一维环上量子随机行走演化算符的本征值和本征态

李应天，徐新平

（苏州大学物理科学与技术学院，江苏苏州 215006）

摘要：利用切比雪夫多项式（Chebyshev polynomial）方法，首次推导了一维环上离散时间量子随机行走演化算符的本征值和本征态。计算结果表明，演化算符的本征值与第一类切比雪夫多项式有关，其本征态与凝聚态物理中的布里赫（Bloch）函数有关。计算结果为定量分析离散时间量子随机行走的动力学性质奠定了重要基础。

关键词：理论物理学；统计物理与复杂系统；随机行走；量子随机行走；复杂网络

中图分类号：O415　　**文献标识码**：A　　**文章编号**：1674-2850(2016)07-0683-05

Eigenvalues and eigenstates of the evolution operator of quantum walks on cycles

LI Yingtian, XU Xinping

(*School of Physical Science and Technology*, *Soochow University*, *Suzhou*, *Jiangsu* 215006, *China*)

Abstract: We investigate the eigenvalues and eigenstates of the evolution operator of the discrete-time quantum random walk on the cycles. Using the Chebyshev polynomial method, we derive exact analytical expression of the eigenvalues and eigenstates of the evolution operator for the first time. It is found that the eigenvalues of the evolution operator are closely related to the Chebyshev polynomial of the first kind, the eigenstates of the evolution operator are closely related to the Bloch function in condensed matter physics. Our results provide important information to analyze the dynamical properties of discrete-time quantum random walk.

Key words: theoretical physics; statistical physics and complex system; random walk; quantum random walk; complex network

0　引言

量子随机行走在量子计算、量子信息和凝聚态物理等领域有重要应用[1]，是近年来学术界研究的热点[1~4]。量子随机行走的一个重要研究方向是考察其相干动力学行为，并与经典随机行走的非相干动力学行为进行比较[5~8]。目前学术界存在两种不同的量子随机行走模型[1~2]，一种是离散时间（discrete-time）模型，另一种是连续时间（continuous-time）模型，二者的时间演化方式不同，不存在直接的等价关系[2~3]。本文主要讨论最简单的一维离散时间量子随机行走（discrete-time quantum random walk），连续时间量子随机行走这里不作介绍。

目前学术界关于一维离散时间量子随机行走已有大量研究，对其动力学性质也有较好的分析和理解，

基金项目：高等学校博士学科点专项科研基金（新教师基金）（20103201120003）；国家自然科学基金（11205110）

作者简介：李应天（1988—），男，硕士研究生，主要研究方向：高能物理实验中的物理分析

通信联系人：徐新平，副教授，主要研究方向：统计物理与复杂系统. E-mail: xuxinping@suda.edu.cn

如 BEDNARSKA 等[9]和 TREGENNA 等[10]得到了概率分布随时间演化的解析表达式，特别是在 Hadamard“硬币”算符作用下，概率对时间平均的极限分布与系统大小的奇偶性有关[9]。离散时间量子随机行走的动力学性质与时间演化算符的本征值和本征态有密切关系[8]。例如，离散时间量子随机行走的回归概率与时间演化算符的本征值有关，极限概率分布与时间演化算符的本征态有关[8]。演化算符的本征值和本征态在量子随机行走的动力学性质中扮演重要角色，一旦得到量子随机行走演化算符的本征值和本征态，一些动力学行为和性质就容易得到解析计算结果，从而更好地理解其动力学特性。在分析和计算一些动力学函数时，量子随机行走演化算符的本征值和本征态的计算显得尤为重要。

这里利用切比雪夫多项式方法[7, 11~12]，推导一维环上离散时间量子随机行走演化算符的本征值和本征态，以期为定量分析离散时间量子随机行走的动力学性质奠定重要基础。

1　量子随机行走的定义

离散时间量子随机行走的理论框架在学术界已经建立[1~3]。在一个 d 维规则图（d-regular graph）上，每个节点都与 d 个节点相连（假设这 d 个方向分别标为 $e_1, e_2,\ldots, e_d$），构造一个 d 维“硬币翻转”算符 $\widehat{C}$ 和位置转移算符 $\widehat{S}$；这两个算符依次作用在位置希尔伯特空间 H_p 和“硬币”希尔伯特空间 H_c 组成的直积空间 $H = H_c \otimes H_p$. 量子态的时间演化算符由式（1）给出：

$$\hat{U} = \hat{S}(\hat{I} \otimes \hat{C}), \tag{1}$$

其中，$\hat{I}$ 为“硬币”空间的单位算符。设粒子的初态为 $|\psi(0)\rangle$，经过 t 步后的量子态为 $|\psi(t)\rangle$，相邻两步的量子态满足关系 $|\psi(t+1)\rangle = \hat{U}|\psi(t)\rangle$，则 $|\psi(t)\rangle$ 可以写为[1~3]

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}^t |\psi(0)\rangle. \tag{2}$$

t 步后在节点 x 找到粒子的概率为

$$P(x,t) = \sum_i \left|\langle e_i, x|\psi(t)\rangle\right|^2 = \sum_i \left|\langle e_i, x|\hat{U}^t|\psi(0)\rangle\right|^2. \tag{3}$$

假设时间演化算符 $\widehat{U}$ 的本征值和本征态为 $u_{j,J}$ 和 $|\psi_{j,J}\rangle$，其本征方程为

$$\widehat{U}|\psi_{j,J}\rangle = u_{j,J}|\psi_{j,J}\rangle,\ j=1,2,\cdots,N;\ J=[1, d].$$

方程（3）用本征值和本征态可以表示为

$$P(x,t) = \sum_i \left|\langle e_i, x|\psi(t)\rangle\right|^2 = \sum_i \left|\sum_{j,J} u_{j,J}^t \langle e_i, x|\psi_{j,J}\rangle\langle\psi_{j,J}|\psi(0)\rangle\right|^2. \tag{4}$$

由式（4）可以看出，量子随机行走的演化概率分布可以用演化算符的本征值和本征态表示。下面将在这一理论的基础上，计算一维环上量子随机行走时间演化算符 $\widehat{U}$ 的本征值和本征态。

2　量子随机行走演化算符的矩阵形式

一维直线或环上离散时间量子随机行走有很多理论方法，本节计算一维环上量子随机行走时间演化算符的矩阵表示形式。

2.1　“硬币翻转”算符 $\widehat{C}$

为得到时间演化算符 $\widehat{U}$ 的矩阵形式，首先定义“硬币翻转”算符的矩阵形式。“硬币翻转”算符控

制硬币态的演化，最终影响量子随机行走的动力学行为。对于一维随机行走，学术界常采用如下形式的“硬币翻转”算符[1~3]：

$$\hat{\boldsymbol{C}}=\begin{pmatrix} a & b \\ b & -a \end{pmatrix} \quad (0<a<1,\ 0<b<1,\ a^2+b^2=1)\text{，} \tag{5}$$

这里将研究演化算符的本征值和本征态与参数 a、b 的关系。

2.2 位置转移算符 $\hat{S}$

对于量子态位置转移算符 $\hat{S}$，采用国际上的标准交换算符 $\hat{S}|x,\mathrm{L}\rangle=|x-1,\mathrm{R}\rangle$ 和 $\hat{S}|x,\mathrm{R}\rangle=|x+1,\mathrm{L}\rangle$，即

$$\hat{S}\,|\,x,J\rangle=\begin{cases} |\,x-1,\mathrm{R}\rangle,\ J=\mathrm{L}; \\ |\,x+1,\mathrm{L}\rangle,\ J=\mathrm{R}. \end{cases} \tag{6}$$

在节点组成的希尔伯特空间中，上述位置转移算符可以表示为如下的矩阵形式：

$$\hat{\boldsymbol{S}}=\left[\begin{array}{ccccc|ccccc} & & & & & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ & & & & & 1 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ & & 0 & & & 0 & 1 & \ddots & 0 & \vdots \\ & & & & & 0 & \vdots & \ddots & 0 & 0 \\ & & & & & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & & & & & \\ 0 & 0 & 1 & \ddots & 0 & & & & & \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & 0 & & & 0 & & \\ 0 & \vdots & \ddots & 0 & 1 & & & & & \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & & & & & \end{array}\right]. \tag{7}$$

2.3 时间演化算符 $\hat{U}$

时间演化算符 $\hat{U}=\hat{S}(\hat{I}\otimes\hat{C})$，根据硬币算符 $\hat{C}$ 和位置转移算符 $\hat{S}$ 的矩阵形式[如式（5）和式（7）所示]，时间演化算符 $\hat{U}=\hat{S}(\hat{I}\otimes\hat{C})$ 可以写为如下的矩阵形式：

$$\hat{\boldsymbol{U}}=\hat{\boldsymbol{S}}\hat{\boldsymbol{C}}_{\mathrm{p}}=\begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & b & 0 & \dots & 0 & -a \\ b & 0 & 0 & 0 & -a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b & 0 & 0 & 0 & -a & 0 \\ 0 & a & 0 & 0 & 0 & b & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a & 0 & 0 & 0 & b \\ a & 0 & 0 & 0 & b & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}. \tag{8}$$

3 量子随机行走演化算符的本征值和本征态

3.1 本征值方程

假设时间演化算符 $\hat{U}$ 的本征值和本征态为 $u_{j,J}$ 和 $|\psi_{j,J}\rangle$，其本征方程为 $\hat{U}|\psi_{j,J}\rangle=u_{j,J}|\psi_{j,J}\rangle$，$j$=1,2,⋯,$N$；$J$=L,R. 本征态 $|\psi_{j,J}\rangle$ 可以用左矢和右矢展开为

$$|\psi_{j,J}\rangle=\sum_{j,J}\alpha_{j,J}\,|\,j,J\rangle=\sum_{j}\alpha_{j,\mathrm{L}}\,|\,j,\mathrm{L}\rangle+\sum_{j}\alpha_{j,\mathrm{R}}\,|\,j,\mathrm{R}\rangle\,. \tag{9}$$

本征值方程 $\hat{U}|\psi\rangle=u|\psi\rangle$ 可以分解为如下 $2N$ 个线性方程：

$$b\alpha_{j,\mathrm{L}}-a\alpha_{j,\mathrm{R}}=u\alpha_{j+1,\mathrm{L}}\,,\quad 1\leqslant j\leqslant N; \tag{10}$$

$$a\alpha_{j,\mathrm{L}}+b\alpha_{j,\mathrm{R}}=u\alpha_{j-1,\mathrm{R}}\,,\quad 1\leqslant j\leqslant N. \tag{11}$$

利用上述方程组消去 $\alpha_{j,\mathrm{R}}$ 和 $\alpha_{j-1,\mathrm{R}}$，变为如下迭代关系：

$$\alpha_{j+1,\mathrm{L}}+\alpha_{j-1,\mathrm{L}}=\frac{u^2+1}{bu}\alpha_{j,\mathrm{L}}. \tag{12}$$

式（12）和第二类切比雪夫多项式的迭代关系一样[11~12]。令 $\dfrac{u^2+1}{bu}\equiv 2x$，则展开系数 $\alpha_{j,\mathrm{L}}$ 可以用 $\alpha_{1,\mathrm{L}}$ 和 $\alpha_{2,\mathrm{L}}$ 表示为

$$\alpha_{j,\mathrm{L}}=U_{j-2}(x)\alpha_{2,\mathrm{L}}-U_{j-3}(x)\alpha_{1,\mathrm{L}}\,, \tag{13}$$

其中，$U_j(x)$ 为第二类切比雪夫多项式[11~12]。利用式（13）、式（9）和 式（10），得到 $\alpha_{1,\mathrm{L}}$ 和 $\alpha_{2,\mathrm{L}}$ 的两组独立方程：

$$[1+U_{N-2}(x)]\alpha_{2,\mathrm{L}}=[2x+U_{N-3}(x)]\alpha_{1,\mathrm{L}}\,, \tag{14}$$

$$[2xU_{N-2}(x)-U_{N-3}(x)]\alpha_{2,\mathrm{L}}\equiv U_{N-1}(x)\alpha_{2,\mathrm{L}}=[U_{N-2}(x)+1]\alpha_{1,\mathrm{L}}\,. \tag{15}$$

式（14）和式（15）是关于 $\alpha_{1,\mathrm{L}}$ 和 $\alpha_{2,\mathrm{L}}$ 的两组独立方程，需满足有非零解。根据其系数组成的行列式等于 0，得到以下本征值方程：

$$[1+U_{N-2}(x)]^2=[2x+U_{N-3}(x)]U_{N-1}(x)\,. \tag{16}$$

利用文献[7]中的切比雪夫多项式恒等关系（A8）和（A10），本征值方程（16）化简为

$$T_N(x)=1\,, \tag{17}$$

其中，$T_N(x)$ 为第一类切比雪夫多项式[11~12]。至此得到了演化算符 $\hat{U}$ 的本征值方程，它只与第一类切比雪夫多项式有关。

3.2 本征值

本征值由方程（17）决定。根据第一类切比雪夫多项式的三角函数定义[11~12]，方程（17）的 N 个根可以表示为

$$x_k=\cos\theta_k\,,\quad \theta_k=\frac{2k\pi}{N}\,,\quad k=1,2,\cdots,N. \tag{18}$$

又根据本征值和 x 之间的映射关系 $\dfrac{u^2+1}{bu}\equiv 2x$，得到演化算符 $\hat{U}$ 的 $2N$ 个本征值为

$$u_{\pm k}=bx_k\pm\mathrm{i}\sqrt{1-b^2x_k^2}\,,\quad x_k=\cos\theta_k\,,\quad \theta_k=\frac{2k\pi}{N}\,,\quad k=1,2,\cdots,N. \tag{19}$$

3.3 本征态

根据布里赫定理（Bloch theorem）[13~14]，与本征值 u_k 相对应的归一化本征态可以表示为

$$\alpha_{j,\mathrm{L}}(\theta_k)=B(a,b,\theta_k)\exp(\mathrm{i}j\theta_k)\text{，}\tag{20}$$

$$\alpha_{j,\mathrm{R}}(\theta_k)|_{u_{\pm k}}=\frac{\mp\mathrm{i}}{a}\exp(\mathrm{i}\theta_k)(\sqrt{1-b^2\cos^2\theta_k}\pm b\sin\theta_k)B(a,b,\theta_k)\exp(\mathrm{i}j\theta_k)\text{，}\tag{21}$$

其中，归一化因子 $B(a,b,\theta_k)$ 由归一化条件 $\sum_k|\alpha_{j,\mathrm{L}}(\theta_k)|^2+\sum_k|\alpha_{j,\mathrm{R}}(\theta_k)|^2=1$ 决定：

$$B(a,b,\theta_k)=\frac{a}{\sqrt{N[a^2+(\sqrt{1-b^2\cos^2\theta_k}\pm b\sin\theta_k)^2]}}.\tag{22}$$

4 结论

利用切比雪夫多项式方法和布里赫定理，首次推导了一维环上离散时间量子随机行走演化算符的本征值和本征态。计算结果表明，演化算符的本征值与第一类切比雪夫多项式有关，其本征态与凝聚态物理中的布里赫函数有关，首次得到了本征值和本征态与硬币参数 a、b 之间的解析关系，为定量分析离散时间量子随机行走的动力学性质奠定了重要的基础。

[参考文献] (References)

[1] KEMPE J. Quantum random walks: an introductory overview[J]. Contemporary Physics, 2003, 44(4): 307-327.

[2] KENDON V. Decoherence in quantum walks: a review[J]. Mathematical Structures in Computer Science, 2007, 17(6): 1169-1220.

[3] VENEGAS-ANDRACA S E. Quantum walks: a comprehensive review[J]. Quantum Information Processing, 2012, 11(5): 1015-1106.

[4] MÜELKEN O, BLUMEN A. Continuous-time quantum walks: models for coherent transport on complex networks[J]. Physics Reports, 2011, 502(2-3): 37-87.

[5] 张晓琨，魏晨阳，徐新平. 一维量子随机行走回归概率的计算[J]. 中国科技论文在线精品论文，2014，7（3）：273-276. ZHANG X K, WEI C Y, XU X P. Return probability of one-dimensional quantum random walk[J]. Highlights of Sciencepaper Online, 2014, 7(3): 273-276. (in Chinese)

[6] XU X P. Coherent exciton transport and trapping on long-range interacting cycles[J]. Physical Review E, 2009, 79: 011117.

[7] XU X P, IDE Y, KONNO N. Symmetry and localization of quantum walks induced by an extra link in cycles[J]. Physical Review A, 2012, 85: 042327.

[8] XU X P, ZHANG X K, IDE Y, et al. Analytical solutions for quantum walks on 1D chain with different shift operators[J]. Annals of Physics, 2014, 344: 194-212.

[9] BEDNARSKA M, GRUDKA A, KURZYNSKI P, et al. Quantum walks on cycles[J]. Physics Letters A, 2003, 317(1-2): 21-25.

[10] TREGENNA B, FLANAGAN W, MAILE R, et al. Controlling discrete quantum walks: coins and initial states[J]. New Journal of Physics, 2003, 5: 83.

[11] MASON J C, HANDSCOMB D C. Chebyshev polynomials[M]. Boca Raton: Chapman and Hall/CRC, 2002.

[12] RIVLIN T J. Chebyshev polynomials: from approximation theory to algebra and number theory[M]. New York: Wiley-Interscience, 1990.

[13] KITTEL C. Introduction to solid state physics[M]. New York: Wiley, 1996.

[14] KUCHMENT P A. Floquet theory for partial differential equations[J]. Russian Mathematical Surveys, 1982, 37(4): 1-60.