

2005年度 修士論文

量子ウォークの極限分布とワイル方程式

Limit Distribution of Quantum Walks
and Weyl Equation

中央大学大学院 理工学研究科
博士課程前期課程 物理学専攻
藤野 壮一

2006年3月2日

目次

第 1 章	はじめに	2
第 2 章	量子ウォーク模型	4
2.1	ランダム・ターン模型	4
2.2	量子ウォーク模型	5
2.3	量子ウォークの振る舞い	6
第 3 章	量子ウォーク模型と今野分布	8
3.1	量子ウォーク模型とユニタリ行列との連携	8
3.2	期待値の定式化	9
3.3	今野の結果 [7, 8]	10
第 4 章	ワイル方程式への写像	13
4.1	パウリ行列の指数演算子	13
4.2	運動量空間中の軌道状態	15
4.3	軌道に沿った線積分	16
第 5 章	量子ウォークの極限定理	19
5.1	原点からスタートする量子ウォーク	19
5.2	弱収束の定理	19
第 6 章	多状態への拡張	21
6.1	3 状態の量子ウォーク模型	21
6.2	3 状態量子ウォークの極限分布	22
6.3	4 状態以上の場合	22
第 7 章	今後の展望	25
付録 A	軌道の様子とヤコビアン <small>の計算</small>	27
付録 B	初期状態依存性	29

第1章 はじめに

1936年に英国の数学者チューリングが現在のコンピュータモデル、チューリング機械を考案してから約70年、コンピュータは凄まじい進歩を遂げてきた。しかしここ最近、集積回路技術の限界等によりこれまでのような進歩は終わりを告げると言われている。

これらの問題を解決する1つの手法として、1985年にチューリングと同じ英国人の物理学者ドイチは、全く新しいコンピュータモデル、量子チューリング機械を提案した。2つのコンピュータモデルの違いを端的に言うと、それは用いる力学系の違いにある。古典力学か量子力学かである [1, 2]。

通常のチューリング機械での、計算の各ステップや、テープへの情報の書き込み・読み出しなどは確定的に行われるので、これは古典力学を使って記述できるモデルである。現在使われているノイマン型コンピュータも数学的にはチューリング機械と等価なので、全てのコンピュータが古典力学を用いたモデルを使って計算を行っている。しかし、ファインマンは現在のノイマン型コンピュータを用いて量子系をシミュレーションすると、古典力学と量子力学における確率法則の違いのために、非常に多くの計算時間が必要になることを指摘した。彼はまた、この問題を解決するために、量子力学的原理に基づくコンピュータが利用できる可能性についても述べた。これが量子コンピュータである。

元々は、量子系のシミュレーションのために作られたモデルであったが、1994年に AT&T, Bell 研究所のショアが、量子チューリング機械を用いて、因数分解と離散対数問題を高速に解けるアルゴリズムを開発し、大反響をもたらした。というのは、現在使われている RSA などの公開鍵暗号系の代表的なものが、因数分解と離散対数問題の難しさを前提に設計されているからである。つまり、もし量子コンピュータが実現されるとショアのアルゴリズムを用いて公開鍵暗号を破ることができるのである。

この他にも、グローバーによるデータ検索アルゴリズムなど有用なアルゴリズムが開発され、世界中で多くの研究者が量子コンピュータの実現に向け研究を行っている。

チューリング機械の動作を表現する際に、計算木というものをを用いている。計算木の振る舞いを古典力学で表現すると、それはランダム・ウォークに対応している。量子チューリング機械においても計算木が存在するが、それは

ランダム・ウォークでは表現することが出来ない．ランダム・ウォークを量子力学的に拡張したもの，量子ウォークによって表現されるのである．

本論文では，この量子ウォークに焦点をあてて，ランダム・ウォークとの違いや量子ウォークの見せる面白い性質などを解き明かしていきたい [3] ．

第2章 量子ウォーク模型

2.1 ランダム・ターン模型

量子ウォークは、通常のランダム・ウォークを量子力学的に拡張したものであることを示すために、1次元の対称なランダム・ウォークをランダム・ターン模型として見直してみる。

1次元格子 $\mathbf{Z} = \{\dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots\}$ 上の原点からスタートするランダム・ウォークを考える。これを行う粒子は「向き」を持っていて、初期の向きは確率 q で左、確率 $1 - q$ で右を向くものとする。さらにこの粒子はコインを持っていて、このコインは確率 p で表、確率 $1 - p$ で裏がでる。コインを投げて、もし表がでたら向きを換える。左向きなら右向きへ、右向きなら左向きへという具合にである。裏がでた場合は向きを換えない。その後、自分の向いている方へと1歩進む。次に新しい位置において、再びコインを投げて向きの変更の有無を決め、その向きの方へと1歩進む。これを繰り返して行った結果、時刻 n で粒子が位置 $x \in \mathbf{Z}$ にあり、その向きが右向き（左向き）である確率を $P_n^{(1)}(x)$ ($P_n^{(2)}(x)$) と書くことにする。この確率はフーリエ積分を用いて

$$\begin{pmatrix} P_n^{(1)}(x) \\ P_n^{(2)}(x) \end{pmatrix} = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} W(k)^n \begin{pmatrix} q \\ 1 - q \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

と与えられる。但しここで、

$$W(k) = \begin{pmatrix} e^{ik} & 0 \\ 0 & e^{-ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 - p & p \\ p & 1 - p \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

$$i = \sqrt{-1}$$

である。もし表と裏の出る確率が等しいコイン ($p = 1/2$) ならば、遷移行列 $W(k)$ の固有値は $\lambda = 0$ と $\lambda = \cos k$ であり、 $P_n^{(1)}(x) = P_n^{(2)}(x) \equiv P_n(x)/2$ は q に依らない（つまり、粒子の初めの向きに依らない）。この左右対称な場合は、

$$P_n(x) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \cos^n k = \frac{1}{2^n} \binom{n}{(n+x)/2}$$

となる。ここで、時間間隔と空間間隔の単位をそれぞれ τ と a として、 $n = t/\tau, x \rightarrow x/a, k \rightarrow ak$ とする。そして、 $a, \tau \rightarrow 0$ としたときに確率密度 $p_t(x) =$

$P_{t/\tau}(x/a)/a$ がどのように振舞うかを見ることにする．いわゆる拡散スケール
 ング極限 $\tau = a^2 \rightarrow 0$ をとると, $(\cos ak)^{t/\tau} = (1 - a^2 k^2/2 + \dots)^{t/\tau} \rightarrow e^{-tk^2/2}$
 となる．したがって, 確率密度は収束し

$$p_t(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} \exp\left[-\frac{t}{2}k^2 + ikx\right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} e^{-x^2/2t}$$

となる．これは熱方程式

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right] p_t(x) = 0$$

を初期条件 $\lim_{t \rightarrow 0} p_t(x) = \delta(x)$ として解いたときに得られる解であり, 熱核
 とよばれるものである．つまり粒子の位置の分布は, 上述の連続極限では平
 均 0, 分散 t のガウス分布となるのである (図 2.1)．これは中心極限定理の典
 型的な例である．

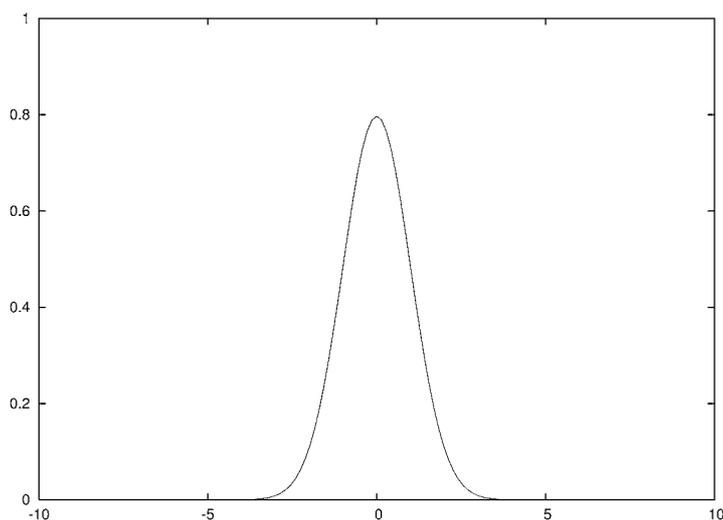


図 2.1: 原点からスタートしたランダム・ウォークの 200 ステップ後の分布．
 ほぼガウス分布である．

2.2 量子ウォーク模型

次にランダム・ターン模型を量子力学的に拡張して, 量子ウォーク模型を
 定義する．(2.1) 式の左辺を 2 次元ベクトルから次の様な 2 状態の波動関数へ
 と置き換える．

$$\Psi_n(x) = \begin{pmatrix} \Psi_n^{(1)}(x) \\ \Psi_n^{(2)}(x) \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

次に (2.1) 式の右辺の粒子の初期の向き $\begin{pmatrix} q \\ 1-q \end{pmatrix}$ を, 初期量子ビット $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ で置き換える. ただし $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ (複素数) であり, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ とする. さらに遷移行列 $W(k)$ を

$$U(k) = \begin{pmatrix} e^{ik} & 0 \\ 0 & e^{-ik} \end{pmatrix} A \quad (2.4)$$

と置き換える. ここで A は 2×2 のユニタリ行列で, 量子コインの振る舞いを表す.

量子力学では, 2 状態の波動関数 (2.3) 式は通常, スピン $1/2$ の粒子の量子状態を記述するために用いられる. そしてヒルベルト空間中のスピン演算子は, パウリ行列 $\sigma_j, j = 1, 2, 3$ と 2×2 の単位行列 I_2 を用いて表すことができる. 古典ランダム・ターンモデルにおいてのステップする方向は, ステップを行う前にランダムに変化する粒子の向きで決まる. 量子ウォークでこれに相当するものは, 粒子の“スピン状態”に作用するスピン演算子である. 通常の 3 次元の量子力学において, 運動量ベクトル演算子 $\mathbf{p} = (p_1, p_2, p_3) = -i\hbar\nabla$ は, スピン演算子と結びつき次のような形をしたものが得られる.

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}) = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \quad (2.5)$$

但し, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ である. これは, 質量が 0 でスピンの $1/2$ の自由粒子 (ニュートリノなど) のハミルトニアンとして知られている. これに相当するシュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Phi}_t(\mathbf{p}) = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \hat{\Phi}_t(\mathbf{p})$$

は 3 次元運動量空間中のワイル方程式といわれ, ディラック方程式の質量項を 0 にしたものである [4].

2.3 量子ウォークの振る舞い

ここではさらに詳しく, 量子ウォークの説明を行いたい.

今まで見てきたように, 古典ランダム・ウォークの場合には, ある場所に粒子が存在するか否かのみであった. しかし量子ウォークの場合には, さらに 2 つの状態が存在すると考えられる. $\Psi^{(1)}$ と $\Psi^{(2)}$ である. 時刻 n で位置 x にいる状態を今後,

$$\begin{pmatrix} \Psi_n^{(1)}(x) \\ \Psi_n^{(2)}(x) \end{pmatrix}$$

と書くことにする. これを時間発展させるものが, ユニタリ行列 U である. 量子ウォークの場合, このユニタリ行 U は 2 つの部分からできている. 1

つは位置を遷移させる行列 S で、もう 1 つは状態を遷移させる行列 A である。これらを使って

$$U = SA$$

と表すことができる。具体的な形としては、

$$S = \begin{pmatrix} s_+ & 0 \\ 0 & s_- \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

と書くことが出来る。ここで s_+, s_- とは位置を進める演算子で、

$$\begin{aligned} s_+ \Psi_n^{(1)}(x) &= \Psi_n^{(1)}(x+1) \\ s_- \Psi_n^{(1)}(x) &= \Psi_n^{(1)}(x-1) \end{aligned}$$

となる。また A はユニタリ行列であり、 $AA^\dagger = A^\dagger A = I_2$ を満たすものとする。 A として特に

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

というアダマール行列をとることが出来る。その場合に得られる量子ウォークは特にアダマール・ウォークと呼ばれ、最もよく研究されている。これらを使うと量子ウォークモデルは以下のように定義できる。

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \Psi_{n+1}^{(1)}(x) \\ \Psi_{n+1}^{(2)}(x) \end{pmatrix} &= U \begin{pmatrix} \Psi_n^{(1)}(x) \\ \Psi_n^{(2)}(x) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} s_+ & 0 \\ 0 & s_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_n^{(1)}(x) \\ \Psi_n^{(2)}(x) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a\Psi_n^{(1)}(x+1) + b\Psi_n^{(2)}(x+1) \\ c\Psi_n^{(1)}(x-1) + d\Psi_n^{(2)}(x-1) \end{pmatrix} \quad (2.6) \end{aligned}$$

なお、量子ウォークモデルについてのさらに詳しい解説は、[5] や [6] を参照していただきたい。

第3章 量子ウォーク模型と今野分布

ランダム・ウォークでは，長時間極限 $\lim n \rightarrow \infty$ をとることによりガウス分布を得ることができた．しかし量子ウォークでは，長時間極限をとただけでは極限分布を得ることはできない．この章では，この問題を解決する方法を示したいと思う．

3.1 量子ウォーク模型とユニタリ行列との連携

2 状態波動関数 (2.3) 式を考える．(2.6) 式より量子ウォーク模型は

$$\Psi_{n+1}(x) = \begin{pmatrix} a\Psi_n^{(1)}(x+1) + b\Psi_n^{(2)}(x+1) \\ c\Psi_n^{(1)}(x-1) + d\Psi_n^{(2)}(x-1) \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

であった．但し A は 2×2 のユニタリ行列， $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in U(2)$ である．

次に波数 $k \in [-\pi, \pi)$ を使い波動関数を

$$\hat{\Psi}_n(k) = \begin{pmatrix} \hat{\Psi}_n^{(1)}(k) \\ \hat{\Psi}_n^{(2)}(k) \end{pmatrix}$$

と表すと，実空間と波数空間との関係はフーリエ変換を使い，

$$\begin{aligned} \Psi_n^{(j)}(x) &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \hat{\Psi}_n^{(j)}(k) \\ \hat{\Psi}_n^{(j)}(k) &= \sum_{x \in \mathbf{Z}} \Psi_n^{(j)}(x) e^{-ikx} \quad j = 1, 2 \end{aligned}$$

となる．以上より，(3.1) 式は波数空間で

$$\hat{\Psi}_{n+1}(k) = U(k) \hat{\Psi}_n(k), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

と表すことが出来る．ここで $U(k)$ は (2.4) 式で与えられる．

n ステップでの波数空間における状態は，初期状態 $\hat{\Psi}_0(k) = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$, $\alpha, \beta \in \mathbf{C}$, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ に $U(k)$ を n 回作用することによって

$$\hat{\Psi}_n(k) = U(k)^n \hat{\Psi}_0(k) \quad (3.2)$$

得られる．したがって実空間では， n ステップでの波動関数は

$$\begin{aligned}\Psi_n(x) &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \hat{\Psi}_n(k) \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} U(k)^n \hat{\Psi}_0(k)\end{aligned}$$

と求まることになる． n ステップでの実空間で粒子位置の確率分布関数は，量子力学に従って次のように与えられることになる．

$$\begin{aligned}P_n(x) &= |\Psi_n(x)|^2 = \Psi_n^\dagger(x) \Psi_n(x) \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk'}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{i(k-k')x} \\ &\quad \times \left(\hat{\Psi}_0^\dagger(k') U^\dagger(k')^n \right) \left(U(k)^n \hat{\Psi}_0(k) \right)\end{aligned}\quad (3.3)$$

全ての $U(2)$ は， $SU(2)$ に位相因子 $e^{i\varphi}$, $\varphi \in [-\pi/2, \pi/2)$ を掛けた形をしている． $U(2)$ と $SU(2)$ の間にはこの位相因子の差しかないので，(3.3) 式で定められる確率分布には差が生じないので，今後は行列 A として $SU(2)$ (determinant が 1 の 2×2 のユニタリ行列) の元のみを考えることにする．例えば，アダマール行列に対しては次のようになる．

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \in U(2)\quad (3.4)$$

$$H = e^{-i\pi/2} A, \quad A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i & i \\ i & -i \end{pmatrix} \in SU(2)\quad (3.5)$$

$SU(2)$ は一般的に次のように書くことが出来る．

$$\begin{aligned}SU(2) &= \left\{ A = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}; a, b \in \mathbf{C}, |a|^2 + |b|^2 = 1 \right\} \\ &= \left\{ A = \begin{pmatrix} ue^{i\theta} & \sqrt{1-u^2}e^{i\phi} \\ -\sqrt{1-u^2}e^{-i\phi} & ue^{-i\theta} \end{pmatrix}; \right. \\ &\quad \left. u \in [0, 1], \theta, \phi \in [-\pi, \pi) \right\}\end{aligned}\quad (3.6)$$

上の 2 番目の等式中に示されている通り， $SU(2)$ は実変数 u, θ, ϕ (ケーリー・クライン パラメータ) を座標とする 3 次元パラメータ空間を成している．

3.2 期待値の定式化

X_n を n ステップ ($n = 0, 1, 2, \dots$) での 1 次元量子ウォークの位置として， $x \in \mathbf{Z}$ の関数を f とする．すると期待値 $f(X_n)$ は次のように定義される．

$$\begin{aligned}\langle f(X_n) \rangle &= \sum_{x \in \mathbf{Z}} f(x) P_n(x) \\ &= \sum_{x \in \mathbf{Z}} f(x) \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk'}{2\pi} e^{-ik'x} \hat{\Psi}_n^\dagger(k') \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \hat{\Psi}_n(k)\end{aligned}$$

$f(x) = x^r, r = 0, 1, 2, \dots$ の時は

$$\langle X_n^r \rangle = \sum_{x \in \mathbf{Z}} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk'}{2\pi} e^{-ik'x} \hat{\Psi}_n^\dagger(k') \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \left\{ \left(-i \frac{d}{dk} \right)^r e^{ikx} \right\} \hat{\Psi}_n(k)$$

となる．ここで， $\hat{\Psi}_n(k)$ は $k \in [-\pi, \pi)$ の周期関数であるから，部分積分を行うと，

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \left\{ \left(-i \frac{d}{dk} \right)^r e^{ikx} \right\} \hat{\Psi}_n(k) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{ikx} \left(i \frac{d}{dk} \right)^r \hat{\Psi}_n(k)$$

となる．これと和の公式

$$\sum_{x \in \mathbf{Z}} e^{ixk} = 2\pi \delta(k)$$

を使うと， X_n^r の期待値は，

$$\langle X_n^r \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \hat{\Psi}_n^\dagger(k) \left(i \frac{d}{dk} \right)^r \hat{\Psi}_n(k)$$

となる．もし， $f(x)$ が $x = 0$ のまわりで解析的ならば，テイラー展開 $f(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j x^j$ をすることが出来るので，以下の公式が得られる．

$$\langle f(X_n) \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \hat{\Psi}_n^\dagger(k) f \left(i \frac{d}{dk} \right) \hat{\Psi}_n(k) \quad (3.7)$$

3.3 今野の結果 [7, 8]

量子力学の基本的な要請で，孤立系の時間発展はどのような場合でも波動関数のユニタリ変換として表される．これは，「波動関数の絶対値の2乗が観測の結果得られる確率分布を表している」ということから導かれる．量子ウォークの場合では， $U(k)$ がユニタリで， n ステップ後に観測出来る位置 $x \in \mathbf{Z}$ での確率が (3.3) 式である． n ステップ後の位置の関数 f の期待値は (3.7) 式で計算できる．

$U(k)$ のユニタリ性は， $U(k)$ の全ての固有値 λ が $|\lambda| = 1$ となることを保障する．このことから量子ウォークにおいて，波動関数 $\Psi_n(x)$ と確率 $P_n(x)$ は $n \rightarrow \infty$ の長時間極限をとっても収束することは無い．これは古典系のランダム・ウォークと全く対称的である．古典系では一般的に，長時間と大きなスケールでの極限で収束する (2.1 節を参照) ．

しかし最近，今野は量子ウォークの擬速度 X_n/n の任意のモーメントの分布が $n \rightarrow \infty$ の長時間極限において収束することを証明した．この極限分布は下に示すように，今までに無い新しい確率密度関数で与えられている [7, 8] ．任意の $r = 0, 1, 2, \dots$ に対して，

$$\langle (X_n/n)^r \rangle \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dy y^r \nu(y) \quad n \rightarrow \infty$$

である．ただしここで， $\nu(y)$ は

$$\mu(y; |a|) = \frac{\sqrt{1 - |a|^2}}{\pi(1 - y^2)\sqrt{|a|^2 - y^2}} \quad (3.8)$$

と

$$\mathcal{I}(y; a, b; \alpha, \beta) = 1 - \left(|\alpha|^2 - |\beta|^2 + \frac{\alpha\beta^*ab^* + \alpha^*\beta a^*b}{|a|^2} \right) y \quad (3.9)$$

を用いて

$$\nu(y) = \mu(y; |a|)\mathcal{I}(y; a, b; \alpha, \beta)\mathbf{1}_{\{|y| < |a|\}} \quad (3.10)$$

と与えられる．ここで， $\mathbf{1}_{\{\omega\}}$ は条件 ω の指示関数で， ω を満足していれば $\mathbf{1}_{\{\omega\}} = 1$ ，それ以外では $\mathbf{1}_{\{\omega\}} = 0$ である． A がアダマール行列 (3.4) 式である場合はアダマール・ウォークとしてよく研究されてきたのは，古典ランダム・ターンモデル (2.1) 式と (2.2) 式において $p = 1/2$ の場合に相当すると考えられるからである．しかし，今野の弱収束の定理はアダマール・ウォークの場合であっても $\mathcal{I} \neq 1$ であることを示している．極限分布は初期量子ビットに依存し，一般的には対称ではない (図 3.1)．極限分布は初期量子ビットに非常に敏感で，唯一 $|\alpha| = |\beta|$ かつ $\alpha\beta^*ab^* + \alpha^*\beta a^*b = 0$ (a, b は A の成分) の場合のみ確率密度関数は対称な分布 $\mu(y; |a|)\mathbf{1}_{\{|y| < |a|\}}$ になるのである [7, 8] (図 3.2 を参照)．

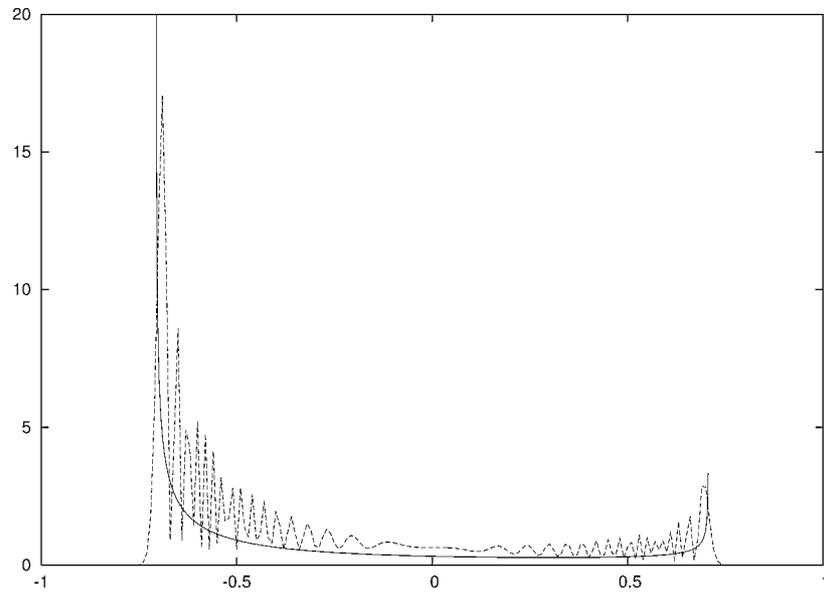


図 3.1: 極限分布のグラフ．実線が今野分布関数で破線がシミュレーションの結果．シミュレーションのステップ数は 200．ユニタリ行列 A はアダマール行列に対応．初期量子ビットは $\alpha = 1, \beta = 0$ ．

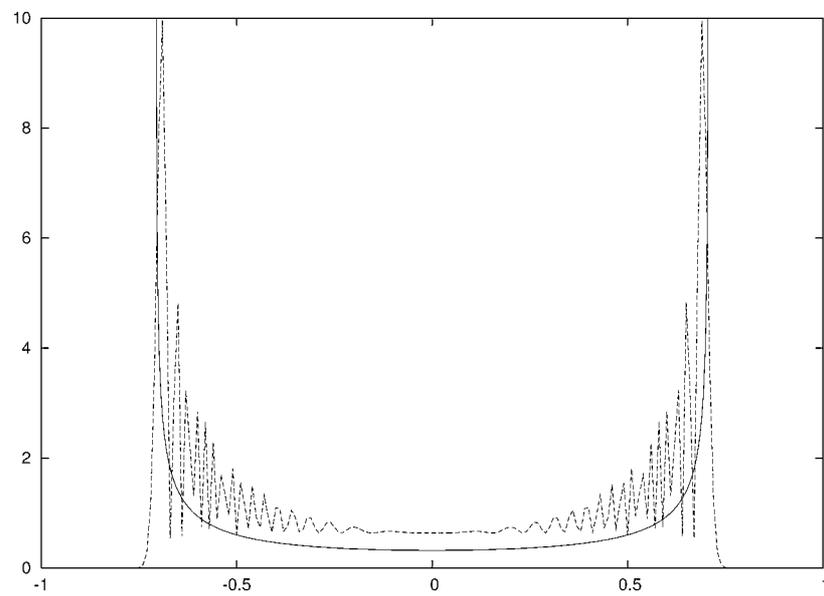


図 3.2: 初期量子ビットが $\alpha = 1/\sqrt{2}, \beta = i/\sqrt{2}$ の時．他の条件は図 3.1 と同じ．

第4章 ワイル方程式への写像

4.1 パウリ行列の指数演算子

パウリ行列 $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ を考える . 任意の 3 次元ベクトル $\mathbf{q} = (q_1, q_2, q_3)$ を用意し $q = |\mathbf{q}|$ とすると , 簡単な計算により $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q})^2 = q^2 I_2$ ということがわかる . すると

$$\begin{aligned} e^{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q})^n \\ &= \left(I_2 - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{q}} \tan q \right) \cos q \end{aligned} \quad (4.1)$$

である . ここで , $\hat{\mathbf{q}}$ は単位ベクトルで $\hat{\mathbf{q}} = \mathbf{q}/q$ と定義される . パウリ行列のよく知られた性質を使うことにより , $A \in \text{SU}(2)$ に対して (2.4) 式は以下のように変形できる .

$$\begin{aligned} U(k) &= \begin{pmatrix} ue^{i(k+\theta)} & \sqrt{1-u^2}e^{i(k+\phi)} \\ -\sqrt{1-u^2}e^{-i(k+\phi)} & ue^{-i(k+\theta)} \end{pmatrix} \\ &= u \cos(k+\theta) \\ &\times \left[I_2 + i \left(\frac{\sqrt{1-u^2} \sin(k+\phi)}{u \cos(k+\theta)} \sigma_1 + \frac{\sqrt{1-u^2} \cos(k+\phi)}{u \cos(k+\theta)} \sigma_2 + \tan(k+\theta) \sigma_3 \right) \right] \end{aligned} \quad (4.2)$$

$U(k)$ を (4.1) 式を使って表現するために , \mathbf{q} をうまく合うように選ぶ . つまり ,

$$\begin{aligned} u \cos(k+\theta) &= \cos q \\ \frac{\sqrt{1-u^2} \sin(k+\phi)}{u \cos(k+\theta)} &= -\hat{q}_1 \tan q \\ \frac{\sqrt{1-u^2} \cos(k+\phi)}{u \cos(k+\theta)} &= -\hat{q}_2 \tan q \\ \tan(k+\theta) &= -\hat{q}_3 \tan q \end{aligned}$$

とする . これを解くとまず $q(k)$ は ,

$$q(k) = \arccos \left[u \cos(k+\theta) \right] \quad (4.3)$$

$$= \arctan \left[\frac{1}{\cos(k+\theta)} \sqrt{\frac{1}{u^2} - \cos^2(k+\theta)} \right] \quad (4.4)$$

となる．ここで， $\arccos x$ と $\arctan x$ は $q(k)$ が $k \in [-\pi, \pi)$ において周期的かつ連続な関数として与えられるように適当な分枝をとることにする．さらに他の成分も

$$\begin{aligned}\hat{q}_1(k) &= -\frac{\sqrt{1-u^2}/u}{\sqrt{1/u^2 - \cos^2(k+\theta)}} \sin(k+\phi) \\ \hat{q}_2(k) &= -\frac{\sqrt{1-u^2}/u}{\sqrt{1/u^2 - \cos^2(k+\theta)}} \cos(k+\phi) \\ \hat{q}_3(k) &= -\frac{1}{\sqrt{1/u^2 - \cos^2(k+\theta)}} \sin(k+\theta)\end{aligned}\quad (4.5)$$

と定まる．以上より，3次元ベクトル

$$\mathbf{q}(k) = (q(k)\hat{q}_1(k), q(k)\hat{q}_2(k), q(k)\hat{q}_3(k)) \quad (4.6)$$

が定義できる．(4.1)式を使うことにより $U(k)$ を

$$U(k) = e^{-i\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{q}(k)} \quad (4.7)$$

と変形することができたことになる．

ステップ $n = 0, 1, 2, \dots$ を連続的な時間 $t \in [0, \infty)$ へと内挿し，定義しなおすと，

$$\hat{\Psi}_t(k) = e^{-it\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{q}(k)} \hat{\Psi}_0(k), \quad k \in [-\pi, \pi) \quad (4.8)$$

となる．これは， $\hbar = 1$ としたワイル方程式

$$i\frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}_t(k) = \mathcal{H}(\mathbf{q}(k)) \hat{\Psi}_t(k) \quad (4.9)$$

の解になっている．ハミルトニアンは (2.5) 式で与えられている．等式 (4.3)-(4.6) は，波数 $k \in [-\pi, \pi) \mapsto \mathbf{q} \in \mathbf{p}$ -空間への写像を定義している．この写像により，1次元量子ウォークの時間発展 (3.2) 式は，まさにワイル方程式 (4.9) へと変換されたことになる．

運動量 p でハミルトニアンが (2.5) 式の自由ワイル粒子の固有値問題は簡単に解くことが出来る [4]．固有値は $\lambda = \pm p$ ， $p = |\mathbf{p}|$ である．エネルギーと運動量に相当する固有関数は， \mathbf{p} の単位ベクトル $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}/p$ の関数として以下のように求まる．

$$\begin{aligned}\psi_+(\hat{\mathbf{p}}) &= \begin{pmatrix} \psi_+^{(1)}(\hat{\mathbf{p}}) \\ \psi_+^{(2)}(\hat{\mathbf{p}}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta_p/2) \\ \sin(\theta_p/2)e^{i\varphi_p} \end{pmatrix} \\ \psi_-(\hat{\mathbf{p}}) &= \begin{pmatrix} \psi_-^{(1)}(\hat{\mathbf{p}}) \\ \psi_-^{(2)}(\hat{\mathbf{p}}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin(\theta_p/2)e^{-i\varphi_p} \\ \cos(\theta_p/2) \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (4.10)$$

ここで運動量の極座標表示 $p_1 = p \sin \theta_p \cos \varphi_p$, $p_2 = p \sin \theta_p \sin \varphi_p$, $p_3 = p \cos \theta_p$ ，を用いた．これらの固有関数は正規直交系をなしている．

$$\begin{aligned}|\psi_+(\hat{\mathbf{p}})|^2 &= \psi_+^\dagger(\hat{\mathbf{p}})\psi_+(\hat{\mathbf{p}}) = 1 \\ |\psi_-(\hat{\mathbf{p}})|^2 &= \psi_-^\dagger(\hat{\mathbf{p}})\psi_-(\hat{\mathbf{p}}) = 1 \\ \psi_+^\dagger(\hat{\mathbf{p}})\psi_-(\hat{\mathbf{p}}) &= \psi_-^\dagger(\hat{\mathbf{p}})\psi_+(\hat{\mathbf{p}}) = 0\end{aligned}\quad (4.11)$$

以上より問題は, (4.3)-(4.6) で定義された非線形変換 $k \mapsto q \in p$ -空間 を調べることに帰着された.

4.2 運動量空間中の軌道状態

(4.3)-(4.5) で示されているように, $q_j(k), j = 1, 2, 3$ の全ての構成要素は $k \in [-\pi, \pi)$ において周期関数であり, $q(k)$ は3次元 p -空間においてパラメータを $k \in [-\pi, \pi)$ とする1パラメータ軌道を描く. 単位ベクトルを

$$\hat{e}_3 = \left(-u \cos(\phi - \theta), u \sin(\phi - \theta) \sqrt{1 - u^2} \right) \quad (4.12)$$

と定義すると, $q(k) \cdot \hat{e}_3 = 0$ となることが分かる. これは

$$\text{全ての } k \in [-\pi, \pi) \text{ に対して } q(k) \perp \hat{e}_3$$

ということである. この関係から軌道は原点を含む1つの平面に載っていて, その平面の法線ベクトルが \hat{e}_3 であることが分かる. この軌道平面を $\Pi(u, \theta, \phi)$ と表示することにする.

(4.3) 式において $\arccos x$ は主値をとればよく, 全ての $0 \leq u \leq 1$ なる u に対して, $0 \leq \arccos u \leq \pi/2$ となる. $u = 0$ ならば $\arccos u = \pi/2$, そして $u = 1$ ならば $\arccos u = 0$ である. 付録 A で説明するように, $q(k) = |q(k)|$ は $k = -\theta \pmod{2\pi}$ の時に最小値 $q_{\min} = \arccos u$ をとり, $k = -\pi - \theta \pmod{2\pi}$ の時に最大値 $q_{\max} = \pi - q_{\min}$ をとる. $k = -\pi/2 - \theta$ と $k = \pi/2 - \theta \pmod{2\pi}$ の時は $q(k) = \pi/2$ となる.

$$\begin{aligned} \hat{e}_1 &= \left(-\sin(\phi - \theta), -\cos(\phi - \theta), 0 \right) \\ \hat{e}_2 &= \left(\sqrt{1 - u^2} \cos(\phi - \theta), -\sqrt{1 - u^2} \sin(\phi - \theta), u \right) \end{aligned} \quad (4.13)$$

とすると, $(\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3)$ は p -空間で正規直交基底をなし, 軌道平面 $\Pi(u, \theta, \phi)$ は (\hat{e}_1, \hat{e}_2) -平面と等しい. 単位ベクトル \hat{e}_1 は $k_0 = -\theta \pmod{2\pi}$ とした $q(k_0)$ の「近日点」の方向を向き, この平面の角度 γ は $\hat{q}(k) = q(k)/|q(k)|$ とした

$$\cos \gamma = \hat{q}(k) \cdot \hat{e}_1$$

として定義される. これから

$$\cos \gamma = \frac{(\sqrt{1 - u^2}/u) \cos(k + \theta)}{\sqrt{1/u^2 - \cos^2(k + \theta)}} \quad (4.14)$$

$$\sin \gamma = -\frac{(1/u) \sin(k + \theta)}{\sqrt{1/u^2 - \cos^2(k + \theta)}} \quad (4.15)$$

を導くことができ, (4.4) 式と (4.14) 式を結びつけることにより軌道平面 $\Pi(u, \theta, \phi)$ 上の極座標平面 $(q, \gamma), 0 \leq q < \infty, \gamma \in [-\pi, \pi)$ の軌道方程式

$$\tan q = \frac{\sqrt{1 - u^2}}{u} \frac{1}{\cos \gamma} \quad (4.16)$$

を得ることが出来る．(4.3)-(4.6) を q と γ の関数として書き直すと

$$\begin{aligned} q_1 &= q\sqrt{1-u^2}\cos(\phi-\theta)\sin\gamma - q\sin(\phi-\theta)\cos\gamma \\ q_2 &= -q\sqrt{1-u^2}\sin(\phi-\theta)\sin\gamma - q\cos(\phi-\theta)\cos\gamma \\ q_3 &= qu\sin\gamma \end{aligned} \quad (4.17)$$

となる．これは q の3つの要素を， $\Pi(u, \theta, \phi)$ 平面上の極座標 (q, γ) を用いて表現したものである．

この軌道 $\{q(k); k \in [-\pi, \pi]\}$ が $SU(2)$ の3つのパラメータ u, θ, ϕ にどのように依存するかを調べた．軌道平面の直交方向 e_3 は(4.12)式で与えられている．図4.1のように， $u=0$ の時は z 方向を向き， u が0から1へと増加するとともに $(-\cos(\phi-\theta), \sin(\phi-\theta), 0)$ 方向へと傾き， (x, y) 平面へと横たわるようになる． $\arctan x$ は $x \geq 0$ において主値 $(0 \leq \arctan x < \pi/2)$ をとり， $x < 0$ で $(\pi/2, \pi)$ の値をとる．(4.16)式より

$$q = \arctan \left[\frac{\sqrt{1-u^2}}{u} \frac{1}{\cos\gamma} \right]$$

である．図4.1のように， $u=0$ のとき， $q \equiv \pi/2$ なので軌道は原点を中心とする半径 $\pi/2$ の円を描く． $-\pi/2 \leq \gamma \leq \pi/2$ のとき， $\cos\gamma \geq 0$ なので $u \rightarrow 1$ の極限では， $q \rightarrow 0$ となる． $-\pi \leq \gamma < -\pi/2$ と $\pi/2 < \gamma < \pi$ のときは， $q \rightarrow \pi$ となる． $u \in (0, 1)$ の間は軌道は歪んだ円を描く．傾いていく軌道平面に乗って軌道を眺めると，図4.2のように u の変化により軌道の形が変わっていき様子が分かる．

4.3 軌道に沿った線積分

期待値(3.7)式を計算するために， $[-\pi, \pi]$ の区間で k についての積分を行う．この積分は $\gamma \in [-\pi, \pi]$ の積分に相当するので，軌道に沿った線積分となる．そこで，積分変数を $k \rightarrow \gamma$ へと変えるためにヤコビアン $J = |dk/d\gamma|$ を導入する．簡単な計算により(付録A)

$$J = \frac{\sqrt{1-u^2}}{1-u^2\sin^2\gamma} \quad (4.18)$$

となる．これにより k の積分は，

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} f(k) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\gamma}{2\pi} \frac{\sqrt{1-u^2}}{1-u^2\sin^2\gamma} f(k(\gamma)) \quad (4.19)$$

となる．ここで $k(\gamma)$ は，(A.2)式と(A.3)式により決まる．さらに変数変換を

$$\gamma \rightarrow y \quad ; \quad y = u \sin\gamma \quad (4.20)$$

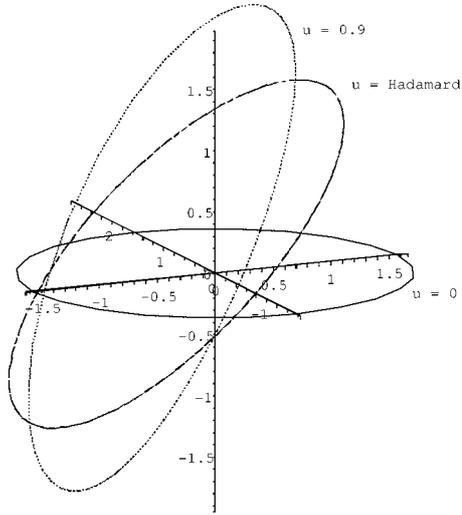


図 4.1: 軌道の u 依存性 . $\phi - \theta = 0$ とした . $u = 0, u = 1/\sqrt{2}$ (アダマール行列に対応), $u = 0.9$ の時 .

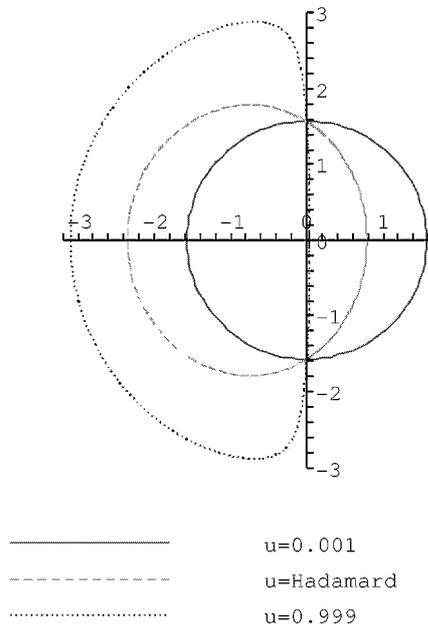


図 4.2: 軌道面上の極座標から見た軌道の u 依存性 . $u \simeq 0, u = 1/\sqrt{2}$ (アダマール行列に対応), $u \simeq 1$ の時 .

のように行くと (4.19) 式は

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} f(k) = 2 \int_{-u}^u \frac{dy}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{u^2 - y^2}} \frac{\sqrt{1 - u^2}}{1 - y^2} f(k(y))$$

となる．以上により今野関数 (3.8) を導くことが出来た．

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} f(k) = \int_{-u}^u dy \mu(y; u) f(k(y))$$

第5章 量子ウォークの極限定理

5.1 原点からスタートする量子ウォーク

$x = 0$ からスタートする量子ウォークの初期量子ビットを次のように定義する .

$$\Psi_0(x) = \delta(x) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Leftrightarrow \hat{\Psi}_0(k) = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

ここで $\alpha, \beta \in \mathbf{C}$ で $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ という条件がある . 初期波動関数 $\hat{\Psi}_0(k)$ を $\mathbf{p} = \mathbf{q}(k)$ であるハミルトニアン $\mathcal{H}(\mathbf{p})$ の固有関数 (4.10) の線形結合として表す .

$$\hat{\Psi}_0(k) = C_+(\hat{\mathbf{q}}(k))\psi_+(\hat{\mathbf{q}}(k)) + C_-(\hat{\mathbf{q}}(k))\psi_-(\hat{\mathbf{q}}(k)) \quad (5.1)$$

$C_+(\hat{\mathbf{p}})$ と $C_-(\hat{\mathbf{p}})$ は , $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$ の関数として与えられる (付録 B の (B.1) を参照) . $n = 0, 1, 2, \dots$ とすると (4.8) は

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_n(k) &= e^{-i\mathcal{H}(\mathbf{q}(k))n} \left\{ C_+(\hat{\mathbf{q}}(k))\psi_+(\hat{\mathbf{q}}(k)) + C_-(\hat{\mathbf{q}}(k))\psi_-(\hat{\mathbf{q}}(k)) \right\} \\ &= e^{-iq(k)n} C_+(\hat{\mathbf{q}}(k))\psi_+(\hat{\mathbf{q}}(k)) + e^{iq(k)n} C_-(\hat{\mathbf{q}}(k))\psi_-(\hat{\mathbf{q}}(k)) \quad (5.2) \end{aligned}$$

$\psi_{\pm}(\hat{\mathbf{p}})$ は固有値が $\lambda = \pm p$ である $\mathcal{H}(\mathbf{p})$ の固有関数である . $q(k)$ の絶対値 $q(k) = |q(k)|$ により時間依存性と初期量子ビット依存性は各々分けられている .

5.2 弱収束の定理

まず始めに (3.7) 式を考える . $f(x) = x^r, r = 0, 1, 2, \dots$, の場合だけ考えれば十分である . グリメットらによると [9] , (5.2) は

$$\begin{aligned} &\left(i \frac{d}{dk} \right)^r \hat{\Psi}_n(k) \\ &= \left(\frac{dq(k)}{dk} \right)^r e^{-iq(k)n} C_+(\hat{\mathbf{q}}(k))\psi_+(\hat{\mathbf{q}}(k))n^r \\ &+ \left(-\frac{dq(k)}{dk} \right)^r e^{iq(k)n} C_-(\hat{\mathbf{q}}(k))\psi_-(\hat{\mathbf{q}}(k))n^r + \mathcal{O}(n^{r-1}) \quad (5.3) \end{aligned}$$

となる．(3.7) 式に (5.2) 式と (5.3) 式を代入し正規直交性 (4.11) 式を使い極限 $n \rightarrow \infty$ をとる．[9] と (A.1) 式より

$$\begin{aligned} & \lim_{n \rightarrow \infty} \langle (X_n/n)^r \rangle \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \left\{ |C_+(\hat{q}(k))|^2 + (-1)^r |C_-(\hat{q}(k))|^2 \right\} \left(\frac{\sin(k+\theta)}{\sqrt{1/u^2 - \cos^2(k+\theta)}} \right)^r \end{aligned} \quad (5.4)$$

である．次に $k \rightarrow \gamma$ 写像を行う．(4.15), (4.19) と (B.2) より

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \langle (X_n/n)^{2m} \rangle &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\gamma}{2\pi} \frac{\sqrt{1-u^2}}{1-u^2 \sin^2 \gamma} (u \sin \gamma)^{2m} \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \langle (X_n/n)^{2m+1} \rangle &= - \left\{ (|\alpha|^2 - |\beta|^2) + \frac{\sqrt{1-u^2}}{u} (\alpha\beta^* e^{-i(\phi-\theta)} + \alpha^*\beta e^{i(\phi-\theta)}) \right\} \\ &\quad \times \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\gamma}{2\pi} \frac{\sqrt{1-u^2}}{1-u^2 \sin^2 \gamma} (u \sin \gamma)^{2m+2} \end{aligned}$$

を得る．ここで $m = 0, 1, 2, \dots$ である．最後に変数変換 (4.20) を行い (3.8) の表現を使うことにより結果は，

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \langle (X_n/n)^{2m} \rangle &= \int_{-u}^u dy \mu(y; u) y^{2m} \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \langle (X_n/n)^{2m+1} \rangle &= - \left\{ (|\alpha|^2 - |\beta|^2) + \frac{\sqrt{1-u^2}}{u} (\alpha\beta^* e^{-i(\phi-\theta)} + \alpha^*\beta e^{i(\phi-\theta)}) \right\} \\ &\quad \times \int_{-u}^u dy \mu(y; u) y^{2m+2} \end{aligned} \quad (5.5)$$

となる．以上で今野 [7, 8] により初めて示された弱収束の定理を導くことが出来た．

定理 X_n を時刻 n での 1 次元量子ウォークの位置とする．量子コインの振る舞いを定めるユニタリー行列を

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$$

とする． $a, b \in \mathbf{C}$, $|a|^2 + |b|^2 = 1$ である．初期状態を

$$\Psi_0(x) = \delta(x) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1, \quad \alpha, \beta \in \mathbf{C}$$

とする． \mathbf{Z} 上の全ての解析的関数を $f(x)$ とすると

$$\langle f(X_n/n) \rangle \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) \nu(y) \quad n \rightarrow \infty$$

となる． $\nu(y)$ は (3.10)-(3.9) で与えられている．

第6章 多状態への拡張

6.1 3状態の量子ウォーク模型

前章では、2状態量子ウォークの極限分布として今野分布が得られることを示した。ここでは、そのモデルを拡張して3つの状態を持つ量子ウォークとその極限分布を考えてみたい。

3状態量子ウォーク模型の定義も、基本的には2状態の時と同じものを使う。しかし2つ違いがある。1つは波動関数が

$$\begin{pmatrix} \Psi_n^{(1)}(x) \\ \Psi_n^{(2)}(x) \\ \Psi_n^{(3)}(x) \end{pmatrix}$$

と3つの状態を持つこと、もう1つはユニタリ行列が

$$U = SA$$

$$S = \begin{pmatrix} s_+ & 0 & 0 \\ 0 & s_0 & 0 \\ 0 & 0 & s_- \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix}$$

となることである。ここで s_0 演算子は、 $s_0\Psi_n(x) = \Psi_n(x)$ のように位置を動かさない演算子である。2状態でのアダマール行列のように、3状態では以下のグローバー行列がよく研究されている。

$$G = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 2 \\ 2 & 2 & -1 \end{pmatrix}$$

以上より3状態量子ウォーク模型は以下のように定義できる。

$$\begin{pmatrix} \Psi_{n+1}^{(1)}(x) \\ \Psi_{n+1}^{(2)}(x) \\ \Psi_{n+1}^{(3)}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a\Psi_n^{(1)}(x+1) + b\Psi_n^{(2)}(x+1) + c\Psi_n^{(3)}(x+1) \\ d\Psi_n^{(1)}(x) + e\Psi_n^{(2)}(x) + f\Psi_n^{(3)}(x) \\ g\Psi_n^{(1)}(x-1) + h\Psi_n^{(2)}(x-1) + i\Psi_n^{(3)}(x-1) \end{pmatrix} \quad (6.1)$$

6.2 3 状態量子ウォークの極限分布

現在のところ，一般のユニタリ行列での極限分布は求められていない．しかし前述のグローバール行列の場合では，乾，今野，瀬川により極限分布が求められている [10]．これは，グリメットの方法 [9] を用いて解いたものである．

(図 6.1, 図 6.2)

6.3 4 状態以上の場合

4 状態以降も，2,3 状態と同じようにモデル化することが出来る．しかし，固有値，固有関数を求めることが非常に困難になることから，特殊な場合を含めて分布関数の導出には成功していない．だが，数値シミュレーションならできるのでその結果をいくつか示す．いずれも，4 状態のグローバール行列を使ったモデルである (図 6.3, 図 6.4 を参照)．

$$\begin{pmatrix} \Psi_{n+1}^{(1)}(x) \\ \Psi_{n+1}^{(2)}(x) \\ \Psi_{n+1}^{(3)}(x) \\ \Psi_{n+1}^{(4)}(x) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\Psi_n^{(1)}(x+2) + \Psi_n^{(2)}(x+2) + \Psi_n^{(3)}(x+2) + \Psi_n^{(4)}(x+2) \\ \Psi_n^{(1)}(x+1) - \Psi_n^{(2)}(x+1) + \Psi_n^{(3)}(x+1) + \Psi_n^{(4)}(x+1) \\ \Psi_n^{(1)}(x-1) + \Psi_n^{(2)}(x-1) - \Psi_n^{(3)}(x-1) + \Psi_n^{(4)}(x-1) \\ \Psi_n^{(1)}(x-2) + \Psi_n^{(2)}(x-2) + \Psi_n^{(3)}(x-2) - \Psi_n^{(4)}(x-2) \end{pmatrix}$$

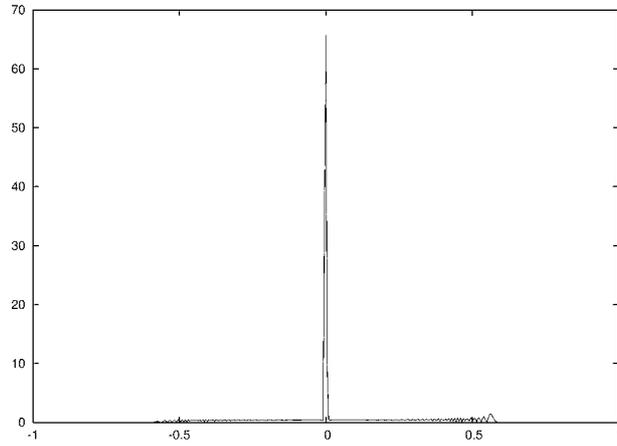


図 6.1: 初期状態 $= {}^t(1 \ 1 \ \sqrt{2})/\sqrt{6}$ の時の 3 状態量子ウォーク . ユニタリ行列はグローバール行列 . 非対称の形をしている .

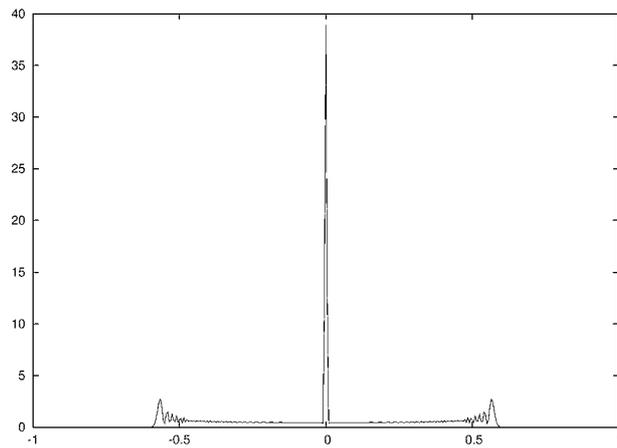


図 6.2: 初期状態 $= {}^t(1 \ i \ 1)/\sqrt{3}$ の時 . 対称な形をしている .

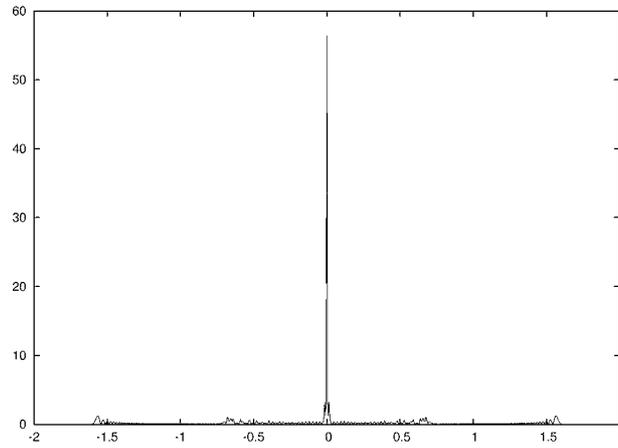


図 6.3: 初期状態 $= {}^t(1 \ i \ i \ 1)/2$ の時の 4 状態量子ウォーク . 対称な形をしている .

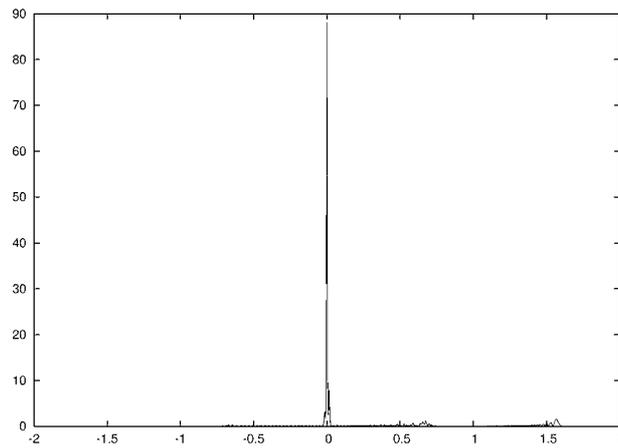


図 6.4: 初期状態 $= {}^t(1 \ 1 \ 1 \ i)/2$ の時 . 非対称な形をしている .

第7章 今後の展望

まず理論面での展望として、3 状態以降での量子ウォークモデルの極限分布を求める問題がある。いまだに分かっていないが、この論文で行ったワイル方程式を使う方法を応用して、3 状態以降も解けるかもしれない。

また、量子ウォークを行う粒子の数を増やす拡張方法も考えられる。こちらの方の研究は、まだ多く行われていないので今後の発展が期待される。

一方、実験・応用面での展望として、量子ウォークの現象を実験で確かめられるか、という問題がある。これには、光子の偏光を利用した実験が提案されている [11]。さらに、非常に興味深いことに、強相関電子系におけるランダウ-ツェナー転移が、反射壁を持った 1 次元半無限量子ウォークへと写像されることが証明された [12]。今後さらに物理現象と量子ウォークとの関連が明らかにされるかもしれない。

謝辞

まず私の指導教官である香取眞理先生には、研究の進め方から、論文へのアドバイス、発表の仕方などたくさんのことを教えていただきました。深く感謝しております。横浜国立大学工学部の今野紀雄先生からは、研究の初めからご指導を受け、また最新の研究についての報告など貴重なご意見の数々をいただきました。大変感謝しております。また、中野徹先生と松下眞先生には、審査及び発表会で大変お世話になりました。ありがとうございました。最後に、プログラムなどの技術面で私を助けて下さった、香取研究室の宮崎玄洋君と同じ部屋で研究をしている中野研究室のみなさんにも大変お世話になりました。

以上の方々とその他私を支えて下さった、たくさんの方々には心から感謝しております。

付 録 A 軌道の様子とヤコビアン の計算

$q(k)$ の簡単な記述について考える . (4.3) より

$$(i) \quad q(k) = \pi - \arccos u \searrow \frac{\pi}{2} \searrow \arccos u \quad k + \theta = -\pi \nearrow -\frac{\pi}{2} \nearrow 0 \quad \text{の時}$$

$$(ii) \quad q(k) = \arccos u \nearrow \frac{\pi}{2} \nearrow \pi - \arccos u \quad k + \theta = 0 \nearrow \frac{\pi}{2} \nearrow \pi \quad \text{の時}$$

となることが分かる . ここで , $x = a \nearrow b$ とは変数 x が a から b へと単調増加することを意味する . 同様に $x = a \searrow b$ は変数 x が a から b へと単調減少することを表す . $-\pi \leq k + \theta \leq 0$ の時 $dq(k)/dk \leq 0$ で , $0 \leq k + \theta < \pi$ の時 $dq(k)/dk \geq 0$ である . 以上のことと一般的な公式 $(d/dx) \arccos x = \mp 1/\sqrt{1-x^2}$ により次の導関数を定義できる .

$$\frac{dq(k)}{dk} = \frac{\sin(k + \theta)}{\sqrt{1/u^2 - \cos^2(k + \theta)}} \quad (\text{A.1})$$

式 (4.3)-(4.5) は ,

$$q(-\pi - \theta) = q_{\max}(\sin(\phi - \theta), \cos(\phi - \theta), 0)$$

$$q(-\pi/2 - \theta) = \frac{\pi}{2}(\sqrt{1-u^2} \cos(\phi - \theta), -\sqrt{1-u^2} \sin(\phi - \theta), u)$$

$$q(-\theta) = -q_{\min}(\sin(\phi - \theta), \cos(\phi - \theta), 0)$$

$$q(\pi/2 - \theta) = \frac{\pi}{2}(-\sqrt{1-u^2} \cos(\phi - \theta), \sqrt{1-u^2} \sin(\phi - \theta), -u)$$

を与える . ここで , $q_{\min} = \arccos u$ と $q_{\max} = \pi - q_{\min}$ である . (4.14) と (4.15) の関係は

$$k + \theta = -\pi \quad \Leftrightarrow \quad \gamma = -\pi$$

$$k + \theta = -\pi/2 \quad \Leftrightarrow \quad \gamma = \pi/2$$

$$k + \theta = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \gamma = 0$$

$$k + \theta = \pi/2 \quad \Leftrightarrow \quad \gamma = -\pi/2$$

を意味している . またこれは逆にすることも出来て ,

$$\sin(k + \theta) = -\frac{(\sqrt{1-u^2}/u) \sin \gamma}{\sqrt{(1-u^2)/u^2 + \cos^2 \gamma}} \quad (\text{A.2})$$

$$\cos(k + \theta) = \frac{(1/u) \cos \gamma}{\sqrt{(1-u^2)/u^2 + \cos^2 \gamma}} \quad (\text{A.3})$$

となる . (A.3) の両辺を微分すると

$$-\sin(k + \theta)dk = \frac{d}{d\gamma} \left[\frac{(1/u) \cos \gamma}{\sqrt{(1-u^2)/u^2 + \cos^2 \gamma}} \right] d\gamma$$

となるので (A.2) を使い

$$\frac{d}{d\gamma} \left[\frac{(1/u) \cos \gamma}{\sqrt{(1-u^2)/u^2 + \cos^2 \gamma}} \right] = \sin(k + \theta) \frac{\sqrt{1-u^2}}{1-u^2 \sin^2 \gamma}$$

を得ることが出来る . 以上よりヤコビアン $J = |dk/d\gamma|$ を (4.18) と決めることが出来た .

付録B 初期状態依存性

2個の状態を持つ単位ベクトル

$$\phi_0 = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad \alpha, \beta \in \mathbf{C}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$$

を考える．これは $\mathcal{H}(\mathbf{p}) = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$ とした2つの固有関数 (4.10) 式の線形結合として表すことができる．

$$\phi_0 = C_+(\hat{\mathbf{p}})\psi_+(\hat{\mathbf{p}}) + C_-(\hat{\mathbf{p}})\psi_-(\hat{\mathbf{p}})$$

ここで正規直交性 (4.11) より

$$\begin{aligned} C_+(\hat{\mathbf{p}}) &= \psi_+^\dagger(\hat{\mathbf{p}})\phi_0 \\ &= \alpha \cos \frac{\theta_p}{2} + \beta \sin \frac{\theta_p}{2} e^{-i\varphi_p} \\ C_-(\hat{\mathbf{p}}) &= \psi_-^\dagger(\hat{\mathbf{p}})\phi_0 \\ &= -\alpha \sin \frac{\theta_p}{2} e^{i\varphi_p} + \beta \cos \frac{\theta_p}{2} \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

である．さらに (4.17) 式で与えられている $\hat{\mathbf{p}} \Rightarrow \hat{\mathbf{q}}(\gamma)$ 変換を行う．

$$\hat{p}_1 \pm i\hat{p}_2 \Rightarrow \hat{q}_1 \pm i\hat{q}_2 = \left(\sqrt{1-u^2} \sin \gamma \mp i \cos \gamma \right) e^{\mp i(\phi-\theta)}$$

なので先程の式は

$$\begin{aligned} |C_\pm(\hat{\mathbf{q}}(\gamma))|^2 &= \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \left\{ (|\alpha|^2 - |\beta|^2) + \frac{\sqrt{1-u^2}}{u} (\alpha\beta^* e^{-i(\phi-\theta)} + \alpha^*\beta e^{i(\phi-\theta)}) \right\} u \sin \gamma \\ &\quad \mp \frac{1}{2} i (\alpha\beta^* e^{-i(\phi-\theta)} - \alpha^*\beta e^{i(\phi-\theta)}) \cos \gamma \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

となる．

参考文献

- [1] 西野哲郎, 量子コンピュータ入門, 東京電機大学出版局 (1997).
- [2] 西野哲郎, 量子コンピュータの理論, 培風館 (2002).
- [3] M.Katori, S.Fujino, and N.Konno, Phys. Rev. A **72**, 012316 (2005)
- [4] 西島和彦, 相対論的量子力学, 培風館 (1973).
- [5] 今野紀雄, 数理科学 No. 492, PP. 37-44, (2004).
- [6] J.Kempe, Contemp. Phys. **44**, 307 (2003).
- [7] N.Konno, Quantum Inf. Process. **1**, 345 (2002).
- [8] N.Konno, J.Math. Soc. Jpn, **57**, 1179 (2005).
- [9] G.Grimmett, S.Janson, and P.F.Scudo, Phys. Rev. E **69**, 026119 (2004).
- [10] N.Inui, N.Konno and E.Segawa, Phys. Rev. E **72**, 056112 (2005).
- [11] D.Bouwmeester, I.Marzoli, G.P.Karman, W.Schleich, and J.P.Woerdman, Phys. Rev. A **61**, 013410 (1999).
- [12] T.Oka, N.Konno, R.Arita, and H.Aoki, Phys. Rev. Lett. **94**, 100602 (2005).