量子ウォークのユニタリ同値性

大野　博道

信州大学

RIMS 共同研究
量子ウォークをめぐる数理と量子情報科学

2026 年 11 月

自己紹介

修士のころ：2002 年に修士修了．東北大学情報科学研究科.

このころは作用素環，とくに C^* 環の分類理論の勉強をしていた．そのため，出身は作用素環論だと思っている．最近は作用素環論の研究集会にはほとんど参加していない.

自己紹介

博士のころ：2005 年に博士修了．同じく東北大学情報科学研究科.

このころは量子マルコフ連鎖の研究をしていた．博論のタイトルは「Generalized Quantum Markov States」．博士学生時代にイタリアの Accardi さんのところへ 1 か月 × 2 回お邪魔になった．最近は量子マルコフ連鎖の研究も全くしていない.

自己紹介

量子ウォークとの出会い：2005 年から 2 年間就職浪人（地獄），2007 年から学振 PD（九大），2009 年から信州大学，今に至る

2014 年にとある研究会で瀬川さんに声をかけられる．きっかけは Accardi さんだったらしい．その後，今野先生の「量子ウォーク」の本で勉強を始める．

量子ウォークの勉強を始めて，最初に思った疑問は「量子ウォークの定義はなに？」だった．
次に思った疑問は「今野先生の本にある 4 つのモデルは全部同じじゃないか？」だった．

量子ウォークの定義はなに？

本講演では，時間・空間ともに離散的な量子ウォークを考えます．

個人的な見解：
ウォークとあるので，推移確率にあたるものと，位置を表すものは最低限必要．以下はその当時に考えた量子ウォークの定義．

Definition

V を可算集合（頂点集合），$\{\mathcal{H}_x\}_{x\in V}$ を可分ヒルベルト空間の族とする．ヒルベルト空間 $\mathcal{H}=\bigoplus_{x\in V}\mathcal{H}_x$ 上のユニタリ作用素 U と $\{\mathcal{H}_x\}_{x\in V}$ の組

$$(U,\{\mathcal{H}_x\}_{x\in V})$$

を量子ウォークという．初期状態 $\Psi\in\mathcal{H}$ を考える場合は，

$$(U,\{\mathcal{H}_x\}_{x\in V},\Psi)$$

を量子ウォークという．

今野先生の本：Ambainis 型

1 次元 2 状態の量子ウォークを考える．2 つの行列 P, Q ($P+Q=U$ はユニタリ) を

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

とおき，場所 x におけるベクトル $\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$ は，

$$P \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a\alpha + b\beta \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{位置 } x-1)$$

$$Q \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ c\alpha + d\beta \end{bmatrix} \quad (\text{位置 } x+1)$$

に写る．とくに，$\begin{bmatrix} \bar{a} \\ \bar{b} \end{bmatrix}$ は $x-1$ の $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ に，$\begin{bmatrix} \bar{c} \\ \bar{d} \end{bmatrix}$ は $x+1$ の $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ に写る．

今野先生の本：Gudder 型

2 つの行列 P, Q ($P + Q = U$ はユニタリ) を

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

とおき，場所 x におけるベクトル $\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}$ は,

$$P \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a\alpha \\ c\alpha \end{bmatrix} \quad (\text{位置 } x-1)$$

$$Q \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b\beta \\ d\beta \end{bmatrix} \quad (\text{位置 } x+1)$$

に写る．とくに，$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ は $x-1$ の $\begin{bmatrix} a \\ c \end{bmatrix}$ に，$\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ は $x+1$ の $\begin{bmatrix} b \\ d \end{bmatrix}$ に写る．

Ambainis 型と Gudder 型

もちろん，2 つの量子ウォークは違うものなのだが，両方とも，位置 x のベクトル 1 次元分を $x-1$ に，それと直交するもう 1 次元分を $x+1$ に写している．

Ambainis 型 $\begin{bmatrix}\bar{a}\\ \bar{b}\end{bmatrix}$ は $x-1$ の $\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$ に，$\begin{bmatrix}\bar{c}\\ \bar{d}\end{bmatrix}$ は $x+1$ の $\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$

Gudder 型 $\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$ は $x-1$ の $\begin{bmatrix}a\\c\end{bmatrix}$ に，$\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$ は $x+1$ の $\begin{bmatrix}b\\d\end{bmatrix}$

なので，表現 (representation) を変えれば同じものになるのではないか．つまり，$\begin{bmatrix}a\\c\end{bmatrix}$ を $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ とし，$\begin{bmatrix}b\\d\end{bmatrix}$ を $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ と表せば，同じものとして扱えそうである．

ユニタリ同値

この表現の違いは，ユニタリ作用素 W を使えば表すことができる．すなわち，

$$W\begin{bmatrix} a \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \qquad W\begin{bmatrix} b \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

である．これより，ユニタリ同値性を使えば,「同じ量子ウォーク」を数学的に定義できるのではと考えた.

また，2 つの作用素 A, B がユニタリ同値のとき，すなわち $A = WBW^*$ であるとき，作用素 A と B の性質の多くが一致する．例えば，自己共役性の一致や，

$$\sigma(A) = \sigma(B), \qquad \sigma_p(A) = \sigma_p(B), \qquad \mathrm{Tr}(A) = \mathrm{Tr}(B)$$

などが成り立つ.

一方で，量子ウォークの場合，単なるユニタリ同値だと確率分布が保存されない.

量子力学の公理：純粋状態

確率分布を考えるにあたり，2 通りの量子力学の公理を確認する．

公理 1． 量子状態は，ヒルベルト空間の単位ベクトル $\xi \in \mathcal{H}$ で表される．ただし，ξ と $e^{\mathrm{i}\theta}\xi$ $(\theta \in [0, 2\pi))$ は同一視される．

公理 2． 量子状態 ξ は正規直交基底 $\{e_i\}$ で測定できる．測定すると，数値 i が確率 $|\langle e_i, \xi\rangle|^2$ で得られる．

公理 3． 量子状態 ξ の変化（時間発展，操作など）はユニタリ行列 U を用いて $U\xi$ で表される．

量子ウォークは，基本的にこちらの公理を使っているが，公理 2 だけはもう一つの方を使っているように感じる．

量子力学の公理：混合状態

公理 1'. 量子状態は，行列環 $M_n(\mathbb{C})$ の密度行列 D として表される．

公理 2'. 量子状態 D は POVM (positive operator valued measure) $\{P_i\}$ で測定できる．測定すると，数値 i が確率 $\mathrm{Tr}(P_i D)$ で得られる．

公理 3'. 量子状態 D の変化（時間発展，操作など）はトレースを保存する完全正写像 $\mathcal{F}$ を用いて $\mathcal{F}(D)$ で表される．

量子ウォークでは，公理 2' を PVM (projection valued measure) $\{P_i\}$ で確率分布を得ていることが多い．

なお，公理 1 のベクトル ξ に対応する公理 1' の密度行列は，$\mathbb{C}\xi$ への rank-1-projection $|\xi\rangle\langle\xi|$ であり，こちらだと件の同一視を考える必要はない．

量子力学の公理：公理 2'

例えば，1 次元量子ウォークで，ベクトル $\Psi \in \ell^2(\mathbb{Z}, \mathbb{C}^2)$ を

$$\Psi(x) = \begin{bmatrix} \Psi_L(x) \\ \Psi_R(x) \end{bmatrix}$$

で定義する．位置 x に対応する 2 次元部分空間への projection を P_x とするとき，量子ウォーカーが位置 x にいる確率は

$$\|\Psi(x)\|^2 = \|P_x \Psi\|^2 = \mathrm{Tr}(P_x |\Psi\rangle\langle\Psi|)$$

である．大体の量子ウォークの確率分布は，このように projection を使って書き表すことができる．

量子ウォークの定義

量子ウォークを考えるときは，少なくとも以下の情報があると考えて良い．

・全体空間であるヒルベルト空間 $\mathcal{H}$.

・位置情報を表す（頂点）集合 V.

・位置情報に対応する projection P_x $(x \in V)$．または，部分空間 $\mathcal{H}_x = P_x\mathcal{H}$.

・推移確率を表すユニタリ U.

・初期状態を表すベクトル Ψ.

なお，初期状態を考えない場合もある．

量子ウォークの定義（大野私見，この講演のみ）

Definition

V を可算集合（頂点集合），$\{\mathcal{H}_x\}_{x\in V}$ を可分ヒルベルト空間の族とする．ヒルベルト空間 $\mathcal{H}=\bigoplus_{x\in V}\mathcal{H}_x$ 上のユニタリ作用素 U と $\{\mathcal{H}_x\}_{x\in V}$ の組

$$(U,\{\mathcal{H}_x\}_{x\in V})$$

を量子ウォークという．初期状態 $\Psi\in\mathcal{H}$ を考える場合は,

$$(U,\{\mathcal{H}_x\}_{x\in V},\Psi)$$

を量子ウォークという.

以下，$\mathcal{H}_x$ への projection を P_x で表す.

ユニタリ同値性の定義：ヒルベルト空間が同じ場合

Definition

2 つの量子ウォーク $(U_1, \{\mathcal{H}_x\}_{x\in V}, \Psi_1)$ と $(U_2, \{\mathcal{H}_x\}_{x\in V}, \Psi_2)$ に対し，$\mathcal{H} = \bigoplus_{x\in V} \mathcal{H}_x$ 上のユニタリ作用素 $W = \bigoplus_{x\in V} W_x$ が存在して

$$WU_1W^* = U_2, \quad W\Psi_1 = \Psi_2$$

を満たすとき，この 2 つの量子ウォークはユニタリ同値であるという．

このとき，確率分布を考えると，$P_xW = WP_x$ より，

$$\mu_t^{\Psi_2}(x) = \|P_xU_2^t\Psi_2\| = \|P_x(WU_1W^*)^tW\Psi_1\| = \|P_xU_1^t\Psi_1\| = \mu_t^{\Psi_1}(x)$$

となり，確率分布も一致することがわかる．

Ambainis 型と Gudder 型

Ambainis 型 $\begin{bmatrix}\bar{a}\\ \bar{b}\end{bmatrix}$ は $x-1$ の $\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$ に，$\begin{bmatrix}\bar{c}\\ \bar{d}\end{bmatrix}$ は $x+1$ の $\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$

Gudder 型 $\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$ は $x-1$ の $\begin{bmatrix}a\\c\end{bmatrix}$ に，$\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$ は $x+1$ の $\begin{bmatrix}b\\d\end{bmatrix}$

1 次元 2 状態の量子ウォークで，位置 x の表すヒルベルト空間 $\mathbb{C}^2$ において，$W_x = \begin{bmatrix}\bar{a} & \bar{c}\\ \bar{b} & \bar{d}\end{bmatrix}$ とする．Gudder 型の量子ウォークを U で表すと，

$$
\begin{aligned}
WUW^* \begin{bmatrix}\bar{a}\\ \bar{b}\end{bmatrix}_x &= WU \begin{bmatrix}a & b\\ c & d\end{bmatrix} \begin{bmatrix}\bar{a}\\ \bar{b}\end{bmatrix}_x = WU \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}_x \\
&= W \begin{bmatrix}a\\c\end{bmatrix}_{x-1} = \begin{bmatrix}\bar{a} & \bar{c}\\ \bar{b} & \bar{d}\end{bmatrix} \begin{bmatrix}a\\c\end{bmatrix}_{x-1} = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}_{x-1}
\end{aligned}
$$

となる．ただし，ベクトルの添え字は位置を表している．この計算から，WUW^* は Ambainis 型であることが分かり，Ambainis 型と Gudder 型はユニタリ同値であることが分かる．

ユニタリ同値性の定義：ヒルベルト空間が違う場合

例えば，1 次元 2 状態の量子ウォークのヒルベルト空間の表し方として，

$$\ell^2(\mathbb{Z},\mathbb{C}^2), \qquad \bigoplus_{x\in\mathbb{Z}} \mathbb{C}^2, \qquad \ell^2(\mathbb{Z})\otimes\mathbb{C}^2$$

などがある．他にも，$\mathbb{Z}$ を頂点集合とし，有向辺の集合を
$A=\{(x,x+1),(x+1,x)\colon x\in\mathbb{Z}\}$ とすれば，

$$\mathcal{H}=\ell^2(A)$$

も 1 次元 2 状態の量子ウォークと考えられる．このような量子ウォークの場合，ヒルベルト空間が同一とした前の定義では不十分で，もう少し一般的な定義が必要になる．

ユニタリ同値性の定義：ヒルベルト空間が違う場合

Definition

2 つの量子ウォーク $(U_1, \{\mathcal{H}_x\}_{x\in V_1}, \Psi_1)$ と $(U_2, \{\mathcal{K}_y\}_{y\in V_2}, \Psi_2)$ は，次の条件を満たすときにユニタリ同値であるという．

1. V_1 から V_2 への全単射 π が存在する．
2. 各 $x \in V_1$ に対し，$\mathcal{H}_x$ から $\mathcal{K}_{\pi(x)}$ へのユニタリ作用素 W_x が存在する．
3. $\mathcal{H} = \bigoplus_{x\in V_1} \mathcal{H}_x$ から $\mathcal{K} = \bigoplus_{y\in V_2} \mathcal{K}_y$ へのユニタリ作用素を $W = \bigoplus_{x\in V_1} W_x$ で定義するとき，

$$WU_1W^* = U_2, \quad W\Psi_1 = \Psi_2$$

が成り立つ．

このユニタリ同値性を用いることで，違うモデルの量子ウォークであっても同一とみなせることがある．

ユニタリ同値性の例：ヒルベルト空間が違う場合

$\mathbb{Z}$ を頂点集合とし，有向辺の集合 $A = \{(x, x+1), (x+1, x) \colon x \in \mathbb{Z}\}$ に対して，

$$\mathcal{H} = \ell^2(A)$$

でヒルベルト空間を考えるとき，各 $x \in \mathbb{Z}$ に対し，

$$\mathcal{H}_x = \{\xi \in \mathcal{H} \colon \mathrm{supp}(\xi) \subset \{(x-1, x), (x+1, x)\}\}$$

とする．

一方，ヒルベルト空間を $\ell^2(\mathbb{Z}) \otimes \mathbb{C}^2$ とする量子ウォークについて，$\mathcal{K}_x = |x\rangle\langle x| \otimes \mathbb{C}^2$ とすると，$\mathcal{H}_x$ から $\mathcal{K}_x$ へのユニタリ作用素を考えることができる．

ユニタリ同値類

Ambainis 型と Gudder 型の量子ウォークはユニタリ同値であった．これより，この 2 つの型の量子ウォークの性質を調べるときは，片方だけ調べれば事足りる．

このように，ユニタリ同値性があると，その同値類の代表元のみ調べれば，全ての量子ウォークを調べたことと同じになる．

つまり，量子ウォークのユニタリ同値類を明らかにすることで調べるべき量子ウォークを限定し，解析をしやすくすることができる．