KM, Tomotaka Kuwahara, arXiv:2504.20746 (2025), to appear in Physical Review Letters

Trotterization is substantially efficient for low-energy states

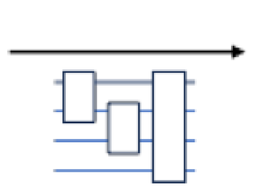
-Trotter分解の低エネルギー初期状態に対する本質的効率性-

Kaoru Mizuta (UTokyo, RIKEN RQC, JST PRESTO)

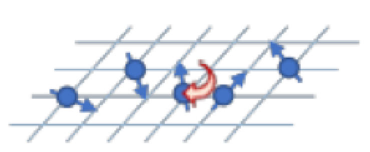
1. Intro: Hamiltonian simulation

■ Hamiltonian simulation Schrodinger eq. を量子計算機で解く

$|\psi\rangle$ 初期状態



$e^{-iHt}|\psi\rangle + \mathcal{O}(\varepsilon)$ 時刻 t での解



- 指数加速が期待
- 物性物理&量子化学へ広い応用

Goal: 系サイズ N & 時刻 t & 許容誤差 ε について高速な量子アルゴリズム

■ Trotter 分解 NISQ & FTQC で最も標準的な量子アルゴリズム

[p 次の積公式]

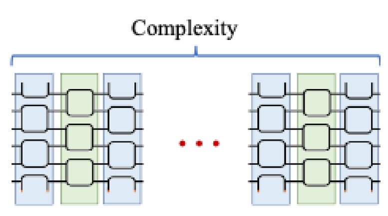
$$T_p(\tau) = e^{-iH\tau} + \mathcal{O}(\tau^{p+1})$$

$H = H_1 + H_2$ の場合

$$T_1(\tau) = e^{-iH_2\tau}e^{-iH_1\tau}$$
$$T_2(\tau) = e^{-iH_1\tau/2}e^{-iH_2\tau}e^{-iH_1\tau/2}$$

[アルゴリズム]

微小時間 $\tau = t/r$ の時間発展を繰り返す



$$e^{-iHt} = \left\{T_p\left(\frac{t}{r}\right)\right\}^r + \mathcal{O}\left(\frac{t^{p+1}}{r^p}\right)$$

$< \varepsilon$ (許容誤差)

2. Intro: Trotter 誤差と計算コスト

■ Trotter 誤差 "全ての可能な初期状態に対する worst-case の誤差"

$$\|e^{-iH\tau} - T_p(\tau)\| = \max_{|\psi\rangle \in \mathcal{H}} \left(\|(e^{-iH\tau} - T_p(\tau))|\psi\rangle\|\right)$$

誤差の上界:

$$H = \sum_{\gamma=1}^{\Gamma} H_\gamma$$

1-norm スケーリング (Taylor展開)

$$\leq \mathcal{O}\left(\left(\sum_\gamma \|H_\gamma\|\tau\right)^{p+1}\right) \subset \mathcal{O}\left((Ng\tau)^{p+1}\right)$$

交換子スケーリング (局所性を反映)

A. M. Childs, et al., PRX **11**, 011020 (2021)

$$\leq \mathcal{O}\left(\sum_{\gamma_0,\cdots,\gamma_p} \|[H_{\gamma_p},[\cdots,[H_{\gamma_1},H_{\gamma_0}]]]\|\tau^{p+1}\right)$$

Many vanishing terms

$$\subset \mathcal{O}\left((g\tau)^{p+1}N\right)$$

■ 計算複雑性 ← Worst-case error, 許容誤差で決まる

$$r \times \left(g\frac{t}{r}\right)^{p+1} N \leq \mathcal{O}(\varepsilon)$$

1 step の誤差　許容誤差

Trotter 数 (複雑性)

$$r \in \Theta\left(gt\left(\frac{Ngt}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}\right)$$

- ✅ 任意の初期状態に対する精度保証
- ✅ 交換子スケーリングによる良い系サイズ N 依存性

LCU, QSVT などよりも良い

D. W. Berry, et al., PRL 114, 090502 (2015).
A. Gilyen, et al., STOC (2019)

3. Motivation & Result: 低エネルギー初期状態に対する本質的効率性

■ 動機 物理的に興味のあるクラスの初期状態に対して誤差・コストを本質的に改善できるか？

Worst-case error は過大評価している

[Setup]

半正定値項からなる一般の N-qubit 局所 Hamiltonian

$$H = \sum_X h_X, \quad h_X \geq 0$$

・1 site あたりエネルギー (extensiveness):

$$g = \max_{i=1,\cdots,N}\left(\sum_{X \ni i} \|h_X\|\right)$$

有限距離相互作用の場合、 $g \in \mathcal{O}(1)$

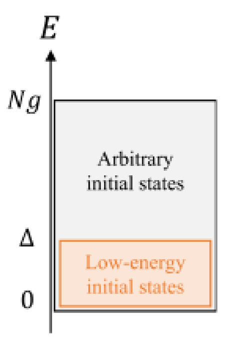
・全系の最大エネルギー: $Ng \quad (\geq \|H\|)$

■ 結果 低エネルギー初期状態に対する普遍的なスケーリングの改善を証明

[低エネルギー初期状態]

$$|\psi_{\leq\Delta}\rangle = \sum_{n; E_n \leq \Delta} c_n |E_n\rangle, \quad 0 \leq \Delta \ll Ng$$

初期状態エネルギー



[計算コスト]

任意の初期状態 $r \propto gt\left(\frac{Ngt}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}$

低エネルギー初期状態 $r \propto gt\left(\frac{(\Delta + g\log(N/\varepsilon))t}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}$

・初期状態のエネルギー $\Delta \in o(Ng)$ でアルゴリズム高速化

・種々の先行研究の結果を改善 & これ以上改善できない最適なスケーリングを達成

B. Şahinoğlu, et al., Npj Quantum Info. (2021)

4. Result: 誤差上限と導出

■ 低エネルギー初期状態に対する誤差

$$\|(e^{-iH\tau} - T_p(\tau))\Pi_{\leq\Delta}\| = \max_{|\psi_{\leq\Delta}\rangle}\left(\|(e^{-iH\tau} - T_p(\tau))|\psi_{\leq\Delta}\rangle\|\right)$$

[結果]

	誤差上限	Trotter 数 r	
任意初期状態 (A. M. Childs, et al., PRX **11**, 011020 (2021))	$\mathcal{O}\left((g\tau)^p Ng\tau\right)$	$gt\left(\frac{Ngt}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}$	
低エネルギー状態 (B. Şahinoğlu, et al., Npj Quantum Info. (2021))	$\mathcal{O}\left(\{(\Delta + (g\tau)Ng)\tau\}^{p+1}\right)$	$\Delta t\left(\frac{\Delta t}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}} + gt\left(\frac{gt}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{2p+1}} N^{\frac{1}{2}+\frac{1}{4p+2}}$	$\Delta \lesssim N^{\frac{1}{p+1}}g$ でのみ高速化 / N 依存性の改善殆どなし
低エネルギー状態 (K. Hejazi, at al., arXiv:2402.10362 (2024))	$\mathcal{O}\left(\{(\Delta + (g\tau)^{p+1}Ng)\tau\}^{p+1}\right)$	$\Delta t\left(\frac{\Delta t}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}} + gt\left(\frac{N^{p+1}gt}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{(p+1)^2+p}}$	
低エネルギー状態 (Our result)	$\mathcal{O}\left((g\tau)^p\{\Delta + g\log(N/\epsilon)\}\tau\right)$	$gt\left(\frac{(\Delta + g\log(N/\varepsilon))t}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}$	$\Delta \in o(Ng)$ で高速化 / N 依存性の指数的改善

Trotter 誤差による低エネルギー部分空間からの leakage

■ 導出 低エネルギー性 & 交換子スケーリングの両立

(1) 低エネルギー空間における多重交換子の上限

$$\sum_{\gamma_0,\cdots,\gamma_q} \|\Pi_{\leq\Delta}[H_{\gamma_q},[\cdots,[H_{\gamma_1},H_{\gamma_0}]]]\Pi_{\leq\Delta}\| \leq q!(2kg)^q\Delta$$

先行研究: $\lesssim \mathcal{O}(\Delta^{p+1})$

→ 相互作用の局所性を正確に反映

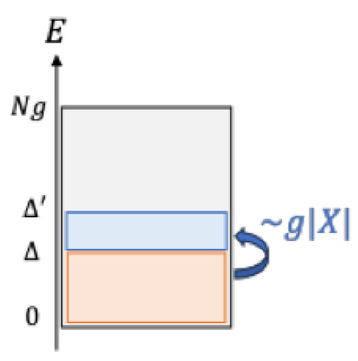
(2) Trotter 誤差による低エネルギー空間からの leakage

Hastings' theorem on leakage

I. Arad, et al., J. Stat. Mech. 2016, 033301 (2016).

$$\|\Pi_{>\Delta'}O_X\Pi_{\leq\Delta}\| \leq \|O_X\|e^{-\mathcal{O}\left(\frac{\Delta'-\Delta-g|X|}{g}\right)}$$

Local op.



Trotter 誤差による leakage

$$\|\Pi_{>\Delta'}(e^{-iH\tau} - T_p(\tau))\Pi_{\leq\Delta}\|$$
$$\lesssim \sum_{\gamma_0,\cdots,\gamma_q} \|\Pi_{>\Delta'}[H_{\gamma_q},[\cdots,[H_{\gamma_1},H_{\gamma_0}]]]\Pi_{\leq\Delta}\|\tau^{p+1}$$

Local op.

先行研究: $\|\Pi_{>\Delta'}T_p(\tau)\Pi_{\leq\Delta}\|$

Non-local op.

5. Extension: 他の低エネルギー状態

ここまでの初期状態: $|\psi_{\leq\Delta}\rangle = \sum_{n;E_n\leq\Delta} c_n|E_n\rangle$ 低エネルギー部分空間で閉じている

→一般にそのような状態の準備や検証は困難

拡張: 低エネルギー期待値を持つ弱相関な初期状態

・**弱相関性**: 積状態, 有限回路深さのゲートをかけた積状態, など

・**低エネルギー期待値**: $\langle\psi|H|\psi\rangle \leq \Delta$
- 古典/量子計算で検証が容易
- 部分空間で閉じる必要なし

[誤差上限]

$$\leq \mathcal{O}\left((g\tau)^p\{\Delta + \sqrt{N\log(N/\epsilon)}g\}\tau\right) + \epsilon$$

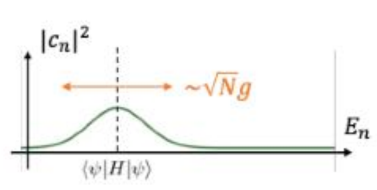
[Trotter 数 r]

$$gt\left(\frac{\Delta t + \sqrt{N\log(N/\varepsilon)}gt}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{p}}$$

低エネルギー領域 $\langle\psi|H|\psi\rangle \in o(Ng)$ で N について2乗加速まで可能

導出

我々の結果 & 量子 Chernoff 限界



A. Anshu, New J. Phys. **18**, 083011 (2016).

6. Summary & Future direction

エネルギー $\Delta \in o(Ng)$ の初期状態に対する普遍的な誤差・コストのスケーリング改善

最適性: 誤差の $\Theta(\Delta)$-scaling は理論上ベスト ← 任意初期状態での最適な scaling $\Theta(N)$ を $\Delta = Ng$ で再現するため

Q. Zhao, et al., Nature Physics 21, 1338 (2025)

■ 展望

低エネルギー × Trotter-based algorithms (qDRIFT, 複数積公式, etc. より良いスケーリング)

低エネルギー × 時間依存量子系 (断熱量子状態準備による低エネルギー固有状態)