

基于散射量子行走的完全图上结构异常搜索算法

薛希玲 陈汉武 刘志昊 章彬彬

Search algorithm of structure anomalies in complete graph based on scattering quantum walk

Xue Xi-Ling Chen Han-Wu Liu Zhi-Hao Zhang Bin-Bin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 080302 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.080302

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.080302>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I8>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于相位匹配的量子行走搜索算法及电路实现

Quantum walk search algorithm based on phase matching and circuit cplementation

物理学报.2015, 64(24): 240301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.240301>

球坐标中三维各向同性谐振子的类经典态

Near classical states of three-dimensional isotropic harmonic oscillator in spherical coordinate system

物理学报.2015, 64(8): 080301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.080301>

星图上的散射量子行走搜索算法

Scattering quantum walk search algorithm on star graph

物理学报.2015, 64(1): 010301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.010301>

不同磁场环境下 Heisenberg XXZ 自旋链中的热量子失协

Thermal quantum discord in Heisenberg XXZ model under different magnetic field conditions

物理学报.2013, 62(11): 110303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.110303>

基于散射量子行走的完全图上结构异常搜索算法*

薛希玲 陈汉武† 刘志昊 章彬彬

(东南大学计算机科学与工程学院, 南京 210096)

(2015年11月2日收到; 2016年1月11日收到修改稿)

完全图 K_N 上某个顶点连接到图 G 将破坏其对称性. 为加速定位这类结构异常, 基于散射量子行走模型设计搜索算法, 首先给出了算法酉算子的定义, 在此基础上利用完全图的对称性, 将算法的搜索空间限定为一个低维的坍塌图空间. 以 G 为一个顶点的情况为例, 利用硬币量子行走模型上的研究结论简化了坍塌图空间中酉算子的计算, 并借助矩阵扰动理论分析算法演化过程. 针对星图 S_N 上结构异常的研究表明, 以星图中心节点为界将整个图分为左右两个部分, 当且仅当两部分在 $N \rightarrow \infty$ 时具有相同的特征值, 搜索算法可以获得量子加速. 本文说明星图上的分析方法和结论可以推广至完全图的坍塌图上. 基于此, 本文证明无论完全图连接的图 G 结构如何, 搜索算法均可在 $O(\sqrt{N})$ 时间内定位到目标顶点, 成功概率为 $1 - O(1/\sqrt{N})$, 即量子行走搜索该类异常与经典搜索相比有二次加速.

关键词: 散射量子行走, 量子搜索, 完全图

PACS: 03.67.Ac, 03.65.Aa

DOI: 10.7498/aps.65.080302

1 引言

经典随机行走为因式分解、 k -SAT、图同构等问题提供了一些最广为人知的算法. 与经典的连续和离散随机行走相对应, 量子行走也分为连续时间量子行走和离散时间量子行走, 二者都是通用的计算模型^[1-3]. 其中离散量子行走又包含了硬币量子行走^[4]和散射量子行走^[5]. 图上的硬币量子行走是定义在顶点上的行走, 需要一个辅助的硬币空间, 其维数为顶点的度数. 散射量子行走将图的所有边编码成量子态, 行走不使用硬币算子. 文献^[6]证明两种离散量子行走酉等价, 但散射量子行走非正则图上的定义更加自然且物理实现更加直接. 目前量子行走已有不同物理系统的实验室实现, 如离子阱^[7]和光网络中的光子^[8,9].

大量研究证实量子行走是设计量子算法的有用工具, 其中尤为显著的是搜索算法的设计^[10-16].

现有的量子行走搜索算法均定义在具有某种对称性的图上, 如超立方体^[10,11]、强正则图^[14]、星图等^[16], 但能获得量子加速的图需要具有何种性质目前尚无定论. 基本的搜索算法存在一个或多个使用 oracle 标识的目标顶点, 算法的目标是找到该顶点. 近期的研究表明量子行走在星图上查找标记结构或打破图的对称性的结构方面的有用性^[17-19]. 文献^[19]给出了星图上几类结构异常的搜索算法, 如叶节点连接到另一个星图等. 这类算法针对每类不同的异常设计特定的初态, 使用矩阵扰动理论分析演化算子的特征谱来分析算法的演化过程, 计算复杂且不具有通用性. Cottrell^[20,21]通过数学分析给出了搜索星图的叶节点连接图 G 的一般结论. 以星图中心节点为界将整个图划分为左右两部分, 证明当且仅当两部分在 $N \rightarrow \infty$ 时具有相同的特征值可以获得二次加速, 并且证明时间复杂度的下界为 $O(\sqrt{N})$.

星图上顶点之间的关系简单, 演化算子的形式

* 国家自然科学基金 (批准号: 61502101, 61170321)、江苏省自然科学基金 (批准号: BK20140651) 和高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20110092110024) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hanwu_chen@163.com

相对固定, 已有研究均针对星图上的结构异常. 本文基于散射量子行走模型研究完全图 K_N 上存在某个顶点连接到图 G 的结构异常, 设计搜索算法定位该顶点. 文中第二节定义了搜索算法使用的演化算子, 介绍了坍塌图的概念. 第三节以 G 为一个顶点的情况为例, 借助矩阵扰动理论给出了算法演化过程的分析, 并利用硬币量子行走模型上的研究结论^[22] 简化了酉算子的推导过程. 第四节介绍了 Cottrell 在星图上的结论并说明其适用于完全图. 在此基础上得到本文的主要结论, 即证明无论完全图连接的图 G 结构如何, 搜索算法均可在 $O(\sqrt{N})$ 时间内以 $1 - O(1/\sqrt{N})$ 的成功概率定位到异常顶点.

2 基本概念与定义

2.1 散射量子行走模型

在图 $G(V, E)$ 上的散射量子行走对应的 Hilbert 空间由图的所有边张成, 且每条边对应两个基态. 对于图 G 的每个顶点 $k (k \in V)$ 存在两个不重叠的子空间: 由顶点 k 出发的基态张成的子空间 A_k 和以顶点 k 为终点的基态张成的子空间 Ω_k . 散射量子行走可看作是从 $\Omega_k \rightarrow A_k$ 的映射, 即在顶点 k 的散射, 如图 1 所示. 局部酉算子 U^k 作用于

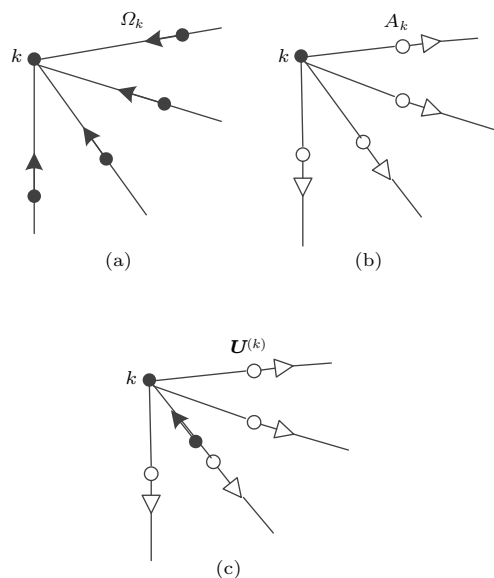


图 1 (a) 以 k 为终点的基张成的子空间 Ω_k ; (b) 以 k 为出发点的基张成的子空间 A_k ; (c) 酉变换 $U^{(k)} : \Omega_k \rightarrow A_k$ 是在顶点 k 的散射

Fig. 1. (a) The subspace Ω_k of states entering vertex k ; (b) the subspace A_k of states exiting vertex k ; (c) the action of the local unitary $U^{(k)} : \Omega_k \rightarrow A_k$ can be viewed as scattering on vertex k .

每个顶点, 将入边态映射为出边态, 图 G 上的酉算子为所有顶点演化算子的并: $\Gamma \oplus_k U^k, k (k \in V)$, Γ 是作用于基态的置换算子.

2.2 局部演化算子的定义

搜索算法对目标顶点和非目标顶点执行不同的操作. 对于基本搜索算法, 若 k 是目标顶点则对其进行一次反射 $U^k |j, k\rangle = e^{i\phi} |k, j\rangle$. 否则 U^k 定义如下: $U^k |j, k\rangle = r |k, j\rangle + t \sum_{l \neq j} |k, l\rangle$, 这里 r 和 t 是使得 U 满足酉性的反射和透射因子. 对于度为 d 的顶点, 算子的酉性要求 $|r|^2 + (d-1)|t|^2 = 1$ 和 $rt^* + r^*t + (d-2)|t|^2 = 0$. 若取 $r = -1 + \frac{2}{d}$,

$t = \frac{2}{d}$, 则对应于 Grover 算子^[23] $G = 2|\varphi\rangle\langle\varphi| - I = \begin{pmatrix} \frac{2}{n} - 1 & \frac{2}{n} & \dots & \frac{2}{n} \\ \frac{2}{n} & \frac{2}{n} - 1 & \dots & \frac{2}{n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{2}{n} & \frac{2}{n} & \dots & \frac{2}{n} - 1 \end{pmatrix}_{n \times n}$, 其中均匀叠加态

$|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=0}^{n-1} |i\rangle$. 该算子是所有满足酉性和置换对称性的算子中距恒等算子最远的^[4], 这在直观上能加快行走的扩散速度.

为搜索完全图上的结构异常, 算子的定义是算法的关键. 不失一般性, 设完全图 K_N 上顶点 1 连接到图 G , 记 d_k 为顶点 k 的度, $r_k = \frac{2}{d_k} - 1$, $t_k = \frac{2}{d_k}$. 作用于顶点 k 的酉算子 U^k 定义如下:

$$U^k |j, k\rangle = \begin{cases} e^{i\phi} \left(r_k |1, j\rangle + t_k \sum_{l \neq j} |1, l\rangle \right), & k = 1, \\ r_k |k, j\rangle + t_k \sum_{l \neq j} |k, l\rangle, & k \neq 1. \end{cases} \quad (1)$$

下述算法中我们取 $\phi = \pi$, 算子 U^k 对入射边进行散射并执行一次 oracle 查询标记目标顶点. oracle 是用于研究判定问题的抽象机器, 在经典算法设计中有广泛应用. 可以将其视为能够在单个时间步内确定某个判定问题的黑箱, 亦即 oracle 能够识别特定问题的解. 其本质同其他函数一样, 提供了一种量化执行一个搜索算法所需资源的方式. 在量子计算的背景下, 作为简化算法设计过程的工具, 使用 oracle 来识别满足条件的解. 搜索算法以 oracle 的调用次数衡量时间复杂度, 即查询复杂度.

2.3 坍缩图上的量子行走

定义 1 图的同构是保持图不变的顶点和边的置换. 若图 $G(V, E)$ 上定义了算子 U , 自同构 $A: E \rightarrow E$ 满足 $A^{-1}UA = U$, 即 A 和 U 对易, 称 A 为量子图自同构^[21]. 量子图自同构是保持 U 的作用不变的顶点和边的置换. 若存在边的集合 $X \subseteq E$, 使得 $\forall e \in X, Ae \in X$, 则 $\{e\}$ 构成一个等价类, 同一等价类的边构成坍缩图上的一条边.

定义 2 对任意定义了算子 U 的图 G , 其在量子图自同构 A 作用下的坍缩图^[21] 对应下列状态 $G_A \equiv \{\psi: A\psi = \psi\}$. 即 G_A 由在量子图自同构 A 的作用下保持不变的状态构成. 注意坍缩图的定义借助图上的边和 Hilbert 空间状态的对应关系.

考虑完全图 K_3 在算子 U 作用下的坍缩图, 如图 2 所示. 定义算子 U 在 K_3 上的作用如下: 在顶点 a 为严格反射的, 顶点 b, c 为严格透射的, 例如 $U|b, a\rangle = |a, b\rangle$, $U|b, c\rangle = |c, a\rangle$. 惟一不平行的量子图自同构 A 交换 b 和 c , 即 A 做如下交换: $|a, b\rangle \leftrightarrow |a, c\rangle$, $|b, a\rangle \leftrightarrow |c, a\rangle$, $|b, c\rangle \leftrightarrow |c, b\rangle$. 原图 K_3 有 3 条边对应 6 个状态, 带自环边的坍缩图对应 3 个状态: $|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a, b\rangle + |a, c\rangle)$, $|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|b, a\rangle + |c, a\rangle)$, $|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|b, c\rangle + |c, b\rangle)$, 注意 $\{|\psi_i\rangle, i = 1, 2, 3\}$ 在 U 的作用下封闭, 即 $U|\psi_1\rangle = |\psi_3\rangle$, $U|\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle$, $U|\psi_3\rangle = |\psi_2\rangle$.

算法在坍缩图 G_A 的不变子空间中演化, 如果初始状态在该子空间中, 量子行走将局限于这个子空间. 若坍缩图状态空间的维度极大地降低, 可以简化算法分析过程.

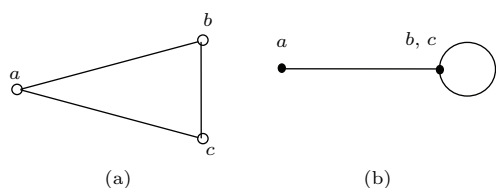


图 2 (a) 完全图 K_3 ; (b) K_3 的坍缩图

Fig. 2. (a) Complete graph K_3 ; (b) collapsed graph of K_3 .

3 搜索算法描述和分析

3.1 算法描述

假设完全图 K_N 上某顶点连接到图 G , 为定位到该顶点, 基于查询模型的搜索算法基本步骤如下:

1) 初始化系统状态为均匀叠加态

$$|\psi_{\text{init}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N(N-1)}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j \neq i}^N |i, j\rangle;$$

2) 应用扰动的行走酉算子 U , 执行次数为 m ;

3) 测量终态 $|\psi_{\text{final}}\rangle = U^m |\psi_{\text{init}}\rangle$.

将系统状态初始化为均匀叠加态是由于无法预知目标顶点的信息, 对算法而言所有顶点是等价的. 迭代次数 m 的取值须使得以最大概率测得目标顶点, 要通过对算法演化过程的分析得到. 在散射量子行走模型下算法的一般分析模式如下^[18,19]: 首先找到行走发生的低维不变子空间, 即坍缩图的行走空间, 确定该空间中算子 U 的形式. 然后求解 U 的特征值 λ 和特征向量 $|\mathbf{v}_\lambda\rangle$, 这要利用矩阵微扰理论, 取 $N \rightarrow \infty$ 的极限求得 0 阶解, 然后对其修正得到近似解. 将初态用特征向量表出, 计算 U 在该状态上的作用, 最终根据 $|\psi_{\text{final}}\rangle = \sum_{\lambda} \lambda^m \langle \mathbf{v}_\lambda | \psi_{\text{init}} \rangle |\mathbf{v}_\lambda\rangle$ 计算最大成功概率及时间步 m .

3.2 坍缩图上的状态和算子

设外接图 G 为一个顶点, 记为 $N+1$, 如图 3(a), 以此为例给出搜索算法的分析过程. 为确定行走发生的不变子空间, 考察完全图 K_N 在 (1) 式定义的酉算子下的坍缩图. 自同构映射 A 要反映 U , 则完全图中与目标顶点 1 相连的边与其他边分属不同的等价类, 连接点 $N+1$ 的完全图 K_N 在 A 作用下的坍缩如图 3(b) 所示. 点 c 由原图的 $N-1$ 个点坍缩得到, 其上的自环边由原图每个顶点的 $N-2$ 条边坍缩而来.

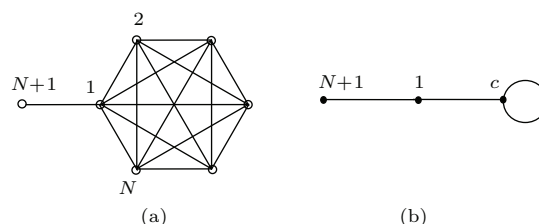


图 3 (a) 顶点 1 连接外接顶点 $N+1$ 的完全图 K_N ($N=6$); (b) K_N 的坍缩图

Fig. 3. (a) Complete graph K_N ($N=6$) with an external vertex $N+1$ attached to vertex 1; (b) collapsed graph of K_N .

定义如下 5 个状态: $|1, N+1\rangle$, $|N+1, 1\rangle$,

$$|\psi_L\rangle = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{i=2}^N |i, 1\rangle, \quad (2)$$

$$|\psi_R\rangle = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{i=2}^N |1, i\rangle, \quad (3)$$

$$|\psi_C\rangle = \frac{1}{\sqrt{(N-1)(N-2)}} \sum_{i=2}^N \sum_{\substack{j=2 \\ j \neq i}}^N |i, j\rangle. \quad (4)$$

坍缩图上点1在原图中的度为 N , $r_1 = -1 + \frac{2}{N}$, $t_1 = \frac{2}{N}$; 点 c 在原图中的度为 $N-1$, $r_c = -1 + \frac{2}{N-1}$, $t_c = \frac{2}{N-1}$. 定义 $U|1, N+1\rangle = |N+1, 1\rangle$, 代入(1)式, 得坍缩图上算子 U 的作用为

$$\begin{aligned} & U|N+1, 1\rangle \\ &= r_1|1, N+1\rangle + t_1 \sum_{i=2}^N |1, i\rangle \\ &= r_1|1, N+1\rangle + t_1 \sqrt{N-1} |\psi_R\rangle \\ &= \left(\frac{2}{N} - 1\right) |1, N+1\rangle + \frac{2\sqrt{N-1}}{N} |\psi_R\rangle, \\ U|\psi_L\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{i=2}^N \left(r_1|1, i\rangle + t_1 \sum_{j \neq i}^N |1, j\rangle \right) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{i=2}^N \left[r_1|1, i\rangle + t_1 \left(|1, N+1\rangle \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \sum_{j=2}^N |1, j\rangle - |1, i\rangle \right) \right] \\ &= -\frac{(r_1 - t_1)}{\sqrt{N-1}} \sum_{i=2}^N |1, i\rangle \\ &\quad - \frac{t_1}{\sqrt{N-1}} \sum_{i=2}^N |1, N+1\rangle \\ &\quad - \frac{t_1}{\sqrt{N-1}} \sum_{i=2}^N \sum_{j=2}^N |1, j\rangle \\ &= -t_1 \sqrt{N-1} |1, N+1\rangle \\ &\quad - (t_1(N-1) - 1) |\psi_R\rangle \\ &= -\frac{2\sqrt{N-1}}{N} |1, N+1\rangle - \frac{N-2}{N} |\psi_R\rangle, \\ U|\psi_R\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{i=2}^N \left(r_c|i, 1\rangle + t_c \sum_{\substack{j=2 \\ j \neq i}}^N |i, j\rangle \right) \\ &= \frac{r_c}{\sqrt{N-1}} \sum_{i=2}^N |i, 1\rangle \\ &\quad + \frac{t_c}{\sqrt{N-1}} \sum_{i=2}^N \sum_{\substack{j=2 \\ j \neq i}}^N |i, j\rangle \\ &= r_c |\psi_L\rangle + t_c \sqrt{N-2} |\psi_C\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{N-3}{N-1} |\psi_L\rangle + \frac{2\sqrt{N-2}}{N-1} |\psi_C\rangle, \\ U|\psi_C\rangle &= \frac{1}{\sqrt{(N-1)(N-2)}} \\ &\quad \times \sum_{i=2}^N \sum_{\substack{j=2 \\ j \neq i}}^N \left(r_c|j, i\rangle + t_c \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq i, j}}^N |j, l\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{(N-1)(N-2)}} \\ &\quad \times \sum_{i=2}^N \sum_{\substack{j=2 \\ j \neq i}}^N \left[r_c|j, i\rangle + t_c \left(|j, 1\rangle \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \sum_{\substack{l=2 \\ l \neq j}}^N |j, l\rangle - |j, i\rangle \right) \right] \\ &= \frac{r_c - t_c}{\sqrt{(N-1)(N-2)}} \sum_{i=2}^N \sum_{\substack{j=2 \\ j \neq i}}^N |j, i\rangle \\ &\quad + \frac{t_c}{\sqrt{(N-1)(N-2)}} \sum_{i=2}^N \sum_{\substack{j=2 \\ j \neq i}}^N |j, 1\rangle \\ &\quad + \frac{t_c}{\sqrt{(N-1)(N-2)}} \sum_{i=2}^N \sum_{\substack{j=2 \\ j \neq i}}^N \sum_{\substack{l=2 \\ l \neq j}}^N |j, l\rangle \\ &= -|\psi_C\rangle + t_c \sqrt{N-2} |\psi_L\rangle + t_c(N-2) |\psi_C\rangle \\ &= \frac{2\sqrt{N-2}}{N-1} |\psi_L\rangle + \frac{N-3}{N-1} |\psi_C\rangle. \end{aligned}$$

由上式可见状态 $\{|1, N+1\rangle, |N+1, 1\rangle, |\psi_L\rangle, |\psi_R\rangle, |\psi_C\rangle\}$ 在 U 的作用下是封闭的, 即张成了 U 的不变子空间, 且在该子空间中

$$U = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{N-2}{N} & -\frac{2\sqrt{N-1}}{N} & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{N-3}{N-1} & \frac{2\sqrt{N-2}}{N-1} \\ 0 & \frac{2\sqrt{N-1}}{N} & -\frac{N-2}{N} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2\sqrt{N-2}}{N-1} & \frac{N-3}{N-1} \end{pmatrix},$$

容易验证 $U^\dagger U = I$.

上述推导过程较为繁琐, 可以利用我们在硬币量子行走上的研究结论简化计算过程. 使用Grover硬币算子的量子行走, 设原图上度为 d 的点 k 所属的等价类集合 $\{k\}$ 坍缩为坍缩图上度为2的点 a , 且坍缩图上的左右两条边分别由原图上 x 条

边和 $d-x$ 条边坍塌得到. 令 P_x 是由 d 阶单位矩阵经如下变换得来的 $2 \times n$ 维矩阵: 将其前 x 行相加并归一化, 后 $d-x$ 行相加并归一化,

$$P_x = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{x}} & \cdots & \frac{1}{\sqrt{x}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{\sqrt{d-x}} & \cdots & \frac{1}{\sqrt{d-x}} \end{pmatrix},$$

则坍塌图上点 a 的硬币算子为

$$C_a = P_x G P_x^\Gamma = \begin{pmatrix} \frac{2x}{d} - 1 & \frac{2\sqrt{x(d-x)}}{d} \\ \frac{2\sqrt{x(d-x)}}{d} & 1 - \frac{2x}{d} \end{pmatrix}.$$

C_a 的作用与原图中的 Grover 硬币算子相同, 都是在二维的平面上的反射.

散射量子行走和硬币量子行走是酉等价的, 且在本文算子定义中局部酉算子亦为 Grover 算子 (若 $k=1$ 则有全局相位 -1). 若散射量子行走的坍塌图上点 a 的度为 2, 将 a 的入边空间 Ω_a 映射为出边空间 A_a 的算子即为 C_a . 具体来说, 图 3(b) 上点 1 的算子 U_1 将基为 $\{|N+1, 1\rangle, |\psi_L\rangle\}$ 的入射边空间 Ω_1 映射到基为 $\{|1, N+1\rangle, |\psi_R\rangle\}$ 的出射边空间 A_1 . 点 1 的度数由原图上的 N 变为 2, 且左右两条边分别由 1 条边和 $N-1$ 条边坍塌而来, 令 $d=N$, $x=1$, 则

$$U_1 = \begin{pmatrix} \frac{2}{N} - 1 & -\frac{2\sqrt{N-1}}{N} \\ \frac{2\sqrt{N-1}}{N} & -\left(1 - \frac{2}{N}\right) \end{pmatrix},$$

注意第二列的负号是标记目标顶点 1 的全局相位. 同样, 对点 c 而言算子 U_c 将基为 $\{|\psi_R\rangle, |\psi_C\rangle\}$ 的 Ω_c 映射到基 $\{|\psi_L\rangle, |\psi_C\rangle\}$ 的 A_c ,

$$U_c = \begin{pmatrix} \frac{2}{N-1} - 1 & \frac{2\sqrt{N-3}}{N-1} \\ \frac{2\sqrt{N-3}}{N-1} & 1 - \frac{2}{N-1} \end{pmatrix}.$$

坍塌图上点 $N+1$ 的度数和原图相同, 都是 1, 故算子也不变. 由此可以直接给出坍塌图上算子 U 的形式.

3.3 算法分析

接下来分析算法的演化过程, 即分析 U 的特征谱. 由 $|\lambda U - I| = 0$, 得特征方程

$$\lambda^5 - \frac{N-3}{N-1}\lambda^4 + \frac{2(N-2)}{N(N-1)}\lambda^3 + \frac{2(N-2)}{N(N-1)}\lambda^2 - \frac{N-3}{N-1}\lambda + 1 = 0.$$

容易看出, $\lambda = -1$ 是其精确解, 即

$$(\lambda+1)\left(\lambda^4 - \frac{2(N-2)}{N-1}\lambda^3 + \frac{(N+1)(N-2)}{N(N-1)}\lambda^2 - \frac{2(N-2)}{N-1}\lambda + 1\right) = 0. \quad (5)$$

使用矩阵微扰理论, 当 $N \rightarrow \infty$ 时, 其零阶方程为

$$\lambda_0^5 - \lambda_0^4 - \lambda_0 + 1 = 0,$$

即

$$(\lambda_0 - 1)^2(\lambda_0^2 + 1)(\lambda_0 + 1) = 0.$$

取其二重根 $\lambda_0 = 1$, 令 $\lambda = \Delta + 1$, 代入 (5) 式四阶子式求修正项 Δ . 丢掉高阶项, 解方程 $N\Delta^2 + 4\Delta + 2 = 0$, 得 $\Delta = \pm i\sqrt{2\varepsilon} + O(\varepsilon)$, 其中 $\varepsilon = 1/N$. 故算子 U 的特征值 $\lambda_{\pm} = 1 \pm i\sqrt{2\varepsilon} + O(\varepsilon)$, 对应特征向量

$$|v_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \mp \frac{i}{\sqrt{2}} & \pm \frac{i}{\sqrt{2}} & 1 \end{pmatrix}^T + O(\sqrt{\varepsilon}),$$

注意到对应外接图部分的分量为 0.

算法的初态可表示为

$$\begin{aligned} |\psi_{\text{init}}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}}|\psi_L\rangle + \frac{1}{\sqrt{N}}|\psi_R\rangle + \sqrt{\frac{N-2}{N}}|\psi_C\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|v_+\rangle + |v_-\rangle) + O(\sqrt{\varepsilon}). \end{aligned}$$

令 $\lambda_{\pm} = e^{\pm i\theta} + O(\varepsilon)$, $\theta = \sqrt{2\varepsilon}$, 则 m 步之后系统的状态

$$\begin{aligned} |\psi_{\text{final}}\rangle &= U^m |\psi_{\text{init}}\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda_+^m |v_+\rangle + \lambda_-^m |v_-\rangle) + O(\sqrt{\varepsilon}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\frac{i}{\sqrt{2}}(e^{im\theta} - e^{-im\theta}) \\ \frac{i}{\sqrt{2}}(e^{im\theta} - e^{-im\theta}) \\ e^{im\theta} + e^{-im\theta} \end{pmatrix} + O(\sqrt{\varepsilon}) \\ &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -i \sin(m\theta) \\ i \sin(m\theta) \\ \sqrt{2} \cos(m\theta) \end{pmatrix} + O(\sqrt{\varepsilon}). \end{aligned}$$

当 $m\theta = \pi/2$, $m = O(\sqrt{N})$ 时测量, 系统以 $1 - O(\sqrt{\varepsilon})$ 的概率落在与点 1 相连的边上.

4 完全图上搜索结构异常

上述算法的分析虽然直观, 但计算过程较为繁琐, 特别是当 U 的维数较大时. 文献 [20] 针对星图连接到图 G 的结构异常给出了 U 的特征值和特征向量的近似估计. 本节阐述星图上的条件及结论而省略推导过程, 并将结论加以推广从而得出完全图上搜索结构异常的一般结论.

4.1 星图上搜索结构异常

设星图 S_N 上叶节点 1 连接到图 G , 将星图以中心节点 0 为界分为左右两部分, 如图 4(a) 所示. 对任意的 N 记算子 U 为 $U(\varepsilon)$, $\varepsilon = 1/N$, 令 $N \rightarrow \infty$ 得到演化算子 $U(\varepsilon)$ 的零阶矩阵 $U(0)$. 记 $U(0)$ 对应图的左右两侧的矩阵分别为 $U_{0,L}$ 和 $U_{0,R}$, 由于图的两部分仅通过一个点相连, $U(0)$ 为 $U_{0,L}$ 和 $U_{0,R}$ 组成的对角阵 $U(0) = \begin{pmatrix} U_{0,L} & 0 \\ 0 & U_{0,R} \end{pmatrix}$. 文献 [21] 证明当且仅当 $U_{0,L}$ 和 $U_{0,R}$ 存在具有相同特征值 λ_0 的特征向量 $|\mathbf{u}_0\rangle$ 和 $|\mathbf{v}_0\rangle$ 时, $U(\varepsilon)$ 具有成对出现的特征值 $\lambda_{\pm} = \lambda_0 e^{\pm i c \sqrt{\varepsilon}} + O(\varepsilon)$, 其中 $c = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} |\langle \mathbf{u}_0 | U | \mathbf{v}_0 \rangle|$. 对应的特征向量 $|\mathbf{v}_{\pm}\rangle$ 可以用 $|\mathbf{u}_0\rangle$ 和 $|\mathbf{v}_0\rangle$ 近似表示, $|\mathbf{v}_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mp i |\mathbf{u}_0\rangle + |\mathbf{v}_0\rangle) + O(\sqrt{\varepsilon})$. 算法将在 $O(\sqrt{N})$ 的时间内将系统从 $|\mathbf{v}_0\rangle$ 移动至 $|\mathbf{u}_0\rangle$, 即系统位于图左侧的概率为 $1 - O(\sqrt{\varepsilon})$. 基于连续量子行走模型的搜索算法使用简并微扰理论分析强正则图上搜索算法演化过程有类似结果 [14].

星图上定义状态 $|\psi_{\text{out}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{i=2}^N |0, i\rangle$, $|\psi_{\text{in}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{i=2}^N |i, 0\rangle$, 在基 $\{|\psi_{\text{out}}\rangle, |\psi_{\text{in}}\rangle\}$ 下, $U_{0,R} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ e^{i\phi} & 0 \end{pmatrix}$. 其特征值为 $\pm e^{i\frac{\phi}{2}}$, 特征向量 $|\mathbf{v}_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_{\text{out}}\rangle \pm e^{i\frac{\phi}{2}} |\psi_{\text{in}}\rangle)$. 若相应地令初态 $|\psi_{\text{init}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N}} \left(\sum_{i=1}^N |0, i\rangle \pm e^{i\phi} \sum_{i=1}^N |i, 0\rangle \right)$, 则 $|\mathbf{v}_0\rangle = |\psi_{\text{init}}\rangle + O(\sqrt{\varepsilon})$. ϕ 值的连续变化使得特征值可以取单位圆上的任意值, 从而能够通过调整 ϕ 的值使得 $U_{0,R}$ 的特征值和 $U_{0,L}$ 的相同 [21].

上述结论要求将图以某个节点为界分为两部

分, 搜索算法将状态从初态所在的一侧“翻转”至目标态所在的一侧. 不同于星图的叶节点, 完全图 K_N 的顶点度为 $N-1$. 直观上, 这不符合要求. 考察在量子自同构 A 下的坍缩图, 则以点 c 为界分为左右两部分, 两部分仅通过点 c 相连, 如图 4(b) 所示. 初态可以用右侧自环边对应的状态 $|\psi_C\rangle$ 近似表示,

$$\begin{aligned} |\psi_{\text{init}}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N(N-1)}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j \neq i}^N |i, j\rangle \\ &= |\psi_C\rangle + O(\sqrt{\varepsilon}). \end{aligned}$$

若终态 $|\psi_{\text{final}}\rangle$ 近似为 $|\psi_L\rangle$ 和 $|\psi_R\rangle$ 的组合, 则可以接近 1 的概率测得目标顶点.

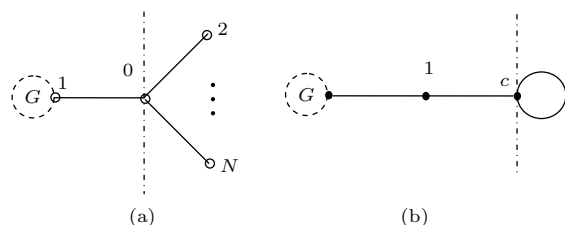


图 4 (a) 顶点 1 连接图 G 的星图, 虚线将图分为左右两部分; (b) 顶点 1 连接图 G 的完全图 K_N 的坍缩图, 虚线将坍缩图分为左右两部分

Fig. 4. (a) A star graph with graph G attached to vertex 1 is divided into two parts by dashed line; (b) the collapsed graph of complete graph K_N with graph G attached to vertex 1 can also be divided into two parts.

4.2 完全图上的结论

使用 (1) 式定义的演化算子搜索完全图连接图 G 的异常, 有以下结论.

定理 1 若完全图上存在连接到图 G 的结构异常, 则无论 G 的结构如何均可从初态 $|\psi_{\text{init}}\rangle = |\psi_C\rangle + O(\sqrt{\varepsilon})$ 出发, 在 $O(\sqrt{N})$ 时间内搜索到目标, 成功概率为 $1 - O(\sqrt{\varepsilon})$.

证明 由文献 [21] 的结论可知, 关键是要证明无论 G 的结构如何在 $N \rightarrow \infty$ 时 $U_{0,R}$ 和 $U_{0,L}$ 一定存在相同的特征值.

状态 $|\psi_L\rangle$, $|\psi_R\rangle$ 和 $|\psi_C\rangle$ 定义同 (2)–(4) 式, 首先考察 $U(0)$ 在基 $\{|\psi_G\rangle, |\psi_L\rangle, |\psi_R\rangle, |\psi_C\rangle\}$ ($|\psi_G\rangle$ 表示图 G 对应的基态) 下的形式. 点 1 和 c 将图分为三部分, 则 $U(0)$ 一定可以表示为有 3 个分块的对角阵. 以点 c 为界, 坍缩图上右侧的反射系数 $r_R^A = 1 - 2\varepsilon$, 左侧的反射系数 $r_L^A = 2\varepsilon - 1$, 透射系数 $t^A = \pm 2\sqrt{\varepsilon - \varepsilon^2}$. 则在 $\varepsilon \rightarrow 0$ 时的

$$U(0) = \begin{pmatrix} U_G & & \\ & 0 & -1 \\ & -1 & 0 \\ & & & 1 \end{pmatrix}, U_G \text{ 表示算子 } U(0)$$

作用于图 G 的部分. 图 4(b) 右侧对应 1 阶矩阵 $U_{0,R} = (1)$, 其惟一的特征值为 $\lambda_0 = 1$, 特征

$$\text{向量 } |\tau_0\rangle = |\psi_C\rangle. U_{0,L} = \begin{pmatrix} U_G & & \\ & 0 & -1 \\ & -1 & 0 \end{pmatrix}, \text{ 其}$$

特征多项式 $|\lambda I - U_{0,L}| = |\lambda I - U_G| \cdot \begin{vmatrix} \lambda & 1 \\ 1 & \lambda \end{vmatrix} = (\lambda^2 - 1)|\lambda I - U_G|$, 即保证 $U_{0,L}$ 有特征值为 1 的特征向量 $|\mathbf{u}_0\rangle$, 且 $|\mathbf{u}_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_L\rangle - |\psi_R\rangle + 0 \cdot |\psi_G\rangle)$, 即 $|\mathbf{u}_0\rangle$ 可以仅用完全图中的状态表示, 而与图 G 的结构无关. 以下的计算仅考虑 U 作用于完全图的部分.

算子 $U(\varepsilon)$ 成对出现的特征值 $\lambda_{\pm} = \lambda_0 e^{\pm i c \sqrt{\varepsilon}} + O(\varepsilon) = e^{\pm i c \sqrt{\varepsilon}} + O(\varepsilon)$. 记 $U(\varepsilon) = U(0) + \sqrt{\varepsilon} A_1 + \dots$, 由在坍缩图中 $t^A = 2\sqrt{\varepsilon - \varepsilon^2}$,

$$\text{可得 } A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}, \text{ 则 } c = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} |\langle \mathbf{u}_0 | U | \tau_0 \rangle| =$$

$$|\langle \mathbf{u}_0 | A_1 | \tau_0 \rangle| = \sqrt{2}, \lambda_{\pm} = e^{\pm i \sqrt{2\varepsilon}} + O(\varepsilon). \text{ 对应的特征向量 } |\mathbf{v}_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mp i |\mathbf{u}_0\rangle + |\tau_0\rangle) + O(\sqrt{\varepsilon}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mp \frac{i}{\sqrt{2}} \pm \frac{i}{\sqrt{2}} & 1 \end{pmatrix}^T + O(\sqrt{\varepsilon}).$$

算法的初态 $|\psi_{\text{init}}\rangle = |\psi_C\rangle + O(\sqrt{\varepsilon}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\mathbf{v}_+\rangle + |\mathbf{v}_-\rangle) + O(\sqrt{\varepsilon})$, 令 $\theta = \sqrt{2\varepsilon}$, 则 m 步之后算法的终态:

$$\begin{aligned} |\psi_{\text{final}}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} U^m (|\mathbf{v}_+\rangle + |\mathbf{v}_-\rangle) + O(\sqrt{\varepsilon}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{im\theta} |\mathbf{v}_+\rangle + e^{-im\theta} |\mathbf{v}_-\rangle) + O(\sqrt{\varepsilon}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\frac{i}{\sqrt{2}}(e^{im\theta} - e^{-im\theta}) \\ \frac{i}{\sqrt{2}}(e^{im\theta} - e^{-im\theta}) \\ e^{im\theta} + e^{-im\theta} \end{pmatrix} + O(\sqrt{\varepsilon}) \\ &= \begin{pmatrix} -i \sin(m\theta) \\ i \sin(m\theta) \\ \sqrt{2} \cos(m\theta) \end{pmatrix} + O(\sqrt{\varepsilon}). \end{aligned}$$

当 $m\theta = \frac{\pi}{2}$, 即 $m = O(\sqrt{N})$ 时测量终态 $|\psi_{\text{final}}\rangle$, 落在与目标顶点相连的边上的概率为 $1 - O(\sqrt{\varepsilon})$.

证毕.

完全图连接外接图 G 的结构异常, 目标顶点的度为 N , 当 $N \gg 1$ 时 $\langle \psi_R | U | \psi_L \rangle = -1 + O(\sqrt{\varepsilon})$, 在目标顶点处近似为全反射, 状态中仅有极小的一部分会扩散到图 G 中, 算法基本在完全图上演化, 因而可以在完全图的坍缩图上讨论算法的演化过程.

5 结 论

本文借助坍缩图理论, 将星图上的分析结论加以推广, 证明该结论有更广泛的适用性. 在此基础上, 证明完全图上存在连接到图 G 的结构异常, 则此时无论 G 的形式如何均可从初态 $|\psi_{\text{init}}\rangle = |\psi_C\rangle + O(\sqrt{\varepsilon})$ 出发, 在 $O(\sqrt{N})$ 时间内搜索到目标, 成功概率为 $1 - O(\sqrt{\varepsilon})$.

最初提出的 Grover 算法 [23] 实现成功概率小于 1 的近似搜索, 文献 [24] 改进其相位反转算子将其成功概率提高为 1. 均值反演算子 G (即 Grover 算子) 执行关于所有节点叠加的反射, 需要一次访问到所有节点, 其在量子行走模型下对应完全图上的行走. Grover 算法已被证明是最优的 [25], 可以推断基于量子行走的完全图上搜索算法的下界为 $O(\sqrt{N})$. 而迄今所有的研究证实, 二次加速是利用量子并行性搜索无结构数据所能达到的最好结果.

本文仅考虑完全图上连接到图 G 的情况, 若完全图内部出现异常, 如边的缺失或冗余, 则演化算子具有不同的形式, 不能直接应用上述结论, 这是我们下一步的研究内容. 另外研究文献 [20] 的方法是否可用于其他图结构上的搜索算法分析也是极富意义的.

参考文献

- [1] Childs A M 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 180501
- [2] Childs A M, Gosset D, Webb Z 2013 *Science* **339** 6121
- [3] Lovett N B, Cooper S, Everitt M, Trevers M, Kendon V 2010 *Phys. Rev. A* **81** 042330
- [4] Kempe J 2003 *Contemp. Phys.* **44** 307
- [5] Hillery M, Bergou J, Feldman E 2003 *Phys. Rev. A* **68** 032314
- [6] Andrade F M, da Luz M G E 2009 *Phys. Rev. A* **80** 052301
- [7] Karski M, Förster L, Choi J M, Steffen A, Alt W, Meschede D, Widera A 2009 *Science* **325** 174

- [8] Schreiber A, Gábris A, Rohde P P, Laiho K, Štefaňák M, Potocek V, Hamilton C, Jex I, Silberhorn C 2012 *Science* **336** 55
- [9] Xue P, Zhang R, Qin H, Zhan X, Bian Z H, Li J, Sanders B C 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 140502
- [10] Shenvi N, Kempe J, Whaley K B 2003 *Phys. Rev. A* **67** 052307
- [11] Zhang Y C, Bao W S, Wang X, Fu X Q 2015 *Chin. Phys. B* **24** 110309
- [12] Ambainis A 2007 *SIAM J. Comput.* **37** 210
- [13] Tulsi A 2015 *Phys. Rev. A* **91** 052307
- [14] Janmark J, Meyer D A, Wong T G 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 210502
- [15] Meyer D A, Wong T G 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 110503
- [16] Liu Y M, Chen H W, Liu Z H, Xue X L, Zhu W N 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 010301 (in Chinese) [刘艳梅, 陈汉武, 刘志昊, 薛希玲, 朱皖宁 2015 物理学报 **64** 010301]
- [17] Hillery M, Reitzner D, Bužek V 2010 *Phys. Rev. A* **81** 062324
- [18] Feldman E, Hillery M, Lee H W, Reitzner D, Zheng H, Bužek V 2010 *Phys. Rev. A* **82** 040301R
- [19] Hillery M, Zheng H, Feldman E, Reitzner D, Bužek V 2012 *Phys. Rev. A* **85** 062325
- [20] Cottrell S S, Hillery M 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 030501
- [21] Cottrell S S 2015 *J. Phys. A: Math. Theor.* **48** 035304
- [22] Krovi H, Brun T A 2015 *Phys. Rev. A* **75** 062332
- [23] Grover L K 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 325
- [24] Long G L 2001 *Phys. Rev. A* **64** 22307
- [25] Bennett C H, Bernstein E, Brassard G, Vazirani U 1997 *SIAM J. Comput.* **26** 1510

Search algorithm of structure anomalies in complete graph based on scattering quantum walk^{*}

Xue Xi-Ling Chen Han-Wu[†] Liu Zhi-Hao Zhang Bin-Bin

(School of Computer Science and Engineering, Southeast University, Nanjing 210096, China)

(Received 2 November 2015; revised manuscript received 11 January 2016)

Abstract

Quantum walks have been proven to be a useful framework in designing new quantum algorithms, of which the search algorithm is the most notable. Besides a general search for a special vertex, recent researches have shown that quantum walks can also be used to find structural anomalies. Suppose a vertex of complete graph K_N is attached to a second graph G , then the kind of structure anomaly will break the symmetry of the complete graph. The search algorithm based on scattering quantum walk model is presented to speed up locating this kind of structure anomaly. The concepts of scattering quantum walk model and collapsed graphs are presented. The definition of the evolutionary operator, which is different from that of a general search, is given. Based on the specific definition of evolutionary operator and the obvious symmetry of complete graph, it is shown that the search space is confined to a low-dimensional collapsed space, and the initial state is chosen to lie in this subspace. To illustrate the evolutionary process of the search algorithm, an example is given in the case that G is a single vertex. Taking advantage of our earlier study on the evolutionary operator of coined quantum walks with Grover coin, calculations of the unitary operator in the collapsed space are greatly simplified. To quantify the evolutionary process of the algorithm, we use the matrix perturbation theory involving a perturbative approach to find the eigenvalues and eigenstates. It is the degenerate zeroth-order eigenvalue $\lambda_0 = 1$ that leads to the interesting parts of the Hilbert space. Most of the recent researches of searching the structure anomalies focus on star graph S_N with an unspecified graph G attached to one of its external vertices, where the overall graph is divided into two parts by the central vertex. It is shown that quantum speedup will occur if and only if the eigenvalues associated with these two parts in the $N \rightarrow \infty$ limit are the same. In this paper, we find that the collapsed graph of complete graphs can also be divided into two parts by a single collapsed vertex. As these two parts roughly correspond to the initial state and the desired state respectively, the techniques and results in star graphs can be generalized to the collapse graph on complete graph. What is more, under our definition of unitary evolution operator these two parts in the $N \rightarrow \infty$ limit will always share the same eigenvalue, i.e. $\lambda_0 = 1$, no matter what the structure of graph G is. Based on this, we prove that the search algorithm can find the target vertex in $O(\sqrt{N})$ time steps with a success probability of $1 - O(1/\sqrt{N})$. That is to say, the quantum search algorithm gains a quadratic speedup over classical counterpart.

Keywords: scattering quantum walk, quantum search, complete graph

PACS: 03.67.Ac, 03.65.Aa

DOI: 10.7498/aps.65.080302

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61502101, 61170321), the Natural Science Foundation of Jiangsu Province, China (Grant No. BK20140651), and the Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education, China (Grant No. 20110092110024).

[†] Corresponding author. E-mail: hanwu_chen@163.com