

Wigner formula of rotation matrices and quantum walks

中央大学大学院理工学研究科 宮崎玄洋 (MIYAZAKI Takahiro)
中央大学理工学部 香取眞理 (KATORI Makoto)
横浜国立大学大学院工学研究院 今野紀雄 (KONNO Norio)

量子的な拡散過程のモデルとして導入された量子ウォーク模型は、量子情報理論などとも関係して注目されている。最近、今野は 1 次元上の 2 状態量子ウォーク模型に対して、量子ウォークの擬速度分布のモーメント収束定理を証明した。この極限分布は、古典的なランダム・ウォークで見られるガウス分布とは対照的で、中心 (出発点) 近くでの値が小さい逆釣鐘状の関数 (今野の密度関数) で表される。本講演では、多状態 ($(2j+1)$ 状態) に拡張した 1 次元量子ウォーク模型を提案し、一般にその弱極限分布が、今野の密度関数を適当にスケール変換したものの重ね合わせで与えられることを示す。計算機シミュレーションの結果との比較も報告する。

1 Introduction: 古典系から量子系へ

1.1 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 $1-q$ で右を向いているものとする。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 $1-p$ で裏がでるものとする。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、その向きが左向き (右向き) である確率を $P_n^{(L)}(x)$ ($P_n^{(R)}(x)$) と書くことにする。この確率はフーリエ積分を用いて

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

と与えられる。但しここで、 $i = \sqrt{-1}$ であり、

$$W(k) = \begin{pmatrix} e^{ik} & 0 \\ 0 & e^{-ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1-p & p \\ p & 1-p \end{pmatrix} \quad (2)$$

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、 $P_n^{(L)}(x) = P_n^{(R)}(x) \equiv P_n(x)/2$ 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。これは、左右対称な通常のランダムウォークで見られる 2 項分布に他ならない。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。これは中心極限定理の典型的な例である。

1.2 1次元量子ウォーク模型

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。(1)式の左辺を2次元ベクトルから次のような2状態の波動関数へと置き換える。これは時刻 t で $x \in \mathbf{Z}$ にいるウォーカーの量子状態を表すものである。

$$\Psi(x, t) = \begin{pmatrix} \Psi_{1/2}(x, t) \\ \Psi_{-1/2}(x, t) \end{pmatrix} \quad (3)$$

次に(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。但し $\alpha, \beta \in \mathbf{C}$ (複素数全体) であり、 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ とする。さらに遷移行列 $V(k)$ を

$$V(k) = S(k)A = \begin{pmatrix} e^{ik} & 0 \\ 0 & e^{-ik} \end{pmatrix} A \quad (4)$$

で置き換える。ここで A は 2×2 のユニタリ行列 $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in \mathbf{U}(2)$ で、量子コインの振る舞いを表す。次に波数 $k \in [-\pi, \pi)$ を使い波動関数を

$$\hat{\Psi}(k, t) = \begin{pmatrix} \hat{\Psi}_{1/2}(k, t) \\ \hat{\Psi}_{-1/2}(k, t) \end{pmatrix}$$

と表すと、波数空間では

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}(k, t+1) &= V(k)\hat{\Psi}(k, t) \\ &= (V(k))^{t+1}\hat{\Psi}(k, 0) \end{aligned}$$

となる。実空間と波数空間との関係は

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

とフーリエ変換で互いに変換されるものである。実空間での1ステップは、この変換により

$$\Psi(x, t+1) = \begin{pmatrix} a\Psi_{1/2}(x+1, t) + b\Psi_{-1/2}(x+1, t) \\ c\Psi_{1/2}(x-1, t) + d\Psi_{-1/2}(x-1, t) \end{pmatrix} \quad (5)$$

と定められる。

時刻 t での実空間で粒子の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する。

$$\begin{aligned} P(x, t) &= |\Psi(x, t)|^2 = [\Psi(x, t)]^\dagger \Psi(x, t) \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk'}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{i(k-k')x} \left\{ [\hat{\Psi}(k', 0)]^\dagger ([V(k')]^\dagger)^n \right\} \left\{ (V(k))^n \hat{\Psi}(k, 0) \right\} \end{aligned} \quad (6)$$

ここで $[\Psi(x, t)]^\dagger$ は $\Psi(x, t)$ のエルミート共役である。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、(6) 式で定められる確率分布には差が生じないので、行列 A として $SU(2)$ (行列式の値が 1 の 2×2 のユニタリ行列) の元のみを考えることにする。

$SU(2)$ は一般に次のように書くことができる。

$$\begin{aligned} SU(2) &= \left\{ A = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}; a, b \in \mathbf{C}, |a|^2 + |b|^2 = 1 \right\} \\ &= \left\{ A = \begin{pmatrix} ue^{i\theta} & \sqrt{1-u^2}e^{i\phi} \\ -\sqrt{1-u^2}e^{-i\phi} & ue^{-i\theta} \end{pmatrix}; u \in [0, 1], \theta, \phi \in [-\pi, \pi) \right\} \end{aligned} \quad (7)$$

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) を座標とする実 3 次元のパラメータ空間を成している。

X_t を時刻 $t = 0, 1, 2, \dots$ での量子ウォークの位置とすると、 X_t の r -次のモーメント ($r = 0, 1, 2, \dots$) は次のように計算される。

$$\begin{aligned} \langle (X_t)^r \rangle &\equiv \sum_{x \in \mathbf{Z}} x^r P(x, t) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} [\hat{\Psi}(k, t)]^\dagger \left(i \frac{d}{dk} \right)^r \hat{\Psi}(k, t) \end{aligned}$$

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、 $V(k)$ がユニタリで、 t ステップ後に観測出来る位置 $x \in \mathbf{Z}$ での確率が (6) 式で与えられる。 $V(k)$ のユニタリ性により、 $V(k)$ の全ての固有値 λ が $|\lambda| = 1$ となることが結論される。このことから量子ウォークにおいて、波動関数 $\Psi(x, t)$ と確率 $P(x, t)$ は $t \rightarrow \infty$ 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・ウォークと全く対照的である。1.1 項で見たように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ガウス分布に収束するのであった。

しかし最近分野は、量子ウォークの擬速度 X_t/t の任意のモーメントが $t \rightarrow \infty$ の長時間極限において収束することを証明した。つまり擬速度の分布は $t \rightarrow \infty$ でモーメント収束 (弱収束) する。その極限分布は下に示すように、今までにない新しい確率密度関数で与えられている [5, 9]。任意の $r = 0, 1, 2, \dots$ に対して、

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left\langle \left(\frac{X_t}{t} \right)^r \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dy y^r \nu(y)$$

但しここで、 $\nu(y)$ は

$$\mu(x; s) = \frac{\sqrt{1-s^2}}{\pi(1-x^2)\sqrt{s^2-x^2}} \mathbf{1}_{\{|x| < |s|\}} \quad (8)$$

と

$$\mathcal{I}(y; a, b; \alpha, \beta) = 1 - \left(|\alpha|^2 - |\beta|^2 + \frac{\alpha\beta^*ab^* + \alpha^*\beta a^*b}{|a|^2} \right) y \quad (9)$$

を用いて

$$\nu(y) = \mu(y; |a|) \mathcal{I}(y; a, b; \alpha, \beta) \quad (10)$$

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。

2 回転行列のウィグナー公式

実 3 次元空間 \mathbf{R}^3 のどのような回転もオイラー角と呼ばれる 3 つの回転角 α, β, γ で特徴付けられる。量子力学では、オイラー角 α, β, γ の回転は演算子の形で次のように与えられる。

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-i\alpha\hat{J}_3} e^{-i\beta\hat{J}_2} e^{-i\gamma\hat{J}_3} \quad (11)$$

ここで $\hat{\mathbf{J}} = (\hat{J}_1, \hat{J}_2, \hat{J}_3)$ は角運動量演算子ベクトルで、その要素はリー代数 $\mathfrak{su}(2)$ の交換関係

$$[\hat{J}_k, \hat{J}_\ell] = i \sum_{m=1}^3 \varepsilon_{k\ell m} \hat{J}_m, \quad k, \ell = 1, 2, 3 \quad (12)$$

を満たす。ここで $\varepsilon_{k\ell m}$ は 3 階の完全反対称テンソルである。ケットベクトル $|j, m\rangle$, $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$, $m = -j, -j+1, \dots, j$ は

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |j, m\rangle &= j(j+1) |j, m\rangle \\ \hat{J}_3 |j, m\rangle &= m |j, m\rangle \end{aligned}$$

を満たすように定めた $\hat{J}^2 = \sum_{k=1}^3 \hat{J}_k^2$ と \hat{J}_3 の固有状態を意味するものとする。(本論文では $\hbar = 1$ としている.)

半整数 j の値を固定して $m, m' = -j, -j+1, \dots, j$ に対して

$$R_{mm'}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = \langle j, m | \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) | j, m' \rangle \quad (13)$$

とする。これを計算すると

$$r_{mm'}^{(j)}(\beta) = \sum_{\ell} \Gamma(j, m, m', \ell) \left(\cos \frac{\beta}{2} \right)^{2j+m-m'-2\ell} \left(\sin \frac{\beta}{2} \right)^{2\ell+m'-m} \quad (14)$$

$$\Gamma(j, m, m', \ell) = (-1)^\ell \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{(j-m'-\ell)!(j+m-\ell)! \ell! (\ell+m'-m)!} \quad (15)$$

として

$$R_{mm'}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-i\alpha m} r_{mm'}^{(j)}(\beta) e^{-i\gamma m'} \quad (16)$$

となる (ウィグナーの公式) [1, 2]。但し (14) 式の中で和 \sum_{ℓ} は階乗の指数が正または 0 (但し $0! = 1$ とする) になるようなすべての ℓ について和をとる。(16) 式を成分とする $(2j+1) \times (2j+1)$ の行列を考えることにする。

$$R^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = (R_{mm'}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma))$$

このユニタリ行列は回転群 $SO(3)$ の $(2j+1)$ -次元既約表現を与え、回転行列と呼ばれている [1, 2]。本論文で、行列やベクトルの成分を m, m' を指標として書くとき、添え字の m と m' は、 j から $-j$ まで大きい値から小さい値に 1 つずつ減る順番に並べて記すことにする。Appendix A において、 $j = 1/2, 1, 3/2$ について行列 $r^{(j)}(\beta) = (r_{mm'}^{(j)}(\beta))$ の陽な表示を与えておくことにする。

3 $(2j+1)$ -成分量子ウォーク模型

標準 1 次元量子ウォーク模型は 2 成分の量子ビットを持つウォーカーに 2 次元ユニタリ行列を作用させるものとして 1.2 項のように定義された。ここでは、この標準模型を拡張することによって得られる半整数 $j = 1/2, 1, 3/2, \dots$ で指標される 1 次元格子 \mathbf{Z} 上の量子ウォーク模型の族を導入する。

この模型のウォーカーは次のような $(2j+1)$ -成分量子ビットを持つものとする。以下の議論を簡単にするため、1.2 項と同様に $t = 0$ で原点にいるものとする。

$$\phi_0^{(j)} = \begin{pmatrix} q_j \\ q_{j-1} \\ \vdots \\ q_{-j+1} \\ q_{-j} \end{pmatrix} \quad \text{但し} \quad \sum_{m=-j}^j |q_m|^2 = 1 \quad (17)$$

それぞれの時刻で量子ビットの成分は、前節で述べたウィグナーの公式によって得られる $(2j+1)$ -次元ユニタリ行列 $R^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)$ によって混ぜられ、 \mathbf{Z} 上の $(2j+1)$ -個の点に飛び移る。図 1 に $j = 1/2, 1, 3/2, 2$ それぞれの場合に、ホップ

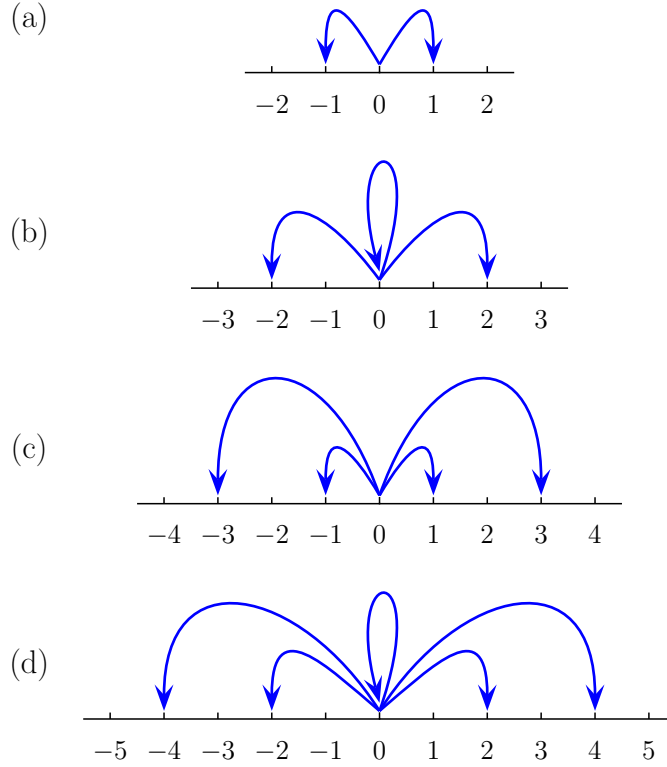


図1 量子ウォークの基本ホッピングの様子. (a) $j = 1/2$ (2成分模型), (b) $j = 1$ (3成分模型), (c) $j = 3/2$ (4成分模型), (d) $j = 2$ (5成分模型). (b) と (d) で原点における環状の矢印で示されているように, $(2j + 1)$ が奇数のとき, ウォーカーは1ステップの間で同じ場所にとどまることが出来る.

ングの様子を示した. (後述の (24) 式も参照せよ.) ここで注意すべきなのは j が整数 ($(2j + 1)$ が奇数) のとき, ウォーカーは1ステップの間で同じ点にとどまることが出来るということである.

1節で述べたように, 先行研究の論文 [11] では2成分模型の弱収束定理が報告されている. その模型は $SU(2)$ の行列

$$A = \begin{pmatrix} ue^{i\theta} & \sqrt{1-u^2}e^{i\phi} \\ -\sqrt{1-u^2}e^{-i\phi} & ue^{-i\theta} \end{pmatrix}, \quad u \in [-1, 1], \theta, \phi \in [-\pi, \pi] \quad (18)$$

で表現される量子コインによって作られ, \mathbb{Z} 上の空間シフト演算子は波数空間で次の行列によって表現された.

$$S(k) = \begin{pmatrix} e^{ik} & 0 \\ 0 & e^{-ik} \end{pmatrix} \quad (19)$$

これらの行列と, Appendix A の行列 (A1) を (16) 式で $j = 1/2$ としたものに代入して得られる 2×2 行列と比較すると,

$$\begin{aligned} A &= R^{(1/2)}(\pi - \theta - \phi, 2\arccos(u), -\pi - \theta + \phi) \\ S(k) &= R^{(1/2)}(-2k, 0, 0) \end{aligned} \quad (20)$$

であることに気が付く. すなわち, これらの行列が $R^{(1/2)}(\alpha, \beta, \gamma)$ の特別な場合になっているのである.

群論の視点から考えると, 次のようなことが分かる. 論文 [11] では $SU(2) \simeq S^3 (\equiv \mathbb{R}^4$ の中の3次元単位球表面) というものを使っている. そして量子コイン A は群空間の次元3に一致する3つの実変数 u, θ, ϕ (ケーリー・クラインパラメータ) によって表される. 他方, 量子コイン A を回転群 $SO(3)$ の2次元表現と見ることにも出来る. したがって, 3つのケーリー・クラインパラメータは3次元実空間 \mathbb{R}^3 の回転のオイラー角と同一視出来るのである.

この事実から回転群の $(2j + 1)$ -次元表現を量子ビット (17) の $(2j + 1)$ -成分を混ぜる量子コインとして採用することにした. 空間シフト行列は $S^{(j)}(k) = R^{(j)}(-2k, 0, 0) = \text{diag}(e^{-2ijk}, e^{-2i(j-1)k}, \dots, e^{2ijk})$ で与えられる. (diag は対角行列を表す.)

時刻 $t = 0$ でウォーカーは原点に位置している、と仮定した。すると波数空間では、時刻 t のウォーカーの $(2j + 1)$ -成分波動関数は

$$\begin{aligned} V^{(j)}(k) &= V^{(j)}(k; \alpha, \beta, \gamma) \\ &\equiv S^{(j)}(k)R^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) \end{aligned} \quad (21)$$

として

$$\hat{\Psi}^{(j)}(k, t) = (V^{(j)}(k))^t \phi_0^{(j)}, \quad t = 0, 1, 2, \dots \quad (22)$$

で与えられる。フーリエ変換

$$\begin{aligned} \Psi^{(j)}(x, t) &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \hat{\Psi}^{(j)}(k, t) e^{ikx} \\ \hat{\Psi}^{(j)}(k, t) &= \sum_{x \in \mathbf{Z}} \Psi^{(j)}(x, t) e^{-ikx} \end{aligned} \quad (23)$$

をすることにより、実空間 \mathbf{Z} での時間発展は

$$\Psi_m^{(j)}(x, t+1) = \sum_{m'=-j}^j R_{mm'}^{(j)} \Psi_{m'}^{(j)}(x+2m, t), \quad t = 0, 1, 2, \dots \quad (24)$$

と得られる。 $\Psi_m^{(j)}(x, t)$ は $(2j + 1)$ -成分波動関数 $\Psi^{(j)}(x, t)$ の第 m 番目の成分を意味している。

$X_t^{(j)}$ を時刻 t でのウォーカーの位置とする。時刻 t でウォーカーが \mathbf{Z} 上の x にいるのを観測する確率は

$$\text{Prob}(X_t^{(j)} = x) = P(x, t) = [\Psi^{(j)}(x, t)]^\dagger \Psi^{(j)}(x, t) \quad (25)$$

であるものとする。論文 [11] にも示されているように $X_t^{(j)}$ の r -次モーメントは

$$\begin{aligned} \langle (X_t^{(j)})^r \rangle &\equiv \sum_{x \in \mathbf{Z}} x^r P(x, t) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} [\hat{\Psi}^{(j)}(k, t)]^\dagger \left(i \frac{d}{dk} \right)^r \hat{\Psi}^{(j)}(k, t), \quad r = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (26)$$

で与えられる。これらの式によって、分布やモーメントが与えられる確率過程を $(2j + 1)$ -成分量子ウォーク模型と定義することにする [16]。上の式で $j = 1/2$ とすると 2 状態の標準模型に帰着される。この場合は (24) 式は (5) 式となる。

4 量子ウォークの極限分布

4.1 時間発展行列の分解

以下では、前節で導入した量子ウォーク模型を解析する。この解析で重要な補助定理は、(21) 式で定義される時間発展行列 $V^{(j)}(k)$ が

$$V^{(j)}(k) = R^{(j)}(\phi(k), \theta(k), 0) R^{(j)}(-p(k), 0, 0) [R^{(j)}(\phi(k), \theta(k), 0)]^\dagger \quad (27)$$

という形式の $R^{(j)}$ の 3 つの行列に分解出来るということである。ここで $\phi(k), \theta(k), p(k)$ は

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \{ (\alpha - 2k) - \gamma \} &= \phi(k) + \frac{\pi}{2} \\ \tan \frac{1}{2} \{ (\alpha - 2k) + \gamma \} &= -\tan \frac{p(k)}{2} \cos \theta(k) \\ \sin \frac{\beta}{2} &= \sin \frac{p(k)}{2} \sin \theta(k) \end{aligned} \quad (28)$$

によって、オイラー角 α, β, γ 及び波数 k と関係付けられている。証明は Appendix B に与えた。

(27) 式は時間発展行列 $V^{(j)}(k)$ は $R^{(j)}(\phi(k), \theta(k), 0)$ で与えられるユニタリ変換によって $R^{(j)}(-p(k), 0, 0)$ のように対角化出来る, ということの意味する. 実際 $R^{(j)}(-p(k), 0, 0)$ は $R^{(j)}(-p(k), 0, 0) = \text{diag}(e^{ijp(k)}, e^{i(j-1)p(k)}, \dots, e^{-ijp(k)})$ という対角行列である. したがって $R^{(j)}$ のユニタリ性 $[R^{(j)}]^\dagger = [R^{(j)}]^{-1}$ により, (22) 式は

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}^{(j)}(k, t) &= R^{(j)}(\phi(k), \theta(k), 0) \begin{pmatrix} e^{itjp(k)} & & & \\ & e^{it(j-1)p(k)} & & \\ & & \ddots & \\ & & & e^{-itjp(k)} \end{pmatrix} [R^{(j)}(\phi(k), \theta(k), 0)]^\dagger \phi_0^{(j)} \\ &= \sum_{m=-j}^j e^{itmp(k)} \mathbf{v}_m^{(j)}(k) C_m^{(j)}(k) \end{aligned} \quad (29)$$

のように書きかえることが出来る. ここで $\mathbf{v}_m^{(j)}(k)$ は行列 $R^{(j)}(\phi(k), \theta(k), 0)$ の第 m 番目の列ベクトルで

$$\mathbf{v}_m^{(j)}(k) = \begin{pmatrix} R_{jm}^{(j)}(\phi(k), \theta(k), 0) \\ R_{j-1m}^{(j)}(\phi(k), \theta(k), 0) \\ \vdots \\ R_{-jm}^{(j)}(\phi(k), \theta(k), 0) \end{pmatrix}$$

であり

$$C_m^{(j)}(k) \equiv [\mathbf{v}_m^{(j)}(k)]^\dagger \phi_0^{(j)} = \sum_{m'=-j}^j \overline{R_{m'm}^{(j)}(\phi(k), \theta(k), 0)} q_{m'} \quad (30)$$

である. \bar{z} は複素数 z の複素共役を意味するものとする.

(29) 式の展開式から, その微分に関して

$$\left(i \frac{d}{dk} \right)^r \hat{\Psi}^{(j)}(k, t) = \sum_{m=-j}^j \left(-m \frac{dp(k)}{dk} \right)^r e^{itmp(k)} \mathbf{v}_m^{(j)}(k) C_m^{(j)}(k) t^r + \mathcal{O}(t^{r-1})$$

という評価が直ちに得られる. 但しここで, $\mathcal{O}(t^{r-1})$ は t の $(r-1)$ -次以下のオーダーの項を表す. $R^{(j)}$ はユニタリ行列なので, その列ベクトルはそれぞれ正規直交関係

$$[\mathbf{v}_m^{(j)}(k)]^\dagger \mathbf{v}_{m'}^{(j)}(k) = \delta_{mm'}$$

をなしている. このことより

$$[\hat{\Psi}^{(j)}(k, t)]^\dagger \left(i \frac{d}{dk} \right)^r \hat{\Psi}^{(j)}(k, t) = \sum_{m=-j}^j \left(-m \frac{dp(k)}{dk} \right)^r |C_m^{(j)}(k)|^2 t^r + \mathcal{O}(t^{r-1})$$

となる. この評価を (26) 式に代入すると, 長時間極限で擬速度 $X_t^{(j)}/t$ の r -次モーメント ($r = 1, 2, 3, \dots$) が収束し

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left\langle \left(\frac{X_t^{(j)}}{t} \right)^r \right\rangle = \sum_{m: 0 < m \leq j} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \left\{ (-1)^r |C_m^{(j)}(k)|^2 + |C_{-m}^{(j)}(k)|^2 \right\} \left(m \frac{dp(k)}{dk} \right)^r \quad (31)$$

という積分の和で与えられることが結論される. この式の求和は j が半奇数ならば $m = 1/2, 3/2, \dots, j$ について, j が正の整数ならば $m = 1, 2, \dots, j$ について行う. ここで注意すべきことは, j が正の整数ならば $m = 0$ のモードが存在するが, それは (31) 式の中の $r = 1, 2, 3, \dots$ のどの r -次モーメントにも寄与しないことである. $m = 0$ のモードは $(2j+1)$ が奇数のとき 1 ステップで同じ位置にとどまることが出来ることから生まれるものである. そしてその極限分布への寄与は原点におけるディラックのデルタ関数によって記述される. (後述の 4.3 項で詳しく述べる.)

4.2 軌道平面上の線積分

(28) 式はオイラー角 (α, β, γ) を (p, θ, ϕ) へ変換する助変数 k の 1 助変数変換を定義する. より正確には (28) 式から次の式を求めることが出来る. (導出については Appendix B を参照のこと.)

$$\cos \frac{p(k)}{2} = \cos \frac{\beta}{2} \cos \frac{1}{2}(\alpha + \gamma - 2k) \quad (32)$$

$$\sin \frac{p(k)}{2} = \sqrt{1 - \cos^2(\beta/2) \cos^2\{(\alpha + \gamma - 2k)/2\}} \quad (33)$$

$$\cos \theta(k) = -\frac{\cos(\beta/2) \sin\{(\alpha + \gamma - 2k)/2\}}{\sqrt{1 - \cos^2(\beta/2) \cos^2\{(\alpha + \gamma - 2k)/2\}}} \quad (34)$$

$$\sin \theta(k) = \frac{\sin(\beta/2)}{\sqrt{1 - \cos^2(\beta/2) \cos^2\{(\alpha + \gamma - 2k)/2\}}} \quad (35)$$

$$\phi(k) = \frac{1}{2}(\alpha - \gamma - 2k - \pi) \quad (36)$$

以下の議論は先行研究の論文 [11] で与えられているものと同様である. 3 次元パラメータ空間において以下で定義されるベクトル $\mathbf{p}(k) = (p_1(k), p_2(k), p_3(k))$ を考える.

$$\begin{aligned} p_1(k) &= p(k) \sin \theta(k) \cos \phi(k) \\ p_2(k) &= p(k) \sin \theta(k) \sin \phi(k) \\ p_3(k) &= p(k) \cos \theta(k) \end{aligned} \quad (37)$$

また, 以下のようにすると

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{e}}_1 &= (-\sin \gamma, -\cos \gamma, 0) \\ \hat{\mathbf{e}}_2 &= \left(\sin \frac{\beta}{2} \cos \gamma, -\sin \frac{\beta}{2} \sin \gamma, -\cos \frac{\beta}{2}\right) \\ \hat{\mathbf{e}}_3 &= \left(\cos \frac{\beta}{2} \cos \gamma, -\cos \frac{\beta}{2} \sin \gamma, \sin \frac{\beta}{2}\right) \end{aligned} \quad (38)$$

(32)–(36) 式を使うことにより

$$\mathbf{p}(k) \perp \hat{\mathbf{e}}_3 \quad \text{for all } k \in [-\pi, \pi)$$

を確認することが出来る. これは $\mathbf{p}(k)$ が, パラメータ空間において $\hat{\mathbf{e}}_3$ が法線ベクトルとなるような原点を含む平面の上で, 軌道を描くことを意味する. この軌道平面上で $\cos \chi = \hat{\mathbf{p}}(k) \cdot \hat{\mathbf{e}}_1$ によって角 χ を定義する. 但し $\hat{\mathbf{p}}(k) = \mathbf{p}(k)/p(k)$ である. すると以下の関係式を得ることが出来る.

$$\cos \chi = \frac{\sin(\beta/2) \cos\{(\alpha + \gamma - 2k)/2\}}{\sqrt{1 - \cos^2(\beta/2) \cos^2\{(\alpha + \gamma - 2k)/2\}}} \quad (39)$$

$$\sin \chi = \frac{\sin\{(\alpha + \gamma - 2k)/2\}}{\sqrt{1 - \cos^2(\beta/2) \cos^2\{(\alpha + \gamma - 2k)/2\}}} \quad (40)$$

(39) 式を (32) 式及び (33) 式と比較することにより平面上の軌道を定める方程式は論文 [11] で報告されている形式と本質的に同じものとして決定される.

$$\tan \frac{p(k)}{2} = \tan \frac{\beta}{2} \frac{1}{\cos \chi} \quad (41)$$

論文 [11] で示されているように (31) 式の波数 k に関する積分は (39) 式と (40) 式, またはこれらを逆に解いて得られる関係式

$$\cos \frac{1}{2}(\alpha + \gamma - 2k) = \frac{\cos \chi}{\sqrt{1 - \cos^2(\beta/2) \sin^2 \chi}} \quad (42)$$

$$\sin \frac{1}{2}(\alpha + \gamma - 2k) = \frac{\sin \chi \sin(\beta/2)}{\sqrt{1 - \cos^2(\beta/2) \sin^2 \chi}} \quad (43)$$

を介して軌道上の χ に関する線積分に写像される. $k \mapsto \chi$ の写像に伴うヤコビアンは

$$J \equiv \left| \frac{dk}{d\chi} \right| = \frac{\sin(\beta/2)}{1 - \cos^2(\beta/2) \sin^2 \chi} \quad (44)$$

と求められる. (33) 式より以下を得る.

$$p(k) = 2 \arccos \left\{ \cos \frac{\beta}{2} \cos \frac{1}{2}(\alpha + \gamma - 2k) \right\}$$

微分の公式 $(d/dx)\arccos x = \mp 1/\sqrt{1-x^2}$ を使うと,

$$\frac{dp(k)}{dk} = -2 \cos \frac{\beta}{2} \sin \chi \quad (45)$$

となる.

以上の変数変換の結果, (31) 式の擬速度のモーメントの長時間極限は $\hat{C}_{\pm m}^{(j)}(\chi) \equiv C_{\pm m}^{(j)}(k(\chi))$ として

$$I_m^{(j)}(r) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\chi}{2\pi} \frac{\sin(\beta/2)}{1 - \cos^2(\beta/2) \sin^2 \chi} \left\{ |\hat{C}_m^{(j)}(\chi)|^2 + (-1)^r |\hat{C}_{-m}^{(j)}(\chi)|^2 \right\} \left(2m \cos \frac{\beta}{2} \sin \chi \right)^r \quad (46)$$

と書くと

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left\langle \left(\frac{X_t^{(j)}}{t} \right)^r \right\rangle = \sum_{m: 0 < m \leq j} I_m^{(j)}(r), \quad r = 1, 2, 3, \dots \quad (47)$$

書き直される.

4.3 今野密度関数の重ね合わせ

それぞれの積分 $I_m^{(j)}(r)$ の中でさらに, 積分変数を χ から y へ

$$y = 2m \cos \frac{\beta}{2} \sin \chi \quad (48)$$

によって変えることにする. この変数変換によって $\hat{C}_m^{(j)}(\chi)$ は $c_m^{(j)}(y)$ に変わるものとする, 積分は

$$I_m^{(j)}(r) = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dy y^r \mu \left(\frac{y}{2m}; \cos \frac{\beta}{2} \right) \left\{ |c_m^{(j)}(y)|^2 + (-1)^r |c_{-m}^{(j)}(y)|^2 \right\} \quad (49)$$

のように書かれる. $\mu(x; a)$ は (8) 式で与えられているものである. これは今野が弱収束定理 [5, 9] の中で 1 次元 2 成分量子ウォークの極限分布を記述するために初めて導入した密度関数である.

y の関数として $|c_m^{(j)}(y)|^2$ は偶関数項と奇関数項に分けることができる. 正の値 m に対して, $|c_m^{(j)}(y)|^2 + |c_{-m}^{(j)}(y)|^2$ の偶関数項を $\mathcal{M}_{\text{even}}^{(j,m)}(y/2m)$, $|c_m^{(j)}(y)|^2 - |c_{-m}^{(j)}(y)|^2$ の奇関数項を $\mathcal{M}_{\text{odd}}^{(j,m)}(y/2m)$ と略記することにする. $\mu(x; a)$ は x の偶関数なので (49) 式は $n = 1, 2, 3, \dots$ に対して

$$\begin{aligned} I_m^{(j)}(2n) &= \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dy y^{2n} \mu \left(\frac{y}{2m}; \cos \frac{\beta}{2} \right) \mathcal{M}_{\text{even}}^{(j,m)} \left(\frac{y}{2m} \right) \\ I_m^{(j)}(2n-1) &= \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dy y^{2n-1} \mu \left(\frac{y}{2m}; \cos \frac{\beta}{2} \right) \mathcal{M}_{\text{odd}}^{(j,m)} \left(\frac{y}{2m} \right) \end{aligned} \quad (50)$$

となる. そこで

$$\mathcal{M}^{(j,m)}(x) = \mathcal{M}_{\text{even}}^{(j,m)}(x) + \mathcal{M}_{\text{odd}}^{(j,m)}(x) \quad (51)$$

とすると, (47) 式は $r = 1, 2, 3, \dots$ に対して

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left\langle \left(\frac{X_t^{(j)}}{t} \right)^r \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dy y^r \sum_{m: 0 < m \leq j} \frac{1}{2m} \mu \left(\frac{y}{2m}; \cos \frac{\beta}{2} \right) \mathcal{M}^{(j,m)} \left(\frac{y}{2m} \right) \quad (52)$$

となる.

j が正の整数 (すなわち $(2j+1)$ が奇数) のとき, 積分

$$J^{(j)} = \int_{-\infty}^{\infty} dy \sum_{m: 0 < m \leq j} \frac{1}{2m} \mu \left(\frac{y}{2m}; \cos \frac{\beta}{2} \right) \mathcal{M}^{(j,m)} \left(\frac{y}{2m} \right) \quad (53)$$

は一般に 1 より小さい. これは $m=0$ のモードの寄与が求和に含まれていないことによる. この差,

$$\Delta^{(j)} = 1 - J^{(j)} \quad (54)$$

は分布の中で $y=0$ におけるデルタ関数の重みを与える.

結論を要約すると以下ようになる.

- 1) $(2j+1)$ -成分量子ウォークの擬速度の分布は長時間極限でモーメント収束する.

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \left\langle \left(\frac{X_t^{(j)}}{t} \right)^r \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dy y^r \nu^{(j)}(y), \quad r = 0, 1, 2, \dots \quad (55)$$

- 2) 極限分布は

$$\nu^{(j)}(y) = \sum_{m: 0 < m \leq j} \frac{1}{2m} \mu \left(\frac{y}{2m}; \cos \frac{\beta}{2} \right) \mathcal{M}^{(j,m)} \left(\frac{y}{2m} \right) + \mathbf{1}_{\{(2j+1) \text{ is odd}\}} \Delta^{(j)} \delta(y) \quad (56)$$

である. つまり適切にスケール変換された重み $\mathcal{M}^{(j,m)}(y/2m)$ が掛かった今野密度関数の和と, $(2j+1)$ の値が奇数のときは原点における重み $\Delta^{(j)}$ のデルタ関数の和で与えられる.

4.4 多項式 $\mathcal{M}^{(j,m)}(x)$

Appendix C で与えられている式と Appendix A の行列 $r^{(j)}$ を使うことにより極限分布 (56) 式の中の重み $\mathcal{M}^{(j,m)}(x)$ 及び $\Delta^{(j)}$ を, $j = 1/2, 1, 3/2$ と $0 < m \leq j$ に対して具体的に計算することが出来る. 以下ではその結果を与えることにする. ここでは

$$\tau = \tan \frac{\beta}{2} \quad (57)$$

とする. また複素数 z に対して, $\text{Re}\{z\}$ は z の実部を意味するものとする.

$j = 1/2$ の場合 (2 成分模型)

$$\mathcal{M}^{(1/2,1/2)}(x) = 1 + \mathcal{M}_1^{(1/2,1/2)} x \quad (58)$$

但し,

$$\mathcal{M}_1^{(1/2,1/2)} = -\{|q_{1/2}|^2 - |q_{-1/2}|^2\} + 2\tau \text{Re}\{q_{1/2} \bar{q}_{-1/2} e^{-i\gamma}\} \quad (59)$$

である. $\mathcal{M}_1^{(1/2,1/2)} = 0$ のとき, 極限分布 $\nu^{(1/2)}(y)$ は対称であり, $\mathcal{M}_1^{(1/2,1/2)} \neq 0$ のとき非対称である [5, 9, 11].

$j = 1$ の場合 (3 成分模型)

$$\mathcal{M}^{(1,1)}(x) = \mathcal{M}_0^{(1,1)} + \mathcal{M}_1^{(1,1)}x + \mathcal{M}_2^{(1,1)}x^2 \quad (60)$$

但し,

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_0^{(1,1)} &= \frac{1}{2}\{|q_1|^2 + 2|q_0|^2 + |q_{-1}|^2\} - \operatorname{Re}\{q_1\bar{q}_{-1}e^{-2i\gamma}\} \\ \mathcal{M}_1^{(1,1)} &= -\{|q_1|^2 - |q_{-1}|^2\} + \sqrt{2}\tau \operatorname{Re}\{(q_1\bar{q}_0 + q_0\bar{q}_{-1})e^{-i\gamma}\} \\ \mathcal{M}_2^{(1,1)} &= \frac{1}{2}\{|q_1|^2 - 2|q_0|^2 + |q_{-1}|^2\} - \sqrt{2}\tau \operatorname{Re}\{(q_1\bar{q}_0 - q_0\bar{q}_{-1})e^{-i\gamma}\} + (1 + 2\tau^2) \operatorname{Re}\{q_1\bar{q}_{-1}e^{-2i\gamma}\} \end{aligned} \quad (61)$$

である。また原点におけるデルタ関数の重みは以下ようになる。

$$\Delta^{(1)} = 1 - \left\{ \mathcal{M}_0^{(1,1)} + \left(1 - \sin \frac{\beta}{2}\right) \mathcal{M}_2^{(1,1)} \right\} \quad (62)$$

極限分布 $\nu^{(1)}(y)$ が対称になる条件は $\mathcal{M}_1^{(1,1)} = 0$ で与えられる。一般に、原点におけるデルタ関数は重み $\Delta^{(1)}$ で極限分布に出現する。

$j = 3/2$ の場合 (4 成分模型)

$$\mathcal{M}^{(3/2,3/2)}(x) = \mathcal{M}_0^{(3/2,3/2)} + \mathcal{M}_1^{(3/2,3/2)}x + \mathcal{M}_2^{(3/2,3/2)}x^2 + \mathcal{M}_3^{(3/2,3/2)}x^3 \quad (63)$$

及び

$$\mathcal{M}^{(3/2,1/2)}(x) = \mathcal{M}_0^{(3/2,1/2)} + \mathcal{M}_1^{(3/2,1/2)}x + \mathcal{M}_2^{(3/2,1/2)}x^2 + \mathcal{M}_3^{(3/2,1/2)}x^3 \quad (64)$$

但し

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_0^{(3/2,3/2)} &= \frac{1}{4}\{|q_{3/2}|^2 + 3|q_{1/2}|^2 + 3|q_{-1/2}|^2 + |q_{-3/2}|^2\} - \frac{\sqrt{3}}{2} \operatorname{Re}\{(q_{3/2}\bar{q}_{-1/2} + q_{1/2}\bar{q}_{-3/2})e^{-2i\gamma}\} \\ \mathcal{M}_1^{(3/2,3/2)} &= -\frac{3}{4}\{|q_{3/2}|^2 + |q_{1/2}|^2 - |q_{-1/2}|^2 - |q_{-3/2}|^2\} - \frac{3}{2}\tau \operatorname{Re}\{q_{3/2}\bar{q}_{-3/2}e^{-3i\gamma} - q_{1/2}\bar{q}_{-1/2}e^{-i\gamma}\} \\ &\quad + \frac{\sqrt{3}}{2}\tau \operatorname{Re}\{(q_{3/2}\bar{q}_{1/2} + q_{-1/2}\bar{q}_{-3/2})e^{-i\gamma}\} + \frac{\sqrt{3}}{2} \operatorname{Re}\{(q_{3/2}\bar{q}_{-1/2} - q_{1/2}\bar{q}_{-3/2})e^{-2i\gamma}\} \\ \mathcal{M}_2^{(3/2,3/2)} &= \frac{3}{4}\{|q_{3/2}|^2 - |q_{1/2}|^2 - |q_{-1/2}|^2 + |q_{-3/2}|^2\} - \sqrt{3}\tau \operatorname{Re}\{(q_{3/2}\bar{q}_{1/2} - q_{-1/2}\bar{q}_{-3/2})e^{-i\gamma}\} \\ &\quad + \frac{\sqrt{3}}{2}(1 + 2\tau^2) \operatorname{Re}\{(q_{3/2}\bar{q}_{-1/2} + q_{1/2}\bar{q}_{-3/2})e^{-2i\gamma}\} \\ \mathcal{M}_3^{(3/2,3/2)} &= -\frac{1}{4}\{|q_{3/2}|^2 - 3|q_{1/2}|^2 + 3|q_{-1/2}|^2 - |q_{-3/2}|^2\} + \frac{1}{2}\tau(3 + 4\tau^2) \operatorname{Re}\{q_{3/2}\bar{q}_{-3/2}e^{-3i\gamma}\} \\ &\quad - \frac{3}{2}\tau \operatorname{Re}\{q_{1/2}\bar{q}_{-1/2}e^{-i\gamma}\} + \frac{\sqrt{3}}{2}\tau \operatorname{Re}\{(q_{3/2}\bar{q}_{1/2} + q_{-1/2}\bar{q}_{-3/2})e^{-i\gamma}\} \\ &\quad - \frac{\sqrt{3}}{2}(1 + 2\tau^2) \operatorname{Re}\{(q_{3/2}\bar{q}_{-1/2} - q_{1/2}\bar{q}_{-3/2})e^{-2i\gamma}\} \end{aligned} \quad (65)$$

及び

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_0^{(3/2,1/2)} &= \frac{1}{4}\{3|q_{3/2}|^2 + |q_{1/2}|^2 + |q_{-1/2}|^2 + 3|q_{-3/2}|^2\} + \frac{\sqrt{3}}{2} \operatorname{Re}\{(q_{3/2}\bar{q}_{-1/2} + q_{1/2}\bar{q}_{-3/2})e^{-2i\gamma}\} \\ \mathcal{M}_1^{(3/2,1/2)} &= -\frac{1}{4}\{3|q_{3/2}|^2 - 5|q_{1/2}|^2 + 5|q_{-1/2}|^2 - 3|q_{-3/2}|^2\} + \frac{9}{2}\tau \operatorname{Re}\{q_{3/2}\bar{q}_{-3/2}e^{-3i\gamma}\} \\ &\quad - \frac{1}{2}\tau \operatorname{Re}\{q_{1/2}\bar{q}_{-1/2}e^{-i\gamma}\} + \frac{\sqrt{3}}{2}\tau \operatorname{Re}\{(q_{3/2}\bar{q}_{1/2} + q_{-1/2}\bar{q}_{-3/2})e^{-i\gamma}\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{3\sqrt{3}}{2}\operatorname{Re}\left\{(q_{3/2}\bar{q}_{-1/2}-q_{1/2}\bar{q}_{-3/2})e^{-2i\gamma}\right\} \\
\mathcal{M}_2^{(3/2,1/2)} &= -\frac{3}{4}\left\{|q_{3/2}|^2-|q_{1/2}|^2-|q_{-1/2}|^2+|q_{-3/2}|^2\right\}+\sqrt{3}\tau\operatorname{Re}\left\{(q_{3/2}\bar{q}_{1/2}-q_{-1/2}\bar{q}_{-3/2})e^{-i\gamma}\right\} \\
& -\frac{\sqrt{3}}{2}(1+2\tau^2)\operatorname{Re}\left\{(q_{3/2}\bar{q}_{-1/2}+q_{1/2}\bar{q}_{-3/2})e^{-2i\gamma}\right\} \\
\mathcal{M}_3^{(3/2,1/2)} &= \frac{3}{4}\left\{|q_{3/2}|^2-3|q_{1/2}|^2+3|q_{-1/2}|^2-|q_{-3/2}|^2\right\}-\frac{3}{2}\tau(3+4\tau^2)\operatorname{Re}\left\{q_{3/2}\bar{q}_{-3/2}e^{-3i\gamma}\right\} \\
& +\frac{9}{2}\tau\operatorname{Re}\left\{q_{1/2}\bar{q}_{-1/2}e^{-i\gamma}\right\}-\frac{3\sqrt{3}}{2}\tau\operatorname{Re}\left\{(q_{3/2}\bar{q}_{1/2}+q_{-1/2}\bar{q}_{-3/2})e^{-i\gamma}\right\} \\
& +\frac{3\sqrt{3}}{2}(1+2\tau^2)\operatorname{Re}\left\{(q_{3/2}\bar{q}_{-1/2}-q_{1/2}\bar{q}_{-3/2})e^{-2i\gamma}\right\}
\end{aligned} \tag{66}$$

である。そして $\mathcal{M}_1^{(3/2,3/2)} = \mathcal{M}_3^{(3/2,3/2)} = 0$ かつ $\mathcal{M}_1^{(3/2,1/2)} = \mathcal{M}_3^{(3/2,1/2)} = 0$ の場合のみ極限分布 $\nu^{(3/2)}(y)$ は対称となる。

4.5 計算機シミュレーションとの比較と結論

上記の結果の正当性を明らかにするために、計算機シミュレーションの結果との比較を示すことにする。

以下の図 (図 2-4) で、細い破線は計算機シミュレーションで得られた時刻 $t = 100$ での X_t/t の分布を表し、太い線は前項で与えられた極限分布を表す。

2 成分模型

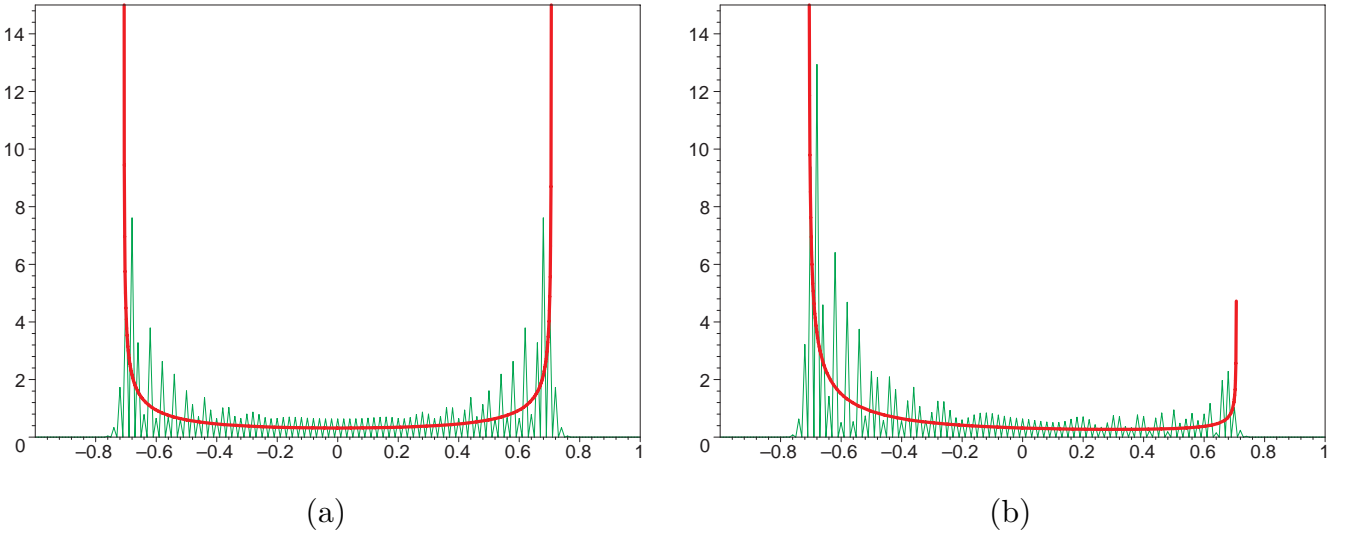


図 2 2 成分模型の場合のシミュレーション結果と極限分布の比較. (a) 対称な場合, (b) 非対称な場合.

(58) 式と (59) 式の結果は、先行研究の結果 [5, 9, 11] と完全に一致する。ここでは、 $(\alpha, \beta, \gamma) = (0, -3\pi/2, \pi)$ とし、量子コインとして

$$R^{(1/2)} = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \tag{67}$$

を採用した。これはアダマール行列に虚数 i を掛けたものである。(因子の虚数 i は極限分布には無関係である。しかしこの因子によって $R^{(1/2)}$ は $SU(2)$ の元になる。論文 [11] を参照のこと。) 初期量子ビットを ${}^t\phi_0 = (1+i, 1-i)/2$ と選べると、図 2 (a) に示すように擬速度の極限分布は対称となる。しかし第 2 成分の虚部の符号を変えて ${}^t\phi_0 = (1+i, 1+i)/2$ とすると、図 2 (b) に示すように極限分布は非対称になる。 $(\alpha, \beta, \gamma) = (0, -3\pi/2, \pi)$ のとき、前者の量子ビットは (59) 式で与えられている $\mathcal{M}_1^{(1/2,1/2)}$ に関する条件 $\mathcal{M}_1^{(1/2,1/2)} = 0$ を満たし、後者は満たさない。この例が示すように、極限分布関数の形状は初期量子ビットの変化に非常に敏感であることが分かる。

3 成分模型

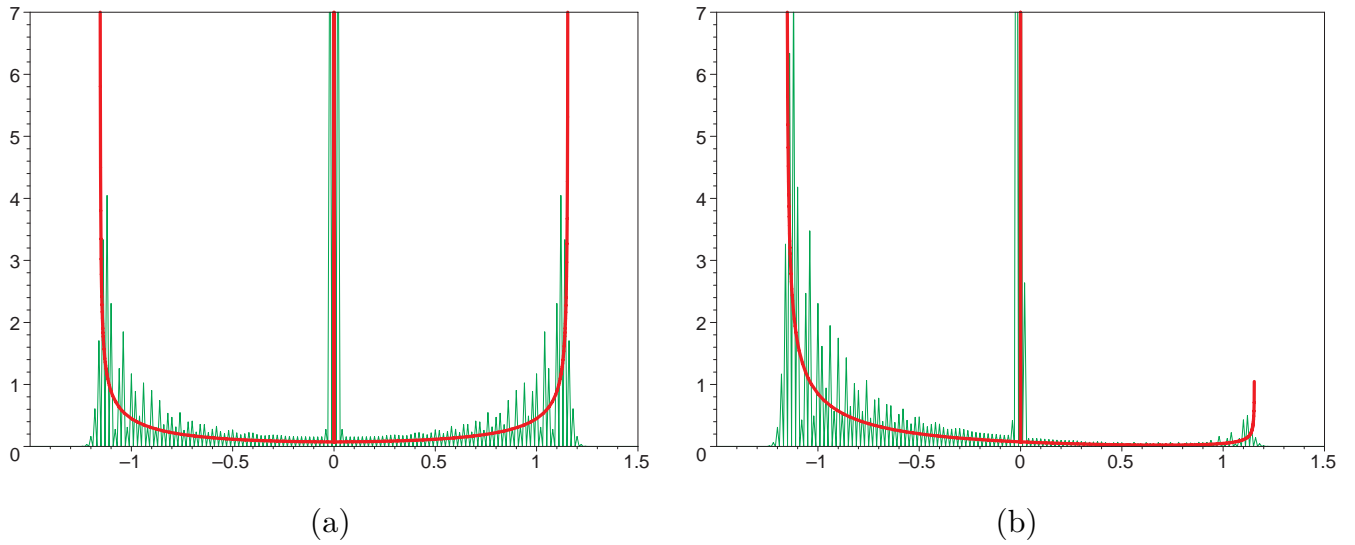


図3 3成分模型の場合のシミュレーション結果と極限分布の比較. (a) 対称な場合, (b) 非対称な場合. 原点における太い垂線はディラックのデルタ関数を意味する.

3成分模型では $(\alpha, \beta, \gamma) = (0, \arccos(-1/3), \pi)$ とし, 量子コインとして

$$R^{(1)} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} -1 & -2 & -2 \\ -2 & -1 & 2 \\ -2 & 2 & -1 \end{pmatrix} \quad (68)$$

を採用した. これは検索アルゴリズムで用いられるグローバーク列 [3] と似ている.

図3はそれぞれ, (a) ${}^t\phi_0 = (1-i, 1+i, 1-i)/\sqrt{6}$ として対称な分布, (b) ${}^t\phi_0 = (1-i, 1-i, 1-i)/\sqrt{6}$ として非対称な分布を与える極限分布とシミュレーションの結果を比較している.

(a) の場合が, 対称な分布のための条件 $\mathcal{M}_1^{(1,1)} = 0$ を満たすことはすぐに確かめられる. 3成分模型では, 原点にディラックのデルタ関数型のピークがある.

4 成分模型

4成分模型では $(\alpha, \beta, \gamma) = (0, 2\pi/3, \pi)$ とし, 量子コインは以下の行列とした.

$$R^{(3/2)} = \frac{i}{8} \begin{pmatrix} 1 & 3 & 3\sqrt{3} & 3\sqrt{3} \\ 3 & 5 & \sqrt{3} & -3\sqrt{3} \\ 3\sqrt{3} & \sqrt{3} & -5 & 3 \\ 3\sqrt{3} & -3\sqrt{3} & 3 & -1 \end{pmatrix} \quad (69)$$

量子ビットを

$$\phi_0 = \frac{1}{2\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1+3i \\ 0 \\ 0 \\ -3+i \end{pmatrix} \quad \text{及び} \quad \phi_0 = \frac{1}{2\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1+3i \\ 0 \\ 0 \\ -3-i \end{pmatrix} \quad (70)$$

のようにすると, 分布は図4(a)と図4(b)にそれぞれ示すように決まる.

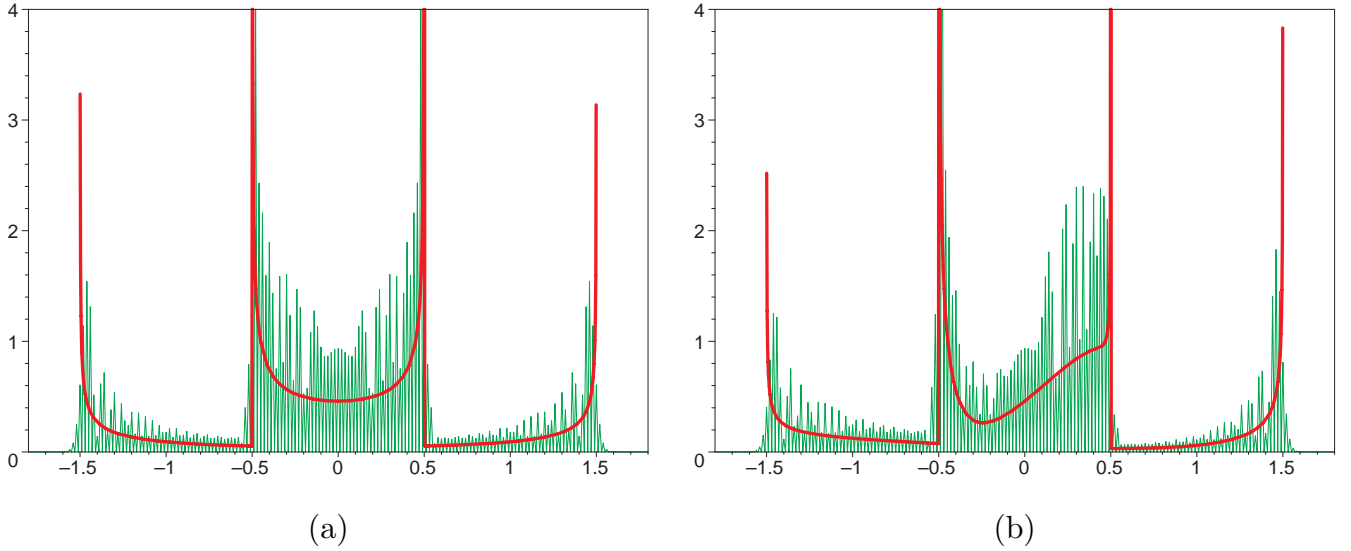


図4 4成分模型の場合のシミュレーション結果と極限分布の比較. (a) 対称な場合, (b) 非対称な場合.

5 まとめ及び今後の課題

ウィグナーの公式により得られるユニタリ行列を量子コインとして用いる模型の極限分布は, 適切にスケール変換された今野密度関数の重ね合わせで記述されることが分かった. 但し量子ビットの成分数 $(2j+1)$ が奇数のときは重み $\Delta^{(j)}$ のデルタ関数が原点に付け加えられる. この模型の極限分布を $j = 1/2, 1, 3/2$ の場合について具体的に計算したものを 4.4 項に記載した. これらの結果は $\mathcal{M}^{(j,m)}(x)$ は x の $2j$ -次多項式であり, その係数 $\mathcal{M}_k^{(j,m)}$, $k = 0, 1, \dots, j$ は $\tau = \tan(\beta/2)$ と $e^{-i\gamma}$ を通じて β と γ に依存するが, α には依存しないことを示唆する. 極限分布の初期量子ビット (17) 依存性は複雑である. 言い換えれば, 量子ウォークの擬速度の極限分布は初期量子ビットの変化に非常に敏感である. 極限分布関数と計算機シミュレーションの結果を比較した図では, どの図においても計算機シミュレーションで X_t/t の分布関数が振動する様子が気付く. また一般的に時間ステップ t が増えるにつれて, 振動は激しくなる. しかし, (55) 式で与えられたモーメントの収束は, 振動をならすことによって分布関数を平均した線を考えて, それは (56) 式の極限分布関数でよく描写されることを意味しているのである. このことは, 図 2-4 で示した通りである.

本論文で述べた模型は 1 次元格子上を移動するものであった. 模型の拡張として次元を上げたものを考えることが出来る. 2 次元正方格子 (4 成分, \dots), 3 次元立方格子 (6 成分, \dots) などである. 2 次元についての計算機シミュレーション結果がすでに報告されている [12] が詳しい解析はまだ行われていない.

量子ウォークを実現する実験として, 光の偏光を利用する方法 [4] などが提案されている. また強相関電子系のランダウ・ツェナー転移の模型が反射壁を持った 1 次元半無限量子ウォーク模型に写像されることが示され, 量子ウォークの研究が物性物理学に応用されはじめた [13]. 今後, 量子ウォークと物理現象とのかわりを明らかにするうえで, 本論文で導入した多成分模型が役立つことを望む.

Appendix A $j = 1/2, 1, 3/2$ のときの $r^{(j)}(\beta)$ の具体例

$r^{(j)}(\beta)$ の各成分の具体的な式は, ウィグナーの公式 (14) から直ちに得られる. $j = 1/2, 1, 3/2$ の場合は $c = \cos(\beta/2)$, $s = \sin(\beta/2)$ として次のように与えることが出来る.

$$r^{(1/2)}(\beta) = \begin{pmatrix} c & -s \\ s & c \end{pmatrix} \quad (\text{A1})$$

$$r^{(1)}(\beta) = \begin{pmatrix} c^2 & -\sqrt{2}cs & s^2 \\ \sqrt{2}cs & 2c^2 - 1 & -\sqrt{2}cs \\ s^2 & \sqrt{2}cs & c^2 \end{pmatrix} \quad (\text{A2})$$

$$r^{(3/2)}(\beta) = \begin{pmatrix} c^3 & -\sqrt{3}c^2s & \sqrt{3}cs^2 & -s^3 \\ \sqrt{3}c^2s & -2cs^2 + c^3 & s^3 - 2c^2s & \sqrt{3}cs^2 \\ \sqrt{3}cs^2 & -s^3 + 2c^2s & -2cs^2 + c^3 & -\sqrt{3}c^2s \\ s^3 & \sqrt{3}cs^2 & \sqrt{3}c^2s & c^3 \end{pmatrix} \quad (\text{A3})$$

Appendix B (28) 式に関して (27) 式の証明

定義 (13) 式, (21) 式で, $S^{(j)}(k) = R^{(j)}(-2k, 0, 0)$ としたもの, また $V^{(j)}(k) = R^{(j)}(\alpha - 2k, \beta, \gamma)$ を用いる. 以下の関係式

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(\alpha - \gamma) &= \phi + \frac{\pi}{2} \\ \tan \frac{1}{2}(\alpha + \gamma) &= -\tan \frac{p}{2} \cos \theta \\ \sin \frac{\beta}{2} &= \sin \frac{p}{2} \sin \theta \end{aligned} \quad (\text{B1})$$

に関して, 等式

$$R^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = R^{(j)}(\phi, \theta, 0)R^{(j)}(-p, 0, 0)[R^{(j)}(\phi, \theta, 0)]^\dagger \quad (\text{B2})$$

を証明すれば十分である. 等式 (B2) は回転の間にある等式

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) = \hat{R}(\phi, \theta, 0)\hat{R}(-p, 0, 0)[\hat{R}(\phi, \theta, 0)]^\dagger \quad (\text{B3})$$

の行列表現である. $j = 1/2, 1, 3/2, \dots$ について (13) 式によって決められる回転行列は回転の忠実な表現であるから, 等式 (B3) を含む最小の場合 ($j = 1/2$) で, 等式 (B2) を証明すれば十分であろう. 直接計算することにより

$$\begin{aligned} &R^{(1/2)}(\phi, \theta, 0)R^{(1/2)}(-p, 0, 0)[R^{(1/2)}(\phi, \theta, 0)]^\dagger \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} \cos(\theta/2) & -e^{-i\phi/2} \sin(\theta/2) \\ e^{i\phi/2} \sin(\theta/2) & e^{i\phi/2} \cos(\theta/2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ip/2} & 0 \\ 0 & e^{-ip/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\phi/2} \cos(\theta/2) & e^{-i\phi/2} \sin(\theta/2) \\ -e^{i\phi/2} \sin(\theta/2) & e^{-i\phi/2} \cos(\theta/2) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(p/2) + i \sin(p/2) \cos \theta & i \sin(p/2) \sin \theta e^{-i\phi} \\ i \sin(p/2) \sin \theta e^{i\phi} & \cos(p/2) - i \sin(p/2) \cos \theta \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{B4})$$

を得る.

$$R^{(1/2)}(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \cos(\beta/2) & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin(\beta/2) \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2} \sin(\beta/2) & e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos(\beta/2) \end{pmatrix} \quad (\text{B5})$$

と比較して,

$$\begin{aligned} \cos \frac{p}{2} &= \cos \frac{\beta}{2} \cos \frac{1}{2}(\alpha + \gamma) \\ \sin \frac{p}{2} \cos \theta &= -\cos \frac{\beta}{2} \sin \frac{1}{2}(\alpha + \gamma) \\ \sin \frac{p}{2} \sin \theta \sin \phi &= -\sin \frac{\beta}{2} \cos \frac{1}{2}(\alpha - \gamma) \\ \sin \frac{p}{2} \sin \theta \cos \phi &= \sin \frac{\beta}{2} \sin \frac{1}{2}(\alpha - \gamma) \end{aligned} \quad (\text{B6})$$

という関係式が得られる. これらから (B1) 式は導かれる.

Appendix C 計算の公式

(14) を (30) に代入し、複素数の絶対値の 2 乗をとると、

$$\begin{aligned}
 |C_m^{(j)}(k)|^2 &= \sum_{m_1=-j}^j \sum_{m_2=-j}^j q_{m_1} \bar{q}_{m_2} e^{i(m_1-m_2)\phi(k)} \\
 &\times \sum_{\ell_1} \sum_{\ell_2} \Gamma(j, m_1, m, \ell_1) \Gamma(j, m_2, m, \ell_2) \\
 &\times \left(\cos \frac{\theta(k)}{2} \right)^{4j+m_1+m_2-2m-2\ell_1-2\ell_2} \left(\sin \frac{\theta(k)}{2} \right)^{2\ell_1+2\ell_2+2m-m_1-m_2}
 \end{aligned} \tag{C1}$$

の式を得る. (34)–(36) 式より、次の関係式が導かれる.

$$\begin{aligned}
 \cos \theta(k) &= -\cos \frac{\beta}{2} \sin \chi, \\
 \sin \theta(k) e^{i\phi(k)} &= \left(\sin \frac{\beta}{2} \sin \chi - i \cos \chi \right) e^{-i\gamma}
 \end{aligned} \tag{C2}$$

そして (48) 式の変数変換をすると

$$\begin{aligned}
 \cos^2 \frac{\theta(k)}{2} &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{y}{2m} \right) \\
 \sin^2 \frac{\theta(k)}{2} &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{y}{2m} \right) \\
 \sin \frac{\theta(k)}{2} \cos \frac{\theta(k)}{2} e^{i\phi(k)} &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{y}{2m} \tan \frac{\beta}{2} - i \sqrt{1 - \left(\frac{y}{2m} \right)^2 \sec^2 \frac{\beta}{2}} \right\} e^{-i\gamma}
 \end{aligned} \tag{C3}$$

が得られる. (C3) 式より、 $|C_m^{(j)}(k)|^2 \mapsto |\hat{C}_m^{(j)}(\chi)|^2 \mapsto |c_m^{(j)}(y)|^2$ の変換をすることが出来、 $\mathcal{M}^{(j,m)}(y/2m)$ が得られる.

(62) 式を計算するには次の積分公式を使った.

$$\begin{aligned}
 \int_0^{2\cos(\beta/2)} \frac{1}{\sqrt{\cos^2(\beta/2) - (y/2)^2}} dy &= \pi \\
 \int_0^{2\cos(\beta/2)} \frac{1}{\{1 - (y/2)^2\} \sqrt{\cos^2(\beta/2) - (y/2)^2}} dy &= \frac{\pi}{\sin(\beta/2)}
 \end{aligned} \tag{C4}$$

参考文献

- [1] E. P. Wigner, *Group Theory and Its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra*, (Academic Press, New York, 1959).
- [2] A. Messiah, *Quantum mechanics, Vol. II*, (North Holland, Amsterdam, 1962).
- [3] L. K. Grover, Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 325–328 (1997).
- [4] D. Bouwmeester, I. Marzoli, G. P. Karman, W. Schleich, and J. P. Woerdman, Optical Galton board, *Phys. Rev. A* **61**, 013410 (1999)
- [5] N. Konno, Quantum random walks in one dimension, *Quantum Inf. Process.* **1**, 345–354 (2002).
- [6] G. Grimmett, S. Janson, and P. F. Scudo, Weak limits for quantum random walks, *Phys. Rev. E* **69**, 026119 (2004).
- [7] A. D. Gottlieb, S. Janson, and P. F. Scudo, Convergence of quantum walks on \mathbb{R}^d , *Inf. Dim. Anal. Quantum Probab. Rel. Topics* **8**, 129–140 (2005).

- [8] N. Inui and N. Konno, Localization of multi-state quantum walk in one dimension, *Physica A* **353**, 133–144 (2005).
- [9] N. Konno, A new type of limit theorems for the one-dimensional quantum random walk, *J. Math. Soc. Jpn.* **57**, 1179–1195 (2005).
- [10] N. Konno, A path integral approach for disordered quantum walks in one dimension, *Fluctuation and Noise Lett.* **5**, L529–L537 (2005).
- [11] M. Katori, S. Fujino, and N. Konno, Quantum walks and orbital states of a Weyl particle, *Phys. Rev. A* **72**, 012316 (2005).
- [12] S. E. Venegas-Andraca, J. L. Ball, K. Burnett, and S. Bose, Quantum walks with entangled coins, *New J. Phys.* **7**, 221 (2005)
- [13] 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**, 100602 (2005)
- [14] N. Konno, Continuous-time quantum walks on trees in quantum probability theory, *Inf. Dim. Anal. Quantum Probab. Rel. Topics* **9**, 287–297 (2006).
- [15] N. Obata, A note on Konno’s paper on quantum walk, *Inf. Dim. Anal. Quantum Probab. Rel. Topics* **9**, 299–304 (2006).
- [16] T. Miyazaki, M. Katori, and N. Konno, Wigner formula of rotation matrices and quantum walks, e-print quant-ph/0611022.
- [17] 今野紀雄, 量子ウォークの極限定理, 数理科学, No.492, 37–44 (2004).
- [18] 今野紀雄, 量子ウォークの局在と非局在, 日本物理学会誌, **61**, 491–498 (2006).
- [19] 藤野壮一, 量子ウォークの極限分布とワイル方程式, 中央大学修士論文 (2005 年度).