
Trotter 分解

Kaoru Mizuta
The University of Osaka

2026 年 7 月 30 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

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

を満たすよう要請する。一般に ε 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} を作用させ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 ε 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 モデル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。このモデルでは、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・化学で考えるモデルに備わっており、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 モデルは $Z_i Z_{i+1}$ 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モデルとして現れる。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 モデルという)。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に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_{γ} 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

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

である。ここで、

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

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；

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

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。 $\square$

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。

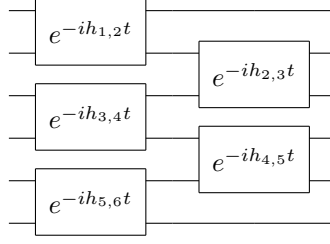


図 1.1: Lie-Trotter 公式の量子回路による実装。第 1 層目は $e^{-iH_1 t}$, 第 2 層目は $e^{-iH_2 t}$ を表し、それぞれ 2-qubit ゲートを基本ゲートとして深さ 1 で実装できる。

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、

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

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、

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

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 ε 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_{γ} 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 γ_v 、対応する時間幅の係数 α_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で決まるため、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 α, β, γ 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_γ での時間発展演算子の積となるとき、 $T_p(t)$ も自明に H_γ 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、 $T_{p-1}(t) = e^{-iHt} + \mathcal{O}(t^p)$ 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。 $\square$

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 $T_1(t) = e^{-iH_2t}e^{-iH_1t}$ 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 α, β 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。¹ 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 α_q, β_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 α_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 α_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。

¹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 α_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发散を防げる。

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 ε 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 Γ 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 α_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;

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

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

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

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

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

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

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。 $\square$

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

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

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 Λ 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 Λ 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。 $\square$

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_γ は $\{h_X\}$ の部分
和であるとする。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_γ が h_X の部分和であることより

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

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 ε 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 ε 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 polylog の範囲内でしかずれない。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_{γ} 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 $e^{-iH_{\gamma_v}\alpha_v t}$ 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

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

- 量子ゲート数

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

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

- 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_{γ} 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 $e^{-ih_X \alpha_v t}$ を並列化できるのでその $\mathcal{O}(1/N)$ 倍となる。

- 回路深さ

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

- 量子ゲート数

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

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 ε 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 ε 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⁺21] である。

References

- [CST⁺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.