

---

# Trotter 分解

---

Kaoru Mizuta  
The University of Tokyo

2026年3月22日



# 第1章 量子ダイナミクスと Trotter 分解

量子多体系の時間発展のシミュレーションは、量子計算が古典計算に比べて優位性を持つと最も期待されると同時に物性物理・量子化学に対する量子計算機の最も有用な応用の一つとされる。ここでは、量子多体系の時間発展を精度保証付きでシミュレートする最も基本的な量子アルゴリズムである Trotter 分解を概観する。

## 1.1 量子多体系とその時間発展

### 1.1.1 ハミルトニアンシミュレーション

量子多体系のダイナミクスは Schrödinger 方程式で記述される。換算 Planck 定数  $\hbar$  を 1 として、量子多体系のハミルトニアンが時間依存しない  $H$  で与えられるとき、

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (1.1)$$

に従って量子状態  $|\psi(t)\rangle$  が変化する。初期状態  $|\psi(0)\rangle$  が与えられれば、その解は

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle, \quad U(t) = e^{-iHt} \quad (1.2)$$

で与えられる。ハミルトニアンシミュレーション (Hamiltonian simulation) とは、初期状態  $|\psi(0)\rangle$  が量子計算機上で用意された時適切にユニタリーゲートを掛けて Schrödinger 方程式の解  $|\psi(t)\rangle$  を正確に実現する量子アルゴリズムを指す。このタスクは、量子多体系の実時間ダイナミクスを解析にとどまらず、量子位相推定アルゴリズムのサブルーチンとして利用され量子系の基底状態・励起状態の計算にも応用されるなど、物性分野・量子化学に対する量子計算機の最も有望な使徒である。

ハミルトニアンシミュレーションの計算コストを特徴づける量として以下のものが重要となる。

- 系サイズ  $N$ ;  
系が  $N$  qubit 系とするとハミルトニアン  $H$  は  $2^N \times 2^N$  次元の指数的に大きな行列となる。
- 時刻  $t$ ;  
一般に長時間のダイナミクスをシミュレートするには多くの計算コストが必要と期待される。
- 要求精度  $\varepsilon \in (0, 1)$ ;  
アルゴリズムに精度保証があると要請する。すなわち、任意の初期状態  $|\psi(0)\rangle$  に対して量子アルゴリズムで実現された状態  $U |\psi(0)\rangle$  が

$$\|U |\psi(0)\rangle - e^{-iHt} |\psi(0)\rangle\| \leq \varepsilon \quad (1.3)$$

を満たすよう要請する。一般に  $\varepsilon$  が 0 に近いほどより多くの計算コストが必要と期待される。

ハミルトニアンシミュレーションは、(厳密な証明はいまだにないものの) 古典計算機と比べて量子優位性があると確実視される最も基本的なタスクである。というのも、量子計算機自体が Schrödinger 方程式に従って動いているため、Schrödinger 方程式を解くという行為は量子計算機の動作をシミュレートすることと等価である。一般に量子計算機の動作を古典計算機で効率よくシミュレートすることは困難であると考えられているので(でなければ量子計算機を研究する意義がない)、ハミルトニアンシミュレーションも古典計算機で効率よく実行することは困難と予想されている。実際、古典計算機では一般に  $N$ -qubit 系の状態を保持するには  $2^N$  サイズのメモリが必要で、それに対し  $2^N \times 2^N$  行列の巨大な時間発展演算子  $e^{-iHt}$  を作用されるには同じく指数的に大きな計算時間が必要と期待される。その一方で、量子計算では  $N$ -qubit 状態をそのまま自然に保持することができ、また様々な手法(例: 本節で取り扱う Trotter 分解アルゴリズム)で量子ゲートを組み合わせ  $e^{-iHt}$  の演算も効率的に行えることが知られている。ハミルトニアンシミュレーションは、量子計算機の優位性と応用性を併せ持つ量子計算の最も中心的な分野の一つと言える。その上で、系サイズ  $N$ 、時刻  $t$ 、要求精度  $\varepsilon$  に対してハミルトニアンシミュレーションに必要な計算コスト(=必要な量子ゲート数, 量子ビット数)を削減した量子アルゴリズムを構成できるかが特に重要な問題である。

### 1.1.2 量子多体系のハミルトニアン

$N$  qubit の量子多体系のハミルトニアン  $H$  は  $2^N \times 2^N$  サイズのエルミート行列であり独立な実数係数を  $4^N$  個持つ。故に一般にはハミルトニアンは莫大な自由度を持つが、物理・化学で重要なハミルトニアンはその限りではない。例えば、磁場下の相互作用するスピン系を記述するモデルとして代表的な一次元横磁場 Ising 模型のハミルトニアンは

$$H = - \sum_{i=1}^N J_i Z_i Z_{i+1} - \sum_{i=1}^N h_i X_i \quad (1.4)$$

で記述される。ここで、 $X_i, Y_i, Z_i$  はそれぞれサイト  $i$  上の Pauli 演算子を表し、周期境界条件を課すものとする。このとき、パラメータの自由度はスピン間の相互作用  $\{J_i\}$  とスピンに働く磁場  $\{h_i\}$  の  $2N$  個のみである。この模型では、2体相互作用 ( $Z_i Z_{i+1}$ ) が付近にしか及ばないということに由来して著しくハミルトニアンの項数が減っている。このような性質は一般的な物理・化学で考える模型に備わっており、抽象的には以下の性質にまとめられる。

**相互作用の局所性.**— ハミルトニアン  $H$  が高々  $k$  体までの相互作用しか持たないとき、そのハミルトニアンは  $k$ -local であるといいそのような性質を**局所性**(locality)と呼ぶ。例えば、(1.4) 式の横磁場 Ising 模型は  $Z_i Z_{i+1}$  が 2体相互作用、 $X_i$  が 1体相互作用なので 2-local なハミルトニアンである。物性物理・量子化学で興味のある結晶や分子での相互作用は基本的に電磁気力に由来するため 2体である。それより多体の相互作用は、低エネルギー領域など特定の部分空間上における有効模型として現れる。例えば隣接サイト間の斥力相互作用が極端に強い Rydberg 原子系では、隣り合う  $\uparrow\uparrow$  が許されずそのような部分空間上で

$$H = \sum_i h_i P_{i-1} X_i P_{i+1}, \quad P_i = \frac{1 + Z_i}{2} \quad (1.5)$$

という 3-local なハミルトニアンで記述されることが摂動論によって導かれる (PXP 模型という)。いずれにせよ、相互作用が高々  $k \in \mathcal{O}(1)$  体までしかない、というのは物理的に自然な仮定である。

**相互作用の有効範囲.**— 相互作用の局所性とともに重要な概念が、相互作用の係数の大きさが相互作用するサイト間の距離に応じてどのように減衰するかである。その減衰の仕方によって以下のように大別される。

- 有限距離相互作用 (finite-ranged interaction)

サイト  $i, j$  に働く相互作用の係数が  $|i - j| \leq R$  (定数) の時のみ非ゼロとなるとき、有限距離相互作用という。例えば (1.4) 式の横磁場 Ising 模型, (1.5) 式の PXP 模型はそれぞれ  $R = 1, 2$  の有限距離相互作用を持つハミルトニアンである。このようなハミルトニアンは最も寄与の大きい相互作用項以外を切り落として単純化したモデルとして物性物理でしばしば考えられる。それ以外の例は、スピン系の Heisenberg 模型, 電子系の Fermi-Hubbard 模型などがある。

- 短距離相互作用 (short-ranged interaction)

サイト  $i, j$  に働く相互作用の係数  $J_{ij}$  が  $|J_{ij}| \in \mathcal{O}(e^{-|i-j|/\xi})$  ( $\xi > 0$ : 定数) のように距離に従って指数的に減衰するとき、短距離的な相互作用という。このような模型は、Coulomb 相互作用が自由電子によって遮蔽される時などに現れる。

- 長距離相互作用 (long-ranged interaction)

サイト  $i, j$  に働く相互作用の係数  $J_{ij}$  が  $|J_{ij}| \in \mathcal{O}(|i - j|^{-\nu})$  ( $\nu > 0$ : 定数) のように距離に従って多項式的に減衰するとき、長距離的な相互作用という。具体的な例としては Coulomb 相互作用 ( $\nu = 1$ ) やそれに由来する双極子相互作用 ( $\nu = 3$ ), van der Waals 相互作用 ( $\nu = 6$ ) などがある。量子化学における分子や物性物理における結晶を第一原理的に計算する場合に重要となる。

一般の  $k$ -local ( $k \in \mathcal{O}(1)$ ) で有限距離の相互作用を持つハミルトニアンは、各サイト  $i$  ごとにその周囲の  $k$  サイトと相互作用する高々  $\mathcal{O}(1)$  種類の相互作用項を持つので、 $\mathcal{O}(N)$  個の独立な項からなる。短距離的な相互作用を持つ場合は一見すると  $\mathcal{O}(N^k)$  個の項が必要であるが、Lieb-Robinson 限界という時間発展における情報伝播の限界 [LR72] により、本質的に距離  $R \sim \xi$  で打ち切った有限距離相互作用系として記述できることが知られる。それ故に、 $k$ -local な短距離相互作用系も  $\mathcal{O}(N)$  項のハミルトニアンで記述できる。一方で長距離相互作用系では、相互作用の減衰が遅いためそのような打ち切りはできず  $\mathcal{O}(N^k)$  個の項を考える必要がある。いずれにせよ、元々のハミルトニアンの自由度  $4^N$  と比べると物理・化学で興味のある局所的なハミルトニアンは高々  $\text{poly}(N)$  個の大幅に少ない自由度しか持たない。

以降では、局所的な相互作用を持つハミルトニアンに着目してその時間発展を計算する量子アルゴリズムを構築する。相互作用の有効範囲については有限距離, 短距離, 長距離でそれぞれ議論する必要があるが、指定しない限りは簡単のために有限距離の場合を扱うものとする。

## 1.2 Trotter 分解アルゴリズム

時間発展を計算したい量子多体系は、時間依存しない局所的な相互作用を持つハミルトニアン  $H$  で記述されるとする。時間  $t$  のハミルトニアンシミュレーションを誤差  $\varepsilon \in (0, 1)$  以内の精度保証付きで量子計算機で実行するとは、

$$\|U - e^{-iHt}\| \leq \varepsilon \quad (1.6)$$

となるユニタリ行列  $U$  を基本ゲートセット (1 量子ビットゲートと 2 量子ビットゲート, あるいは一般に  $\mathcal{O}(1)$  量子ビットゲート) から構成し、初期状態  $|\psi(0)\rangle$  に作用させて解  $U|\psi(0)\rangle = e^{-iHt}|\psi(0)\rangle + \mathcal{O}(\varepsilon)$  を得ることである。ここでは時間発展演算子  $e^{-iHt}$  を近似するユニタリ  $U$  の構成法に着目して、Trotter 分解公式により多項式個の基本量子ゲートで構成できることを見る。

### 1.2.1 Trotter 分解公式

ハミルトニアン  $H$  が

$$H = \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} H_{\gamma} \quad (1.7)$$

と表現できるときを考えよう。Trotter 分解公式 (より正確には積公式, product formula という) とは、時間発展演算子  $\exp(-iHt)$  を各項の時間発展演算子  $\exp(-iH_{\gamma}t)$  ( $\gamma = 1, 2, \dots, \Gamma$ ) の積として近似する公式で Lie 代数などの文脈における近似公式に基づいている。時間発展演算子  $e^{-iHt}$  を近似する手法は Taylor 展開など様々あるものの、Trotter 分解公式はユニタリ性を保ったまま近似することができるということから、量子計算で最初期に考えられた標準的な手法となっている [Llo96]。量子計算では各  $H_{\gamma}$  に対して  $\exp(-iH_{\gamma}t)$  が簡単に基本量子ゲートで構成できるように分解し、詳細は 1.2.2 節で説明するが一般の局所的なハミルトニアンに対してそのような分解は可能である。

時間発展演算子  $e^{-iHt}$  を  $\exp(-iH_{\gamma}t)$  の積として近似する例として最も単純な

$$T_1(t) = e^{-iH_{\Gamma}t} \dots e^{-iH_2t} e^{-iH_1t} \equiv \prod_{\gamma=1,2,\dots,\Gamma}^{\leftarrow} e^{-iH_{\gamma}t} \quad (1.8)$$

を考えてみる。各項  $H_1, \dots, H_{\Gamma}$  が互いに可換であるときは行列指数関数の結合則が成立するので

$$T_1(t) = \exp\left(-i \sum_{\gamma} H_{\gamma}t\right) = \exp(-iHt) \quad (1.9)$$

となり  $T_1(t)$  は正確に時間発展演算子  $e^{-iHt}$  を与える。一方で、 $H_1, \dots, H_{\Gamma}$  が互いに可換とは限らない一般の場合には  $T_1(t) \neq e^{-iHt}$  である。しかしながら、そのような場合においても時間  $|t|$  が十分小さいならば  $T_1(t)$  は近似的に  $e^{-iHt}$  を与えることが知られている。具体的には Taylor 展開を用いることで以下のような定理を証明できる。

**Theorem 1.1. (Lie-Trotter 公式)**

ハミルトニアン  $H = \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} H_{\gamma}$  に対して  $T_1(t) = e^{-iH_{\Gamma}t} \dots e^{-iH_1t}$  とすると、

$$\|T_1(t) - e^{-iHt}\| \in \mathcal{O}\left(\left(\sum_{\gamma=1}^{\Gamma} \|H_{\gamma}\| \cdot |t|\right)^2\right) \quad (1.10)$$

が成立する。

*Proof.* — 各時間発展演算子に対して 1 次までの Taylor 展開

$$e^{-iAt} = 1 - iAt + \mathcal{O}(\|A\| \cdot |t|^2), \quad A = H, H_1, H_2, \dots, H_{\Gamma} \quad (1.11)$$

を用いて誤差  $T_1(t) - e^{-iHt}$  に代入すると

$$\begin{aligned}
T_1(t) - e^{-iHt} &= \prod_{\gamma=1, \dots, \Gamma}^{\leftarrow} (1 - iH_\gamma t + \mathcal{O}(\|H_\gamma\| \cdot |t|^2)) - 1 + iHt + \mathcal{O}(\|H\| \cdot |t|^2) \\
&\in \mathcal{O}\left(\sum_{\gamma} (\|H_\gamma\| \cdot |t|^2), (\|H\| \cdot |t|^2)\right) \\
&\subset \mathcal{O}\left(\left(\sum_{\gamma=1}^{\Gamma} \|H_\gamma\| \cdot |t|\right)^2\right)
\end{aligned} \tag{1.12}$$

により示される。  $\square$

$T_1(t)$  は  $e^{-iHt}$  を時刻  $t$  に関して 1 次までの範囲内で近似する公式として Lie-Trotter 公式と呼ばれる。なお、(1.12) 式の右辺で現れる誤差の表式は実際の誤差よりも過大評価している。なぜならば、 $H_1, \dots, H_\Gamma$  が互いに可換な場合は  $T_1(t)$  は  $e^{-iHt}$  に一致するため誤差はゼロとなるべきであるが、(1.12) 式の右辺の誤差はそのような量になっていないからである。そのような事実を反映したより正確な誤差として、以下の定理が知られる。

**Theorem 1.2. (Lie-Trotter 公式の交換子スケールリング)**

$H = H_1 + H_2$  で表されるハミルトニアンを考える。任意の  $t \in \mathbb{R}$  に対して

$$\|e^{-iHt} - T_1(t)\| \leq \frac{t^2}{2} \|[H_1, H_2]\|. \tag{1.13}$$

が成立する。

*Proof.* —  $e^{iH0} = T_1(0) = I$  より

$$\begin{aligned}
e^{-iHt} - T_1(t) &= -e^{-iHt}(e^{iHt}T_1(t) - I) \\
&= -\int_0^t d\tau \frac{d}{d\tau} (e^{iH\tau}T_1(\tau)) \\
&= -i \int_0^t d\tau e^{-iH(t-\tau)}T_1(\tau) \left\{ T_1(\tau)^\dagger HT_1(\tau) - iT_1(\tau)^\dagger \frac{d}{d\tau} T_1(\tau) \right\}
\end{aligned} \tag{1.14}$$

である。ここで、

$$\Delta_1(\tau) \equiv T_1(\tau)^\dagger HT_1(\tau) - iT_1(\tau)^\dagger \frac{d}{d\tau} T_1(\tau) \tag{1.15}$$

と定めると、

$$\|e^{-iHt} - T_1(t)\| \leq \int_0^t d\tau \|\Delta_1(\tau)\| \tag{1.16}$$

となり、演算子  $\Delta_1(\tau)$  が Trotter 誤差の大きさを決定することが分かる。 $T_1(t)$  の表式から  $\Delta_1(\tau)$  を詳しく調べよう;

$$\begin{aligned}
\Delta_1(\tau) &= T_1(\tau)^\dagger (H_1 + H_2) T_1(\tau) - ie^{iH_1\tau} e^{iH_2\tau} \frac{d}{d\tau} e^{-iH_2\tau} e^{-iH_1\tau} \\
&= e^{iH_1\tau} e^{iH_2\tau} H_1 e^{-iH_2\tau} e^{-iH_1\tau} - e^{iH_2\tau} H_1 e^{-iH_2\tau}
\end{aligned} \tag{1.17}$$

ここで、第 1 項は Taylor の定理より

$$\begin{aligned}
e^{iH_2\tau} H_1 e^{-iH_2\tau} &= H_1 + \int_0^\tau d\tau' \frac{d}{d\tau'} (e^{iH_2\tau'} H_1 e^{-iH_2\tau'}) \\
&= H_1 - i \int_0^\tau d\tau' e^{iH_2\tau'} [H_1, H_2] e^{-iH_2\tau'}
\end{aligned} \tag{1.18}$$

と書けるので、

$$\Delta_1(\tau) = -i \int_0^\tau d\tau' e^{iH_1\tau'} e^{iH_2\tau'} [H_1, H_2] e^{-iH_2\tau'} e^{-iH_1\tau'} \quad (1.19)$$

である。(1.16) 式にこれを代入すると、

$$\begin{aligned} \|e^{-iHt} - T_1(t)\| &\leq \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau_1 \| [H_1, H_2] \| \\ &= \frac{t^2}{2} \| [H_1, H_2] \| \end{aligned} \quad (1.20)$$

であることが導ける。□

この定理で与えられる Trotter 分解公式の誤差は、単純に Taylor 展開から予想されるハミルトニアンノルムではなく各項の交換子に依存することから、交換子スケーリングと呼ばれる。この誤差上界は、 $H_1, H_2$  が可換ならば Trotter 分解公式は厳密に成立するという事実を反映しており、その意味で (1.12) 式で与えられる誤差 (1-ノルム スケーリング) よりも正確と言える。

### 1.2.2 量子アルゴリズムと計算コスト

Trotter 分解公式は、一般の local なハミルトニアンに対してその時間発展の効率的な量子アルゴリズムを与える。最も簡単な模型として、相互作用が 2-local かつ最近接サイトまでしか及ばないような 1 次元有限距離相互作用系を考えよう。そのようなハミルトニアンは一般的に

$$H = \sum_{i=1}^{N-1} h_{i,i+1} \quad (1.21)$$

と表される。局所項  $h_{i,i+1}$  はサイト  $i, i+1$  のみに非自明に作用するものとする相互作用を意味する。例えば、(1.4) 式の横磁場 Ising 模型では  $h_{i,i+1} = JZ_i Z_{i+1} + hX_i$  である。時間発展演算子  $e^{-iHt}$  は系全体に作用するグローバルな演算子であるが、Trotter 分解公式を用いることで  $\mathcal{O}(1)$  qubit に作用する量子ゲートに分解することができる。

上記のハミルトニアンを

$$H = H_1 + H_2, \quad H_1 = \sum_{i:\text{odd}} h_{i,i+1}, \quad H_2 = \sum_{i:\text{even}} h_{i,i+1}. \quad (1.22)$$

のように、奇数番目 (偶数番目) のペアに関する相互作用項  $H_1, H_2$  に分解しよう。この時、Trotter 分解公式により  $t$  が十分小さい時

$$e^{-iHt} = e^{-iH_2t} e^{-iH_1t} + \mathcal{O}((\|H_1\| + \|H_2\|)^2 t^2) \quad (1.23)$$

と近似されるが、 $H_1, H_2$  中の各項は可換であるので右辺に現れる時間発展演算子は

$$e^{-iH_1t} = \prod_{i:\text{odd}} e^{-ih_{i,i+1}t}, \quad e^{-iH_2t} = \prod_{i:\text{even}} e^{-ih_{i,i+1}t}, \quad (1.24)$$

と表せる。各  $e^{-ih_{i,i+1}t}$  は 2 量子ビットに作用する演算子であり、系サイズ  $N$  によらない個数の 1,2 量子ビットゲートで実装することが可能である。さらに、 $e^{-iH_1t}, e^{-iH_2t}$  中の  $e^{-ih_{i,i+1}t}$  はそれぞれ別のサイトに作用するので、これらは 2 量子ビットゲート  $e^{-ih_{i,i+1}t}$  を並列することで Fig. 1.1 のようにそれぞれ深さ 1 で実装できる。

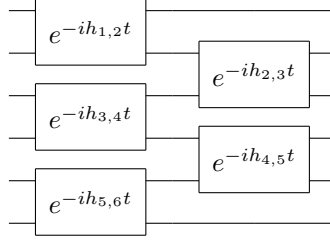


図 1.1: Lie-Trotter 公式の量子回路による実装。第 1 層目は  $e^{-iH_1 t}$ , 第 2 層目は  $e^{-iH_2 t}$  を表し、それぞれ 2-qubit ゲートを基本ゲートとして深さ 1 で実装できる。

さて、上記の方法による時間発展のシミュレートは Trotter 分解の近似の正当性のために時間  $t$  が十分小さい時のみ有効だが、一般には小さいとは限らない時間  $t$  の時間発展を考えたい。この場合、目的の時間  $t$  に対して時間  $t/r$  が十分小さくなるよう  $r$  分割し、微小な時間発展  $e^{-iHt/r}$  を Trotter 分解で近似したものを  $r$  回繰り返せば良い。量子回路としては Fig. 1.1 の回路で時刻  $t$  を  $t/r$  としたものを  $r$  層積み重ねたものとなっており、回路深さは  $2r$  となっている。問題は、量子回路の深さに相当する分割数  $r$  をどのように決定するかであるが、これは回路全体の要求精度

$$\|e^{-iHt} - \{T_1(t/r)\}^r\| \leq \varepsilon \quad (1.25)$$

を満たすように定める。左辺を評価するために以下の命題を用いる。

**Proposition 1.3.**

ユニタリー行列  $U_1, U_2$  に対して、

$$\|(U_1)^r - (U_2)^r\| \leq r\|U_1 - U_2\|, \quad r \in \mathbb{N} \quad (1.26)$$

が成立する。

*Proof.* —

$$\begin{aligned} \|(U_1)^r - (U_2)^r\| &\leq \|U_1\{(U_1)^{r-1} - (U_2)^{r-1}\}\| + \|(U_1 - U_2)(U_2)^{r-1}\| \\ &= \|(U_1)^{r-1} - (U_2)^{r-1}\| + \|U_1 - U_2\| \\ &\vdots \\ &\leq r\|U_1 - U_2\|. \quad \square \end{aligned} \quad (1.27)$$

上記の命題は、目的のユニタリー  $U_1$  を誤差  $\|U_2 - U_1\| < \varepsilon$  で  $U_2$  によって近似できる時、それらを  $r$  回繰り返した時の誤差は単純に  $r$  倍した  $r\varepsilon$  で抑えられるというものである。  $U_1 = e^{-iHt/r}$ ,  $U_2 = T_1(t/r)$  とすると、

$$\|e^{-iHt/r} - T_1(t/r)\| \leq \frac{\varepsilon}{r} \quad (1.28)$$

を満たすように分割数  $r$  を設定すると、(1.25) 式が満たされる。Theorem 1.2 より、

$$\|e^{-iHt/r} - T_1(t/r)\| \leq \frac{\|[H_1, H_2]\|}{2} \left(\frac{t}{r}\right)^2 \quad (1.29)$$

である。ここで交換子  $[H_1, H_2]$  のノルムは  $H_1, H_2$  の表式 (1.22) を用いると、

$$\begin{aligned} \|[H_1, H_2]\| &\leq \sum_{i;\text{odd}} \sum_{j;\text{even}} \|[h_{i,i+1}, h_{j,j+1}]\| \\ &= \sum_{i;\text{odd}} (\|[h_{i,i+1}, h_{i-1,i}]\| + \|[h_{i,i+1}, h_{i+1,i+2}]\|) \\ &\leq \frac{N}{2} \cdot (2h^2 + 2h^2) = 2h^2N \end{aligned} \quad (1.30)$$

で抑えられる。ただし、2行目の等号ではサイトの重なりがない相互作用の演算子同士は演算子同士は可換であることを利用し、3行目の不等号では

$$h = \max_i (\|h_{i,i+1}\|) \in \mathcal{O}(N^0) \quad (1.31)$$

という系サイズ  $N$  によらない 1 サイトあたりの最大エネルギーを導入した。故に、

$$h^2N \left(\frac{t}{r}\right)^2 \leq \frac{\varepsilon}{r} \quad (1.32)$$

を満たすように  $r$  を選ばばよく、

$$r = \left\lceil \frac{N(ht)^2}{\varepsilon} \right\rceil \quad (1.33)$$

と設定できる。

以上により、Trotter 分解公式で量子系の時間発展を計算する量子アルゴリズムの実装方法とそのコストを決定できる。まとめると以下ようになる。

### 量子アルゴリズム.—

1. 時間  $t$  を (1.33) 式で指定される  $r$  により  $r$  分割する。
2. 各時間幅  $t/r$  の時間発展を近似する Trotter 分解  $T_1(t/r)$  を量子回路で構成する。
3. 上記の回路を  $r$  回繰り返す。

**計算コスト.**— 量子回路では、任意の 1-qubit ゲート, 2-qubit ゲートを基本ゲートとして利用できるとし、それに基づいて回路の深さ, 必要な量子ゲート数を評価する。

- 回路深さ

Fig. 1.1 のように一つの Trotter 分解  $T_1(t/r)$  毎に深さ 2 の量子回路が必要となる。故に回路深さは

$$2r = 2 \left\lceil \frac{N(ht)^2}{\varepsilon} \right\rceil \in \mathcal{O}\left(\frac{Nt^2}{\varepsilon}\right) \quad (1.34)$$

となる。

- 量子ゲート数

Trotter 分解  $T_1(t/r)$  毎に  $N-1$  個の 2-qubit ゲートがあるので、全体で

$$(N-1)r = (N-1) \left\lceil \frac{N(ht)^2}{\varepsilon} \right\rceil \in \mathcal{O}\left(\frac{(Nt)^2}{\varepsilon}\right) \quad (1.35)$$

の量子ゲートが必要となる。

量子アルゴリズムの計算時間はその回路深さによって決まり、上記の議論から量子系の時間発展は系サイズ  $N$  に関して多項式的な時間で計算できることが分かる。一方で、古典計算機を用いて量子系の時間発展を計算するには一般には系サイズ  $N$  について指数的に多大な時間を必要とすると考えられているため、量子系の時間発展計算は指数的な量子加速のあるタスクと信じられている。ここまでの議論は 1 次元, 2-local, 最近接相互作用の簡単な場合を考えてきたが、一般の次元で有限距離相互作用を持つ系に対しても同様の結果が得られ、以下の定理でまとめられる。

**Theorem 1.4.**

有限距離相互作用を持つ系サイズ  $N$  のハミルトニアン  $H$  の下での時間発展演算子  $e^{-iHt}$  を誤差  $\varepsilon$  以内でシミュレートする問題を考える。Trotter 分解  $T_1(\cdot)$  を用いると、 $\mathcal{O}(1)$ -qubit ゲートを基本ゲートとして

$$\text{回路深さ: } \mathcal{O}\left(\frac{Nt^2}{\varepsilon}\right), \quad \text{量子ゲート数: } \mathcal{O}\left(\frac{(Nt)^2}{\varepsilon}\right) \quad (1.36)$$

の量子回路でシミュレートできる。

### 1.3 高次の Trotter 分解

前節で導入した Trotter 分解公式  $T_1(t)$  は  $e^{-iHt}$  と  $t$  の 1 次までの範囲内で一致するように Taylor 展開から設定された。これを一般に  $t$  の  $p$  次まで一致するように拡張したものを  $p$  次の積公式 (Product formula) といい、 $T_p(t)$  と書く。ハミルトニアンが  $H = \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} H_{\gamma}$  で与えられるとき、 $T_p(t)$  は前節の Trotter 分解と同じように各項  $H_{\gamma}$  の時間発展の積で与え、

$$T_p(t) = \prod_{v=1, \dots, V}^{\leftarrow} e^{-iH_{\gamma_v} \alpha_v t}, \quad \alpha_v \in \mathbb{R}, \quad \gamma_v \in \{1, 2, \dots, \Gamma\} \quad (1.37)$$

で定める。積の個数  $V$ 、ハミルトニアンの添字  $\gamma_v$ 、対応する時間幅の係数  $\alpha_v$  は

$$T_p(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^{p+1}) \quad (1.38)$$

が成立するように定めるもので、具体的に前節における  $H = H_1 + H_2$  に対する  $T_1(t)$  の場合は  $V = 2, \gamma_1 = 1, \gamma_2 = 2, \alpha_1 = \alpha_2 = 1$  となっている。

高次の積公式  $T_p(t)$  を導入する利点は、誤差項  $e^{-iHt} - T_p(t) \in \mathcal{O}(t^{p+1})$  が次数  $p$  を大きくすると更に小さくなることである。1.2.2 節で議論したように、Trotter 分解に基づく量子アルゴリズムのコストはその誤差の大きさに決まるため、誤差を小さくすることで計算コストを下げるができる。以下では、まず 1.3.1 節で Trotter 分解  $T_1(t)$  を拡張し一般の次数  $p$  で  $T_p(t)$  を構成する方法 (Lie-Suzuki-Trotter 公式) を議論する。1.3.2 節では次数  $p$  の積公式における誤差を議論し、1.3.3 節で次数  $p$  の積公式に基づく量子アルゴリズムが Theorem 1.4 よりも効率的となることを示す。また、前節では有限距離の相互作用を持つハミルトニアンに着目したが、1.3.3 節では長距離相互作用も含む一般の局所ハミルトニアンも考える。

### 1.3.1 Lie-Suzuki-Trotter 公式

本節では、微小時間  $t$  に対して  $t^p$  まで時間発展演算子  $e^{-iHt}$  と一致する積公式  $T_p(t)$  を定める。積公式には複数の可能なものが存在するが、ここでは特に代表的なものとして Lie-Suzuki-Trotter 公式を導出する。その 1 次は前節で導入した  $T_1(t)$  で与えられ、2 次以降の一般の偶数  $p$  次に対しては漸化式で系統的に与えることができる。次数 1 のものを Lie-Trotter 公式、次数 2 以降のものを Suzuki 公式と呼び、合わせて Lie-Suzuki-Trotter 公式と呼ばれることが多い。

まず、時間発展演算子  $e^{-iHt}$  と  $t^2$  まで一致する 2 次の積公式  $T_2(t)$  を与える。その導出には  $T_1(t)$  で行ったのと同様に Taylor 展開を用いる。 $H = H_1 + H_2$  の場合に、(1.8) 式の  $T_1(t)$  よりも積の個数を増やして

$$T_2(t) = e^{-i\alpha t H_1} e^{-i\beta t H_2} e^{-i\gamma t H_1} \quad (1.39)$$

の形に  $T_2(t)$  を仮定して  $T_2(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^3)$  となるように実数  $\alpha, \beta, \gamma$  を定めよう。 $\mathcal{O}(t^2)$  項まで Taylor 展開を行うと、

$$\begin{aligned} & \left(1 - i\alpha t H_1 - \frac{\alpha^2 t^2}{2} H_1^2\right) \left(1 - i\beta t H_2 - \frac{\beta^2 t^2}{2} H_2^2\right) \left(1 - i\gamma t H_1 - \frac{\gamma^2 t^2}{2} H_1^2\right) \\ &= 1 - it(H_1 + H_2) - \frac{t^2}{2}(H_1 + H_2)^2 + \mathcal{O}(t^3). \end{aligned} \quad (1.40)$$

である。これが  $e^{-iHt}$  の  $\mathcal{O}(t^2)$  まで一致するためには係数比較をして

$$\mathcal{O}(t); \quad \alpha + \gamma = 1, \quad \beta = 1, \quad (1.41)$$

$$\mathcal{O}(t^2); \quad \frac{\alpha^2 + \gamma^2}{2} + \alpha\gamma = \frac{1}{2}, \quad \beta^2 = 1, \quad \alpha\beta = \beta\gamma = 1. \quad (1.42)$$

を満たせば良いことがわかり、この解は  $\alpha = \gamma = 1/2, \beta = 1$  である。よって、 $H = H_1 + H_2$  に対する 2 次の Suzuki 公式は

$$T_2(t) = e^{-iH_1 t/2} e^{-iH_2 t} e^{-iH_1 t/2} = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^3) \quad (1.43)$$

で与えられる。一般のハミルトニアンに対する 2 次の Suzuki 公式は以下の通りである。

#### Theorem 1.5. (2 次の Suzuki 公式)

ハミルトニアン  $H = \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} H_{\gamma}$  に対して

$$T_2(t) = \prod_{\gamma=1, \dots, \Gamma}^{\rightarrow} e^{-iH_{\gamma} t/2} \cdot \prod_{\gamma=1, \dots, \Gamma}^{\leftarrow} e^{-iH_{\gamma} t/2} = T_1(-t/2)^{\dagger} T_1(t/2) \quad (1.44)$$

と定める。このとき、

$$T_2(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^3) \quad (1.45)$$

である。

高次の積公式の漸化式的定義.— 次に一般の次数  $p$  に対して

$$T_p(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^{p+1}). \quad (1.46)$$

が成立するような積公式  $T_p(t)$  を定めよう。2 次公式で考えた (1.39) 式のようにその都度積の個数と係数を仮定して Taylor 展開を行えば原理的には導出できるが、一般の次数に対してはあまり賢くない方法である。そこで、漸化式を用いて

$$T_p(t) = \prod_{j=1}^J T_{p-1}(\alpha_{p,j} t), \quad \alpha_{p,j} \in \mathbb{R}. \quad (1.47)$$

の形を仮定することで高次の公式を導出しよう。 $T_{p-1}(t)$  が各項  $H_\gamma$  での時間発展演算子の積となるとき、 $T_p(t)$  も自明に  $H_\gamma$  での時間発展演算子の積となることが分かる。残る問題は、 $T_{p-1}(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^p)$  を満たすときに  $T_p(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^{p+1})$  を満たすよう個数  $J$  と係数  $\alpha_{p,j}$  をうまく定めることである。これは以下の定理により解決される。

**Theorem 1.6. (積公式の漸化式)**

次数  $p-1$  の積公式

$$T_{p-1}(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^p) \quad (1.48)$$

が与えられているものとする。(1.47) 式で定めた  $T_p(t)$  が  $T_p(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^{p+1})$  を満たすための十分条件は、

$$\sum_{j=1}^J \alpha_{p,j} = 1, \quad \sum_{j=1}^J (\alpha_{p,j})^p = 0 \quad (1.49)$$

である。

**Proof.**—  $\sum_j \alpha_{p,j} = 1$  を満たすとき、時間発展演算子  $e^{-iHt}$  を次のように Taylor 展開することができる；

$$\begin{aligned} e^{-iHt} &= \prod_{j=1}^J e^{-i\alpha_{p,j}tH} \\ &= \prod_{j=1}^J \left( \sum_{n_j=0}^{p-1} \frac{(-i\alpha_{p,j}tH)^{n_j}}{n_j!} + \frac{(-iHt)^p}{p!} (\alpha_{p,j})^p + \mathcal{O}(t^{p+1}) \right) \\ &= \prod_{j=1}^J \left( \sum_{n_j=0}^{p-1} \frac{(-i\alpha_{p,j}tH)^{n_j}}{n_j!} \right) + \sum_{j=1}^J \frac{(-iHt)^p}{p!} (\alpha_{p,j})^p + \mathcal{O}(t^{p+1}). \end{aligned} \quad (1.50)$$

一方で、 $T_{p-1}(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^{p+1})$  を満たす次数  $p-1$  の積公式  $T_{p-1}(t)$  については、ある行列  $A_p$  があって

$$T_{p-1}(t) = \sum_{n=0}^{p-1} \frac{(-iHt)^n}{n!} + A_p t^p + \mathcal{O}(t^{p+1}) \quad (1.51)$$

と展開できる。これを (1.47) 式の右辺に代入すると

$$\begin{aligned} T_p(t) &= \prod_{j=1}^J \left( \sum_{n_j=0}^{p-1} \frac{(-i\alpha_{p,j}tH)^{n_j}}{n_j!} + A_p (\alpha_{p,j}t)^p + \mathcal{O}(t^{p+1}) \right) \\ &= \prod_{j=1}^J \left( \sum_{n_j=0}^{p-1} \frac{(-i\alpha_{p,j}tH)^{n_j}}{n_j!} \right) + \sum_{j=1}^r A_p t^p (\alpha_{p,j})^p + \mathcal{O}(t^{p+1}) \end{aligned} \quad (1.52)$$

となる。よって  $T_p(t)$  に対する誤差項の大きさは  $\sum_j (\alpha_{p,j})^p = 0$  を満たすとき

$$\begin{aligned} T_p(t) - e^{-iHt} &= \left( A_p t^p - \frac{(-iHt)^p}{p!} \right) \sum_{j=1}^r (\alpha_{p,j})^p + \mathcal{O}(t^{p+1}) \\ &= \mathcal{O}(t^{p+1}) \end{aligned} \quad (1.53)$$

で表される。□

上記の定理によって  $T_2(t)$  から  $T_3, T_4, \dots$  と一般の次数の積公式を定められそうに思えるが、そうではない。(1.49) 式を満たす係数  $\alpha_{p,j}$  の実数解が  $p$  が奇数の時のみしか存在しないからである。す

なわち、 $T_2(t)$  が与えられた時に (1.47) 式の漸化式で  $T_3(t)$  を構成することはできるが、 $T_3(t)$  から  $T_4(t)$  を構成することはできない。この問題は以下の等価性定理 (equivalence theorem) で解決する。

**Theorem 1.7. (Equivalence theorem)**

次数  $(2q - 1)$  ( $q \in \mathbb{N}$ ) の積公式  $T_{2q-1}(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^{2q})$  が対称性条件

$$T_{2q-1}(t)T_{2q-1}(-t) = 1, \quad T_{2q-1}(0) = 1 \quad (1.54)$$

を満たすならば、 $T_{2q-1}(t)$  は次数  $2q$  の積公式でもある。すなわち、

$$T_{2q-1}(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^{2q+1}) \quad (1.55)$$

を満たす。

**Proof.**—  $F_{2q}$  を  $T_{2q-1}(t)$  を Taylor 展開した際の  $t^{2q}$  項の係数とすると、

$$T_{2q-1}(t) = e^{-iHt} + F_{2q} \cdot t^{2q} + \mathcal{O}(t^{2q+1}) \quad (1.56)$$

と表現できる。時間発展演算子のユニタリー性から次のような恒等式が成立する；

$$\begin{aligned} 1 &= e^{-iHt} e^{-iH(-t)} \\ &= (T_{2q-1}(t) - F_{2q} \cdot t^{2q}) (T_{2q-1}(-t) - F_{2q} \cdot t^{2q}) + \mathcal{O}(t^{2q+1}) \\ &= T_{2q-1}(t)T_{2q-1}(-t) - t^{2q}(F_{2q}T_{2q-1}(-t) + T_{2q-1}(t)F_{2q}) + \mathcal{O}(t^{2q+1}). \end{aligned} \quad (1.57)$$

対称性条件 (1.54) 式の第1式を用いると、上記の恒等式が成立するためには少なくとも

$$F_{2q}T_{2q-1}(-t) + T_{2q-1}(t)F_{2q} = \mathcal{O}(t) \quad (1.58)$$

でなければならない。これに対して  $t \rightarrow 0$  を取り、対称性条件 (1.54) 式の第2式を用いると  $F_{2q} = 0$  が言える。故に、 $T_{2q-1}(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^{2q+1})$  である。□

等価性定理の意味するところを、 $H = H_1 + H_2$ 、次数  $p = 1$  の簡単な場合で見よう。元々の1次の Lie-Trotter 公式  $T_1(t) = e^{-iH_2 t} e^{-iH_1 t}$  は対称性条件  $T_1(t)T_1(-t) = 1$  を満たさない。そこで、代わりに1次の積公式  $\tilde{T}_1(t)$  として、対称性条件

$$\tilde{T}_1(t)\tilde{T}_1(-t) = 1, \quad \tilde{T}_1(0) = 1 \quad (1.59)$$

を満たすようなものを探そう。実数  $\alpha, \beta$  を用いて

$$\tilde{T}_1(t) = e^{-i\alpha t H_1} e^{-i\beta t H_2} e^{-i\alpha t H_1} \quad (1.60)$$

の形で表せば、対称性条件を満たすことがわかる。これを Taylor 展開すると  $\tilde{T}_1(t) = 1 - 2i\alpha t H_1 - i\beta t H_2 + \mathcal{O}(t^2)$  より、 $\tilde{T}_1(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^2)$  となるためには  $\alpha = 1/2, \beta = 1$  と取れば良い。こうして構成された1次公式  $\tilde{T}_1(t)$  は Theorem 1.5 による2次の Suzuki 公式  $T_2(t)$  に他ならない。よって、 $\tilde{T}_1(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^3)$  である。Theorem 1.5 では Taylor 展開をもとに  $t^2$  項まで一致することを示したが、等価性定理により対称性条件を満たすように1次の積公式を構成すれば自動的に  $t^2$  項まで一致することが言える。

Theorem 1.6 による漸化式と Theorem 1.7 の等価性定理により、一般の次数  $p$  に対する Lie-Suzuki-Trotter 公式を

$$T_2(t) \xrightarrow{\text{漸化式}} T_3(t) \xrightarrow{\text{等価性}} T_4(t) \xrightarrow{\text{漸化式}} T_5(t) \rightarrow \dots \quad (1.61)$$

のように構成する。そのためには奇数次の  $T_{2q-1}(t)$  が対称性条件を満たすように  $T_{2q-2}(t)$  で表現される漸化式を上手く構成すれば良い。単純な場合として積の個数  $J = 5$  の場合を考え、(1.47) 式の漸化式の形を

$$T_{2q-1}(t) = [T_{2q-2}(\alpha_q t)]^2 T_{2q-2}(\beta_q t) [T_{2q-2}(\alpha_q t)]^2, \quad \alpha_q, \beta_q \in \mathbb{R} \quad (1.62)$$

と取ると、対称性条件を満たす。<sup>1</sup> あとは、 $T_{2q-1}(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^{2q})$  となるように Theorem 1.6 に従って実数  $\alpha_q, \beta_q$  を選択すれば良い。(1.49) 式から

$$4\alpha_q + \beta_q = 1, \quad 4(\alpha_q)^{2q-1} + (\beta_q)^{2q-1} = 0 \quad (1.64)$$

を満たせば十分であり、その解は

$$\alpha_q = \frac{1}{4 - 4^{\frac{1}{2q-1}}}, \quad \beta_q = -\frac{4^{\frac{1}{2q-1}}}{4 - 4^{\frac{1}{2q-1}}} \quad (1.65)$$

である。等価性定理により  $T_{2q}(t) = T_{2q-1}(t)$  であるので、結局一般の次数  $p$  に対する Lie-Suzuki-Trotter 公式は以下にまとめられる。

**Theorem 1.8. (Lie-Suzuki-Trotter 公式)**

ハミルトニアン  $H = \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} H_{\gamma}$  とする。積公式  $T_1(t), T_2(t)$  を

$$T_1(t) = e^{-iH_{\Gamma}t} \dots e^{-iH_1t}, \quad (1.66)$$

$$T_2(t) = e^{-iH_1t/2} \dots e^{-iH_{\Gamma}t/2} e^{-iH_{\Gamma}t/2} \dots e^{-iH_1t/2} \quad (1.67)$$

で定め、2 次以上の偶数次に対して

$$T_{2q}(t) = [T_{2q-2}(\alpha_q t)]^2 T_{2q-2}((1 - 4\alpha_q)t) [T_{2q-2}(\alpha_q t)]^2, \quad \alpha_q = \frac{1}{4 - 4^{1/(2q-1)}} \quad (1.68)$$

の漸化式で積公式を定めると、 $T_p(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^{p+1})$  である。

Lie-Suzuki-Trotter 公式を (1.37) 式のような形

$$T_{2q}(t) = \prod_{v=1}^V e^{-iH_{\gamma_v} \alpha_v t} \quad (1.69)$$

に展開する。このとき、積の個数  $V$  は漸化式を用いるたび 5 倍になるため

$$V = 2\Gamma \cdot 5^{q-1} \quad (1.70)$$

である。また、各係数  $\alpha_v$  の大きさは

$$|\alpha_q| = \left| \frac{1}{4 - 4^{1/(2q-1)}} \right| < \frac{1}{3}, \quad |1 - 4\alpha_q| = \left| \frac{4^{1/(2q-1)}}{4 - 4^{1/(2q-1)}} \right| < \frac{2}{3} \quad (1.71)$$

の積で与えられるため  $|\alpha_v| < (2/3)^q$  である。また、 $1 - 4\alpha_q < 0$  であるため  $\alpha_v$  中のうちいくつかは必ず負である。1.3.3 節で議論するように、次数  $p$  を上げると時間発展  $e^{-iHt}$  をシミュレートするための Trotter step 数  $r$  は減少するが、その分 1 Trotter step に含まれる層の数  $V$  は指数的に上昇してしまう。故に、現実的な範囲内で量子計算で利用される Lie-Suzuki-Trotter 公式の次数は高々  $p \in \mathcal{O}(1)$  である。

<sup>1</sup>対称性条件を満たす最も単純な場合の積の個数は  $J = 3$  であり、その場合漸化式は

$$T_{2q}(t) = T_{2q-1}(t) = T_{2q-2}(\alpha_q t) T_{2q-2}((1 - 2\alpha_q)t) T_{2q-2}(\alpha_q t) \quad (1.63)$$

となる。Theorem 1.6 から係数  $\alpha_q$  を決定すると  $\alpha_q = (2 - 2^{1/(2q-1)})^{-1}$  となるが、 $|\alpha_q| > 1$  となってしまう。すなわち、漸化式を繰り返すごとに時間  $t$  にかかる係数が指数的に発散してしまうために実用的ではない。 $J = 5$  と選択することで  $|\alpha_q|, |1 - 4\alpha_q| < 2/3$  となり係数の指数的発散を防げる。

**その他の積公式.**— ここでは Lie-Suzuki-Trotter 公式を取り上げたが、一般に Taylor 展開で  $\mathcal{O}(t^p)$  項まで  $e^{-iHt}$  と一致するようにすれば様々な積公式を構成できる。例えば、 $H = H_1 + H_2$  で与えられるとき

$$T_4(t) = e^{-i\frac{\alpha}{2}H_1} e^{-i\alpha H_2} e^{-i\frac{1-\alpha}{2}H_1} e^{-i(1-2\alpha)H_2} e^{-i\frac{1-\alpha}{2}H_1} e^{-i\alpha H_2} e^{-i\frac{\alpha}{2}H_1}, \quad \alpha = (2 - 2^{1/3})^{-1} \quad (1.72)$$

も対称性条件を満たす 4 次の積公式であり、Forest-Ruth-Suzuki 公式と呼ばれる。同じ 4 次の Lie-Suzuki-Trotter 公式では積の個数が 11 であるのに対し、Forest-Ruth-Suzuki 公式では積の個数が 7 でありその分だけ Trotter step 毎のゲート深さが浅くなるという利点がある。

### 1.3.2 誤差の交換子スケーリング

一般の次数  $p$  の積公式  $T_p(t)$  を用いて誤差  $\varepsilon$  以内で時間発展をシミュレートするとき、その計算コストは 1.2.2 節で議論したのと同様にその誤差の大きさ  $\|e^{-iHt} - T_p(t)\|$  によって決まる。ここではその上限について評価し、一般的な局所ハミルトニアンに対してどのようなスケーリングを持つか議論する。

**誤差の交換子スケーリング.**—  $H = \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} H_{\gamma}$  に対する次数  $p$  の一般の積公式

$$T_p(t) = \prod_{v=1}^V e^{-iH_{\gamma_v} \alpha_v t} \quad (1.73)$$

に対して、その誤差  $\|e^{-iHt} - T_p(t)\|$  を考える。今 Lie-Suzuki-Trotter 公式の例から、積の個数  $V$  は項数  $\Gamma$  に比例するとして

$$V = c_p \Gamma \quad (1.74)$$

とおき (Lie-Suzuki-Trotter の場合は  $c_p = 2 \cdot 5^{p/2-1}$ )、各係数  $\alpha_v$  は  $|\alpha_v| \leq 1$  を満たすものとする。Taylor 展開に基づく構成法から、(1.12) 式のように

$$\|e^{-iHt} - T_p(t)\| \leq \text{Const.} \times \left( \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} \|H_{\gamma}\| \cdot |t| \right)^{p+1} \quad (1.75)$$

という誤差 (1 ノルムスケーリング) が予想されるが、この式は誤差の大きさを過大評価している。なぜならば、 $H_1, H_2, \dots, H_{\Gamma}$  が互いに可換である場合に  $e^{-iHt}$  は  $T_p(t)$  と一致するが、この誤差の形はそのような場合でも 0 とならないからである。故に、一般の次数  $p$  の積公式  $T_p(t)$  についても誤差が (1.13) 式のように  $H_1, \dots, H_{\Gamma}$  の交換子で与えられること (交換子スケーリング, commutator scaling) が期待される。この期待は実際に正しく、Theorem 1.2 の拡張として以下が知られる。

#### Theorem 1.9. (積公式の誤差に対する交換子スケーリング)

(1.37) 式で定められる積公式  $T_p(t)$  が次数条件

$$T_p(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^{p+1}) \quad (1.76)$$

を満たすならば、その誤差は

$$\|e^{-iHt} - T_p(t)\| \leq 2(c_p)^{p+1} \sum_{\gamma_1, \dots, \gamma_{p+1}=1}^{\Gamma} \|[H_{\gamma_1}, [H_{\gamma_2}, \dots, [H_{\gamma_p}, H_{\gamma_{p+1}}]]]\| \cdot |t|^{p+1} \quad (1.77)$$

で抑えられる。

*Proof.*— ここでは証明の概略のみを記述するが、基本的には Theorem 1.2 の証明と同様である。(1.16) 式と同様にして誤差  $e^{-iHt} - T_p(t)$  は次のように表現できる;

$$\begin{aligned} e^{-iHt} - T_p(t) &= e^{-iHt}(1 - e^{iHt}T_p(t)) \\ &= -e^{-iHt} \int_0^t d\tau \frac{d}{d\tau} e^{iH\tau} T_p(\tau) \\ &\equiv -i \int_0^t d\tau e^{-iH(t-\tau)} T_p(\tau) \Delta_p(\tau), \end{aligned} \quad (1.78)$$

$$\Delta_p(\tau) \equiv T_p(\tau)^\dagger H T_p(\tau) - iT_p(\tau)^\dagger \frac{d}{d\tau} T_p(\tau). \quad (1.79)$$

時間発展演算子と積公式のユニタリー性より

$$\|e^{-iHt} - T_p(t)\| \leq \int_0^t d\tau \|\Delta_p(\tau)\| \quad (1.80)$$

であり、演算子  $\Delta_p(\tau)$  が誤差の大きさを与える尺度となる。演算子  $\Delta_p(\tau)$  は  $T_p(\tau)$  の定義 (1.37) を代入すれば

$$\Delta_p(\tau) = \left( \prod_{v=1}^{\Gamma} e^{i\text{ad}_{H_{\gamma_v}} \alpha_v \tau} \right) H - \sum_{v=1}^V \alpha_v \left( \prod_{v'=v+1}^V e^{i\text{ad}_{H_{\gamma_{v'}}} \alpha_{v'} \tau} \right) H_{\gamma_v} \quad (1.81)$$

とも表せる。ここで、 $e^{\tau \text{ad}_A} B$  に対する Taylor の定理

$$e^{\tau \text{ad}_A} B = B + \tau \text{ad}_A B + \cdots + \frac{(\tau \text{ad}_A)^{p-1}}{(p-1)!} B + \int_0^\tau d\tau' \frac{(\tau')^{p-1}}{(p-1)!} e^{(\tau-\tau') \text{ad}_A} (\text{ad}_A)^{p-1} B \quad (1.82)$$

を用いて剰余項が  $\mathcal{O}(\tau^p)$  となるように  $\Delta_p(\tau)$  を展開すると、

$$\Delta_p(\tau) = A_0 + A_1 \tau + \cdots + A_{p-1} \tau^{p-1} + A_p(\tau), \quad A_p(\tau) \in \mathcal{O}(\tau^p) \quad (1.83)$$

という形になるが、次数条件 (1.76) 式より  $A_0 = A_1 = \cdots = A_{p-1} = 0$  である。剰余項  $A_p(\tau)$  の各項は (1.82) 式より交換子  $[H_{\gamma_1}, [H_{\gamma_2}, \cdots, [H_{\gamma_p}, H_{\gamma_{p+1}}]]]$  に比例するため、そのノルムを取って積分を行うと (1.77) 式の誤差上限が得られる。□

**ハミルトニアン**の局所性と相互作用.— Theorem 1.9 で与えられる積公式の誤差上限がどのように系サイズ  $N$  に依存するかを調べたい。この  $N$  依存性はハミルトニアン  $H$  の相互作用がどのような局所性を持つか、どのような距離にまで及ぶかで決まる。そこで、1.1.2 節で議論したハミルトニアンの局所性についてより形式的に定義したのち、積公式の誤差の  $N$  依存性を導出する。

$N$  サイトの格子  $\Lambda = \{1, 2, \dots, N\}$  上のハミルトニアン  $H$  は一般に

$$H = \sum_{X \subset \Lambda} h_X, \quad (h_X \text{ は領域 } X \text{ にのみ作用}) \quad (1.84)$$

という形で表現できる。演算子  $h_X$  は領域  $X$  に含まれるサイト間の相互作用と言える。このとき、ハミルトニアンの局所性と有効距離について以下で定める。

**Definition 1.10. (局所性)**

ハミルトニアン  $H = \sum_X h_X$  について

$$h_X = 0, \quad \text{if } |X| > k \quad (1.85)$$

であるとき、 $k$ -local であるという。加えて、

- ある定数  $R > 0$  があって、

$$h_X = 0, \quad \text{if } r(X) > R \quad (1.86)$$

を満たすとき、有限距離相互作用を持つハミルトニアンであるという。

- 格子  $\Lambda$  上での2点  $i, j$  の距離を  $\text{dist}(i, j)$  と書く。ある定数  $A, \nu > 0$  があって、

$$\sum_{X: i, j \in X} \|h_X\| \leq A(\text{dist}(i, j) + 1)^{-\nu}, \quad \forall i, j \in \Lambda \quad (1.87)$$

を満たすとき、長距離相互作用を持つハミルトニアンであるという。

局所性は、相互作用が高々  $k$  体相互作用までしか持たないことを意味し、物理・化学における標準的な量子多体系では常に  $k \in \mathcal{O}(1)$  である。局所性自体は相互作用の届く距離を特徴づけない(無限距離でも良い)ので、以降の条件によって有限距離、長距離の相互作用を定めている。局所的なハミルトニアンの相互作用を特徴づけるもう一つの重要な量として以下を導入する。

**Definition 1.11. (Extensiveness)**

ハミルトニアン  $H = \sum_X h_X$  を考える。このとき、

$$J = \max_{i \in \Lambda} \left( \sum_{X \subset \Lambda: X \ni i} \|h_X\| \right) \quad (1.88)$$

をハミルトニアンのエクステンシブネス (extensiveness) と呼ぶ。格子  $\Lambda$  の空間次元が  $d$  であるとき、 $J$  は

$$J \in \begin{cases} \mathcal{O}(N^0) & (\text{有限距離相互作用の時}), \\ \mathcal{O}(N^0) & (\text{長距離相互作用かつ } \nu > d \text{ の時}), \\ \mathcal{O}(\log N) & (\text{長距離相互作用かつ } \nu = d \text{ の時}), \\ \mathcal{O}(N^{1-\nu/d}) & (\text{長距離相互作用かつ } \nu < d \text{ の時}) \end{cases} \quad (1.89)$$

を満たす。

*Proof.* —  $J$  のスケーリング (1.89) 式を示す。有限距離相互作用を持つ場合、 $\sum_{X: X \ni i} \|h_X\|$  はサイト  $i$  から高々距離  $R$  以内のサイト間の有限個の相互作用  $\|h_X\|$  の和であるため、 $J$  は系サイズ  $N$

に依存しない。一方で長距離相互作用を持つ場合には

$$\begin{aligned}
\sum_{X; X \ni i} \|h_X\| &\leq \sum_{j \in \Lambda} \sum_{X; X \ni i, j} \|h_X\| \\
&\leq \sum_{j \in \Lambda} \frac{A}{(\text{dist}(i, j) + 1)^\nu} \\
&\leq \text{Const.} \times \int_0^{L_\Lambda} dr \cdot r^{d-1} \frac{A}{(r+1)^\nu} \quad (L_\Lambda; \Lambda \text{ の一辺の長さ}) \\
&\leq \text{Const.} \times \begin{cases} (L_\Lambda)^0 & (\nu > d) \\ \log L_\Lambda & (\nu = d) \\ (L_\Lambda)^{d-\nu} & (\nu < d) \end{cases} \quad (1.90)
\end{aligned}$$

である。 $(L_\Lambda)^d \propto N$  であることを用いれば (1.89) 式であることが言える。□

エクステンシブネス  $J$  は、各サイト  $i$  毎にそれが関与する相互作用の大きさ  $\|h_X\|$  を足したものの最大である。すなわち、ハミルトニアン  $H$  において 1 サイトあたりの最大エネルギーを与える量となっている。下で議論するように、積公式の誤差においてハミルトニアンの特徴的なエネルギースケールとして機能する。

**誤差の系サイズ依存性.**— さて、ハミルトニアンの局所性とエクステンシブネスを定めたことで Theorem 1.9 による積公式の誤差の系サイズ依存性を具体的に調べることができる。まず、(1.77) 式中における多重交換子の大きさは次のように上限を求めることができる。

**Proposition 1.12. (交換子スケーリングの系サイズ依存性)**

$H = \sum_X h_X$  に対して、積公式の構成に行う分解  $H = \sum_{\gamma=1}^\Gamma H_\gamma$  の各項  $H_\gamma$  は  $\{h_X\}$  の部分 and であるとする。この時、

$$\sum_{\gamma_1, \dots, \gamma_{p+1}=1}^\Gamma \|[H_{\gamma_1}, [H_{\gamma_2}, \dots, [H_{\gamma_p}, H_{\gamma_{p+1}}]]]\| \leq p!(2kJ)^p NJ \quad (1.91)$$

である。

*Proof.*— 各項  $H_\gamma$  が  $h_X$  の部分 and であることより

$$\sum_{\gamma_1, \dots, \gamma_{p+1}=1}^\Gamma \|[H_{\gamma_1}, [H_{\gamma_2}, \dots, [H_{\gamma_p}, H_{\gamma_{p+1}}]]]\| \leq \sum_{X_1, \dots, X_{p+1}} \|[h_{X_1}, [h_{X_2}, \dots, [h_{X_p}, h_{X_{p+1}}]]]\| \quad (1.92)$$

が成立する。右辺の交換子のノルムの総和について、まず  $p=1$  の場合を考えよう。交換子  $[h_{X_1}, h_{X_2}]$  は作用する領域  $X_1, X_2$  が重なる時のみ非ゼロになることから、以下のように評価できる；

$$\begin{aligned}
\sum_{X_1, X_2} \|[h_{X_1}, h_{X_2}]\| &= \sum_{X_2 \subset \Lambda} \sum_{X_1; X_1 \cap X_2 \neq \emptyset} \|[h_{X_1}, h_{X_2}]\| \\
&\leq \sum_{X_2 \subset \Lambda} \sum_{i \in X_2} \sum_{X_1; X_1 \ni i} 2\|h_{X_1}\| \cdot \|h_{X_2}\| \\
&\leq 2kJ \sum_{X_2 \subset \Lambda} \|h_{X_2}\| \\
&\leq 2kJ \sum_{j \in \Lambda} \sum_{X_2; X_2 \ni j} \|h_{X_2}\| \\
&\leq 2kJ \cdot NJ. \quad (1.93)
\end{aligned}$$

3行目の不等号では、 $J$  の定義 (1.88) 式と  $\sum_{i \in X_2}$  が  $X_2$  のサイト数である  $k$  で抑えられることを利用した。一般の次数  $p$  に対しても同様に計算できる。多重交換子  $[h_{X_2}, [h_{X_3}, \dots, [h_{X_p}, h_{X_{p+1}}]]]$  の作用する領域は  $X_2 \cup X_3 \cup \dots \cup X_{p+1}$  の高々  $pk$  サイトであるので、

$$\begin{aligned}
& \sum_{X_1, \dots, X_{p+1}} \|[h_{X_1}, [h_{X_2}, \dots, [h_{X_p}, h_{X_{p+1}}]]]\| \\
&= \sum_{X_2, \dots, X_{p+1}} \sum_{X_1; X_1 \cap (X_2 \cup \dots \cup X_{p+1}) \neq \emptyset} \|[h_{X_1}, [h_{X_2}, \dots, [h_{X_p}, h_{X_{p+1}}]]]\| \\
&\leq \sum_{X_2, \dots, X_{p+1}} \sum_{i \in X_2 \cup \dots \cup X_{p+1}} \sum_{X_1; X_1 \ni i} 2\|h_{X_1}\| \cdot \|[h_{X_2}, \dots, [h_{X_p}, h_{X_{p+1}}]]]\| \\
&\leq p(2kJ) \sum_{X_2, \dots, X_{p+1}} \|[h_{X_2}, \dots, [h_{X_p}, h_{X_{p+1}}]]]\| \tag{1.94}
\end{aligned}$$

が得られる。これを漸化式的に繰り返して最後に (1.93) 式を用いると、

$$\sum_{\gamma_1, \dots, \gamma_{p+1}=1}^{\Gamma} \|[H_{\gamma_1}, [H_{\gamma_2}, \dots, [H_{\gamma_p}, H_{\gamma_{p+1}}]]]\| \leq p!(2kJ)^p NJ \tag{1.95}$$

が得られる。  $\square$

この帰結からハミルトニアン  $H$  の局所性が  $k$ 、エクステンシブネスが  $J$  である時、Theorem 1.9 による次数  $p$  の積公式  $T_p(t)$  の誤差は

$$\|e^{-iHt} - T_p(t)\| \leq 2(c_p)^p p!(2kJ)^p NJ t^{p+1} \in \mathcal{O}((Jt)^{p+1}N) \tag{1.96}$$

である。最後の次数条件は、 $k, p \in \mathcal{O}(1)$  であることを利用した。

### 1.3.3 量子アルゴリズムと計算コスト

次数  $p$  の積公式  $T_p(t)$  を用いて、微小とは限らない時間  $t$  の時間発展  $e^{-iHt}$  をシミュレートする方法と計算コストを考えよう。基本的には1次の Lie-Trotter 公式 (1.2.2 節) によるものと同じであるが、1.3.2 節で計算した誤差が小さくなっていることに由来して目的の誤差  $\varepsilon$  を達成するための計算コストが減少する。

#### 量子アルゴリズム.—

1. 時間  $t$  を  $r$  分割し、1ステップの積公式の誤差が

$$\|e^{-iHt/r} - T_p(t/r)\| \leq \frac{\varepsilon}{r} \tag{1.97}$$

を満たすよう分割数  $r$  を設定する。(1.91) 式より、

$$2(c_p)^p p!(2kJ)^p NJ \left(\frac{t}{r}\right)^{p+1} \leq \frac{\varepsilon}{r} \tag{1.98}$$

を満たせば十分で、

$$r = \left\lceil 2c_p k J t \left(\frac{2p! N J t}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}} \right\rceil \in \mathcal{O}\left(J t \left(\frac{N J t}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}\right) \tag{1.99}$$

2. 各時間幅  $t/r$  の時間発展を近似する積公式  $T_p(t/r)$  を量子回路で構成する。
3. 上記の回路を  $r$  回繰り返す。

**計算コスト.**— 量子回路では、任意の  $\mathcal{O}(1)$ -qubit ゲートを基本ゲートとして利用できるとし、それに基づいて回路の深さ、必要な量子ゲート数を評価する。なお、任意の  $\mathcal{O}(1)$ -qubit ゲートは Solovay-Kitaev アルゴリズムにより  $\text{polylog}(1/\varepsilon)$  個の 1,2-qubit の基本ゲートを用いて誤差  $\varepsilon$  以内で実装可能である。故に計算コストの評価方法を 1,2-qubit ゲートの基本ゲートを用いるとしても、計算コストは下記のものより  $\text{polylog}$  の範囲内ではかぎらない。ハミルトニアン  $H$  が有限距離相互作用と長距離相互作用を持つ場合で異なるので、以下のように場合分けをして考える。

- 有限距離相互作用を持つ場合

局所性  $k$ 、相互作用の届く距離  $R$  がともに定数である時、 $H = \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} H_{\gamma}$  における各項  $H_{\gamma}$  を重ならない領域  $X$  に作用する相互作用  $h_X$  の和と取れば、 $\Gamma \in \mathcal{O}(1)$  としつつ  $e^{-iH_{\gamma}\alpha vt}$  を深さ 1 の量子回路で実装できる。また、(1.89) より  $J \in \mathcal{O}(N^0)$  である。

- 回路深さ

$$c_p \Gamma r \in \mathcal{O}\left(Jt \left(\frac{NJt}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}\right) = \mathcal{O}\left(t \left(\frac{Nt}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}\right). \quad (1.100)$$

- 量子ゲート数

各項  $H_{\gamma}$  に含まれる相互作用  $h_X$  の個数は高々  $N/k$  であるので

$$\frac{N}{k} \cdot c_p \Gamma r \in \mathcal{O}\left(Nt \left(\frac{Nt}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}\right). \quad (1.101)$$

- 長距離相互作用を持つ場合

ハミルトニアン  $H = \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} H_{\gamma}$  の各項  $H_{\gamma}$  を長距離相互作用項  $h_X$  とすると  $\Gamma \in \mathcal{O}(N^k)$  である。全ゲート数は  $c_p \Gamma r$  であるのに対し、回路深さについては  $k$  体の相互作用項  $h_X$  を並進移動した  $N$  通りの時間発展演算子  $e^{-ih_X\alpha vt}$  を並列化できるのでその  $\mathcal{O}(1/N)$  倍となる。

- 回路深さ

$$\frac{1}{N} \cdot c_p \Gamma r \in \mathcal{O}\left(N^{k-1} Jt \left(\frac{NJt}{\varepsilon}\right)\right) \quad (1.102)$$

- 量子ゲート数

$$c_p \Gamma r \in \mathcal{O}\left(N^k Jt \left(\frac{NJt}{\varepsilon}\right)\right) \quad (1.103)$$

次数  $p$  の積公式  $T_p(t)$  を用いて系サイズ  $N$  を持つ量子多体系の時刻  $t$  における時間発展を誤差  $\varepsilon$  以内で計算する量子アルゴリズムの計算コストを表 1.1 にまとめる。長距離相互作用を持つ系に関してはエクステンシブネス  $J$  に (1.89) 式を代入している。次数  $p$  を増やすとともに回路深さ、量子ゲート数は系サイズ  $N$ 、時刻  $t$ 、許容誤差  $\varepsilon$  のいずれについても減少することが分かる。

特に有限距離相互作用を持つハミルトニアンに対して量子ゲート数のスケーリングは次数  $p$  を大きくすると  $Nt$  というスケーリングに従う。このスケーリングは、一般の局所ハミルトニアンをシミュレートするのに必要な量子アルゴリズムの理論限界 [HHKL21] であり、積公式の基づく量子アルゴリズムは系サイズ  $N$ 、時刻  $t$  については理論上最高速に近い効率を達成している。ただし留意すべき点として、表 1.1 では  $p \in \mathcal{O}(1)$  とすることによりファクター  $c_p$  [= 積公式 (1.37) における

	有限距離相互作用 を持つ系	長距離相互作用を持つ系	
		$\nu \geq d$	$\nu < d$
回路深さ	$\mathcal{O}\left(t\left(\frac{Nt}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}\right)$	$\tilde{\mathcal{O}}\left(N^{k-1}t\left(\frac{Nt}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}\right)$	$\mathcal{O}\left(N^{k-\frac{\nu}{d}}t\left(\frac{N^{2-\frac{\nu}{d}}t}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}\right)$
量子ゲート数	$\mathcal{O}\left(Nt\left(\frac{Nt}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}\right)$	$\tilde{\mathcal{O}}\left(N^k t\left(\frac{Nt}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}\right)$	$\mathcal{O}\left(N^{k+1-\frac{\nu}{d}}t\left(\frac{N^{2-\frac{\nu}{d}}t}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}\right)$

表 1.1: 一般の次数  $p$  の積公式に基づくハミルトニアンシミュレーションのコスト

繰り返し数  $c_p = V/\Gamma$  が隠れている。一般的な積公式では  $c_p \in e^{\mathcal{O}(p)}$  (Lie-Suzuki-Trotter 公式では  $c_p = 2 \cdot 5^{p/2-1}$ ) であるため、回路深さ、量子ゲート数は次数  $p$  について指数的に増大する。そのため、あくまで表 1.1 は  $p \in \mathcal{O}(1)$  の下での結果であり、実際に  $p \rightarrow \infty$  として理論限界  $\mathcal{O}(Nt)$  の量子ゲート数を達成できるわけではない。また、積公式に基づく量子アルゴリズムの短所として、その回路深さ、量子ゲート数が許容誤差の逆数  $1/\varepsilon$  について多項式的に増大し、精密な計算に多大なコストを要する点である。その欠点に対しては、 $\mathcal{O}(\log(1/\varepsilon))$  の計算コストを達成する量子特異値変換という代替の量子アルゴリズムや、積公式を発展させて  $\text{polylog}(1/\varepsilon)$  のコストを達成する複数積公式 (詳細は次節) などが提案されて部分的に解決されている。

**誤差の交換子スケーリングの重要性.**— 積公式によるハミルトニアンシミュレーションは量子アルゴリズムとして最も長い歴史を持つものの一つである [Llo96] が、いまだに時間発展を計算する既存のアルゴリズムの中で特にコストの系サイズ  $N$  依存性が良いアルゴリズムとなっている。この性質は 1.3.2 節で議論した積公式の誤差が交換子スケーリングであることに由来している。例えば交換子スケーリングが存在せず、積公式の誤差が (1.75) 式のような 1-ノルムスケーリングで与えられると仮定しよう。このとき、

$$\begin{aligned}
\sum_{\gamma=1}^{\Gamma} \|H_{\gamma}\| &= \sum_{X \subset \Lambda} \|h_X\| \\
&\leq \sum_{i \in \Lambda} \sum_{X: X \ni i} \|h_X\| \\
&\leq NJ
\end{aligned} \tag{1.104}$$

である。故に積公式の誤差上限は  $\|e^{-iHt} - T_p(t)\| \in \mathcal{O}((NJt)^{p+1})$  となり、これに基づき回路深さと量子ゲート数を計算すると有限距離相互作用を持つハミルトニアンの場合

$$\text{回路深さ; } \mathcal{O}\left(Nt\left(\frac{Nt}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}\right), \quad \text{量子ゲート数; } \mathcal{O}\left(N^2t\left(\frac{Nt}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}\right) \tag{1.105}$$

となる。表 1.1 と比べて  $N$  倍だけ悪くなっており、長距離相互作用系の場合も同様の結果である。以上から、積公式の誤差の交換子スケーリングは量子アルゴリズムのコストが良いサイズ依存性を持つ為には本質的に重要な要素である。とはいうものの一般の次数  $p$  の積公式についてその性質が明らかになったのはごく最近のこと [CST<sup>+</sup>21] である。

## References

- [CST<sup>+</sup>21] Andrew M. Childs, Yuan Su, Minh C. Tran, Nathan Wiebe, and Shuchen Zhu. Theory of trotter error with commutator scaling. *Phys. Rev. X*, 11:011020, Feb 2021.

- [HHKL21] Jeongwan Haah, Matthew B Hastings, Robin Kothari, and Guang Hao Low. Quantum algorithm for simulating real time evolution of lattice Hamiltonians. *SIAM J. Comput.*, pages FOCS18–250–FOCS18–284, January 2021.
- [Llo96] S Lloyd. Universal Quantum Simulators. *Science*, 273:1073–1078, 1996.
- [LR72] Elliott H Lieb and Derek W Robinson. The finite group velocity of quantum spin systems. *Commun. Math. Phys.*, 28(3):251–257, September 1972.



## 第2章 トロッター分解の派生と応用

Trotter 分解によるハミルトニアンシミュレーションは、量子多体系に対する量子アルゴリズムとして最も歴史の長い手法の一つである。それ故に、計算リソースを改善する派生手法や量子開放系のダイナミクスをシミュレートする手法など様々な進展を遂げてきた。ここでは、独断と偏見で選んだ幾つかの代表的な量子アルゴリズムを解説する。

### 2.1 複数積公式 (Multi-product formula)

2026.04.01 追記: 複数積公式の誤差とコストの証明において、BCH formula に基づく (2.28), (2.29) 式の誤差上限を利用しています。同証明を行った論文 [AAT24] の著者の D. An 氏に確認しましたが、この誤差上限だと Trotter 分解のような交換子スケーリングによる良い計算コストが得られず、表 2.1 のような複数積公式のコストは得られません。同論文の証明 (=以下のノート) の過ちを修正し正しく複数積公式の誤差上限とコストを導出した研究を本ノートの著者である水田が行いましたのでそちらをご参照ください [Miz26]。なお、証明の過程は誤っていましたが、以下のノートに記された複数積公式の実装方法および結果の計算コストのスケーリングは正しいです。

Trotter 分解による量子アルゴリズムは、その量子ゲート数が許容誤差  $\varepsilon$  の逆数  $1/\varepsilon$  について多項式的に増大するという欠点を抱える。一方で、近年構成されたユニタリ線型結合法や量子特異値変換のような量子アルゴリズムは、その計算コストが  $\mathcal{O}(\log(1/\varepsilon))$  と許容誤差に関して指数的に良い反面、系サイズ  $N$  に関する依存性は Trotter 分解よりも悪いという特徴を持つ。複数積公式 (Multi-product formula, MPF) は、Trotter 分解とユニタリ線型結合法を組み合わせた手法で両者の欠点を補完しつつ系サイズ  $N$  についても許容誤差  $\varepsilon$  についても良いスケーリングのコストを持つ。

#### 2.1.1 定義とアイデア

ユニタリ線型結合法 (Linear combination of unitaries, LCU) とは、その名の通りユニタリー演算子  $U_j$  の線型結合

$$\sum_j c_j U_j, \quad c_j \in \mathbb{C} \quad (2.1)$$

を量子回路上で実装する量子アルゴリズム (詳細は 2.1.3 節参照) である。ハミルトニアンシミュレーションにおいては、時間発展演算子  $e^{-iHt}$  の Taylor 展開

$$e^{-iHt} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-it)^n}{n!} H^n \quad (2.2)$$

を (2.1) 式で表示し実装する。許容誤差  $\varepsilon$  について  $\mathcal{O}(\log(1/\varepsilon))$  のコストを達成するが、系サイズ  $N$  に関するスケーリングは Trotter 分解の方が良い。これは、1.3.2 節で議論した交換子スケーリングのおかげである。複数積公式では (2.1) 式のユニタリ演算子  $U_j$  を Trotter 分解としたユニタリ線型結合を利用することで、両者の欠点を補完しそのコストは良い  $N$  依存性と  $\varepsilon$  依存性を両立することができる。早速、以下によって複数積公式を定義しよう。

**Definition 2.1. (複数積公式, Multi-product formula)**

$T_p(t)$  を次数  $p$  の積公式とする。このとき、次数  $p$ , 項数  $J$  の複数積公式を

$$M_{pJ}(t) = \sum_{j=1}^J c_j \{T_p(t/k_j)\}^{k_j}, \quad c_j \in \mathbb{C}, \quad k_j \in \mathbb{N} \quad (2.3)$$

で定める。

(2.3) 式において  $\{T_p(t/k_j)\}^{k_j} \simeq (e^{-iHt/k_j})^{k_j} = e^{-iHt}$  より、 $M_{pJ}(t)$  は  $e^{-iHt}$  の様々な近似を重み  $c_j$  で足し合わせたものを意味する。上記の定義の時点では、項数  $J$ , 重み  $c_j \in \mathbb{C}$ , 時間の分割数  $k_j \in \mathbb{N}$  は任意であるが、量子アルゴリズムに利用する上では複数積公式  $M_{pJ}(t)$  が普通の積公式  $T_p(t)$  よりも精度よく  $e^{-iHt}$  を近似するようにそれらを設定する。少し雑にアイデアを説明すると、 $\{T_p(t/k_j)\}^{k_j}$  は微小な  $t$  で  $e^{-iHt}$  を近似することから

$$\{T_p(t/k_j)\}^{k_j} = e^{-iHt} + A_1(k_j)t + A_2(k_j)t^2 + \dots + \quad (2.4)$$

と多項式展開できるだろう。 $A_l(k_j)$  は分割数  $k_j$  には依存するが時間  $t$  には依存しない定数行列である。これを重み  $c_j$  で足し合わせると、

$$M_{pJ}(t) = \left( \sum_{j=1}^J c_j \right) e^{-iHt} + \underbrace{\sum_{l=1}^{J-1} \sum_{j=1}^J c_j A_l(k_j) t^l}_{J-1 \text{ 個}} + \sum_{j=1}^J c_j A_J(k_j) t^J + \dots \quad (2.5)$$

となる。独立な  $J$  個のパラメータ  $\{c_j\}$  があるとき、

$$\sum_{j=1}^J c_j = 1, \quad \sum_{j=1}^J c_j A_l(k_j) = 0 \quad (l = 1, 2, \dots, J-1) \quad (2.6)$$

の  $J$  個の拘束条件を満たすような  $\{c_j\}$  を選択できる。このとき、 $M_{pJ}(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^J)$  となり線型結合の個数  $J$  を増やせば元々の積公式の近似精度  $T_p(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^p)$  を更に改善することができる [ただし、実際の複数積公式の表式や近似精度は (2.5) 式とは少し異なる]。このように多項式近似されたものを線型結合によって誤差の低次項を相殺して近似精度を上げる手法は一般に Richardson 補間 (Richardson extrapolation) と呼ばれ、複数積公式以外にも数値積分や量子エラー抑制など広範な分野で利用される。1.3.3 節の Trotter 分解で議論したように、時間発展演算子  $e^{-iHt}$  に対する誤差が計算コストを決定する。従って、複数積公式によってより良い近似精度を達成することで計算コストも Trotter 分解よりも改善されることとなる。

以降の節では、まず 2.1.2 節で (2.5) 式の正確な表式を導出することで精度の良い複数積公式を与える  $c_j, k_j$  を決定すると同時に、複数積公式の誤差を評価する。2.1.3 節では複数積公式を量子計算機上で実装するためのユニタリ線型結合法を議論し、2.1.4 節でその計算コストを与える。

## 2.1.2 複数積公式の係数決定と誤差評価

まず、複数積公式  $M_{p,J}(t)$  が時間発展演算子  $e^{-iHt}$  を高い精度で近似するための係数  $c_j \in \mathbb{C}$ , 分割数  $k_j \in \mathbb{N}$  [(2.3) 式] を決定しよう。その為には、(2.4) 式で説明したように誤差  $\{T_p(t/k_j)\}^{k_j} - e^{-iHt}$  の  $t$  に関する多項式展開を導出する必要がある。以降では簡単のために、次数  $p$  は偶数として (2.3) 式で用いる積公式  $T_p(t)$  は対称性条件  $T_p(-t)^\dagger = T_p(t)$  (1.3.1 節参照) を満たすものを採用する。

次数  $p$  の積公式の誤差は対称性条件を満たすとき Theorem 1.7 により誤差の偶数次の項は消え、

$$T_p(t/k_j) = e^{-iHt/k_j} + A_{p+1} \left(\frac{t}{k_j}\right)^{p+1} + A_{p+3} \left(\frac{t}{k_j}\right)^{p+3} + \dots \quad (2.7)$$

のように展開できる。ただし、この表式の両辺を  $k_j$  乗して (2.4) 式の形に直すのは煩雑である。そこで、積公式のもう一つの誤差表示の方法として以下を利用する。

**Theorem 2.2. (Magnus 展開)**

$T_p(t)$  を偶数次  $p$  の対称性条件を満たす積公式とする。このとき、十分小さい  $t$  で

$$T_p(t) = e^{-iHt - iE(t)}, \quad E(t) = E_{p+1}t^{p+1} + E_{p+3}t^{p+3} + \dots + \quad (2.8)$$

となるエルミート演算子  $E(t) \in \mathcal{O}(t^{p+1})$  が存在する。

*Proof.*— ここでは簡単のため  $H = H_1 + H_2$  の次数 2 の積公式  $T_2(t) = e^{-iH_1t/2}e^{-iH_2t}e^{-iH_1t/2}$  に絞って示すが、一般の場合も同様である。行列指数関数に対する Baker-Campbell-Hausdorff 公式

$$e^A e^B = e^{A+B + \frac{1}{2}[A,B] + \frac{1}{12}[A-B, [A,B]] + \dots} \quad (2.9)$$

を用いると、

$$\begin{aligned} T_2(t) &= \left( e^{-iH_1t/2} e^{-iH_2t/2} \right) \left( e^{-iH_2t/2} e^{-iH_1t/2} \right) \\ &= e^{-iHt/2 - \frac{1}{4}[H_1, H_2]t^2 + \mathcal{O}(t^3)} e^{-iHt/2 + \frac{1}{4}[H_2, H_1]t^2 + \mathcal{O}(t^3)} \\ &= e^{-iHt + \mathcal{O}(t^3)} \end{aligned} \quad (2.10)$$

である。よって、十分小さな  $t$  に対して  $T_2(t) = e^{-iHt - iE(t)}$  を満たすような展開

$$E(t) = E_3t^3 + E_4t^4 + \dots + \quad (2.11)$$

が存在し、 $T_2(t)$  のユニタリー性から  $E(t)$  はエルミートである。また対称性条件  $T_2(-t)^\dagger = T_2(t)$  より

$$\begin{aligned} I &= T_2(-t)T_2(t) \\ &= e^{iHt - iE(-t)} e^{-iHt - iE(t)} \end{aligned} \quad (2.12)$$

が任意の  $t$  で成立する。故に  $E(-t) = -E(t)$  が満たされる必要があり  $E_4 = E_6 = \dots = 0$  となる。

□

上記の展開は Magnus 展開とも呼ばれ、指数に現れる演算子  $E(t)$  も積公式  $T_p(t)$  の誤差の尺度と言える。Magnus 展開を用いることで複数積公式中の  $\{T_p(t/k_j)\}^{k_j}$  を用意に計算することができて

$$\begin{aligned} \{T_p(t/k_j)\}^{k_j} &= \left\{ e^{-iHt/k_j - iE(t/k_j)} \right\}^{k_j} \\ &= \exp \left( -iHt - i \sum_{q \in 2\mathbb{N}+1} E_q \frac{t^q}{(k_j)^{q-1}} \right) \end{aligned} \quad (2.13)$$

となる (ただし、 $E_3 = E_5 = \dots = E_{p-1} = 0$  である)。次に、Magnus 展開で得られた表式を (2.4) 式のように表現するために以下の関係式を用いる。

**Proposition 2.3.**

行列  $A, B$  に対して

$$e^{-i(A+B)} = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_0^1 ds_n \cdots \int_0^{s_2} dt_1 e^{-iA(1-s_n)} B e^{-iA(s_n-s_{n-1})} B \cdots e^{-iA(s_2-s_1)} B e^{-iAs_1}. \quad (2.14)$$

**Proof.**—  $U_I(t) = e^{iAt} e^{-i(A+B)t}$  とすると、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} U_I(t) &= e^{iAt} (-iB) e^{-i(A+B)t} \\ &= -iB_I(t) U_I(t), \quad B_I(t) = e^{iAt} B e^{-iAt}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

この方程式と初期条件  $U_I(0) = I$  を満たす  $U_I(t)$  は時間依存するハミルトニアン  $B_I(t)$  下での時間発展演算子であるので Dyson 級数展開を用いて

$$U_I(t) = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_0^t dt_n \cdots \int_0^{t_2} dt_1 B_I(t_n) \cdots B_I(t_1) \quad (2.16)$$

が得られる。 $U_I(1) = e^{iA} e^{-i(A+B)}$  を代入して  $e^{-i(A+B)}$  について整理すれば (2.14) 式が得られる。  
□

この Proposition を (2.13) 式に適用しよう。 $A = Ht$ ,  $B = \sum_q E_q t^q / (k_j)^{q-1}$  を代入すれば、

$$\{T_p(t/k_j)\}^{k_j} = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_0^1 ds_n \cdots \int_0^{s_2} ds_1 \prod_{n'=1}^n \left( e^{-iHt(s_{n'+1}-s_{n'})} \sum_{q \in 2\mathbb{N}+1} E_q \frac{t^q}{(k_j)^{q-1}} \right) e^{-iHts_1} \quad (2.17)$$

が得られる ( $s_{n+1} = 1$  とする)。上記の和で  $n = 1$  に対応する項は  $e^{-iHt}$  そのものであり、 $n \geq 2$  に対応する項は (2.4) 式中で  $t$  について多項式展開で表現される項である。(2.4) 式の形で表現されるようにさらに計算を行うと、

$$\begin{aligned} \{T_p(t/k_j)\}^{k_j} &= \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_0^1 ds_n \cdots \int_0^{s_2} ds_1 \sum_{\substack{q_1, \dots, q_n \in 2\mathbb{N}+1 \\ q_1 + \dots + q_n = q+n-1}} \prod_{n'=1}^n \left( e^{-iHt(s_{n'+1}-s_{n'})} \frac{E_{q_{n'}} t^{q_{n'}}}{(k_j)^{q_{n'}-1}} \right) e^{-iHts_1} \\ &= e^{-iHt} + \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \sum_{q \in 2\mathbb{N}+2n-1} \frac{t^{q+n-1}}{(k_j)^{q-1}} \\ &\quad \times \sum_{\substack{q_1, \dots, q_n \in 2\mathbb{N}+1; \\ q_1 + \dots + q_n = q+n-1}} \int_0^1 ds_n \cdots \int_0^{s_2} ds_1 \prod_{n'=1}^n \left( e^{-iHt(s_{n'+1}-s_{n'})} E_{q_{n'}} \right) e^{-iHts_1} \\ &\equiv e^{-iHt} + \sum_{q \in 2\mathbb{N}+1} \frac{t^q}{(k_j)^{q-1}} \tilde{E}_q(t), \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\tilde{E}_q(t) = \sum_{n=\frac{q+1}{2}}^{\infty} t^{n-1} \sum_{\substack{q_1, \dots, q_n \in 2\mathbb{N}+1; \\ q_1 + \dots + q_n = q+n-1}} \int_0^1 ds_n \cdots \int_0^{s_2} ds_1 \prod_{n'=1}^n \left( e^{-iHt(s_{n'+1}-s_{n'})} E_{q_{n'}} \right) e^{-iHts_1} \quad (2.19)$$

となる。ここで  $t \rightarrow 0$  で  $\tilde{E}_q(t) \rightarrow 0$  であるので  $\tilde{E}_q(t)$  は  $t = 0$  近傍で特異ではない  $o(t^0)$  の関数である。故に、(2.18) 式が (2.4) 式に相当する展開である。以上より、複数積公式における係数  $\{c_j\}$  と分割数  $\{k_j\}$  は以下のように決定できる。

**Theorem 2.4. (複数積公式の係数と分割数)**

(2.3) 式で定まる複数積公式  $M_{pJ}(t)$  における係数  $\{c_j\}_{j=1}^J$  と分割数  $\{k_j\}_{j=1}^J$  を以下で決定する:

$$\{k_j\}_{j=1}^J; \text{ 互いに相異なる実数の組,} \quad (2.20)$$

$$\{c_j\}_{j=1}^J; \{k_j\} \text{ で決まる以下の連立方程式の解,} \quad (2.21)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ (k_1)^{-2} & (k_2)^{-2} & \cdots & (k_J)^{-2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (k_1)^{-2J+2} & (k_2)^{-2J+2} & \cdots & (k_m)^{-2J+2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_J \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

このとき、複数積公式  $M_{pJ}(t)$  は

$$M_{pJ}(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^{2J+1}) \quad (2.23)$$

を満たす。

**Proof.**—  $\{T_p(t/k_k)\}^{k_j}$  が (2.18) 式で書けることにより、

$$\begin{aligned} M_{pJ}(t) &= \sum_{j=1}^J c_j \{T_p(t/k_k)\}^{k_j} \\ &= \left( \sum_{j=1}^J c_j \right) e^{-iHt} + \sum_{q \in 2\mathbb{N}+1} \left( \sum_{j=1}^J \frac{c_j}{(k_j)^{q-1}} \right) t^q \tilde{E}_q(t) \end{aligned} \quad (2.24)$$

となる。ここで、

$$\sum_{j=1}^J c_j = 1, \quad \sum_{j=1}^J \frac{c_j}{(k_j)^q} = 1 \quad (q = 2, 4, \dots, 2J-2) \quad (2.25)$$

を満たすように係数  $\{c_j\}_j$  と分割数  $\{k_j\}_j$  を定めよう。これは、条件式 (2.22) に他ならない。なお、 $\{k_j\}_j$  に関する条件式 (2.22) はこの連立方程式が唯一解  $\{c_j\}_j$  を持つための必要十分条件である。このとき (2.24) 式を計算すると、

$$\begin{aligned} M_{pJ}(t) &= e^{-iHt} + \sum_{q \in 2\mathbb{N}+2J-1} \left( \sum_{j=1}^J \frac{c_j}{(k_j)^{q-1}} \right) t^q \tilde{E}_q(t) \\ &\in e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^{2J+1}) \end{aligned} \quad (2.26)$$

が得られる。□

以上の定理により Trotter 分解に対して適切に線型結合を構成することで、時間発展演算子との低次の誤差項  $\mathcal{O}(t^q)$  ( $q = 3, 5, \dots, 2J-1$ ) を相殺し更に良い近似精度  $\mathcal{O}(t^{2J+1})$  を達成できることが分かった。連立方程式 (2.22) は Vandermonde 方程式と呼ばれ、その厳密解が

$$c_j = \prod_{j' \in \{1, 2, \dots, J\} \setminus j} \frac{1}{1 - (k_{j'}/k_j)^2}, \quad j = 1, 2, \dots, J \quad (2.27)$$

で与えられることが知られている。特筆すべき点として、係数  $\{c_j\}_j$ 、分割数  $\{k_j\}_j$  は共にハミルトニアン  $H$  や用いる Trotter 分解の次数  $p$  などには依存しない。すなわち、それらに依存した誤差項の係数行列  $\tilde{E}_q(t)$  [(2.19) 式] の具体的な表式を計算することなく、一度係数  $\{c_j\}_j$ 、分割数  $\{k_j\}_j$  を古典計算によって計算すれば良い。なお、複数積公式の誤差  $e^{-iHt} - M_{pJ}(t) \in \mathcal{O}(t^{2J+1})$  の具体的な

な上限を導出するには、 $\tilde{E}_q(t)$  の表式が必要である。Ref. [LKW19] により、 $\{k_j\}_j$  を相異なる自然数とすると複数積公式の誤差が  $H = \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} H_{\gamma}$  の下では

$$\|e^{-iHt} - M_{pJ}(t)\| \leq \text{Const.} \times \|c\|_1 (\alpha_p t)^{2J+1}, \quad \|c\|_1 = \sum_{j=1}^J |c_j|, \quad (2.28)$$

$$\alpha_p = \max_{q \in p+2\mathbb{N}-2} \left\{ \left( \sum_{\gamma_1, \dots, \gamma_{p+1}=1}^{\Gamma} \|[H_{\gamma_1}, [H_{\gamma_2}, \dots, [H_{\gamma_p}, H_{\gamma_{p+1}}]]]\| \right)^{\frac{1}{q+1}} \right\} \quad (2.29)$$

(Const. は次数  $p$  のみに依存する定数) で抑えられ、積公式  $T_p(t)$  に対する誤差上限 (Theorem 1.9) と同様に係数が交換子で与えられる交換子スケリングが明らかとなった。2.1.4 節で議論するように、この交換子スケリングが複数積公式による量子アルゴリズムのコストが良い系サイズスケリングを持つ上で重要な性質となっている。

#### Remark: 次数 $p$ の係数条件

Theorem 2.4 では複数積公式に用いる積公式  $T_p(t)$  の次数  $p$  によらず、(2.24) 式に現れる初めの  $J-1$  個の誤差項  $\mathcal{O}(t^q)$  ( $q = 3, 5, \dots, 2J-1$ ) が相殺されるように係数と分割数を設定している。しかしながら、実は低次の誤差項は  $c_j$  を設定することなく既に消えている。すなわち、次数  $p$  の積公式  $T_p(t)$  を用いるとき (2.19) 式において  $E_3 = E_5 = \dots = E_{p-1} = 0$  であるので、 $\{T_p(t/k_j)\}^{k_j}$  を展開した (2.18) 式においても

$$\tilde{E}_3(t) = \tilde{E}_5(t) = \dots = \tilde{E}_{p-1}(t) = 0 \quad (2.30)$$

が成立している [(2.19) 式より]。故に、連立方程式 (2.22) における  $p/2$  個の条件

$$\sum_{j=1}^J \frac{c_j}{(k_j)^{q-1}} = 0, \quad q = 3, 5, \dots, p-1 \quad (2.31)$$

は課す必要がない。代わりに、 $t^{2J+1}, t^{2J+3}, \dots, t^{2J+p-3}$  の誤差項が相殺するように同様の条件を追加して、

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ (k_1)^{-p} & (k_2)^{-p} & \dots & (k_J)^{-p} \\ (k_1)^{-p-2} & (k_2)^{-p-2} & \dots & (k_J)^{-p-2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (k_1)^{-p-2J+4} & (k_2)^{-p-2J+4} & \dots & (k_m)^{-p-2J+4} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_J \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

を満たすように係数を決定すれば、

$$M_{pJ}(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^{2J+p-1}) \quad (2.33)$$

となり、(2.23) 式よりも良い精度で時間発展演算子を近似できる。しかしながら、この連立方程式に対して  $p=2$  以外では (2.27) 式のような厳密解が知られていない。数値的に計算する場合においても、誤差 (2.33) 式に現れる  $\sum_{j=1}^J |c_j|$  のスケリング等を評価できないため、量子アルゴリズムを構成しその計算コストを示す上で都合が悪い。故に、複数積公式による量子アルゴリズムにおいては Theorem 2.4 によって決定される係数  $\{c_j\}_j$  を用いる。

### 2.1.3 ユニタリ線型結合法

本節では複数積公式  $M_{p,J}(t)$  を量子回路上で構成する方法を議論する。複数積公式  $M_{p,J}(t)$  は  $M_{p,J}(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^{2J+1})$  により近似的にはユニタリーであるが厳密にはそうでない。従って  $M_{p,J}(t)$  をユニタリーゲートのみで構成された量子回路で実現することは不可能である。そこで、一般にユニタリーではないユニタリー演算子の線型結合を量子測定によって量子回路上で実装するユニタリ線型結合法を利用する。

今、複素係数の組  $\{c_j\}_{j=0}^{J-1}$ , ユニタリー演算子  $\{U_j\}_{j=0}^{J-1}$  に対して、ユニタリー演算子の線型結合

$$M = \sum_{j=0}^{J-1} c_j U_j \quad (2.34)$$

を定め、量子回路上で  $M$  を印加して規格化された状態

$$\frac{M|\psi\rangle}{\|M|\psi\rangle\|} = \frac{\sum_j c_j U_j |\psi\rangle}{\left\| \sum_j c_j U_j |\psi\rangle \right\|} \quad (2.35)$$

を実現したいとしよう。ここで一般性を失わずに  $c_j$  は実数として尚且つ  $c_j \geq 0$  とできる。なぜなら、 $c_j$  が複素数の場合  $c_j = |c_j|e^{i \arg c_j}$  に対して、ユニタリー演算子  $U_j$  を位相因子  $e^{i \arg c_j}$  含めて再定義し  $c_j$  は  $|c_j|$  と置き換えれば良いからである。

このとき、基底を  $\{|j\rangle_a\}_{j=1}^J$  とする次元  $J$  の補助系  $a$  を用意し、ユニタリー演算子  $P_M, S_M$  を次のように定める:

$$P_M: P_M |0\rangle_a = \sum_{j=0}^{J-1} \sqrt{\frac{c_j}{\|c\|_1}} |j\rangle_a \quad \text{を満たす補助系 } a \text{ 上のユニタリー演算子,} \quad (2.36)$$

$$S_M: S_M = \sum_{j=1}^J |j\rangle \langle j|_a \otimes U_j \quad \text{で定義される全系上のユニタリー演算子.} \quad (2.37)$$

ユニタリー演算子  $P_M$  は係数  $\{c_j\}$  に応じた重みの重ね合わせを作る量子回路で PREPARE 回路と呼ばれる。一般の係数の組  $\{c_j\}$  に対して、 $P_M$  の実装には補助系  $a$  の次元  $J$  に対して  $\mathcal{O}(J)$  程度の基本ゲートが必要である [BCC<sup>+</sup>15]。一方で、演算子  $S_M$  は SELECT 回路とも呼ばれ補助系  $a$  の状態  $|j\rangle_a$  に応じてユニタリー  $U_j$  を選択して注目系に印加する量子回路である。SELECT 回路  $S_M$  は図 2.1 (a) のような量子回路で実装することができる。次元  $J$  を持つ補助系  $a$  は  $\lceil \log_2 J \rceil$  量子ビットによって実現され、各状態  $|j\rangle_a$  は  $j$  の 2 進数表示によって表現できる。状態  $|j\rangle_a$  に依存した制御演算子の実装には複数の制御量子ビットを持った制御演算子が必要であり、それは図 2.1 (b) のように非 Clifford な基本ゲートの一つである Toffoli ゲートを用いることで実現できる。各ユニタリー演算子  $U_j$  の実装に必要な基本量子ゲートの個数を  $n_j$  と書くと、SELECT 回路  $S_M$  の実装には

$$\mathcal{O}\left(\sum_{j=1}^J n_j\right) \quad (2.38)$$

だけの基本ゲートが必要となる。

さて、PREPARE 回路  $P_M$ , SELECT 回路  $S_M$ , および量子測定を用いると、ユニタリ線型結合  $M = \sum_j c_j U_j$  を量子状態に印加することができる。具体的には次のような手順で行う:

1. 補助系  $a$  と注目系を用意し、補助系は  $|0\rangle_a$ , 注目系は  $|\psi\rangle$  の初期状態を用意する。

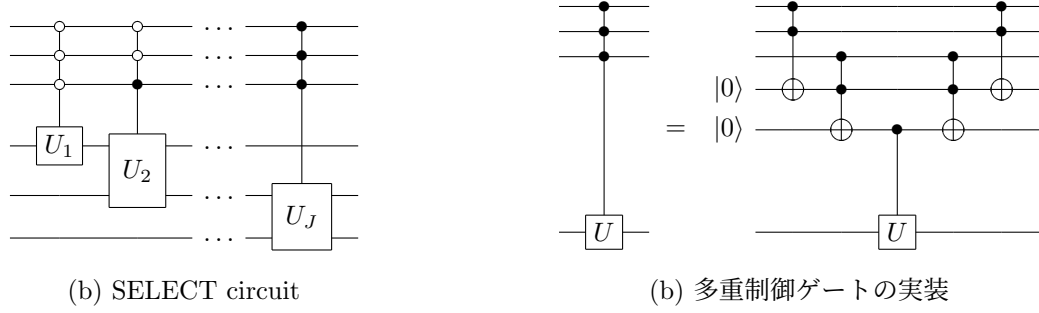


図 2.1: ユニタリ線形結合で用いる量子回路。

2. 補助系と注目系の両方に PREPARE 回路, SELECT 回路からなる量子回路

$$O_M = (P_M^\dagger \otimes I) S_M (P_M \otimes I) \quad (2.39)$$

を印加する。

3. 補助系  $a$  に対して、基底  $\{|j\rangle_a\}_{j=0}^{J-1}$  を識別する射影測定を行う。  
 4. 測定結果の事後選択を行う。すなわち、測定結果  $|0\rangle_a$  が得られた場合には測定成功として得られた量子状態を出力とし、そうでない場合には成功するまで 1.-3. を繰り返す。

上記の操作が (2.35) 式の状態を実現していることを確かめる。まず、1.-2. によって実現される全系の量子状態は

$$\begin{aligned} O_M |0\rangle_a |\psi\rangle &= (P_M^\dagger \otimes I) S_M \sum_j \sqrt{\frac{c_j}{\|c\|_1}} |j\rangle_a |\psi\rangle \\ &= (P_M^\dagger \otimes I) \sum_j \sqrt{\frac{c_j}{\|c\|_1}} |j\rangle_a U_j |\psi\rangle \end{aligned} \quad (2.40)$$

である。次に、3.-4. で補助系に対して射影測定を行い測定結果  $|0\rangle_a$  が得られる場合を事後選択するとき、測定後の量子状態は  $|0\rangle \langle 0|_a \otimes I$  で射影される。規格化因子を無視すると、測定後の状態は

$$\begin{aligned} (|0\rangle \langle 0|_a \otimes I) O_M |0\rangle_a |\psi\rangle &= \left( \sum_j \sqrt{\frac{c_j}{\|c\|_1}} |0\rangle \langle j|_a \otimes I \right) \sum_j \sqrt{\frac{c_j}{\|c\|_1}} |j\rangle_a U_j |\psi\rangle \\ &= \frac{1}{\|c\|_1} |0\rangle_a \otimes \left( \sum_j c_j U_j |\psi\rangle \right) \propto |0\rangle_a \otimes M |\psi\rangle \end{aligned} \quad (2.41)$$

となる。4. において測定の事後選択に成功する確率  $p_0$  は

$$\begin{aligned} p_0 &= \|( |0\rangle \langle 0|_a \otimes I ) O_M |0\rangle_a |\psi\rangle \|^2 \\ &= \left\| \frac{1}{\|c\|_1} |0\rangle_a \otimes \left( \sum_j c_j U_j |\psi\rangle \right) \right\|^2 \\ &= \frac{\|M |\psi\rangle\|^2}{(\|c\|_1)^2} \end{aligned} \quad (2.42)$$

となる。よって、操作 1.-4. の後に出力される規格化因子も含めた量子状態は

$$\frac{1}{\sqrt{p_0}} (|0\rangle \langle 0|_a \otimes I) O_M |0\rangle_a |\psi\rangle = |0\rangle_a \otimes \frac{M |\psi\rangle}{\|M |\psi\rangle} \quad (2.43)$$

であり、注目系においては (2.35) 式の状態を実現することができる。

操作 1.-4. によって量子状態  $M|\psi\rangle/\|M|\psi\rangle\|$  を実現するためのコストを考えよう。まず、必要な量子ゲート数については  $O_M$  に含まれる PREPARE 回路  $P_M, P_M^\dagger$  に対する  $\mathcal{O}(J)$  および SELECT 回路  $S_M$  に対する (2.38) 式が必要である。基底  $\{|j\rangle_a\}$  に関する射影測定においては、各状態  $|j\rangle_a$  を  $\lceil \log_2 J \rceil$  ビットの 2 進数で表示する場合そのまま補助系の全量子ビットを計算基底で測定すればよく量子ゲートは不要である。その場合、測定結果  $|0\rangle_a$  の事後選択は  $\lceil \log_2 J \rceil$  量子ビットの全てで測定結果 0 が得られた場合を成功とすれば良い。測定結果の事後選択の成功確率は  $p_0$  であるので、目的の状態  $M|\psi\rangle/\|M|\psi\rangle\|$  が得られるまでの操作 1.-3. の試行回数の期待値は  $(p_0)^{-1}$  である。以上をまとめると、操作 1.-4. を通じて状態  $|\psi\rangle$  にユニタリ線型結合  $M$  を印加するための量子ゲート数の期待値は

$$\frac{1}{p_0} \left( 2 \times \mathcal{O}(J) + \mathcal{O} \left( \sum_{j=0}^{n-1} n_j \right) \right) \subset \mathcal{O} \left( \frac{(\|c\|_1)^2}{\|M|\psi\rangle\|^2} \sum_{j=0}^{J-1} n_j \right) \quad (2.44)$$

となる。故に、効率よくユニタリ線型結合  $M$  を実装するためにはその係数の重みの総和  $\|c\|_1 = \sum_j |c_j|$  はある程度小さくなくてはならない。また同時に、目的の演算子を印加した状態の振幅  $\|M|\psi\rangle\|$  も大きくなくてはならないが、これは演算子  $M$  がどれだけユニタリー演算子から離れていて非ユニタリーであるかを表す量である。一般のユニタリ線型結合法による量子アルゴリズムの実装においては  $\|M|\psi\rangle\|$  が多項式的または指数的に小さくなり得るが、複数積公式などのように時間発展演算子を実装する場合  $\|M|\psi\rangle\| \simeq \|e^{-iHt}|\psi\rangle\| = 1$  となるため問題とならない。

最後に、上記の操作 1.-4. は測定結果の事後選択により確率的に成功する量子アルゴリズムであるが、それを元に確率 1 で成功させる手法である量子振幅増幅 (Quantum amplitude amplification, QAA) について触れておく。非ユニタリーな演算子  $M$  を 1 回のみ作用させたい場合測定が成功するまで 1.-3. を繰り返せば良い。一方で、 $M$  を  $n$  回繰り返して印加して  $M^n|\psi\rangle$  に比例する状態を実現したい場合、事後選択を  $n$  回連続して成功させなければならず、その成功確率は  $(p_0)^{-n}$  で繰り返し数  $n$  について指数的に小さくなる。この性質は演算子  $M$  の印加を他の量子アルゴリズムのサブルーチンとして繰り返し利用する場合などで問題であり、複数積公式においても Trotter 分解と同様に時間  $t$  を  $r$  分割して  $r$  回  $M_{p,J}(t/r)$  を実装するという操作が必要となるため特に問題となる。このようなユニタリ線型結合法の欠点は、“確率  $p_0$  で成功する量子操作を量子回路の深さを  $\Theta(1/\sqrt{p_0})$  倍に大きくすることで成功確率を 1 にまで増幅する” 量子振幅増幅 [BHMT02] によって解決される。量子振幅増幅を用いて演算子  $M$  の実装を確率 1 で成功させることができるとき、補助系と注目系の出力状態は積状態

$$|0\rangle_a \otimes \frac{M|\psi\rangle}{\|M|\psi\rangle\|} \quad (2.45)$$

となっている。故に量子振幅増幅を用いると補助系に対する射影測定を行う必要はなく、注目系に出力される状態が目的の状態そのものである。また、 $M$  の印加が必要となる量子ゲート数は操作 1.-4. の確率的に成功する量子アルゴリズムでは量子回路  $O_M$  の  $\Theta(1/p_0)$  回分に相当する一方で、量子振幅増幅を用いる場合では試行回数が 1 で量子回路  $O_M$  を  $\Theta(1/\sqrt{p_0})$  回利用する。すなわち量子振幅増幅は単に成功確率を 1 にまで増幅して測定を不要とするだけでなく、成功確率  $p_0$  について全体の実行時間の 2 乗加速を達成するという特徴がある。これは、量子振幅増幅が 2 乗加速を達成する代表的な量子アルゴリズムである Grover 探索と共通のメカニズムで動作していることに由来する性質である。以上をまとめるとユニタリ線型結合を印加するためのコストは次のようになる。

**Proposition 2.5. (ユニタリ線型結合法)**

ユニタリ線型結合  $M = \sum_{j=0}^{J-1} c_j U_j$  に対して、成功確率  $p_0 = (\|M|\psi\rangle\|/\|c\|_1)^2$  が既知であるとする。このとき、

$$\text{QAA}[O_M] |0\rangle_a |\psi\rangle = |0\rangle_a \otimes \frac{M|\psi\rangle}{\|M|\psi\rangle\|} \quad (2.46)$$

となるユニタリーな量子回路  $\text{QAA}[O_A]$  を次のリソースで実現できる:

- $\lceil \log_2 J \rceil$  量子ビットの補助系  $a$
- $\mathcal{O}(1)$  量子ビットの追加の補助系  $a'$
- 補助系  $a$  と注目系に作用する  $O_M$  [(2.39) 式] の  $\Theta(1/\sqrt{p_0})$  回の呼び出し。すなわち、

$$\Theta\left(\frac{1}{\sqrt{p_0}} \sum_{j=0}^{J-1} n_j\right) \quad (2.47)$$

の量子ゲート数 ( $n_j$ : ユニタリー  $U_j$  に必要なゲート数)。

- 補助系  $a, a'$  にのみ作用する  $\Theta(J/\sqrt{p_0})$  の量子ゲート。

**Remark: Hamiltonian シミュレーションのユニタリ線型結合法**

本節では Trotter 分解とユニタリ線型結合法を組み合わせた複数積公式による Hamiltonian simulation を主眼としているが、元々の提案であるユニタリ線型結合法による Hamiltonian simulation について簡単にレビューする。 $N$  量子ビットの量子多体系のハミルトニアン  $H$  が (2.1) 式のようにユニタリ線型結合

$$H = \sum_{j=0}^{J-1} c_j U_j, \quad c_j > 0, \quad U_j; \text{ユニタリー演算子} \quad (2.48)$$

で書ける場合を考える。このような状況は 1.1.2 節で考えた一般の局所的な相互作用を持つハミルトニアンに対して成立し、例えば  $k$ -local な場合各  $U_j$  は  $k$  体の Pauli 演算子に取れば良い。ユニタリ線型結合の項数  $J$  は高々  $\mathcal{O}(N^k)$  となる。ユニタリ線型結合法による Hamiltonian simulation では時間発展演算子  $e^{-iHt}$  自体をユニタリ線型結合で近似して Proposition 2.5 のような手法で実装する。

時間発展演算子  $e^{-iHt}$  の Taylor 展開を考える:

$$\begin{aligned} e^{-iHt} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-iHt)^n}{n!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{j_1, j_2, \dots, j_n} \frac{(-it)^n}{n!} c_{j_1} c_{j_2} \cdots c_{j_n} U_{j_1} \cdots U_{j_n}. \end{aligned} \quad (2.49)$$

これは  $(n, j_1, \dots, j_n)$  をラベルとして重み  $(-it)^n c_{j_1} \cdots c_{j_n} / n!$  でのユニタリー演算子  $U_{j_1} \cdots U_{j_n}$  から成るユニタリ線型結合である。ただし、その項数が無限であるため Proposition 2.5 のように有限のリソースでこの無限級数を実装することはできない。そこで、それを有限次数  $q$  で打ち切って近

似した

$$\begin{aligned} M_q(t) &\equiv \sum_{n=0}^q \frac{(-iHt)^n}{n!} \\ &= \sum_{n=0}^q \sum_{j_1, j_2, \dots, j_n} \frac{(-it)^n}{n!} c_{j_1} c_{j_2} \cdots c_{j_n} U_{j_1} \cdots U_{j_n} \end{aligned} \quad (2.50)$$

を Proposition 2.5 に従って実装する。その際、 $M_q(t)$  に対する PREPARE 回路, SELECT 回路が必要となるが、それらは以下のリソースで構成できることが知られる [BCC<sup>+</sup>15]:

- $H$  の項  $j = 0, 1, \dots, J$  をラベルする  $\lceil \log_2 J \rceil \in \mathcal{O}(\log N)$  量子ビットの補助系  $a$
- 次数  $n = 0, \dots, q$  をラベルする  $\lceil \log_2 q \rceil$  量子ビットの補助系  $b$
- さらに追加の  $\mathcal{O}(1)$  量子ビットの補助系  $a'$
- $\Theta(q/\sqrt{p_0})$  回のハミルトニアン  $H$  に対する PREPARE 回路 [(2.36) 式], SELECT 回路 [(2.37) 式] の呼び出し。ただし、 $p_0$  は (2.42) 式のユニタリ線型結合の実装の成功確率に相当し、次数  $q$  が大きいとき

$$p_0 = \|M_q(t)|\psi\rangle\|^2 \left( \sum_{n=0}^q \sum_{j_1, \dots, j_n} \left| \frac{(-it)^n}{n!} c_{j_1} c_{j_2} \cdots c_{j_n} \right| \right)^{-2} \sim e^{-2\|c\|_1 \cdot |t|} \quad (2.51)$$

で与えられる。ここで  $M_q(t) \simeq e^{-iHt}$  より  $\|M_q(t)|\psi\rangle\| \simeq 1$  を用いた。

- $\Theta(q/\sqrt{p_0})$  回の補助系  $a, b, a'$  に対する基本量子ゲート。

$M_q(t)$  に実装に必要な PREPARE 回路, SELECT 回路の呼び出し回数  $\Theta(q/\sqrt{p_0})$  に関して簡単に説明する。まず因子  $q$  について、これは (2.48) 式による  $\{c_j\}, \{U_j\}$  の  $q$  次の多項式を  $H$  に対する PREPARE 回路  $P_H$ , SELECT 回路  $S_H$  で実現するために必要な回数である。回路  $P_H, S_H$  ではそれぞれ  $c_j, U_j$  を 1 回掛けることができるため次数  $q$  に比例する回数分それらが必要となる。次に呼び出し回数  $\Theta(q/\sqrt{p_0})$  中の因子  $1/\sqrt{p_0}$  は Proposition 2.5 のように量子振幅増幅に由来する。 $M_q(t)$  のユニタリ線型結合の実装には  $c_j, U_j$  を掛けることに加えて次数  $n$  に応じた (2.49) 式中の重み  $(-it)^n/n!$  の重ねあわせ状態を生成する必要があるが、これは上記第 2,5 項目の次数  $n$  をラベルする補助系とそれを利用した補助系上の量子ゲートによって実装できる。

#### 2.1.4 量子アルゴリズムと計算コスト

さて、複数積公式  $M_{p,J}(t)$  によるハミルトニアンシミュレーションの量子アルゴリズムを具体的に構成し、その計算コストを評価しよう。複数積公式は十分小さな時間  $t$  に対して  $M_{p,J}(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^{2J+1})$  と時間発展を近似するため、長時間  $t$  の時間発展を近似するためには Trotter 分解の場合と同じように時間を  $r$  分割して時間  $t/r$  の時間発展を繰り返せば良い。量子アルゴリズムは以下ようになる。

1. 時間  $t$  を  $r$  分割し、1 ステップ分の誤差が  $\|e^{-iHt/r} - M_{p,J}(t/r)\| \in \mathcal{O}(\varepsilon/r)$  となるよう  $r$  を設定する。

2. 各時間幅  $t/r$  の複数積公式  $M_{pJ}(t/r)$  を確率 1 で印加する量子回路をユニタリ線型結合と量子振幅増幅を用いて構成する。
3. 上記の回路を  $r$  回繰り返す。

**第1ステップ.**— まず、第1ステップ目で設定すべき分割数  $r$  を定める。許容誤差  $\varepsilon \in (0, 1)$  に対して、

$$\left\| e^{-iHt/r} - M_{pJ}(t/r) \right\| \leq \frac{\varepsilon}{2r} \quad (2.52)$$

が満たされるよう  $r$  を定める。このとき、第3ステップで複数積公式を  $r$  回繰り返した時の誤差は

$$\begin{aligned} \left\| e^{-iHt} - \{M_{pJ}(t/r)\}^r \right\| &\leq \left\| \left( e^{-iH(r-1)t/r} - \{M_{pJ}(t/r)\}^{r-1} \right) M_{pJ}(t/r) \right\| \\ &\quad + \left\| e^{-iH(r-1)t/r} \left( e^{-iHt/r} - M_{pJ}(t/r) \right) \right\| \\ &\leq \left\| e^{-iH(r-1)t/r} - \{M_{pJ}(t/r)\}^{r-1} \right\| \cdot \|M_{pJ}(t/r)\| + \frac{\varepsilon}{2r}. \end{aligned} \quad (2.53)$$

ここで  $M_{pJ}(t/r)$  は一般に非ユニタリーで  $\|M_{pJ}(t/r)\| \neq 1$  であることに留意する。(2.52) 式で

$$\|M_{pJ}(t/r)\| \leq \|e^{-iHt/r}\| + \|M_{pJ}(t/r) - e^{-iHt/r}\| \leq 1 + \frac{\varepsilon}{2r} \quad (2.54)$$

であることを考慮し、(2.53) を繰り返し用いれば、

$$\begin{aligned} \left\| e^{-iHt} - \{M_{pJ}(t/r)\}^r \right\| &\leq \frac{\varepsilon}{2r} \sum_{r'=0}^{r-1} \left( 1 + \frac{\varepsilon}{2r} \right)^{r'} \\ &\leq \frac{\varepsilon}{2r} \cdot r \left( e^{\varepsilon/2r} \right)^r \leq \frac{\varepsilon}{2} e^{1/2} \leq \varepsilon \end{aligned} \quad (2.55)$$

となる。故に、(2.52) 式で  $r$  を定めれば量子アルゴリズム全体で許容誤差  $\varepsilon$  を達成できる。

(2.52) 式を満たす分割数  $r$  は (2.28) 式の複数積公式の誤差上限により

$$C_p \|c\|_1 \left( \frac{\alpha_p t}{r} \right)^{2J+1} \leq \frac{\varepsilon}{2r} \quad (2.56)$$

を満たすように取れば十分である。ここで  $C_p$  は (2.28) 式中の定数で次数  $p$  にのみ依存しそれ以外の系サイズ  $N$  などには依存しない。 $\alpha_p$  は (2.29) 式で定義されるハミルトニアン多重交換子の和であり、系サイズスケリングが Proposition 1.12 によって与えられる。これを満たすには

$$r = \left\lceil \alpha_p t \left( \frac{2C_p \|c\|_1 \alpha_p t}{\varepsilon} \right)^{\frac{1}{2J}} \right\rceil \quad (2.57)$$

と取れば良い。上式において、複数積公式  $M_{pJ}(t)$  の和の項数  $J$  と係数の総和  $\|c\|_1 = \sum_j |c_j|$  は現時点で具体的に設定していないため、分割数  $r$  の  $N, t, \varepsilon$  の顕わな依存性はまだ分からない。これらは、第2ステップ目に対する以下の議論で決定する。

**第2ステップ.**— 第2ステップではユニタリ線型結合と量子振幅増幅を用いて複数積公式  $M_{pJ}(t)$  を印加する量子回路を構成する。具体的には (2.1) 式において各ユニタリー  $U_j$  を積公式  $\{T_p(t/rk_j)\}^{k_j}$  として (2.37) 式で現れる量子回路 [図 2.1] を構成すれば良い。このとき、単一の  $M_{pJ}(t/r)$  を実装するための量子ゲート数は Proposition 2.5 で与えられる。成功確率  $p_0$  は

$$\begin{aligned} p_0 &= \left( \frac{\|M_{pJ}(t/r)|\psi\rangle\|}{\|c\|_1} \right)^2 \\ &\geq \frac{(\|e^{-iHt/r}\| - \|e^{-iHt/r} - M_{pJ}(t/r)\|)^2}{(\|c\|_1)^2} \\ &\geq \frac{1}{4(\|c\|_1)^2} \end{aligned} \quad (2.58)$$

である [(2.52) 式を用いた]。よって、 $M_{pJ}(t/r)$  の実装に必要な量子ゲート数は

$$\mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{p_0}} \sum_j k_j \times [T_p(t/rk_j) \text{ の量子ゲート数}]\right) = \mathcal{O}(\|c\|_1 \cdot \|k\|_1 \cdot [T_p(t/rk_j) \text{ の量子ゲート数}]) \quad (2.59)$$

である。積公式  $T_p(t)$  に必要な量子ゲート数は  $t$  に依存しないので、以降では単に  $T_p$  の量子ゲート数を書く。従って、複数積公式  $M_{pJ}(t/r)$  を量子回路上で効率よく実装するためには係数の重みの総和  $\|c\|_1$  および複数積公式の分割数の総和  $\|k\|_1 = \sum_j k_j$  が大きくなりすぎてはいけな。時間発展演算子  $e^{-iHt}$  を精度よく近似する複数積公式を与える  $\{c_j\}, \{k_j\}$  の組は Theorem 2.4 により無数に存在するが、この条件によって選択すべき  $\{c_j\}, \{k_j\}$  の組が決定される。具体的には Ref. [LKW19] により複数積公式の分割数の組  $k_j$  を

$$k_j = \left\lceil \frac{K}{\sin\left(\frac{\pi(2j-1)}{8J}\right)} \right\rceil, \quad j = 1, 2, \dots, J \quad (2.60)$$

(ただし、 $K$  は  $K < \sqrt{8}J/\pi$  を満たし  $k_j$  が相異なるようなものが存在し、それを選択する) と設定し、そのときの (2.27) 式による連立方程式の解  $\{c_j\}$  を用いれば効率よく量子回路を実装できることが示された。このとき、それぞれの絶対値の総和は

$$\|k\|_1 \in \mathcal{O}(J^2 \log J), \quad \|c\|_1 \in \mathcal{O}(\log J) \quad (2.61)$$

となることが知られる。

**第3ステップ。**— 第3ステップでは Trotter 分解と同様に第1, 2ステップで構成した量子回路を  $r$  回繰り返し、時間発展  $e^{-iHt}$  を近似する目的の量子回路を得る。本ステップで複数積公式の項数  $J$  を決定し、最終的な量子アルゴリズムのコストを得る。(2.57) 式, (2.61) 式より、複数積公式  $M_{pJ}(t/r)$  を  $r$  回印加する量子回路の量子ゲート数は

$$\begin{aligned} & \mathcal{O}(r \cdot \|c\|_1 \cdot \|k\|_1 \cdot [T_p \text{ の量子ゲート数}]) \\ & \subset \mathcal{O}\left(\alpha_p t \left(\frac{\alpha_p t}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2J}} J^2 \log^{1+\frac{1}{2J}} J \times [T_p \text{ の量子ゲート数}]\right) \end{aligned} \quad (2.62)$$

である。ここで、複数積公式の項数  $J$  を上記のスケールリングが小さくなるように、

$$J = \left\lceil \log\left(\frac{\alpha_p t}{\varepsilon}\right) \right\rceil \in \mathcal{O}(\log(Nt/\varepsilon)) \quad (2.63)$$

と定めよう。このとき、(2.62) 式において  $1/\varepsilon$  の多項式的な依存性は消失し、必要な量子ゲートの総数は

$$\mathcal{O}(\alpha_p t) \times \text{polylog}(Nt/\varepsilon) \times [T_p \text{ の量子ゲート数}] \quad (2.64)$$

となる。有限距離相互作用を持つハミルトニアンの場合、 $\alpha_p \in \mathcal{O}\left(N^{\frac{1}{p+1}}\right)$  [Proposition 1.12 および (2.29) 式] であることと積公式  $T_p$  の実装に  $\mathcal{O}(N)$  の量子ゲート数が必要であること [1.3.3 節] を踏まえて、必要な量子ゲート数のスケールリングは

$$N^{1+\frac{1}{p+1}} t \times \text{polylog}(Nt/\varepsilon) \quad (2.65)$$

となる。このスケールリングは 1.3.3 節で議論した次数  $p$  の積公式  $T_p(t)$  に基づく量子アルゴリズムと同程度の系サイズ依存性を持ちつつ、誤差依存性は指数的に改善されている。また、必要な補助量子ビット数についても項数  $J$  で決まる。補助量子ビットは第2ステップにおけるユニタリ線型結合法で必要となるが、その数は Proposition 2.5 で与えられる。従って、そのスケールリングは

$$\mathcal{O}(\log J) \subset \mathcal{O}\left(\log \log\left(\frac{Nt}{\varepsilon}\right)\right) \quad (2.66)$$

	ゲート数	クエリ複雑性	補助量子ビット
Trotter 分解 [CST+21]	$N^k Jt \left(\frac{NJt}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}$	$Jt \left(\frac{NJt}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}$	0
ユニタリ線型結合 [BCC+15]	$N^{k+1} Jt \log\left(\frac{NJt}{\varepsilon}\right)$	$NJt \log\left(\frac{NJt}{\varepsilon}\right)$	$\log\left(\frac{NJt}{\varepsilon}\right)$
量子特異値変換 [GSLW19]	$N^k(NJt + \log(1/\varepsilon))$	$NJt + \log(1/\varepsilon)$	$\log N$
複数積公式 [LKW19]	$N^{k+\frac{1}{p+1}} Jt \text{polylog}(NJt/\varepsilon)$	$N^{\frac{1}{p+1}} Jt \text{polylog}(NJt/\varepsilon)$	$\log \log\left(\frac{NJt}{\varepsilon}\right)$

表 2.1: 様々な量子アルゴリズムのコスト。クエリ複雑性において呼び出す量子回路の定義がアルゴリズム毎に異なることに留意する。Trotter 分解, 複数積公式: Trotter ステップ  $T_p(t/r)$ , その制御演算子。ユニタリ線型結合, 量子特異値変換: ブロック埋め込みの制御演算子またはその共役。

である。積公式による量子アルゴリズムでの補助量子ビット数は 0 であるのに対し、複数積公式では全系サイズ  $N$  に比べれば十分少ないものの補助量子ビットが必要となる。

最後に、複数積公式による量子アルゴリズムのコストを表 2.1 にまとめる。同表に 1.3.3 節で議論した積公式、およびユニタリ線型結合法 [BCC+15], 量子特異値変換 [GSLW19] に基づく量子アルゴリズムもまとめたが、複数積公式はそれらの長所を両立するものとなっている。まず、量子ゲート数の系サイズ  $N$  に関する依存性は積公式・複数積公式が良い。これは、積公式・複数積公式の誤差 (1.77), (2.28) 式が交換子スケーリングを満たし、量子多体系の相互作用の局所性を反映していることに由来する。一方で、許容誤差  $\varepsilon$  に対する依存性では複数積公式、ユニタリ線形結合法、量子特異値変換が対数スケーリングを達成しており、複数積公式はベースとなった積公式よりも指数的に改善されている。これは、複数積公式の誤差  $\mathcal{O}(t^{2J+1})$  が項数  $J$  に関して指数的に減衰することに由来し、(2.49) 式による多項式近似で指数的に誤差が減衰するユニタリ線型結合法 (および量子特異値変換) と共通の性質である。また、補助量子ビット数については複数積公式では積公式とユニタリ線型結合法に必要な数のちょうど中間的な量となっている。以上をまとめると、複数積公式によるハミルトニアンシミュレーションは積公式とユニタリ線型結合法の長所を両立しつつ両者の欠点を補完し、系サイズ  $N$ , 時刻  $t$ , 許容誤差  $\varepsilon$  のいずれに対しても良いスケーリングのコストを達成する手法と言える。

## 2.2 時間依存系のシミュレーション

これまでの節では、系が時間依存しないハミルトニアン  $H$  で記述されるときに時間発展を考えた。本節では、時間依存するハミルトニアン  $H(t)$  下での Schrodinger 方程式

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (2.67)$$

に従う量子多体系をシミュレートする量子アルゴリズムを議論する。

時間依存する量子多体系は主に光や磁場パルスなどの外場のある物質などが挙げられ、そのシミュレートは光学応答などの非平衡現象の解析に重要である。また、時間依存する量子系に対する量子アルゴリズムによって従来の時間依存しないハミルトニアンで記述される量子系を効率よくシミュレートする試みもある。例えば、断熱量子状態準備 (adiabatic state preparation) では、自明なハミルト

ニアン  $H_0$  から非自明なハミルトニアン  $H_1$  へと十分ゆっくり時間変化する時間依存ハミルトニアン  $H(t)$  下での時間発展を利用する。断熱定理 (adiabatic theorem) により、初期状態を自明なハミルトニアン  $H_0$  の固有状態とすれば時間発展後の状態において目的のハミルトニアン  $H_1$  の固有状態を実現できることが知られる。また、相互作用描像を利用することで時間非依存系の時間発展を時間依存系の時間発展として表現し高速化する手法も考えられている。このように、時間依存系のシミュレートは非平衡量子多体系のような物性物理・量子化学の関心事から時間非依存系に対する量子アルゴリズムまで広範な応用範囲を持つ。

### 2.2.1 時間依存系の Lie-Suzuki-Trotter 公式

時間依存する Schrodinger 方程式 (??) の解は、

$$|\psi(t)\rangle = U(t,0)|\psi(0)\rangle, \quad U(t,0) = \mathcal{T} \exp\left(-i \int_0^t d\tau H(\tau)\right) \quad (2.68)$$

と書ける。ここで、 $U(t,0)$  は時間発展演算子、それに含まれる記号  $\mathcal{T} \exp$  は時間順序積と呼ばれ

$$\mathcal{T} \exp\left(-i \int_0^t d\tau H(\tau)\right) = \lim_{n \rightarrow \infty} e^{-iH(t_n)dt} \dots e^{-iH(t_1)dt}, \quad (2.69)$$

( $t_i = (i/n)t$ ,  $dt = t/n$ ) として定義される。また時間発展演算子に対する等価な表現として Dyson 級数展開

$$U(t,0) = \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_0^t dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 H(t_n) \dots H(t_1) \quad (2.70)$$

も知られる。本節では、このように与えられるユニタリー演算子  $U(t,0)$  を量子回路上で実装する方法を導出する。

時間依存系における時間発展演算子  $U(t,0)$  は、時間非依存の場合とは異なり行列指数関数を用いて簡単に表現することはできない。しかしながら、Trotter 分解 (積公式) は積の構成要素の時間発展を適切に選択することで拡張可能である。今、時間依存ハミルトニアン  $H(t)$  を

$$H(t) = \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} H_{\gamma}(t) \quad (2.71)$$

と分解しよう。積公式の構成法は、その構成要素に応じて主として次の2つが存在する。

- 時間順序積による時間発展に基づく構成

時間発展演算子  $U(t,0)$  を近似する積公式  $S_q(t,0)$  を各項  $H_{\gamma}(t)$  下での時間発展演算子

$$U_{\gamma}(t_2, t_1) = \mathcal{T} \exp\left(-i \int_{t_1}^{t_2} d\tau H_{\gamma}(\tau)\right) \quad (2.72)$$

の積によって構成する手法である。具体的には

$$S_p(t,0) = \prod_{v=1}^V U_{\gamma_v}(\beta_v t + \alpha_v t, \beta_v t) = U_{\gamma_V}(\beta_V t + \alpha_V t, \beta_V t) \dots U_{\gamma_1}(\beta_1 t + \alpha_1 t, \beta_1 t) \quad (2.73)$$

と定め、 $S_p(t,0) = U(t,0) + \mathcal{O}(t^{p+1})$  となるように係数  $\alpha_v, \beta_v \in \mathbb{R}$  を上手く選ぶ。

具体的な構成方法としては、時間非依存系の場合を単純に拡張した Lie-Suzuki-Trotter 公式がある。例えば、1 次の場合では (??) 式において時間発展演算子  $e^{-iH\gamma t}$  を時間依存系のもの  $U_\gamma(t, 0)$  に置換することで

$$S_1(t, 0) = \prod_{\gamma=1}^{\Gamma} U_\gamma(t, 0) = U_\Gamma(t, 0) \cdots U_1(t, 0) \quad (2.74)$$

を得る。この公式は  $t$  が十分小さい極限で実際に  $S_1(t, 0) = U(t, 0) + \mathcal{O}(t^2)$  で時間発展演算子を近似することが知られる。2 次の場合も同様であるが、(??) 式で時間発展演算子を  $U_\gamma$  で置換する際に時間の原点を移動する必要がある

$$S_2(t, 0) = \left( \prod_{\gamma=1, \dots, \Gamma}^{\rightarrow} U_\gamma(t, t/2) \right) \left( \prod_{\gamma=1, \dots, \Gamma}^{\leftarrow} U_\gamma(t/2, 0) \right) \quad (2.75)$$

で定められる。この時間原点の移動は区間  $[0, t]$  の情報をくまなく  $S_2(t, 0)$  が反映する必要があるという要請に基づく。一般の次数  $p \geq 2$  (偶数) における Lie-Suzuki-Trotter 公式は (??) を拡張した漸化式

$$S_{2q}(t, 0) = S_{2q-2}(t, (1 - \alpha_q)t) S_{2q-2}((1 - \alpha_q)t, (1 - 2\alpha_q)t) \\ \times S_{2q-2}(2\alpha_q t, (1 - 2\alpha_q)t)^\dagger S_{2q-2}(2\alpha_q t, \alpha_q t) S_{2q-2}(\alpha_q t, 0) \quad (2.76)$$

で定められる。ここで  $\alpha_q$  は (??) 式で与えられる時間非依存系の積公式のものと同一である。その誤差については ?? 節で議論するが、 $S_p(t, 0) = U(t, 0) + \mathcal{O}(t^{p+1})$  となることが知られる。

- 離散時刻の時間発展に基づく構成

時間依存系の積公式を構成するもう一つの方法として、離散化された時刻で固定されたハミルトニアン下での時間発展  $e^{-iH_{\gamma_v}(\tilde{\beta}_v t)\tilde{\alpha}_v t}$  を用いる手法がある。すなわち、

$$\tilde{S}_p(t, 0) = \prod_{v=1}^V e^{-iH_{\gamma_v}(\tilde{\beta}_v t)\tilde{\alpha}_v t} \quad (2.77)$$

として、 $\tilde{S}_p(t, 0) = U(t, 0) + \mathcal{O}(t^{p+1})$  となるように係数  $\tilde{\alpha}_v, \tilde{\beta}_v$  を上手く選ぶ。

## 2.2.2 積公式の形式的表現と積公式間の関係性

## 2.2.3 誤差の交換子スケーリングと計算コスト

## 2.3 量子開放系のシミュレーション

これまで量子多体系のダイナミクスとしてハミルトニアン  $H$  の下での Schrödinger 方程式を考え、その解を与える時間発展演算子  $e^{-iHt}$  を考えてきた。Schrödinger 方程式は量子力学における最も基本的な方程式であるが、そこでは注目する量子多体系が外界とは相互作用せず、ハミルトニアン  $H$  (すなわちエネルギー) を保存量として持つことが仮定されている。ここでは、注目する量子多体系が外界と相互作用しエネルギーを保存しない場合のダイナミクスとその量子計算法を考えよう。このような量子系は量子開放系 (open quantum systems) と呼ばれ、実際の実験などにおけるノイズや散逸の影響の解析などの観点から広く興味を持たれている対象である。

### 2.3.1 量子マスター方程式

まず、外界との相互作用のある量子開放系のダイナミクスが Schrödinger 方程式の代わりにどのような方程式で記述されるかを導入しよう。注目する量子多体系を  $S$  (system), 外界の量子系を  $B$  (bath) とすると、注目系と外界を合わせた系ではエネルギーは保存されている。すなわち、Schrödinger 方程式が適用可能であり全系の時間発展は

$$i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_{S+B} = (H_S + H_I + H_B)|\psi(t)\rangle_{S+B} \quad (2.78)$$

に従う。 $H_S, H_B$  はそれぞれ注目系, 外界のハミルトニアンを表し,  $H_I$  は注目系と外界の間の相互作用を意味する。もし、外界  $B$  に関してそのハミルトニアンや状態等が分かるのであれば、前掲の Schrödinger 方程式を解けば原理的には注目系の振る舞いも分かる。しかしながら、一般的には外界は注目系に比べて遥かに大きく制御不可能であり、その情報を実験等を通じて決定するのは困難である。そのような状況では、注目系の状態は全系の状態  $|\psi(t)\rangle_{S+B}$  から外界の情報を捨て去ることで得られる。すなわち、注目系の状態は密度状態として

$$\rho_S(t) = \text{Tr}_B [|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|_{S+B}] \in \mathbb{C}^{2^N \times 2^N} \quad (2.79)$$

として与えられる。全系の Schrödinger 方程式を使うと、注目系の状態  $\rho_S(t)$  の従う方程式は

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho_S(t) &= \text{Tr}_B \left[ \left( \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_{S+B} \right) \langle\psi(t)|_{S+B} \right] + \text{Tr}_B \left[ |\psi(t)\rangle_{S+B} \left( \frac{d}{dt}\langle\psi(t)|_{S+B} \right) \right] \\ &= -i\text{Tr}_B ([H_S + H_I + H_B, |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|_{S+B}]) \\ &= -i[H_S, \rho_S(t)] - i\text{Tr}_B ([H_I + H_B, |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|_{S+B}]) \end{aligned} \quad (2.80)$$

となる。右辺第 1 項が注目系のハミルトニアンの影響, 第 2 項が外界との相互作用の影響を意味する。外界との相互作用  $H_I = 0$  とすると右辺第 2 項は消え、Schrödinger 方程式と等価な von Neumann 方程式

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i[H_S, \rho_S(t)] \quad (2.81)$$

に帰着する。

(??) 式が開放量子系のダイナミクスを記述する微分方程式であるが、一般にこれは解けない。なぜならば、右辺第 2 項は注目系の状態  $\rho_S(t)$  のみを使って表現できず結局外界の情報 ( $H_I, H_B$  や外界を含む状態  $|\psi(t)\rangle_{S+B}$ ) が必要となるためである。そこで、量子開放系のダイナミクスはしばしば幾つかの簡単化のための条件を課した上で現象論的に解析される。具体的には以下の以下の仮定を課す。

#### 1. CPTP 性 (completely-positive and trace-preserving)

初期状態  $\rho_S(0)$  から時刻  $t$  での量子状態  $\rho_S(t)$  への変化は、量子状態を量子状態へ移す CPTP 写像

$$\rho_S(t) = \sum_i K_i(t)\rho_S(0)K_i(t)^\dagger, \quad \sum_i K_i(t)^\dagger K_i(t) = I \quad (2.82)$$

で表現される。

#### 2. Markov 性

ある時刻  $t + \delta t$  での状態  $\rho_S(t + \delta t)$  は、その直前の状態  $\rho_S(t)$  にのみに依存する。すなわち、CPTP 性と合わせて

$$\rho_S(t + \delta t) = \sum_i \tilde{K}_i\rho_S(t)\tilde{K}_i^\dagger, \quad \sum_i \tilde{K}_i^\dagger\tilde{K}_i = I \quad (2.83)$$

と仮定する。物理的には、外界が注目系よりも十分大きくてなおかつ外界の緩和時間が十分に短いことが仮定されている。一般に注目系の状態  $\rho_S(t)$  の時間変化は、(??) 式によりその時刻  $t$  における注目系と外界の状態の両方に依存する。そのうち、時刻  $t$  における外界の状態は、外界の初期状態と時刻  $t$  までどのように注目系の状態が変化してきたかに依存する。上記の物理的な仮定のもとでは注目系が外界に及ぼす変化はほぼ無視できるようになるため、“注目系の状態  $\rho_S(t)$  の変化は外界の影響はあるものの、その時の状態  $\rho_S(t)$  にしか依存しない” 状況となり (??) 式が正当化される。

1. と 2. の数学的な制約のもとでは、注目系の状態  $\rho_S(t)$  の従う微分方程式は次の形に限られていることが証明されている:

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = -i[H_S(t), \rho_S(t)] + \sum_i \left( L_i(t)\rho_S(t)L_i(t)^\dagger - \frac{1}{2}\{L_i(t)^\dagger L_i(t), \rho_S(t)\} \right). \quad (2.84)$$

ここで、 $H_S(t) \in \mathbb{C}^{2^N \times 2^N}$  は (??) 式の von Neumann 方程式のように系のハミルトニアンと見做せる。一方で、 $\{L_i \in \mathbb{C}^{2^N \times 2^N}\}$  は Lindblad 演算子と呼ばれ外界との相互作用が注目系に及ぼす影響とみなせる。また、

$$\mathcal{L}(t)\rho = -i[H_S(t), \rho] + \sum_i \left( L_i(t)\rho L_i(t)^\dagger - \frac{1}{2}\{L_i(t)^\dagger L_i(t), \rho\} \right) \quad (2.85)$$

で定義される時間発展の生成子  $\mathcal{L}$  は リウビリアン (Liouvillian) と呼ばれる。この量子開放系に対する運動方程式  $\frac{d}{dt}\rho_S(t) = \mathcal{L}\rho_S(t)$  は、発見者の名を取って GKSL (Gorini-Kossakowski-Sudarshan-Lindblad) 方程式、あるいは単に Lindblad 方程式と呼ばれる。GKSL 方程式は数学的には時間発展の CPTP 性と Markov 性のみから導出される。一方で、系の物理的な描像から導出することは容易ではない。注目系と外界の合成系が従う Schrödinger 方程式に従う (??) 式から GKSL 方程式を導出するためには、弱結合近似 (注目系と外界の相互作用が弱い)、回転波近似 (注目系における非共鳴な振動が消える)、Markov 近似 (外界の緩和時間が短い) などの要請が必要となる。

GKSL 方程式に従う量子開放系は一般の外界と相互作用する量子系の中でも特に扱いやすいようにモデル化された系である。ただ、そのような単純化された方程式でも超伝導量子ビット、冷却原子、共振器中の原子系など様々な量子系の実験結果とよく整合することが知られており、散逸のある量子系の解析の出発点となっている。また、GKSL 方程式の基づく散逸を利用した非平衡物質相や物性制御法などもあり、物性物理でも重要な対象となっている。

### 2.3.2 量子開放系ダイナミクスのシミュレーション

ここでは時間依存しない GKSL 方程式

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \mathcal{L}\rho(t), \quad \mathcal{L}\rho = -i[H, \rho] + \sum_{i=1}^l \left( L_i\rho L_i^\dagger - \frac{1}{2}\{L_i^\dagger L_i, \rho\} \right) \quad (2.86)$$

を量子計算機によって効率よくシミュレートする方法を考えよう。 $N$  qubit 系の Hilbert 空間  $\mathcal{H} \simeq \mathbb{C}^{2^N}$  に対して、注目系の密度状態  $\rho(t)$  は

$$\mathcal{B}(\mathcal{H}) \equiv \{\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \text{ の線形演算子}\} \simeq \mathbb{C}^{4^N} \quad (2.87)$$

の下である。Schrödinger 方程式と同じく 1 階の線形常微分方程式であるので、初期条件  $\rho(0) = \rho$  の下でその解は

$$\rho(t) = e^{\mathcal{L}t}\rho \quad (2.88)$$

と書ける。この解  $\rho(t)$  を量子計算機上に精度保証付きで実現する問題は、散逸項をゼロにする ( $L_i = 0$ ) と Schrödinger 方程式と等価な von Neumann 方程式に帰着されるので、少なくともハミルトニアンシミュレーションより難しいと言える。

量子開放系のシミュレーションが Hamiltonian シミュレーションと異なる点として、時間発展の非ユニタリー性と誤差の評価法が挙げられる。まず時間発展の非ユニタリー性に関して、時間発展演算子  $e^{\mathcal{L}t}$  の共役を定義するために次の Hilbert-Schmidt 内積  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\text{HS}}$  を考える:

$$\langle \rho, \sigma \rangle_{\text{HS}} = \text{Tr}[\rho^\dagger \sigma], \quad \rho, \sigma \in \mathbb{C}^{4^N}. \quad (2.89)$$

超演算子  $\mathcal{L}$  のエルミート共役  $\mathcal{L}^\dagger$  は、Hilbert-Schmidt 内積に基づいて  $\langle A, \mathcal{L}(B) \rangle_{\text{HS}} = \langle \mathcal{L}^\dagger(A), B \rangle_{\text{HS}}$  ( $A, B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ ) を満たす演算子として定義され、 $\mathcal{L}$  が (??) 式の Liouvillian で与えられる場合には

$$\mathcal{L}^\dagger(O) = i[H, O] + \sum_i \left( L_i^\dagger O L_i - \frac{1}{2} O L_i^\dagger L_i - \frac{1}{2} L_i^\dagger L_i O \right) \quad (2.90)$$

となる。故に、 $(e^{\mathcal{L}t})^\dagger = e^{\mathcal{L}^\dagger t}$  であり、時間発展演算子  $e^{\mathcal{L}t}$  は一般にユニタリー性  $e^{\mathcal{L}^\dagger t} e^{\mathcal{L}t} = e^{\mathcal{L}t} e^{\mathcal{L}^\dagger t} = \mathcal{I}$  を満たさない。量子回路では基本的にユニタリーゲートの組を使って量子状態を変化させる一方で量子開放系の時間発展は一般に非ユニタリーであるという乖離を乗り越えて、効率よく量子開放系をシミュレートするユニタリーな量子回路を構成できるかということが問題である。これは一見すると困難そうであるが、拡張された Trotter 分解および Stinespring 拡張という非ユニタリーな CPTP 写像をユニタリーな量子回路で実装する手法により、実は量子開放系のダイナミクスもハミルトニアンシミュレーションと同じように多項式程度のゲート数でシミュレートできることを以降で示す。

第二に異なる点が誤差の評価法である。Hamiltonian シミュレーションでは作用素ノルムを用いて  $\|U - e^{-iHt}\| \leq \varepsilon$  となるようにユニタリーな量子回路  $U$  を構成した。ここでは CPTP 写像である  $e^{\mathcal{L}t}$  に対して誤差  $\varepsilon$  以内で近似する量子操作を構成しなければならない。そこで次のように CPTP 写像に対してノルムを定めた上でその誤差についても定義する。

**Definition 2.6. (ダイヤモンドノルム, diamond norm)**

CPTP 写像  $\Phi: \mathcal{B}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H})$  に対して、そのダイヤモンドノルム  $\|\cdot\|_\diamond$  を

$$\|\Phi\|_\diamond \equiv \max_\rho \left( \|(\Phi \otimes \mathcal{I})(\rho)\|_1 \mid \rho \in \mathcal{B}(\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}), \|\rho\|_1 \leq 1, \rho^\dagger = \rho \right) \quad (2.91)$$

で定める。ただし、 $\|\cdot\|_1$  は  $\|\rho\|_1 = \text{Tr}\sqrt{\rho^\dagger \rho}$  で定められる  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  上のトレースノルムである。また、CPTP 写像  $\Phi, \Phi'$  が

$$\|\Phi - \Phi'\|_\diamond \leq \varepsilon \quad (2.92)$$

を満たすとき、 $\Phi'$  は  $\Phi$  を誤差  $\varepsilon$  以内で近似するという。

入力状態  $\rho$  に対して最大化する際には、注目系が外部ともエンタングルした任意状態を考えるために  $\mathcal{H}$  ではなく  $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$  の状態を取る。このとき、CPTP 写像間の距離

$$\|\Phi - \Phi'\|_\diamond = \max_\rho (\|(\Phi \otimes \mathcal{I})\rho - (\Phi' \otimes \mathcal{I})\rho\|_1) \quad (2.93)$$

は、 $\Phi, \Phi'$  によって作られる状態の識別可能性の上界を与えることが知られ [ ], その意味で誤差と言える。Liouvillian  $\mathcal{L}$  の下での時間発展演算子  $e^{\mathcal{L}t}$  は、ユニタリーな時間発展演算子  $e^{-iHt}$  のようなノルムを保存する性質を持たないが、代わりにダイヤモンドノルム上で以下のような性質を持つ。

**Theorem 2.7. (Contractivity)**

$\mathcal{L}$  を (??) 式で与えられる Liouvillian とする。このとき、

$$\|e^{\mathcal{L}t}\|_{\diamond} \leq 1, \quad \forall t \geq 0 \quad (2.94)$$

である。

**Proof.**— 時間発展演算子  $e^{\mathcal{L}t}$  の CPTP 性を利用する。 $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$  上のエルミート演算子  $\rho$  に対してスペクトル分解を行い

$$\rho = \sum_n \lambda_n |\lambda_n\rangle \langle \lambda_n| = \underbrace{\sum_{n;\lambda_n \geq 0} \lambda_n |\lambda_n\rangle \langle \lambda_n|}_{\rho_+} - \underbrace{\sum_{n;\lambda_n < 0} (-\lambda_n) |\lambda_n\rangle \langle \lambda_n|}_{\rho_-} \quad (2.95)$$

とおくと、

$$\|(e^{\mathcal{L}t} \otimes I)\rho\|_1 \leq \|(e^{\mathcal{L}t} \otimes I)\rho_+\|_1 + \|(e^{\mathcal{L}t} \otimes I)\rho_-\|_1 \quad (2.96)$$

$e^{\mathcal{L}t}$  の CPTP 性により

$$\|(e^{\mathcal{L}t} \otimes I)\rho_{\pm}\|_1 \underbrace{=}_{\text{CP 性}} \text{Tr}[(e^{\mathcal{L}t} \otimes I)\rho_{\pm}] \underbrace{=}_{\text{TP 性}} \text{Tr}[\rho_{\pm}] = \|\rho_{\pm}\|_1 \quad (2.97)$$

が成立する。よって、 $\|(e^{\mathcal{L}t} \otimes I)\rho\|_1 \leq \|\rho_+\|_1 + \|\rho_-\|_1 = \|\rho\|_1 \leq 1$  であるので  $\|e^{\mathcal{L}t}\|_{\diamond} \leq 1$  が成立する。なお、この性質は時間発展演算子  $e^{\mathcal{L}t}$  に限らず任意の CPTP 写像で成立するものである。□

時間発展演算子の contractivity は Trotter 分解の誤差評価を行う上でユニタリー性の代わりとなる重要な性質である。

### 2.3.3 量子開放系の Trotter 分解

まず、量子開放系における Trotter 分解の定式化を行う。これはハミルトニアンシミュレーションの場合と同様に、全系に作用する時間発展演算子  $e^{\mathcal{L}t}$  を部分系に作用する時間発展で近似するという役割を持つ。Liouvillian  $\mathcal{L}$  を

$$\mathcal{L} = \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} \mathcal{L}_{\gamma} \quad (2.98)$$

と分解できるとしたとき、微小時間  $t$  に対して

$$e^{\mathcal{L}t} = \prod_v e^{\mathcal{L}_{\gamma_v} \alpha_v t} + \mathcal{O}(t^{p+1}) \quad (2.99)$$

となるような公式を見つけたい。ただし、ユニタリーな時間発展  $e^{-iHt}$  に対する Trotter 分解と本質的に異なる点として、 $e^{\mathcal{L}_{\gamma_v} \alpha_v t}$  が量子操作で効率よく実装可能な CPTP 写像であるためには  $\alpha_v \geq 0$  が必要である。よって、1次、2次の Trotter 分解についてはユニタリーな時間発展の場合と同様に

$$\mathcal{T}_1(t) = e^{\mathcal{L}_1 t} \dots e^{\mathcal{L}_1 t} = e^{\mathcal{L}t} + \mathcal{O}(t^2), \quad (2.100)$$

$$\mathcal{T}_2(t) = e^{\mathcal{L}_1 t/2} \dots e^{\mathcal{L}_1 t/2} e^{\mathcal{L}_1 t/2} \dots e^{\mathcal{L}_1 t/2} = e^{\mathcal{L}t} + \mathcal{O}(t^3) \quad (2.101)$$

と定めることができる。一方で、4次以上の Lie-Suzuki-Trotter 公式  $T_p(t)$  [(??) 式] では必ず負の係数が現れてしまい量子開放系に拡張することはできない<sup>1</sup>。ここでは1次または2次の Trotter 分解を利用して量子開放系のダイナミクスをシミュレートすることを考え、その誤差の上界を評価しよう。誤差の上界は基本的にはユニタリーな時間発展の場合と同様であるが、ユニタリー性  $\|e^{-iHt}\| = 1$  ではなく contractivity [Theorem ??] を利用することに気をつける。

**Theorem 2.8. (量子開放系の Trotter 分解と誤差上限)**

Liouvillian  $\mathcal{L} = \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} \mathcal{L}_{\gamma}$  に対する 1,2 次に対する Trotter 分解を

$$\mathcal{T}_1(t) = e^{\mathcal{L}_1 t} \dots e^{\mathcal{L}_1 t}, \quad \mathcal{T}_2(t) = e^{\mathcal{L}_1 t/2} \dots e^{\mathcal{L}_1 t/2} e^{\mathcal{L}_2 t/2} \dots e^{\mathcal{L}_2 t/2} \dots e^{\mathcal{L}_1 t/2} \quad (2.102)$$

で定める。このとき、 $t \geq 0$  ならば

$$\|e^{\mathcal{L}t} - \mathcal{T}_1(t)\|_{\diamond} \leq \frac{t^2}{2} \sum_{\gamma, \gamma': \gamma < \gamma'} \|[\mathcal{L}_{\gamma}, \mathcal{L}_{\gamma'}]\|_{\diamond}, \quad (2.103)$$

$$\|e^{\mathcal{L}t} - \mathcal{T}_2(t)\|_{\diamond} \leq \quad (2.104)$$

が成立する。リウビリアン  $\mathcal{L}$  が  $\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2$  と分解されるとき、 $t \geq 0$  ならば

$$\|e^{\mathcal{L}t} - e^{\mathcal{L}_2 t} e^{\mathcal{L}_1 t}\|_{\diamond} \leq \frac{t^2}{2} \|[\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2]\|_{\diamond} \in \mathcal{O}(t^2) \quad (2.105)$$

が成立する (Lie-Trotter 公式)。同じく、 $t \geq 0$  ならば

$$\|e^{\mathcal{L}t} - e^{\mathcal{L}_1 t/2} e^{\mathcal{L}_2 t} e^{\mathcal{L}_1 t/2}\|_{\diamond} \leq \frac{t^3}{24} (\|[\mathcal{L}_1, [\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2]]\|_{\diamond} + 2\|[\mathcal{L}_2, [\mathcal{L}_2, \mathcal{L}_1]]\|_{\diamond}) \in \mathcal{O}(t^3) \quad (2.106)$$

が成立する (Suzuki 公式)。

*Proof.* —  $-iH \rightarrow \mathcal{L}$ ,  $-iH_1 \rightarrow \mathcal{L}_1$ ,  $-iH_2 \rightarrow \mathcal{L}_2$  という置き換えでハミルトニアンダイナミクスにおける Theorem ??, ?? と対応しているが、リウビリアンに対してはその証明に利用したユニタリ性が妥当でない。そこで次のように評価する。まず、 $\mathcal{A}(0) = \mathcal{B}(0) = \mathcal{I}$  を満たす2つの超演算子  $\mathcal{A}(t), \mathcal{B}(t)$  について

$$\mathcal{A}(t) - \mathcal{B}(t) = \mathcal{A}(t)\mathcal{B}(0) - \mathcal{A}(0)\mathcal{B}(t) = \int_0^t ds \frac{d}{ds} (\mathcal{A}(s)\mathcal{B}(t-s)) \quad (2.107)$$

という関係を利用する。 $\mathcal{A}(t) = e^{\mathcal{L}t}$ ,  $\mathcal{B}(t) = e^{\mathcal{L}_2 t} e^{\mathcal{L}_1 t}$  とすれば、

$$e^{\mathcal{L}t} - e^{\mathcal{L}_2 t} e^{\mathcal{L}_1 t} = \int_0^t ds \frac{d}{ds} \left( e^{\mathcal{L}s} e^{\mathcal{L}_2(t-s)} e^{\mathcal{L}_1(t-s)} \right) \quad (2.108)$$

$$= \int_0^t ds \left( e^{\mathcal{L}s} [\mathcal{L}_1, e^{\mathcal{L}_2(t-s)}] e^{\mathcal{L}_1(t-s)} \right) \quad (2.109)$$

$$= \int_0^t ds e^{\mathcal{L}s} e^{\mathcal{L}_2(t-s)} \left( e^{-\mathcal{L}_2(t-s)} \mathcal{L}_1 e^{\mathcal{L}_2(t-s)} - \mathcal{L}_1 \right) e^{\mathcal{L}_1(t-s)} \quad (2.110)$$

$$= \int_0^t ds e^{\mathcal{L}s} e^{\mathcal{L}_2(t-s)} \left( \int_0^{t-s} dr \frac{d}{dr} e^{-\mathcal{L}_2 r} \mathcal{L}_1 e^{\mathcal{L}_2 r} \right) e^{\mathcal{L}_1(t-s)} \quad (2.111)$$

$$= \int_0^t ds \int_0^{t-s} dr e^{\mathcal{L}s} e^{\mathcal{L}_2(t-s-r)} [\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2] e^{\mathcal{L}_2 r} e^{\mathcal{L}_1(t-s)} \quad (2.112)$$

<sup>1</sup>一般に、Lie-Suzuki-Trotter 公式以外の方法で3次以上の積公式を構成したとしても必ず負の係数が現れることが証明されている []。交換子の下での時間発展  $e^{[\mathcal{L}_{\gamma}, \mathcal{L}_{\gamma'}] \alpha_0 t^2}$  などを使うことができるならば全ての係数を非負にできることが知られるが、交換子  $[\mathcal{L}_{\gamma}, \mathcal{L}_{\gamma'}]$  は一般には Liouvillian とはならないためそれらを量子回路で効率よく実装することは難しい。筆者の知る限りでは、現状量子開放系のダイナミクスを効率よくシミュレートする3次以上の積公式が存在するかは未解決の問題である。

である。ここで、被積分関数中における時間発展  $e^{\mathcal{L}s}$ ,  $e^{\mathcal{L}_1s}$ ,  $e^{\mathcal{L}_2(t-s)}$ ,  $e^{\mathcal{L}_2(t-s-r)}$  の時間の引数は全て非負であり、リウビリアン  $\|e^{\mathcal{L}t}\|_{\diamond} \leq 1$  ( $t \geq 0$ ) が使える。従って、

$$\|e^{\mathcal{L}t} - e^{\mathcal{L}_2t}e^{\mathcal{L}_1t}\|_{\diamond} \leq \int_0^t ds \int_0^{t-s} dr \|\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2\|_{\diamond} = \frac{t^2}{2} \|\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2\|_{\diamond} \quad (2.113)$$

である。

同じようにして、

$$\begin{aligned} & e^{\mathcal{L}t} - e^{\mathcal{L}_1t/2}e^{\mathcal{L}_2t}e^{\mathcal{L}_1t/2} \\ &= \frac{-1}{2} \int_0^t ds \int_0^{t-s} dr \int_0^r du e^{\mathcal{L}s}e^{\mathcal{L}_1(t-s)/2}e^{\mathcal{L}u}[\mathcal{L}_2, [\mathcal{L}_2, \mathcal{L}_1]]e^{\mathcal{L}_2(t-s-u)}e^{\mathcal{L}_1(t-s)/2} \\ & \quad + \frac{1}{4} \int_0^t ds \int_0^{t-s} dr \int_0^r du e^{\mathcal{L}s}e^{\mathcal{L}_1(t-s-u)/2}[\mathcal{L}_1, [\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2]]e^{\mathcal{L}_1u/2}e^{\mathcal{L}_2(t-s)}e^{\mathcal{L}_1(t-s)/2} \end{aligned} \quad (2.114)$$

となるが、被積分関数中の時間張っては再び全て時間順方向である。故に、

$$\|e^{\mathcal{L}t} - e^{\mathcal{L}_1t/2}e^{\mathcal{L}_2t}e^{\mathcal{L}_1t/2}\|_{\diamond} \leq \frac{t^3}{24} (\|\mathcal{L}_1, [\mathcal{L}_1, \mathcal{L}_2]\|_{\diamond} + 2\|\mathcal{L}_2, [\mathcal{L}_2, \mathcal{L}_1]\|_{\diamond}) \quad (2.115)$$

である。  $\square$

上記の証明ではリウビリアンが2項のみの場合で証明したが、これを繰り返し用いる事により一般の  $\mathcal{L} = \sum_X \mathcal{L}_X$  の場合の Trotter 分解も直ちに示される。具体的には

$$\left\| e^{\mathcal{L}t} - \prod_X e^{\mathcal{L}_X t} \right\|_{\diamond} \leq \frac{t^2}{2} \sum_{X,Y} \|\mathcal{L}_X, \mathcal{L}_Y\|_{\diamond} \quad (2.116)$$

となる。

### 2.3.4 Stinespring 拡張とリウビリアンシミュレーション

Trotter 分解を用いて、初期状態  $\rho$  に対してそのリウビリアンダイナミクス  $e^{\mathcal{L}t}(\rho)$  を計算する量子アルゴリズムを完成させよう。ハミルトニアンシミュレーションと同様に、目的の時間  $t$  を微小時間  $\delta t = t/M$  に分割しその時間発展を  $M$  回繰り返す。このときの誤差の大きさは

$$\left\| e^{\mathcal{L}t} - \left( \prod_X e^{\mathcal{L}_X \delta t} \right)^M \right\|_{\diamond} \leq M \left\| e^{\mathcal{L} \delta t} - \prod_X e^{\mathcal{L}_X \delta t} \right\|_{\diamond} \quad (2.117)$$

$$\leq \frac{t^2}{2M} \sum_{X,Y \subset \Lambda} \|\mathcal{L}_X, \mathcal{L}_Y\|_{\diamond} \in \mathcal{O}\left(\frac{t^2}{M}\right) \quad (2.118)$$

である。従って、望みの精度  $\varepsilon$  を達成して  $e^{\mathcal{L}t}$  を実装するには、局所的な領域  $X \subset \Lambda$  にのみ作用する  $e^{\mathcal{L}_X \delta t}$  を局所ユニタリーゲートで実装できれば良い。

ここで問題となるのが、非ユニタリーである  $e^{\mathcal{L}_X \delta t}$  をどのようにユニタリーゲートで実装するかという事である。結論から言うと、微小時間発展  $e^{\mathcal{L}_X \delta t}$  の近似的な Kraus 表現を与え、Stinespring

拡張という CPTP 写像のユニタリーゲートによる実装法を適用すれば良い。まず前者に関して、 $\delta t$  は微小であるのでその 2 次まで展開すると、

$$e^{\mathcal{L}_X \delta t}(\rho) = (\mathcal{I} + \mathcal{L}_X \delta t)(\rho) + \mathcal{O}((\delta t)^2) \quad (2.119)$$

$$\begin{aligned} &= \rho + \left( -i[h_X, \rho] + \sum_{i: X_i \subset X} \left( L_i \rho L_i^\dagger - \frac{1}{2} L_i^\dagger L_i \rho - \frac{1}{2} \rho L_i^\dagger L_i \right) \right) \delta t + \mathcal{O}((\delta t)^2) \\ &= (1 - i\delta t h_X^{\text{NH}}) \rho \left( 1 + i\delta t h_X^{\text{NH}, \dagger} \right) + \sum_{i: X_i \subset X} \delta t L_i \rho L_i^\dagger + \mathcal{O}((\delta t)^2), \end{aligned} \quad (2.120)$$

$$h_X^{\text{NH}} \equiv h_X - \frac{i}{2} \sum_{i: X_i \subset X} L_i^\dagger L_i, \quad (2.121)$$

と近似される。ここで  $h_X^{\text{NH}}$  は非エルミート (Non-Hermitian) ハミルトニアンと呼ばれ、散逸の影響を注目系の寿命として取り入れたハミルトニアンとなっている。そうすると、上記の式は近似的に Kraus 表現による CPTP 写像を与えていることがわかる。 $X$  に作用する Lindblad 演算子  $L_i$  の個数を  $I_X$  として、演算子  $\{K_i\}$  を

$$K_i = \sqrt{\delta t} L_i \quad (i = 1, 2, \dots, I_X), \quad K_{I_X+1} = 1 - i\delta t h_X^{\text{NH}} \quad (2.122)$$

と定めると、 $e^{\mathcal{L}_X \delta t}(\rho) = \sum_{i=1}^{I_X+1} K_i \rho K_i^\dagger + \mathcal{O}((\delta t)^2)$  である。一方で、

$$\sum_{i=1}^{I_X+1} K_i^\dagger K_i = \sum_{i: X_i \subset X} \delta t L_i^\dagger L_i + \left( 1 + i\delta t h_X^{\text{NH}, \dagger} \right) \left( 1 - i\delta t h_X^{\text{NH}} \right) \quad (2.123)$$

$$= \sum_{i: X_i \subset X} \delta t L_i^\dagger L_i + i\delta t \left( h_X^{\text{NH}, \dagger} - h_X^{\text{NH}} \right) + \mathcal{O}((\delta t)^2) \quad (2.124)$$

$$= 1 + \mathcal{O}((\delta t)^2) \quad (2.125)$$

となっており、 $\{K_i\}$  は  $\mathcal{O}((\delta t)^2)$  のずれの範囲内で CPTP 写像を与える。実際の量子系で許される操作は CPTP 写像であるので、 $\{K_i\}$  と近似的に同じ CPTP 写像を与えつつ  $\sum_i K_i'^\dagger K_i' = I$  となるような代替の Kraus 演算子の組  $\{K_i'\}$  が必要となる。これには、 $1 - \alpha \sum_{i=1}^{I_X+1} K_i^\dagger K_i \geq 0$  となるように定数  $\alpha \in (0, 1)$  を定め、新しい Kraus 演算子  $\{K_i'\}$  を

$$K_i' = \sqrt{\alpha} K_i \quad (i = 1, 2, \dots, I_X + 1), \quad K_{I_X+2}' = \sqrt{1 - \alpha \sum_{i=1}^{I_X+1} K_i^\dagger K_i} \quad (2.126)$$

とすれば良い。 $1 - \sum_{i=1}^{I_X+1} K_i^\dagger K_i \in \mathcal{O}((\delta t)^2)$  より、 $\alpha = 1 - \mathcal{O}((\delta t)^2)$  と取れば十分で  $K_{I_X+2}' \in \mathcal{O}(\delta t)$  となる。この事実から、 $\{K_i\}$  の代わりに Kraus 表現  $\{K_i'\}$  を用いても

$$\sum_{i=1}^{I_X+2} K_i' \rho K_i'^\dagger = \sum_{i=1}^{I_X+1} K_i \rho K_i^\dagger + \mathcal{O}((\delta t)^2) = e^{\mathcal{L}_X \delta t} + \mathcal{O}((\delta t)^2) \quad (2.127)$$

のように微小時間発展  $e^{\mathcal{L}_X t}$  を再現できる<sup>2</sup>。

あとは Kraus 表現  $\{K_i\}_i$  が与えられた時にその CPTP 写像をユニタリーな量子回路で実行できれば良い。一般には非ユニタリーである CPTP 写像を印加するにはまず補助系  $a$  を用意する。全系に対して

$$U_{as} |0\rangle_a |\psi\rangle = \sum_{i=0}^{|\{K_i\}_i|-1} |i\rangle_a K_i |\psi\rangle \quad (2.128)$$

<sup>2</sup>時間発展演算子  $e^{\mathcal{L}_X t}$  は任意の時刻  $t \geq 0$  に対して CPTP 写像であるので、本来は微小時刻  $\delta t$  を考えてそれに関する展開を行わなくても対応する Kraus 演算子の組  $\{K_i\}$  が存在する。にも関わらず  $\delta t$  での 1 次までの展開を行ってから Kraus 表現を決めるのは  $\mathcal{O}((\delta t)^2)$  までの誤差を保証した上で系統的に  $\{K_i\}$  の表式を  $\mathcal{L}_X$  から構成するためである。

となる作用を持つユニタリー行列  $U_{as}$  を印加し、補助系  $a$  をトレースアウトすれば

$$\mathrm{Tr}_a [U_{as}(|0\rangle\langle 0|_a \otimes \rho_s)U_{as}^\dagger] = \sum_{i,j} \mathrm{Tr}_a [ |i\rangle\langle j|_a \otimes K_i \rho_s K_j^\dagger ] \quad (2.129)$$

$$= \sum_i K_i \rho_s K_i^\dagger \quad (2.130)$$

により目的の CPTP 写像を得ることができる (Stinespring 拡張)。((?)) 式のような作用を持つ行列  $U_{as}$  がユニタリー行列として構成できることは次のように確かめられる: () 式より  $U_{as}$  は  $\langle i|U_{as}|0\rangle_a = K_i$  であり  $\{|i\rangle_a\}$  基底を用いて

$$U_{as} = \left( \begin{array}{c|c} K_0 & \\ \hline K_1 & * \\ \vdots & \end{array} \right) \quad (2.131)$$

のようなブロック行列としてかける。初めの  $|0\rangle_a$  で張られる列ブロックに関して

$$\langle 0|U_{as}^\dagger U_{as}|0\rangle_a = \sum_i \langle 0|U_{as}^\dagger|i\rangle_a \langle i|U_{as}|0\rangle_a \quad (2.132)$$

$$= \sum_i K_i^\dagger K_i \quad (2.133)$$

$$= I \quad (2.134)$$

より、互いに直交する  $\dim(\mathcal{H})$  個の正規ベクトルとなっている。このとき、((?)) 式の \* 部分に入る  $(|\{K_i\}_i| - 1)\dim(\mathcal{H})$  個の列ベクトルを (Gram-Schmidt 法などを使って) それらの  $|0\rangle_a$  列と合わせて全系の Hilbert 空間の正規直交系をなすように構成すれば、目的のユニタリー行列  $U_{as}$  が得られる。必要な列ベクトルの個数が系サイズに関して指数的に大きいためその構成は容易ではないが、注目系のサイズが小さければ  $U_{as}$  の全成分を与えることができ、なおかつその基本ユニタリーゲートの分解を与えることも可能である。

さて、議論をリウビリアンの時間発展  $e^{\mathcal{L}t}$  のシミュレーションに戻そう。Trotter 分解と Stinespring 拡張を利用して次のように量子回路を構成する。

### 1. Trotter 分解により

$$e^{\mathcal{L}t} = \left( \prod_X e^{\mathcal{L}_X \delta t} \right)^M + \mathcal{O}\left(\frac{N(lt)^2}{M}\right) \quad (2.135)$$

と近似する。ここで、 $l \equiv \max_{X \subset \Lambda} (\|\mathcal{L}_X\|_\diamond)$  は局所的なハミルトニアンと散逸のエネルギーの大きさを表し、 $\mathcal{L}_X$  が近接相互作用しか持たないとして、

$$\sum_{X,Y} \|[\mathcal{L}_X, \mathcal{L}_Y]\| \sim Nl^2 \quad (2.136)$$

という交換子スケールングを利用した。

2. 各 CPTP 写像  $e^{\mathcal{L}_X \delta t}$  を近似的に与える Kraus 表現  $\{K_i^X\}$  に対して、Stinespring 拡張によりそれを実現するユニタリー  $U_{as}^X$  を構成する。各  $U_{as}^X$  はサイズ  $\mathcal{O}(|X|) = \mathcal{O}(1)$  の局所的な局所的領域のみに作用するので、その具体的な構成は古典的な数値計算により可能である。ここでは、Kraus 表現を  $\{K_i^X\}$  で近似することによる誤差が () 式の蓄積として

$$\mathcal{O}(M \times |\{\mathcal{L}_X\}_X| \times (l\delta t)^2) = \mathcal{O}\left(\frac{N(lt)^2}{M}\right) \quad (2.137)$$

だけ生じる。また、必要な補助系の自由度は合計で  $\mathcal{O}(M \times |\{\mathcal{L}_X\}_X| \times I_X) = \mathcal{O}(MN)$  であり、量子ビット数に換算して  $\mathcal{O}(\log(MN))$  が必要である。

量子回路全体での誤差を  $\mathcal{O}(\varepsilon)$  とするには、時間の分割数  $M$  を

$$M \in \mathcal{O}\left(\frac{N(lt)^2}{\varepsilon}\right) \quad (2.138)$$

となるように取れば良いことが分かる。上記の過程で利用するユニタリーゲートは Stinespring 拡張  $U_{as}^X$  および それを印加する際に補助系  $a$  と作用する領域  $X$  の量子ビットを隣接させるための SWAP ゲートである。前者  $U_{as}^X$  は、Solovay-Kitaev アルゴリズムにより  $M \times |\{\mathcal{L}_X\}_X|$  回の合計誤差が  $\mathcal{O}(\varepsilon)$  となるように、 $\text{poly}(\log(M \times |\{\mathcal{L}_X\}_X|/\varepsilon))$  個の基本ゲートにより構成できる。以上よりリウビリアンダイナミクスのシミュレーションに関して次が結論づけられる。

**Theorem 2.9. (リウビリアンダイナミクスのシミュレーション)**

サイズ  $N$  の量子系の状態  $\rho_s$  が与えられたとき、局所的なリウビリアン  $\mathcal{L} = \sum_{X \subset \Lambda} \mathcal{L}_X$  による Markov なダイナミクス  $e^{\mathcal{L}t}(\rho_s)$  は、 $\text{poly}(N, t, 1/\varepsilon)$  個の基本ゲートと  $\text{poly}(\log N, \log t, \log(1/\varepsilon))$  個の補助量子ビットで要求精度  $\varepsilon$  以内で効率よくシミュレートできる。

よって、リウビリアンダイナミクスはハミルトニアンダイナミクスを包含し一般には非ユニタリーである広いクラスではあるが、ユニタリーゲートで構成される量子計算機で多項式の時間・量子ビット数のコストで効率よくシミュレートできる。

**時間依存開放系と Church-Turing のテーゼ。**— 最後にリウビリアンが時間依存しており、量子系が時間依存 GKSL 方程式

$$\frac{d}{dt}\rho_s(t) = \mathcal{L}(t)(\rho_s(t)), \quad \mathcal{L}(t) = \sum_{X \subset \Lambda} \mathcal{L}_X(t) \quad (2.139)$$

に従う場合のシミュレーションについても考えよう。時間発展演算子はハミルトニアンの場合と同様に

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{T} \exp\left(\int_{t_0}^t d\tau \mathcal{L}(\tau)\right) \quad (2.140)$$

であるが、 $t = M\Delta t$  により時間を離散化して

$$\mathcal{U}_\Delta(t) = \prod_{p=0}^{M-1} e^{\mathcal{L}(p\Delta t)\Delta t} \quad (2.141)$$

により近似する。近似誤差は

$$\begin{aligned} \|\mathcal{U}(t, 0) - \mathcal{U}_\Delta(t)\|_\diamond &\leq \left\| \left( \mathcal{U}(t, (M-1)\Delta t) - e^{\mathcal{L}((M-1)\Delta t)\Delta t} \right) \mathcal{U}((M-1)\Delta t, 0) \right\|_\diamond \\ &\quad + \left\| e^{\mathcal{L}((M-1)\Delta t)\Delta t} \left( \mathcal{U}((M-1)\Delta t, 0) - \prod_{p=0}^{M-1} e^{\mathcal{L}(p\Delta t)\Delta t} \right) \right\|_\diamond \\ &\leq \left\| \mathcal{U}(t, (M-1)\Delta t) - e^{\mathcal{L}((M-1)\Delta t)\Delta t} \right\|_\diamond + \left\| \mathcal{U}((M-1)\Delta t, 0) - \prod_{p=0}^{M-1} e^{\mathcal{L}(p\Delta t)\Delta t} \right\|_\diamond \\ &\quad \vdots \\ &\leq \sum_{p=0}^{M-1} \left\| \mathcal{U}((p+1)\Delta t, p\Delta t) - e^{\mathcal{L}(p\Delta t)\Delta t} \right\|_\diamond \end{aligned} \quad (2.142)$$

となって、各微小時間幅  $p\Delta t \sim (p+1)\Delta t$  の誤差の蓄積として評価できる。

$$\begin{aligned}
\left\| \mathcal{U}((p+1)\Delta t, p\Delta t) - e^{\mathcal{L}(p\Delta t)\Delta t} \right\|_{\diamond} &\leq \int_0^{\Delta t} du \left\| \frac{d}{du} e^{\mathcal{L}(p\Delta t)(\Delta t-u)} \mathcal{U}(u+p\Delta t, p\Delta t) \right\|_{\diamond} \\
&\leq \int_0^{\Delta t} du \left\| \mathcal{L}(u+p\Delta t) - \mathcal{L}(p\Delta t) \right\|_{\diamond} \\
&\leq \int_0^{\Delta t} du \int_0^u ds \left\| \frac{d}{ds} \mathcal{L}(s+p\Delta t) \right\|_{\diamond} \\
&\leq \frac{1}{2} (\Delta t)^2 \max_t \left( \left\| \dot{\mathcal{L}}(t) \right\|_{\diamond} \right) \tag{2.143}
\end{aligned}$$

である。結局、 $\gamma = \max_t \left( \left\| \dot{\mathcal{L}}(t) \right\|_{\diamond} \right)$  とおくと、 $\left\| \mathcal{U}(t, 0) - \mathcal{U}_{\Delta}(t) \right\|_{\diamond} \leq M\gamma(\Delta t)^2/2$  によって近似誤差が抑えられ、各微小時間発展  $e^{\mathcal{L}(p\Delta t)\Delta t}$  に Trotter 分解を適用すると、

$$\mathcal{U}(t, 0) = \prod_{p=0}^{M-1} \left( \prod_{X \subset \Lambda} e^{\mathcal{L}_X(p\Delta t)\Delta t} \right) + \mathcal{O}(M\gamma(\Delta t)^2 + M(l\Delta t)^2) \tag{2.144}$$

$$= \prod_{p=0}^{M-1} \left( \prod_{X \subset \Lambda} e^{\mathcal{L}_X(p\Delta t)\Delta t} \right) + \mathcal{O}\left( \frac{(\gamma + l^2)t^2}{M} \right) \tag{2.145}$$

である。所望の誤差  $\varepsilon$  を達成するように時間の分割数  $M \in \mathcal{O}((\gamma + l^2)t^2/\varepsilon)$  に設定して  $e^{\mathcal{L}_X(p\Delta t)\Delta t}$  を局所ユニタリーゲートで実装すれば、時間依存するリウビリ안의時間発展も poly( $N, t, 1/\varepsilon$ ) のリソースでシミュレート可能である。

また、時間依存するリウビリアンダイナミクスが効率よく量子計算機でシミュレートできるという事実から、“量子開放系を量子計算機として利用した際の計算能力”についても議論できる。これまでに議論してきたユニタリーな量子回路を用いる量子計算機は、時間依存する Schrödinger 方程式に従う量子系を利用して実現される。実際、 $U_1, U_2, \dots, U_d$  の 1 量子ビットゲートまたは 2 量子ビットゲートからなる量子回路  $U = U_d U_{d-1} \dots U_1$  の作用は、

$$H(t) = \begin{cases} -i \log U_1 & (0 \leq t < 1) \\ -i \log U_2 & (1 \leq t < 2) \\ \vdots \\ -i \log U_d & (d-1 \leq t < d) \end{cases} \tag{2.146}$$

という時間依存する局所ハミルトニアン下の時間発展と等価であり、量子アルゴリズムは初期状態  $|0\rangle^{\otimes N}$  にこのような  $H(t)$  を制御して実現し計算基底での測定を行うことで実行される。ではここで、Schrödinger 方程式の代わりに開放系の GKSL 方程式に従う量子系で量子計算機を構成すればどのようなようになるかを考えよう。すなわち、初期状態  $\rho_s = (|0\rangle\langle 0|)^{\otimes N}$  を用意したのち局所リウビリアン  $\mathcal{L}(t)$  で時間発展させたのち計算基底での測定結果を出力として得るような計算機を考える。GKSL 方程式は自明に Schrödinger 方程式を包含するので、そのような新しい量子計算機は少なくとも元の量子計算機以上の性能を持つことが言える。では、量子開放系による量子計算機が (例えば計算時間の指数加速などで) 通常の量子計算機よりも優位といえるであろうか? リウビリアンダイナミクスを効率よくシミュレートする量子アルゴリズムの存在から、この結論は次のように直ちに与えられる。

**Theorem 2.10. (量子開放系の Church-Turing のテーゼ)**

時間依存する局所的なリウビリアンダイナミクスに従う量子開放系を用いて多項式時間で解ける判定問題の集合は BQP である。

*Proof.* — 量子開放系によって多項式時間で解ける判定問題の集合は自明に BQP を包含するので、任意の量子開放系によって多項式時間で解ける判定問題が BQP に含まれることを示せば良い。量子

開放系による多項式時間のアルゴリズムを実現する局所リウビリアンを  $\mathcal{L}(t)$  とする。その量子アルゴリズムの出力は

$$p(z) = \text{Tr} \left[ |0\rangle\langle 0| \mathcal{T} e^{\int_0^t d\tau \mathcal{L}(\tau)} \left( |0\rangle\langle 0|^{\otimes N} \right) \right], \quad z \in [0, 1]^N \quad (2.147)$$

という確率分布であるが、これは Trotter 分解を用いてリウビリアンダイナミクスをシミュレートすることでユニタリーな量子回路で  $\text{poly}(N, t, 1/\varepsilon)$  以内の時間・量子ビット数のコストで誤差  $\varepsilon$  以内で得ることができる。よって、量子開放系によって多項式時間で解ける判定問題はユニタリーな量子回路を用いても多項式時間で解け BQP に含まれる。  $\square$

## References

- [AAT24] Junaid Aftab, Dong An, and Konstantina Trivisa. Multi-product Hamiltonian simulation with explicit commutator scaling. 2024.
- [BCC<sup>+</sup>15] Dominic W. Berry, Andrew M. Childs, Richard Cleve, Robin Kothari, and Rolando D. Somma. Simulating hamiltonian dynamics with a truncated taylor series. *Phys. Rev. Lett.*, 114:090502, Mar 2015.
- [BHMT02] Gilles Brassard, Peter Hoyer, Michele Mosca, and Alain Tapp. Quantum amplitude amplification and estimation. *Contemporary Mathematics*, 305:53–74, 2002.
- [CST<sup>+</sup>21] Andrew M. Childs, Yuan Su, Minh C. Tran, Nathan Wiebe, and Shuchen Zhu. Theory of trotter error with commutator scaling. *Phys. Rev. X*, 11:011020, Feb 2021.
- [GSLW19] András Gilyén, Yuan Su, Guang Hao Low, and Nathan Wiebe. Quantum singular value transformation and beyond: exponential improvements for quantum matrix arithmetics. In *Proceedings of the 51st Annual ACM SIGACT Symposium on Theory of Computing*, STOC 2019, pages 193–204, New York, NY, USA, June 2019. Association for Computing Machinery.
- [LKW19] Guang Hao Low, Vadym Kliuchnikov, and Nathan Wiebe. Well-conditioned multi-product Hamiltonian simulation. 2019.
- [Miz26] Kaoru Mizuta. On the commutator scaling in hamiltonian simulation with multi-product formulas. *Quantum*, 10:1974, January 2026.