

DOI:10.3969/j.issn.1001-0505.2017.05.005

# 完全图上结构异常的搜索算法

——融入量子计算思维的经典算法探讨

陈汉武<sup>1,2</sup> 李文骞<sup>1,3</sup> 刘志昊<sup>1,2</sup> 赵生妹<sup>4</sup>

(<sup>1</sup> 东南大学计算机科学与工程学院, 南京 211189)

(<sup>2</sup> 东南大学计算机网络和信息集成教育部重点实验室, 南京 211189)

(<sup>3</sup> 南京森林公安学院信息技术系, 南京 210023)

(<sup>4</sup> 南京邮电大学通信与信息工程学院, 南京 210003)

**摘要:** 采用量子计算思维探索新的图结构搜索方法, 提出了一种基于散射量子行走的完全图上结构异常的搜索算法. 在  $N$  个顶点的完全图上外接一个悬挂点, 既破坏了完全图的对称性, 也预示着图的拓扑结构将发生变化. 首先给出完全图上散射量子行走酉算子  $U$  的解析刻画, 将行走的 Hilbert 空间投影到低维不变子空间  $S$ , 并给出酉算子  $U$  在空间  $S$  中的作用  $U_S$  的形式; 然后将完全图中所有状态的均匀叠加态选择为行走的初态, 借用微扰理论求出酉算子  $U_S$  的本征值和特征向量, 通过数学解析计算出行走的终态(悬挂点); 最后分析算法的时间复杂度和成功概率. 算法分析及 Matlab 仿真结果表明, 利用散射量子行走可以在  $O(\sqrt{N})$  步内以接近于 1 的概率找到异常位置, 而经典算法中使用邻接矩阵查找该异常点的时间复杂度为  $O(N)$ , 因此相对特定问题和特定的经典算法, 使用散射量子行走搜索算法可以实现二次加速.

**关键词:** 散射量子行走; 完全图; 结构异常; 不变子空间; 微扰理论

**中图分类号:** TP387 **文献标志码:** A **文章编号:** 1001-0505(2017)05-0866-07

## Search algorithm of abnormal structure on complete graph:

## Discussion of classical algorithm merged into the quantum computing thinking

Chen Hanwu<sup>1,2</sup> Li Wenqian<sup>1,3</sup> Liu Zhihao<sup>1,2</sup> Zhao Shengmei<sup>4</sup>

(<sup>1</sup> School of Computer Science and Engineering, Southeast University, Nanjing 211189, China)

(<sup>2</sup> Key Laboratory of Computer Network and Information Integration of Ministry of Education, Southeast University, Nanjing 211189, China)

(<sup>3</sup> Department of Information Technology, Nanjing Forest Police College, Nanjing 210023, China)

(<sup>4</sup> College of Telecommunications and Information Engineering, Nanjing University of Posts and Telecommunications, Nanjing 210003, China)

**Abstract:** Quantum computing thinking is used to explore new search methods for graph structures. A search algorithm for structural anomalies on complete graphs based on scattering quantum walk is proposed. Adding a pendant vertex to a complete graph, in which the number of vertices is  $N$ , breaks the symmetry of the complete graph and indicates the change of the topology of the complete graph. First, the precise definition of the evolutionary unitary operator  $U$  of scattering quantum walk in the complete graph is presented. The Hilbert space in which the walk occurs is projected to a lower-dimensional invariant subspace  $S$ , and the action of the evolutionary operator in the subspace  $U_S$  is given. Then, the equal superposition of all the basis states in the complete graph is chosen as the initial state. The eigenvalues and the eigenstates of  $U_S$  is calculated by using the perturbation theory, and the final state (pendants) of the algorithm is solved. Finally, the time complexity and the success probability of the algorithm are analyzed. The algorithm analysis and the Matlab simulation results show that the quantum search algorithm using scattering quantum walk can find the anomaly in  $O(\sqrt{N})$  steps with the probability near to 1. However, the time complexity of the classical algorithm for searching the anomaly by the adjacency list is  $O(N)$ . Therefore, the search algorithm based on scattering quantum walk can provide a quadric speed up over the classical algorithm for this specific problem.

**Key words:** scattering quantum walk; complete graph; structural anomalies; invariant subspace; perturbation theory

收稿日期: 2017-02-20. 作者简介: 陈汉武(1955—), 男, 博士, 教授, 博士生导师, hw\_chen@seu.edu.cn.

引用本文: 陈汉武, 李文骞, 刘志昊, 等. 完全图上结构异常的搜索算法: 融入量子计算思维的经典算法探讨[J]. 东南大学学报(自然科学版), 2017, 47(5): 866-872. DOI:10.3969/j.issn.1001-0505.2017.05.005.

搜索问题是计算机科学理论与应用技术领域的重要命题,大数据时代更是如此. AlphaGo 算法很好地诠释了随机概念在大数据搜索中的重要性. 根据 AlphaGo 搜索策略核心技术的进化历程可知,即便只从对弈的当前盘面出发去搜索博弈树的枝干,也会在有限步内很快耗尽所有计算资源. AlphaGo 算法采取蒙特卡罗树搜索代替穷举搜索,即多次随机选取部分枝干进行搜索,通过计算这些搜索结果的平均值,帮助程序选出最佳走法. 这种随机搜索与结果获取的思维,与量子搜索算法<sup>[1-4]</sup>的思维几乎一样,随机选取部分枝干进行搜索的思想方法在算法实践的解析中随处可见,其物理上的行为可称为随机行走. 上述随机行走是经典的随机行走. 基于量子力学理论的随机行走称为量子行走<sup>[5]</sup>. 量子行走理论可看成是经典随机行走在量子系统中的自然推广. 1993年 Aharonov 等<sup>[6]</sup>首次提出量子行走的概念. 2003年 Shenvi 等<sup>[7]</sup>提出了第1个基于硬币量子行走的搜索算法(SKW 算法). 2009~2010年, Childs<sup>[8]</sup>和 Lovett 等<sup>[9]</sup>分别证明了连续量子行走算法和离散量子行走算法可以被看作通用量子计算原型,即任意量子算法都可以被构建为基于量子行走的算法形式.

量子行走算法包括离散时间量子行走算法<sup>[10-11]</sup>和连续时间量子行走算法<sup>[12]</sup>,前者又包含了硬币量子行走算法<sup>[13]</sup>和散射量子行走算法<sup>[14]</sup>. 硬币量子行走算法需要一个硬币辅助空间,主要研究在图顶点上的行走;散射量子行走算法主要考察在图边上的行走,不需要辅助空间,每一步行走都在图的顶点处发生散射. 硬币量子行走与散射量子行走是酉等价的<sup>[15]</sup>. 2015年刘艳梅等<sup>[16]</sup>提出了一种基于星图的散射量子行走搜索算法,并证明了星图上硬币量子行走与散射量子行走的酉等价关系.

量子随机行走理论研究初期的热点主要集中在问题的数学建模、概率分布与发散速度、行走的图形拓扑结构等问题上,某些特定问题的理论研究成果指出,行走到达目标的时间较经典随机行走有着指数级加速<sup>[17-18]</sup>. 随着研究的深入,研究者发现量子随机行走异于经典随机行走的一些性质,并逐步被物理实验验证<sup>[12,19-20]</sup>. 随着认知的深入,2007年 ACM 相关会议上就已提出应将量子计算及其相关理论引入计算机软件理论的实践中. 实际上量子随机行走在各种问题的解决方案都有着杰出的理论应用,例如使用量子随机行走解决元素独立性问题<sup>[21]</sup>、子集查找问题<sup>[22]</sup>,甚至在密码攻击<sup>[23]</sup>上也有重要的应用.

量子随机行走搜索算法<sup>[24-26]</sup>是量子随机行走的一个重要应用,目前已有较多关于散射量子行走及其相关搜索算法的研究. 文献[27-31]研究了使用散射量子行走算法搜索星图上的结构异常,并给出一般性结论. 本文将散射量子行走的计算思维嵌入到完全图结构异常的搜索算法中,通过数学解析和 Matlab 程序仿真,探索经典算法融入量子计算思维的可能性. 仿真结果中算法随时间延伸呈现周期性变化的特点完全符合量子计算的特征,说明主导该算法行为的内核包含了量子计算元素. 最后,通过与采用邻接矩阵表示法的经典算法进行比较,说明本文算法可获得二次加速.

## 1 散射量子行走模型

物理现实中散射量子行走模型是描述微观粒子行为的一种数学模型. 用散射量子行走视角观察粒子在图中的运动,视点在图的边上(即粒子在图的边上运动). 该模型设每条边对应2个基态. 例如,顶点  $A, B$  间存在一条边  $(A, B)$ , 则此边对应的2个基态分别为从  $A$  到  $B$  的状态  $|A, B\rangle$  和从  $B$  到  $A$  的状态  $|B, A\rangle$ , 状态  $|A, B\rangle, |B, A\rangle$  在量子计算领域中代表2个正交态. 量子态  $|A, B\rangle$  指明了粒子行走的起止点和方向.

在图  $G(V, E)$  中,令  $V$  为顶点集合,  $E$  为边集合,则图  $G(V, E)$  中每个顶点  $j(j \in V)$  存在如下2个不同的子空间:

$$A_j \equiv \{ |j, i\rangle \mid \forall i \in V, (j, i) \in E \} \quad (1)$$

$$\Omega_j \equiv \{ |i, j\rangle \mid \forall i \in V, (i, j) \in E \} \quad (2)$$

式中,  $A_j, \Omega_j$  分别表示由以顶点  $j$  为起点、终点的基态张成的子空间,且  $|A_j| = |\Omega_j|$ . 显然,如果  $j \neq l$ , 则  $A_j \cap A_l = \emptyset, \Omega_j \cap \Omega_l = \emptyset$ .

图上散射量子行走的行为可以看成是在图  $G$  中每个顶点  $j$  处执行局部酉变换  $U_j: \Omega_j \rightarrow A_j$ . 针对某一状态  $|i, j\rangle$ , 行走过程在顶点  $j$  处发生散射,即

$$U |i, j\rangle = -r_j |j, i\rangle + t_j \sum_{\substack{(j, k) \in E \\ k \neq i}} |j, k\rangle \quad (3)$$

式中,  $r_j$  和  $t_j$  分别表示粒子从端点  $i$  出发、在顶点  $j$  处的反射系数和透射系数.

假设完全图中包含  $N$  个顶点,分别记为  $1, 2, \dots, N$ , 每个顶点均与其他  $N-1$  个顶点相连,顶点的度  $d = N-1$ . 此完全图中共有  $N(N-1)/2$  条边,对应于  $N(N-1)$  个状态,则该完全图上散射量子行走 Hilbert 空间  $H$  的维度为  $N(N-1)$ .

完全图中散射量子行走酉算子的作用定义为

$$U|i,j\rangle = -r_j|j,i\rangle + t_j \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i, k \neq j}}^N |j,k\rangle \quad (4)$$

式中,  $|r_j|^2 + (N-2)|t_j|^2 = 1$ , 即满足在一个点上散射加透射的概率分布完备性. 当  $r_j$  和  $t_j$  选取

$$\left. \begin{aligned} r_i &= 1 - \frac{2}{d} = \frac{N-3}{N-1} \\ t_i &= \frac{2}{d} = \frac{2}{N-1} \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

时, 此酉算子的作用等价于 Grover 均值反演算子:

$$2|\psi\rangle\langle\psi| - I = \begin{bmatrix} \frac{2}{d}-1 & \frac{2}{d} & \cdots & \frac{2}{d} \\ \frac{2}{d} & \frac{2}{d}-1 & \cdots & \frac{2}{d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{2}{d} & \frac{2}{d} & \cdots & \frac{2}{d}-1 \end{bmatrix}$$

式中,  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{x=0}^{d-1} |x\rangle$ . 由此可知, 这种行走本质上与 Grover 搜索算法等价.

## 2 悬挂点异常

**定义 1**(悬挂点) 度为 1 的顶点为悬挂点.

在完全图中加入一个悬挂点(即完全图中某个异常顶点连接到一个悬挂点)时, 完全图的对称性被打破, 需要针对异常顶点重新定义散射量子行走酉算子. 不失一般性, 假设完全图中异常顶点 1 上连接了一个悬挂点 0,  $N=5$  时完全图结构异常如图 1 所示.

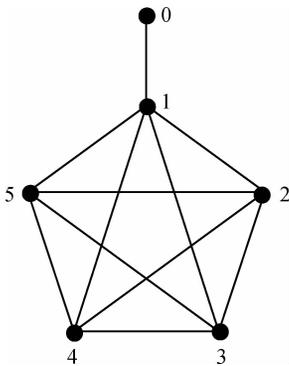


图 1  $N=5$  时完全图的结构异常

由于异常顶点 1 连接了悬挂点 0, 顶点的度变为  $N$ , 则从顶点 2, 3, 4, 5 向顶点 1 散射, 顶点 1 的反射系数和透射系数分别为

$$\left. \begin{aligned} r' &= \frac{N-2}{N} \\ t' &= \frac{2}{N} \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

式中,  $|r'|^2 + (N-1)|t'|^2 = 1$ .

对于顶点 0, 1 上发生的散射, 利用 Oracle 查询进行一次相位翻转, 以标记目标顶点. Oracle 是能够在单位时间内识别特定问题满足条件的解的布尔函数, 搜索算法通常以 Oracle 的调用次数衡量算法时间复杂度. 酉算子在顶点 0 和 1 上的作用为

$$U|1,0\rangle = e^{i\pi}|0,1\rangle \quad (7)$$

$$U|0,1\rangle = e^{i\pi}(-r'|1,0\rangle + t' \sum_{j=2}^N |1,j\rangle) = r'|1,0\rangle - t' \sum_{j=2}^N |1,j\rangle \quad (8)$$

$$U|j,1\rangle_{j \neq 0} = e^{i\pi}(-r'|1,j\rangle + t'|1,0\rangle + t' \sum_{\substack{k=2 \\ k \neq j}}^N |1,k\rangle) = r'|1,j\rangle - t'|1,0\rangle - t' \sum_{k=2}^N |1,k\rangle \quad (9)$$

对于正常顶点 2, 3, ...,  $N$ , 顶点的度并未改变, 反射系数和透射系数根据式(5)取值. 使用散射量子行走搜索结构异常的算法的基本步骤如下:

① 初始化行走初态为均匀叠加态, 即

$$|\psi_{\text{init}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N(N-1)}} \sum_{j=1}^N \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^N |j,k\rangle \quad (10)$$

② 反复执行行走酉算子  $U$ , 重复  $n$  次;

③ 得到系统最终状态为

$$|\psi_{\text{final}}\rangle = U^n |\psi_{\text{init}}\rangle \quad (11)$$

可见, 算法的初始状态为完全图中所有状态的均匀叠加态, 不包含关于异常顶点的任何先验知识, 因此对所有顶点是等价的. 迭代次数  $n$  的取值应该使得终态  $|\psi_{\text{final}}\rangle$  以最大概率测得异常顶点, 需要通过对酉算子  $U$  的具体分析得到.

## 3 算法中模型的代数推演与分析

对散射量子行走搜索算法的一般(通行)分析模式<sup>[28-29, 31]</sup>为: ① 找出行走空间的低维不变子空间; ② 确定该子空间中酉算子  $U$  的形式; ③ 通过求解  $U$  的特征值和特征向量, 将行走初态用特征向量表示; ④ 计算在初态上重复执行  $n$  次  $U$  算子后的终态  $|\psi_{\text{final}}\rangle$ ; ⑤ 分析算法的时间复杂度和搜索成功的概率.

定义如下 5 个状态:  $|0,1\rangle, |1,0\rangle,$

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{j=2}^N |1,j\rangle \quad (12)$$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{j=2}^N |j,1\rangle \quad (13)$$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{(N-1)(N-2)}} \sum_{j=2}^N \sum_{\substack{k=2 \\ k \neq j}}^N |j, k\rangle \quad (14)$$

式中,  $|\psi_1\rangle$  为从异常顶点到正常顶点的所有状态的均匀叠加态;  $|\psi_2\rangle$  为从正常顶点到异常顶点的所有状态的均匀叠加态;  $|\psi_3\rangle$  为从正常顶点到正常顶点的所有状态的均匀叠加态(算法中已融入量子信息元素)。

行走酉算子  $U$  对这 5 个状态的作用表示为

$$U|0,1\rangle = r'|1,0\rangle - t' \sum_{j=2}^N |1,j\rangle = r'|1,0\rangle - t' \sqrt{N-1} |\psi_1\rangle \quad (15)$$

$$U|1,0\rangle = -|0,1\rangle \quad (16)$$

$$U|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{j=2}^N U|1,j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{j=2}^N (-r|j,1\rangle + t \sum_{\substack{k=2 \\ k \neq j}}^N |j,k\rangle) = -\frac{r}{\sqrt{N-1}} \sum_{j=2}^N |j,1\rangle + \frac{t}{\sqrt{N-1}} \sum_{j=2}^N \sum_{\substack{k=2 \\ k \neq j}}^N |j,k\rangle = -r|\psi_2\rangle + t\sqrt{N-2}|\psi_3\rangle \quad (17)$$

$$U|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{j=2}^N U|j,1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{j=2}^N (r'|1,j\rangle - t'|1,0\rangle - t' \sum_{\substack{k=2 \\ k \neq j}}^N |1,k\rangle) =$$

$$U_S = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ r' & 0 & 0 & -t'\sqrt{N-1} & 0 \\ -t'\sqrt{N-1} & 0 & 0 & -r' & 0 \\ 0 & 0 & -r & 0 & t\sqrt{N-2} \\ 0 & 0 & t\sqrt{N-2} & 0 & r \end{bmatrix}$$

容易验证  $U_S U_S^\dagger = I$ , 即算子满足酉性. 如果行走的初始状态为  $|\psi_{\text{init}}\rangle$ , 则行走  $n$  步后的状态为  $U_S^n |\psi_{\text{init}}\rangle$ .

$U_S$  的特征方程为

$$\lambda^5 - \frac{N-3}{N-1} \lambda^4 + \frac{2N-4}{N(N-1)} \lambda^3 + \frac{2N-4}{N(N-1)} \lambda^2 - \frac{N-3}{N-1} \lambda + 1 = 0 \quad (20)$$

$$(\lambda+1) \left( \lambda^4 - \frac{2N-4}{N-1} \lambda^3 + \frac{2(N+1)(N-2)}{N(N-1)} \lambda^2 - \frac{2N-4}{N-1} \lambda + 1 \right) = 0 \quad (21)$$

$$r'|\psi_1\rangle - t'\sqrt{N-1}|1,0\rangle - (N-2)t'|\psi_1\rangle = -t'\sqrt{N-1}|1,0\rangle - r'|\psi_1\rangle \quad (18)$$

$$U|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{(N-1)(N-2)}} \sum_{j=2}^N \sum_{\substack{k=2 \\ k \neq j}}^N U|j,k\rangle = \frac{1}{\sqrt{(N-1)(N-2)}} \left( -\sum_{j=2}^N \sum_{\substack{k=2 \\ k \neq j}}^N |k,j\rangle + (N-2)t \left( \sum_{k=2}^N |k,1\rangle + \sum_{k=2}^N \sum_{\substack{l=2 \\ l \neq k}}^N |k,l\rangle \right) \right) = -|\psi_3\rangle + t\sqrt{N-2}|\psi_2\rangle + (N-2)t|\psi_3\rangle = t\sqrt{N-2}|\psi_2\rangle + r|\psi_3\rangle \quad (19)$$

**定义 2**(不变子空间<sup>[19]</sup>) 若  $T$  表示线性空间  $V$  的线性变换,  $V_1$  表示  $V$  的子空间, 且对于任意一个  $x \in V_1$ , 都有  $Tx \in V_1$ , 则称  $V_1$  为  $T$  的不变子空间.

由前面的演算结果可见,  $\{|0,1\rangle, |1,0\rangle, |\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle\}$  张成的空间  $S$  为酉算子  $U$  作用下的不变子空间. 如果行走的初始状态  $|\psi_{\text{init}}\rangle$  在  $S$  中, 则整个行走过程都在  $S$  中. 鉴于完全图的高度对称性, 为方便分析算法, 将  $N(N-1)$  维的 Hilbert 空间投影到 5 维 Hilbert 空间. 按照  $S$  中基的定义顺序, 酉算子  $U$  在  $S$  中的作用  $U_S$  表示为

$\lambda = -1$  是方程的一个根, 而式(21)中的系数与  $N$  有关, 无法求出确定的解. 为了求解其他根, 需要对其中的四阶多项式使用微扰理论. 微扰理论从一个相关简单问题的精确解入手, 通过加入一个微扰项到这个精确解上, 寻找无法精确求解的复杂问题的近似解.

令  $N \rightarrow \infty$ , 四阶多项式近似为

$$\lambda^4 - 2\lambda^3 + 2\lambda^2 - 2\lambda + 1 = 0 \quad (22)$$

即

$$(\lambda-1)^2(\lambda^2+1) = 0 \quad (23)$$

其精确解分别为  $1, i, -i$ . 取其中的二重根  $\lambda_0 = 1$  进行修正, 令  $\lambda = 1 + \Delta$ , 并代入四阶多项式中, 得

$$\Delta^4 + \frac{2N}{N-1}\Delta^3 + \frac{2(N^2+2N-2)}{N(N-1)}\Delta^2 + \frac{8}{N}\Delta + \frac{4}{N} = 0 \quad (24)$$

去掉其中的高阶项,求解二次方程,可得  $\Delta = \pm i\sqrt{2/N} + O(1/N)$ , 故酉算子  $U_S$  的特征值为  $\lambda_{\pm} = 1 \pm i\sqrt{2/N} + O(1/N)$ , 2个特征值对应的特征向量分别为

$$|v_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} & 1 \end{bmatrix}^T + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) \quad (25)$$

$$|v_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 1 \end{bmatrix}^T + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) \quad (26)$$

行走的初态为完全图中所有状态的均匀叠加态,即

$$|\psi_{\text{init}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N(N-1)}} \sum_{j=1}^N \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^N |j, k\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{N(N-1)}} (\sqrt{N-1} |\psi_1\rangle + \sqrt{N-1} |\psi_2\rangle + \sqrt{(N-1)(N-2)} |\psi_3\rangle) \cong \frac{1}{\sqrt{2}} (|v_+\rangle + |v_-\rangle) + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) \quad (27)$$

由于  $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ , 当  $\theta \rightarrow 0$  时,  $e^{i\theta} \cong 1 + i\theta$ , 故令  $\lambda_{\pm} = 1 \pm i\sqrt{2/N} + O(1/N) \cong e^{\pm i\theta}$ , 其中  $\theta \cong \sqrt{2/N}$ . 则行走  $n$  步后,系统的状态

$$|\psi_{\text{final}}\rangle = U_S^n |\psi_{\text{init}}\rangle \cong \frac{1}{\sqrt{2}} (\lambda_+^n |v_+\rangle + \lambda_-^n |v_-\rangle) + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) \cong \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{in\theta} |v_+\rangle + e^{-in\theta} |v_-\rangle) + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -\frac{i}{\sqrt{2}}(e^{in\theta} - e^{-in\theta}) \\ \frac{i}{\sqrt{2}}(e^{in\theta} - e^{-in\theta}) \\ e^{in\theta} + e^{-in\theta} \end{bmatrix} + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \sin n\theta \\ -\sin n\theta \\ \sqrt{2} \cos n\theta \end{bmatrix} + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) \quad (28)$$

可见,当  $n\theta = \pi/2$  时,  $|\psi_{\text{final}}\rangle$  中  $|0, 1\rangle, |1, 0\rangle,$

$|\psi_3\rangle$  对应的概率幅均接近于 0, 因此行走  $n = O(\sqrt{N})$  步后,粒子将以概率  $1 - O(1/\sqrt{N})$  处于  $|\psi_1\rangle$  或  $|\psi_2\rangle$  状态,即位于与异常顶点相连的边上. 由此可知,只需重复上述搜索过程有限次数,即可确定异常顶点,故采用散射量子行走搜索该结构异常所需的时间复杂度为  $O(\sqrt{N})$ .

## 4 仿真及分析

### 4.1 Matlab 仿真

使用 Matlab 程序模拟散射量子行走搜索过程,利用  $(N+1) \times (N+1)$  维矩阵记录粒子状态中各基态的概率幅,以表示粒子当前状态. 在行走过程中,按照行走酉算子  $U$  的作用,根据前一步的状态矩阵计算行走一步后新的概率幅矩阵,依此类推. 在每一步行走后,计算粒子处于  $|\psi_1\rangle$  或  $|\psi_2\rangle$  状态,即位于与异常顶点相连的边上的概率. 在顶点个数  $N=100$  的完全图中,粒子位于异常顶点相连的边上的概率与行走步数的关系如图 2 所示.

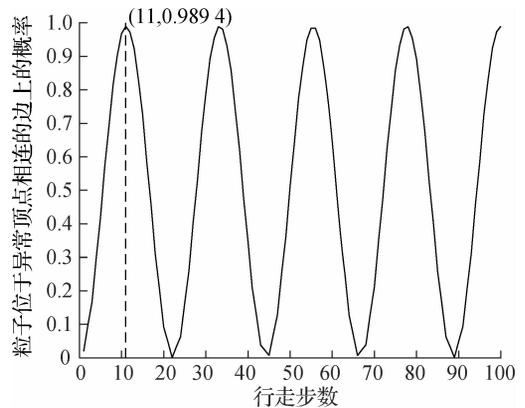


图2  $N=100$  时搜索成功概率

由图 2 可知,行走 10 步后,粒子位于与异常顶点相连的边上的概率为 0.967 8;行走 11 步后,此概率达到极大值 0.989 4. 即行走  $O(\sqrt{N})$  步后,粒子将以较大概率位于与异常顶点相连的边上,而且此概率呈现周期性变化,周期长度约为  $2\sqrt{N}$ .

图 2 中,  $N=100$  的完全图上行走 11 步后进行测量,搜索到的结果最好. 在  $N=4, 9, 16, 25, \dots, 400$  的完全图中重复实验,找出使成功概率达到极大值所需的步数,该步数即为实验的最佳行走步数. 完全图顶点个数与最佳行走步数的关系见图 3.

由图 3 可知,完全图顶点个数与最佳行走步数的关系大致符合函数  $y = \sqrt{x}$ . 因此,为使粒子位于与异常顶点相连的边上的概率达到极大值,最佳行

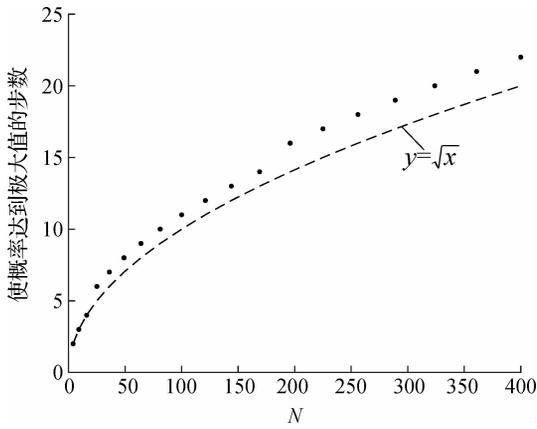


图 3 完全图顶点个数与最佳行走步数的关系

行走步数为  $O(\sqrt{N})$ . 对于顶点个数为  $N$  的完全图, 行走  $\sqrt{N}$  步后进行测量, 成功概率见表 1.

表 1 行走  $\sqrt{N}$  步后测量的成功概率

$N$	行走步数	成功概率	$N$	行走步数	成功概率
4	2	0.625 0	144	12	0.970 3
9	3	0.811 5	169	13	0.969 3
16	4	0.917 4	196	14	0.971 8
25	5	0.929 9	225	15	0.970 9
36	6	0.952 6	256	16	0.972 7
49	7	0.952 7	289	17	0.971 9
64	8	0.963 2	324	18	0.973 3
81	9	0.962 1	361	19	0.972 6
100	10	0.967 8	400	20	0.973 8
121	11	0.966 6			

上述算法理论分析结果表明, 行走  $\sqrt{N}$  步后, 粒子将以概率  $1 - O(1/\sqrt{N})$  位于与异常顶点相连的边上, 此概率随  $N$  增加而增大. 分析表 1 中的数据可得相同结论: 当完全图顶点个数  $N$  较小时, 成功概率与 1 差距较大; 当完全图顶点个数  $N$  较大时, 行走  $\sqrt{N}$  步后进行测量, 成功概率均大于 95%.

综上可知, 使用散射量子行走搜索该异常结构的时间复杂度为  $O(\sqrt{N})$ .

#### 4.2 经典算法分析

在经典算法中, 通常采用邻接矩阵来表示图的结构. 以图 1 中  $N = 5$  的完全图为例, 其邻接矩阵的表格示意图如表 2 所示.

表 2  $N = 5$  时完全图异常的邻接矩阵表格示意图

行号	列号					
	0	1	2	3	4	5
0	0	1	0	0	0	0
1	1	0	1	1	1	1
2	0	1	0	1	1	1
3	0	1	1	0	1	1
4	0	1	1	1	0	1
5	0	1	1	1	1	0

为找出异常顶点, 仅需检测任意一顶点, 扫描邻接矩阵中该顶点对应的行, 统计该行中出现 0 和 1 的次数. 结果存在如下 3 种情况: ① 1 出现了 1 次, 表明此顶点只与 1 个顶点相连, 则此顶点必然是额外顶点, 而与其相连的顶点必然是异常顶点. ② 0 出现了 1 次, 表明此顶点与其他所有顶点都相连, 则此顶点必然是异常顶点. ③ 0 出现了 2 次, 表明此顶点是正常顶点. 其中一次 0 表示该顶点与自己不通, 另一次则表示该顶点与悬挂点未连接, 因此可根据此次 0 对应的列找出悬挂点, 然后扫描该悬挂点对应的行即可找出异常顶点.

根据上述分析可知, 在经典算法中, 扫描邻接矩阵中的任意一行, 都可以在  $O(N)$  的时间复杂度内找到异常顶点.

### 5 结语

在计算机程序设计领域, 量子随机行走的理论研究及其在搜索算法中的应用还在初期阶段. 这类算法的理论设计与数学解析必须服从量子力学演算框架, 需要一定的量子计算与矩阵分析的理论支持, 其中酉算子 (刻画量子系统演化的酉矩阵) 分析是难点之一. 基于量子计算刻画任何图和结构都可以简单地写出相应的初始状态、状态空间和酉演化算子, 但随着行走的进行, 寻找有效的方法去分析就越困难. 因此, 目前的研究对象多数只局限于特殊结构的图 (包括完全图、完全二分图等高度对称的图形), 以便于分析和探索融入量子计算思维的算法构造.

本文针对完全图中加入一个悬挂点时使用散射量子行走搜索该结构异常的问题进行了研究. 通过构建酉算子, 采用不变子空间及微扰理论的概念完成了算法设计的理论与仿真的实践研究. 数学解析和仿真实验结果均可证明, 关于此类问题的量子算法的时间复杂度为  $O(\sqrt{N})$ . 经典算法 (使用邻接矩阵案例) 中解决此问题的时间复杂度为  $O(N)$ . 因此, 针对此问题的邻接矩阵经典算法, 本文算法可以实现二次加速.

### 参考文献 (References)

[1] Toyama F M, van Dijk W, Nogami Y. Quantum search with certainty based on modified Grover algorithms; Optimum choice of parameters [J]. *Quantum Information Processing*, 2012, 12(5): 1897 - 1914. DOI:10.1007/s11128-012-0498-0.

[2] Liu Y, Zhang F. First experimental demonstration of an exact quantum search algorithm in nuclear magnetic resonance system [J]. *Science China Physics, Mechanics*

- & *Astronomy*, 2015, **58**(7): 1 - 6. DOI: 10.1007/s11433-015-5661-z.
- [3] Long G L. Grover algorithm with zero theoretical failure rate[J]. *Physical Review A*, 2001, **64**(2). DOI: 10.1103/physreva.64.022307.
- [4] Long G, Liu Y. Search an unsorted database with quantum mechanics[J]. *Frontiers of Computer Science in China*, 2007, **1**(3): 247 - 271. DOI: 10.1007/s11704-007-0026-z.
- [5] Kempe J. Quantum random walks: An introductory overview[J]. *Contemporary Physics*, 2009, **50**(1): 339 - 359. DOI: 10.1080/00107510902734722.
- [6] Aharonov Y, Davidovich L, Zagury N. Quantum random walks[J]. *Physical Review A*, 1993, **48**(2): 1687 - 1690. DOI: 10.1103/physreva.48.1687.
- [7] Shenvi N, Kempe J, Whaley K B. Quantum random-walk search algorithm[J]. *Physical Review A*, 2003, **67**(5). DOI: 10.1103/physreva.67.052307.
- [8] Childs A M. Universal computation by quantum walk[J]. *Phys Rev Lett*, 2009, **102**(18): 180501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.102.180501.
- [9] Lovett N B, Cooper S, Everitt M, et al. Universal quantum computation using the discrete-time quantum walk[J]. *Physical Review A*, 2010, **81**(4): 042330. DOI: 10.1103/physreva.81.042330.
- [10] Ambainis A, Bach E, Nayak A, et al. One-dimensional quantum walks [C]//*Proceedings of the Thirty-Third Annual ACM Symposium on Theory of Computing*. Heraklion, Greece, 2001: 37 - 49. DOI: 10.1145/380752.380757.
- [11] Aharonov D, Ambainis A, Kempe J, et al. Quantum walks on graphs [C]//*Proceedings of the Thirty-Third Annual ACM Symposium on Theory of Computing*. Heraklion, Greece, 2001: 50 - 59. DOI: 10.1145/380752.380758.
- [12] Childs A M, Farhi E, Gutmann S. An example of the difference between quantum and classical random walks [J]. *Quantum Information Processing*, 2002, **1**(1/2): 35 - 43. DOI: https://doi.org/10.1023/A:1019609420309.
- [13] Ambainis A, Kempe J, Rivosh A. Coins make quantum walks faster [C]//*Proceedings of the sixteenth annual ACM-SIAM symposium on discrete algorithms*. Philadelphia, USA, 2005: 1099 - 1108.
- [14] Hillery M, Bergou J, Feldman E. Quantum walks based on an interferometric analogy [J]. *Physical Review A*, 2003, **68**(3): 032314. DOI: 10.1103/physreva.68.032314.
- [15] Andrade F M, da Luz M G E. Equivalence between discrete quantum walk models in arbitrary topologies [J]. *Physical Review A*, 2009, **80**(5): 052301. DOI: 10.1103/physreva.80.052301.
- [16] 刘艳梅, 陈汉武, 刘志昊, 等. 星图上的散射量子行走搜索算法[J]. *物理学报*, 2015, **64**(1): 010301. DOI: 10.7498/aps.64.010301.  
Liu Yanmei, Chen Hanwu, Liu Zhihao, et al. Scattering quantum walk search algorithm on star graph[J]. *Acta Physica Sinica*, 2015, **64**(1): 010301. DOI: 10.7498/aps.64.010301. (in Chinese)
- [17] Childs A M. On the relationship between continuous- and discrete-time quantum walk [J]. *Communications in Mathematical Physics*, 2010, **294**(2): 581 - 603. DOI: 10.1007/s00220-009-0930-1.
- [18] Kempe J. Discrete quantum walks hit exponentially faster [J]. *Probability Theory and Related Fields*, 2005, **133**(2): 215 - 235. DOI: 10.1007/s00440-004-0423-2.
- [19] Travaglione B C, Milburn G J. Implementing the quantum random walk[J]. *Physical Review A*, 2002, **65**(3). DOI: 10.1103/physreva.65.032310.
- [20] Wang C, Li Y, Hao L. Optical implementation of quantum random walks using weak cross-Kerr media [J]. *Chinese Science Bulletin*, 2011, **56**(20): 2088 - 2091. DOI: 10.1007/s11434-011-4545-5.
- [21] Xue P, Zhang R, Qin H, et al. Experimental quantum-walk revival with a time-dependent coin [J]. *Physical Review Letters*, 2015, **114**(14): 140502. DOI: 10.1103/PhysRevLett.114.140502.
- [22] Ambainis A. Quantum walk algorithm for element distinctness [J]. *SIAM Journal on Computing*, 2007, **37**(1): 210 - 239. DOI: 10.1137/s0097539705447311.
- [23] Childs A M, Eisenberg J M. Quantum algorithms for subset finding [J]. *Quantum Information & Computation*, 2003, **5**(7): 593 - 604.
- [24] Wang H, Ma Z, Ma C. An efficient quantum meet-in-the-middle attack against NTRU-2005 [J]. *Chinese Science Bulletin*, 2013, **58**(28): 3514 - 3518. DOI: 10.1007/s11434-013-6020-y.
- [25] Lee J, Lee H W, Hillery M. Searches on star graphs and equivalent oracle problems [J]. *Physical Review A*, 2011, **83**(2): 022318. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevA.83.022318.
- [26] Potoček V, Gábris A, Kiss T, et al. Optimized quantum random-walk search algorithms on the hypercube [J]. *Physical Review A*, 2009, **79**(1): 012325. DOI: 10.1103/physreva.79.012325.
- [27] Reitzner D, Hillery M, Feldman E, et al. Quantum searches on highly symmetric graphs [J]. *Physical Review A*, 2009, **79**(1): 012323. DOI: 10.1103/physreva.79.012323.
- [28] Feldman E, Hillery M, Lee H W, et al. Finding structural anomalies in graphs by means of quantum walks [J]. *Physical Review A*, 2010, **82**(4): 83 - 79. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevA.82.040301.
- [29] Hillery M, Zheng H, Feldman E, et al. Quantum walks as a probe of structural anomalies in graphs [J]. *Physical Review A*, 2012, **85**(6): 062325. DOI: 10.1103/physreva.85.062325.
- [30] Cottrell S, Hillery M. Finding structural anomalies in star graphs using quantum walks [J]. *Phys Rev Lett*, 2014, **112**(3): 030501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.112.030501.
- [31] 薛希玲, 李文骞, 陈汉武, 等. 基于 Grover 硬币算子的量子行走在商图上的演化算子 [J]. *电子学报*, 2016, **44**(3): 555 - 559. DOI: 10.3969/j.issn.0372-2112.2016.03.009.  
Xue Xiling, Li Wenqian, Chen Hanwu, et al. The evolutionary operator of quantum walks with Grover coin on quotient graph [J]. 2016, **44**(3): 555 - 559. DOI: 10.3969/j.issn.0372-2112.2016.03.009. (in Chinese)