arXiv:2601.01071v1 [quant-ph] 3 Jan 2026

Molchanov公式与量子行走：一种概率方法

Hoang Vu

Department of Statistics and Applied Probability, University of California, Santa Barbara
Santa Barbara, California 93106, United States

本文通过为连续时间和离散时间量子行走（量子行走）建立概率表示，确立了量子动力学与经典动力学之间稳健的联系。我们首先改编了 Molchanov公式——该公式最初用于研究晶格 $\mathbb{Z}^d$上的 Schr¨odinger 算子——以刻画连续时间量子行走的演化。在此框架基础上，我们进一步开发了一种概率方法，用于表示无限整数线上的离散时间量子行走，从而绕过通常妨碍直接扩展 Molchanov方法的局部性约束。通过对 Hadamard行走进行基准分析，我们以实证方式验证了该表示的有效性；结果表明，它与传统的幺正演化高度吻合。我们的研究结果表明，这种概率视角为模拟高维量子行走提供了一种强有力的替代方案，并为通过经典随机过程研究量子系统开辟了新的分析途径。

Keywords：量子行走：概率方法

1 引言

量子行走（QW）是经典随机游走的有力推广，为量子信息处理和算法设计提供了基础框架。量子行走大致分为离散时间（含币）和连续时间两类，自 Gudder 的开创性工作 [6]以及 Meyer 随后对量子格气自动机的探索以来，量子行走便一直受到严格研究 [10]。Nayak 和 Vishwanath 首次详细阐述了离散时间 Hadamard行走独特的弹道式扩散 [12] ，Ambainis 等人也对此进行了研究 [1]；这种扩散与经典中心极限定理所描述的扩散模式截然不同。Konno 对这一差异作了正式阐述 [7, 8], ，为一维格点建立了独特的弱极限定理，Grimmett 等人后来又将这一结果加以推广[5]。尽管取得了这些进展，将此类极限定理推广至多维流形仍然是一项分析上的挑战，迄今尚未得到充分解决。

从历史上看，量子行走的分析工具主要是组合方法 [7] 以及泛函分析框架中的傅里叶分析 [5]。相较之下，纯粹的概率方法一直未得到充分发展。这种不足在很大程度上源于量子行走的本

质：它是一种确定性的幺正演化，而非随机过程。然而，近期文献 [9, 11, 14] 开始表明，从概率论的角度考察量子行走，可以揭示量子动力学与经典动力学之间深层且此前未被发现的结构对称性。通过采用概率表示，我们可以揭示这些潜在联系，并将经典随机工具应用于量子系统。

本文通过将 Molchanov公式——一种最初为晶格上的 Schr¨odinger 算子开发的经典概率工具 $\mathbb{Z}^d$ [2]——应用于量子动力学研究，弥合了这一差距。在第2节中，我们建立了 Molchanov 表示与连续时间量子游走之间的形式映射；连续时间量子游走由 Schr¨odinger 方程 [4]的解定义。尽管局部性约束 [13] 使 Molchanov公式无法直接推广至离散时间情形，我们仍在第3节提出了一种新颖的替代方法。该方法为由任意硬币矩阵驱动的整数线上的离散时间量子行走提供了稳健的概率表示。与我们的研究同期，工作论文 citeji 的作者提出了另一种表示；然而，该表示缺乏实证验证，且存在若干分析上的不一致。

最后，在第4节中，我们提出并实现了高效算法，以基于推导出的概率公式模拟量子行走。我们通过对 Hadamard行走进行基准分析，验证了理论结果。通过将量子行走构建为一种概率结构，我们为研究高维离散时间量子行走提供了新的视角，也为蒙特卡罗模拟以及未来推导多维弱极限定理开辟了一条可扩展的途径。

2 Molchanov 的连续时间量子游走概率公式

我们首先定义连续时间量子游走：

定义 2.0.1. 设$(X_t)^{t\geq 0}$ 为连续时间马尔可夫链，其概率转移矩阵为 P，该链的跳跃时刻由参数为 $\lambda > 0$ 的泊松过程 $(N_t)^{t\geq 0}$表示。连续时间量子游走 Q 由幺正演化算子 $U(t) = e^{i\lambda Pt}$ 确定，使得时刻 $t \geq 0$的量子态 Ψ 为：

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)\,|\Psi(0)\rangle\,.$$

换句话说，它是以下薛定谔方程的解：

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\lambda P\Psi. \tag{2.1}$$

Molchanov 公式于 1981 年建立，并已用于研究晶格上的薛定谔算子 $\mathbb{Z}^d$ （例如参见 [2]）。然而，利用定义 2.0.1，我们可以对其进行修改，从而得到无限整数线上连续时间量子游走的概率公式 $\mathbb{Z}$。这种量子游走的 Molchanov 概率表示陈述如下定理：

定理 2.0.2。 定义 *2.0.1* 中的连续时间量子游走具有如下概率表示：

$$\Psi(t,x) = e^{\lambda t}\mathbb{E}\Big[i^{N_t}\Psi(0,X_t)\Big], \tag{2.2}$$

其中 $\Psi(.)$表示量子游走的概率振幅。

证明。只需证明由方程（2.2）可以得到方程（2.1）。事实上，我们有：

$$\Psi(t+\Delta t,x) = e^{\lambda(t+\Delta t)}\mathbb{E}\Big[i^{N_{t+\Delta_t}}\Psi(0,X_{t+\Delta t})\Big]$$

应用全期望公式，并对 $N_{\Delta t}$进行条件化，可得：

$$\begin{aligned}\Psi(t+\Delta_t,x) = e^{\lambda(t+\Delta_t)}\mathbb{E}\Big[i^{N_{t+\Delta_t}}\Psi(0,X_{t+\Delta_t})\Big|N_{\Delta_t}=0\Big]\cdot\mathbb{P}[N_{\Delta_t}=0]\\ +e^{\lambda(t+\Delta_t)}\mathbb{E}\Big[i^{N_{t+\Delta_t}}\Psi(0,X_{t+\Delta_t})\Big|N_{\Delta_t}=1\Big]\cdot\mathbb{P}[N_{\Delta_t}=1]\\ +O(\Delta_t^2)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}= e^{\lambda(t+\Delta_t)}e^{-\lambda\Delta_t}\mathbb{E}\Big[i^{N_{t+\Delta_t}}\Psi(0,X_{t+\Delta_t})\Big|N_{\Delta_t}=0\Big]\\ +e^{\lambda(t+\Delta_t)}e^{-\lambda\Delta_t}(\lambda\Delta_t)\mathbb{E}\Big[i^{N_{t+\Delta_t}}\Psi(0,X_{t+\Delta_t})\Big|N_{\Delta_t}=1\Big]\\ +O(\Delta_t^2).\end{aligned}$$

现在，利用时间齐次性，可得：

$$\begin{aligned}\Psi(t+\Delta_t,x) &= e^{\lambda t}\mathbb{E}\Big[i^{N_t}\Psi(0,X_t)\Big] + e^{\lambda t}(\lambda\Delta_t)(iP)\mathbb{E}\Big[i^{N_t}\Psi(0,X_t)\Big] + O(\Delta_t^2)\\ &= \Psi(t,x) + \Delta_t(i\lambda P)\Psi(x,t) + O(\Delta_t^2).\end{aligned}$$

因此，我们有：

$$\frac{\Psi(t+\Delta_t,x)-\Psi(t,x)}{\Delta_t} = (i\lambda P)\Psi(x,t) + O(\Delta_t^2).$$

取极限并令 $\Delta_t \to 0$，即可完成证明。 □

可以尝试推导 Molchanov 公式的离散时间版本。例如，我们可以定义一列参数为 $\lambda > 0$ 的 n 独立同分布的泊松随机变量 $N_{j,\ j=1,\ \ldots\ldots,\ n}$，并且很容易证明，经过 n 步后的概率幅演化满足以下概率表示：

$$\Psi(n,x) = e^{\lambda n}\mathbb{E}\Big[i^{\sum_{j=1}^{n}N_j}\Psi(0,X_n)\Big]. \tag{2.3}$$

然而，这里的离散时间量子游走由于局部性而定义不明确（例如，参见[13]）。因此，我们需要另辟蹊径，通过硬币模型得到离散时间量子游走的概率表示。不过，我们很快就会看到，离散时间量子游走的正确表示与方程（2.3）并没有太大区别。

3 离散时间量子游走的概率表示

我们通过希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 来定义离散时间量子游走，使得

$$\mathcal{H} = \ell^2(\mathbb{Z}, \mathbb{C}^2) = \left\{ \Psi : \mathbb{Z} \to \mathbb{C}^2 \middle| \sum_{x \in \mathbb{Z}} ||\Psi(x)||^2_{\mathbb{C}^2} < \infty \right\},$$

其中， $\mathbb{Z}$ 对应于行者位置空间的整数格， $\mathbb{C}^2$ 对应于复数币空间， Ψ 是量子态。

我们将 $\mathcal{H}$ 上有界算子构成的巴拿赫空间记为 $\mathcal{L}(\mathcal{H})$，将其酉算子闭子群记为 $\mathcal{U}(\mathcal{H})$。币空间的标准正交基为 $\{-1, 1\}$，定义如下：

$$|-1\rangle := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \qquad |1\rangle := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

接下来，离散时间量子游走定义如下：

定义 3.0.1。 希尔伯特空间 $\mathcal{H} = \ell^2(\mathbb{Z}) \otimes \ell^2(\mathbb{C}^2)$上的随机量子游走 Q，其中位置空间记为 $\ell^2(\mathbb{Z})$ = 张成，币空间记为$\ell^2(\mathbb{C}^2)$ = 张成，由幺正演化算子 $U \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$决定：

$$U = S \cdot \Big(\sum_{x \in \mathbb{Z}} |x\rangle\langle x| \otimes C(x) \Big), \tag{3.1}$$

其中， S 是移位算子，满足

$$S\,|x\rangle \otimes |y\rangle = |x + y\rangle \otimes |y\rangle\,, \tag{3.2}$$

且 $C(x) \in \mathcal{U}(\ell^2(\mathbb{C}^2))$ 是量子币。

注意，任何硬币矩阵 $C \in \mathcal{U}(\ell^2(\mathbb{C}^2))$ 都可以通过欧拉角分解写成以下形式：

$$C = e^{i\lambda_1\sigma_3} e^{i\lambda_2\sigma_2} e^{i\lambda_3\sigma_3}, \tag{3.3}$$

其中 $\lambda_j \in (0, 2\pi)$ $j = 1, 2, 3$； σ_2 和 σ_3 分别是泡利矩阵 Y 和 Z，定义如下：

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

这促使我们在推导一般硬币对应的量子游走公式之前，先研究与硬币矩阵 σ_2 和 σ_3 相关的量子行走的概率表示。

3.1 泡利币的公式

首先考虑硬币算子 $C = e^{i\lambda\sigma_2}$，我们有：

引理 3.1.1。 由齐次硬币算子 $C = e^{i\lambda\sigma_2}$ 驱动的离散时间量子游走的概率幅演化如下：

$$\Psi_n(x,y) = \sum_{k_1,k_2,\ldots,k_n\in\mathbb{N}} i^{\sum_{j=1}^n k_j + y_j\cdot\frac{1-(-1)^{k_j}}{2}} \frac{\lambda^{\sum_{j=1}^n k_j}}{k_1!k_2!\ldots k_n!}\Psi_0(x_n,y_n), \tag{3.4}$$

其中 $x_n := x_0 - \sum_{j=0}^{n-1} y_j$, $y_n := (-1)^{k_n} y_{n-1}$ 对于 $n \geq 1$，满足 $(x_0, y_0) = (x, y)$。

证明。对于量子游走的任意状态 Ψ，我们有：

$$\begin{aligned}
U\Psi &= U \sum_{\substack{x\in\mathbb{Z}\\ y\in\{\pm 1\}}} \Psi(x,y)\,|x\rangle\,|y\rangle \\
&= S\cdot(I\otimes C) \sum_{\substack{x\in\mathbb{Z}\\ y\in\{\pm 1\}}} \Psi(x,y)\,|x\rangle\,|y\rangle \\
&= \sum_{\substack{x\in\mathbb{Z}\\ y\in\{\pm 1\}}} \Psi(x,y) S\,|x\rangle\, e^{i\lambda\sigma_2}\,|y\rangle \\
&= \sum_{\substack{x\in\mathbb{Z}\\ y\in\{\pm 1\}}} \Psi(x,y) \sum_{k\in\mathbb{N}} S\,|x\rangle\,\frac{(i\lambda)^k}{k!}\sigma_2^k\,|y\rangle \\
&= \sum_{\substack{x\in\mathbb{Z}\\ y\in\{\pm 1\}\\ k\in\mathbb{N}}} \Psi(x,y) i^k\frac{\lambda^k}{k!} i^{y\cdot\frac{1-(-1)^k}{2}}\,\left|x+(-1)^k y\right\rangle\left|(-1)^k y\right\rangle \\
&= \sum_{\substack{x\in\mathbb{Z}\\ y\in\{\pm 1\}\\ k\in\mathbb{N}}} i^{k+y\cdot\frac{1-(-1)^k}{2}}\,\frac{\lambda^k}{k!}\Psi(x-y,(-1)^k y)\,|x\rangle\,|y\rangle\,.
\end{aligned}$$

这意味着

$$(U\Psi)(x,y) = \sum_{k\in\mathbb{N}} i^{k+y\cdot\frac{1-(-1)^k}{2}}\,\frac{\lambda^k}{k!}\Psi(x-y,(-1)^k y). \tag{3.5}$$

因此，经过 $n-$ 步演化后，得到概率振幅：

$$\Psi_n(x,y) = \sum_{k_1,k_2,\ldots,k_n\in\mathbb{N}} i^{\sum_{j=1}^n k_j + y_j\cdot\frac{1-(-1)^{k_j}}{2}} \frac{\lambda^{\sum_{j=1}^n k_j}}{k_1!k_2!\ldots k_n!}\Psi_0(x_n,y_n). \tag{3.6}$$

证明至此完成。 □

We 引入以下经典过程，以构建我们的概率表示：

定义 3.1.2. 设 N_1、N_2、$...N_n$ 为参数为 $\lambda \in (0、2\pi)$ 的独立同分布泊松随机变量，则有：

$$\begin{aligned}
&S_0 = 0, \qquad S_n = \sum_{j=1}^{n} N_j \qquad (n \geq 1),\\
&Y_0 = y, \qquad Y_n = (-1)^{S_n}\left(Y_0 + \frac{a_{0,c}(Y_0)}{2}\right) - \frac{a_{0,c}(Y_0)}{2}(-1)^{S_n(c+1)} \qquad (n \geq 1),\\
&X_0 = x, \qquad X_n = X_{n-1} - Y_{n-1} = X_0 - \sum_{j=0}^{n-1} Y_j \qquad (n \geq 1),
\end{aligned}$$

其中 $a_{0,\ c}(Y_0)$ 是由 y 和 c确定的确定性函数，而 c 是给定的固定常数 .

备注 3.1.1. 这里 Y_n 的定义本可以更简单，但为与未来关于高维量子行走的研究保持一致，我们坚持采用这种形式。

由此得到以下表示定理：

定理 3.1.3. 由齐次硬币算子 $C = e^{i\lambda\sigma_2}$驱动的离散时间量子游走具有以下概率表示：

$$\Psi_n(x,y) = e^{n\lambda}\mathbb{E}\left[i^{S_n+Y_0\cdot\frac{1-(-1)^{S_n}}{2}}\Psi_0(X_n,Y_n)\right], \tag{3.7}$$

当 $(x,\ y,\ n) \in \mathbb{Z}\times\{\pm 1\}\times\mathbb{N}_0$，其中 $\Psi_0(.,.)$ 由方程 (4.1)定义，经典过程 S_n，Y_n和 X_n 在定义 *3.1.2* 中定义，其中 $c = 0$。

证明。 由引理 3.1.1中的方程 (3.1.1)，应用泊松分布，可得：

$$\begin{aligned}
\Psi_n(x_0,y_0) &= \sum_{k_1,\ldots,k_n\in\mathbb{N}} i^{\sum_{j=1}^n k_j + y_j\cdot\frac{1-(-1)^{k_j}}{2}} \frac{\lambda^{\sum_{j=1}^n k_j}}{k_1!\ldots k_n!}\Psi_0(x_n,y_n)\\
&= e^{n\lambda}\sum_{k_1,\ldots,k_n\in\mathbb{N}} i^{\sum_{j=1}^n k_j + y_j\cdot\frac{1-(-1)^{k_j}}{2}} \frac{e^{-\lambda}\lambda^{k_1}\ldots e^{-\lambda}\lambda^{k_n}}{k_1!\ldots k_n!}\Psi_0(x_n,y_n)\\
&= e^{n\lambda}\mathbb{E}\left[i^{S_n+Y_0\cdot\frac{1-(-1)^{S_n}}{2}}\Psi_0(X_n,Y_n)\right],
\end{aligned}$$

对于 $x_0 = x$ 和 $y_0 = y$。至此，我们的证明完成。 □

现在考虑硬币 $C = e^{i\lambda\sigma_3}$，我们有：

引理 3.1.4。 由齐次硬币算子 $C = e^{i\lambda\sigma_3}$ 驱动的离散时间量子游走的概率幅演化如下：

$$\Psi_n(x,y) = \sum_{k_1,k_2,\ldots,k_n\in\mathbb{N}} i^{y_0\sum_{j=1}^n k_j}\frac{\lambda^{\sum_{j=1}^n k_j}}{k_1!k_2!\ldots k_n!}\Psi_0(x_n,y_n), \tag{3.8}$$

其中 $x_n := x_0 - ny_0$, $y_n := y_0$ 对于 $n \geq 1$，其中 $(x_0, y_0) = (x, y)$。

证明。对于量子游走的任意状态 Ψ，我们有:

$$\begin{aligned}
U\Psi &= U \sum_{\substack{x\in\mathbb{Z}\\ y\in\{\pm 1\}}} \Psi(x,y)\,|x\rangle\,|y\rangle \\
&= S\cdot(I\otimes C)\sum_{\substack{x\in\mathbb{Z}\\ y\in\{\pm 1\}}} \Psi(x,y)\,|x\rangle\,|y\rangle \\
&= \sum_{\substack{x\in\mathbb{Z}\\ y\in\{\pm 1\}}} \Psi(x,y) S\,|x\rangle\, e^{i\lambda\sigma_3}\,|y\rangle \\
&= \sum_{\substack{x\in\mathbb{Z}\\ y\in\{\pm 1\}}} \Psi(x,y)\sum_{k\in\mathbb{N}} S\,|x\rangle\,\frac{(i\lambda)^k}{k!}\sigma_3^k\,|y\rangle \\
&= \sum_{\substack{x\in\mathbb{Z}\\ y\in\{\pm 1\}\\ k\in\mathbb{N}}} \Psi(x,y) i^k \frac{\lambda^k}{k!} i^{k(y-1)}\,|x+y\rangle\,|y\rangle \\
&= \sum_{\substack{x\in\mathbb{Z}\\ y\in\{\pm 1\}\\ k\in\mathbb{N}}} i^{ky}\frac{\lambda^k}{k!}\Psi(x-y,y)\,|x\rangle\,|y\rangle\,.
\end{aligned}$$

这意味着

$$(U\Psi)(x,y) = \sum_{k\in\mathbb{N}} i^{ky}\frac{\lambda^k}{k!}\Psi(x-y,y). \tag{3.9}$$

因此，经过 $n-$ 步演化后，得到如下概率振幅:

$$\Psi_n(x,y) = \sum_{k_1,k_2,\ldots,k_n\in\mathbb{N}} i^{y_0\sum_{j=1}^n k_j}\frac{\lambda^{\sum_{j=1}^n k_j}}{k_1!k_2!\ldots k_n!}\Psi_0(x-ny_0,y_0). \tag{3.10}$$

至此，证明完成。 □

由此得到以下表示定理:

定理 3.1.5。由齐次硬币算子 $C = e^{i\lambda\sigma_3}$ 驱动的离散时间量子游走具有如下表示:

$$\Psi_n(x,y) = e^{in\lambda y_0}\Psi_0(x_0 - ny_0, y_0), \tag{3.11}$$

对于$(x, y, n) \in \mathbb{Z}\times\{\pm 1\}\times\mathbb{N}_0$，其中$(x_0, y_0) = (x, y)$。

证明。由引理 3.1.4中的方程（3.8），应用泊松分布，可得 :

$$\begin{aligned}\Psi_n(x_0,y_0) &= \sum_{k_1,\dots,k_n\in\mathbb{N}} i^{y_0\sum_{j=1}^n k_j}\frac{\lambda^{\sum_{j=1}^n k_j}}{k_1!\dots k_n!}\Psi_0(x_n,y_n)\\ &= e^{n\lambda}\sum_{k_1,\dots,k_n\in\mathbb{N}} i^{y_0\sum_{j=1}^n k_j}\frac{e^{-\lambda}\lambda^{k_1}\dots e^{-\lambda}\lambda^{k_n}}{k_1!\dots k_n!}\Psi_0(x_0-ny_0,y_0)\\ &= e^{n\lambda}\Psi_0(x_0-ny_0,y_0)\mathbb{E}\left[i^{y_0S_n}\right]\\ &= e^{n\lambda}\Psi_0(x_0-ny_0,y_0)\mathbb{E}\left[e^{i\frac{\pi}{2}y_0S_n}\right]\\ &= e^{in\lambda y_0}\Psi_0(x_0-ny_0,y_0),\end{aligned}$$

对于 $x_0=x$ 和 $y_0=y$，在最后一个方程中，我们使用了泊松随机变量的特征函数公式。至此，证明完成。 □

3.2 一般硬币的一个公式

现在，考虑方程（3.3）中的一般硬币， $C=e^{i\lambda_1\sigma_3}e^{i\lambda_2\sigma_2}e^{i\lambda_3\sigma_3}$，我们有:

引理 3.2.1. 由齐次硬币算子 $C=e^{i\lambda_1\sigma_3}e^{i\lambda_2\sigma_2}e^{i\lambda_3\sigma_3}$ 驱动的离散时间量子游走的概率幅演化如下:

$$\Psi_n(x,y)=\sum_{k_1,k_2,\dots,k_n\in\mathbb{N}} e^{i\lambda_1\sum_{j=0}^{n-1}y_j}e^{i\lambda_3\sum_{j=1}^n y_j}i^{\sum_{j=1}^n k_j+y_j\cdot\frac{1-(-1)^{k_j}}{2}}\frac{\lambda_2^{\sum_{j=1}^n k_j}}{k_1!k_2!\dots k_n!}\Psi_0(x_n,y_n), \tag{3.12}$$

其中 $x_n:=x_0-\sum_{j=0}^{n-1}y_j$, $y_n:=(-1)^{k_n}y_{n-1}$ 对于 $n\geq 1$，其中 $(x_0,y_0)=(x,y)$ 。

证明。 注意，根据引理 3.1.4 和定理3.1.5，当仅作用硬币算符 $e^{i\lambda.\sigma_3}$并保持位置不变时，一步演化为:

$$\Psi_1(x,y)=e^{i\lambda.y_0}\Psi_0(x_0,y_0).$$

现在，对于量子游走的任意状态 Ψ ，我们有：

$$\begin{aligned}
U\Psi &= U \sum_{\substack{x\in\mathbb{Z}\\ y\in\{\pm 1\}}} \Psi(x,y)\,|x\rangle\,|y\rangle \\
&= S\cdot(I\otimes C)\sum_{\substack{x\in\mathbb{Z}\\ y\in\{\pm 1\}}} \Psi(x,y)\,|x\rangle\,|y\rangle \\
&= \sum_{\substack{x\in\mathbb{Z}\\ y\in\{\pm 1\}}} \Psi(x,y) S\,|x\rangle\, e^{i\lambda_1\sigma_3}e^{i\lambda_2\sigma_2}e^{i\lambda_3\sigma_3}\,|y\rangle \\
&= \sum_{\substack{x\in\mathbb{Z}\\ y\in\{\pm 1\}}} \Psi(x,y) e^{i\lambda_1 y}\sum_{k\in\mathbb{N}} S\,|x\rangle\, e^{i\lambda_3(-1)^k y}\frac{(i\lambda_2)^k}{k!} i^{y\cdot\frac{1-(-1)^k}{2}}\,\left|(-1)^k y\right\rangle \\
&= \sum_{\substack{x\in\mathbb{Z}\\ y\in\{\pm 1\}\\ k\in\mathbb{N}}} \Psi(x,y) e^{i\lambda_1 y}e^{i\lambda_3(-1)^k y}\frac{\lambda_2^k}{k!} i^{k+y\cdot\frac{1-(-1)^k}{2}}\,\left|x+(-1)^k y\right\rangle\left|(-1)^k y\right\rangle \\
&= \sum_{\substack{x\in\mathbb{Z}\\ y\in\{\pm 1\}\\ k\in\mathbb{N}}} e^{i\lambda_1 y}e^{i\lambda_3(-1)^k y}\frac{\lambda_2^k}{k!} i^{k+y\cdot\frac{1-(-1)^k}{2}}\Psi(x-y,(-1)^k y)\,|x\rangle\,|y\rangle\,.
\end{aligned}$$

这意味着

$$(U\Psi)(x,y)=\sum_{k\in\mathbb{N}} e^{i\lambda_1 y}e^{i\lambda_3(-1)^k y}\frac{\lambda_2^k}{k!} i^{k+y\cdot\frac{1-(-1)^k}{2}}\Psi(x-y,(-1)^k y). \tag{3.13}$$

因此，经过 $n-$ 步演化后，得到的概率振幅为：

$$\Psi_n(x,y)=\sum_{k_1,k_2,\ldots,k_n\in\mathbb{N}} e^{i\lambda_1\sum_{j=0}^{n-1}y_j}e^{i\lambda_3\sum_{j=1}^{n}y_j} i^{\sum_{j=1}^{n}k_j+y_j\cdot\frac{1-(-1)^{k_j}}{2}}\frac{\lambda_2^{\sum_{j=1}^{n}k_j}}{k_1!k_2!\ldots k_n!}\Psi_0(x_n,y_n). \tag{3.14}$$

至此，我们完成了证明。 □

由此可得以下表示定理：

定理 3.2.2。 由齐次硬币算子 $C=e^{i\lambda_1\sigma_3}e^{i\lambda_2\sigma_2}e^{i\lambda_3\sigma_3}$ 驱动的离散时间量子行走具有以下概率表示：

$$\Psi_n(x,y)=e^{n\lambda_2}\mathbb{E}\left[i^{S_n+Y_0\cdot\frac{1-(-1)^{S_n}}{2}}e^{i\lambda_1(X_0-X_n)}e^{i\lambda_3(X_0-X_n+Y_n)}\Psi_0(X_n,Y_n)\right], \tag{3.15}$$

对于 $(x,\ y,\ n)\in\mathbb{Z}\times\{\pm 1\}\times\mathbb{N}_0$，其中 $\Psi_0(.,.)$ 由方程 (4.1)定义，经典过程 S_n，Y_n和 X_n 由定义 *3.1.2* 给出，其中 $c=0$。

证明。 由引理 3.12中的方程（3.2.1），应用泊松分布可得：

$$\begin{aligned}\Psi_n(x_0,y_0) &= \sum_{k_1,k_2,\ldots,k_n\in\mathbb{N}} e^{i\lambda_1\sum_{j=0}^{n-1}y_j}e^{i\lambda_3\sum_{j=1}^{n}y_j}i^{\sum_{j=1}^{n}k_j+y_j\cdot\frac{1-(-1)^{k_j}}{2}}\frac{\lambda_2^{\sum_{j=1}^{n}k_j}}{k_1!k_2!\ldots k_n!}\Psi_0(x_n,y_n)\\ &= e^{n\lambda_2}\sum_{k_1,\ldots,k_n\in\mathbb{N}} e^{i\lambda_1\sum_{j=0}^{n-1}y_j}e^{i\lambda_3\sum_{j=1}^{n}y_j}i^{\sum_{j=1}^{n}k_j+y_j\cdot\frac{1-(-1)^{k_j}}{2}}\frac{e^{-\lambda_2}\lambda_2^{k_1}\ldots e^{-\lambda_2}\lambda_2^{k_n}}{k_1!\ldots k_n!}\Psi_0(x_n,y_n)\\ &= e^{n\lambda_2}\mathbb{E}\Big[i^{S_n+Y_0\cdot\frac{1-(-1)^{S_n}}{2}}e^{i\lambda_1(X_0-X_n)}e^{i\lambda_3(X_0-X_n+Y_n)}\Psi_0(X_n,Y_n)\Big],\end{aligned}$$

对于 $x_0=x$ 和 $y_0=y$。至此，我们完成了证明。 □

例3.2.3。 考虑硬币矩阵为以下形式的*Hadamard*行走

$$H=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix},$$

它也可以写成以下形式：

$$H=e^{i\frac{\pi}{2}\sigma_3}e^{i\frac{\pi}{4}\sigma_2}.$$

根据定理 *3.2.2*，其概率表示为

$$\Psi_n(x,y)=e^{\frac{n\pi}{4}}\mathbb{E}\Big[i^{S_n+Y_0\cdot\frac{1-(-1)^{S_n}}{2}}e^{i\frac{\pi}{2}(X_0-X_n)}\Psi_0(X_n,Y_n)\Big]. \tag{3.16}$$

4 公式的实证分析

本节中，我们提出一种高效算法，通过方程（3.15）中的概率表示，模拟具有一般硬币的离散时间量子游走。

量子行走者初始态的一般形式为：

$$|\Psi_0\rangle=|0\rangle\otimes\Big(\alpha\,|1\rangle+\beta\,|-1\rangle\Big),$$

其中，$\alpha\in\mathbb{C}$、$\beta\in\mathbb{C}$和 $|\alpha|^2+|\beta|^2=1$ 分别是在位置 $x=0$ 、时刻 $t=0$，与硬币态 $|1\rangle$ 和 $|-1\rangle$ 对应的概率振幅。因此，我们可以将方程（3.15）中期望值内的 $\Psi_0(.,.)$ 的函数形式定义为

$$\Psi_0(x,y):=\mathbb{I}_{x=0}\Big(\alpha\cdot\mathbb{I}_{y=1}+\beta\cdot\mathbb{I}_{y=-1}\Big). \tag{4.1}$$

由此，我们还可以将方程（3.15改写为更紧凑的形式：

$$\Psi_n(x,y)=e^{n\lambda_2}\mathbb{E}\Big[i^{S_n+y\cdot\frac{1-(-1)^{S_n}}{2}}e^{i\lambda_1 x}e^{i\lambda_3(x+y(-1)^{S_n})}\Psi_0(X_n,Y_n)\Big]. \tag{4.2}$$

现在，我们介绍使用一般硬币的量子行走算法：

算法1 通过概率表示模拟离散时间量子游走**要求：** 总迭代次数 M、考察时间 n、初始硬币态的系数 α 和 β、欧拉分解参数 λ_1 和 λ_3，以及泊松分布参数 λ_2。

1: 初始化数组 L 和 R，分别保存硬币自旋 $\{1\}$ 和 $\{-1\}$ 在各个位置 $x \in (-n,\ n)$ $x \in \mathbb{Z}$ 处的概率振幅。
2: **重复**
3: 从均值为 λ_2 的泊松分布中抽取一组数值 N_j，表示时刻 $j = 1,\ 2,\ \ldots\ldots,\ n$ 的跳跃次数。4: 计算和序列 $S_1,\ \cdots,\ S_n$，其中 $S_n = \sum_{j=1}^{n} N_j$。5: 计算 $Y_n^{\{1\}} = (-1)^{S_n}$ 和 $Y_n^{\{-1\}} = (-1)^{S_n+1}$。6: 更新位置 $x = \sum_{j=0}^{n-1} (-1)^{S_j}$ 处的 R 数组：

$$R[x] += e^{n\lambda_2} e^{i\lambda_1 x} e^{i\lambda_3 (x+(-1)^{S_n})} \cdot \frac{i^{S_n + \frac{1-(-1)^{S_n}}{2}}}{M} \cdot \left(\alpha \cdot \mathbb{I}_{Y_n^{\{1\}}=1} + \beta \cdot \mathbb{I}_{Y_n^{\{1\}}=-1}\right)$$

7: 更新位置 $x = -\sum_{j=0}^{n-1} (-1)^{S_j}$ 处的 L 数组：

$$L[x] += e^{n\lambda_2} e^{i\lambda_1 x} e^{i\lambda_3 (x-(-1)^{S_n})} \cdot \frac{i^{S_n - \frac{1-(-1)^{S_n}}{2}}}{M} \cdot \left(\alpha \cdot \mathbb{I}_{Y_n^{\{-1\}}=1} + \beta \cdot \mathbb{I}_{Y_n^{\{-1\}}=-1}\right)$$

8: **直到**完成 M 次迭代9: **返回** 数组 L 和 R。

现在回到示例3.2.3，我们将通过传统方法模拟 Hadamard行走，并将其作为基准，再与算法1得到的模拟结果进行比较。请注意，Hadamard行走的初始态为

$$|\Psi_0\rangle = |0\rangle \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle + i\frac{1}{\sqrt{2}}|-1\rangle\right).$$

数值模拟结果如图1所示，并验证了我们公式的有效性。

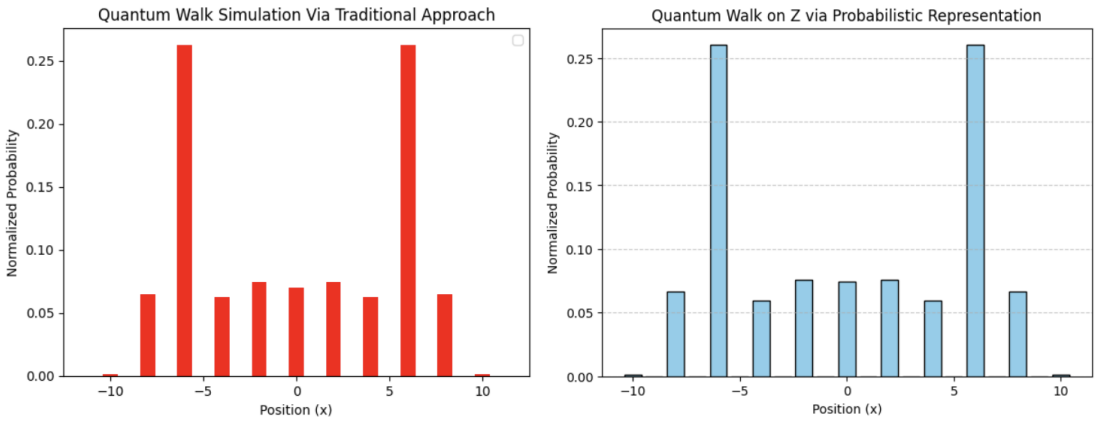


图 1. 当 $n = 10$、 $\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}$ 和 $\beta = \frac{1}{\sqrt{2}}i$ 时 Hadamard行走的概率分布。左侧柱状图展示基准方法，右侧柱状图展示概率方法，其迭代次数为 $M = 5 \times 10^9$、 $\lambda_1 = \frac{\pi}{2}$、 $\lambda_2 = \frac{\pi}{4}$ 和 $\lambda_3 = 0$。

5 结论

总之，我们通过为连续时间和离散时间情形构建稳健的概率表示，探讨了量子行走与经典随机过程的交集。尽管量子行走本质上是确定性的，我们的研究表明，可以通过概率论的视角对其进行有效刻画，从而揭示出其与经典过程之间的联系比以往文献所强调的更为深刻。

我们成功地运用 Molchanov公式——这一原本用于薛¨定谔算子的工具——来表示连续时间量子游走，并在第 3 节中引入了一个方法论框架，从而为由任意硬币矩阵驱动的整数线上的离散时间量子行走 $\mathcal{U}(\mathcal{H}$推导出概率表示。此外，我们通过开发高效的模拟算法，展示了这些理论构造的实际用途。通过研究 Hadamard行走这一具体案例，我们验证了概率公式能够准确再现已知的量子行为，为传统幺正演化方法提供了一种计算上可行的替代方案。

从泛函分析方法转向概率方法，为未来研究开辟了若干前景广阔的方向：我们的表示方法为克服多维量子行走的分析复杂性提供了潜在途径，而其弱极限定理仍难以捉摸。此外，本文推导出的公式为将方差缩减技术及其他经典蒙特卡罗方法应用于量子系统奠定了基础。通过将量子振幅映射为概率结构，研究人员或许能够识别出量子行走相较于其经典对应物所特有的“量子性”。

参考文献

1. Ambainis, A., Bach, E., Nayak, A., Vishwanath, A., 和 Watrous, J. (2001). 一维量子随机游走, Proc. of the 33rd Annual ACM Symposium on Theory of Computing, 37–49. 2. Ren´e Carmona. 随机薛定谔算子。圣弗卢尔概率暑期学校 XIV, 第 1–124 页，1984. 3. Childs, A. M., Farhi, E., 和 Gutmann, S. (2002). 量子随机游走与经典随机游走之间差异的一个例子，量子信息处理, 1, 35–43, quant-ph/0103020. 4. Childs, A. M. (2022). 量子算法讲义。马里兰大学。https:// www.cs.umd.edu/ amchilds/qa/qa.pdf 5. Grimmett, G., Janson, S., 和 Scudo, P. F. (2004). 量子随机游走的弱极限，Phys. Rev. E, 69, 026119, quant-ph/0309135. 6. Gudder, S. P. (1988). 量子概率。Academic Press Inc., CA. 7. Konno, N. (2002a). 一维量子随机游走，量子信息处理, 1, 345–354, quant-ph/0206053. 8. Konno, N. (2005a). 直线上连续时间量子游走的极限定理，Phys. Rev. E, 72, 026113, quant-ph/0408140. 9. Konno, N., Matsue, K., 和 Segawa, E. (2023). 从开放量子随机游走到量子行走的转变。统计物理学杂志, 190(12):202. 10. Meyer, D. A. (1996). 从量子元胞自动机到量子格气，J. Statist. Phys., 85, 551–574, quant-ph/9604003. 11. Montero, M. (2017). 量子行走和随机游走作为概率分布的通用生成器。物理评论A, 95(6):062326. 12. Nayak, A., 和 Vishwanath, A. (2000). 直线上的量子行走，quant-ph/0010117. 13. Portugal, R. (2018). 量子行走与搜索算法（第 2 版）。Springer Nature. https://doi.org/10.1007/978-3-319-97813-0 14. Yamagami, T., Segawa, E., Chauvet, N., Rohm, A., Horisaki, R., 和 Naruse, M. (2022). 通过随机游走副本实现量子行走的方向性。复杂性, 2022(ID 9021583):114.