双通道多乘积公式

Seung Park[1,2], Sangjin Lee[3], 和 Kyunghyun Baek[1,2]

[1]延世大学先进技术融合研究与教育研究所，韩国首尔 03722[2]延世大学研究生院量子信息系，韩国首尔 03722[3]韩国高等研究院量子宇宙中心，韩国首尔 02455

arXiv:2602.01713v1 [quant-ph] 2 Feb 2026

基于乘积公式（PF）的量子模拟，是在近期量子计算机上模拟量子系统的一种有前景的方法。要达到所需的模拟精度，通常需要以多项式级增长的 Trotter 步数；而受限于当前量子硬件的性能，这仍然颇具挑战。为缓解这一问题，人们引入了多乘积公式（MPF）等后处理技术，以在有限的硬件资源下抑制算法误差。

在这项工作中，我们提出了一种双通道多乘积公式，可使 Trotter误差标度提升两倍。因此，与传统多乘积公式方案相比，我们的方法能够以约一半的电路深度达到目标模拟精度。值得注意的是，在真实量子硬件上实现时，电路深度的降低可直接转化为更低的物理误差缓解开销。我们以固定的 CNOT数量作为量子电路的衡量指标，证明该方案可显著降低算法误差，同时采样误差基本保持不变。

1 引言

量子计算机通过利用由叠加态和纠缠所体现的量子力学，为探索庞大的希尔伯特空间提供了一个高效平台。利用这些特性的重要应用之一是量子模拟 [1–4], , 它能够处理经典方法难以处理的、处于指数级庞大希尔伯特空间中的量子多体系统动力学。

高效量子算法的开发对于模拟量子多体系统至关重要，是量子计算领域的核心课题 [5, 6]。为此，研究人员提出了多种先进的量子模拟算法，例如乘积公式（PF）方法 [1, 7–9], 幺正算符线性组合方法 [10, 11], 量子信号处理 [12], 基于量子游走的算法 [13–16],以及量子奇异值变换 [17]。这些方法各具特色，因此算法的选择取决于问题的具体特点，例如哈密顿量的结构和局域性，以及算法开销和硬件限制。

乘积公式方法 [1, 7–9]尤其适用于近期量子设备，因为它们无需受控时间演化或分块编码构造。因此，相较之下，它们预计能够更好地抵御物理误差，也更容易在现实的硬件限制下实现，例如相干时间有限、量子比特连接受限。为在乘积公式框架内实现更高精度的量子模拟，研究人员提出了一种递归方法，可生成精度任意高的量子电路 [18–22]。然而，由于这些方法具有递归结构，其生成的量子电路深度会随目标精度的提高而呈指数增长。

为缓解量子门序列过长的问题，研究人员提出了多乘积公式（MPF）方法。这类方法依赖于对多个量子电路的测量结果进行经典后处理，但需要额外资源 [23–28]。实现这些算法的主要瓶颈在于——

Sangjin Lee: sangjin5190@gmail.com
Kyunghyun Baek: k.baek@yonsei.ac.kr

电路执行过程中累积的物理误差。因此，有效算法误差缓解策略的一大优势，在于能够以较低的电路深度达到所需的准确度。

在这项工作中，我们提出了一种改进的 MPF 方案，它结合了 MPF 电路的双通道，在降低电路深度的同时提高模拟精度。对于给定的电路深度并使用相同数量的测量，与传统 MPF 方法相比，所提出方法的算法缓解性能几乎提高了一倍 [29], 。

本文结构安排如下。下一节中，我们将简要回顾传统的 MPF 方法，并介绍所考虑的量子模拟设置。在第3节中，我们提出了称为双通道多产品公式的协议：该方法利用两类乘积公式。我们还概述了其算法性能的证明，详细证明见附录B。第4节中，我们通过数值模拟展示该方案的理想性能，以及其在含噪近期量子模拟器上的表现。最后，本文的结论见第5节。

2 MPF简要回顾

乘积公式（乘积公式） [1, 7, 21] 是量子模拟中一种众所周知的技术，用于近似量子系统的动力学；该动力学由给定哈密顿量 H的时间演化算符 $U(t) = e^{-iHt}$ 支配。通过将哈密顿量分解为 k-局域哈密顿量H_j，例如 $H = \sum_{j=1}^{N} H_j$， α 阶乘积公式 $T_\alpha(t)$由$\{e^{-ia_j(t)H_j}\}$的乘积构造而成，其中$e^{-ia_j(t)H_j}$ 可由量子计算平台上的原生量子门实现。例如，一阶和二阶Trotter PF$T_1(t)$与 $T_2(t)$由下式给出

$$T_1(t) = \prod_{j=1}^{N} e^{-itH_j} = U(t) + \mathcal{O}(t^2), \tag{1}$$

$$T_2(t) = T_1\left(\frac{t}{2}\right) T_1^\dagger\left(-\frac{t}{2}\right) = U(t) + \mathcal{O}(t^3), \tag{2}$$

其中 $T_\alpha^\dagger(t)T_\alpha(t) = \mathbb{1}$ ，相应的误差称为 Trotter 误差。若 $T_\alpha^\dagger(-t) = T_\alpha(t)$，则称 PF 为对称乘积公式；否则称为常规PF，

例如， $T_1(t)$ 是常规PF，而 $T_2(t)$ 是对称乘积公式。

为提高量子模拟的准确度，可以构造高阶乘积公式，例如 [7, 21],

$$T_{2k+2}(t) = T_{2k}^2(\gamma_k t)T_{2k}((1-4\gamma_k)\,t)T_{2k}^2(\gamma_k t), \tag{3}$$

其中 $\gamma_k^{-1} = 4 - 4^{1/(2k+1)}$ ($k \in$ Z+)，或实现其 n重乘积公式，

$$T_\alpha^n\left(\frac{t}{n}\right) = U(t) + \mathcal{O}\left(\frac{t^{\alpha+1}}{n^\alpha}\right).$$

然而，由于递归特性，高阶乘积公式需要指数级增长的电路深度；而 n重Trotter乘积公式尽管需要随n线性增长的电路深度，却无法改善 t 固有的Trotter误差标度。这种对长量子门序列的需求会因物理噪声而严重损害量子模拟的结果。

近年来，为了实现高效且精确的量子模拟，多乘积公式（MPF）方法已被广泛用于降低基于乘积公式的方法的算法误差 [10, 30, 31]。MPF方法通过将多个折叠乘积公式线性组合，以达到所需的模拟准确度。具体而言，对于给定的乘积公式 T_α（t）及其n_1阶…、K重折叠乘积公式，它们的线性组合$\sum_{i=1}^{K} c_i T_\alpha^{n_i}\left(\frac{t}{n_i}\right)$，其中范德蒙德方程确定系数 [31], ，可改善Trotter误差标度

$$\sum_{i=1}^{K} c_i T_\alpha^{n_i}\left(\frac{t}{n_i}\right) = U(t) + \mathcal{O}(t^{o_K}), \tag{4}$$

其中

$$o_K = \begin{cases} \alpha + K & \text{for regular PFs,} \\ \alpha + 2K - 1 & \text{for symmetric PFs.} \end{cases} \tag{5}$$

此外，研究还表明，如果 MPF 系数 $\{c_i\}$ 和折叠数（Trotter 指数）$\{n_i\}$ 满足式 (4)，那么某个可观测量的期望值加权和 O 会呈现相同的算法误差缓解效果 [29]

$$\begin{aligned} \langle O(t)\rangle_{\mathrm{MPF}} &= \sum_{i=1}^{K} c_i \langle O(t)\rangle_{T_\alpha^{n_i}}, \\ &= \langle O(t)\rangle_U + \mathcal{O}(t^{o_K}), \end{aligned} \tag{6}$$

其中

$$\langle O(t)\rangle_{T_\alpha^n} := \left\langle \psi \middle| T_\alpha^{\dagger n}\left(\frac{t}{n}\right) O T_\alpha^n\left(\frac{t}{n}\right) \middle| \psi \right\rangle,$$
$$\langle O(t)\rangle_U := \langle\psi|U^\dagger(t)OU(t)|\psi\rangle,$$

对于初始态 $|\psi\rangle$。

式中用于算法误差缓解的多乘积公式方法 (6) 在真实量子模拟器上相对容易实现，因为它只需重复执行 Trotter 电路，并对测量结果进行经典后处理，而无需像前沿量子算法那样使用多个受控幺正门。这种电路深度相对较浅的量子电路能够抑制量子模拟中产生的物理误差，否则随着电路深度增加，这些误差会使量子模拟结果呈指数级恶化。因此，与量子奇异值变换等其他量子模拟算法相比，MPF 方法非常适合存在物理噪声的近期量子设备；后者通常需要深得多、资源消耗也大得多的电路 [10–16, 32–34]。

3 双通道 MPF 协议

虽然 MPF 方法提供了一种有利的途径，可将 Trotter 误差抑制到任意阶，且该阶数随 K线性增长，但它也面临所谓的“条件数问题” [27, 29] ，这使得协议的结果容易受到硬件噪声的影响。要实现条件良好的MPF，通常需要较大的折叠数，从而导致电路深度显著增加，进而累积更多物理误差。

这里，我们提出一种后处理协议，即双通道多乘积公式（DCMPF）协议。在该协议下，使用$\mathcal{O}(t^{\alpha+2K})$ 阶的常规乘积公式（参见式(5)），Trotter误差可得到缓解。这意味着我们的协议所需资源更少，且在条件数问题方面相对稳定，稍后将对此进行说明。

为介绍我们的协议，对于给定的常规PF $T_\alpha(t)$，我们记$\bar{T}_\alpha(t) = T_\alpha^\dagger(-t)$。请注意，$T_\alpha(t)$ 是通过反转 $T_\alpha(t)$ 中序列的顺序构造的乘积公式；例如，$\bar{T}_1(t) = \prod_{j=1}^N e^{-iH_{N-j+1}t}$ 由式 (1) 中给出的$T_1(t)$ 得到。利用 $T_\alpha(t)$和 $T_\alpha(t)$ 及其折叠电路，我们的协议将 Trotter误差标度从$\mathcal{O}(t^{\alpha+K})$ 提升至$\mathcal{O}(t^{\alpha+2K})$。

我们证明，线性组合

$$\frac{1}{2}\sum_{i=1}^K c_i\left(T_\alpha^{n_i}\left(\frac{t}{n_i}\right) + \bar{T}_\alpha^{n_i}\left(\frac{t}{n_i}\right)\right) = U(t) + \mathcal{O}(t^{\alpha+2K}), \tag{7}$$

其中系数 $\{c_i\}$ 满足范德蒙德方程

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ n_1^{-(\alpha+1)} & n_2^{-(\alpha+1)} & \cdots & n_K^{-(\alpha+1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ n_1^{-2K+\alpha-1} & n_2^{-2K+\alpha-1} & \cdots & n_K^{-2K+\alpha-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_K \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{8}$$

与基于对称乘积公式的 MPF 方程相同。此外，我们的协议也适用于可观测量 O的期望值；缓解结果为

$$\begin{aligned}\langle O(t)\rangle_{\mathrm{DCMPF}} &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^K c_i\left(\langle O(t)\rangle_{T_\alpha^{n_i}} + \langle O(t)\rangle_{\bar{T}_\alpha^{n_i}}\right), \\ &= \langle O(t)\rangle_U + \mathcal{O}(t^{\alpha+2K}).\end{aligned} \tag{9}$$

我们简要概述一下该方案的基本机制。对于常规乘积公式 $T_\alpha(t)$，和 $T_\alpha(t) + T_\alpha(t)$ 满足对称条件

$$\left(T_\alpha(-t) + \bar{T}_\alpha(-t)\right)^\dagger = \left(T_\alpha(t) + \bar{T}_\alpha(t)\right), \tag{10}$$

这一性质对任意 n重构也成立。因此，求和所涉及的 Trotter 误差应表现得如同对称乘积公式中的误差，从而能够抵消不同折叠次数之间相互交织的 Trotter 误差。证明详情见附录 B。

我们指出，由于采用相同的范德蒙德方程，DCMPF 与基于对称PF的 MPF 方法具有相同的条件数 [27, 29]，但要达到相同的算法误差，所需的电路深度几乎只有一半。这不仅意味着在条件数相同的情况下，物理噪声降低一半。对于给定的最大电路深度约束，DCMPF 所允许的折叠数几乎是基于对称PF的 MPF 的两倍。因此，DCMPF 拥有更多能够产生条件良好的 MPF 的折叠数，从而可实现更大的K。进而，这将显著提升

在相同的最大电路深度限制下的准确度，详情将在第4节介绍。

作为本节的最后一点说明，由于 DCMPF 使用测量结果的线性组合，如式(9)所示，因此使用给定常规PF得到的缓解结果的方差为

$$\begin{aligned}&\mathrm{var}\langle O(t)\rangle_{\mathrm{DCMPF}},\\ =&\frac{1}{4}\sum_{i=1}^{K} c_i^2\left(\mathrm{var}\langle O(t)\rangle_{T_\alpha^{n_i}}+\mathrm{var}\langle O(t)\rangle_{\bar{T}_\alpha^{n_i}}\right).\end{aligned}$$

因此，DCMPF 缓解结果的方差与采用单个PF的传统 MPF 方法相同。因此，要达到给定算法精度所需的采样成本比满足

$$\frac{(\mathrm{var}\langle O(t)\rangle_{\mathrm{DCMPF}}/\epsilon^2_{\mathrm{DCMPF}})}{(\mathrm{var}\langle O(t)\rangle_{\mathrm{MPF}}/\epsilon^2_{\mathrm{MPF}})}\propto t^{-2K},$$

其中 $\epsilon_{\mathrm{DCMPF},\ \mathrm{MPF}}$ 表示相应缓解协议的精度。

4 数值演示

4.1 理论性能：一维横向伊辛模型

我们首先考察 $2K$ 式(9)中给出的误差标度。我们在横场伊辛链上检验该方法，其哈密顿量定义为

$$H=-J\sum_{j=1}^{N-1}\sigma_j^z\sigma_{j+1}^z+h\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^x,$$

情形下。我们设 $J=1$，使能量以 J为单位，取 $h=0.5$，并使用随机乘积态作为初始态，计算 $\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^z$在时间 $t=0.8$的期望值。我们采用一阶（李–特罗特）和三阶（Ruth）乘积公式 [35] 构造 DCMPF，并将结果与使用一阶乘积公式的多乘积公式方法进行比较。

由于误差不仅取决于 t，还取决于折叠数$\{n_i\}$，因此我们为每个奇数 K 选择以 $n_{\mathrm{mid}}=4$ 为中心、间隔为 1 的 K 个折叠数：

$$\left\{n_{\mathrm{mid}}-\frac{K-1}{2},\cdots,n_{\mathrm{mid}},\cdots,n_{\mathrm{mid}}+\frac{K-1}{2}\right\},$$

并通过将 $K=1,3,5,7$ 的数据拟合到函数 $c_1(t/n_{\mathrm{mid}})^{c_2K}$，估算误差指数如何依赖于 K。

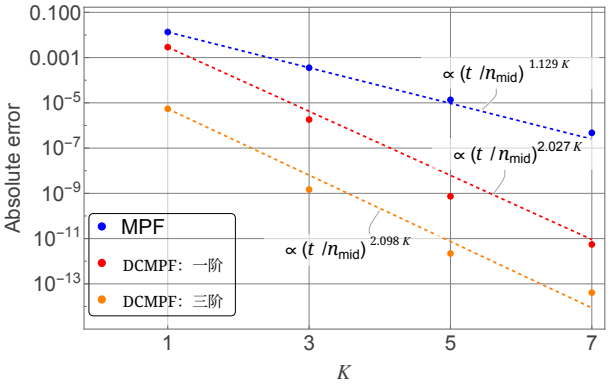

图1：基于常规一阶乘积公式的 MPF（蓝点）、基于一阶乘积公式的 DCMPF（红点）和基于三阶乘积公式的 DCMPF（橙点）模拟得到的全局 z-磁化强度的绝对误差，图中误差以精确值为参照。相应的拟合结果以虚线表示。

通过拟合得到的指数 c_2 约为1．129、2．027和2．098，分别对应使用常规一阶乘积公式的多乘积公式方法，以及基于一阶和三阶乘积公式的 DCMPF [图 1]，，结果与公式（9）符合得很好。

4.2 有噪声模拟：XXZ 自旋链

我们还数值展示了物理噪声存在时的方法。我们模拟带有外部磁场的 XXZ 自旋链

$$H=-J\sum_{j=1}^{N-1}\left(\sigma_j^x\sigma_{j+1}^x+\sigma_j^y\sigma_{j+1}^y+\delta\sigma_j^z\sigma_{j+1}^z\right)+h\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^z,$$

并再次设定 $J=1$。对于 $N=8$、$\delta=-1.5$ 和 $h=0.1$，我们测量偶数位点上的磁化强度，

$$\frac{1}{4}\sum_{j=1}^{4}\langle\sigma_{2j}^z(t)\rangle,$$

在时间 $t=0.3$，以尼尔态 $|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$ 作为初始态。

为了考察物理误差的影响，我们对每个 CNOT 门添加退极化噪声，其概率从 10^{-8} 变化到10^{-6}。为了考察固定资源的影响，我们

绘制误差缓解后的相对误差与电路深度之间的关系，其中电路深度以电路消耗的 CNOT 门数量衡量。作为基准，我们还绘制了通过对称乘积公式缓解的相同相对误差 [图 2]。在 CNOT 门数量固定的情况下，我们观察到，与基于对称PF的多乘积公式方法以及二阶PF相比，DCMPF 在所有测试的噪声水平下均表现更好。

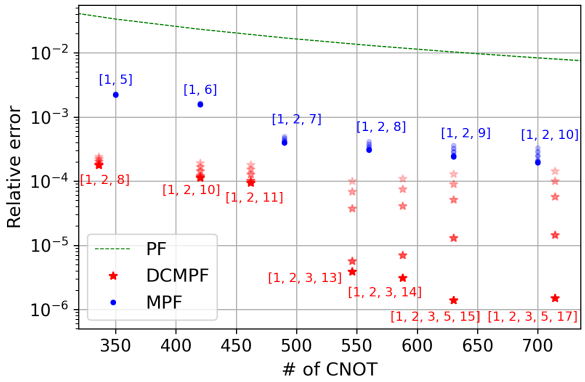

图 2：模拟得到的平均 z-磁化强度相对于精确值的相对误差，随 CNOT 门数量变化（在 MPF 中实现时，以最深电路中的门数为准）。分别使用二阶 Suzuki-Trotter PF（绿色虚线）、基于二阶对称 Trotter PF 的多乘积公式方法（蓝色圆点），以及我们采用一阶 Trotter PF 的多乘积公式方法（红色星号）模拟动力学。对每个 CNOT 门施加退极化噪声，概率为 $10^{-8}, 10^{-7}, 4\times10^{-7}, 7\times10^{-7}$ and10^{-6}，对应的数据点颜色从鲜明到逐渐透明。每个 MPF 模拟所选用的折叠数一并显示。

由于我们考虑的是噪声环境，条件数问题变得至关重要 [24, 27,29]。为此，我们将条件良好的MPF 的判定标准设为条件数小于目标值：（$||\mathbf{c}||_1 < 1.2 \sim 1.3$），并选择使条件数达到最小值的折叠数。

我们尝试模拟含噪量子模拟器中物理噪声的影响；在物理噪声作用下，长串量子门往往会抹去理想的测量结果。尽管 DCMPF 与基于对称乘积公式的多乘积公式方法具有相同的条件数，但可达到的最大电路深度相差近一倍。因此，在物理约束所规定的电路深度有限时，我们的协议允许选择更多折叠数，从而得到条件良好，准确度高于多乘积公式方法 [图 2]。

5 结论

在本研究中，我们提出了双通道多乘积公式（DCMPF）协议，利用一个乘积公式及其逆电路来提升 Trotter 误差缓解的性能。与采用对称PF的多乘积公式方法相比，该协议有效地将量子电路深度减半。这些结构特征可能会直接影响物理噪声和采样噪声，并且在电路资源有限时尤其有利。这种深度减半的特性往往带来远超简单线性缩减所能预期的实际益处。降低电路深度所带来的一项具体且显著的优势，是条件良好的MPF可采用的折叠方式集合有所扩大 [27, 29]。

在量子模拟器中实现我们的协议时，必须考虑物理误差。为减轻物理误差的影响，尽管我们并未直接缓解物理误差，但固定电路深度下的条件数问题仍然值得关注。基于这一点，我们通过数值结果表明，我们提出的方法在算法缓解方面表现显著更优。这一改进源于在方差相同的情况下电路深度更短，因为在没有任何物理误差缓解的情况下，量子电路中的物理误差会随着电路深度增加而呈指数级降低结果质量。

此外，我们认为，电路深度较短的算法误差缓解方法也可能降低物理误差缓解所需的开销。因此，未来值得开发一种适用于我们方案的物理误差缓解技术，并在量子模拟器上实现该技术。

6 致谢

本研究获得韩国政府（MSIT）资助的韩国国家研究基金会（NRF）项目（RS-2023-NR119931，RS-2025-18362970）以及由保健福祉部资助、通过韩国健康产业发展院（KHIDI）开展的韩国 ARPA-H 项目

（RS-2025-25456722），以及韩国产业通商资源部（MOTIE，韩国）“产业技术基础设施计划”项目（RS2024-00466693）的资助。SJL 获得通过量子宇宙中心提供的高等研究院个人资助（QP104301-6P104301）。

数据可用性声明：本文的所有数据和代码均可应合理要求向通讯作者获取。

参考文献

[1] Seth Lloyd. 通用量子模拟器。《科学》，273(5278):1073–1078, 1996.[2] C. Monroe, W. C. Campbell, L.-M. Duan, Z.-X. Gong, A. V. Gorshkov, P. W. Hess, R. Islam, K. Kim, N. M. Linke, G. Pagano, P. Richerme, C. Senko和N. Y. Yao. 利用囚禁离子对自旋系统进行可编程量子模拟。《现代物理评论》，93:025001, 2021年4月.[3] J. Ignacio Cirac和Peter Zoller. 量子模拟的目标与机遇。《自然·物理》, 8(4):264–266, 2012.[4]B. P. Lanyon, C. Hempel, D. Nigg, M. Müller, R. Gerritsma, F. Zähringer, P. Schindler, J. T. Barreiro, M. Rambach, G. Kirchmair, M. Hennrich, P. Zoller, R. Blatt和C. F. Roos. 基于囚禁离子的通用数字量子模拟。《科学》，334(6052):57–61, 2011.[5]I. M. Georgescu, S. Ashhab和Franco Nori. 量子模拟。《现代物理评论》, 86:153–185, 2014年3月.[6] Alexander Miessen, Pauline J. Ollitrault, Francesco Tacchino和Ivano Tavernelli. 面向量子动力学的量子算法。《自然·计算科学》，3(1):25–37, 2023.[7] Dominic W Berry, Graeme Ahokas, Richard Cleve和Barry C Sanders. 模拟稀疏哈密顿量的高效量子算法。《数学物理通讯》, 270(2):359–371, 2007.[8] Andrew M Childs和Yuan Su. 基于乘积公式的近最优晶格模拟。《物理评论快报》，123(5):050503, 2019.[9] Andrew M. Childs, Yuan Su, Minh C. Tran, Nathan Wiebe和Shuchen Zhu. ……的理论具有对易子标度的Trotter误差。《物理评论*X*》，11:011020，2021年2月。[10] Nathan Wiebe、Andrew M. Childs。利用酉操作的线性组合进行哈密顿量模拟。《量子信息与计算》，12(11 & 12):0901–0924，2012年11月。[11]Dominic W. Berry、Andrew M. Childs、Richard Cleve、Robin Kothari 和 Rolando D. Somma。利用截断泰勒级数模拟哈密顿量动力学。《物理评论快报》，114:090502，2015年3月。[12] Guang Hao Low 和 Isaac L. Chuang。通过量子信号处理实现最优哈密顿量模拟。《物理评论快报》，118:010501，2017年1月。[13]Dominic W. Berry、Andrew M. Childs、Aaron Ostrander 和 Guoming Wang。精度依赖性呈指数级改善的线性微分方程量子算法。《数学物理通讯》，356(3):1057–1081，2017年。[14] Andrew M. Childs、Richard Cleve、Enrico Deotto、Edward Farhi、Sam Gutmann 和 Daniel A. Spielman。量子漫步带来的指数级算法加速。载于第三十五届年度 *ACM* 计算理论研讨会论文集，STOC ’03，第59–68页，美国纽约州纽约市，2003年。计算机协会。[15] Andrew M. Childs。连续时间量子漫步与离散时间量子漫步之间的关系。《数学物理通讯》，294(2):581–603，2010年。[16] Andrew M. Childs、Dominic W. Berry。黑箱哈密顿量模拟与酉操作实现。《量子信息与计算》，12(1 & 2):0029–0062，2012 年 1 月。[17] John M. Martyn、Zane M. Rossi、Andrew K. Tan 和 Isaac L. Chuang。量子算法的大统一。《*PRX Quantum*》，2:040203，2021年12月。[18] Ronald D. Ruth。正则积分技术。《*IEEE*核科学汇刊》，30(4):2669–2671，1983年。[19] Etienne Forest 和 Ronald D. Ruth。四阶辛积分。《物理学*D*辑：非线性现象》，43(1):105–117，1990年。

[20] Naomichi Hatano 和 Masuo Suzuki。《高阶指数乘积公式的求解》，第37–68页。Springer Berlin Heidelberg，柏林，海德堡，2005年。[21]Masuo Suzuki。分形路径积分的一般理论及其在多体理论和统计物理学中的应用。《数学物理学杂志》，32(2):400–407，1991年。[22] Mauro E. S. Morales、Pedro C. S. Costa、Giacomo Pantaleoni、Daniel K. Burgarth、Yuval R. Sanders 和 Dominic W. Berry。为实现量子模拟的最佳性能而选择和改进乘积公式。《量子信息与计算》，25(1):1–35，2025年。[23]Sangjin Lee、Youngseok Kim 和 Seung-Woo Lee。利用浅层量子电路和误差分析缓解Trotter误差，2025年。[24] Sergiy Zhuk、Niall F. Robertson 和 Sergey Bravyi。哈密顿量模拟的Trotter误差界与动态多乘积公式。《物理评论研究》，6:033309，2024年9月。[25]Junaid Aftab、Dong An 和 Konstantina Trivisa。具有显式对易子标度的多乘积哈密顿量模拟，2024年。[26] James D. Watson 和 Jacob Watkins。利用Trotter误差缓解显著降低电路深度，2024年。[27] Guang Hao Low、Vadym Kliuchnikov 和 Nathan Wiebe。条件良好的多乘积哈密顿量模拟。*arXiv*预印本 *arXiv:1907.11679*，2019年。[28]Gumaro Rendon、Jacob Watkins 和 Nathan Wiebe。《利用切比雪夫插值提高 Trotter 模拟的准确度》。《*Quantum*》，8:1266，2024年2月。[29]Almudena Carrera Vazquez、Daniel J Egger、David Ochsner 和 Stefan Woerner。《适用于硬件友好型哈密顿量模拟的良态多乘积公式》。《*Quantum*》，7:1067，2023年。[30] S Blanes、F Casas 和 J Ros。《辛积分器的外推法》。《天体力学与动力天文学》，75(2):149–161，1999年。[31]Si u A Chin。《多乘积分裂与龙格-库塔-尼约斯特伦积分器》。《天体力学与动力天文学》，106(4):391–406，2010年。[32]Guang Hao Low 和 Isaac L. Chuang。《通过量子比特化进行哈密顿量模拟》。《*Quantum*》，3:163，2019年7月。[33] Andrew M. Childs、Aaron Ostrander 和 Yuan Su。《通过随机化加速量子模拟》。《*Quantum*》，3:182，2019年9月。[34] Minh C. Tran、Yuan Su、Daniel Carney 和 Jacob M. Taylor。《通过对称性保护加速数字量子模拟》。《*PRX Quantum*》，2:010323，2021年2月。[35]Ronald D Ruth。《一种正则积分技术》。*IEEE*核科学汇刊，30(CERN-LEP-TH-83-14):2669–2671，1983年。

传统 MPF 的详细计算

为使内容自成一体，我们详细介绍传统 MPF 方法的计算过程，以便读者理解双通道 MPF 的逻辑。

A.1 传统 MPF：算符级，式(4)

对于任意给定的 α 阶 Trotter乘积公式 $T_\alpha(t)$，可将公式写成 Trotter 误差算子的形式：

$$\begin{aligned} T_\alpha(t) &= e^{-iHt+i\sum_{q=\alpha+1}^{\infty} t^q E_q^{(0)}}, \\ &= e^{-iHt} + \sum_{q=\alpha+1}^{\infty} t^q E_q, \end{aligned}$$

由于 T_α 的幺正性，对于所有 q， $E_q^{(0)}$ 都是厄米的。虽然 Trotter 误差 $E_q^{(0)}$ 和 E_q 的具体形式取决于乘积公式的结构，但利用下式可以独立于该结构推导出 $E_q^{(0)}$ 与 E_q 之间的关系：

$$\sum_{q=\alpha+1}^{\infty} t^q E_q = \exp[itH]\exp\left[-itH + i\sum_{q=\alpha+1}^{\infty} t^q E_q^{(0)}\right] - 1. \tag{A1}$$

通过比较 t 中各阶的项，可以将 E_q 写成 $E_q^{(0)}$ 的形式：

$$E_q = \sum_{l,l'} C_{l,l'}^{(q)}(H, E_q^{(0)}, E_{q-1}^{(0)}, \cdots, E_{\alpha+1}^{(0)}). \tag{A2}$$

函数 $C_{l\,l'}^{(q)}$，是若干项的和，每一项由 l 个 H 和 l' 个误差算子 $E^{(0)}$ 组成，并满足所有项（包括误差算子）的阶数之和与 H 的个数之和等于 q。例如，部分 $C^{(q)}$ 的显式形式为：

$$C_{0,1}^{(q)} = iE_q^{(0)}\ ,\quad C_{1,1}^{(q)} = -\frac{1}{2}[H, E_{q-1}^{(0)}] + HE_{q-1}^{(0)}\ ,\quad C_{0,2}^{(q)} = -\frac{1}{2}\sum_{q'=\alpha+1}^{q-(\alpha+1)} E_{q'}^{(0)}E_{q-q'}^{(0)}\ ,\quad \cdots .$$

值得注意的是，在考察 n重 Trotter乘积公式的误差时，这个表达式很有用。类似地，n重 Trotter乘积公式可写为

$$T_\alpha^n\left(\frac{t}{n}\right) = e^{-itH+i\sum_{q=\alpha+1}^{\infty} t^q E_{n;q}^{(0)}}, \tag{A3}$$

$$= e^{-itH} + \sum_{q=\alpha+1}^{\infty} t^q E_{n;q}, \tag{A4}$$

其中 $E_{n;q}^{(0)} = \frac{E_q^{(0)}}{n^{q-1}}$。在此表达式中， $E_{n;q}^{(0)}$ 与 $E_{n;q}$ 之间的关系与$E_q^{(0)}$和 E_q之间的关系相同，因为函数 $C_{l,\ l'}$ 的确定与乘积公式（PF）的具体结构无关。现在我们可以用 $E_q^{(0)}$来改写 $E_{n;q}$：

$$E_{n;q} = \sum_{l,l'} C_{l,l'}^{(q)}(H, E_{n;q}^{(0)}, E_{n;q-1}^{(0)}, \cdots, E_{n;\alpha+1}^{(0)}), \tag{A5}$$

$$= \sum_{l,l'} \frac{1}{n^{q-(l+l')}} C_{l,l'}^{(q)}(H, E_q^{(0)}, E_{q-1}^{(0)}, \cdots, E_{\alpha+1}^{(0)}), \tag{A6}$$

任意 n_i 重的 Trotter乘积公式（Trotter PF）都可用 $E_q^{(0)}$表示为

$$\begin{aligned} T_\alpha^{n_i}\left(\frac{t}{n_i}\right) &= U(t) + \sum_{q=\alpha+1}^{\infty} t^q E_{n_i;q}, \\ &= U(t) + \sum_{q=\alpha+1}^{\infty} t^q \sum_{l,l'} \frac{1}{n_i^{q-(l+l')}} C_{l,l'}^{(q)}(H, E_q^{(0)}, E_{q-1}^{(0)}, \cdots, E_{\alpha+1}^{(0)}). \end{aligned}$$

其中 $C_{l\,l'}^{(q)}$ ，与 n_i无关，并且对于每个 t^q，Trotter误差算子$E_{n_i;\ q}$ 是$1/n_i^{\alpha}$，$1/n_i^{\alpha+1}$、$\cdots$ $1/n_i^{q-1}$}的多项式，其系数是与 n_i无关的逐算子系数。因此，我们得出

$$\sum_{i=1}^{K} c_i T_\alpha^{n_i}\left(\frac{t}{n_i}\right) = U(t) + \mathcal{O}(t^{\alpha+K}), \tag{A7}$$

其中系数$\{c_k\}$ 由下式确定

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ n_1^{-\alpha} & n_2^{-\alpha} & \cdots & n_K^{-\alpha} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ n_1^{-(K-1)} & n_2^{-(K-1)} & \cdots & n_K^{-(K-1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_K \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{A8}$$

对称乘积公式的情形可证明如下。对于 $T_2(t)$，二阶对称Trotter公式（高阶情形可直接处理），我们可以写出 n重Trotter乘积公式，

$$\begin{aligned} T_2^n(t/n) &= e^{-itH + i\left(t^3 E_{n;3}^{(0)} + t^5 E_{n;5}^{(0)} + \cdots\right)}, \\ &= e^{-itH} + \sum_{q=3}^{\infty} t^q E_{n;q}. \end{aligned}$$

由于 $E_{n;q}^{(0)} = 0$ 对所有偶数 q均成立，可以容易地证明，对于给定的奇数 q， $E_{n;q}$ 和 $E_{n;q+1}$ 都是 $1/n^2$，$1/n^4$、$\cdots$ $1/n^{q-1}$的多项式。因此，对于二阶对称公式，MPF的系数满足

$$\sum_{i=1}^{K} c_i = 1\ , \text{ and } \sum_{i=1}^{K} \frac{c_i}{n_i^q} = 0, \text{ for } q = 2, 4, \cdots, 2(K-1), \tag{A9}$$

误差阶数变为 $o_K = 2 + 2K - 1$。

A.2 传统 MPF：期望值级别，公式 (6)

这里，我们将说明，如果 MPF 对单个算符有效，

$$\sum_{i=1}^{K} c_i T_\alpha^{n_i}\left(\frac{t}{n_i}\right) = U(t) + \mathcal{O}(t^{o_K}), \tag{A10}$$

并且对可观测量 O 和量子态的期望值也以类似方式有效，即

$$\sum_{i=1}^{K} c_i \left\langle O(t)\right\rangle_{T_\alpha^{n_i}} = \left\langle O(t)\right\rangle_U + \mathcal{O}(t^{o_K}). \tag{A11}$$

方程 (A10) 意味着，用 $E_{n;q}$ 算符表示时，

$$\sum_{i=1}^{K} c_i E_{n_i;q} = 0\ ,\ \ \forall q < o_K. \tag{A12}$$

期望值 $\langle O(t)\rangle_{T^{n_i}}$ 包含三个误差项：

$$\begin{aligned}&\sum_{i=1}^{K} c_i \langle O(t)\rangle_{T_\alpha^{n_i}}\\ =&\langle O(t)\rangle_U + \sum_{i=1}^{K}\sum_{q=\alpha+1}^{\infty}\left(c_i t^q \langle U^\dagger O E_{n_i;q}\rangle + c_i t^q \langle E_{n_i;q}^\dagger O U\rangle\right) + \sum_{i=1}^{K}\sum_{q,q'=\alpha+1}^{\infty} c_i t^{q+q'} \langle E_{n_i;q}^\dagger O E_{n_i;q'}\rangle.\end{aligned}$$

由于根据式(o_K-1)，前两项的误差消除阶数为(A12)阶，因此我们将重点关注最后一项。利用关系式(A6)，每个 t^q 阶对应的最后一个误差项为

$$\sum_{i=1}^{K} c_i t^q \sum_{q'=\alpha+1}^{q-(\alpha+1)} \langle E_{n_i;q-q'}^\dagger O E_{n_i;q'}\rangle = \sum_{i=1}^{K} c_i t^q \sum_{q'=\alpha+1}^{q-(\alpha+1)} \sum_{l,l'\bar{l},\bar{l}'} \frac{1}{n_i^{q-(l+l'+\bar{l}+\bar{l}')}} \langle (C_{l,l'}^{(q-q')})^\dagger O C_{\bar{l},\bar{l}'}^{(q')}\rangle.$$

因此，每个 t^q 对应的期望值误差是关于$\{1/n_i^\alpha, 1/n_i^{\alpha+1}, \cdots \ 1/n_i^{q-1}\}$的多项式，其系数固定且独立于 n_i。因此，式(A8) 之后的系数也适用于式(A11)所给出的期望值表述。采用对称乘积公式的情况也可以用类似方法证明。

B 双通道 MPF 的证明

在本节　中，我们通过详细计算证明双通道 MPF 的性能。

B.1 双通道 MPF：算符层面，式(7)

回顾一下，$\bar{T}_\alpha(t) = T_\alpha^\dagger(-t)$，而 $\bar{T}$ 的 n 重乘积公式可写为

$$\begin{aligned}\bar{T}_\alpha^n\left(\frac{t}{n}\right) &= e^{-itH+i\sum_{q=\alpha+1}^{\infty} t^q \bar{E}_{n;q}^{(0)}}\\ &= e^{-itH} + \sum_{q=\alpha+1}^{\infty} t^q \bar{E}_{n;q},\end{aligned}$$

其中 $\bar{E}_{n;q}^{(0)} = (-1)^{q-1} E_{n;q}^{(0)}$，其中 $E_{n;q}^{(0)}$ 见方程 (A3)。与计算传统 MPF 时一样，我们得到

$$\begin{aligned}\bar{E}_{n;q} &= \sum_{l,l'} C_{l,l'}^{(q)}(H, \bar{E}_{n;q}^{(0)}, \bar{E}_{n;q-1}^{(0)}, \cdots, \bar{E}_{n;\alpha+1}^{(0)}),\\ &= (-1)^{q-(l+l')} \sum_{l,l'} C_{l,l'}^{(q)}(H, E_{n;q}^{(0)}, E_{n;q-1}^{(0)}, \cdots, E_{n;\alpha+1}^{(0)}).\end{aligned}$$

我们可以证明，求和后的两个乘积公式 $\{\underline{T}_\alpha\left(\frac{t}{n_i}\right), \underline{\bar{T}}_\alpha\left(\frac{t}{n_i}\right)\}$，结合上述关系，具有如下结构，

$$T_\alpha^{n_i}\left(\frac{t}{n_i}\right) + \bar{T}_\alpha^{n_i}\left(\frac{t}{n_i}\right) = U(t) + \frac{1}{2}\sum_{q=\alpha+1}^{\infty} t^q \sum_{l,l'} \frac{1+(-1)^{q-(l+l')}}{n_i^{q-(l+l')}} C_{l,l'}^{(q)}(H, E_q^{(0)}, E_{q-1}^{(0)}, \cdots, E_{\alpha+1}^{(0)}).$$

我们指出，所有 $C_{l\,l'}^{(q)}$，包含在每个 t^q 中的系数都只有偶数阶，即 $1/n_i^{\alpha+1}$，$1/n_i^{\alpha+3}$，$\cdots$对于 $\alpha \in \mathbb{Z}_{\text{odd}}$。因此，满足式(8) 的系数会消去 $o_K = \alpha + 2K$阶误差，从而完成证明。

B.2 双通道MPF：期望值层面，方程（9）

最后，两个乘积公式$\{T_\alpha\left(\begin{smallmatrix}t\\n_i\end{smallmatrix}\right)$，$\bar{T}_\alpha\left(\begin{smallmatrix}t\\n_i\end{smallmatrix}\right)\}$的两个期望值可写为

$$\begin{aligned}
\langle O(t)\rangle_{T_\alpha^{n_i}} &= \langle O(t)\rangle_U + \sum_{q=\alpha+1}^{\infty} t^q \sum_{l,l'} \frac{1}{n_i^{q-(l+l')}} \left(\left\langle U^\dagger(t) O C_{l,l'}^{(q)} \right\rangle + \text{h.c.}\right) \\
&\quad + \sum_{q=\alpha+1}^{\infty} t^q \sum_{l,l',\bar{l},\bar{l}'} \frac{1}{n_i^{q-(l+l'+\bar{l}+\bar{l}')}} \sum_{q'=\alpha+1}^{q-(\alpha+1)} \left\langle (C_{l,l'}^{(q')})^\dagger O C_{\bar{l},\bar{l}'}^{(q-q')} \right\rangle \\
\langle O(t)\rangle_{\bar{T}_\alpha^{n_i}} &= \langle O(t)\rangle_U + \sum_{q=\alpha+1}^{\infty} t^q \sum_{l,l'} \frac{(-1)^{q-(l+l')}}{n_i^{q-(l+l')}} \left(\left\langle U^\dagger(t) O C_{l,l'}^{(q)} \right\rangle + \text{h.c.}\right) \\
&\quad + \sum_{q=\alpha+1}^{\infty} t^q \sum_{l,l',\bar{l},\bar{l}'} \frac{(-1)^{q-(l+l'+\bar{l}+\bar{l}')}}{n_i^{q-(l+l'+\bar{l}+\bar{l}')}} \sum_{q'=\alpha+1}^{q-(\alpha+1)} \left\langle (C_{l,l'}^{(q')})^\dagger O C_{\bar{l},\bar{l}'}^{(q-q')} \right\rangle .
\end{aligned}$$

因此，两个期望值的平均值为

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2}\left(\langle O(t)\rangle_{T^{n_i}} + \langle O(t)\rangle_{\bar{T}^{n_i}}\right) &= \langle O(t)\rangle_U + \frac{1}{2}\sum_{q=\alpha+1}^{\infty} t^q \sum_{l,l'} \frac{1+(-1)^{q-(l+l')}}{n_i^{q-(l+l')}} \left(\left\langle U^\dagger(t) O C_{l,l'}^{(q)} \right\rangle + \text{h.c.}\right) \\
&\quad + \frac{1}{2}\sum_{q=\alpha+1}^{\infty} t^q \sum_{l,l',\bar{l},\bar{l}'} \frac{1+(-1)^{q-(l+l'+\bar{l}+\bar{l}')}}{n_i^{q-(l+l'+\bar{l}+\bar{l}')}} \sum_{q'=\alpha+1}^{q-(\alpha+1)} \left\langle (C_{l,l'}^{(q')})^\dagger O C_{\bar{l},\bar{l}'}^{(q-q')} \right\rangle ,
\end{aligned}$$

其中包含 $1/n_i^{\alpha+1}$、$1/n_i^{\alpha+3}$、$\cdots$ $1/n_i^{q-1}$（对于 $\alpha \in \mathbb{Z}_{\text{odd}}$）的多项式，对于任意给定的奇数 t^q 和 t^{q+1} 项，它们均作为 Trotter误差。因此，满足方程（8）的系数 $\{c_l\}$，从而完成证明。