浅谈随机游走与量子游走

陈增敬　江昊

1　随机游走

随机游走(Random walk)是概率论统计中最简单的一个模型，它是产生正态分布和实现随机计算的重要方法。什么是随机游走？假定一个粒子从原点出发，在直线上作游走，人们事先不知其运动的规律，而假定这个粒子游走是按照抛掷一枚均匀的硬币，根据硬币出现正面和反面的方式决定其运动的走势，当硬币是正面时，粒子向右行走一步，否则粒子向左行走一步，我们假定向左和向右的概率相等。由于硬币出现正面和反面是“随机”的，因此，这种粒子的游走通常称为随机游走。Pearson于1905年首次提出随机游走，并提出了著名的醉汉问题：一个按照随机游走行走的醉汉，最后，他是否能回到他行走的起始点。

数学上，如果用随机变量$\xi_i \in \{-1, +1\}$来刻画粒子第i次移动时的位移，则粒子在经历n次的运动后，它所处的位置为$X_n = \sum_{i=1}^{n} \xi_i$，$X_n$服从二项分布且它的概率分布为

$$\mathbb{P}\left(X_n = x\right) = \begin{cases} C_n^{\frac{x+n}{2}}, \frac{x+n}{2} \in \mathbb{N} \\ 0, \frac{x+n}{2} \notin \mathbb{N} \end{cases}$$

其中$\mathbb{N}$是自然数集。显然，$\{\xi_i\}_{i\geq 1}$是一列独立同分布的随机变量序列。根据中心极限定理，有$\frac{X_n}{\sqrt{n}}$依分布收敛到标准正态分布。从这个意义讲，随机游走是产生正态分布和实现随机计算的重要方法。

随机游走的一个成功的应用是金融中的资产定价和风险防范问题。早在1900年，法国数学家Louis Bachelier首次提出了金融资产价格服从对数正态分布的假设，并假设股票价格服从布朗运动(物理学中分子微粒所做的一种无休止的无序运动)，这成为随机游走理论和有效市场假说共同的源头。有关这方面的研究产生了一批诺贝尔经济奖获得者(例如：Lucas、Markowitz、Merton、Scholes、Sargent、Hansen、Fama)。可以说，当今缤纷灿烂的金融世界都是由随机游走而衍生出来的。现在，随机游走理论的思想和原理已在许多学科领域中得到了广泛的运用。例如：生物学家利用随机游走模拟动物的活动规律和行为方式；物理学家利用随机游走描述和模拟粒子的运动规律；人工智能专家利用随机游走实现机器的智能化等等。

随机游走的一个显著特点是：行走的位移是由一列独立同分布的随机变量决定。然而，这个重要的特性在量子世界不再存在了，因为，在量子世界，由于量子的纠缠性，粒子的

行为不再独立了。

2 量子游走

量子游走(Quantum walk)是经典随机游走的量子对应，Aharonov[4]等人于1993年将随机游走理论扩展到了量子力学领域，提出了量子游走概念。一方面，由于融合了量子并行计算等量子力学特有性质，量子游走具有更快的扩散速度，在解决某些算法问题时，有可能获得比经典行走更少的时间复杂度；另一方面，在量子世界，由于量子的纠缠性，粒子的行为不再独立了，经典概率统计中有关独立同分布下的定理不再成立了。量子游走还有类似于随机游走的极限定理吗？与随机游走在随机计算的重要作用一样，量子游走也能在量子计算中发挥着同样重要的作用？第一个基于量子游走的搜索算法一SKW算法的提出，从理论上证实了量子游走在算法上的优越性，人们越来越坚信：量子游走将是实现量子计算的重要方法之一。

2.1 Dirac符号

为了介绍量子游走，我们先介绍一下量子符号。量子力学中，我们经常用Hilbert空间中的矢量 ψ 来描述一个粒子的状态，用Dirac符号记作 $|\psi\rangle$。$|\psi\rangle$可以理解为一个列向量，或者说$n \times 1$矩阵，与之相对应的 $\langle\psi|$ 表示 $|\psi\rangle$ 的共轭转置，两个态矢量 $|\psi\rangle$, $|\phi\rangle$ 的内积用Dirac符号可以记作 $\langle\psi|\phi\rangle$。

对于一个量子比特，用Dirac符号就可以表示为

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1,$$

其中$|0\rangle = [1,0]^T$, $|1\rangle = [0,1]^T$ 分别表示两个相互正交的状态。在这里 $|\psi\rangle$ 是一个“叠加态”，它既处在$|0\rangle$状态，又处在$|1\rangle$状态。 α, β是它们的“振幅”，它们是复数，$|\alpha|$, $|\beta|$表示它们的模长。对于上面给出的量子比特，如果我们对它进行“测量”，那么量子态“坍缩”到结果 $|0\rangle$, $|1\rangle$ 态的概率分别为$|\alpha|^2$, $|\beta|^2$，也意味着我们也会以$|\alpha|^2$的概率观测到$|0\rangle$，以$|\beta|^2$的概率观测到$|1\rangle$ 。例如著名的薛定谔的猫，我们可以说这个在黑盒里的猫处于一个既生又死的状态，在打开黑盒后我们只能观测到生和死其中一个结果；又或是一个抛掷在空中翻转的硬币可以同时处在正面和反面，当它落地后，才能知道硬币是正面还是反面。这或许很难理解，但是它提供了一种解释世界的新角度。

2.2 量子游走与随机游走的不同

我们现在介绍一下量子游走。量子游走是经典随机游走的量子对应，在随机游走中粒子为确定的状态，由于状态之间的随机跃迁而产生随机性。而在量子游走中，随机性由下

述方式产生：(1)状态的叠加；(2)酉算符演化；(3)由于状态测量，量子态“坍缩”。由于这样的量子随机性，通常难以控制量子游走的行为。比方说，抛硬币，如果是正面，向右走一步；如果是反面，向左走一步。而在量子世界里，是立刻向两个方向移动，像波一样展开，这种随机性使行走难以控制。

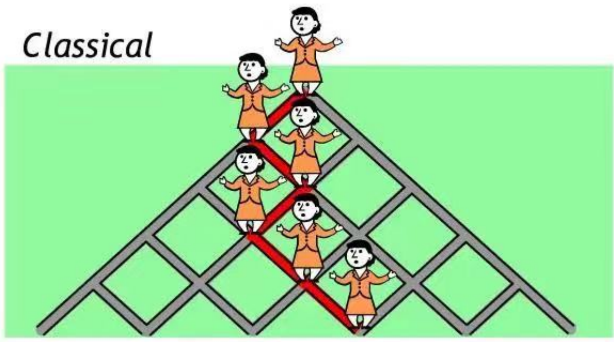


图 2.1: 随机游走

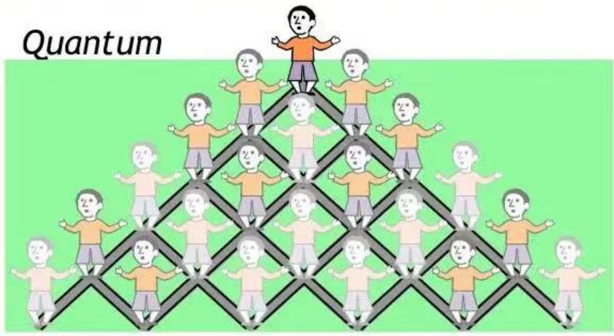


图 2.2: 量子游走

在量子游走中，粒子所在的位置和硬币都被量子化，即粒子的位置和硬币都是以叠加态的形式存在。粒子在初始时刻的状态写成

$$|\Psi_0\rangle = |0\rangle \otimes (\alpha|\downarrow\rangle + \beta|\uparrow\rangle), \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1,$$

其中$\otimes$表示张量积，$|\uparrow\rangle = [1,0]^T$, $|\downarrow\rangle = [0,1]^T$。第一个量子位代表粒子在原点，第二个量子位代表硬币的状态，即硬币处于$|\downarrow\rangle$与$|\uparrow\rangle$的叠加态。

量子游走的第一步依然是对硬币的抛掷，与经典随机游走不同的是，量子游走是用硬币算符C更新硬币的状态。对于C的选取是任意的二阶酉矩阵，而由此表现出的量子游走的

性质也是多种多样的，量子计算中通常选取Hadamard矩阵

$$C = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

作为硬币算符进行量子游走。第二步就是粒子进行移动，用行走算符S来更新粒子的位置状态；行走算符S把$|x\rangle\otimes|\uparrow\rangle$变成$|x+1\rangle\otimes|\uparrow\rangle$，$|x\rangle\otimes|\uparrow\rangle$变成$|x-1\rangle\otimes|\downarrow\rangle$。我们当然不会每走完一步就进行观测，也就是每一步之后我们都保持了不同位置间的量子关联，并让它们在接下来的行走中继续互相干涉。每一回合用这两个算符依次作用，即$|\Psi_{n+1}\rangle = S(I \otimes C)|\Psi_n\rangle$，$S(I \otimes C)$的作用就类似于经典随机游走的状态转移矩阵。行走很多步之后，我们就得到了一个很长的叠加态

$$|\Psi_n\rangle = \sum_{x \in \mathbb{Z}} |x\rangle \otimes (\alpha_n(x)|\downarrow\rangle + \beta_n(x)|\uparrow\rangle),$$

类似地，我们也可以定义直到第n回合对粒子的位置进行观测，观察到的结果X_n。如果我们在第n回合对粒子的位置进行观测，在量子力学的规定下，我们就可以根据$|\Psi_n\rangle$中的振幅信息计算出粒子“坍缩”到在x位置的概率

$$\mathbb{P}(X_n = x) = |\alpha_n(x)|^2 + |\beta_n(x)|^2.$$

举个例子，如果选取Hadmard硬币和初态$|\Psi_0\rangle = |0\rangle \otimes |\uparrow\rangle$，进行一次量子游走

$$\begin{aligned}
&|\Psi_0\rangle = |0\rangle \otimes |\uparrow\rangle = |0\rangle \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\
&\xrightarrow{C} \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \otimes \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \otimes (|\downarrow\rangle + |\uparrow\rangle) \\
&\xrightarrow{S} |\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|-1\rangle \otimes |\downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle \otimes |\uparrow\rangle.
\end{aligned}$$

那么粒子将以$\frac{1}{2}$概率坍缩到位置1，以$\frac{1}{2}$概率坍缩到位置-1。

x \ n	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4
0					1				
1				1/2		1/2			
2			1/4		1/2		1/4		
3		1/8		3/8		3/8		1/8	
4	1/16		1/4		3/8		1/4		1/16

(a) 随机游走的分布

x \ n	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4
0					1				
1				1/2		1/2			
2			1/4		1/2		1/4		
3		1/8		5/8		1/8		1/8	
4	1/16		5/8		1/8		1/8		1/16

(b) 量子游走的分布

图 2.3: 从$n=3$开始，随机游走与量子游走的差异就显现出来了

量子游走的概率分布是很复杂的，而且和直觉不同，越往两边概率越大。这正是量子世界的奇异性质的体现。因为量子游走中的X_n不能像经典随机游走一样写成一列独立同分布随机变量的和，而且每一步行走都是互相关联的，我们就不能用中心极限定理来判断X_n的收敛性质。

随机游走和量子游走的不同：那么一个自然的问题是，量子游走会不会像经典随机游走一样依分布收敛于标准正态分布？它的收敛速度又是多少？

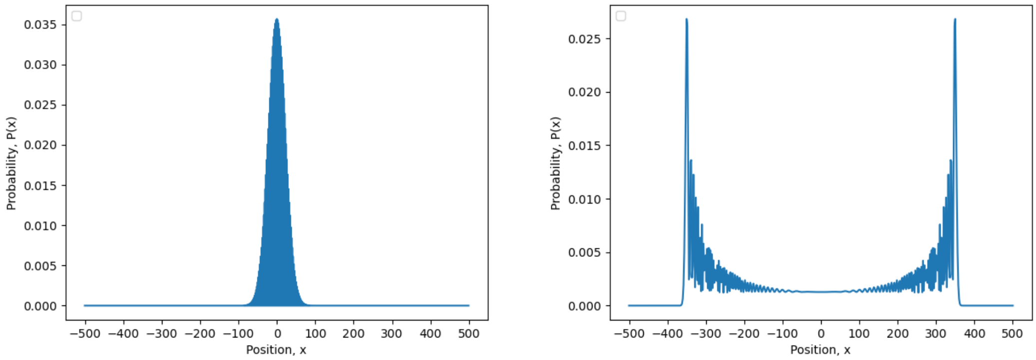
第一个不同：Konno (2002) [1] 证明了量子游走的极限定理，对于任意酉矩阵

$$C=\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix},$$

且粒子的初始状态为$|\Psi_0\rangle=|0\rangle\otimes(\alpha|\downarrow\rangle+\beta|\uparrow\rangle)$，那么$\frac{X_n}{n}$依分布收敛于

$$f(x)=\frac{\sqrt{1-|a|^2}}{\pi(1-x^2)\sqrt{|a|^2-x^2}}(1-\lambda x)\mathbb{I}_{(-|a|,|a|)}(x),$$

其中$\lambda=|\alpha|^2-|\beta|^2+\frac{a\alpha\overline{b\beta}+\overline{a\alpha}b\beta}{|a|^2}$。



(a) 随机游走 (b) 量子游走

图 2.4: 行走500步后的概率分布

量子游走的极限定理与经典随机游走的极限定理有很大的不同，量子游走的极限分布已经不是正态分布的钟形曲线的形状，而是一个具有支集的无界函数。在收敛速度上，量子极限定理会有平方加速的效果，会比中心极限定理更快的收敛到极限分布。

第二个不同：由于量子的纠缠与相干叠加，每一步的位移不再独立，因此量子游走的X_n不再能写成一列独立同分布的随机变量和的形式，这就造成了量子游走的极限分布与标准正态分布不同。

第三个不同：最近，陈增敬与合作者[5] 研究了三态下的量子游走极限定理，得到了如下结论：与二态下的量子游走极限定理不同，三态下的量子游走极限分布密度不再有统一的表达式了。与随机游走不同，三态下的量子游走的极限分布密度可能有一个峰，也可能有多个峰，这完全依赖量子游走的初始状态和硬币的选择。

第四个不同：Machida (2012)[3] 证明了如果我们把初始状态$|\Psi_0\rangle$改成一个叠加态即粒子在每个位置上都存在，那么我们就可以用量子游走产生正态分布，均匀分布甚至其他一些分布。尽管用量子游走可以产生正态分布，但是，条件要求十分苛刻。可以说：自从De Moivre和Gauss 发现和证明正态分布300多年以来，正态分布一直在概率论中占据着“中心”地位。但是，在量子游走世界，正态分布已不再占“中心”地位。

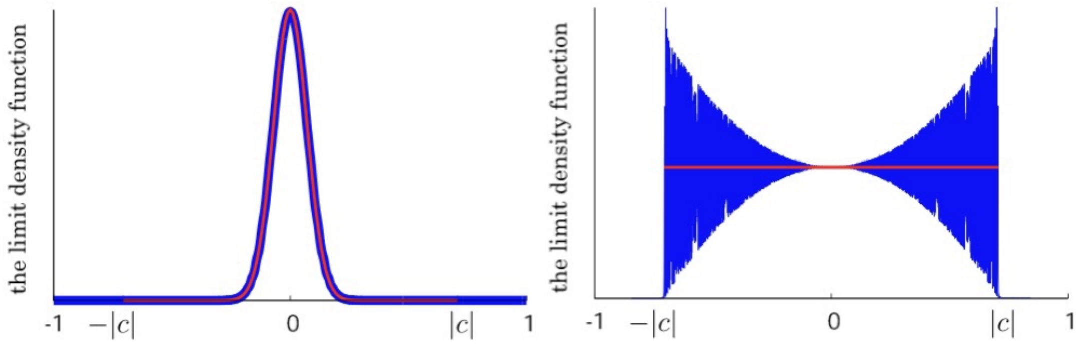


图 2.5: 量子游走产生正态分布和均匀分布，其中红线代表极限分布，蓝线代表量子游走500步的概率密度

[1] N. Konno(2002), Quantum random walks in one dimension, Quantum Information Processing, 1(5), pp. 345-354.

[2] N. Konno (2005), A new type of limit theorems for the one-dimensional quantum random walk, Journal of the Mathematical Society of Japan, 57, pp. 1179-1195.

[3] T. Machida (2012), Realization of the probability laws in the quantum central limit theorems by a quantum walk, arXiv preprint arXiv:1208.1005.

[4] Y. Aharonov, L. Davidovich and N. Zagury (1993), Quantum random walks, Phys. Rev. A, 48(2), 021687.

[5] Z. Chen, H. Jiang and C. Xing(2023), Does normal distribution still occupy a “central” position in quantum realm？ to appear.