量子ランダムウォーク概論

研究グループ　大谷　諭
武田　聡
伊藤　塊

序章

『量子ランダムウォーク』について触れてみよう。
ところで、まずは、『量子ウォーク・量子ランダムウォーク』、とはなにか？

古典ランダムウォーク[Random　Walk]

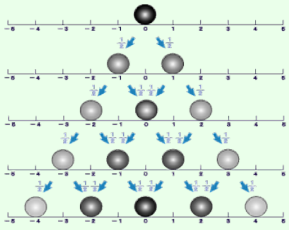
一般によく知られた、いわゆる「ランダムウォーク(酔歩)」が、これ。
力学を量子力学へと拡張したように、ランダムウォークも量子版へ拡張することを考えてみる。

量子ウォーク[Quantum　(Random)　Walk]
(量子ランダムウォーク)

ということで、上で触れた拡張版。現在も研究は続行中で、実のところかなりの部分がまだ未知だったりする。

このパネルでは、この量子ウォークの入門編として、基本的な部分について、少し数式やグラフなども交えて、触れてみよう。

第1段階　ランダムウォーク[Random　Walk]



まずは基本からということで、古典のランダムウォークを押さえておこう。単純化のため、今いる位置から、等確率で、左右どちらかに一歩だけ、しかも必ず移動する、という場合を考える。

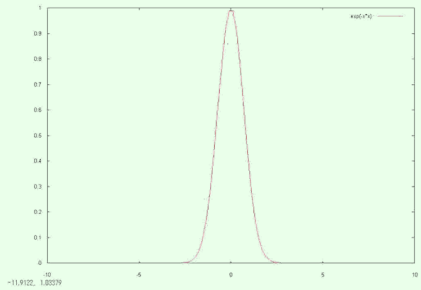
右図の通り、歩数を重ねるに従って、左右に対称に広がって行き、各点の到達確率は、ガウス分布と呼ばれる形に、分布することになる。

分布の計算式は次の通り。

$$P(x) = \exp[-x^2]$$

この場合は、各点の係数は、「パスカルの三角形」のように、二項係数で導くことができる。

グラフは右図のとおり、中央にはっきりと頂点ができる。

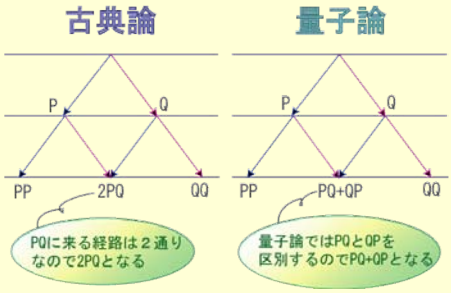


第2段階　量子ウォーク[Quantum　Walk]

次いで、本題である量子ウォークについて。
こちらも、条件は先に書いたランダムウォークと同じではあるが、量子化されたものを扱う。

これも、基本的な見た目は、ランダムウォークと同じ。
但し、中央付近に違いがある。

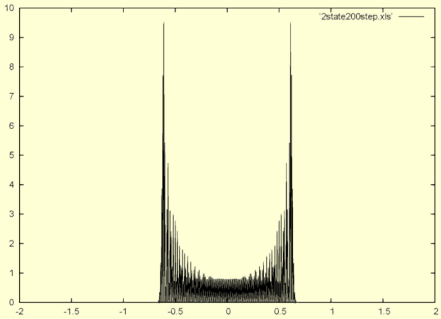
右の図を見てもらえば、すぐに分かることではあるが、中央の、左右から集まってきている点で、項の足し算が残っているのが分かる。
これは、一歩前からの影響を計算する際のP・Qが、ともに行列なため。行列においては、PQ≠QPが基本であることはよく知られている。



また、グラフを見ると、右のように古典とは全く異なり、中央付近には頂点を持たない。

右の図は、左右に1ずつという上の条件で、200ステップした時に、ランダムウォーカーがどこにくるか、という分布の図。

古典論でのランダムウォークでは、前段階にあるグラフのように中央に頂点が来たが、量子版は見ての通り、左右の端にピークが来ている。



第3段階　経路Ξと、存在確率

量子ウォークの、各点における存在確率は次の計算式より求められる。

$$P(n,k) = (\Xi\varphi)^* \cdot (\Xi\varphi)$$

量子力学における $P = \Psi^* \cdot \Psi$　波動関数の絶対値が確率になるのと、理屈は同じ。
ここで、Pはn歩目にkにいる存在確率、φは初期キュービット(qubit、Quantum　BIT)と呼ばれるもので、力学でいう初期条件。
Ξは、その点までの、量子ウォークの各経路ごとに決まる行列である。
φは初期条件なので、こちらで任意に調整ができる。従って、Ξの変化の様子がわかれば、任意のφに対してPを計算でき、全容がつかめる。
ここでは、

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

と一般形(特定の数字でない)を用いて、n＋1歩目に、kにいる確率がどのような影響を受けるのかを計算してみる。

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

$$\begin{pmatrix} a_{n+1}(k) & b_{n+1}(k) \\ c_{n+1}(k) & d_{n+1}(k) \end{pmatrix} = P\begin{pmatrix} a_n(k+1) & b_n(k+1) \\ c_n(k+1) & d_n(k+1) \end{pmatrix} + Q\begin{pmatrix} a_n(k-1) & b_n(k-1) \\ c_n(k-1) & d_n(k-1) \end{pmatrix}$$

このような式が得られる。
この式は、直前の状態から、次の状態を一つ一つ計算するが、その際に、直前の状態がどうなっていようと、代入すれば必ず、次の状態を帰納的に導ける。
次の状態が、一つ前の状態がどんな影響を与えるかが、この式には現れてくる。

各成分の一般形を知るための、基本となる式である。

第4段階　アダマール行列

上の計算式の、最も簡単な例を計算してみよう。
量子ウォークは、通常左右対称にはなりにくいが、初期キュービットとの兼ね合いで、対称になる特殊な例として、アダマールウォーク(Hadamard walk)というものがある(実は前段階のP,Qや、グラフはこれだったりする)。
これで、試しに経路Ξを計算してみよう。
1歩目は…、

- $k = -1$

$$P = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- $k = 1$

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

と、古典と同じようになる(厳密には違うのだが)。
これが2歩目からは、前段階の最後の計算式に乗ってくる。

- $k = -2$

$$P \cdot P = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- $k = 2$

$$Q \cdot Q = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

- $k = 0$

$$P \cdot Q + Q \cdot P = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

この時点で既に、最初は上下に分かれていた(上下どちらかは0だった)行列は、もう各成分とも大きさを持ち始めている。グラフが左右に割れていく、その前兆である。

おわりに

数式などもあって、また多少煩雑ではあるが、具体的な計算も含めての入門としては、これで大方に触れている。

最後に、もう少しばかり、今度は少し先の発展について触れておこう。

第3段階の式は、直前が分かれば～、という帰納的なものであったが、当然これは、式変形を続ければ、各成分毎の漸化式へと変形することができ、より直接的に状態を計算することができる。つまりは、より解析的に、量子ウォークを理解できるようになるだろう。

すぐ上のグラフは、2状態(左と右)ではああなるが、3状態・4状態と状態数を増やしていくと、ピークが3つ4つと増えていき、多状態は現状では未知の領域である。まだまだ基本的なこと以外は、現在進行形で研究がされている。

また、量子レベルでの運動の解析は、これが進むと量子コンピューターの基礎理論などへの発展・応用が……。

などなど、まだまだ最先端で研究が進んでいる分野であることを、ここで言及しておこう。