第10卷 第1期
2017 年 1 月

highlights.paper.edu.cn
中国科技论文在线精品论文
Highlights of Sciencepaper Online

Vol.10 No.1
January 2017

一维链上量子随机行走演化算符的本征值和本征态

王 越，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，首次推导了一维链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二类切比雪夫多项式有关。计算结果为定量分析离散时间量子随机行走在一维链上的动力学性质奠定了基础。

关键词：理论物理学；统计物理；量子物理；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(2017)01-0035-06

Eigenvalues and eigenstates of the evolution operator of quantum random walk on 1D chain

WANG Yue, XU Xinping

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

Abstract: Using the Chebyshev polynomial method, we derive the eigenvalues and eigenstates of the evolution operator of the discrete-time quantum random walk on 1D chain for the first time. It is found that the eigenvalues of the evolution operator are closely related to the Chebyshev polynomial of the second kind. The results presented in this paper are important to quantatively analyze the dynamical properties of discrete-time quantum random walk on 1D chain.

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

0 引言

在量子计算中，量子随机行走是经典随机行走（如布朗运动）的量子模拟。与经典随机行走相似，量子随机行走的瞬时状态由所处位置的概率分布描述，在量子随机行走中粒子可以处在很多位置的重叠态中。类比经典随机行走，有两种形式的量子游走——离散时间下的量子随机行走（discrete-time quantum walk）和连续时间下的量子随机行走（continuous-time quantum walk）[1~4]。

量子随机行走可以看作经典随机行走在量子系统上的一种自然延伸。在量子信息和量子计算科学中，量子随机行走提供了一种非常好的量子算法，例如：量子随机行走提供了一种比任何经典随机行走快指数倍的运算法则，比经典计算有更快的多项式分解速度，如元素区分问题、寻找三角形问题和数值评价“与非树”，著名的 Grover 搜索算法也可以认为是一种量子随机行走算法[5~7]。

本文主要讨论最简单的一维离散时间量子随机行走，连续时间量子随机行走这里不作介绍。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关[8]，一旦得到量子随机行走时间演

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

作者简介：王越（1992—），男，硕士研究生，主要研究方向：高能物理实验中的数据分析

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

化算符的本征值和本征态，一些动力学行为和性质更容易得到解析计算结果，从而更好地理解其动力学特性。因此，在分析一些量子随机行走的动力学性质时，求解量子随机行走时间演化算符的本征值和本征态显得尤为重要。

本课题组曾经推导过一维环上量子随机行走时间演化算符的本征值和本征态[9]。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，并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。本文主要研究一维链上量子随机行走时间演化算符的本征值和本征态。一维链和一维环在拓扑结构上不同，因此，同样采用切比雪夫多项式方法，得到的本征值和本征态不同。本文和文献[9]内容相辅相成，为定量分析一维离散时间量子随机行走的动力学性质奠定基础。

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，每个节点都和 d 个节点相连（假设这 d 个方向分别标为 $e_1, e_2, \cdots, e_d$），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 $H = H_\mathrm{c} \otimes H_\mathrm{p}$. 量子态的时间演化算符由式（1）给出：

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

其中，$\widehat{I}$ 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]

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

t 步后在节点 x 找到粒子的几率为

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

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几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，计算一维链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

本节计算一维链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]：

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

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 $\widehat{S}$

对于量子态位置转移算符 $\widehat{S}$，采用国际上广泛使用的交换转移算符（swapping shift operator）$\widehat{S}|x,\mathrm{L}\rangle=|x-1,\mathrm{R}\rangle$ 和 $\widehat{S}|x,\mathrm{R}\rangle=|x+1,\mathrm{L}\rangle$，即

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

对于一维链，在节点和硬币态组成的希尔伯特空间中，上述位置转移算符可以表示成如下的矩阵形式：

$$\widehat{\boldsymbol{S}}=\begin{array}{c}\\ 2\\ \vdots\\ N\\ 1\\ \vdots\\ N-1\end{array}\!\!\begin{array}{c}\overbrace{\begin{array}{cccc}2 & \cdots\ N & 1\cdots & N-1\end{array}}\\ \left[\begin{array}{cccc} & & 1 & 0\\ & 0 & \ddots & \\ & & 0 & 1\\ 1 & 0 & & \\ & \ddots & 0 & \\ 0 & 1 & & \end{array}\right]\end{array}. \tag{7}$$

2.3 时间演化算符 $\widehat{U}$

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

$$\widehat{\boldsymbol{U}}=\widehat{\boldsymbol{S}}\widehat{\boldsymbol{C}}_{\mathrm{p}}=\begin{array}{c}\\ 2\\ \vdots\\ N-1\\ N\\ 1\\ 2\\ \vdots\\ N-1\end{array}\!\!\begin{array}{c}\overbrace{\begin{array}{cccccccc}2 & \cdots & N-1 & N & 1 & 2 & \cdots & N-1\end{array}}\\ \left[\begin{array}{cccccccc} 0 & & & & 1 & & & 0\\ b & 0 & & & & & \ddots & \\ & \ddots & 0 & & & & -a & \\ & & b & 0 & 0 & & & -a\\ a & & & 0 & 0 & b & & \\ & \ddots & & & & 0 & \ddots & \\ & & a & & & & 0 & b\\ 0 & & & 1 & & & & 0 \end{array}\right]\end{array}. \tag{8}$$

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 $\widehat{U}$ 的本征值和本征态分别为 $u_{j,J}$ 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,⋯,$N$；$J$=L, R. 本征态 $|\psi_{j,J}\rangle$ 可以用左矢和右矢展开为

$$|\psi_{j,J}\rangle=\sum_{j,J}\alpha_{j,J}\,|\,j,J\rangle=\sum_{j=2}^{N}\alpha_{j,\mathrm{L}}\,|\,j,\mathrm{L}\rangle+\sum_{j=1}^{N-1}\alpha_{j,\mathrm{R}}\,|\,j,\mathrm{R}\rangle\ . \tag{9}$$

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：

$$\alpha_{1,\mathrm{R}} = u\alpha_{2,\mathrm{L}}\,; \tag{10}$$

$$b\alpha_{j,\mathrm{L}} - a\alpha_{j,\mathrm{R}} = u\alpha_{j+1,\mathrm{L}},\quad 2 \leqslant j \leqslant N-1\,; \tag{11}$$

$$a\alpha_{j,\mathrm{L}} - a\alpha_{j,\mathrm{R}} = u\alpha_{j-1,\mathrm{R}},\quad 2 \leqslant j \leqslant N-1\,; \tag{12}$$

$$\alpha_{N,\mathrm{L}} = u\alpha_{N-1,\mathrm{R}}\,. \tag{13}$$

利用式（11）和式（12）消去 $\alpha_{j,\mathrm{R}}$ 和 $\alpha_{j-1,\mathrm{R}}$，得到左矢展开系数的迭代关系：

$$\alpha_{j+1,\mathrm{L}} + \alpha_{j-1,\mathrm{L}} = \frac{u^2+1}{bu}\alpha_{j,\mathrm{L}}. \tag{14}$$

式（14）和第二类切比雪夫多项式的迭代关系一样[10~11]。令 $\frac{u^2+1}{bu} \equiv 2x$，则展开系数 $\alpha_{j,\mathrm{L}}$ 可以用 $\alpha_{3,\mathrm{L}}$ 和 $\alpha_{2,\mathrm{L}}$ 表示为

$$\alpha_{j,\mathrm{L}} = U_{j-3}(x)\alpha_{3,\mathrm{L}} - U_{j-4}(x)\alpha_{2,\mathrm{L}},\quad 2 \leqslant j \leqslant N\,, \tag{15}$$

其中，$U_j(x)$ 为第二类切比雪夫多项式[10~11]。联合式（11）和式（13），并利用 $\alpha_{j,\mathrm{L}}$ 的通项表达式（15），得到关于 $\alpha_{3,\mathrm{L}}$ 和 $\alpha_{2,\mathrm{L}}$ 的一组方程：

$$[\left(a+u^2\right)U_{N-4}(x) - buU_{N-5}(x)]\alpha_{2,\mathrm{L}} - [\left(a+u^2\right)U_{N-3}(x) - buU_{N-4}(x)]\alpha_{3,\mathrm{L}} = 0\,. \tag{16}$$

又根据式（12）得到 $a\alpha_{2,\mathrm{L}} + b\alpha_{2,\mathrm{R}} = u\alpha_{1,\mathrm{R}}$，利用式（11）消去 $\alpha_{2,\mathrm{R}}$ 并利用式（10）消去 $\alpha_{1,\mathrm{R}}$，得到另外一组关于 $\alpha_{3,\mathrm{L}}$ 和 $\alpha_{2,\mathrm{L}}$ 的方程：

$$\left(1-au^2\right)\alpha_{2,\mathrm{L}} - bu\alpha_{3,\mathrm{L}} = 0\,. \tag{17}$$

式（16）和式（17）是关于 $\alpha_{2,\mathrm{L}}$ 和 $\alpha_{3,\mathrm{L}}$ 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零，得到以下本征值方程：

$$abu\left(u^2-1\right)U_{N-2}(x) = 0\,. \tag{18}$$

上述方程的解为 u=0, ±1 及 $U_{N-2}(x)=0$. 显然 u=0 不符合物理要求，应舍弃。这样演化算符的 $2N$–2 个本征值为 $u=\pm1$；剩下的 2(N–2)个本征值由方程 $U_{N-2}(x)=0$ 确定。

3.2 本征值

本征值由式（18）决定。根据第二类切比雪夫多项式的三角函数定义[10~11]，方程 $U_{N-2}(x)=0$ 的 N–2 个根可以表示为

$$x_k = \cos\theta_k,\quad \theta_k = \frac{k\pi}{N-1},\qquad k=1,2,\cdots,N-2. \tag{19}$$

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

$$u_{\pm k} = bx_k \pm \mathrm{i}\sqrt{1-b^2x_k^2}\,,\quad x_k = \cos\theta_k\,,\quad \theta_k = \frac{k\pi}{N-1}\,,\quad k=1,2,\cdots,N-2. \tag{20}$$

另外，还有两个特殊本征值 $u_{\pm0} = \pm1$，总计 $2N$–2 个本征值全部确定。

3.3　本征态

先确定两个特殊本征值 $u_{\pm 0}=\pm 1$ 的本征态。根据 u 和 x 之间的映射关系 $\frac{u^2+1}{bu}\equiv 2x$，$u_{\pm 0}=\pm 1$ 时可知 $x_{\pm 0}=\pm 1/b$. 由式（17）得 $\alpha_{3,\mathrm{L}}=\pm\frac{1-a}{b}\alpha_{2,\mathrm{L}}$，此时式（15）可以写为

$$\alpha_{j,\mathrm{L}}(x_{\pm 0})=\left[\left(\pm\frac{1-a}{b}\right)U_{j-3}\left(\pm\frac{1}{b}\right)\alpha_{3,\mathrm{L}}-U_{j-4}\left(\pm\frac{1}{b}\right)\right]\alpha_{2,\mathrm{L}}=\left(\pm\frac{1-a}{b}\right)^{j-2}\alpha_{2,\mathrm{L}}(x_{\pm 0}).\tag{21}$$

同样地，根据式（11）可以计算出 $x_{\pm 0}=\pm 1/b$ 的右矢展开系数：

$$\alpha_{j,\mathrm{R}}(x_{\pm 0})=\frac{b}{a}\alpha_{j,\mathrm{L}}(x_{\pm 0})-\frac{u}{a}\alpha_{j+1,\mathrm{L}}(x_{\pm 0})=\pm\left(\pm\frac{1-a}{b}\right)^{j-1}\alpha_{2,\mathrm{L}}(x_{\pm 0}).\tag{22}$$

根据本征态的正交归一化条件 $\sum_{j=2}^{N}\left|\alpha_{j,\mathrm{L}}\right|^2+\sum_{j=1}^{N-1}\left|\alpha_{j,\mathrm{R}}\right|^2=1$，可以求得式（21）和 式（22）中的 $\alpha_{2,\mathrm{L}}$：

$$\alpha_{2,\mathrm{L}}(x_{\pm 0})=\frac{1-\frac{1-a}{b}}{2\left[1-\left(\frac{1-a}{b}\right)^{N-1}\right]}.\tag{23}$$

对于 $U_{N-2}(x)=0$ 的本征值所对应的本征态，也可以采用上述计算方法。先由式（17）得到 $\alpha_{2,\mathrm{L}}$ 和 $\alpha_{3,\mathrm{L}}$ 的关系式：

$$\alpha_{3,\mathrm{L}}(x_{\pm k})=\left(2x-\frac{1+a}{b}u\right)\alpha_{2,\mathrm{L}}(x_{\pm k}),\tag{24}$$

将式（24）代入式（15），得

$$\begin{aligned}\alpha_{j,\mathrm{L}}(x_{\pm k})&=\left[\left(2x-\frac{1+a}{b}u\right)U_{j-3}(x_{\pm k})-U_{j-4}(x_{\pm k})\right]\alpha_{2,\mathrm{L}}(x_{\pm k})\\&=\left[U_{j-2}(x_{\pm k})-\frac{1+a}{b}uU_{j-3}(x_{\pm k})\right]\alpha_{2,\mathrm{L}}(x_{\pm k}).\end{aligned}\tag{25}$$

根据式（11），右矢展开系数可以表示为

$$\alpha_{j,\mathrm{R}}(x_{\pm k})=\frac{b}{a}\alpha_{j,\mathrm{L}}(x_{\pm k})-\frac{u}{a}\alpha_{j+1,\mathrm{L}}(x_{\pm k})=\left[-\frac{1+a}{b}U_{j-2}(x_{\pm k})+uU_{j-1}(x_{\pm k})\right]\alpha_{2,\mathrm{L}}(x_{\pm k}),\ j=1,2,\cdots,N-1.\tag{26}$$

式（25）和式（26）的共同系数 $\alpha_{2,\mathrm{L}}(x_{\pm k})$ 可以由正交归一化条件 $\sum_{j=2}^{N}\left|\alpha_{j,\mathrm{L}}\right|^2+\sum_{j=1}^{N-1}\left|\alpha_{j,\mathrm{R}}\right|^2=1$ 确定，

$$\alpha_{2,\mathrm{L}}(x_{\pm k})=\frac{\frac{1-a}{2}\sin^2\theta_k}{(N-1)\left(1-b^2\cos^2\theta_k\right)},\quad \theta_k=\frac{k\pi}{N-1},\ k=1,2,\cdots,N-2.\tag{27}$$

至此，所有的正交归一化本征态全部确定。

4　结论

利用切比雪夫多项式方法，首次推导了一维链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，演化算符存在两个特殊的本征值±1，其他本征值与第二类切比雪夫多项式有关，同时确定了所有本征值对应的正交归一化本征态。并首次得到了一维链上量子随机行走演化算符的本征值和本征态与硬币参数 a、b 之间的解析关系。

[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] CHILDS A M, van DAM W. Quantum algorithms for algebraic problems[J]. Reviews of Modern Physics, 2010, 82: 1-52.

[6] VENEGAS-ANDRACA S E. Quantum walks for computer scientists[M]. San Rafael, CA: Morgan and Claypool Publishers, 2008.

[7] PORTUGAL R. Quantum walks and search algorithms[M]. New York: Springer, 2013.

[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] 李应天，徐新平. 一维环上量子随机行走演化算符的本征值和本征态[J]. 中国科技论文在线精品论文，2016，9（7）：683-687.
LI Y T, XU X P. Eigenvalues and eigenstates of the evolution operator of quantum walks on cycles[J]. Highlights of Sciencepaper Online, 2016, 9(7): 683-687. (in Chinese)

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

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