

## 激光与光电子学进展

## 量子行走波-粒相干叠加

李硕, 张融\*

南京邮电大学电子与光学工程学院、柔性电子(未来技术)学院, 江苏 南京 210023

**摘要** 通过理论计算与量子计算模拟机模拟两种方法研究了波-粒量子行走的演化过程与性质。通过量子控制操作使量子行走中的行走者处于相对相位的波-粒相干叠加态。利用后选择操作实现了量子行走以相干和混合两种不同方式, 从多路径相干的波的状态到无相干的粒子的状态的连续调控。由于量子的干涉性, 相干和混合两种方式存在本质的区别, 通过位置方差对两种方式的具体特征进行刻画。最后通过量子计算模拟机模拟了波-粒量子行走的演化过程。当行走者处于波-粒相干态时, 通过一次测量能够同时观测到两个完全不同的性质。通过调节波-粒相干态的相对相位, 可以实现对行走者扩散速率的控制。

**关键词** 量子行走; 相干叠加态; 量子调控; 量子模拟

中图分类号 O413.1

文献标志码 A

DOI: 10.3788/LOP231007

## Quantum Walk Wave-Particle Coherent Superposition

Li Shuo, Zhang Rong\*

College of Electronic and Optical Engineering & College of Flexible Electronics (Future Technology),  
Nanjing University of Posts and Telecommunications, Nanjing 210023, Jiangsu, China

**Abstract** Evolution process and properties of wave-particle quantum walk (QW) are studied by theoretical calculation and quantum simulator's simulation. Quantum control can contribute to the realization of QWs in quantum wave-particle superposition state with a relative phase between walkers. The post-selection operation is used to realize the continuous transitions of QW from the state of waves with multi-path coherence to the state of particles without coherence in two different ways: coherence and mixing. Due to quantum interference, there are essential differences between coherence and mixing, and their specific features are characterized by position variance. We also demonstrate the coherent wave-particle QWs in the real quantum simulator. When the walker is in the wave-particle coherent state, two completely different properties can be observed simultaneously through one measurement. By adjusting the relative phase in the wave-particle coherent state, the diffusion rate of the walker can be controlled.

**Key words** quantum walk; coherent superposition state; quantum control; quantum simulation

## 1 引言

量子行走(QW)是经典随机行走在量子世界的对应产物, 而经典随机行走是计算科学中很多算法的基础<sup>[1-2]</sup>。量子行走与经典随机行走的性质有很大的不同, 相干叠加和量子干涉导致基于量子行走设计的算法比经典随机行走算法拥有更好的性能和更高的效率<sup>[3-6]</sup>。此外, 基于量子行走能够实现量子信息任务<sup>[7-8]</sup>, 它通过精确调控的量子行走演化实现量子态的制备<sup>[9-10]</sup>、传输<sup>[11]</sup>和测量<sup>[12]</sup>。量子行走还能研究复杂现象及模拟提供平台<sup>[13-15]</sup>。

量子行走和经典随机行走本质的差别在于微观粒子的基本属性与宏观物体完全不同。大量研究结果表明, 微观粒子能够同时表现出不同的甚至是相互矛盾的性质, 即波动性和粒子性<sup>[16-17]</sup>。波动性指微观粒子具有量子相干性, 粒子性则指其没有量子相干性。这里给出的“波”和“粒”的定义具有可操作性, 即可以通过观测到的不同实验现象区分微观粒子的不同属性。比如, 大量实验研究结果显示, 光子可以处于波动、粒子及中间状态, 并且光的不同状态能通过后选择操作进行调控。将“波”和“粒”的定义引入分立时间量子行走模型中, 波动行走指微观粒子的所有可能路径具有

收稿日期: 2023-04-03; 修回日期: 2023-05-06; 录用日期: 2023-05-16; 网络首发日期: 2023-05-26

通信作者: \*zhangr\_nj@163.com

量子相干性,即前一步的路径与相位信息对后一步有影响,整个演化过程被初始状态所影响,最终行走者的位置分布呈现非高斯分布,波动行走与标准量子行走的性质是一样的。而粒子行走中由于所有量子相干性都被擦除,经过  $t$  步演化后,所有可能路径的相干性都被彻底消除,完全的消相干使行走者的位置分布呈现与经典随机行走分布相同的高斯分布,因此其表现出的性质与经典随机行走的性质相同,故定义粒子行走为经典随机行走<sup>[18]</sup>。微观粒子能够同时表现出波动性和粒子性,量子行走能否同时表现出波动行走和粒子行走的性质呢?已有的很多研究工作探讨的都是通过消相干、测量等操作实现量子行走(有相干)到经典行走(无相干)的调控,这类调控使两种不同性质的行走处于混合状态,并且少量的消相干操作能有效提高量子算法的性能<sup>[19-22]</sup>。然而,迄今为止人们没有讨论波动行走和粒子行走的相干叠加情形。本文通过引入量子调控,不仅能实现混合波-粒量子行走,还能得到波-粒相干量子行走,即以相干叠加的方式同时实现有(无)多路径的两种状态的连续调控。

本文重点讨论波-粒量子行走的相干叠加性,通过量子控制操作使量子行走可以同时遍历波动和粒子的动力学过程。再对辅助比特实施不同操作,从而用相干和混合两种不同的方式实现波动行走和粒子行走之间的连续调控。其中波动行走和粒子行走的相干叠加形式定义为相干的波-粒量子行走。由于量子干涉,相干波-粒量子行走和混合的性质有差别。随后分别介绍波-粒量子行走的动力学演化过程、硬币-行走者的状态、波-粒量子行走的性质,并在量子计算模拟机上演示波-粒行走。

## 2 相干波-粒量子行走的演化

本研究主要讨论一维线上波-粒量子行走。首先简单回顾标准量子行走的定义和性质,在此基础上定义波-粒量子行走。一维量子行走是包含量子硬币和行走者的复合系统。其中硬币是二维系统,用  $|L\rangle$  ( $|R\rangle$ ) 分别表示行走者向左(右)的行走方向。行走者的位置用整数表示为  $|x\rangle, x \in \mathbf{Z}$ 。整个系统的演化包括两个步骤:首先是硬币操作,随后是条件行走操作。整个演化过程表示为

$$\hat{U}_t^w = \hat{S}_t [\hat{H}_1 \otimes \hat{I}], \quad (1)$$

式中:  $\hat{I}$  是作用于行走者的单位操作;硬币操作用 Hadamard 算符表示为

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}; \quad (2)$$

条件行走算符  $\hat{S}_1$  使得行走者根据硬币状态  $|L\rangle$  ( $|R\rangle$ ) 向左(向右)行走,具体表示为

$$\hat{S}_1 = \sum_x |L\rangle \langle L| \otimes |x-1\rangle \langle x| + |R\rangle \langle R| \otimes |x+1\rangle \langle x|. \quad (3)$$

一维线上的标准量子行走通过重复幺正操作  $\hat{U}_t^w$  实现。整个演化过程被初始状态所影响,初始状态的不同会导致位置分布不一样,这主要是因为前一步的路径与相位信息对后一步有影响。整个演化过程的多路径量子相干性被一直保留,使得最终行走者的位置分布呈现非高斯分布(中间概率低于远离原点处的概率),并且行走者的扩散速率对比经典随机行走呈二次提速。标准量子行走的演化过程由于存在相干性,和波动的动力学过程相似,人们通常又把它称为波动量子行走。波动量子行走可以用量子线路图表示,量子线路是由针对量子数据(如量子比特)的相关量子操作和并发实时经典计算组成的计算程序,由量子门、测量和重置构成。图 1(a) 是波动量子行走一步行走的线路图,最底端的一条线表示和硬币对应的量子比特,其余的量子比特表示行走者的高维位置空间,  $H$  为 Hadamard 门。条件行走操作通过控制-幺正演化实现,其中向右(左)的行走操作通过广义控制非操作(反控制非操作)实现<sup>[23]</sup>,如图 1(b) 所示。

如果每次抛掷的硬币都换一枚新的硬币,则初始硬币状态对系统后续演化没有任何影响,新的硬币完全消除了路径之间的相位信息以及硬币初态对后续演化的影响,因此这种情形在消相干的作用效果方面等价于每次行走后都对硬币态进行测量的行走。每次使用新硬币的量子行走的演化过程通过与演化时间相关的幺正演化操作表示,即

$$\hat{U}^p = \hat{U}_1^p \dots \hat{U}_3^p \hat{U}_2^p \hat{U}_1^p, \quad (4)$$

其中每一步的演化操作表示为

$$\hat{U}_t^p = \hat{S}_t (\hat{H}_t \otimes \hat{I}), \quad (5)$$

式中:  $\hat{H}_t$  表示作用在第  $t$  枚硬币上的 Hadamard 操作;  $\hat{S}_t$  是保持其他硬币态不变,根据第  $t$  枚硬币的状态进行条件行走的操作,具体表示为

$$\hat{S}_t = \sum_x |L\rangle \langle L| \otimes |x-1\rangle \langle x| + |R\rangle \langle R| \otimes |x+1\rangle \langle x|. \quad (6)$$

经过  $t$  步演化后,所有可能路径的相干性都被新的硬币彻底消除,完全的消相干使得行走者的位置分布呈现与经典随机行走分布相同的高斯分布。因此,这种情况下微观粒子的演化过程是没有相干性的粒子态演化,通常称为粒子量子行走。用量子线路表示粒子量子行走,图 1(c) 是使用了三个不同硬币操作  $\hat{H}_{1(2,3)}$  的三步演化。

通过引入辅助比特与硬币-行走者系统相互关联实现量子操控,整个系统与时间相关的演化过程为

$$\hat{U}_t = |0\rangle \langle 0| \otimes \hat{U}_t^w + |1\rangle \langle 1| \otimes \hat{U}_t^p. \quad (7)$$

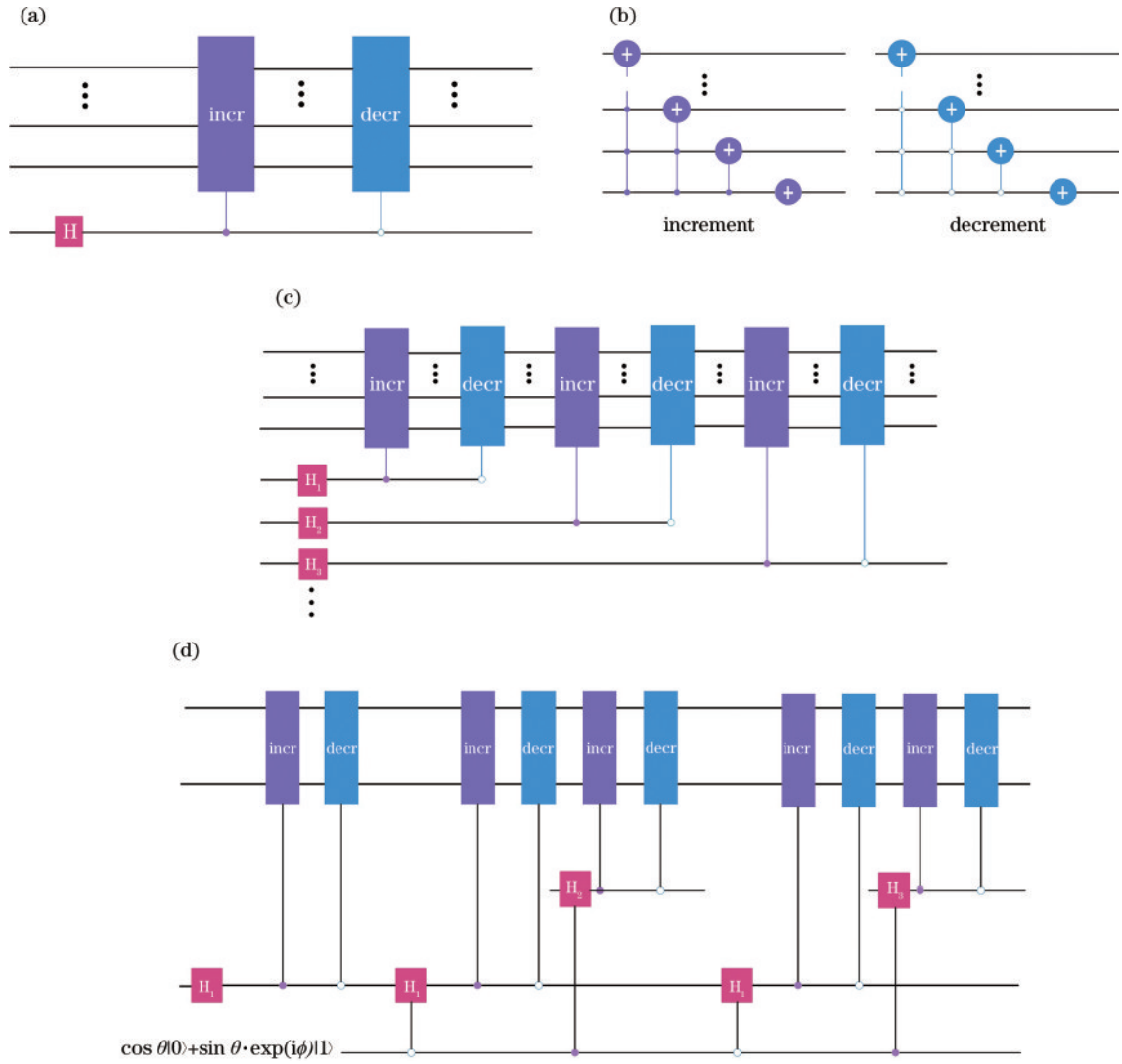


图1 量子行走线路图。(a)波动量子行走;(b)向左和向右的条件行走操作;(c)粒子量子行走;(d)波-粒量子行走  
 Fig. 1 Quantum walk circuit diagrams. (a) Wave quantum walk; (b) a left and right conditional walking operation; (c) particle quantum walk; (d) wave-particle quantum walk

式(7)表示:当辅助比特处于量子态 $|0\rangle$ 时,始终使用同一枚硬币,行走者将处于波动量子行走的演化过程;若辅助比特处于 $|1\rangle$ 态,每一步都用新的硬币,行走者将处于粒子量子行走的演化过程;如果初始辅助比特处于任意的相干叠加态 $|\varphi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ ,其中  $a = \cos \theta, b = \sin \theta \cdot \exp(i\phi)$ ,且  $\theta \in [0, \pi/2], \phi \in [0, 2\pi)$ ,行走者将同时处于波动和粒子的量子行走演化过程,具体演化线路如图 1(d)所示。量子操控不仅能使行走者处于两种完全不同的演化过程,还能使人们通过对辅助比特的不同操作选择行走者的状态,即使行走者演化后的状态已经被测量。

假设行走者处于原点 $|x=0\rangle$ ,硬币处于向左和向右状态的叠加态 $(\alpha|\mathbf{R}\rangle + \beta|\mathbf{L}\rangle, |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1)$ ,整个系统包括辅助比特的状态为

$$\Psi(0) = (a|0\rangle + b|1\rangle) \otimes (\alpha|\mathbf{R}\rangle + \beta|\mathbf{L}\rangle) \otimes |0\rangle. \quad (8)$$

由式(8)可以得出经过  $t$  步演化后,整个系统的状态为

$$\Psi(t) = a|0\rangle|\psi\rangle^w + b|1\rangle|\psi\rangle^p, \quad (9)$$

式中,  $|\psi\rangle^w, |\psi\rangle^p$  是波动、粒子行走的波函数,可以通过组合计算方法得出。粒子行走中由于没有多路径相干,路径之间没有相对相位,通过对所有导致行走者处于位置  $x$  的路径几率幅直接相加,可以得到  $|\psi\rangle^p$  的表达式为

$$|\psi\rangle^p = \frac{1}{2^{t/2}} \sum_x \left[ (\alpha + \beta)^{N_L} (\alpha - \beta)^{N_R} \sum_{n=1}^h |\psi_n\rangle |x\rangle \right], \quad (10)$$

式中:  $N_L = (t-x)/2$  指向左行走的次数;  $N_R = (t+x)/2$  指向右行走的次数;  $h$  是所有导致行走者处于位置  $x$  的路径个数,通过组合方法计算得到  $h = \binom{t}{N_R} = \frac{t!}{N_R!(t-N_R)!}$ ;  $|\psi_n\rangle$  是对应位置态  $|x\rangle$  的所有可能的硬币态。波动量子行走中只使用一枚硬币,其

他硬币状态保持初始状态不变,其波函数 $|\psi\rangle^W$ 具体表示为

$$|\psi\rangle^W = \sum_x [g_R(x, t)|\mathbf{R}\rangle + g_L(x, t)|\mathbf{L}\rangle]_{c_1} \otimes (\alpha|\mathbf{R}\rangle + \beta|\mathbf{L}\rangle)_{c_2} \otimes \dots \otimes (\alpha|\mathbf{R}\rangle + \beta|\mathbf{L}\rangle)_{c_t} \otimes |x\rangle, \quad (11)$$

式中:下标 $c_t$ 指第 $t$ 枚硬币状态,第1枚硬币的状态为 $g_R(x, t)|\mathbf{R}\rangle + g_L(x, t)|\mathbf{L}\rangle$ ,剩余 $(t-1)$ 枚硬币的状态均为 $\alpha|\mathbf{R}\rangle + \beta|\mathbf{L}\rangle$ ;系数 $g_R(x, t) = \alpha p_L(x, t) + \beta q_L(x, t)$ ,  $g_L(x, t) = \alpha p_R(x, t) + \beta q_R(x, t)$ , 其中

$$p_L(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2^t}} \left[ \sum_{m=1}^N (-1)^{N_L-m} \binom{N_R}{m-1} \right], \quad p_R(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2^t}} \left[ \sum_{m=1}^N (-1)^{N_L-m} \binom{N_R}{m} \right],$$

$$q_L(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2^t}} \left[ (-1)^{N_L-m} \cdot \binom{N_R}{m-1} \frac{N_R - 2m + 2}{N_R} \right], \quad q_R(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2^t}} \left[ \sum_{m=1}^N (-1)^{N_L-m} \cdot \binom{N_R}{m} \frac{N_R - 2m}{N_R} \right].$$

对于 $x \leq 0$ 的情形,求和操作从1到 $N = N_L$ ;而当 $x > 0$ 时,求和操作从1到 $N = N_R + 1$ 。式(10)和式(11)表明: $|\psi\rangle^P$ 中的全部硬币都与行走者关联并且路径相干性被完全消除,其位置概率分布为高斯分布;而 $|\psi\rangle^W$ 中与行走者关联的只有一枚硬币,在这种情形下位置状态存在相对相位,经过 $t$ 步演化后,硬币-行走者状态一共有 $2^t$ 个,其波函数的几率幅 $\pm 1/\sqrt{2}$ 会导致多路径的相干现象。

将辅助比特进行不同操作,就可以分别得到波动和粒子状态的叠加与混合态。系统演化之后,如果将硬币态投影到 $|0\rangle$ 态上,就会得到多路径相干的波动量子态;如果投影到 $|1\rangle$ 态上,就会得到没有相干性的粒子态;如果将硬币状态投影到 $|+\rangle = 1/\sqrt{2}(|0\rangle + |1\rangle)$ ,就可以得到经典世界无法实现的波和粒子的相干叠加态:

$$\Phi = a|\psi\rangle^W + b|\psi\rangle^P. \quad (12)$$

另一方面,假设对辅助比特求迹,即不考虑辅助比特与硬币-行走者的关联,得到波动和粒子的混合态:

$$\rho = |a|^2 |\psi\rangle^W \langle\psi|^W + |b|^2 |\psi\rangle^P \langle\psi|^P. \quad (13)$$

由于量子测量的顺序不改变最后的结果,因此可以在系统演化后通过对辅助比特的不同操作将行走者制备到不同的量子态上。也就是说这一装置可以通过对辅助比特进行不同操作后选择硬币-行走者波动、粒子以及中间态,并且中间状态包含相干叠加和混合两种不同的形式。

上述计算表明,引入量子调控能够将硬币-行走者制备到波动、粒子以及中间态,并且中间状态可以是相干叠加和混合两种不同的形式。这些不同状态可以通过位置分布和方差进行定量描述。已有的文献中已经给出了标准量子行走和经典随机行走的位置分布计算结果。接下来分别计算相干叠加和混合的波-粒行走的位置分布,并在此基础上进一步算出位置方差。

根据波-粒相干叠加量子行走的演化量子态,对每一个位置求模方,得到 $x = t$ 处的概率为

$$P_c(t, t) = \frac{1}{N} \left[ \left| ag_R(t, t) \alpha^{t-1} + b \left( \frac{\alpha + \beta}{\sqrt{2}} \right)^t \right|^2 + |a|^2 |g_R(t, t)|^2 |\alpha|^{2(t-1)} (2^{t-1} - 1) \right], \quad (14)$$

$x = -t$ 处的概率为

$$P_c(-t, t) = \frac{1}{N} \left[ \left| ag_L(-t, t) \beta^{t-1} + b \left( \frac{\alpha - \beta}{\sqrt{2}} \right)^t \right|^2 + |a|^2 |g_L(-t, t)|^2 |\alpha|^{2(t-1)} (2^{t-1} - 1) \right], \quad (15)$$

其他位置 $x = -t + 2, \dots, t - 2$ 处的概率为

$$P_c(x, t) = \frac{1}{N} \left[ \binom{t-1}{N_R+1} \left| ag_R(x, t) \alpha^{N_R-1} \beta^{N_L} + \frac{1}{(\sqrt{2})^t} b(\alpha + \beta)^{N_R} (\alpha - \beta)^{N_L} \right|^2 + \binom{t-1}{N_L-1} \left| ag_L(x, t) \alpha^{N_R} \beta^{N_L-1} + \frac{1}{(\sqrt{2})^t} b(\alpha + \beta)^{N_R} (\alpha - \beta)^{N_L} \right|^2 + |a|^2 |g_R(x, t)|^2 (1/2)^{t-1} \left[ 2^{t-1} - \binom{t-1}{N_R-1} \right] \right], \quad (16)$$

式中, $N = \sum_x P(x, t)$ 。另一种混合态的情形中,每一个位置的概率是波动行走和粒子行走相应位置概率之和:

$$P_{\text{mix}}(x, t) = |a|^2 \left[ |g_L(x, t)|^2 + |g_R(x, t)|^2 \right] + |b|^2 \frac{S}{2^t} \left| (\alpha + \beta)^{N_R} (\alpha - \beta)^{N_L} \right|^2, \quad (17)$$

式中,  $s$  为任意未知数。

初始所有硬币状态处于  $(|R\rangle + i|L\rangle)/\sqrt{2}$ , 通过改变辅助比特参数  $\theta \in [0, \pi/2]$  可以实现从波动到粒子状态的连续调控 ( $\phi$  任意取值)。图 2 以  $\phi = 1.19\pi$  为例展示了 4 步演化后的几种行走。4 步演化后奇数位

置的概率为 0, 所以图 2 只展示了偶数位置的概率。从图 2(a) 可以明显看出: 当  $\theta = 0$  时, 位置分布与量子行走对应; 当  $\theta = \pi/2$  时, 位置分布对应于经典随机行走。图 2(b) 给出了当  $\theta \in (0, \pi/2)$  时, 系统处于波动和粒子行走的中间过程, 包括相干叠加和混合两种方式。

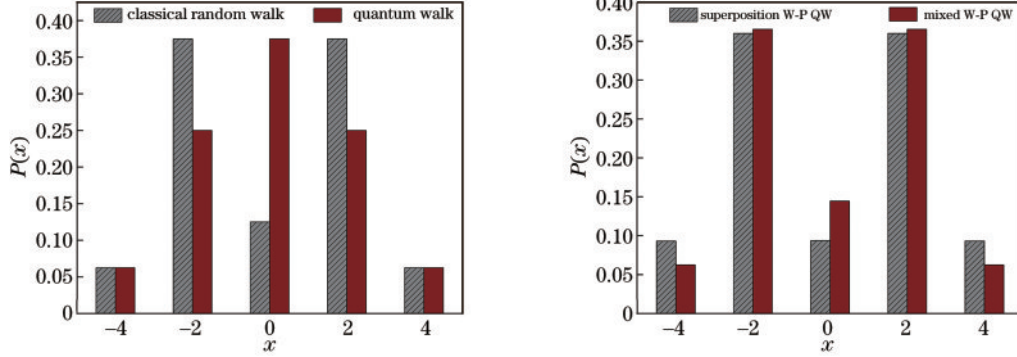


图 2 当  $\phi = 1.19\pi$  时, 4 步演化后偶数步位置理论计算的概率分布。(a) 当  $\theta = \pi/2$  时的经典随机行走及当  $\theta = 0$  时的量子行走; (b) 当  $\theta = 0.385\pi$  时的波-粒相干及波-粒混合

Fig. 2 Probability distribution calculated by even step position theory after 4-step evolution when  $\phi = 1.19\pi$ . (a) Classical random walk when  $\theta = \pi/2$  and quantum walk when  $\theta = 0$ ; (b) wave-particle coherent and wave-particle mixed when  $\theta = 0.385\pi$

行走者的扩散速率通过位置方差  $\nu = \sum_x P(x, t) |x - x_m|^2$ ,  $x_m = \sum_x P(x, t) x$  描述, 通过计算位置方差可进一步研究其性质。图 3 给出了相干波-粒量子行走与混合波-粒量子行走的位置方差随着演化步数的变化情况, 可以明显看出相干波-粒量子行走的扩散速率较混合波-粒量子行走更快。

通过图 4 可以看出在相干调控过程中, 辅助比特参数对位置方差的影响。首先固定  $\phi = 1.19\pi$ , 波-粒相干量子行走和混合波-粒量子行走 4 步演化后位置方差随  $\theta$  的变化趋势如图 4(a) 所示。当固定  $\theta = 0.385\pi$  时, 位置方差随相对相位  $\phi$  的变化情况如图 4(b) 所示。

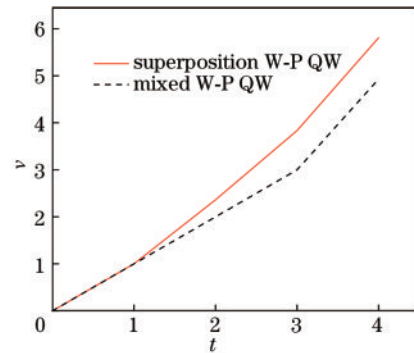


图 3 当  $\phi = 1.19\pi$ ,  $\theta = 0.385\pi$  时, 位置方差随理论计算步数  $t$  的变化情况

Fig. 3 Change of position variance with the theoretical calculation of step  $t$  when  $\phi = 1.19\pi$  and  $\theta = 0.385\pi$

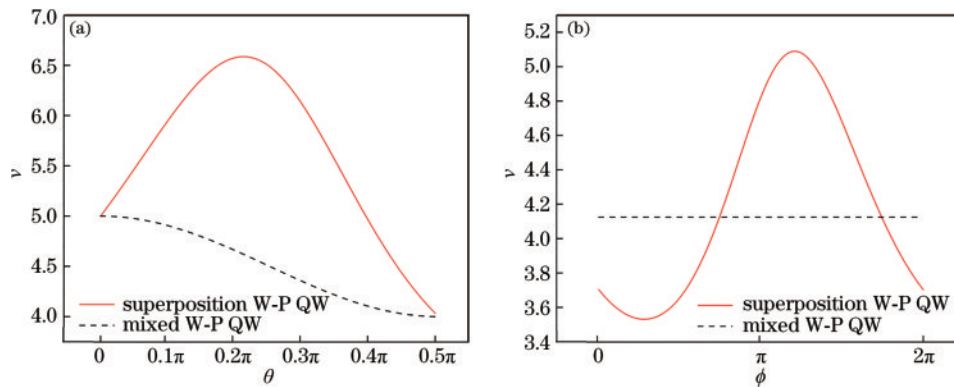


图 4 位置方差随理论计算的辅助比特参数的变化情况。(a) 当  $\phi = 1.19\pi$  时,  $\nu$  随  $\theta$  的变化情况; (b) 当  $\theta = 0.385\pi$  时,  $\nu$  随  $\phi$  的变化情况  
Fig. 4 Changes of position variance with the theoretical calculation of auxiliary bit parameters. (a) When  $\phi = 1.19\pi$ ,  $\nu$  changes with  $\theta$ ; (b) when  $\theta = 0.385\pi$ ,  $\nu$  changes with  $\phi$

### 3 通过量子模拟机展示波-粒量子行走的基本性质

在理论计算的同时,也在 IBM (International Business Machines Corporation) 计算模拟机上分别模拟了波动量子行走、粒子量子行走、相干叠加和混合的波-粒量子行走的位置分布,并在此基础上进一步计算了相干叠加和混合的波-粒量子行走的位置方差。

在经典计算机中,信息只能被表示为 0 或 1 的比特。量子计算机是一种基于量子力学的计算机,它利用量子比特来存储和处理信息,并且由于量子比特的存在,量子计算机可以使用 0 和 1 的叠加态<sup>[24]</sup>,其主要由量子比特、逻辑门和测量组成。波-粒量子行走的演化过程计算借助量子计算机 IBM Quantum 平台完成。

IBM Quantum 量子计算机使用一种被称为超导量子比特的物理类型的量子比特,并且整个设备处于接近于绝对零度的极低温度下。在超导量子比特技术中,超导量子比特使用超导元器件以及非线性电感元件——约瑟夫森结实现<sup>[25]</sup>。

在构建量子线路过程中,单比特与两比特量子门操作是必不可少的,量子逻辑门是对量子比特进行操作的基本单元。单比特量子门操作是通过在超导量子比特上施加特定的射频或者微波脉冲,使量子比特发生能级跃迁实现的,而不同的脉冲参数和时间可以实现不同的单比特量子门操作。两比特的量子门操作则通过有条件的旋转或者跃迁使这两个量子比特在系统中产生纠缠<sup>[26]</sup>,进而使其中一个量子比特的状态和/或相位受控于另一个量子比特的状态和/或相位<sup>[27]</sup>。

在量子计算模拟过程中,测量操作是用于读取和区分量子比特信息和状态的一种方式,它会使量子比特的叠加态坍塌到确定的状态。在量子计算机中,将超导量子比特与谐振耦合会导致谐振器的频率根据量子比特的状态而改变,而谐振器的频率使用色散读取技术进行测量。

量子线路的创建过程分为以下几个步骤:构建、编译、执行与后续分析处理。量子线路的构建主要根据图 1 构思的量子线路进行设计。编译时首先导入 IBM 量子系统所需的基本元素并将所有变量初始化,添加门操作,如:广义控制非操作、反控制非操作与 Hadamard 门等来操控线路的寄存器。通过 Python 代码进行编译,编译完成后可生成可视化的线路,在此线路中,量子比特按从上到下的顺序排列,按照从左到右的顺序读取电路。执行的过程在量子计算机上实时进行,概率分布在后续处理时体现,通过实时量子处理过程中进行的测量创建最终结果,位置方差也可基于此得出。

在 IBM 计算模拟机上模拟波-粒量子行走,首先需要使用 Python 代码构造一个由量子比特、辅助比特、初始状态、量子逻辑门和测量组成的量子线路,Python 代码编译完成后的线路图如图 5 所示。详细过

程如下:

第 1 步,导入必要的 Python 库,以使用这些库所提供的功能和方法。如,在量子计算中,通常需要使用数学运算、可视化等功能,因此需要导入 NumPy、math 和 matplotlib 等库。在 IBM Quantum 中,还需要使用 qiskit 库来创建和模拟量子线路。此外,还可以通过导入其他第三方库,如 pandas、scipy 等,来辅助分析和处理量子计算的结果。因此,导入必要的 Python 库是实现量子计算的基础。

第 2 步,创建一个包含量子比特、辅助比特和经典比特的量子线路。使用 QuantumRegister 创建了包含 9 个量子比特的量子寄存器;使用 ClassicalRegister 创建了包含 9 个经典比特的经典寄存器;使用 QuantumCircuit 创建了一个量子线路,并将这两个寄存器传递给了该线路。其中,含有向左或向右条件行走操作的 4 个量子比特  $q_0 \sim q_3$  为 4 步行走的行走者,含有 Hadamard 门操作的 4 个量子比特  $q_4 \sim q_7$  为 4 步行走所需的硬币,量子比特  $q_8$  为本实验在量子线路中添加的辅助比特,而最下面的  $b$  则代表经典比特。

第 3 步,令所有硬币的初始状态处于  $(|R\rangle + i|L\rangle)/\sqrt{2}$  的状态,令初始辅助比特处于任意相干叠加态  $|\varphi\rangle = \cos\theta|0\rangle + \sin\theta \cdot \exp(i\phi)|1\rangle$ ,  $\phi$  取任意值。当  $\theta = 0$  时,系统处于波动量子行走状态;当  $\theta = \pi/2$  时,系统处于粒子量子行走状态;当  $\theta$  取值在  $(0, \pi/2)$  的区间时,系统处于相干叠加态与混合态的中间态。

第 4 步,添加量子逻辑门用于执行粒子的控制和翻转等操作。将 Hadamard 门施加到硬币上并将控制非操作与反控制非操作作用于硬币和行走者,重复执行控制与翻转等操作。每次演化都包含 Hadamard 门、控制非门与反控制非门等门操作,最后将得到与图 5 一样的完整量子线路图。

第 5 步,使用 qc.measure 在量子线路中添加测量操作,将测量结果存储到经典比特上并将结果记录下来,这些结果表示不同状态与形式的量子行走在不同位置上的概率分布。测量时,波动量子行走、粒子量子行走与混合态只需要测量量子比特  $q_0 \sim q_3$ ,而相干叠加态除了要测量量子比特  $q_0 \sim q_3$ ,还需要测量辅助比特  $q_8$ 。根据测量结果即可得出相应状态下的概率分布。

在量子模拟机上进行演化,图 6 以  $\phi = 1.19\pi$  为例展示了 4 步演化后的 4 种状态,4 步演化后奇数位置的概率为 0,所以只展示偶数位置的概率。IBM 计算模拟与理论计算结果基本相符,多次实验的误差大小通过计算每个位置的 error bar 体现,error bar 是通过多次实验测量计算后得到的,每个位置的 error bar 都在图 6 上展示了出来。从图 6(a)明显可以看出:当  $\theta = 0$  时,位置分布呈现为原点概率低而边锋概率高,和高斯分布完全相反,对应波动量子行走的性质;当  $\theta = \pi/2$

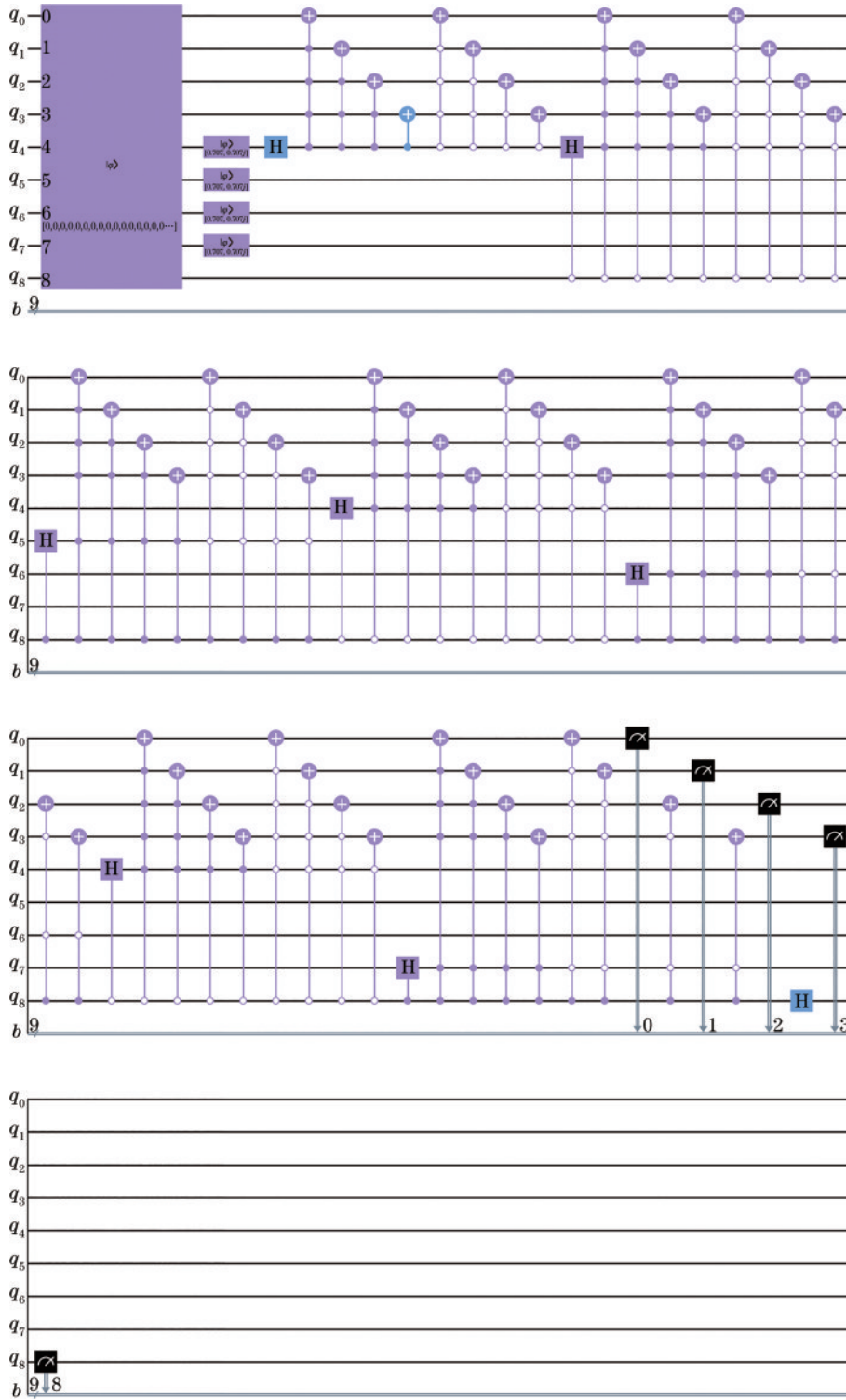


图 5 在 IBM 量子计算机上演示的波-粒子量子行走

Fig. 5 Wave-particle quantum walk demonstrated in IBM quantum computer

时,行走者处于原点处概率高而两边低的高斯分布,对应粒子量子行走的性质; $\theta \in (0, \pi/2)$ 对应的是波动和粒子行走相干叠加的中间过程。中间过程除了这里讨论的相干叠加的方式外,还有混合的方式,图 6(b)给出了  $\theta = 0.385\pi, \phi = 1.19\pi$  时两种不同方式的中间过程。线条(实心)柱状图表示相干叠加(混合)的分布,很显然即便系统参数相同,相干叠加和混合两种方

式的位置分布也是不同的。两者区别主要体现在:相比混合的情形,相干叠加态的边锋概率更大,在  $x \in [-t/\sqrt{2}, t/\sqrt{2}]$  范围内,相干叠加的概率通过选择合适的  $\phi$  更加趋于等概率分布。

行走者的扩散速率通过位置方差  $\nu = \sum_x P(x, t) |x - x_m|^2, x_m = \sum_x P(x, t) x$  描述。波动、粒子以及中间状态的不同性质也可以通过位置方差来

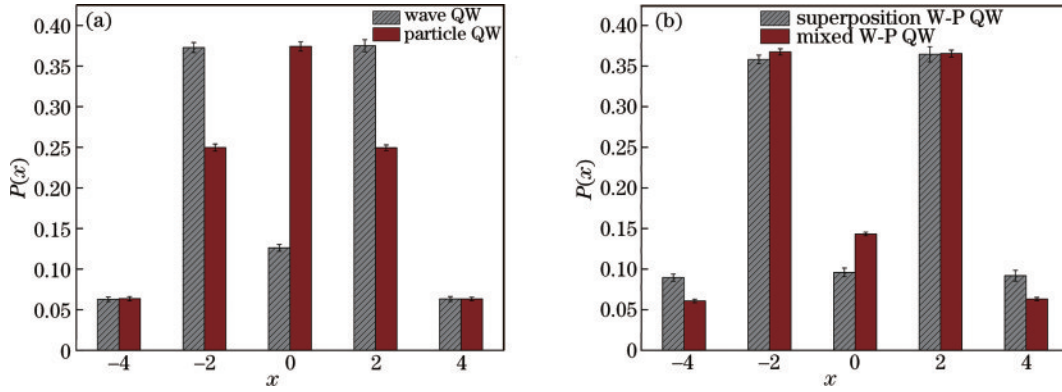


图 6 当  $\phi = 1.19\pi$  时,4 步演化后偶数步位置模拟的概率分布。(a)当  $\theta = 0$  时的波动量子行走及当  $\theta = \pi/2$  时的粒子量子行走；(b)当  $\theta = 0.385\pi$  时的波-粒相干及波-粒混合量子行走

Fig. 6 Probability distribution of even step position simulation after 4-step evolution when  $\phi = 1.19\pi$ . (a) Wave quantum walk when  $\theta = 0$  and particle quantum walk when  $\theta = \pi/2$ ; (b) wave-particle coherent and wave-particle mixed quantum walk when  $\theta = 0.385\pi$

定量描述。分别计算不同类型量子行走的位置方差随着系数  $\theta$  和  $\phi$  的变化情况。波-粒混合量子行走的位置方差与相对相位  $\phi$  无关,并且位置方差随着  $\theta \in [0, \pi/2]$  的取值从最小值 4.0 变化到最大值 5.0。而波-粒相干量子行走的位置方差与相对相位  $\phi$  有关,  $\theta \in [0, \pi/2]$  时,相应的位置方差从最小值 4.0 变化到最大值 6.6。以第 4 步为例,当取  $\theta = 0.385\pi, \phi = 1.19\pi$  时,位置方差达到最大值 6.6, 这比混合的 5.0 还要大。

图 7 给出了波动(点线)、粒子(点划线)、波-粒相干叠加(划线)和波-粒混合(实线)4 种不同类型的量子行走的位置方差随着演化步数的变化情况。在系数相同的情况下做了 10 次实验,计算平均值与标准差得出 error bar, 并且 IBM 计算模拟的结果与理论计算结果基本一致。粒子量子行走的位置方差与演化时间即演化步数  $t$  成正比,而波动量子行走的位置方差与时间平方  $t^2$  成正比,因此波动量子行走中行走者以更大的概率远离原点位置。当取  $\theta = 0.385\pi, \phi = 1.19\pi$  时,波-粒相干量子行走的扩散速率比标准量子行走更大,即通过调节相对相位  $\phi$ ,波-粒相干量子行走者的速率

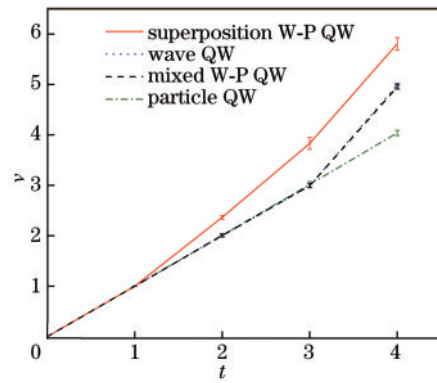


图 7 当  $\phi = 1.19\pi, \theta = 0.385\pi$  时,位置方差随模拟步数  $t$  的变化情况

Fig. 7 Changes of position variance with the simulation of step  $t$  when  $\phi = 1.19\pi, \theta = 0.385\pi$

有进一步的提升。而当  $\theta = 0.385\pi$  时,波-粒混合量子行走的位置方差比标准量子行走小,但是比经典随机行走的位置方差大。

相干叠加与混合位置方差随辅助比特系数的变化情况如图 8 所示, error bar 由多次实验后取平均值与标

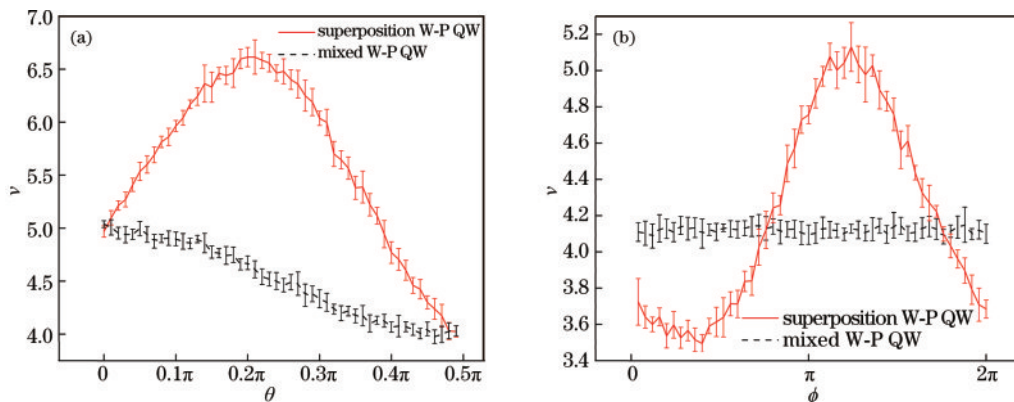


图 8 位置方差随模拟辅助比特参数的变化情况。(a)当  $\phi = 1.19\pi$  时,  $\nu$  随  $\theta$  的变化情况；(b)当  $\theta = 0.385\pi$  时,  $\nu$  随  $\phi$  的变化情况

Fig. 8 Changes of position variance with the simulation of auxiliary bit parameters. (a) When  $\phi = 1.19\pi$ ,  $\nu$  changes with  $\theta$ ; (b) when  $\theta = 0.385\pi$ ,  $\nu$  changes with  $\phi$



准差得出。固定  $\phi = 1.19\pi$ , 波-粒相干和混合量子行走 4 步演化后的位置方差随着  $\theta$  的变化如图 8(a) 所示, 可以很明显地看出, 波和粒状态的量子相干性导致波-粒量子行走的位置方差比混合量子行走的大。接下来进一步讨论固定  $\theta = 0.385\pi$ , 位置方差随着相对相位  $\phi$  的变化情况, 如图 8(b) 所示。波-粒相干量子行走中选取合适的相对相位能提升或减小扩散速率, 为根据需求调控量子行走提供了很好的平台。

在实现波-粒相干量子行走时, IBM Quantum 计算模拟和理论计算的结果可能存在微小的差别。这是由

于 IBM Quantum 量子计算机基于实际的硬件, 包括量子比特之间的耦合和控制操作等, 这些操作的实现可能存在一些误差, 因此计算模拟结果与理论计算结果略有差异。

对于实际的物理系统, 为进一步考虑实现辅助比特和硬币-行走系统的状态调控过程中环境噪声对整个调控的影响, 通过在量子模拟机中加入高斯白噪声模型, 模拟了整个量子系统与辅助比特处于高斯白噪声量子噪声信道中的状态, 计算了波-粒相干量子行走、波-粒混合量子行走 4 步演化后的位置分布, 结果如图 9 所示。

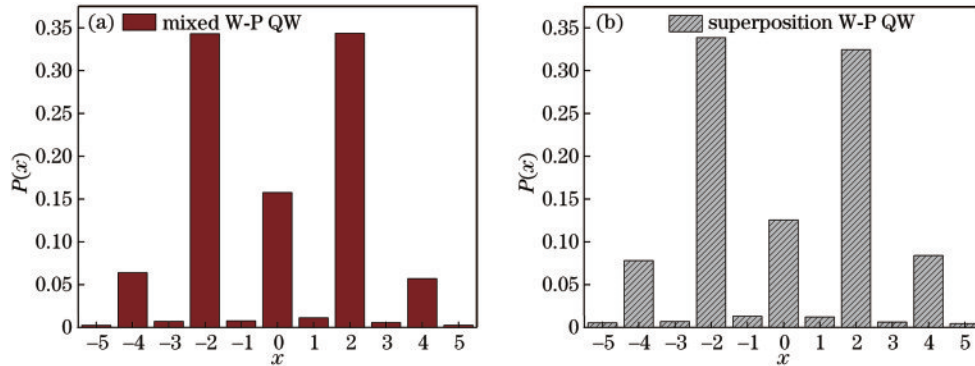


图 9 当  $\phi = 1.19\pi$ 、 $\theta = 0.385\pi$  时, 加入噪声后的 4 步演化概率分布。(a) 波-粒混合; (b) 波-粒相干

Fig. 9 4-step evolutionary probability distribution after adding noise when  $\phi = 1.19\pi$  and  $\theta = 0.385\pi$ . (a) Wave-particle mixed; (b) wave-particle coherent

通过模拟计算发现, 加入噪声的波-粒相干、混合量子行走 4 步演化后, 奇数步位置的概率不再为 0, 而是出现了小概率的额外峰值, 并伴随着原本理想状态下每一个偶数步位置的概率的减小。这是由于噪声的存在导致量子行走演化过程中其量子态与环境发生了不可逆的相互作用, 进而导致量子态的退相干等变化。这些不可避免的噪声效应会导致量子行走的概率分布出现不同于理想状态的变化。因此, 对于任何量子算法或协议, 都需要考虑噪声对其性能的影响, 并采取相应的纠错和噪声抑制方法来确保其正确性和可靠性。

## 4 结 论

通过引入量子控制可以实现量子行走中有量子相干性和无量子相干性这两个不同现象之间的连续调控。通过对辅助比特进行不同的操作, 可以使行走者处于波动、粒子以及中间状态。以往的研究大多具体讨论波动和粒子这两种状态的混合方式调控, 本研究结果表明, 除了波-粒混合, 波动和粒子这两种状态也可以处于相干叠加的形式。最后通过位置分布和方差分别定量刻画了波-粒叠加和混合这两种方式的不同。

所提调控方案可以通过实际物理系统实现, 例如可以通过光子对自由电子-光相互作用的量子统计效应以及电子和光的高效强耦合实现辅助比特与光子系统的相互作用。将电子作为行走者, 在能级的阶梯上

进行量子/经典行走, 每一步都对应于单光子发射或吸收。在每一个这样的发射或吸收过程中, 电子行走者如果与相干态光相互作用, 就会在电子能量态之间保持一个明确的相位, 即表现为量子行走。反之, 如果与热光相互作用则会坍塌洗去电子能态之间的相位, 即表现为经典随机行走的方式<sup>[28]</sup>。

上述讨论表明, 量子行走为人们探索量子现象与经典现象的连续过渡提供了很好的平台。量子控制可以使行走者处于无相干和有相干两种完全不同的量子态的相干叠加状态, 这一现象是经典控制无法实现的。由于量子测量在线路中的顺序不影响最后的状态, 通过量子控制还能后选择行走者状态, 即行走者经过演化并测量后, 依然能够通过辅助比特的不同操作实现行走者处于波动、粒子、波-粒相干和波-粒混合的不同状态。当行走者处于波-粒相干态时, 通过一次测量能够同时观测到两个完全不同的性质。通过调节波-粒相干态中的相对相位可以实现对行走者扩散速率的控制, 选择合适的相对相位可以使行走者的扩散速率比标准量子行走的更大。

## 参 考 文 献

- [1] Guilloin-Plantard N, Schott R. Dynamic random walks: theory and applications[M]. Amsterdam: Elsevier, 2006: 18-35.
- [2] Aharonov Y, Davidovich L, Zagury N. Quantum random

- walks[J]. *Physical Review. A, Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 1993, 48(2): 1687-1690.
- [3] Ambainis A. Quantum walks and their algorithmic applications[J]. *International Journal of Quantum Information*, 2003, 1(4): 507-518.
- [4] Childs A M, Cleve R, Deotto E, et al. Exponential algorithmic speedup by a quantum walk[C]//*Proceedings of the thirty-fifth annual ACM symposium on Theory of computing*, June 9-11, 2003, San Diego, CA, USA. New York: ACM Press, 2003: 59-68.
- [5] Reitzner D, Hillery M, Koch D. Finding paths with quantum walks or quantum walking through a maze[J]. *Physical Review A*, 2017, 96(3): 032323.
- [6] Wong T G, Philipp P. Engineering the success of quantum walk search using weighted graphs[J]. *Physical Review A*, 2016, 94(2): 022304.
- [7] Kempe J. Quantum random walks: an introductory overview[J]. *Contemporary Physics*, 2003, 44(4): 307-327.
- [8] Childs A M. Universal computation by quantum walk[J]. *Physical Review Letters*, 2009, 102(18): 180501.
- [9] 何业锋, 杨梦玫, 李智, 等. 基于量子行走的电子支付协议[J]. *光学学报*, 2023, 43(5): 0527001.  
He Y F, Yang M M, Li Z, et al. E-payment protocols based on quantum walk[J]. *Acta Optica Sinica*, 2023, 43(5): 0527001.
- [10] Zhao Y Y, Yu N K, Kurzyński P, et al. Experimental realization of generalized qubit measurements based on quantum walks[J]. *Physical Review A*, 2015, 91(4): 042101.
- [11] Štefaňák M, Skoupý S. Perfect state transfer by means of discrete-time quantum walk search algorithms on highly symmetric graphs[J]. *Physical Review A*, 2016, 94(2): 022301.
- [12] Kurzyński P, Wójcik A. Quantum walk as a generalized measuring device[J]. *Physical Review Letters*, 2013, 110(20): 200404.
- [13] Xiao L, Zhan X, Bian Z H, et al. Observation of topological edge states in parity-time-symmetric quantum walks[J]. *Nature Physics*, 2017, 13(11): 1117-1123.
- [14] Barkhofen S, Nitsche T, Elster F, et al. Measuring topological invariants in disordered discrete-time quantum walks[J]. *Physical Review A*, 2017, 96(3): 033846.
- [15] Zhang W W, Goyal S K, Simon C, et al. Decomposition of split-step quantum walks for simulating Majorana modes and edge states[J]. *Physical Review A*, 2017, 95(5): 052351.
- [16] Ionicioiu R, Terno D R. Proposal for a quantum delayed-choice experiment[J]. *Physical Review Letters*, 2011, 107(23): 230406.
- [17] Peruzzo A, Shadbolt P, Brunner N, et al. A quantum delayed-choice experiment[J]. *Science*, 2012, 338(6107): 634-637.
- [18] Kendon V, Sanders B C. Complementarity and quantum walks[J]. *Physical Review A*, 2005, 71(2): 022307.
- [19] Brun T A, Carteret H A, Ambainis A. Quantum to classical transition for random walks[J]. *Physical Review Letters*, 2003, 91(13): 130602.
- [20] Xue P, Sanders B C. Controlling and reversing the transition from classical diffusive to quantum ballistic transport in a quantum walk by driving the coin[J]. *Physical Review A*, 2013, 87(2): 022334.
- [21] Brun T A, Carteret H A, Ambainis A. Quantum random walks with decoherent coins[J]. *Physical Review A*, 2003, 67(3): 032304.
- [22] Kendon V, Tregenna B. Decoherence can be useful in quantum walks[J]. *Physical Review A*, 2003, 67(4): 042315.
- [23] 彭永刚. 量子 Toffoli 门的核磁共振物理实现[J]. *激光与光电子学进展*, 2023, 60(7): 0727002.  
Peng Y G. Nuclear-magnetic-resonance-based physical realization of quantum Toffoli gate[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2023, 60(7): 0727002.
- [24] Douglas B L, Wang J B. Efficient quantum circuit implementation of quantum walks[J]. *Physical Review A*, 2009, 79(5): 052335.
- [25] Georgopoulos K, Emary C, Zuliani P. Comparison of quantum-walk implementations on noisy intermediate-scale quantum computers[J]. *Physical Review A*, 2021, 103(2): 022408.
- [26] 种波, 王嘉瑜, 陈博杨, 等. 三量子位纯态的混合纠缠[J]. *激光与光电子学进展*, 2022, 59(11): 1127001.  
Chong B, Wang J Y, Chen B Y, et al. Mixed entanglement of three qubit pure states[J]. *Laser & Optoelectronics Progress*, 2022, 59(11): 1127001.
- [27] Flurin E, Ramasesh V V, Hacohen-Gourgy S, et al. Observing topological invariants using quantum walks in superconducting circuits[J]. *Physical Review X*, 2017, 7(3): 031023.
- [28] Dahan R, Gorlach A, Haeusler U, et al. Imprinting the quantum statistics of photons on free electrons[J]. *Science*, 2021, 373(6561): eabj7128.