neq 0$ とするとき⁸, $w\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} X_n/n = W$ で、 W の密度関数 $f(x)$ は

$$f(x) = \left\{ 1 - \left(|\alpha|^2 - |\beta|^2 + \frac{a\alpha\bar{b}\beta + \bar{a}\alpha b\beta}{|a|^2} \right) x \right\} f_K(x; |a|).$$

⁷ 量子ウォークの大偏差原理に関しては、Sunada and Tate [44] がある.

⁸ $abcd = 0$ のときは自明な場合になる.

但し, $0 < r < 1$ に対して,

$$f_K(x; r) = \frac{\sqrt{1-r^2}}{\pi(1-x^2)\sqrt{r^2-x^2}} I_{(-r,r)}(x).$$

また, $I_A(x) = 1 (x \in A), = 0 (x \notin A)$.

この極限定理より, W は初期量子ビット $\varphi = {}^T[\alpha, \beta]$ に強く依存することが分かる. また, 極限の密度関数の $f_K(x; r)$ は, 様々なグラフ上の多状態モデルの極限の密度関数にも現れ, 中心極限定理のガウス分布に対応したものである. 上記の結果からも, 古典の場合には, 対応する分散が n のオーダーで大きくなるのに対し, 量子ウォークの場合は n^2 のオーダーで大きくなることが分かる. そして, この違いなどを上手く利用し, 空間構造を持った探索問題 [43] や element distinctness の問題 [2] への応用が試みられている.

ここで簡単に紹介した方法は組合せ論的な手法であったが, その他, フーリエ解析, 停留位相法, 母関数法 [7], 転送行列法 [15], グラフゼータ法, スペクトル写像定理, スペクトル散乱理論を用いた方法などがある. また, CMV 行列に基づいた解析手法 (CGMV 法と呼ぶ) は, 系全体を記述する無限次元のユニタリ行列のスペクトルと固有ベクトルを求めることが可能なので, 半直線上などの 1 次元系の局在化を議論するには強力である [6].

3. $\mathbf{Z}$ 上の 3 状態量子ウォーク

本節では, 量子ウォークの特徴的な性質の一つである局在化について, $\mathbf{Z}$ 上の 3 状態の量子ウォークを例に解説する. 具体的には, 3 状態のグローヴァーウォーク (Grover walk) と呼ばれるモデルである. この量子ウォーカーは, 2 状態の場合にとどまる状態を付け加えた $\{|L\rangle, |0\rangle, |R\rangle\}$ の 3 状態を持つ. ここで, $|L\rangle$ と $|R\rangle$ とはそれぞれ左へのジャンプ, 右へのジャンプに対応し, $|0\rangle$ は同じ場所に留まることを表す. 次に, $\Psi_n(x) = {}^T[\Psi_n^L(x), \Psi_n^0(x), \Psi_n^R(x)]$ を場所 $x \in \mathbf{Z}$ で時刻 n のそれぞれ $|L\rangle, |0\rangle, |R\rangle$ に対応する量子ウォーカーの状態とし, 以下の行列を導入する.

$$U_L = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad U_0 = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad U_R = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & -1 \end{bmatrix}.$$

このとき, U_L が左に, U_R が右にジャンプすることに対応し, U_0 が同じ場所に留まることに対応する. 逆に言えば, 3 状態のグローヴァーウォークは以下の (グローヴァーのアルゴリズムと関係があるので, グローヴァー行列とも言われる) ユニタリ行列 $U^{(G)} = U_L + U_0 + U_R$ で定義される. また, このモデルの時間発展は, $\Psi_{n+1}(x) = U_L \Psi_n(x+1) + U_0 \Psi_n(x) + U_R \Psi_n(x-1)$ で与えられる.

初期状態として, 原点での量子ビット状態が $\varphi = {}^T[\alpha, \beta, \gamma] (|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 = 1)$, その他の場所では ${}^T[0, 0, 0]$ としたときの, 時刻 n での量子ウォーク X_n を考えると, その極限測度 $\mu_\infty(x)$ が求まり, 場所 x からの距離に対して指数的に減少

していることがわかる (例えば, Konno [20]). “場所 x で局在化が起こる” とは, “ $\limsup_{n \rightarrow \infty} \mu_n(x) > 0$ ” と定義すると, 実は, $\mu_\infty(x)$ の表現から, 局在化の有無が α, β, γ に依存することが導かれる. また, 特に場所を断らないときは, 出発点で局在化が起きるときを, 簡単に “局在化が起こる” というようにする. 一般には, $0 \leq \sum_{x \in \mathbf{Z}} \mu_\infty(x) \leq 1$ であるが, 例えば, $\alpha = \gamma = 1/\sqrt{6}$, $\beta = -2/\sqrt{6}$ の場合には, $\sum_{x \in \mathbf{Z}} \mu_\infty(x) = 0$ となり, 局在化は起きない. 一方, 対応する古典系 (lazy random walk) では, $\mu_\infty(x) = 0$ ($x \in \mathbf{Z}$) となる. 従って, $\sum_{x \in \mathbf{Z}} \mu_\infty(x) = 0$. 同様の結果は, アダマルウォークのような 2 状態の量子ウォークの場合でも導かれる.

さらに, フーリエ解析の手法により, 以下のような, 任意の初期状態に対する 3 状態のグローヴァーウォークの弱収束の極限定理を得る (Konno [20]).

定理 2 $w\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} X_n/n = Y$ で, Y は次の測度で決まる.

$$\mu(dx) = \Delta \delta_0(dx) + (c_0 + c_1x + c_2x^2) f_K(x; 1/\sqrt{3}) dx.$$

ここで, $\delta_0(dx)$ は原点でのデルタ測度で, Δ, c_0, c_1, c_2 は α, β, γ によって決まる定数である. 重要なこととして, $\Delta = \sum_{x \in \mathbf{Z}} \mu_\infty(x; \alpha, \beta, \gamma)$ が成立している. 従って, 極限測度の全空間 $\mathbf{Z}$ での和 (右辺) が, 弱収束極限定理の δ_0 のマス (左辺) に等しいことが確かめられた. つまり, $\mu_\infty(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} P(X_n = x)$ と $w\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} X_n/n$ の 2 段階の極限定理を得ることにより, 局在化して, しかも, 線形に広がる量子ウォーク特有の性質が, 定量的にとらえられる.

さて, 2 状態のアダマルウォークの場合には, 時刻 0 での初期量子ビットを $\varphi = {}^T[1/\sqrt{2}, i/\sqrt{2}]$ としたとき, 定理 1 よりその極限測度は $f_K(x; 1/\sqrt{2})dx$ になることが分かった. 本節で扱った 3 状態の定理 2 や他のモデルの結果などを考慮すると, 一般に, $w\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} X_n/n$ の極限測度は以下のように表されると期待できる. 即ち, 有理関数 $w(x)$, 定数 $C \in [0, 1)$ と $r \in (0, 1)$ が存在し,

$$C\delta_0(dx) + (1 - C)w(x)f_K(x; r)dx.$$

そして, このようなクラスに属する量子ウォークのモデル全体を $\mathcal{U}$ とする. つまり, その極限測度は, 出発点である原点でのデルタ測度 $\delta_0(dx)$ と $f_K(x; r)$ で特徴づけられる絶対連続な部分の $w(x)f_K(x; r)dx$ の凸結合になっている. Konno et al. [28] で, 量子ウォークのユニバーサリティ・クラスの一つとして $\mathcal{U}$ を提案した. 現時点で知られている量子ウォークのモデルで $\mathcal{U}$ に属しているものは, 多数知られていて, しかもその場合に有理関数 $w(x)$ は比較的次数の低い多項式で表現される.

また, 一般の多状態の量子ウォークに関する結果は現時点では非常に限られている. まず一般の場合の定義の一つを与えよう. U を $M \times M$ のユニタリ行列とし, P_j ($j = 1, 2, \dots, M$) を (j, j) 成分だけ 1 で他の成分は全て 0 の M 次正方行列とする. このとき, P_j は射影 ($P_j^2 = P_j$, $P_j^* = P_j$) で, $\sum_{j=1}^M P_j = I_M$ となる. 但し, I_M は M 次の単位行列である. ここで, $A_j = P_j U$ ($j = 1, 2, \dots, M$)

を考え、この M 個の行列が 2 状態のように、各点から M 個の異なる場所に移動する P, Q に対応するものと考え、一般の場合の量子ウォークが定義できる。例えば、[38] では、1 次元の多状態量子ウォークのあるクラスについて、弱収束の極限定理を得ている。また、2 次元の量子ウォークの局在化に対する証明は [13] で与えられ、さらに弱収束極限定理が [47] で得られた。 $\mathbf{Z}^d$ 上のモデルの定常測度に関しては、[17] がある。一般のグラフ上の離散時間量子ウォークの挙動については、例えば周期性など、スペクトル写像定理等を用いて、その数学的な解析は進展している。

量子コインが場所に依存するモデルを数学的に解析することは一般に非常に難しい。しかし、1 次元格子上でアダマールウォークの量子コインを一カ所だけ変えた“一欠陥モデル (one defect model)”でも局在化が起こりえることが、はじめて 2010 年に Konno [22] によって示された。このことは粗く言うと、ランダムな環境下で局在化が起こりうるアンダーソン局在とは対極をなすので興味深い。一般的な一欠陥のある設定での局在化の判定条件について、[5] で精緻に調べている。さらに、空間依存、時間依存、時空間依存の量子ウォークの数学的研究も着実に進んでいる。

4. おわりに

量子ウォークの解析には、組合せ論的手法、フーリエ解析、停留位相法、母関数法、CGMV 法、転送行列法、グラフゼータ法、スペクトル写像定理、スペクトル散乱理論を用いた手法などがあり、それら相互の関係を明らかにすることにより、多状態や一般のグラフの上の挙動に関する詳しい研究がさらに可能である。そのことは、古典系のマルコフ過程理論に対応する量子系の理論を構築する足掛かりになる。

その他、四元数量子ウォークの諸性質 [25, 29]、場の量子論における超対称性との関係、定常性を仮定しない時系列解析への応用 [27] など、本稿で扱えなかった話題は非常に多い。詳細は、最近の解説 (今野 [26]) の文献等を参考にして頂きたい。

このように、量子ウォークは、数学の問題だけでなく、量子コンピュータなどによる応用も含め、今後も様々な分野で魅力あるテーマであり続けるであろう。

参考文献

- [1] Y. Aharonov, L. Davidovich and N. Zagury, Quantum random walks, Phys. Rev. A, **48** (1993), 1687–1690.
- [2] A. Ambainis, Quantum walk algorithm for element distinctness, SIAM Journal on Computing, **37** (2007), 210–239.
- [3] A. Ambainis, E. Bach, A. Nayak, A. Vishwanath and J. Watrous, One-dimensional quantum walks. In: Proceedings of the 33rd Annual ACM Symposium on Theory of Computing, pp.37–49, 2001.

- [4] M. J. Cantero, F. A. Grünbaum, L. Moral and L. Velázquez, Matrix valued Szegő polynomials and quantum random walks. *Comm. Pure Appl. Math.*, **63** (2010), 464–507.
- [5] M. J. Cantero, F. A. Grünbaum, L. Moral and L. Velázquez, One-dimensional quantum walks with one defect, *Reviews in Math. Phys.*, **24** (2012), No.02.
- [6] M. J. Cantero, F. A. Grünbaum, L. Moral and L. Velázquez, The CGMV method for quantum walks, *Quantum Inf. Process.* **11** (2012), 1149–1192.
- [7] S. Endo, T. Endo, N. Konno, E. Segawa and M. Takei, Limit theorems of a two-phase quantum walk with one defect, *Quantum Inf. Comput.*, **15** (2015), 1373–1396.
- [8] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill Inc., NY. 1965.
- [9] S. P. Gudder, *Quantum Probability*, Academic Press Inc., CA. 1988.
- [10] Yu. Higuchi, N. Konno, I. Sato and E. Segawa, Spectral and asymptotic properties of Grover walks on crystal lattice, *J. Funct. Anal.*, **267** (2014), 4197–4235.
- [11] A. Ichihara, L. Matsuoka, Y. Kurosaki and K. Yokoyama, An analytic formula for describing the transient rotational dynamics of diatomic molecules in an optical frequency comb, *Chin. J. Phys.*, **51** (2013), 1230–1240.
- [12] Y. Ide, N. Konno, S. Matsutani and H. Mitsuhashi, New theory of diffusive and coherent nature of optical wave via a quantum walk, *Ann. Phys.*, **383** (2017), 164–180.
- [13] N. Inui, Y. Konishi and N. Konno, Localization of two-dimensional quantum walks, *Phys. Rev. A*, **69** (2004), 052323.
- [14] N. Inui, N. Konno and E. Segawa, One-dimensional three-state quantum walk, *Phys. Rev. E*, **72** (2005), 056112.
- [15] H. Kawai, T. Komatsu and N. Konno, Stationary measure for two-state space-inhomogeneous quantum walk in one dimension, *arXiv:1707.04040* (2017).
- [16] T. Kitagawa, Topological phenomena in quantum walks: elementary introduction to the physics of topological phases, *Quantum Inf. Process.*, **11** (2012), 1107–1148.
- [17] T. Komatsu and N. Konno, Stationary amplitudes of quantum walks on the higher-dimensional integer lattice, *Quantum Inf. Process.*, **16** (2017), 291.
- [18] N. Konno, Quantum random walks in one dimension, *Quantum Inf. Process.*, **1** (2002), 345–354.
- [19] N. Konno, A new type of limit theorems for the one-dimensional quantum random walk, *J. Math. Soc. Japan*, **57** (2005), 1179–1195.
- [20] N. Konno, Quantum Walks. In: *Quantum Potential Theory*, Franz, U., and Schürmann, M., Eds., *Lecture Notes in Mathematics: Vol. 1954*, pp. 309–452, Springer-Verlag, Heidelberg, 2008.
- [21] 今野紀雄, 量子ウォークの数理, 産業図書, 2008.
- [22] N. Konno, Localization of an inhomogeneous discrete-time quantum walk on the line, *Quantum Inf. Process.*, **9** (2010), 405–418.
- [23] 今野紀雄, 量子ウォーク, 森北出版, 2014.
- [24] N. Konno, The uniform measure for discrete-time quantum walks in one dimension, *Quantum Inf. Process.*, **13** (2014), 1103–1125.
- [25] N. Konno, Quaternionic quantum walks, *Quantum Stud.: Math. Found.*, **12**

(2015), 63–76.

- [26] 今野紀雄, 量子ウォークの数理, 数学 **69** (2017), 70–90.
- [27] N. Konno, A new time-series model based on quantum walk, *Quantum Stud.: Math. Found.*, in press.
- [28] N. Konno, T. Łuczak and E. Segawa, Limit measures of inhomogeneous discrete-time quantum walks in one dimension, *Quantum Inf. Process.*, **12** (2013), 33–53.
- [29] N. Konno, H. Mitsuhashi and I. Sato, The discrete-time quaternionic quantum walk on a graph, *Quantum Inf. Process.*, **15** (2016), 651–673.
- [30] N. Konno and I. Sato, On the relation between quantum walks and zeta functions, *Quantum Inf. Process.*, **11** (2012), 341–349.
- [31] N. Konno and M. Takei, The non-uniform stationary measure for discrete-time quantum walks in one dimension, *Quantum Inf. Comput.*, **15** (2015), 1060–1075.
- [32] 町田拓也, 図で解る量子ウォーク入門, 森北出版, 2015.
- [33] 町田拓也, 量子ウォーク - 基礎と数理 -, 裳華房, 2018.
- [34] K. Manouchehri and J. Wang, *Physical Implementation of Quantum Walks*, Springer, 2013.
- [35] L. Matsuoka, T. Kasajima, M. Hashimoto and K. Yokoyama, Numerical study on quantum walks implemented on cascade rotational transitions in a diatomic molecule, *J. Korean Phys. Soc.*, **59** (2011), 2897–2900.
- [36] L. Matsuoka and K. Yokoyama, Physical implementation of quantum cellular automaton in a diatomic molecule, *J. Compu. Theo. Nanosci.*, **10** (2013), 1617–1620.
- [37] D. A. Meyer, From quantum cellular automata to quantum lattice gases, *J. Statist. Phys.*, **85** (1996), 551–574.
- [38] T. Miyazaki, M. Katori and N. Konno, Wigner formula of rotation matrices and quantum walks, *Phys. Rev. A*, **76** (2007), 012332.
- [39] H. Obuse and N. Kawakami, Topological phases and delocalization of quantum walks in random environments, *Phys. Rev. B*, **84** (2011), 195139.
- [40] T. Oka, N. Konno, R. Arita and H. Aoki, Breakdown of an electric-field driven system: a mapping to a quantum walk, *Phys. Rev. Lett.*, **94** (2005), 100602.
- [41] R. Portugal, *Quantum Walks and Search Algorithms*, Springer, 2013.
- [42] R. Portugal, Staggered quantum walks on graphs, *Phys. Rev. A*, **93** (2016) 062335.
- [43] N. Shenvi, J. Kempe and K. B. Whaley, Quantum random-walk search algorithm, *Phys. Rev. A*, **67** (2003), 052307.
- [44] T. Sunada and T. Tate, Asymptotic behavior of quantum walks on the line, *J. Funct. Anal.*, **262** (2012), 2608–2645.
- [45] A. Suzuki, Asymptotic velocity of a position-dependent quantum walk, *Quantum Inf. Process.*, **15** (2016), 103–119.
- [46] S. E. Venegas-Andraca, Quantum walks: a comprehensive review, *Quantum Inf. Process.* **11** (2012), 1015–1106.
- [47] K. Watabe, N. Kobayashi, M. Katori and N. Konno, Limit distributions of two-dimensional quantum walks, *Phys. Rev. A*, **77** (2008), 062331.