

# 一维离散时间量子行走的路径分析法、概率分布与对称性

林运国<sup>1,2</sup>

(1. 福建农林大学计算机与信息学院, 福建福州 350002; 2. 南威软件集团博士后科研工作站, 福建泉州 362000)

**摘 要:** 为了模拟长程的一维离散时间量子行走的演化过程以及降低计算复杂性, 提出一种路径分析方法. 首先分析系统到达某个位置的路径分块和路径数, 将系统移位到某个位置演化算子进行分解, 表示成二阶矩阵线性空间的一组基的线性组合; 然后用超几何级数进行化简, 给出概率分布的计算方法; 最后分析产生对称式概率分布的充分条件, 表明对称性只与量子初态有关. 实验结果表明, 该方法能够有效模拟系统的长时间演化过程. 相关结果可以推广到更一般类型的离散时间量子行走.

**关键词:** 离散时间量子行走; 翻转算子; 路径分析法; 极限分布; 概率分布; 对称性

**中图分类号:** TP301.6 **文献标识码:** A **文章编号:** 0372-2112 (2021) 07-1323-08

**电子学报 URL:** <http://www.ejournal.org.cn>

**DOI:** 10.12263/DZXB.20200709

## One-Dimensional Discrete Time Quantum Walk: Path Analysis Approach, Probability Distribution and Symmetry

LIN Yun-guo<sup>1,2</sup>

(1. College of Computer and Information Sciences, Fujian Agriculture and Forestry University, Fuzhou, Fujian 350002, China;

2. Post-Doctoral Research Center, Linewell Software Co., Ltd., Quanzhou, Fujian 362000, China)

**Abstract:** In order to simulate one-dimensional discrete time quantum walks after a long time of evolution and reduce the computational complexity, we propose a path analysis approach. Dividing every path of a discrete time quantum walk into a set of blocks and counting number of paths starting from an initial qubit state, we give an expression for some evolution operator in form of a linear combination of a fixed set of basis in a 2-dimensional matrix space. As a consequence, we present a calculating formula of probability distribution in terms of hypergeometric polynomial and give a sufficient condition on symmetry of probability distribution which is only determined by initial qubit states. Our experimental results reveal that this method can well simulate the evolution process in a long time scale. We also briefly extend these studies to more general discrete time quantum walks.

**Key words:** discrete time quantum walk; flip operator; path analysis approach; limit distribution; probability distribution; symmetry

## 1 引言

量子行走作为经典随机游走概念的量子化版本, 最早由 Aharonov 等人于 1993 年提出<sup>[1]</sup>, 它是构成量子算法的有力工具<sup>[2-6]</sup>. 量子行走有两种数学模型: 连续时间量子行走和离散时间量子行走. 连续时间量子行走是由 1998 年 Farhi 和 Gutmann 提出<sup>[7]</sup>; 离散时间量子行走是由 2001 年 Watrous 提出<sup>[8]</sup>. 相较于连续型, 离散时间量子行走得到更多的关注, 学者们提出不同状态

空间上量子行走的数学模型. 比如, 线上量子行走、格上量子行走、环上量子行走以及高维量子行走等<sup>[9-12]</sup>, 其中 Hadamard 量子行走是最常见的一类模型<sup>[13]</sup>. 同时, 还有各种版本的离散时间量子行走也被相继提出. 比如, 具有 SU(2) 硬币算子的量子行走、量子行走的随机化、交替式的量子行走、具有吸收边界的量子行走等<sup>[14-18]</sup>.

作为一个数学模型, 学者们对量子行走的基础性

质做了大量研究. 比如, 行走方式、概率分布、对称性、命中时间、混合时间、周期性、极限分布等<sup>[19-24]</sup>. 常用的数学研究工具有薛定谔方法、费曼路径积分法、组合方法等, 其中组合方法是费曼路径积分法的离散化版本. 薛定谔方法是运用傅里叶变换等数学分析工具计算概率分布和统计特性<sup>[25]</sup>. 费曼路径积分法是基于相空间通过计算从一点到另一点路径数来分析量子行走的概率振幅<sup>[13, 26]</sup>. 其中, 有代表性研究成果有: Konno, Katori 等人通过对酉矩阵进行分解以及运用组合数学计算概率分布、极限定理等特性, 特别提出产生对称式概率分布的条件<sup>[22, 23]</sup>; Xiping 等人也讨论了量子行走的极限分布和 Hadamard 量子行走的概率分布对称性的必要条件<sup>[27]</sup>. 除了基本特性研究外, 学者们还在数值仿真实验方面开展研究. 比如, Rodrigues 等人提出格上离散时间量子行走的数值模拟<sup>[28]</sup>; Schuhmacher 给出离散时间量子“随机”行走的仿真<sup>[18]</sup>; Yuwana 等人运用 Matlab 模拟仿真量子行走, 给出系统的概率分布<sup>[29]</sup>; 任春年研究普适投币算符作用的量子行走数值解<sup>[30]</sup>; 胡杨熠给出 Hadamard 离散时间行走的动态演化<sup>[31]</sup>等.

现有工作虽然能推导出二维离散时间量子行走的概率分布和统计特性, 但却不能很好对长程演化(即较大的演化次数或长时间的演化)进行数值仿真实验. 使用酉算子计算量子终态和概率分布, 其计算时间复杂度为  $O(2^n)$ ; 基于薛定谔方法研究一维离散时间量子行走, 因其借助于量子态矢量的运动方程来表述模型, 特别以傅里叶变换和稳态相位法为计算工具, 这给仿真实验带来一定困难; 费曼路径积分法, 本质上与薛定谔方法是等价的. 鉴于此, 本文针对一维离散时间量子行走提出一种能够模拟仿真长程演化的路径分析方法.

## 2 离散时间量子行走

数学上, 一维离散时间量子行走 (Discrete Time Quantum Walk, DTQW) 的状态集是一个 Hilbert 空间, 表示为  $H = H_C \otimes H_p$ , 其中  $H_C = \text{span}\{|1\rangle, |0\rangle\}$  表示为硬币的状态空间,  $H_p = \text{span}\{|x\rangle : x \in \mathbb{Z}\}$  表示为系统的位置状态空间.

DTQW 的酉算子  $U$  由硬币演化算子  $C$  和位置移位算子  $S$  两部分组成, 表示为  $U = S \cdot (C \otimes I)$ . 常用地, 将硬币演化算子取为翻转算子  $\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}$ ,  $\theta \in [0, 2\pi]$  为翻转角度, 同时将它分解为  $P = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ ,  $Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix}$ , 分别表示硬币向左、向右演化算子. 若硬币演化算子取为  $SU(2)$  算子  $\begin{pmatrix} e^{i\xi} \cos\theta & e^{i\xi} \sin\theta \\ e^{-i\xi} \sin\theta & -e^{-i\xi} \cos\theta \end{pmatrix}$ , 其中  $\xi, \theta$  和  $\zeta$  为 Caley-Klein 参数, 此时记系统

为 DTQW-SU(2). 一般地, 位置移位算子取为  $S = \sum_{x \in \mathbb{Z}} [ |0\rangle\langle 0| \otimes |x-1\rangle\langle x+1| + |1\rangle\langle 1| \otimes |x+1\rangle\langle x| ]$ . 它表示如果硬币向左演化一次, 则系统所处位置向左移动一位, 否则向右移动一位. 若位置移位算子取为  $S = \sum_{x \in \mathbb{Z}} [ |0\rangle\langle 0| \otimes |x-n_k\rangle\langle x+1| + |1\rangle\langle 1| \otimes |x+n_l\rangle\langle x| ]$ , 则系统向左移动  $n_k$  位, 否则向右移动  $n_l$  位. 当  $n_k = n_l \geq 1$  时, 称该系统为离散时间无偏量子行走 (Discrete Time UnBias Quantum Walk, DTUBQW); 当  $n_k \neq n_l$  时, 称该系统为离散时间有偏量子行走 (Discrete Time Bias Quantum Walk, DTBQW); 当  $n_k, n_l$  随机取值于某一个区间, 称该系统为离散时间随机步数量子行走 (Discrete Time Random Step Quantum Walk, DTRSQW).

设量子初态为  $|\psi_0\rangle$ , 则系统经过  $t$  次演化后的量子态表示为  $|\psi_t\rangle = U^t |\psi_0\rangle = \sum_{x \in \mathbb{Z}} |\psi_t(x)\rangle$ , 其中处于位置  $x$  的状态波函数记为  $|\psi_t(x)\rangle = \psi_t^L(x) + \psi_t^R(x) = a_t(x)|1\rangle + b_t(x)|0\rangle$ ,  $t = 1, 2, \dots, n, x \in \mathbb{Z}$ .

系统处于位置  $x$  的概率分布表示为

$$P(X_t = x) = \|\psi_t(x)\|^2 = |a_t(x)|^2 + |b_t(x)|^2$$

其中,  $t = 1, 2, \dots, n, x \in \mathbb{Z}$  且  $\sum_{x \in \mathbb{Z}} P(X_t = x) = 1$ .

## 3 路径分析法

### 3.1 位置路径和移动路径

DTQW 经过  $n$  次演化后的位置集合记为  $B_n = \{-n, -(n-1), \dots, n-1, n\}$ , 并构造一个笛卡尔积  $\Omega_n = B_n^{n+1} = \{-n, -(n-1), \dots, n-1, n\}^{n+1}$ .

**定义 1** 任取一个矢量  $\omega = (\omega(0), \omega(1), \dots, \omega(n)) \in \Omega_n$ , 其中, 分量  $\omega(0), \omega(1), \dots, \omega(n)$  分别表示系统在  $t = 0, 1, \dots, n$  时刻所处的位置, 其中  $\omega(0) = 0$ , 则称该矢量为一条位置路径.

**定义 2** 称  $v = \nabla\omega = (v(1), v(2), \dots, v(n)) = (\omega(1) - \omega(0), \omega(2) - \omega(1), \dots, \omega(n) - \omega(n-1))$  为一条移动路径.

在该定义中,  $\omega(t) - \omega(t-1) \in \{-1, 1\}$  ( $t = 1, 2, \dots, n$ ) 表示系统所经历的前后位置差, 反映系统行走的方向. 当  $v(t) = -1$  时, 表示系统在第  $t$  时刻向左移动一个位置; 当  $v(t) = 1$  时, 表示系统在第  $t$  时刻向右移动一个位置. 因而, 可用  $v$  表示系统行走的方向序列.

设  $u = (u(1), u(2), \dots, u(n)) = (I_{(1)}(v(1)), I_{(1)}(v(2)), \dots, I_{(1)}(v(n)))$ , 其中, 分量  $I_{(1)}(x)$  表示集合  $\{1\}$  的示性函数. 当  $v(t) = 1$  时  $u(t) = 1$ ; 当  $v(t) = -1$  时  $u(t) = 0$ . 记  $v_i$  为系统在时刻  $t = n$  上所选择的第  $i$  条移动路径, 其中  $i = u(n)2^{n-1} + u(n-1)2^{n-2} + \dots + u(2)2^1 + u(1)2^0 \in \{0, 1, 2, \dots, 2^n\}$ .

**定义 3** 设  $P_n^{v_i(t)} \in \{P, Q\}$ ,  $t = 1, 2, \dots, n$ , 称  $P_n^{v_i} =$

$P_n^{v_i(n)} \cdots P_n^{v_i(2)} P_n^{v_i(1)} = \prod_{t=1}^n P_n^{v_i(t)}$  为一条硬币演化序列.

在定义 3 中,  $P_n^{-v_i(t)} + P_n^{v_i(t)} = C, t = 1, \dots, n$ . 用  $P_n^{v_i}$  表示系统经过  $n$  次演化后达到的位置为  $\sum_{t=1}^n v_i(t)$ . 为了方便,有时也记为  $P_n^{v_i}$ . 硬币演化序列与移动路径是一一对应的. 记所有硬币演化序列组成的集合为  $\bar{P}^n$ , 简称为  $n$  级路径集.

在上述定义和记号基础上, DTQW 经过  $n$  次演化后的酉算子的幂运算表示为:

$$U^0 = E, U^1 = P + Q, U^n = \sum_{i=0}^{2^n-1} P_n^{v_i} = \sum_{i=0}^{2^n-1} \prod_{t=1}^n P_n^{v_i(t)}$$

### 3.2 路径分块与路径数

定义 4 任意给定一条路径  $P_n^v$ , 将前后相邻的同类型向左和向右演化算子进行归纳划分, 称之为对路径  $P_n^v$  的一种分块, 用  $|P_n^v|$  表示路径  $P_n^v$  的分块数.

如果一条路径  $P_n^v$  包含  $k$  个  $P$  和  $l$  个  $Q$ , 则有  $1 \leq |P_n^v| \leq \min\{2k+1, 2l+1\}$ .

在下一节提出路径分析法之前, 先引入三张矩阵分别为  $N, B, D$ :

$$N = (N_s) = (N_1, N_2, \dots, N_{2k+1})$$

其中

$$N_i = \begin{pmatrix} G(l - (i-1)/2, (i-1)/2) & & \\ & 0 & \\ G(l - (i-1)/2 - 1, (i-1)/2 + 1) & & \end{pmatrix}, i = 1, 3, \dots, 2k+1$$

$$N_j = \begin{pmatrix} & 0 & \\ G(l - j/2, j/2) & & \\ & 0 & \end{pmatrix}, j = 2, 4, \dots, 2k$$

$$B = \begin{pmatrix} C_2^0 & 0 & 0 \\ 0 & C_2^1 & 0 \\ 0 & 0 & C_2^2 \end{pmatrix}$$

$$D = (D_s) = (D_1, D_2, \dots, D_{2k+1})$$

其中

$$D_1 = \begin{pmatrix} C_{k-1}^0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, D_i = \begin{pmatrix} C_{k-1}^{(i-1)/2} \\ 0 \\ C_{k-1}^{(i-1)/2-1} \end{pmatrix}, D_{2k+1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ C_{k-1}^k \end{pmatrix}, i = 3, 5, \dots, 2k-1$$

$$D_j = \begin{pmatrix} 0 \\ C_{k-1}^{j/2-1} \\ 0 \end{pmatrix}, j = 2, 4, \dots, 2k$$

$G(s, t)$  递归定义为:  $G(s, 0) = 0, G(s, 1) = 1, G(s, t) = \sum_{i=0}^s G(s-i, t-1), t = 1, 2, \dots, k+1$ .

定理 1 给定一类含有  $k$  个  $P$  和  $l$  个  $Q$  的路径  $P_n^v \in \bar{P}^n$ , 其中,  $k, l = 0, 1, 2, \dots, n$ , 则路径数  $M_s$  与分块数  $s$  二者之间的关系表示为

$$M = (M_s)_{1 \times (2k+1)} = \begin{cases} 1, & k = 0 \\ (N_s^T B D_s)_{1 \times (2k+1)}, & k > 0 \end{cases}$$

定理 1 回答了如何计算分块数和路径个数以及给

出了路径数  $M_s$  与分块数  $s$  之间的关系. 若将  $P$  改为  $Q$ , 结论也是成立的.

推论 1 给定一类含有  $k$  个  $P$  和  $l$  个  $Q$  路径, 另一类含有  $l$  个  $P$  和  $k$  个  $Q$  路径, 其中,  $k, l = 0, 1, 2, \dots, n$ , 它们的分块数为  $s$  路径数分别记为  $M_s^1$  和  $M_s^2$ , 则  $M_s^1 = M_s^2, s = 1, 2, \dots, n$ .

推论 2 给定一类含有  $k$  个  $P$  和  $l$  个  $Q$  路径  $P_n^v \in \bar{P}^n$ , 其中,  $k, l = 0, 1, 2, \dots, n$ , 则从  $P$  开始的路径数  $M_s^P$  与分块数  $s$  二者之间的关系表示为

$$M_P = (M_s^P)_{1 \times (2k+1)} = \begin{cases} 1, & k = 0 \\ (N_s^T B_P D_s)_{1 \times (2k+1)}, & k > 0 \end{cases}$$

$$\text{其中, } B_P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

推论 3 给定一类含有  $k$  个  $P$  和  $l$  个  $Q$  路径  $P_n^v \in \bar{P}^n$ , 其中,  $k, l = 0, 1, 2, \dots, n$ , 则从  $Q$  开始的路径数  $M_s^Q$  与分块数  $s$  二者之间的关系表示为

$$M_Q = (M_s^Q)_{1 \times (2k+1)} = \begin{cases} 1, & k = 0 \\ (N_s^T B_Q D_s)_{1 \times (2k+1)}, & k > 0 \end{cases}$$

$$\text{其中, } B_Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

## 4 位置的概率分布

### 4.1 DTQW

本节提出路径分析法以给出 DTQW 关于位置的概率分布的计算公式. 先将路径划分为以下 4 种加以归纳计算.

$$(1) P_n^v = \bar{P}_1 \bar{Q}_1 \bar{P}_2 \bar{Q}_2 \cdots \bar{P}_m \bar{Q}_m$$

该类型将路径划分为  $2m$  块, 每一块均含有若干个  $P$  或  $Q$ , 记  $\bar{P}_i \bar{Q}_i = P^{s_i} Q^{r_i}, s_i, r_i \in \mathbb{Z}^+, i = 1, 2, \dots, m$ . 按先后顺序,  $P_n^{v(n)} = P, P_n^{v(1)} = Q$ . 经过归纳计算得到如下式:

$$P_n^v = (-1)^{l-m} \cos^n \theta \tan^{2m} \theta \begin{pmatrix} 1 & -\cot \theta \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(2) P_n^v = \bar{Q}_0 \bar{P}_1 \bar{Q}_1 \bar{P}_2 \bar{Q}_2 \cdots \bar{P}_m \bar{Q}_m$$

该类型将路径划分为  $2m+1$  块, 每一块均含有若干个  $P$  或  $Q$ , 记  $\bar{Q}_0 = Q^{r_0}, \bar{P}_i \bar{Q}_i = P^{s_i} Q^{r_i}, s_i, r_i \in \mathbb{Z}^+, i = 0, 1, \dots, m. P_n^{v(n)} = Q, P_n^{v(1)} = Q$ . 经过归纳计算得到如下式:

$$P_n^v = (-1)^{l-m} \cos^n \theta \tan^{2m} \theta \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\tan \theta & 1 \end{pmatrix}$$

$$(3) P_n^v = \bar{Q}_1 \bar{P}_1 \bar{Q}_2 \bar{P}_2 \cdots \bar{Q}_m \bar{P}_m$$

该类型将路径划分为  $2m$  块, 每一块均含有若干个  $P$  或  $Q$ , 记  $\bar{Q}_i \bar{P}_i = Q^{r_i} P^{s_i}, s_i, r_i \in \mathbb{Z}^+, i = 1, 2, \dots, m$ . 按

先后顺序,  $P_n^{v(n)} = Q, P_n^{v(1)} = P$ . 经过归纳计算得到如下式:

$$P_n^v = (-1)^{l-m} \cos^n \theta \tan^{2m} \theta \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \cot \theta & 1 \end{pmatrix}$$

$$(4) P_n^v = \bar{P}_0 \bar{Q}_1 \bar{P}_1 \bar{Q}_2 \bar{P}_2 \cdots \bar{Q}_m \bar{P}_m$$

该类型将路径划分为  $2m + 1$  块, 每一块均含有若干个  $P$  或  $Q$ , 记  $P_0 = Q^s, Q_i P_i = Q^r P^r, s_i, r_i \in \mathbb{Z}^+, i = 0, 1, \dots, m, P_n^{v(n)} = P, P_n^{v(1)} = P$ . 经过归纳计算得到如下式:

$$P_n^v = (-1)^{l-m} \cos^n \theta \tan^{2m} \theta \begin{pmatrix} 1 & \tan \theta \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

为了方便计算, 对每个路径计算公式均乘上  $(-1)^{-l+2m}$  使每个式子符号变为  $(-1)^m$ , 这对概率分布计算是不会产生影响的.

令

$$\begin{aligned} \nabla \omega &= (\nabla \omega(1), \nabla \omega(2), \dots, \nabla \omega(n))^T \\ &= (\omega(1) - \omega(0), \omega(2) - \omega(1), \dots, \omega(n) - \omega(n-1))^T \\ \nabla^2 \omega &= (\nabla^2 \omega(1), \nabla^2 \omega(2), \dots, \nabla^2 \omega(n))^T \\ &= (\nabla \omega(1) - \nabla \omega(0), \nabla \omega(2) - \nabla \omega(1), \dots, \nabla \omega(n) - \nabla \omega(n-1))^T, \nabla \omega(0) = 0 \end{aligned}$$

引理 1 任意给定一条路径  $P_n^v \in \bar{P}^n$ , 则有

$$P_n^v = \frac{\cos^n \theta (i \tan \theta)^{2m}}{\text{tr}(P_n^{v(n)} P_1^{v(1)})} P_n^{v(n)} P_1^{v(1)}$$

其中,  $m = \left\lfloor \frac{\sum_{t=1}^n \delta(\nabla^2 \omega(t))}{2} \right\rfloor, \lfloor \cdot \rfloor$  为向下取整函数,  $\delta(\cdot)$  非 0 即 1 函数,  $k = 0, 1, \dots, 2^n - 1$ .

引理 1 表明路径只与首尾演化算子和分块数有关. 进一步, 根据定理 1 和引理 1, 系统处于位置  $x$  的量子左右态矢量为:

$$\begin{aligned} \psi_n^L(x) &= \sum_{s=1}^{2k+1} (C_{k-1}^s C_{l-1}^{s-1} P_{00} + C_{k-1}^{s-1} C_{l-1}^s P_{01}) \cos^n \theta (i \tan \theta)^{2s} |\psi_0\rangle \\ \psi_n^R(x) &= \sum_{s=1}^{2k+1} (C_{k-1}^{s-1} C_{l-1}^s P_{11} + C_{k-1}^s C_{l-1}^{s-1} P_{10}) \cos^n \theta (i \tan \theta)^{2s} |\psi_0\rangle \end{aligned}$$

其中,  $P_{00} = \begin{pmatrix} 1 & \tan \theta \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, P_{11} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\tan \theta & 1 \end{pmatrix}$

$$P_{01} = \begin{pmatrix} 1 & -\cot \theta \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, P_{10} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \cot \theta & 1 \end{pmatrix}$$

定义 5 给定一个量子初态  $|\psi_0\rangle$ , 任意两条路径  $P_n^{v_1}, P_n^{v_2} \in \bar{P}^n$ , 如果  $\|P_n^{v_1} |\psi_0\rangle\|^2 = \|P_n^{v_2} |\psi_0\rangle\|^2$ , 那么称这两条路径是等效的. 记为  $P_n^{v_1} \sim P_n^{v_2}$ .

性质 1 任意两条路径  $P_n^{v_1}, P_n^{v_2} \in \bar{P}^n$ , 如果  $|P_n^{v_1}| = |P_n^{v_2}|$  和  $P_n^{v_1(1)} = P_n^{v_2(1)}$ , 那么  $P_n^{v_1} \sim P_n^{v_2}$ .

路径等效是一种等价关系, 它反映两条不一样路径到达某个相同位置的概率是相等的. 性质 1 表明虽然系统在演化过程中会存在  $2^n$  条不同的路径, 但是沿

着这些路径到达某个位置的概率取值最多只有  $2n$  种. 因而, 可以按概率取值不同对系统所有  $2^n$  条路径进行路径等效划分. 这就是本文提出路径分析法的思想方法.

定理 2 给定一个量子初态  $|\psi_0\rangle, P_{n,s}^v$  是含有  $k$  个  $P$  且分块数为  $s$  的路径,  $M_s$  表示分块数为  $s$  的路径个数,  $X$  是一个关于位置的随机变量, 则 DTQW 的概率分布为

$$P(X = x) = \left\| \sum_{s=1}^{2k+1} M_s P_{n,s}^v |\psi_0\rangle \right\|^2,$$

$$k = 0, 1, 2, \dots, n; x = -n, -n + 2, \dots, n - 2, n.$$

定义 6 称下列级数是一个超几何级数<sup>[32]</sup>:

$$\begin{aligned} {}_2F_1(a_1, a_2, \dots, a_r; b_1, b_2, \dots, b_s; z) \\ = \sum_{k \geq 0} \frac{(a_1)_k (a_2)_k \cdots (a_r)_k}{(b_1)_k (b_2)_k \cdots (b_s)_k} \frac{z^k}{k!} \end{aligned}$$

其中,  $(a_1, a_2, \dots, a_r)_k = (a_1)_k (a_2)_k \cdots (a_r)_k$  且  $(a)_k$  表示升阶乘, 即  $(a)_k = a(a+1) \cdots (a+k-1)$ .

考虑一类超几何级数

$${}_2F_1(a, b; c; z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^{(n)} b^{(n)}}{c^{(n)}} \frac{z^n}{n!}$$

并令  $H(\alpha, \beta, \gamma) = {}_2F_1(\alpha + 1 - k, \beta + 1 - l; \gamma + 1; -\tan^2 \theta)$  ( $-\tan^2 \theta$ ), 那么, 定理 2 中的  $\sum_{s=1}^{2k+1} M_s P_{n,s}^v$  可用如下式计算:

$$\begin{aligned} \sum_{s=1}^{2k+1} M_s P_{n,s}^v &= (k_1 + 1) \cos^n \theta P_{00} + (k_2 + 1) \cos^n \theta P_{11} + k_3 \cos^n \theta (P_{01} + P_{10}), \\ \text{其中, } k_1 &= (k-1)H(1, 0, 1), k_2 = (l-1)H(0, 1, 1), k_3 = H(0, 0, 0). \end{aligned}$$

设  $M_{2 \times 2}(\mathbb{C})$  是所有 2 阶方阵对于通常定义下的矩阵加法和数乘运算构成一个复数域上线性空间, 其中  $P_{00}, P_{11}, P_{01}, P_{10}$  构成  $M_{2 \times 2}(\mathbb{C})$  的一组基, 可将  $\sum_{s=1}^{2k+1} M_s P_{n,s}^v$  分解为基  $P_{00}, P_{11}, P_{01}, P_{10}$  的一个线性组合. 将它作用在量子初态  $|\psi_0\rangle$  上, 就可以得到 DTQW 经过  $n$  次演化后达到位置  $x$  的量子态为  $|\psi_n(x)\rangle$ , 整个系统的量子终态为  $|\psi_n\rangle = \sum_{x \in \mathbb{Z}} |\psi_n(x)\rangle$ . 经过  $n$  次演化后, 系统处于位置的集合为  $\{-n, -n + 2, \dots, n - 2, n\}$ , 每个位置的量子态和量子左右态矢量为:

$$|\psi_n(x)\rangle = \begin{cases} \cos^n \theta P_{00}, & x = -n \\ \psi_{n,x}, & -n < x < n \\ \cos^n \theta P_{11}, & x = n \end{cases}$$

$$\psi_{n,x} = k_1 \cos^n \theta P_{00} + k_2 \cos^n \theta P_{11} + k_3 \cos^n \theta P_{01} + k_3 \cos^n \theta P_{10}$$

$$\psi_n^L(x) = \begin{cases} \cos^n \theta P_{00}, & x = -n \\ k_1 \cos^n \theta P_{00} + k_3 \cos^n \theta P_{01}, & -n < x < n \end{cases}$$

$$\psi_n^R(x) = \begin{cases} k_2 \cos^n \theta P_{11} + k_3 \cos^n \theta P_{10}, & -n < x < n \\ \cos^n \theta P_{11}, & x = n \end{cases}$$

因而,概率分布可按如下式计算:

$$P(X = x) = \begin{cases} \cos^{2n} \theta \| P_{00} |\psi_0\rangle \|^2, & x = -n \\ P_{n,x}, & -n < x < n \\ \cos^{2n} \theta \| P_{11} |\psi_0\rangle \|^2, & x = n \end{cases}$$

其中

$$P_{n,x} = \cos^{2n} \theta \{ \|(k_1 P_{00} + k_3 P_{01}) |\psi_0\rangle \|^2 + \|(k_2 P_{11} + k_3 P_{10}) |\psi_0\rangle \|^2 \}$$

该概率分布是通过将  $n$  次演化的硬币演化序列按路径类型进行划分并计算它们的路径数,最后运用超几何级数给出计算位置概率分布的表达式,称这样的方法为路径分析法. 在定理 2 中  $P_{n,s}^v$  代表一类路径,与之等效的路径个数有  $M_s$  个,因而若计算位置概率分布按不同路径的等效进行划分,则至多有  $2n$  种等价类. 这只需要多项式的时间复杂度. 然而,如果按 DTQW 的定义计算概率分布,则需要  $2^n$  条路径参与计算,其计算时间复杂度为指数阶. 同时,与文献[13,26]路径积分法对比,路径分析法表达式更容易计算. 图 1 给出 1000 次演化的 DTQW 的概率分布图,其中,  $\theta = \pi/4, |\psi_0\rangle = (1, 0)^T$ .

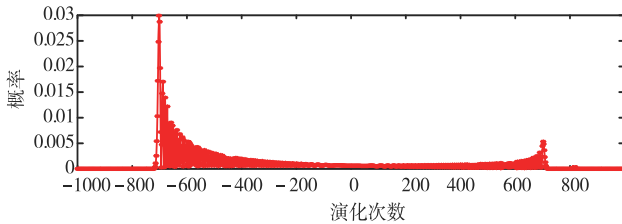


图 1 DTQW 的概率分布图

#### 4.2 DTUBQW、DTBQW、DTRSQW 和 DTQW-SU(2)

DTQW 的路径分析法得到的相关结果是可以推广到更一般类型的离散时间量子行走. 与 DTQW 相比, DTUBQW、DTBQW、DTRSQW 每一次移位其步数将不再限于一步,可以是多步也可以是随机步数.

假设给定一类含有  $k$  个  $P$  和  $l$  个  $Q$  的路径  $P_n^v \in \bar{P}^n$ , 若  $n, k, l, x$  之间的关系满足以下表达式  $k + l = n, n_l l - n_k k = x$ , 其中  $n_l, n_k \in \mathbb{Z}^+$ , 那么系统经历的位置为  $\{-n_k n, -n_k n + n_l, \dots, n_l n - n_k, n_l n\}$ .

除步数和位置不一样,不管是 DTUBQW 还是 DTBQW, 定理 2 的概率分布计算公式仍然适用. 图 2 给出 250 次演化的 DTUBQW 的概率分布图, 其中  $\theta = \pi/4, |\psi_0\rangle = (1, 0)^T, n_k = n_l = 2$ ; 图 3 给出 100 次演化的 DTBQW 的概率分布图, 其中  $\theta = \pi/4, |\psi_0\rangle = (0, 1)^T, n_k = 2, n_l = 5$ .

在文献[16]的基础上,假定在 DTRSQW 向左演化和向右演化步数取值是相互独立且每条路径都是独立的硬币演化序列,那么运用全概率公式可以给出 DTRSQW 的概率分布的计算公式.

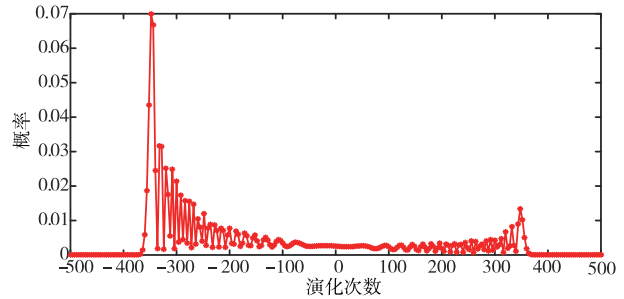


图 2 DTUBQW 的概率分布图

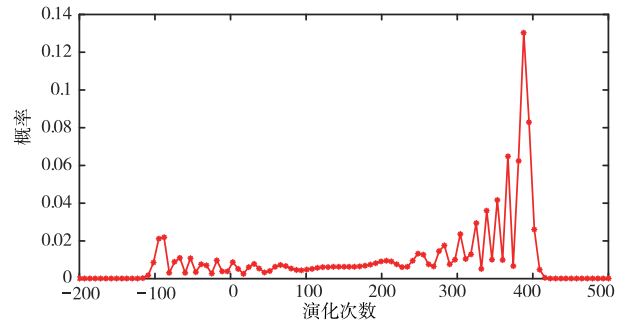


图 3 DTBQW 的概率分布图

首先,将定理 2 中概率分布表示为在向左移位步数和向右移位步数分别为  $n_k$  和  $n_l$  条件下的条件概率分布:

$$P(X = x | n_k, n_l) = \left\| \sum_{s=1}^{2k+1} M_s P_{n,s}^v |\psi_0\rangle \right\|_{(n_k, n_l)}^2.$$

其次,假定系统向左移位步数为  $n_k$  和向右移位步数为  $n_l$ , 它们以一定的概率取值于某个固定区间. 不妨将取值概率分布记为  $n_k = \{(1, p_1), (2, p_2), \dots, (n_1, p_{n_1})\}, n_l = \{(1, q_1), (2, q_2), \dots, (n_2, q_{n_2})\}$ . 由于假定硬币演化序列是独立的,因而向左移位步数和向右移位步数的联合概率分布为:  $(n_k, n_l) = \{(1, 1), p_1 q_1, ((1, 2), p_1 q_2), \dots, ((n_1, n_2), p_{n_1} q_{n_2})\}$ .

最后,运用全概率公式, DTRSQW 经过  $n$  次演化后,其概率分布为

$$P(X = x) = \sum_{k=1}^{n_1} \sum_{l=1}^{n_2} p_{n_k} q_{n_l} \left\| \sum_{s=1}^{2k+1} M_s P_{n,s}^v |\psi_0\rangle \right\|_{(n_k, n_l)}^2.$$

图 4 给出 20 次演化的 DTRSQW 的概率分布图, 其中  $\theta = \pi/12, |\psi_0\rangle = (1, 0)^T, n_k = \{(1, 0.1), (2, 0.2), (3, 0.3), (4, 0.2), (5, 0.2)\}, n_l = \{(1, 0.2), (2, 0.2), (3, 0.2), (4, 0.2), (5, 0.2)\}$ .

对于 DTQW-SU(2), 令  $P_{00} = \begin{pmatrix} 1 & e^{(\xi - \varepsilon)i} \tan \theta \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, P_{11} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -e^{(\xi - \varepsilon)i} \tan \theta & 1 \end{pmatrix}, P_{01} = \begin{pmatrix} 1 & -e^{(\xi - \varepsilon)i} \cot \theta \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, P_{10} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ e^{(\xi - \varepsilon)i} \cot \theta & 1 \end{pmatrix}.$

**引理 2** 任意给定 DTQW-SU(2) 的一类含有  $k$  个  $P$

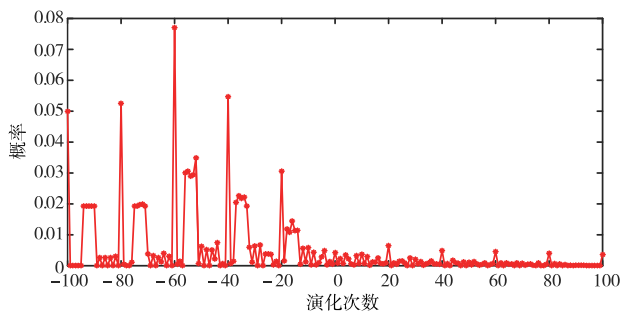


图4 DTRSQW 的概率分布图

和  $l$  个  $Q$  的路径  $P_n^v \in \bar{P}^n$ , 则有

$$P_n^v = \frac{e^{-x\xi} \cos^n \theta (i \tan \theta)^{2m}}{\text{tr}(P_n^{v(n)} P_1^{v(1)})} P_n^{v(n)} P_1^{v(1)}$$

其中,  $m = \left\lfloor \frac{\sum_{t=1}^n \delta(\nabla^2 \omega(t))}{2} \right\rfloor$ ,  $\lfloor \cdot \rfloor$  为向下取整函数,  $\delta(\cdot)$  非

0 即 1 函数,  $k = 0, 1, \dots, 2^n - 1, x = k - l$ .

**推论 4** 给定 DTQW-SU(2) 的一个量子初态  $|\psi_0\rangle$ ,

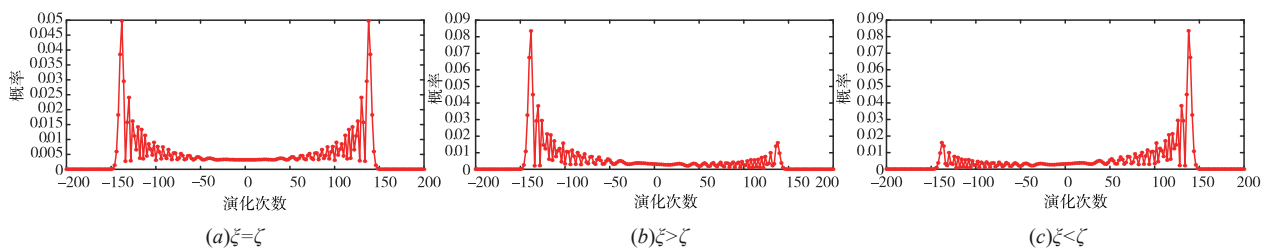


图5 DTQW-SU(2) 的概率分布图

### 5 对称性

概率分布的对称性是研究量子行走的一个重要特性. 本节首先给出 DTQW 对称性概率分布产生的充分性条件, 然后将结果推广到更一般类型的离散时间量子行走.

**定理 3** 任意给定 DTQW 的一个量子初态  $|\psi_0\rangle = \begin{pmatrix} \psi_L^0 \\ \psi_R^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 + a_2 i \\ b_1 + b_2 i \end{pmatrix}$ , 如果  $\|\psi_L^0\|^2 = \|\psi_R^0\|^2$  且  $a_1 b_1 + a_2 b_2 = 0$ , 则概率分布是关于  $Y$  轴对称.

定理 3 给出产生 DTQW 的概率分布对称性的充分性条件. 该条件只跟量子初态有关, 与演化算子是无关,  $\theta$  可取非  $\frac{n\pi}{2}$  的任意角度. 对于 Hadamard 量子行走, 当量子初态为  $|\psi_0\rangle = (\sqrt{2}/2, \sqrt{2}i/2)^T$  时, 满足充分性条件, 所以它的概率分布是对称的.

**定理 4** 任意给定 DTUBQW 或 DTBQW 的一个量子初态  $|\psi_0\rangle = \begin{pmatrix} \psi_L^0 \\ \psi_R^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 + a_2 i \\ b_1 + b_2 i \end{pmatrix}$ , 如果  $\|\psi_L^0\|^2 = \|\psi_R^0\|^2$  且  $a_1 b_1 + a_2 b_2 = 0$ , 则概率分布是关于直线

$P_{n,s}^v$  是分块数为  $s$  的路径, 含有  $k$  个  $P, M_s$  是分块数为  $s$  的路径个数,  $X$  是一个位置随机变量, 则概率分布  $P(X = x) = \left\| \sum_{s=1}^{2k+1} M_s P_{n,s}^v |\psi_0\rangle \right\|^2$ .

在该式中,

$$\sum_{s=1}^{2k+1} M_s P_{n,s}^v |\psi_0\rangle = e^{-x\xi} \{ (k_1 + 1) \cos^n \theta P_{00} + (k_2 + 1) \cos^n \theta P_{11} + k_3 \cos^n \theta P_{01} + k_3 \cos^n \theta P_{10} \}$$

其中,  $k_1 = (k - 1)H(1, 0, 1), k_2 = (l - 1)H(0, 1, 1), k_3 = H(0, 0, 0)$ .

图 5 给出 3 张 200 次的 DTQW-SU(2) 的概率分布图, 其中,  $\theta = \pi/12, |\psi_0\rangle = \left( \frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{i}{\sqrt{2}} \right)^T$ . 依据  $\xi$  和  $\zeta$  的取值不同, 其概率分布会发生左右偏移. 在图 5(a) 中,  $\xi = \zeta = 0$ ; 在图 5(b) 中,  $\xi = \frac{5\pi}{12}, \zeta = 0$ ; 在图 5(c) 中,  $\xi = 0, \zeta = \frac{5\pi}{12}$ .

$x = -n_k \cdot n + n_l \cdot n$  对称.

定理 4 给出产生 DTUBQW 和 DTBQW 的对称性概率分布的充分条件, 它与 DTQW 的结果是一致的. 另外, 研究表明对于 DTRS BW 需要加上等概率移位步数条件才能产生关于  $Y$  轴的对称概率分布.

图 6 给出 DTUBQW、DTBQW 和 DTRS BW 的对称概率分布图, 其中图 6(a),  $n = 500, \theta = \pi/3, |\psi_0\rangle = (\sqrt{6}/6 - \sqrt{3}i/3, \sqrt{3}/3 + \sqrt{6}i/6)^T$ ; 图 6(b),  $n = 100, n_k = 5, n_l = 2, \theta = \pi/3, |\psi_0\rangle = (\sqrt{6}/6 - \sqrt{3}i/3, \sqrt{3}/3 + \sqrt{6}i/6)^T$ ; 图 6(c),  $n = 20, \theta = \pi/12, |\psi_0\rangle = (1/\sqrt{2}, i/\sqrt{2})^T, n_k = \{(1, 0.2), (2, 0.2), (3, 0.2), (4, 0.2), (5, 0.2)\}, n_l = \{(1, 0.2), (2, 0.2), (3, 0.2), (4, 0.2), (5, 0.2)\}$ .

任意给定 DTQW-SU(2) 的一个量子初态  $|\psi_0\rangle = \begin{pmatrix} \psi_L^0 \\ \psi_R^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 + a_2 i \\ b_1 + b_2 i \end{pmatrix}$ , 如果该量子初态满足  $\|\psi_L^0\|^2 = \|\psi_R^0\|^2$  且  $a_1 b_1 + a_2 b_2 = 0$ , 那么系统的概率分布关于  $Y$  轴对称在一般情况下是不成立的, 都会发生左向偏移, 除非  $\xi = \zeta$ . 下面定理表明若对 DTQW-SU(2) 的量子初

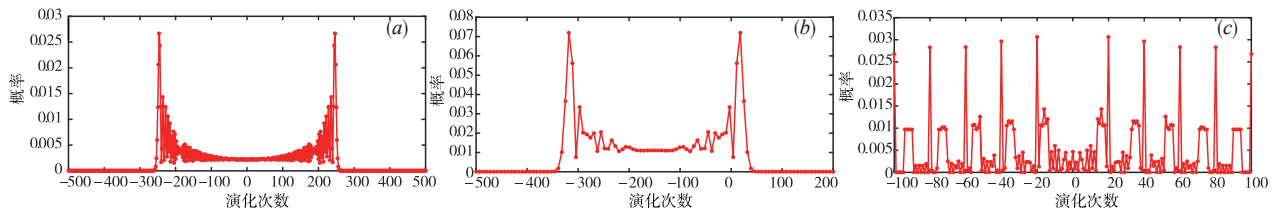


图6 DTUBQW、DTBQW 和 DTRSBW 的对称概率分布图

态做一定修正,则概率分布的对称性是可以得到满足.

**定理 5** 任意给定 DTQW-SU(2) 的一个量子初态

$|\psi_0\rangle = \begin{pmatrix} \psi_L^0 \\ \psi_R^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 + a_2 i \\ e^{(\xi - \zeta)i} (b_1 + b_2 i) \end{pmatrix}$ , 若  $\|\psi_L^0\|^2 = \|\psi_R^0\|^2$  且  $a_1 b_1 + a_2 b_2 = 0$ , 则概率分布是关于 Y 轴对称的.

图 7 给出 2 张 500 次演化 DTQW-SU(2) 的概率分布

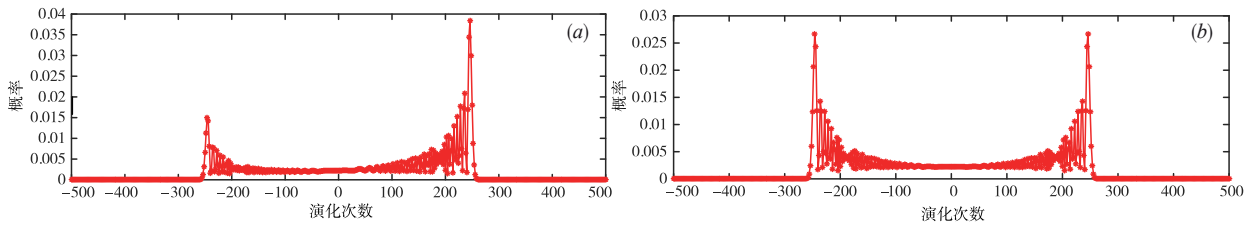


图 7 DTQW-SU(2) 的对称概率分布图

## 6 结论

本文针对长程的一维离散时间量子行走提出路径分析法并给出计算位置概率分布的公式,并对式子加以简化.此外,运用路径分析法可以推导出产生对称式概率分布的充分条件,表明概率分布的对称性只与量子初态有关.

### 参考文献

[1] Aharonov Y, Davidovich L, Zagury N. Quantum random walks[J]. Physical Review A, 1993, 48(2): 1687 – 1690.  
 [2] Shenvi N, Kempe J, Whaley K B. Quantum random walk search algorithm[J]. Physical Review A, 2003, 67(5): 052307.  
 [3] Ambainis A. Quantum walk algorithm for element distinctness [J]. SIAM Journal on Computing, 2007, 37(1): 210 – 239.  
 [4] Kempe J. Quantum Random Walks Hit Exponentially Faster [EB/OL]. <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0205083v1>, 2002.  
 [5] Ambainis A. Quantum walks and their algorithmic applications [J]. International Journal of Quantum Information, 2003, 01(04): 507 – 518.  
 [6] Andraca V, Elías S. Quantum Walks for Computer Scientists[M]. USA, Vermont: Morgan & Claypool, 2008. 61

图. 在图 7 (a) 中,  $\xi = 5\pi/12, \zeta = 3\pi/12, \theta = \pi/3, |\psi\rangle = (1/2 + i/2, 1/2 - i/2)^T$ , 虽然量子初态满足 DTQW 的对称性条件但并未得到对称性概率分布; 在图 7 (b) 中,  $\xi = 5\pi/12, \zeta = 3\pi/12, \theta = \pi/3, |\psi\rangle = (1/2 + i/2, e^{(\xi - \zeta)i} (1/2 - i/2))^T$ , 与图 7 (a) 相比是经过修正后得到的对称性概率分布.

- 87.

[7] Farhi E, Gutmann S. Quantum computation and decision trees [J]. Physical Review A, 1998, 58(2): 915 – 928.  
 [8] Watrous J. Quantum simulations of classical random walks and undirected graph connectivity [J]. Journal of Computer System Sciences, 2001, 62(2): 376 – 391.  
 [9] Kendon, Viv. Quantum walks on general graphs [J]. International Journal of Quantum Information, 2008, 04(05): 791 – 805.  
 [10] Mackay T D, Bartlett S D, Stephenson L T, et al. Quantum walks in higher dimensions [J]. Journal of Physics A, 2002, 35(12): 2745 – 2753.  
 [11] Brun T A, Carteret H A, Ambainis A. Quantum walks driven by many coins [J]. Physical Review A, 2003, 67(5): 052317.  
 [12] Ribeiro P, Milman P, Mossed R. Aperiodic quantum random walks [J]. Physical Review Letters, 2004, 93(19): 190503.  
 [13] Ambainis A, Bach E, Nayak A, et al. One-dimensional quantum walks [A]. Proceedings of the Thirty-Third Annual ACM Symposium on Theory of Computing [C]. New York, USA: ACM, 2001. 37 – 49.  
 [14] Chandrashekar C M, Srikanth R, Laflamme R, et al. Optimizing the discrete time quantum walk using a SU(2)

- coin[J]. *Physical Review A*, 2008, 77(3): 032326.
- [15] Rouseva J, Kovchegov Y. On alternating quantum walks [J]. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 2017, 470: 309 – 320.
- [16] Ahmad R, Bibi S, Sajjad U. Randomizing Quantum Walk [EB/OL]. <https://arxiv.org/abs/2003.00440>, 2020.
- [17] Wang F, Zhang P, Wang Y, et al. Quantum walk with one variable absorbing boundary [J]. *Physics Letters A*, 2017, 381(2): 65 – 69.
- [18] Schuhmacher P K, Govia L C G, Taketani B G, et al. Quantum Simulation of a Discrete-Time Quantum Stochastic Walk [EB/OL]. <https://arxiv.org/abs/2004.06151>, 2020.
- [19] Venegasandraca S E. Quantum walks: a comprehensive review [J]. *Quantum Information Processing*, 2012, 11(5): 1015 – 1106.
- [20] Higuchi Y, Konno N, Sato I, et al. Periodicity of the discrete-time quantum walk on a finite graph [J]. *Interdisciplinary Information Sciences*, 2017, 23: 75 – 86.
- [21] Krovi H, Brun T A. Hitting time for quantum walks on the hypercube [J]. *Physical Review A*, 2006, 73(3): 501 – 507.
- [22] Konno N, Namiki T, Soshi T. Symmetry of distribution for the one-dimensional Hadamard walk [J]. *Interdisciplinary Information Sciences*, 2002, 10(1): 11 – 22.
- [23] Konno N. A new type of limit theorems for the one-dimensional quantum random walk [J]. *Journal of The Mathematical Society of Japan*, 2005, 57(4): 1179 – 1195.
- [24] 韩琦, 陈芷禾, 殷世德, 等. 基于Hadamard算子的二维离散量子行走的概率测度估计 [J]. *应用数学学报*, 2020, 43(1): 49 – 61.  
Han Qi, Chen Zhi-he, Yin Shi-de, et al. Estimation of probability measure for 2-D discrete quantum walk based on Hadamard operator [J]. *Acta Mathematicae Applicatae Sinica*, 2020, 43(1): 49 – 61. (in Chinese)
- [25] Ashwin N, Ashvin V. Quantum Walk on the Line [EB/OL]. <https://arxiv.org/abs/quant-ph/0010117>, 2000.
- [26] Carteret H A, Ismail M E H, Richmond B. Three routes to the exact asymptotics for the one-dimensional quantum walk [J]. *Journal of Physics A*, 2003, 36(33): 8775 – 8795.
- [27] Xu X, Ide Y. Exact solutions and symmetry analysis for the limiting probability distribution of quantum walks [J]. *Annals of Physics*, 2016, 373: 682 – 693.
- [28] Rodrigues J, Paunković N, Mateus P. A simulator for discrete quantum walks on lattices [J]. *International Journal of Modern Physics C*, 2017, 28(04): 1750055.
- [29] Yuwana L, Purwanto A, Endarko E, et al. Matlab programming to implement quantum walk algorithm for presenting probability distributions of quantum walks [J]. *Journal of Informatics and Mathematical Sciences*, 2018, 10: 23 – 32.
- [30] 任春年, 李文东, 顾永建. 普适投币算符作用的量子行走数值解以及安德森局域化仿真 [J]. *中国海洋大学学报(自然科学版)*, 2017, 47(4): 121 – 125.  
Ren Chun-nian, Li Wen-dong, Gu Yong-jian. The numerical solution of quantum walk with general coin operator and simulation Anderson localization [J]. *Periodical of Ocean University of China*, 2017, 47(4): 121 – 125. (in Chinese)
- [31] 胡杨熠. 离散时间量子漫步的动态演化 [D]. 长沙: 国防科技大学, 2019.
- [32] 王元. *数学大辞典* [M]. 北京: 科学出版社, 2016. 525.

#### 作者简介



林运国 男, 1979年出生于福建福清, 博士, 副教授, 主要研究方向为量子计算与量子信息、模型检测.

E-mail: linyg@fafu.edu.cn