arXiv:2611.33128v1 [quant-ph] 24 Nov 2026

借助自由概率论求解稀疏随机哈密顿量的经典算法

Matthew Ding[1,2], Robbie King[1,3,4,5], 和 Thomas Schuster[1,3]

[1]Google Quantum AI，美国加利福尼亚州威尼斯，邮编 90291[2]斯坦福大学，美国加利福尼亚州斯坦福，邮编 94305[3]加州理工学院，美国加利福尼亚州帕萨迪纳，邮编 91125[4]西蒙斯计算理论研究所，美国加利福尼亚州伯克利，邮编 94720[5]Oratomic，美国加利福尼亚州帕萨迪纳，邮编 91105

2026年11月24日

摘要

在平均情形问题中寻求量子优势，是物理学和计算机科学领域亟待解决的开放问题。此类优势中，最广为推测的例子是在量子多体系统模拟方面；符号问题和纠缠增长会导致许多经典方法失效。尽管如此，支持或反对这种优势的理论证据仍然稀少。本文研究稀疏随机非局域哈密顿量。我们为此类哈密顿量设计了一种经典算法，可精确计算谱涨落、热力学值、时间序关联函数和非时间序关联函数。对于任意亚指数精度ε，我们的算法运行时间为$(1/\varepsilon)^{2+o(1)}$，与量子模拟的运行时间几乎相同。尤为重要的是，即便在较晚的演化时间、低温以及临界点附近，该算法依然适用；而现有经典方法在这些条件下需要指数级时间。我们的算法不直接模拟量子态或算子，而是先计算模型的平均行为，再计算一组简短的、依赖于具体实例的修正项。这些修正项利用自由概率论，根据短时数据预测长时间行为。

1 引言

量子计算机正以惊人的速度发展 [1——3]然而，对于哪些问题能够实现有用的量子加速，我们对其全貌的了解却出人意料地少。开创性研究指出了一些高度结构化的代数任务，在这些任务中，量子算法相较于经典算法具有显著优势 [4, 5]。不过，量子计算的希望也寄托于更广泛、缺乏结构的问题，例如物理系统的模拟 [6, 7], 优化 [8, 9], 和机器学习 [10]。量子多体系统的模拟就是一个典型例子。与常见的计算机科学任务相比，具有物理意义的量子多体系统高度缺乏结构：除了局域性和少数守恒定律外，它们的定性行为众所周知地与具体细节无关

的精确系统细节 [11, 12]。因此，人们预期，预测其定量性质的计算难度也应同样与具体细节无关。与此同时，尽管取得了一些重大成功 [13——19], 用于模拟多体系统的经典算法仍反复遭遇重大障碍。在热态中，这些障碍源于符号问题 [20]以及临界效应导致的强关联 [21], ；而在动力学中，则源于量子信息和纠缠随时间迅速扩散 [22——24]。量子计算机能够自然地克服这些障碍，这让人们对多体模拟中广泛存在的巨大量子优势抱有希望。

然而，令人难以置信的是，对于任何此类优势，支持或反对它的理论证据几乎都不存在。支持优势的证据仅限于不自然的“最坏情况”构造 [25–27], 经验观察 [28, 29], 或不具有物理应用的采样任务 [30–34]。与此同时，反对优势的证据大多局限于经典计算容易性直观成立的情形，例如具有弱相互作用 [35, 36],高温 [37–40], 短演化时间 [41], 或较大噪声 [42–44]的情形。这留下了一个尚未解决的根本问题：量子计算机能否在传统上具有复杂性的情形下，为模拟量子多体系统带来普适且可扩展的优势 [29, 45–58]?

在本文中，我们在 Chen 等人引入的一种模型哈密顿量中回答了这一问题 [52]。该哈密顿量由作用于 n 个量子比特的 $m = \mathrm{poly}(n)$ 个独立抽取的随机泡利算符组成，

$$H = \frac{1}{\sqrt{m}} \sum_{i=1}^{m} J_i P_i, \qquad P_i \sim \{\mathbb{I}, X, Y, Z\}^{\otimes n}, \tag{1}$$

其系数为随机系数 $J_i = \pm 1$。重要的是，这些泡利算符是完全非局域的：这与自然系统不同，但为理论分析提供了切入点 [52]。该哈密顿量可以看作高斯（高斯酉系综）随机矩阵的一种稀疏化形式，而后者是量子混沌的典型模型 [59, 60], ，并展现出通常与经典模拟困难性相关的所有特征。该模型的随机性还使得对其性质的计算可以被视为一个定义明确的计算问题，从而能够研究其平均情形复杂度。

我们的主要成果是提出了一套严谨且实用的经典算法框架，用于计算稀疏随机泡利模型的广泛性质，其运行时间几乎与量子模拟相同。这些性质几乎涵盖所有具有物理意义的性质：谱涨落、配分函数、热期望值，以及时间序关联函数和非时间序关联函数。我们还研究了一个会发生谱相变的模型变体，并设计了一种更为通用的算法来模拟该相变的临界点。在所有情况下，对于任意精度，我们的算法都能以 ε 的时间 $\mathcal{O}(n/\varepsilon^{2+o(1)})$计算出精度为 $\varepsilon = 1/2^{o(n/\log n)}$的性质，其精度下限可达到关于 n的近指数小量。[1] 这几乎匹配量子模拟的运行时间$\Omega(n/\varepsilon^2)$，其背后原因具有基础性，我们对此进行了阐明。值得注意的是，我们的算法在演化时间和逆温度几乎随系统大小线性增长时仍然有效， $\mathcal{O}(n/\log n)$。相比之下，这一结果相较于传统方法实现了指数级提升，因为传统方法只能处理 $\mathcal{O}(\log n)$ 值。

我们的算法建立在一种通用方法之上：首先计算模型的平均行为，然后围绕这一行为计算一个简短的依赖于具体实例的修正层级。因此，我们的结果展示了一种常见机制：看似复杂的平均情形问题可能无法产生量子优势 [58, 61], 尽管其具有较大的实例间波动 [29, 62, 63]。在稀疏泡利模型中，我们发现，通过自由概率的视角能够最清晰地理解这一层级 [64–69]。我们的算法首先利用短时数据计算模型的少量 自由累积量 ——它们是概率论中标准累积量的类比物——然后

[1]这里， $g(x) = o(f(x))$ 表示当 x 增大时， $g(x)$ 相对于 $f(x)$ 可忽略不计，即 $\lim_{x\to\infty} g(x)/f(x) = 0$。

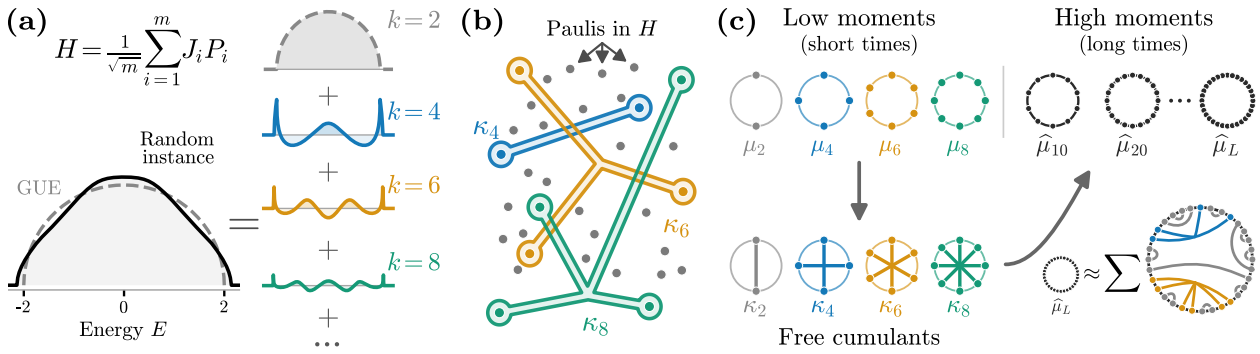


图1：我们的经典算法示意图。(a) 稀疏泡利哈密顿量的谱围绕其极限半圆分布行为呈现实例间波动。我们的经典算法将这些波动分解为一系列阶数层级， $k = 2$、4、6、8、.....，分别对应于该模型的自由累积量。类似的分解也适用于热力学值和关联函数。(b) 自由累积量 κ_k 度量了 H [式（8）]中泡利算符子集之间对易关系的平均性质$k/2$ 。由于子集数量众多，其数值的计算时间呈指数增长$\mathcal{O}$（$m^{k/2}$）；然而，由于子集之间的随机抵消，其幅度也呈指数衰减$\mathcal{O}$（$m^{-k/4}$）。(c) 我们的算法首先根据哈密顿量的低阶矩计算最低阶 ℓ自由累积量。随后，算法利用自由概率中的图解重求和，使用这些自由累积量近似计算哈密顿量的高阶矩。在此，我们展示$\ell = 8$；最高阶矩 $L = \mathcal{O}$（t） $\mathcal{O}$（β）由所关注的演化时间或逆温度决定。

处理这些累积量，对长时行为作出可证明准确的预测。这种方法之所以成功，是因为自由累积量呈指数集中性；直观地说，这源于中心极限定理在自由概率中的类比形式。我们的算法也可以等价地视为一种图解重求和，其概念精神与簇展开 [19, 70], 记忆矩阵 [71–73], 以及关于其他平均情形量子多体问题的同期研究 [54–57]相似。

耐人寻味的是，我们的结果并未排除这样一种可能性：对于稀疏泡利模型在较晚时间演化时的性质，当精度极小且随系统大小呈指数级趋于零时，量子计算机可能带来多项式级优势 n。在这些取值下，我们算法中的展开从根本上失效，而目前已知唯一剩下的经典方法是状态向量模拟。

2 主要结果

现在我们回顾稀疏泡利模型 [式（1）], 并更详细地概述我们的主要结果。我们将在下一节介绍经典算法的运作方式，并在附录中给出完整细节和证明。

2.1 稀疏泡利模型回顾

Chen 等人提出了稀疏泡利模型， [52],将其视为平均情形量子优势的一种优雅潜在候选方案。这一设想源于以下发现：当项数趋于无穷时， $m \gg 4^n$，该模型趋近于高斯（高斯酉系综）随机矩阵。在此极限下，

模型的所有性质都会集中于高斯酉系综的预测；例如，其谱趋近于半圆分布 [图 1(a)]。与此同时，对于任何物理上可实现的项数，m =多项式(n)，该模型相对于高斯酉系综行为会呈现显著的 Ω($1/m$) 波动 [52]。这些波动取决于模型的随机实例（尤其是项的选择 P_i），且足够大，能够在量子计算机上高效地分辨出来。同时，这些波动又足够小，使模型继承了高斯酉系综矩阵的许多特征，包括量子混沌和信息 scrambling 的典型标志，以及具有半圆状边缘的紧致谱 [52]。后者保证了模型的性质（例如其谱振幅 $Z(t)$ ≡Tr(e^{-iHt})，其中 Tr(·) ≡ $\frac{1}{2^n}$ Tr(·)）在多项式级别的晚期时间仍会呈现非平凡信号。它还可用于证明，利用量子相位估计能够高效制备该模型的低能态 [52]；进一步的证明表明，这些态至少具有多项式级别的量子电路复杂度，说明它们可能难以用经典方式表示 [52]。

综合来看，这些发现自然令人期待：稀疏泡利模型的长时间和低能量性质或许易于通过量子方式计算，却难以用经典方法计算。类似的论证也曾被用来支持其他平均情形量子优势，例如模拟随机电路 OTOC [29, 56, 57]。这一期待还因稀疏泡利模型呈现出许多令经典方法难以应对的其他特征而得到助长，例如随着演化时间或逆温度增加，纠缠、非局域关联和符号问题会迅速增长。

2.2 稀疏随机哈密顿量的经典算法

现在让我们转向我们的结果。我们证明，尽管上述所有发现都具有精度，稀疏泡利模型仍无法在平均情形下带来任何相对于经典计算的量子加速。

我们考虑以下一大类可观测量，我们的算法均适用于这些可观测量。稀疏泡利模型中每种可观测量的定性行为都与高斯酉系综哈密顿量中的情况相似，但会出现定量的 $\mathcal{O}(1/m)$ 修正，且这些修正取决于具体的随机哈密顿量实例。

1. 谱振幅， $Z(t) \equiv \mathrm{Tr}(e^{-iHt})$。这是谱的态密度 $D(E)$ 的傅里叶变换。在高斯酉系综极限下，由于 $D(E)$ [59] 中的平方根边，振幅呈现长时间振荡，其包络为 $\sim t^{-3/2}$。2. 配分函数， $\mathcal{Z}(\beta) \equiv \mathrm{Tr}(e^{-\beta H})$。由于半圆谱 $\|H\| \approx 2$ [52] 的支撑集是紧致的，它渐近地呈指数增长 $\sim e^{2\beta}$。由于这一指数因子，我们的算法只需在计算 $\mathcal{Z}(\beta)$ 时达到相对误差。3. 热期望值， $\langle A\rangle_\beta \equiv \mathrm{Tr}(A\rho_\beta)$，其中 $\rho_\beta \equiv e^{-\beta H}/\mathcal{Z}(\beta)$ 是热态。我们假设 A 是 H 中的泡利算符，否则该值以高概率为零。

4. 时间序关联函数（TOC）， $G^A_\beta(t) \equiv \mathrm{Tr}(A(t)A(0)\rho_\beta)$。

5. 非时间序关联函数（OTOC）， $F^{A,B}_\beta(t) \equiv \mathrm{Tr}(A(t)B(0)A(t)B(0)\rho_\beta)$。

对于 TOC 和 OTOC，我们假设算子 A、B 是固定的，并且与 H 中的算子相互独立，尽管我们的结果可以直接推广到其他情形。图 2（a、b）展示了各个可观测量的行为示例。稀疏泡利模型的归一化经过选择，使得所有可观测量在演化时间和温度均达到 1 阶尺度时开始发生涨落；这在参数上早于近线性尺度，而我们的算法将适用至该尺度。

我们的主定理表明，对于随机哈密顿量实例，以高概率而言，所有这些可观测量都可以通过经典算法计算，其运行时间几乎与量子模拟相同：

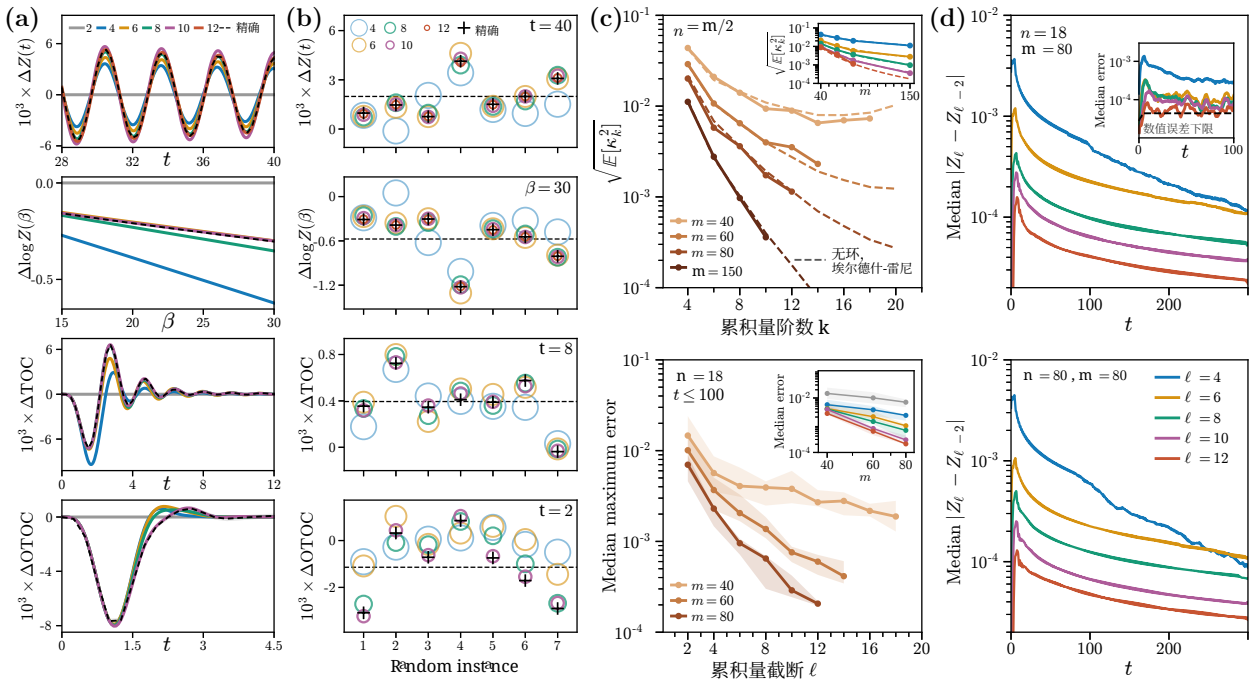


图 2：我们的经典算法的数值演示。**(a)**对于单个随机实例，在谱振幅、配分函数、时间序关联函数和非时间序关联函数上，随着 ℓ从 2 增加到 12，我们的算法（实线）收敛至精确结果（虚线），其中 $m = 80, n = 18$。在每种情况下，我们都减去半圆贡献，以分离依赖于实例的涨落。我们注意到，在相同的 m 下，无论 n如何，稀疏泡利模型和我们的算法都表现出相似的行为。**(b)** 在固定时间或温度下，不同随机实例之间的同一比较。算法预测对应于每个圆的中心。有限 m时，经验均值（黑色虚线）偏离零。**(c)** 均方根自由累积量随阶数 k 的衰减（上图），以及我们的算法误差的相应衰减（下图）。上图：实线表示对 60 个实例取均值；虚线表示理论预测。下图：实线表示对 10 个实例中谱振幅在 $0 \le t \le 100$上的最大误差取中位数；阴影区域表示第 25 和第 75 百分位数。**(d)** 将 ℓ 增加 2 时，我们的算法预测值的绝对变化，并在宽度为 $\Delta t = 5$的时间窗口上进行平滑。随 ℓ 快速衰减，表明即使在非常晚的时刻，也能收敛到精确的预测。在较小的 n下，该预测与精确结果（插图）一致，只有较小的数值误差下限（见附录）。在较大的 n下也观察到类似的收敛，但无法检验精确结果。

定理 *1*（稀疏泡利模型的经典算法）。固定 $m = \Omega(n^3)$。对于任意演化时间 $t = o(^{n}\log n)$、逆温度 $\beta = o(^{n}\log n)$、精度 $\varepsilon = 1/2^{o(^{n}\log n)}$ 以及失败概率 $\delta = 1/\mathrm{poly}(n)$，式（1）中的所有可观测量 *1.–5.* 都可以通过经典算法在时间 $(1/\varepsilon)^{2+o(1)}(n/\delta)\,\mathrm{poly}(t, \beta)$ 内计算得到。

在 t、β 中的精确多项式次数较低，汇总见表1。定理的证明见附录，且可由下一节介绍的经典算法推出。

运行时间随 n 和 ε 的变化规律与量子模拟的几乎完全相同。在标准方法中，使用量子比特化将含有 n个量子比特的哈密顿量演化 m个不对易的哈密顿量项至时间 t 所需的 $\mathcal{O}(1/\varepsilon^2)$次重复运行量子门数量为 $\tilde{\mathcal{O}}(nm^{3/2}t/\varepsilon^2)$；使用振幅估计，[74]；其中$\varepsilon$对 $\mathcal{O}(1/\varepsilon)$ 的依赖关系可以进一步改善。我们的算法还具有

可观测量	经典运行时间
谱振幅	$(n/\delta)(1/\varepsilon)^{2+\mathcal{O}(1/\log m)}$
配分函数	$(n/\delta)(1/\varepsilon)^{2+\mathcal{O}(1/\log m)}(1+\beta)^2$
热期望值	$(n/\delta)(1/\varepsilon)^{2+\mathcal{O}(1/\log m)}(1+\beta)^5$
时间序关联函数和非时间序关联函数	$(n/\delta)(1/\varepsilon)^{2+\mathcal{O}(1/\log m)}(1+\beta)^3(1+\beta+t)^2$
谱振幅（尖峰模型）	$(n/\delta)(1/\varepsilon)^{2+\mathcal{O}(1/\log m)}(1+t)^2$

表1：定理 1和2中经典算法的运行时间。关于定理 F.7、L.9、Q.9、Q.12和Q.14的详细陈述和证明，请参阅附录。

关于 n 的平凡线性标度（这源于表示单个哈密顿量项所需的空间），对 m 和 t 的联合依赖关系进行了温和改进，并且值得注意的是，精确匹配了原本关于 $1/\varepsilon$的二次标度。精度 ε 的标度是基于平均情况行为展开构建的算法的一项尤其重要的属性，因为期望精度决定了展开阶数。在这方面，对于稀疏泡利模型，我们的结果仅比量子模拟保留了标准的二次加速，这种加速源于振幅估计。即使在极小的精度下，这一结论仍然成立，而精度几乎随 n 指数级降低。

我们指出，我们的算法在 ε 中的渐近标度可以进一步改进为$(1/\varepsilon)^{2\omega/3+o(1)}$ 只要 $1/\varepsilon$ 在 m中是次指数的，其中 $2 \le \omega \le 2.25$，通过标准应用 [75] 快速矩阵乘法算法 [76, 77]即可实现。假设 $m = \Omega(n^3)$ 也可以在一个合理的组合数学猜想下改进为 $m =\Omega(n)$。关于这些改进的详细信息，请参阅附录；为简明起见，我们将重点讨论谱振幅。

2.3 谱相变的经典算法

一种常见的启发式论证认为，在系统行为发生相变附近，量子优势可能更大 [28, 29], ，因为经典算法近似会由于非局域关联和长时关联而产生更大的误差。受这一论证启发，我们研究了稀疏泡利模型的谱发生相变是否会导致其经典复杂性增加。为此，我们通过

y 添加 g a “sp尖峰”项 , λQ, 到稀 p疏泡利哈密顿量 ,

$$H_{\text{spiked}} = \lambda Q + \frac{1}{\sqrt{m}} \sum_{i=1}^{m} J_i P_i, \qquad P_i \sim \{\mathbb{I}, X, Y, Z\}^{\otimes n}, \tag{2}$$

其中 Q 是一个固定的非恒等泡利算符，且独立于 H ，而 $\lambda \ge 0$ 是一个可调常数。在高斯酉系综极限下，尖峰模型的谱会在 λ 从大于 1 调至小于 1 时发生明显的相变，其特征是在能量零点处出现立方根尖点 [见图3(a)] [78]。当 $m = \text{poly}(n)$时，也会出现类似的转变，此时它还会对实例间波动变得敏感。在高斯酉系综极限下，该尖点会使谱振幅在晚期出现 $t^{-4/3}$ 尾部，其衰减速度在参数意义上慢于相变之外的 $t^{-3/2}$ 尾部；这些幂次可由对立方根尖点和平方根谱边缘进行傅里叶变换得到 [59, 78]。

遗憾的是，我们发现这一相变并不会导致经典模拟该模型的复杂性增加。我们开发了一种更为复杂的经典算法变体，对于任意 λ，它能够在与原始模型相同的时间内模拟尖峰泡利模型。

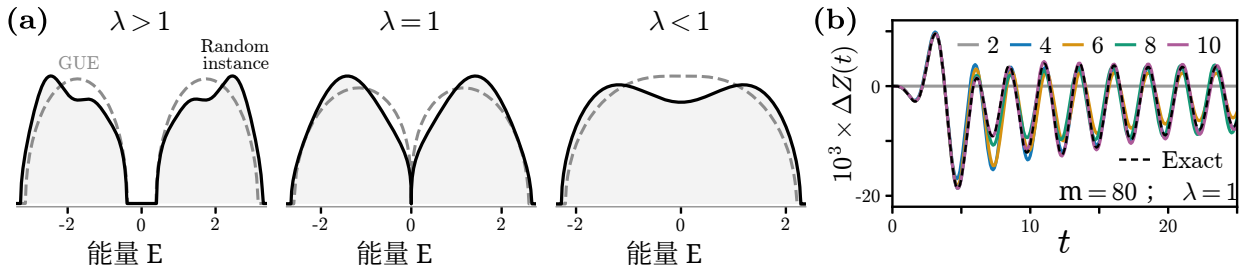


图3：尖峰泡利模型中的谱相变 [方程（2）]。（**a**）当 $\lambda > 1$时，尖峰项占主导，谱由位于能量 $E = \pm\lambda$ 处的两个不相交的半圆状支撑集组成。在$\lambda = 1$处，两个支撑集相交，并在 $E = 0$ 处呈现尖锐尖点，此处态密度按$D(E) \sim |E|^{1/3}$ [78]消失。这比与半圆状边缘相关的平方根标度 $D(E) \sim |E - E_{\text{edge}}|^{1/2}$ 在参数上更为尖锐。当 $\lambda < 1$时，随机泡利项占主导，谱由位于 $E = 0$处的单个半圆状支撑集组成。（**b**）在 $\lambda = 1$处对我们用于计算谱振幅的算法进行数值演示；详见图2 。

定理 2 （尖峰泡利模型的经典算法）。 固定 $m = \Omega(n^3)$。对于任意尖峰$\lambda = \mathcal{O}(1)$、演化时间 $t = o\left(\frac{n}{\log n}\right)$、精度 $\varepsilon = 1/2^{o\left(\frac{n}{\log^3 n}\right)}$ 以及失败概率 $\delta = 1/\text{poly}(n)$, 公式（2）的谱振幅可以在时间 $(1/\varepsilon)^{2+o(1)}(n/\delta)(1+t)^2$内通过经典计算得到。

为简洁起见，我们仅关注谱振幅，因为它是对相变敏感的最简单可观测量。与无尖峰模型的谱振幅（表 $(1+t)^2$ 相比，其相对因子（表 1 ）是证明中的技术性产物；我们认为，这一因子并非本质性的。

我们的算法将在下一节中介绍，并在附录中给出证明。一个令人惊讶的发现是，与 λ 的其他取值相比，我们的算法对相变 $\lambda = 1$ 并不特别敏感。直观地说，这是因为相变处长时间衰减中的多项式差异，被我们的算法在展开阶数上的指数收敛所压倒。

3 我们的算法

现在我们转向经典算法。如前所述，我们算法背后的关键思想是，稀疏泡利模型的长时间和低温行为并不以指数复杂的方式依赖于其随机性，而是以一种简单的方式依赖于少量可由经典计算得到的量。我们将分几个步骤对此进行说明。

3.1 无环近似

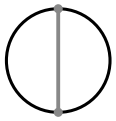
我们将重点介绍如何在稀疏泡利模型中经典计算谱振幅 $\text{Tr}(e^{-iHt})$，之后再讨论关联函数和尖峰模型。为了计算 $\text{Tr}(e^{-iHt})$，我们提供了一种计算哈密顿量矩 $\text{Tr}(H^k)$ 的算法，并可通过对其进行泰勒展开得到 $\text{Tr}(e^{-iHt})$。类似的方法也可以得到配分函数 $\text{Tr}(e^{-\beta H})$。

为了计算这些矩，我们首先对其取值进行严格的图示分解。根据定义， k阶哈密顿量矩可以写成对 m^k 个泡利项求和，

$$\overline{\text{Tr}}(H^k) = \frac{1}{m^{k/2}} \sum_{i_1,\ldots,i_k} J_{i_1} J_{i_2} \ldots J_{i_k} \overline{\text{Tr}}(P_{i_1} P_{i_2} \ldots P_{i_k}), \tag{3}$$

其中每个指标的取值范围为 1 到 m，并对应于 H^k中出现的 H 的一个副本。接下来我们注意到，对于 H中出现的泡利项，高概率地，求和可以限制在这些 k个副本的配对——或者更一般地，划分为偶数大小的块——上。这意味着所有奇数阶矩都为零；因此，从这里起，我们假设 k 为偶数。以最简单的例子二阶矩为例，我们有

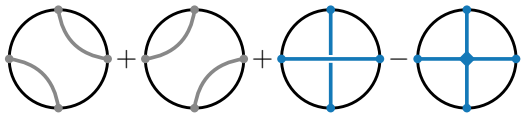
$$\overline{\mathrm{Tr}}(H^2) = \quad = \frac{1}{m}\sum_i \overline{\mathrm{Tr}}(P_iP_i) \tag{4}$$



当 H 中出现的所有泡利算符彼此不同时，迹会强制两个指标相等；对于随机项，这种情况以指数级接近于 1 的概率发生。这里，我们将迹画成一个圆，每个 H 副本对应圆周上的一个点，而两个副本的配对则用一条灰色线表示。与此同时，对于四阶矩，我们有

$$\overline{\mathrm{Tr}}(H^4) = \quad + \quad + \quad - \quad$$

$$= \frac{1}{m^2}\sum_{i,j}\left[\overline{\mathrm{Tr}}(P_iP_iP_jP_j) + \overline{\mathrm{Tr}}(P_iP_jP_jP_i)\right] + \frac{1}{m^2}\sum_{i\neq j}\overline{\mathrm{Tr}}(P_iP_jP_iP_j) - \frac{1}{m^2}\sum_i \overline{\mathrm{Tr}}(P_iP_iP_iP_i). \tag{5}$$



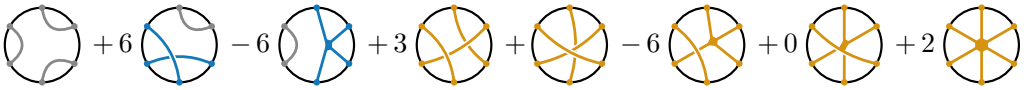
只要不存在由四个泡利项构成的“环”，使得它们的乘积正比于恒等算符，即对于 i, j, k, l 都彼此不同，就会强制指标配对或四重相等，即 $|\overline{\mathrm{Tr}}(P_iP_jP_kP_l)| = 1$。与之前类似，当每个泡利项都是随机的时，这种情况以指数级接近于 1 的概率发生。在上式中，前两项对应于迹中彼此不“交叉”的配对，而第三项对应于交叉配对。最后一项对应于四个指标全都相等，其贡献带有负号 $+1-2=-1$，用于抵消前两项中的重复计数。我们选择这种着色的原因将在下一节中说明。

这种分解可以系统地推广到高阶矩，我们将其称为无环近似。对于每个矩，我们首先证明，以高概率，不存在长度为k的项环，使得 $|\overline{\mathrm{Tr}}(P_{i_1}\dots P_{i_k})| = 1$，同时任意特定项出现奇数次。这意味着 $\overline{\mathrm{Tr}}(H^k)$ 的非零贡献必须来自将 k 个 H 副本划分为大小均为偶数的“块”。由此可得，每个矩都可以分解为

$$\overline{\mathrm{Tr}}(H^k) = \frac{1}{m^{k/2}}\sum_{\pi}\ \chi(\pi)\sum_{\substack{i_1,\dots,i_{|\pi|}\\ \text{distinct w/in components}}}\overline{\mathrm{Tr}}\left(P_{i_{\pi(1)}}\cdots P_{i_{\pi(k)}}\right), \tag{6}$$

其中 π 是这些划分，$i_{\pi(a)}$ 是 π 中包含副本 a的块的索引，而因子 $\chi(\pi)$用于校正重复计数。与式（5）中的第三项类似，我们发现将 $i_1,\dots,i_{|\pi|}$的求和限制为 π的每个“连通分量”内两两不同很方便；每个连通分量即由若干彼此交叉且以连通方式相连的块组成的子集。每个划分 π 可以用图示表示，与上文类似。例如，对于 $k=6$，我们有

$$\overline{\mathrm{Tr}}(H^6) = 5 \quad + 6 \quad - 6 \quad + 3 \quad + \quad - 6 \quad + 0 \quad + 2 \quad \tag{7}$$



在附录中，我们运用编码理论中的技巧证明，对于 $m = \text{poly}(n)$，以至少 $1 - 2^{-\alpha n}$ 的概率，无环近似对所有阶数为 $k \leq \gamma n / \log n$ 的矩都是精确的，其中常数为 γ，$\alpha > 0$。这对应于时间 $t = \mathcal{O}\left(n^{n / \log n}\right)$，因为 H 的范数为常数。

我们注意到，无环近似类似于通常通过对随机耦合 J_i 在 H [79–81]上取平均所得到的图示展开。我们的结果表明，在稀疏泡利模型中，即使对于单个随机实例，此类展开也以高概率成立。

3.2 自由累积量展开

尽管无环近似带来了重要的简化，但它本身并未指出一条经典计算 H 的矩的途径。k 阶矩中的一个典型图将涉及 $\Omega(k)$ 个指标，因此包含 $m^{\Omega(k)}$ 个泡利项。该图的贡献可能以非平凡的方式取决于这些项，因此似乎需要 $m^{\Omega(k)}$ 时间才能计算。这一点以及图的总数，都会随着 k 的增加而迅速膨胀。

为缓解这一问题，我们算法的核心思想是在无环分解中优先处理重要的（即最大的）图。我们可以在四阶矩 [式（5)]中对此进行说明。前两个图 $m^{-2}\sum_{i,\,j}\text{Tr}(P_iP_iP_jP_j)$ 和 $m^{-2}\sum_{i,\,j}\text{Tr}(P_iP_jP_jP_i)$ 都可以分解为配对的乘积，因此取值为一。同时，第三个图 $m^{-2}\sum_{i\neq j}\text{Tr}(P_iP_jP_iP_j)$ 是 $\mathcal{O}(m^2)$ 项的平均值，这些项的均值为零且方差为一，因为对于每个固定的 i 和 j，随机泡利项 P_i 和 P_j 对易或反对易的可能性相等。因此，该图本身的均值为零[2]，标准差为 $\mathcal{O}(m^{-1})$。最后，第四个图 $m^{-2}\sum_i \text{Tr}(P_iP_iP_iP_i)$ 的值为 $1/m$；由于 m 个指标中有两个发生碰撞的概率很低，该值也很小。

为了进一步建立直觉，我们继续考察六阶矩 [Eq. (7)]。第一幅图是三个配对的乘积，其值为一。与此同时，第二幅和第三幅图的均值为零，标准差分别为 $\mathcal{O}(m^{-1})$，值为 m^{-1}，因为它们涉及一个双副本配对（灰色）与一个本质上为四副本的相互作用（蓝色）的乘积。更高阶的图源自本质上为六副本的相互作用（黄色），因而受到更强的抑制：第四幅和第五幅图是 $\mathcal{O}(m^3)$ 个均值为零、单位方差的随机变量之和，因此其均值为零，标准差为 $\mathcal{O}(m^{-3/2})$；其余图的量级则更小，为$\mathcal{O}(m^{-2})$。由此我们注意到一种规律：涉及较少副本的相互作用的图，量级较大；而涉及较多副本相互作用的图，量级较小。这是因为多副本相互作用要么涉及许多次碰撞，每次碰撞都会带来 $\mathcal{O}(m^{-1})$ 的代价；要么是许多随机变量的平均值，$\mathcal{O}(m^j)$，它们会集中于零，标准差为 $\mathcal{O}(m^{-j/2})$。

这种层级关系可以通过自由概率论中的**自由累积量**这一概念优雅地刻画。自由概率论将通常针对标量随机变量的概率论推广到了非交换矩阵随机变量。通常概率论中的一个核心对象是正态分布，它是许多独立随机标量之和的极限分布。自由概率论中与之对应的核心对象是半圆分布，它是许多**自由独立**随机矩阵之和的极限谱。这里，如果对于所有 p_i, q_i，$\text{Tr}\left(\prod_i [A^{p_i} - \text{Tr}(A^{p_i})]\,[B^{q_i} - \text{Tr}(B^{q_i})]\right) = 0$，那么矩阵 A 和 B 就称为自由独立。例如，若 A通过 Haar随机酉矩阵 $A = UA_0U^\dagger$相对于 B进行旋转，则上述性质以指数级小的误差成立，其中 A_0 和 B 是任意的。这立即启发我们将其应用于本问题：虽然 H 中的泡利项并非自由独立，但它们彼此之间通过以下方式随机化

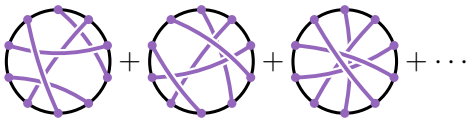
[2]这解释了我们为何将 i设为互不相同，j从而确保均值为零。类似的动机也促使我们在更一般的公式（式 6）中，对 i_1，……，$i_{|\pi|}$ 施加互异性条件。

Clifford旋转，并且在项数趋于无穷时收敛到半圆分布。因此，人们可能会认为自由概率论中的工具适用于此问题。

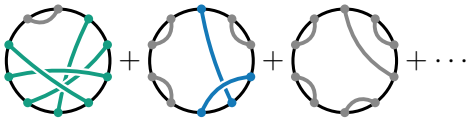
在通常的概率论中，概率分布的**累积量** 刻画了其偏离正态分布的程度。具体而言，第 k 阶累积量提取出分布的第 k 阶矩与正态分布的相应矩之间的偏差中，无法由更低阶矩的偏差解释的部分。在自由概率论中，随机矩阵谱偏离半圆分布的程度同样由其**自由累积量**刻画。对于矩可以展开为图的任意谱（例如我们的谱），第 k 阶自由累积量等于第 k 阶矩中所有本质上包含 k 个副本的图之和 [82]，

$$\kappa_k(H) = \frac{1}{m^{k/2}} \sum_{\substack{\pi \\ \text{connected}}} \chi(\pi) \sum_{\substack{i_1,\ldots,i_{|\pi|} \\ \text{distinct}}} \overline{\mathrm{Tr}}\big(P_{i_{\pi(1)}} \cdots P_{i_{\pi(k)}}\big). \tag{8}$$

这里，π 对所有**连通** 划分求和，即其块以完全连通的方式彼此交叉的划分。例如，在 $k = 10$ 时，自由累积量包括这些图，

$\kappa_{10}(H) =$  $+ \cdots$ (9)

但不包括可分解为更少副本的连通分量乘积的非连通图，

$\overline{\mathrm{Tr}}(H^{10}) - \kappa_{10}(H) =$  $+ \cdots$ (10)

这是直观的，因为非连通图可以分解，因此由包含在低阶矩中的数据所确定。由截至 k 阶的自由累积量可以得到第 k 阶矩：

$$\overline{\mathrm{Tr}}(H^k) = \sum_{\pi \in NC(k)} \prod_{V \in \pi} \kappa_{|V|}(H), \tag{11}$$

其中，$NC(k)$ 表示 k 个位点的不交叉 划分，V 遍历 π 的各个块。实践中，右侧可以通过递归高效计算。反过来，也可以利用该方程，根据截至 k 阶的矩，高效计算 k 阶自由累积量。

有了这一框架，我们的经典算法的关键观察是，稀疏泡利模型的自由累积量随阶数呈指数衰减 k。从我们对低阶矩逐项进行的分析中，已经可以看出这一点。第四阶自由累积量是方程（5）中最后两项（蓝色部分）之和，因此是一个均方根值为 $\mathcal{O}(m^{-1})$ 的随机变量。与此同时，第六阶自由累积量是方程（7）中最后五项（黄色部分）之和，因此为$\mathcal{O}(m^{-3/2})$。在附录中，我们严格证明，稀疏泡利模型的 k阶自由累积量的绝对值

$$|\kappa_k| \le \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{\delta}} \left[\frac{Ck}{m}\right]^{k/4}\right), \tag{12}$$

其概率为 $1 - \delta$。这里，C 是一个常数，并且我们的上界对任意 $k \le \gamma n/\log n$、$k = \mathcal{O}(m^{1/3})$ 均成立。我们还提供证据表明该上界是紧的，即 $|\kappa_k|$ 恰好就是这个阶。

自由累积量的衰减与通常概率论中累积量的衰减相似；在通常概率论中，m 个标量随机变量的平均值具有累积量 $\mathcal{O}(m^{1-k})$ [66]。在我们的情形中，自由累积量的衰减源于连通的 k-副本图，要么是大量随机变量的平均值，要么包含大量指标碰撞。前者给出主导阶贡献[3]。一个含有 $k/2$ 个以连通方式交叉的配对的图，是对 $\mathcal{O}(m^{k/2})$ 个随机变量取平均，因此其典型量级为 $\mathcal{O}(m^{-k/4})$。我们对式（12）的证明将这一直觉与严格的组合上界相结合，估计每一阶所贡献的图的数量，由此得到剩余因子$(Ck)^{k/4}$，见式（12）。

鉴于自由累积量迅速衰减，自然可以考虑仅利用低阶自由累积量来近似稀疏泡利模型的谱，并将高阶累积量近似为零。由此得到我们的经典算法，下一小节将详细介绍该算法。仅保留二阶自由累积量（$k=2$）时，我们的算法会对所有仅由非交叉配对构成的图求和，从而得到半圆谱。众所周知，非交叉配对的数量由卡特兰数 $C_{k/2}$给出，而卡特兰数等于半圆分布的矩。保留更高阶的累积量（$k \le \ell$，并选取阈值 ℓ）时，我们的算法会对所有可分解为 $(k \le \ell)$体相互作用乘积的图求和。这些求和通过矩-累积量关系式（11）自动完成。

3.3 经典算法

基于自　由累积量展开，我们的经典算法极其简单　　：

1. 首先，我们计算 H 的矩，直至 $\ell \sim \log(1/\varepsilon)/\log m$ 阶。
2. 其次，我们根据矩计算 H 的自由累积量，直至 ℓ 阶。
3. 第三，我们计算 H 的高阶矩近似值，直至 $L \sim \log(1/\varepsilon)+t$，使用公式 (11)，并将所有超过 ℓ 的自由累积量近似为零。
4. 最后　，我们对矩求和，以计算 $\mathrm{Tr}(e^{-iHt}$ 的截断泰勒展开　　$)$.

下面将介绍步骤1中的计算，这是主要步骤，所需时间为 $\mathcal{O}(n(m/C'\ell)^{\ell/2})$，其中 C' 是一个常数。同时，根据自由累积量的衰减，我们以概率 $1-\delta$ 严格地将算法的误差上界估计为

$$\varepsilon \le \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{\delta}}\left[\frac{C(\ell+2)}{m}\right]^{(\ell+2)/4} + \left[\frac{2et}{L}\right]^{L}\right). \tag{13}$$

结合两者可得运行时间[4] $(n/\delta)(1/\varepsilon)^{2+\mathcal{O}(1/\log m)}$，见表1。

为计算步骤1中的矩，对于每个偶数 $k \le \ell$，我们首先计算 $H^{k/2}$ 在泡利基 $H^{k/2}=\sum_R c_R R$ 中的系数，由此得到矩 $\mathrm{Tr}(H^k) = \sum_R |c_R|^2$。这一过程所需时间为 $\mathcal{O}(m^{\ell/2}/(\ell/2)!)$，因为 $H^{k/2}$ 中出现的泡利算符至多有这么多个。

[3]这是因为，存在指标碰撞的图会因每次碰撞而受到 m^{-1} 的因子抑制；而向一个连通分量中添加额外配对，由于中心极限定理论证，其典型量级只会降低 $\mathcal{O}(m^{-1/2})$ 的因子。例如，由此可知，所有 k 个副本都发生碰撞的图，其值为 $m^{1-k/2}$，远小于具有 $k/2$ 个连通配对的图的值 $\mathcal{O}(m^{-k/4})$。[4]例如，要达到精度 $\varepsilon < \mathcal{O}(m^{-1})$，取 $\ell=4$，运行时间为 $\mathcal{O}(m^2)$。要达到 $\varepsilon < \mathcal{O}(m^{-3/2})$，取 $\ell=6$，运行时间为 $\mathcal{O}(m^3)$。依此类推。

这是因为每个算子都是以下各项的乘积： $k/2$ 从 m 项 H中选出，且除一个符号外，乘积与顺序无关。根据矩-累积量关系，式（11），步骤2和步骤3便可轻易推出。步骤4也显而易见：将 $\mathrm{Tr}(e^{-iHt})$截断于 L 阶的泰勒展开 $\mathcal{O}((2et/L)^L)$根据泰勒余项定理，误差至多为

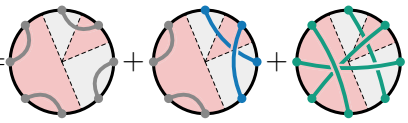
除了自由累积量界之外，我们证明中的关键技术创新，是一种将高阶自由累积量的界转化为 $\mathrm{Tr}(e^{-iHt})$ 中近似误差界的方法。为此，我们利用了对矩—累积量公式 [式（11）] 的一种已知重新诠释，即将其表述为一个小型有效福克空间上的动力学。该福克空间包含态、 $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \ldots\}$以及一个非厄米哈密顿量 $H_{\mathrm{eff}} = a^\dagger + a + \sum_{k>2} \kappa_k a^{k-1}$，其中 $a^\dagger |n\rangle = |n+1\rangle$ 和$a|n\rangle = (1-\delta_{n,0})\ |n-1\rangle$。值得注意的是， H_{eff}在零态中的矩与 H的矩完全相等， $\langle 0| H_{\mathrm{eff}}^k |0\rangle = \mathrm{Tr}(H^k)$。因此，谱振幅对应于福克空间中量子行走的返回振幅，即 $\mathrm{Tr}(e^{-iHt}) = \langle 0| e^{-iH_{\mathrm{eff}}t} |0\rangle$。我们的算法将 H_{eff} 中满足 $k > \ell$的项截断。由于 a 的谱范数为一，这些项之和的范数至多为$\sum_{k>\ell} |\kappa_k|$。由此产生的误差至多为 $t\sum_{k>\ell} |\kappa_k| \approx t|\kappa_{\ell+2}|$，因为 H_{eff} 在 m的一阶近似下是厄米的。通过分析 H_{eff}的具体动力学，还可以进一步消除 t 这一因子。详细内容及福克空间映射的教学式推导，请参阅附录。

3.4 关联函数与尖峰模型

自由累积量包含了关于 H 的矩的数据，但不包含它与其他算子的相互作用。为了将我们的经典算法扩展到热力学值、TOC、OTOC 和尖峰模型，我们将自由累积量展开扩展到更一般的矩量，例如 $\mathrm{Tr}(HQHQH^2QH^4Q)$。当这些量按 H 的幂进行泰勒展开时，就会出现这类矩量。我们将这一扩展称为颜色累积量展开，原因之后便会明了。

让我们以尖峰模型的谱振幅 $H_{\mathrm{spiked}} = H + \lambda Q$ 为背景介绍这一扩展。谱振幅关于 t 和 λ 的泰勒展开由上述矩量构成，其中 H 的幂与尖峰 Q 的单次作用交错出现（回顾 $Q^2 = 1$）。高概率下，这些量是无环的，与 H 的矩类似。因此，它们可以展开为图的和，例如

$$\overline{\mathrm{Tr}}(HQHQH^2QH^4Q) =$$



$$+ \cdots \tag{14}$$

Q 的四种应用对应于背景颜色在灰色和红色之间切换的四个位置。之所以采用这种表示，是因为任何在同一颜色区域开始和结束的配对都会穿过 Q 偶数次，而任何在不同颜色区域开始和结束的配对都会穿过 Q 奇数次。这些情况对图的贡献要么没有符号，要么带有符号 $\mathrm{Tr}(P_iQP_iQ) = \pm 1$，其中 P_i是与该配对对应的泡利项。对于更大的偶数大小的块，也可以作出类似的陈述。

从这些图中可以直接得到我们的颜色累积量展开。对于每个矩阶$k \le L$以及该矩阶中的每种着色，我们都按照原始稀疏泡利模型中的方式进行相应的自由累积量展开。也就是说，对于任意 $k' \le \ell$，我们保留所有可分解为 k' 个 H之间相互作用之积的图。虽然这一表述很简单，但要将其转化为高效算法却会遇到两个难点，这些难点与矩阶为 k时着色数量的爆炸式增长有关。首先，我们的算法必须计算更多

低阶量。具体而言， $\mathcal{O}(2^\ell)$ 比通常的自由累积量多出“颜色累积量”，其数量对应于 $k' \le \ell$ 个顶点的着色数。这使运行时间增加了 $\mathcal{O}(2^\ell)$，但其渐近影响可以忽略不计。其次，将低阶颜色自由累积量转换为 H_{spiked} 的高阶矩近似颇具挑战性，因为在矩阶 L下， $\sim 2^L$的可能放置方式有 Q 种，无法通过暴力求和完成。我们借助算子值自由概率论中的思想，推导出广义矩-累积量关系来解决这一问题 [83, 84]。

我们强调，这种展开不同于以 H 和 Q 的混合自由累积量 [66] 为基础的朴素展开，而这对我们算法的高效性至关重要。混合自由累积量展开无法轻易截断，因为 Q 的谱与半圆分布相去甚远，因此其自由累积量不会随阶数增加而衰减。相反，我们的算法围绕 Q 的简单定义性质构建展开：它的迹为零，且平方为一。

我们的算法可以直接扩展到计算稀疏泡利模型的 TOC 和 OTOC，它们分别涉及 $\binom{k}{2}$ 和 $\binom{k}{4}$ 种可能着色的子集。我们还可以将其用于计算 H 中 A 的热期望值 $\mathrm{Tr}(A\rho_\beta)$：将 $H = \frac{1}{\sqrt{m}} J_1 A + \frac{1}{\sqrt{m}} \sum_{i=2}^{m} J_i P_i$ 分解，并且不失一般性地假设 A 是 H 中的第一项。详情请参阅附录。

4 讨论

我们的工作揭示了一种鲜明的机制：尽管平均情形量子多体问题呈现出典型的困难特征，却仍可能在经典计算上很容易。这是因为在围绕平均情况行为展开实例间波动时，复杂性与集中性之间存在根本性的竞争。据我们所知，我们的结果还代表着首个严格的经典算法，可用于计算一类通用强相互作用量子哈密顿量的长时间和低温性质。

或许，我们的结果最引人注目之处，在于经典运行时间竟会如此精确地降至量子运行时间 $\mathcal{O}(n/\varepsilon^2)$。不过，回过头来看，这种下降其实相当容易理解。 ℓ 阶自由累积量的主导阶贡献，是对 $\mathcal{O}(m^{\ell/2})$ 个随机变量取均值。由于项数为这么多，计算该均值的经典时间为 $\mathcal{O}(m^{\ell/2})$。与此同时，确定该均值所需的量子时间也是 $\mathcal{O}(m^{\ell/2})$，因为对 $\mathcal{O}(m^{\ell/2})$ 个项取均值，其典型量级为 $\mathcal{O}(m^{-\ell/4})$。出于同样的原因，通过对各项进行蒙特卡洛采样来确定该均值，所需的经典时间也是 $\mathcal{O}(m^{\ell/2})$。因此，量子加速的缺失源于最简单不过的原因：一个由众多来源的随机贡献构成的信号，在量子计算机上需要同样数量的随机测量次数才能确定，而在经典计算机上则需要同样数量的随机样本。我们运用自由概率论进行的分析，将这一事实转化为对稀疏泡利模型中可观测量的预测。然而，经典运行时间降至量子运行时间这一现象背后的根本原因，很可能具有普遍性。

为此，尽管稀疏泡利模型具有完全非局域的相互作用，我们希望我们的结果也能为理解具有少体相互作用的系统中的复杂性提供一个起点。这可以类比自旋玻璃物理的发展历程：对高度非局域随机模型的研究推动了早期进展，之后研究才扩展到更贴近现实的情形 [85]。沿着这一方向，一个自然的下一个研究目标是萨赫德夫–叶–基塔耶夫（SYK）模型 [86–88]。与近期同期提出的 SYK 模型算法 [53–55], 相比，我们的结果适用于更长的时间和更低的温度，并且经典与量子运行时间精确一致，而非呈现多项式级差距。若能弄清楚

这些特征能否推广到 SYK 模型；一种可能的途径是采用双重缩放 SYK 模型 [79, 80] 以及 q-高斯代数 [89]，它们在我们的自由概率机制与标准 SYK 极限之间连续插值。

更广泛地说，我们的工作与近期少数几种基于均值或极限量子行为展开的经典算法相呼应。这些算法包括用于随机量子线路期望值 [63] 和随机量子线路 OTOC [56, 57]，的算法，以及用于 SYK 模型 [54, 55]的算法。从物理角度看，对这些结果有一种优雅的解释 [56]：量子混沌将微观信息分散到复杂且不可观测的特征中，反而可能带来更简单而非更复杂的经典算法。这些方法能在多大范围内推广，以及哪些物理现象可能无法由它们处理，都是亟待回答的问题。

鉴于我们的结果，一个尤为有趣的问题是：我们的算法误差 ε的二次依赖关系（与不使用振幅估计时的量子运行时间相匹配）是否也能广泛适用于上述这类算法。目前，这些算法对 ε的依赖关系要差得多，因此在精度较低时，仍存在量子优势达到较大多项式或准多项式量级的可能性。对于这类算法，要获得关于 ε 的最优依赖关系可能颇具挑战，因为这种依赖关系取决于一种微妙的竞争：随着展开阶数增加，经典运行时间呈指数增长，而算法误差则呈指数下降。对展开细节稍作修改，就可能改变这些指数的比值，并导致运行时间发生多项式级变化。稀疏泡利模型的简单性使我们得以在本工作中确定这一展开的“最优”基，即自由累积量。

关于稀疏泡利模型，还有一些更具体的问题尚未解决。虽然我们的数值结果（图 2）表明，我们的算法或许可以扩展到线性时间之外，但目前仍缺乏对这一范围的严格分析。线性倒数温度以下的模型行为也尚未得到探索。然而，或许最引人关注的是，我们的算法似乎从根本上无法计算相对于系统大小而言精度极高的性质：具体来说，在 $1/\varepsilon$ 随 m呈指数级增长、晚时演化 $t = \Omega(n)$，且$m = \Theta(n)$ 规模适中的范围内。要达到这些精度，自由累积量展开需要达到 $\ell = \Omega(m)$ 阶；然而，在这一阶，展开开始发散 [（例如，见图 2(c)] ），原因是图的数量发生了组合爆炸。我们在附录中对这一范围进行了启发式分析，结果表明，已知经典算法在此处或许仍存在多项式量级的量子优势。这些问题有一个共同点：要回答它们，都需要理解高阶矩 $k = \Omega(n)$的行为，而我们的技术在此处失效。

致谢

我们感谢 Ryan Babbush、Fernando Brandão、Chi-Fang Chen、Jeongwan Haah 和 S hreya Vardhan 提供宝贵的讨论和见解。MD 部分得到了美国国家科学基金会研究生研究奖学金计划的资助，资助编号为 DGE-2146755。TS 感谢项目早期获得 Walter Burke 理论物理研究所、量子信息与物质研究所、美国能源部科学办公室国家量子信息科学研究中心量子系统加速器的支撑。

人工智能披露

我们的主要经典算法及其效率证明完全由作者独立完成，时间是在一到两年前，未使用人工智能。这包括正文中描述的所有主要思想，以及

附录第一 部分。

随后，近期我们还协作使用 OpenAI 的 ChatGPT 5.6 和 6 Pro 来优化并扩展研究成果。其中包括通过更精细的组合分析，将最大演化时间从立方根级提升至在 n 中近线性；将失败概率从固定值改进为任意多项式倒数；以及利用快速矩阵乘法改善渐近运行时间。关联函数和尖峰模型的算法与证明也由作者完成，其中利用算子值自由概率从颜色累积量计算矩的思路，源自与 ChatGPT 5.6 Pro 的交流。人工智能还提供了少量技术协助，用于应用颜色框架，主要是完成组合分析和复分析证明。我们感谢 OpenAI Codex 在数值模拟中的帮助。

正文及I 至 IV部分附录均由作者撰写。最后一部分附录，即第V部分，包含由人工智能生成并经作者核实的部分技术性证明；如前所述，这些证明改进了我们结果的参数，但并非理解结果所必需。

附录

目录

I 计算谱振幅 **19**

A 预备知识 **19**
A.1 组合学 .20A.2 自由概率 .24

B 稀疏泡利模型的无环区域 **27**B.1 泡利哈密顿量的无环性 .27B.2 稀疏泡利哈密顿量的对易图 .29

C 无环区域中的对易图统计量与自由累积量 **30**
C.1 对易图统计量 .31C.2 χ-函数 .34C.3 推导无环区域中的自由累积量表达式 .37

D 稀疏泡利模型的自由累积量的集中性 **39**D.1 支配性二阶矩贡献的界 .40D.2 完成证明并转换为自由累积量.43

E 稀疏泡利模型的福克空间解释 **45**
E.1 预备说明：半圆元素的福克空间 .45E.2 一般非交换元素的福克空间 .46

F 谱振幅的经典算法 **48**F.1 算法概述和运行时间 .48F.2 截断矩和自由累积量的近似误差 .50F.3 完整谱振幅算法 .53

II 颜色框架与关联函数 **55**

G 稀疏泡利模型的颜色框架 **56**
G.1 预备说明：两种颜色 .56G.2 一般颜色框架设置 .58

H 稀疏泡利模型的颜色累积量集中性 **59**H.1 由对易图得到的颜色累积量 .59H.2 颜色累积量集中 .60

I 多色 Fock 空间构造 **62**

J 计算关联函数 64J.1 截断颜色矩和累积量的近似误差 .65J.2 全关联器算法 .68

III 尖峰泡利模型 **71**

K 算子值自由概率 71K.1 算子值自由累积量 .72K.2 算子值 R-变换 .73

L 尖峰泡利模型的谱振幅 **74**
L.1 尖峰泡利模型的颜色矩与累积量 .74L.2 算子值颜色框架与递推关系 .76L.3 尖峰泡利模型算法的分析 .79L.4 尖峰模型算法的运行时间.82

M 计算热期望值 **85**

IV 数值研究 88

N 正文中的数值研究详情 88

O 小精度下剩余优势的启发式研究 88

V 选择性技术证明 **92**

P 一般福克空间截断界 **92**

热态可观测量的 Q 扩展 **96**
Q.1 矩界与泰勒级数截断 .96Q.2 配分函数 .99Q.3 关联函数 .104Q.4 热期望值 .106

R 偶奇偶性 cr ossing 划分计数 10 **8**
R.1 大小为二的块 .109R.2 大小为四的块 .111R.3 任意偶数大小的块 .112

S 利用矩阵乘法计算矩 114S.1 利用同态和计算矩 .114S.2 另一种矩计算.115

T 通过超收缩性获得更强的集中性 117T.1 独立符号上的低次多项式 .117T.2 转移到泡利对易符号 .
119

第一部分

计算谱振幅

我们首先考虑经典算法所要解决的最简单任务，即计算稀疏泡利模型的谱振幅。这将介绍我们的技术，而我们会对其进行推广，以推导出其他所有经典算法。

A 节 介绍了我们在 第一部分 以及论文其余部分中所使用的预备知识和记号。我们在B 节中形式化了无环性的概念，并在 C 节中给出了无环性条件下自由累积量的精确表达式。利用这一表达式，我们在D 节中证明了自由累积量的集中性。

在 E 节中，我们介绍福克空间解释，并形式化其与我们算法之间的联系。最后，在F 节中，我们结合福克空间解释和自由累积量的集中性，证明经典谱振幅算法的正确性。

A 预备知识

我们首先介绍论文中使用的一些通用符号和定义。随后，在这两个小节中，我们将广泛且全面地介绍数学中若干相关子领域的背景知识，这些知识将用于构建和分析我们的算法。 **只有小节 A.1.1 和A.2.1 对于理解论文的其余部分是必不可少的**，而其他预备知识在首次阅读时可以暂时跳过，并在后文提及时再行查阅。

在 小节 A.1中，我们给出划分组合学、偏序集和格中的定义，这些内容构成了自由概率论的组合学基础 [66]。具体而言，在小节 A.1.1 中，我们介绍非交叉划分及其与自由累积量的关系；本小节中的主要定义对于整篇论文都至关重要。在 小节 A.1.2中，我们定义 NC-乘法函数，这是自由累积量的一项关键性质。在 小节 A.1.3 中，我们给出非交叉划分与连通划分之间的关系，并在 小节 A.1.4 中介绍关联代数，从而能够利用组合学方法对自由累积量进行界定。对 小节 A.1.2至 A.1.4 的依赖相当局部，主要用于界定 C 节 和D 节中稀疏泡利哈密顿量的自由累积量。

接下来，在小节 A.2中，我们先对自由概率作介绍性概述。我们在小节 A.2.1 中正式引入自由累积量的概念，并在 R-变换的A.2.2小节中介绍它。整篇小节 A.2.1 都至关重要，而小节 A.2.2 主要用于推导F 节中的算法。

一般记号与约定。

- 泡利算符：对于 n量子比特泡利算符 P_i 和 P_j，我们定义

$$\langle P_i, P_j \rangle = \begin{cases} +1 & \text{if } P_i,\, P_j \text{ commute} \\ -1 & \text{if } P_i,\, P_j \text{ anticommute} \end{cases} \tag{15}$$

到 记其对易关系。当稀疏泡利哈密顿量实例

$$H = \frac{1}{\sqrt{m}} \sum_{i=1}^{m} J_i P_i$$

根据上下文可知，我们将其 泡利支撑定义为序列 $\mathbf{P} \equiv (P_1、\ldots\ldots、\ P_m)$，并将其系数向量定义为向量 $\vec{\mathbf{J}} \equiv (J_1、\ldots\ldots、\ J_m) \in \{\pm 1\}^m$。

对于一个 n量子 比特泡利算符 P，我们用 $[P]$ 表示其关于相位的等价类 .

• 集合与函数记号：我们将集合 $[n] \equiv \{1, 2, \ldots, n\}$记为。令 $(m)_r \equiv m(m-1)\ldots\ldots(m-r+1)$，其中 $(m)_0 \equiv 1$。

对于不相交有限集 $A、\ B \subseteq [N]、\ N \in \mathbb{N}$，令

$$\mathrm{inv}(A, B) \equiv |\{(a, b) \in A \times B :\ b < a\}| \tag{16}$$

表示逆序的数量，并令

$$\mathrm{cr}(A, B) \equiv |\{(a_1, a_2, b_1, b_2) \in A^2 \times B^2 : a_1 < b_1 < a_2 < b_2 \text{ or } b_1 < a_1 < b_2 < a_2\}| \tag{17}$$

表示交叉的数量（交替四元组）。

定义域为 A 、值域为 B 的函数 f 记作 $f\colon A \to B$。如果 f 还是一个单射函数，我们也可以使用 $f\colon A \hookrightarrow B$。

对于定义在指标集 V 上的非交换随机变量 $(x_i)_{i \in V}$，我们约定任何乘积$\prod_{i \in V} x_i$ 均按递增顺序进行

$$\prod_{i \in V} x_i = x_{i_1} x_{i_2} \cdots x_{i_k}, \qquad V = \{i_1, \ldots, i_k\}, \quad i_1 < \cdots < i_k,$$

除非另有说明。

• 运行时间：所有运行时间均统计精确实数上的算术运算，每次运算的单位成本均为 1，以及在 n 量子比特泡利串上执行的 $\mathcal{O}(n)$ 时间运算；我们不跟踪算术运算的比特复杂度。

如果存在常数 $c > 0$ 使得 $x = \mathcal{O}(n^c)$，我们就称 $x = \mathrm{poly}(n)$。对于稀疏泡利哈密顿量，我们假设项数满足 $m \geq 2n$ ，并且始终有 $m = \mathrm{poly}(n)$。常数可能隐含地依赖于 $m = \mathrm{poly}(n)$ 和 $1/\delta = \mathrm{poly}(n)$ 的多项式次数。

A.1 组合学

偏序集（“偏序集”）是一个有序对 $(P, \leq)$ 其中 P 是一个集合，而 $\leq$ 定义了其上的偏序 [90]。

定义 A.1 （偏序）。集合 P 上的偏序是一个二元关系 $R \subseteq P \times P$，其中我们使用记号 $x_1 \leq x_2 \iff (x_1, x_2) \in R$，并满足以下公理：

1. 自反性：对于所有 $x \in P$， $x \leq x$。
2. 反对称性：对于所有 x， $y \in P$，如果 $x \leq y$ 且 $y \leq x$，则 $x = y$。

3. 传递性：对于所有 x，y，$z \in P$，如果 $x \le y$ 且 $y \le z$，则 $x \le z$。

格是一种具有特殊结构的偏序集。

定义 A.2（格）。偏序集 P称为格，如果对于任意元素 $\pi, \sigma \in P$，都存在 π 和 σ的交与并：

- 交（$\pi \wedge \sigma$）：如果 $\{\rho \in P \mid (\rho \le \pi) \wedge (\rho \le \sigma)\}$ 的集合非空且有最大元，则 $\pi \wedge \sigma$ 定义为该最大元。
- 并（$\pi \vee \sigma$）：如果 $\{\tau \in P \mid (\tau \ge \pi) \wedge (\tau \ge \sigma)\}$ 的集合非空且有最小元，则 $\pi \vee \sigma$ 定义为该最小元。

子格是格的一个非空子集，并且对于该格中的交与并运算封闭。

定义 A.3（区间）。给定偏序集 P和满足 $\pi \le \sigma$ 的元素 $\pi, \sigma \in P$，区间 $[\pi, \sigma] \subseteq P$定义为 $\{\tau \mid \pi \le \tau \le \sigma\}$。如果 P是格，则区间 $[\pi, \sigma]$ 也是 P 的子格。

我们还可以通过定义 $k-1$ 多链在 P 中的长度为 $P_{(k)}$=$\{(\pi_1, \pi_2, \ldots\ldots, \pi_k) : \pi_1 \le \pi_2 \le \cdots \le \pi_k\}$，例如 $P^{(1)} = P$，以及 $P^{(2)} = \{(\pi, \sigma) : \pi, \sigma \in P, \pi \le \sigma\}$，从而扩展这一概念；后者是 P 上所有区间的集合。

我们还可以取偏序集 $P_1 \times P_2 \times \cdots \times P_n$ 的直积，其诱导偏序定义为 $(\pi_1, \pi_2, \ldots\ldots, \pi_n) \le (\sigma_1, \sigma_2, \ldots\ldots, \sigma_n) \iff \forall i : \pi_i \le \sigma_i$。

A.1.1 非交叉划分

划分和非交叉划分是（自由）概率论中出现的关键组合对象 [66]。

定义 A.4（划分与非交叉划分）。集合 $\pi = \{V_1, V_2, \ldots, V_r\}$ 是有限集合 S的一个划分，当且仅当所有集合 $V_i \subseteq S$均非空且两两不相交，并且 $V_1 \sqcup V_2 \sqcup \cdots \sqcup V_r = S$。若对于所有 $a < b < c < d$、$a \sim_\pi c$ 和 $b \sim_\pi d$，它们共同蕴含 $b \sim_\pi c$，则称一个划分为非交叉划分。我们用 $\mathcal{P}(n)$ 表示 $[n]$ 的所有划分所组成的集合，用 $NC(n)$ 表示 $[n]$的所有非交叉划分所组成的集合。因此 $NC(n) \subseteq \mathcal{P}(n)$。

非交叉划分构成一个格，其偏序定义为 $\forall \pi, \sigma \in NC(n)$,$\pi \le \sigma$，若 π 是对 σ的块的细化，称为“逆细化序” [91]。因此，最大元是由单个块组成的划分（记为 1_n），最小元是由单元素块组成的划分（记为 0_n）。对于划分 $\pi \in \mathcal{P}(n)$，我们用 $|\pi|$ 表示 π 中的块数，用 $\pi(i)$ 表示在预先定义的块标记下，包含元素 $i \in [n]$ 的块的索引。n 个元素的非交叉划分数量由卡特兰数给出：

$$|NC(n)| = C_n \equiv \frac{1}{n+1}\binom{2n}{n}. \tag{18}$$

$NC(n)$中的区间存在典范分解：对于任意 $\pi \le \sigma \in NC(n)$，存在整数 $k_1, \ldots k_n \ge 0$ 使得

$$[\pi, \sigma] \cong NC(1)^{k_1} \times NC(2)^{k_2} \times \cdots \times NC(n)^{k_n}. \tag{19}$$

A.1.2 NC-乘法函数

定义 A.5（NC [65]上的乘法函数）。设 $(\alpha_i)_{i\in\mathbb{N}}$ 是一个复数序列。考虑元素 $\pi,\sigma \in NC(n)$，其中 $\pi \le \sigma$ 且 $[\pi,\sigma]$ 具有典范分解 $NC(1)^{k_1} \times NC(2)^{k_2} \times \cdots \times NC(n)^{k_n}$。如果一个（二元）函数族 $(F_n)_{n\in\mathbb{N}}$ 满足以下条件，则称其为 $NC(n)$上的乘法函数族（或称 NC-乘法族）：

$$F_n(\pi,\sigma) = \alpha_1^{k_1}\alpha_2^{k_2}\ldots\alpha_n^{k_n}. \tag{20}$$

对于任意选择的 π，$\sigma \in NC(n)$。注意，给定一个乘法族 F_n，对于所有 $i \in \mathbb{N}$，α_i 都是固定的，因为 $\alpha_i = F_i(0_i,\ 1_i)$。

函数族（单变量） f_n：$NC(n) \to \mathbb{C}$ 是非交叉划分乘法的，当且仅当对所有 $\pi = \{V_1,\ldots,V_r\}$

$$f_n(\pi) = \alpha_{|V_1|}\alpha_{|V_2|}\ldots\alpha_{|V_r|}. \tag{21}$$

给定一个乘法函数族 $(f_n)_{n\in\mathbb{N}}$，其对应的标量序列为 $(\alpha_n)_{n\in\mathbb{N}}$，乘法扩张 $(\alpha_\pi)_{n\in\mathbb{N},\ \pi\in NC(n)}$ 定义为：对所有 $n \in \mathbb{N}$ 和 $NC(n)$ 中的 π，均有 $\alpha_\pi \equiv f_n(\pi)$。这是一种扩张，因为 $\alpha_{1_n} = \alpha_n$，且扩张映射 $\pi \mapsto \alpha_\pi$ 是 $NC(n)$ 上的乘法函数。偏序集上的乘法函数定义可以扩展到代数上的多重线性泛函。

定义 A.6（代数上的乘法泛函）。设 $\mathcal{A}$ 是一个代数，且 $(\rho_k)_{k\in\mathbb{N}}$是定义在 $\mathcal{A}$ 上的一列多重线性函数，记作 ρ_k：$\mathcal{A}^k \to \mathbb{C}$，其中 ρ_k 作用为映射 $(a_1,\ldots,a_k) \mapsto \rho_k(a_1,\ldots,a_k)$。我们可以将其扩展为定义在 NC上的一族乘法泛函，记作 ρ_π：$\mathcal{A}^k \to \mathbb{C}$，其中 ρ_π作用为映射 $(a_1,\ldots,a_k) \mapsto \rho_\pi[a_1,\ldots,a_k]$，定义如下：若 $\pi = \{V_1,\ldots,V_r\} \in NC(k)$，则

$$\rho_\pi[a_1,\ldots,a_k] \equiv \rho(V_1)[a_1,\ldots,a_k]\cdots\rho(V_r)[a_1,\ldots,a_k] \tag{22}$$

其中

$$\rho(V)[a_1,\ldots,a_k] \equiv \rho_{k'}(a_{i_1},\ldots,a_{i_{k'}}), \qquad V = \{i_1,\ldots,i_{k'}\},\quad i_1 < \cdots < i_{k'}. \tag{23}$$

A.1.3 分拆的唯一分解

组合学中的一个普遍主题是，许多对象都可以唯一地分解为不可约分量，从而更容易理解或计数，例如自然数的素因数分解，或图中的连通分量。我们具体采用 Beissinger [92] 提出的一般框架，并将其应用于划分；这一框架对于自由累积量的分析十分重要。

在我们的设置中，划分的不可约分量称为连通划分 s:

定义 A.7（连通划分 [82, 93]）。如果不存在任何区间 $I = \{k, k+1,\ldots,k+r-1,k+r\} \neq [n]$ 使得 $\pi = \pi_1 \sqcup \pi_2$，其中 $\pi_1 \in \mathcal{P}(I)$ 且 $\pi_2 \in \mathcal{P}([n]\setminus I)$，则称划分 $\pi \in \mathcal{P}(n)$ 是连通的。我们将 $[n]$ 的所有连通划分所构成的偏序集记为 $\mathcal{P}(n)$。

注 A.8. Nica–Speicher [66] 也将连通划分称为不可分解 划分。枚举组合学的早期著作最初将其称为不可约 划分 [92, 94, 95]，不过我们避免使用这一说法，因为它与 Arizmendi 等人 [93] 给出的另一种定义相冲突。将 $\mathcal{P}(n)$ 分解为连通（划分）分量，也类似于将图分解为连通（图）分量。

的一般因子分解框架 也依赖于作用于不可约分量的依赖于实例的闭包算子。在我们的具体情形中，该闭包算子是非交叉闭包：

定义 A.9 （非交叉闭包 [82, 93]）。设 $\mathrm{cl}_{NC}:\mathcal{P}(n)\to\mathcal{P}(n)$ 为闭包算子，它将划分 π 映射为满足 $\pi\le\pi$的最小非交叉划分 π。 π 称为 π的非交叉闭包。

参见 [92, 定理 6。1] 证明（作为一个特例）， $\mathcal{P}$ 中的任意划分都可以唯一地˜分解为若干连通分量，它们是 $\mathcal{P}$ 中互不相交、彼此不交叉的连通子划分。[5] 从组合角度看，对一个划分取非交叉闭包，就是将每个连通分量中的所有块合并为一个块 [82]。所得划分是不交叉的。连通划分也可以等价地定义为 $\mathcal{P}$（n）中所有满足其非交叉闭包为 1_n的划分所构成的子集。

受稀疏泡利哈密顿量的启发，我们考虑所有偶划分的集合：

定义 A.10 （偶分拆）。 如果 π的所有块大小均为偶数，则称 π of $\{1,\dots,k\}$ 为偶分拆 。令 $\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)$ 表示 $\{1,\dots,k\}$ 的所有偶分拆的集合。

连通性的定义自然延伸到偶分拆，因为由块的并集诱导出的偶分拆的子划分也都是偶分拆。[92,定理 6。1]也可推广，从而表明 $\mathcal{P}_{\mathrm{even}}$ 可以唯一分解为连通的偶分拆。我们将 $[n]$的连通˜偶分拆的集合记为 $\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(n)$。

偶分拆的一个重要子集是弦图 $\mathcal{P}_2(n)\subseteq\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(n)$，即每个块的大小均为 2 的划分集合。更一般地，对于任意˜ ˜偶 q，我们可以定义 $\mathcal{P}_q(n)\subseteq\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(n)$，表示每个块的大小均为 q 的所有划分的集合。令 $\mathcal{P}_q(n)\subseteq\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(n)$ 表示每个块的大小均为 q的所有连通划分的集合。

A.1.4 关联代数

偏序集上的关联代数由 Rota [96]在其开创性著作中引入。

定义 A.11 (代数)。 域 K 上的代数是一个向量空间 $\mathcal{A}$，其上配备了双线性乘积 $\mathcal{A}\times\mathcal{A}\to\mathcal{A}$。除非另有说明，本文始终假设所有代数均定义在 $\mathbb{C}$上，且具有单位元（存在单位元 $\mathbf{1}_{\mathcal{A}}$）并满足结合律（$\forall a,b,c\in\mathcal{A}:(ab)c=a(bc)$）。

对于任意（有限）偏序集 P，我们可以定义一个关联代数，其元素是函数$P^{(2)}\to\mathbb{C}$。该代数的二元运算是卷积：

定义 A.12 (偏序集上的卷积)。 对于任意两个函数 $F,G\colon P^{(2)}\to\mathbb{C}$， F 与 G的卷积定义为

$$(F*G)(\pi,\sigma)=\sum_{\substack{\tau\in P\\ \pi\le\tau\le\sigma}}F(\pi,\tau)G(\tau,\sigma). \tag{24}$$

P 关联代数中的特殊元素包括恒等算符和 ζ函数：

$$\delta(\pi,\sigma)=\begin{cases}1 \text{ if } \pi=\sigma\\ 0 \text{ else,}\end{cases}\qquad \zeta(\pi,\sigma)=\begin{cases}1 \text{ if } \pi\le\sigma\\ 0 \text{ else.}\end{cases} \tag{25}$$

[5]形式上， $\mathcal{P}$ 是 $\tilde{\mathcal{P}}$的 NC-复形。

关联代数中ζ函数关于卷积的逆元素是莫比乌斯函数 μ，其定义为 $\mu * \zeta = \zeta * \mu = \delta$:

定义 A.13（偏序集上的莫比乌斯函数）。 设 P 为有限偏序集。偏序集 P 上的莫比乌斯函数μ : $P \times P \to \mathbb{Z}$ 定义如下:

$$\sum_{\substack{\tau \in P \\ \pi \leq \tau \leq \sigma}} \mu(\pi, \tau) = \sum_{\substack{\tau \in P \\ \pi \leq \tau \leq \sigma}} \mu(\tau, \sigma) = \delta(\pi, \sigma) \tag{26}$$

此外，偏序集 P 的任意区间 $[x, y]$ 上的莫比乌斯函数，等于将 μ_P 限制在区间 $[x, y]$ [96, 上。命题 4]。 NC的莫比乌斯函数也是定义 A.5 意义下的乘法族。整个 NC 区间的莫比乌斯函数取值为带符号的卡特兰数 $\mu_{NC}(0_n, 1_n) = (-1)^{n-1} C_{n-1}$，并且对于所有 $\pi, \sigma \in NC(n)$，都有一致界 $|\mu_{NC}(\pi, \sigma)| \leq 4^n$。

该函数使我们能够通过莫比乌斯反演这一过程在关联代数中求逆:

Le引理 A.14（莫比乌斯反演）。 设 P 为有限偏序集。对于任意 f, g： $P \to \mathbb{C}$,

$$\forall \pi \in P : f(\pi) = \sum_{\substack{\sigma \in P \\ \sigma \leq \pi}} g(\sigma) \iff \forall \pi \in P : g(\pi) = \sum_{\substack{\sigma \in P \\ \sigma \leq \pi}} f(\sigma) \mu(\sigma, \pi). \tag{27}$$

A.2 自由概率

我们简要介绍自由概率论，该理论最初由 Voiculescu 形式化 [97, 98]。关于组合视角及其与非交叉划分的关系，则归功于 Speicher [65]。如需全面了解相关内容，建议读者参阅 Nica 和 Speicher 的教材 [66], ，本小节中的所有定义和结果均可在其中找到。

非交换概率。 自由概率论是非交换概率的一个例子：在非交换概率中，经典概率论/测度论中的样本空间和事件空间都被抽象化，而随机变量（可观测量）和期望（迹）则被视为基础对象。这一形式体系涵盖经典概率论，也涵盖非交换随机变量，例如量子可观测量、随机矩阵等。 [81]。

定义 A.15（非交换概率空间）。 一对 $(\mathcal{A}, \tau)$ 被称为非交换概率空间，其中 $\mathcal{A}$ 是域 $\mathbb{C}$ 上的一个（可能是非交换的）代数，并配备含单位线性泛函 τ： $\mathcal{A} \to \mathbb{C}$ （满足 $\tau(\mathbb{1}_{\mathcal{A}}) = 1$）。元素 $a \in \mathcal{A}$ 被称为非交换随机变量。

示例 A.16. 非交换概率空间的一些例子包括:

- 复数上的经典随机变量：$(\mathcal{A}, \tau) = (L^{\infty-}, \mathbb{E}[\cdot])$，其中 $L^{\infty-}$ 表示所有矩有限的 $\mathbb{C}$ 上的随机变量空间。 $\mathcal{A}$ 的乘积是随机变量的逐点乘法。

- 随机矩阵：$(\mathcal{A}, \tau) = (L^{\infty-} \otimes M_n(\mathbb{C}) \ \mathbb{E}\ \frac{1}{n}$迹)，其中双线性算子对应于矩阵乘法，而分布对应于其期望特征值谱。

本文主要考虑由 n量子比特泡利群张成的矩阵有限维代数 $M_{2^n}(\mathbb{C})$ $2^n \times 2^n$ ， 以及由归一化迹 $\underline{\mathrm{Tr}}(\cdot) \equiv 2^{-n}\,\mathrm{Tr}(\cdot)$ 给出的线性泛函。

自由概率。 自由概率是非交换概率的一个主要分支，研究自由独立性这一概念。经典概率论中随机变量的独立性 X， Y等价于“张量独立性”，这意味着 X 和 Y对易，且它们的联合矩可以分解（例如 $\mathbb{E}[X^k Y^j] = \mathbb{E}[X^k]\,\mathbb{E}[Y^j]$）。自由独立性是非交换随机变量独立性的一种替代性定义：

定义 A.17 （自由独立性）。 设 $(\mathcal{A},\ \tau)$ 是一个非交换概率空间。子代数 $(\mathcal{A}_i)_{i\in[s]}$ 称为自由独立的（或称自由的），如果

$$\tau(a_1) = \tau(a_2) = \cdots = \tau(a_k) = 0 \implies \tau(a_1 a_2 \ldots a_k) = 0 \tag{28}$$

对于所有 $a_j \in \mathcal{A}_{i_j}$ ，当相邻元素来自不同的子代数 $(i_j \neq i_{j+1})$ 时。非交换随机变量 a_1，……，$a_s \in \mathcal{A}$ 也称为自由独立的，如果子代数$\left(\mathrm{alg}(\mathbb{I},\ a_i)\right)_{i\in[s]}$ 是自由独立的。

经典概率论中的许多概念在自由概率中都有相应的版本，包括卷积、累积量、中心极限定理等[81]。此外，半圆分布在自由概率论中所起的核心作用，正如高斯分布在经典概率中所起的作用。自由中心极限定理指出，若非交换随机变量a_1，……，a_N同分布、自由独立、自伴、中心化且方差为1，则$N^{-1/2}\sum_{j=1}^{N} a_j$依分布收敛于标准半圆分布，当 $N \to \infty$。Voiculescu [64] 证明了若干类 $N \times N$ 随机矩阵在极限 $N \to \infty$下渐近自由，从而揭示了随机矩阵理论中的Wigner半圆律与自由概率之间的关键联系。半圆分布在自由概率中的这一核心地位，使其成为分析稀疏泡利哈密顿量的自然框架，该哈密顿量可视为GUE矩阵系综的稀疏版本 [52]。

A.2.1 自由累积量

给定一个非交换概率空间 $(\mathcal{A},\ \tau)$，定义矩函数a $\qquad\qquad$ 1

$$\tau_k[a_1, \ldots, a_k] \equiv \tau(a_1 a_2 \cdots a_k). \tag{29}$$

矩泛函的乘法扩张由以下集合给出

$$\tau_\pi[a_1, \ldots, a_k] \equiv \prod_{V\in\pi} \tau_{k'}[a_{i_1}, \ldots, a_{i_{k'}}], \qquad V = \{i_1, \ldots, i_{k'}\}, \quad i_1 < \cdots < i_{k'}. \tag{30}$$

对于所有 $\pi \in NC(k)$。自由累积量是矩泛函在 NC关联代数上的逆：

定义 A.18 （自由累积量）。 设 $(\mathcal{A},\ \tau)$ 为一个非交换概率空间。自由累积量泛函 为 $(\kappa_k)_{k\in\mathbb{N}}$ ， 其中

$$\kappa_k[a_1, \ldots, a_k] \equiv \sum_{\sigma\in NC(k)} \tau_\sigma[a_1, \ldots, a_k]\,\mu_{NC(k)}(\sigma, 1_k), \tag{31}$$

对所有 a_1，……，$a_k \in \mathcal{A}$。

We c还定义了自由累积量的乘法扩张：对所有 $\pi \in NC($ $k)$

$$\kappa_\pi[a_1,\ldots,a_k] \equiv \prod_{V\in\pi} \kappa_{k'}[a_{i_1},\ldots,a_{i_{k'}}], \qquad V=\{i_1,\ldots,i_{k'}\}, \quad i_1<\cdots<i_{k'}. \tag{32}$$

半圆元素的二阶自由累积量为 $\kappa_2 = 1$，其他所有自由累积量均为 0（这类似于标准高斯，其二阶累积量为 1，其他所有累积量均为 0）。

命题 A.19（矩—累积量公式）。 对于 $a_1,\ldots,a_k \in \mathcal{A}$,

$$\begin{aligned} \kappa_\pi[a_1,\ldots,a_k] &= \sum_{\substack{\sigma\in NC(k)\\ \sigma\le\pi}} \tau_\sigma[a_1,\ldots,a_k]\,\mu_{NC(k)}(\sigma,\pi), \\ \tau_\pi[a_1,\ldots,a_k] &= \sum_{\substack{\sigma\in NC(k)\\ \sigma\le\pi}} \kappa_\sigma[a_1,\ldots,a_k]. \end{aligned} \tag{33}$$

利用矩－累积量关系，并按照包含元素 1 的块来分解非交叉划分（同样见 [66, 公式 16。23]），可得

$$\tau(a_1\cdots a_k) = \sum_{k'=1}^{k} \sum_{1=v_1<\cdots<v_{k'}\le k} \kappa_{k'}[a_{v_1},\ldots,a_{v_{k'}}] \prod_{h=1}^{k'} \tau(a_{v_h+1}\cdots a_{v_{h+1}-1}), \qquad v_{k'+1}\equiv k+1, \tag{34}$$

空字的矩为 1。

A.2.2 R-变换

非交换随机变量的 R-变换在自由概率中所起的作用，类似于经典随机变量的特征函数（的对数）。它在计算自由独立变量之和的谱时发挥着重要作用 [81]。

定义 A.20 (R-变换)。 非交换概率空间中有界自伴元素 a 的（单变量） R-变换定义为

$$R_a(z) \equiv \sum_{k=1}^{\infty} \kappa_k(a,\ldots,a) z^k, \tag{35}$$

其中 z 是一个未定元。

有界自伴非交换随机变量的 R-变换也能确定其矩。

定义 A.21（矩级数）。 设 $a \in \mathcal{A}$ 是一个有界自伴元素。它的矩级数是由下式给出的形式幂级数

$$M_a(z) \equiv \sum_{k=0}^{\infty} \tau(a^k) z^k, \tag{36}$$

其中 z 是一个未定元。

矩－累积量关系等价于以下形式幂级数恒等式

$$M_a(z) = 1 + R_a\big(zM_a(z)\big). \tag{37}$$

R变换的一个关键性质是：它对于自由变量具有可加性：对于自由独立变量 $a_1,\ a_2 \in \mathcal{A},$ R变换为 $a_1 + a_2$ 的是

$$R_{a_1+a_2}(z) = R_{a_1}(z) + R_{a_2}(z). \tag{38}$$

B 稀疏泡利模型的无环区域

本节将讨论泡利算符中的随机性 P_i 和拉ademacher系数J_i 如何分别对稀疏泡利哈密顿量的谱产生影响 H。在小节 B.1中，我们将证明，对于随机泡利算符， H 直到$\Omega(n/\log\ n)$ 阶的所有矩和自由累积量，以高概率完全不依赖于拉ademacher系数的取值。我们将这一概念称为无环性。

在小节 B.2中，我们将证明，在满足无环性的条件下，稀疏泡利哈密顿量的矩和自由累积量可以通过一个称为对易图的单一随机图来描述。在达到 k阶的无环性条件下， k阶自由累积量是 H的对易符号的一个多项式，其中每个单项式至多取决于对易图中的 $\binom{k/2}{2}$ 条不同边。因此，我们可以通过计算这些多项式的期望，来证明稀疏泡利哈密顿量的自由累积量具有集中性（第 C节和D节）；这比直接计算自由累积量简单得多。

B.1 泡利哈密顿量的无环性

我们称一组泡利算符 $\{P_1, \ldots, P_m\}$ 构成一个环，如果存在互不相同的指标 i_1、.....、 $i_k \in [m]$，使得 $[P_{i_1} \ldots P_{i_k}] = [\mathbb{I}]$。我们将看到，存在一个无环 区域，在该区域中， H 的泡利算符以高概率不会构成任何小环；这意味着 H 的低阶矩和自由累积量与拉ademacher系数无关。举例来说，考虑展开 $\mathrm{Tr}(H^4)$:

$$\overline{\mathrm{Tr}}(H^4) = \frac{1}{m^2} \sum_{i_1,i_2,i_3,i_4=1}^{m} J_{i_1} J_{i_2} J_{i_3} J_{i_4} \overline{\mathrm{Tr}}(P_{i_1} P_{i_2} P_{i_3} P_{i_4}) \tag{39}$$

迹 $\mathrm{Tr}(P_{i_1}\overline{P_{i_2}}P_{i_3}P_{i_4})$ 非零，当且仅当泡利算符的乘积 $P_{i_1}P_{i_2}P_{i_3}P_{i_4}$ 与 $\mathbb{I}$成正比。这可能由两种概念上不同的方式实现。首先，泡利算符可能两两配对并相互抵消，例如在 $P_1P_1P_2P_2 = \mathbb{I}$中；或者，泡利算符也可能构成一个环并相互抵消，例如 $(Z \otimes \mathbb{I} \otimes \mathbb{I})(\mathbb{I} \otimes Z \otimes \mathbb{I})(\mathbb{I} \otimes \mathbb{I} \otimes Z)(Z \otimes Z \otimes Z) = \mathbb{I}$。配对项与拉ademacher系数无关，因为这些系数的平方都等于 1；例如，$\mathrm{Tr}(P_1P_1P_2P_2)$会伴随系数乘积 $J_1^2J_2^2 = 1$。另一方面，一个环会伴随 $\{J_i\}$ 中的一个单项式，其中至少有一个系数的幂为奇数，因此对这些系数取平均后，该项会消失。

这启发了如下近似：如果我们对拉ademacher系数 J_i 取平均，就会消除环的贡献，只留下配对项的贡献。形式上，我们通过以下定义来描述这一近似：

定义 B.1（无环性）。给定一列 m 泡利算符 $\mathbf{P} = (P_1, \ldots\ldots, P_m)$，如果$\mathbf{P}$满足在阶数 L以内无环，则称其为

$$[P_{i_1} P_{i_2} \cdots P_{i_k}] \neq [\mathbb{I}] \tag{40}$$

对于任意 $1 \leq k \leq L$ 以及任意一列互不相同的指标 $i_1, i_2, \ldots, i_k \in [m]$。如果泡利哈密顿量实例 H 的泡利串支撑集在阶数 L 内无环，就称其在阶数 L 内无环。

通过随机线性码研究无环性。我们采用一种基于纠错码的论证，帮助理解稀疏泡利哈密顿量中环的存在情况。每个泡利算符 P_i 都可以通过其二进制辛表示关联到一个 $2n$ 位向量 $\vec{\mathbf{x}}_i$：

$$[P_i] = [X_1^{\vec{\mathbf{x}}_i(1)} Z_1^{\vec{\mathbf{x}}_i(n+1)}] \otimes \cdots \otimes [X_n^{\vec{\mathbf{x}}_i(n)} Z_n^{\vec{\mathbf{x}}_i(2n)}] \tag{41}$$

我们将这些向量 $\{\vec{\mathbf{x}}_i\}_{i\in[m]}$ 放入一个 $2n \times m$ 矩阵中

$$\hat{P} \equiv \begin{bmatrix} \uparrow & & \uparrow \\ \vec{\mathbf{x}}_1 & \cdots & \vec{\mathbf{x}}_m \\ \downarrow & & \downarrow \end{bmatrix}. \tag{42}$$

ˆ 由于泡利算符 P_i 是随机选取的，P是一个均匀随机的 $2n \times m$ 二进制矩阵，我们可以将其视为一个码块长度为 m的随机二进制线性码的校验矩阵。一组泡利算符 $P_{i_1}, \ldots, P_{i_k}$ 构成一个环，当且仅当向量 $\vec{\mathbf{y}} \equiv \vec{\mathbf{e}}_{i_1} + \cdots + \vec{\mathbf{e}}_{i_k}$ 属于 P的核，因此 $\vec{\mathbf{y}}$ 构成一个重量为 k的码字。

我们利用这一论证，正式证明以下命题：

引理 B.2（稀疏泡利哈密顿量的无环性）。存在常数 $\gamma, \alpha > 0$，使得从稀疏泡利模型中抽取的哈密顿量 H 在 $m = \mathrm{poly}(n)$ 时，以至少 $1 - 2^{-\alpha n}$ 的概率，在 $\gamma n / \log n$ 阶内无环。

证明。证明沿用了随机二进制线性码吉尔伯特–瓦尔沙莫夫界的概率方法 [99]。由于 ˆ$P\vec{\mathbf{u}}$ 在 $\mathbb{F}_2^{2n}$ 中对非零向量 $\vec{\mathbf{u}} \in \mathbb{F}_2^m$是均匀随机的，ˆ概率 $\vec{\mathbf{u}} \in \ker P$ 为 4^{-n}。因此，该码含有权重至多为 L 的非零码字的概率是

$$\Pr\Big(\exists \vec{\mathbf{u}} \in \ker \hat{P} \setminus \{\vec{\mathbf{0}}\} : \mathrm{wt}(\vec{\mathbf{u}}) \leq L\Big) \leq 4^{-n} \sum_{j=1}^{L} \binom{m}{j} \leq 4^{-n} \cdot \Big(\frac{em}{L}\Big)^L \tag{43}$$

当 $L \leq m/$ 2. 令 $L = \gamma n / \log n$，其中常数 $\gamma > 0$ 足够小，即可证明该引理 a. □

注 B.3。引理 B.2 的证明中使用的并集界 即使在固定某些列为任意线性无关向量、再对其余列进行随机采样时，也依然成立。我们将在 第三部分中用到这一事实。

无环区域中的自由累积量表达式。 引理 B.2 表明 H 以高概率在 $\Omega(n/\log n)$ 阶以内无环；现在我们证明，这严格地说明了如下直觉：自由累积量 κ_k 在 $\mathbb{E}_{\vec{\mathbf{J}}}\kappa_k$ 阶以内可由其对拉ademacher变量的期望良好近似 L。

命题 B.4. 设 H 是一个稀疏泡利哈密顿量实例，包含 n 个量子比特、 m 个项，其自由累积量为 $(\kappa_k)_{k\in\mathbb{N}}$。若 H 在阶数 L以内无环，则

$$\kappa_k[H,\dots,H] = \kappa_k[H^{(\mathbf{P},\vec{\mathbf{J}})},\dots,H^{(\mathbf{P},\vec{\mathbf{J}})}] \tag{44}$$

对于所有 $k \le L$ 和 $\vec{\mathbf{J}} = (J_1,\dots,J_m) \in \{\pm 1\}^m$，其中 $H^{(\mathbf{P},\vec{\mathbf{J}})} \equiv m^{-1/2}\sum_{i=1}^m J_i P_i$。具体而言，$\mathbb{E}_{\vec{\mathbf{J}}}\kappa_k[H^{(\mathbf{P},\vec{\mathbf{J}})},\dots,H^{(\mathbf{P},\vec{\mathbf{J}})}] = \kappa_k[H,\dots,H]$。

证明。 回忆 $\mathbf{P} = (P_1,\dots,P_m)$ 和 $H = m^{-1/2}\sum_{i=1}^m J_i P_i$。对于每个 $k \le L$，我们有

$$\overline{\mathrm{Tr}}(H^k) = m^{-k/2}\sum_{i_1,\dots,i_k=1}^{m} J_{i_1}\cdots J_{i_k}\,\overline{\mathrm{Tr}}(P_{i_1}\cdots P_{i_k}).$$

由于泡利算符彼此对易或反对易，且平方后为恒等算符，因此每个词 $P_{i_1}\cdots P_{i_k}$都等于其中出现奇数次的泡利项之积（至多相差一个符号）。若该乘积非空，则其中至多包含 $k \le L$ 个不同的项。无环性（定义 B.1）意味着它不与恒等算符成比例，因此其迹为零。因此，只有每个泡利项都出现偶数次的泡利字才会对求和有贡献。对于每个这样的泡利字，$J_{i_1}\cdots J_{i_k} = 1$，因此 $\mathrm{Tr}(H^k)$ 与 $\vec{\mathbf{J}}$ 无关。

根据矩－累积量关系， $\kappa_k[H,\dots H]$ 由阶数至多为 k的矩决定。因此，阶数为 $k \le L$ 的自由累积量也与$\mathbf{J}$无关，从而证明了所需结果。 □

为方便起见，对于指定的哈密顿量 $H^{(\mathbf{P},\vec{\mathbf{J}})}$ ，我们通常将 $\mathbb{E}_{\vec{\mathbf{J}}}\kappa_k$ 写作 $\mathbb{E}_{\vec{\mathbf{J}}}\kappa_k[H^{(\mathbf{P},\vec{\mathbf{J}})},\dots,H^{(\mathbf{P},\vec{\mathbf{J}})}]$，例如：

$$\kappa_k[H,\dots,H] = \mathop{\mathbb{E}}_{\vec{\mathbf{J}}}\kappa_k.$$

B.2 稀疏泡利哈密顿量的对易图

我们已经证明，无环泡利哈密顿量 H 在阶数至 L 的矩仅取决于随机泡利算符$\mathbf{P}$ 的标签，而不取决于拉德马赫变量系数$\mathbf{J}$。然而，即使在这一无环区域内，这些矩仍可能以非平凡的方式发生波动。让我们回到 $\mathrm{Tr}(H^4)$的例子：

$$\begin{aligned}\mathop{\mathbb{E}}_{\vec{\mathbf{J}}}\overline{\mathrm{Tr}}(H^4) &= \frac{1}{m^2}\left(\sum_i \overline{\mathrm{Tr}}(P_iP_iP_iP_i) + \sum_{i\neq j}\left(\overline{\mathrm{Tr}}(P_iP_iP_jP_j) + \overline{\mathrm{Tr}}(P_iP_jP_iP_j) + \overline{\mathrm{Tr}}(P_iP_jP_jP_i)\right)\right)\\ &= 2 - \frac{1}{m} + \frac{1}{m^2}\sum_{i\neq j}\langle P_i, P_j\rangle\end{aligned}$$

我们可以看到，$\mathrm{Tr}(H^4)$取决于彼此反对易的泡利算符对数目 P_i， P_j 。高阶矩 $\mathrm{Tr}(H^k)$则取决于对易关系的更高阶性质

。我们可以用泡利算符的对易图来表示它们的对易关系，定义如下。

定义 B.5 （对易图）。 序列 m 泡利算符$\mathbf{P} \equiv \{P_a\}_{a\in[m]}$ 的对易图 的顶点分别对应每个泡利算符；如果两个顶点 P_a和 P_b 对应的泡利算符反对易，则在它们之间连一条边。

给定一个泡利哈密顿量实例 H，我们还将 H的对易图定义为$G^{(H)}$，即$\mathbf{P}$的对易图。

最后，我们证明，在任意较小的顶点对集合上，对易图的行为类似于边概率为 $1/2$的 Erdős–Rényi 图：任意不同对易符号的非空乘积的期望绝对值至多为 4^{-n} ，因此这些边近似无偏，并且近似满足 k-重独立。该陈述还涵盖带有固定泡利插入的对易符号，这些符号将在第一部分中使用。我们使用以下定义来表示对易符号：

定义 B.6 （对易符号矩阵）。 给定一个稀疏泡利哈密顿量 $m^{-1/2}\sum_{i=1}^{m} J_i P_i$，我们将 $W \in \{\pm 1\}^{m\times m}$ 记为泡利哈密顿量的对易符号矩阵 ，其定义为

$$W_{ij} \equiv \langle P_i, P_j\rangle, \qquad \forall i,j \in [m]$$

并将 $V \in \{\pm 1\}^{s\times m}$ 定义为固定泡利算符（Q_1， Q_2、……、 Q_s）对应的泡利哈密顿量的对易尖峰矩阵，定义如下

$$V_{ai} = \langle Q_a, P_i\rangle \qquad \forall a \in [s], i \in [m].$$

引理 B.7。 设$\mathbf{P} \equiv (P_1$、……、 $P_m)$是由 m 个独立同分布的采样 n量子比特泡利算符组成的序列。设 Q_1、……、Q_s与$\mathbf{P}$独立，并且除相位外相互独立。对于 W_{ij} 的元素中任意非空的平方自由单项式M，若满足 $i<j$ 和 V_{ia}，则有

$$|\mathop{\mathbb{E}}_{\mathbf{P}} M| \le 4^{-n}.$$

证明。 若不存在 W 因子，则按照采样泡利项 P_i对各因子进行分组。涉及 P_i 的因子合并为 $\langle Q,\ P_i\rangle$ 其中 $Q = \prod_{a\in S_i} Q_a$ 对于某个非空集合 $S_i \subseteq [s]$成立。由于生成元除相位外相互独立，因此 $[Q] \neq [\mathbb{I}]$，所以关于 P_i 的期望为零。

否则，选择一个与某个 W 因子关联的泡利项 P_i 。在给定所有其他采样泡利算符的条件下，所有涉及 P_i 的因子合并为 $\langle P_i,\ R_i\rangle$。对 P_i 取平均，得到 R_i 是模相位恒等元的指示函数。其他因子的绝对值均为一。乘积 R_i 至少包含一个独立均匀的邻接泡利算符，因此模相位后服从均匀分布。因此$|\mathbb{E}_{\mathbf{P}} M| \le \mathbf{Pr}([R_i] = [\mathbb{I}]) = 4^{-n}$。 □

C 环自由区域中的对易图统计与自由累积量

在本节中，我们的主要结果（定理 C.15）给出了稀疏泡利哈密顿量实例的自由累积量表达式 H ，该表达式由其对易图给出，适用于不超过无环阶数的情形。

对于偶数阶 k，如果泡利算符集合 $\{P_1, \dots, P_m\}$ 在阶数 k以内无环，那么除非每个不同的 P_j 都出现偶数次，否则乘积项的迹 $\mathrm{Tr}(P_{i_1} \dots P_{i_k})$ 为零。因此我们可以写成

$$\overline{\mathrm{Tr}}(H^k) = \sum_{\pi \in \mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)} \frac{1}{m^{k/2}} \sum_{\substack{j_1,\dots,j_{|\pi|} \in [m] \\ j_1,\dots,j_{|\pi|} \text{ distinct}}} \overline{\mathrm{Tr}}(P_{j_{\pi(1)}} P_{j_{\pi(2)}} \cdots P_{j_{\pi(k)}}) \tag{45}$$

其中，π 的块将泡利字中等价项所在的位置归为一组。随后，矩将完全由对易图$G^{(H)}$的某些统计量确定。每个迹乘积 $\mathrm{Tr}(P_{j_{\pi(1)}} \dots P_{j_{\pi(k)}})$ 的值要么为 $+1$，要么为 -1，具体取决于我们将 P_j 彼此对易并使其相互抵消时产生的总符号。$\mathrm{Tr}(P_{j_{\pi(1)}} \dots P_{j_{\pi(k)}})$ 的值涉及对 $G^{(H)}$ 中至多 $\binom{k/2}{2}$ 条边进行异或（模 2 加法）。

然而，如果我们直接利用矩-累积量关系计算 H 的自由累积量表达式，莫比乌斯反演会在不同划分之间产生非平凡的依赖关系。本节的主要目标是将这个矩表达式改写为一种形式，使其能够按偶划分的唯一分解进行因子分解，从而使我们能够计算 H 的自由累积量表达式，其中包含对易图中边的独特异或（类似方法已用于 [82, 93]）。

C.1 对易图统计量

我们首先介绍由偶分拆 $\pi \in \mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)$ 产生的奇交图 $g(\pi)$。

定义 C.1（奇交图）。给定一个划分 $\pi = \{V_1, V_2, \dots, V_r\} \in \mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)$，我们将其奇交图 $g(\pi)$定义为如下简单图：π 中的块与 $g(\pi)$ 的顶点相对应，并且当且仅当 $\mathrm{cr}(V_i, V_j)$ 为奇数时，两个块 V_i、V_j 之间存在一条边。

请注意，如果一个块与其他每个块的交叉次数均为偶数，则奇交图中的某些顶点可能与所有其他顶点都不连通。这促使我们给出以下定义：

定义 C.2（边诱导子图）。给定图 g，我们将 g 定义为所有至少有一条相邻边的顶点（即非孤立顶点）所诱导的子图；我们称其为边诱导子图。对于划分 $\pi \in \mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)$，令 $g(\pi)$ 表示 $g(\pi)$ 的边诱导子图。

对于图 g，令 $V(g)$ 表示其顶点集，$E(g)$ 表示其边集，并令 $|g| \equiv |V(g)|$ 表示图 g 中的顶点数。因此，$V(g)$ 是 g 中非孤立顶点的集合，而 $E(g) = E(g)$。令 $\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)$ 表示定义在 $\{1, \dots, k\}$ 上且各块均已标记的连通偶分拆集合；对于块标记分拆 $\hat{\pi} \in \mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)$，令 $g(\hat{\pi})$ 表示与 π 关联的顶点标记的奇交图，其中 $g(\hat{\pi})$ 的标记继承自 $\hat{\pi}$ 的标记。现在

$$\left|\{\hat{\pi} \in \hat{\mathcal{P}}_{\mathrm{even}}(k) : \hat{g}(\hat{\pi}) = \hat{g}\}\right| = \left|\mathrm{Aut}(g)\right| \left|\{\pi \in \tilde{\mathcal{P}}_{\mathrm{even}}(k) : g(\pi) \cong g\}\right|. \tag{46}$$

此外，如果我们只考虑具有固定数量顶点 r 的图（恰好具有

r 个块），则有

$$\sum_{|\hat{g}|=r}\left|\{\hat{\pi}\in\hat{\mathcal{P}}_{\mathrm{even}}(k):\hat{g}(\hat{\pi})=\hat{g}\}\right|^2=\sum_{|\hat{g}|=r}\left|\{\pi\in\tilde{\mathcal{P}}_{\mathrm{even}}(k):g(\pi)\cong g\}\right|^2\left|\mathrm{Aut}(g)\right|^2 \\ =r!\sum_{|g|=r}\left|\{\pi\in\tilde{\mathcal{P}}_{\mathrm{even}}(k):g(\pi)\cong g\}\right|^2\left|\mathrm{Aut}(g)\right|. \tag{47}$$

相同的全 ˜于其他在标记下不变的划分族，例如 $\mathcal{P}_2(k)$ $\mathcal{P}_2(k)$ 等。

对于划分 $\pi=\{V_1,\dots,V_r\}\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)$ 和映射 $\phi:\ \{V_1,\dots,V_r\}\to[m]$，记作

$$P_{\phi\circ\pi}\equiv P_{\phi(\pi(1))}P_{\phi(\pi(2))}\cdots P_{\phi(\pi(k))} \tag{48}$$

对承载标签 $\phi(V)$ 的泡利字，在块 V的每个位置处 $U=\{U_1<\cdots<U_{|U|}\}\subseteq[k]$的一个位置集合，记作$P_{\phi\circ\pi}[U]\equiv P_{\phi(\pi(U_1))}\cdots P_{\phi(\pi(U_{|U|}))}$在 U的位置处的子字。当 $\phi=\iota$ 为单射时，我们称其为标记，记为 π，写作 $\iota:\ \pi\hookrightarrow[m]$；其标签$j_V\equiv\iota(V)$ 是（45）的不同指标。

对于无环哈密顿量，划分对自由累积量的贡献取决于其奇交图与哈密顿量的对易图的组合。我们将这些贡献称为对易图统计量，它们由奇交图$g(\pi)$参数化。

定义 C.3（对易图统计量）。固定一个稀疏泡利哈密顿量 H，其支撑集为 $P_1,P_2,\dots,P_m$。给定一个有 $0\le r\le m$ 个顶点的简单图 g，定义

$$C[g]\equiv\frac{1}{(m)_r}\sum_{\iota:V(g)\hookrightarrow[m]}\left(\prod_{(u,v)\in E(g)}\langle P_{\iota(u)},P_{\iota(v)}\rangle\right). \tag{49}$$

注 C.4（归一化）。惯常的 $1/(m)_r$ 因子确保 $C[g]\in[-1,+1]$ 和$C[g]=C[g]$。

引理 C.5（偶数泡利字的迹）。对于每个偶数 k、每个 $\pi\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)$ 以及每个从 π 的块到 $[m]$的映射 ϕ,

$$\overline{\mathrm{Tr}}\big(P_{\phi\circ\pi}\big)=\prod_{(u,v)\in E(g(\pi))}\big\langle P_{\phi(V_u)},P_{\phi(V_v)}\big\rangle, \tag{50}$$

采用约定 $\langle P,P\rangle=1$ 表示标签重合的情形。特别地，对于不同标签 $j_1,\dots,j_r$,$\overline{\mathrm{Tr}}(P_{j_{\pi(1)}}\cdots P_{j_{\pi(k)}})=\prod_{(u,v)\in E(g(\pi))}\langle P_{j_u},P_{j_v}\rangle$。此外，对于大小为偶数的有限集 $A,B\subset\mathbb{N}$，

$$\mathrm{inv}(A,B)\equiv\mathrm{cr}(A,B)\pmod 2. \tag{51}$$

证明。通过相邻换位对词进行排序，使 π 中相同的位置相邻，例如按 V_1、V_2、.....、V_r 的顺序排列。两个标签为 $j\neq j'$ 的字母换位会产生符号$\langle P_j$、$P_{j'}\rangle$，而两个相同字母换位则不会产生任何影响；V_u 中的一个字母与 V_v 中一个满足 $u<v$ 的字母之间的换位次数为 inv(V_u、V_v)。排序后，每个块贡献 $P^{|V|}=\mathbb{I}$，因为 $|V|$ 是偶数。因此

$$\overline{\mathrm{Tr}}\big(P_{\phi\circ\pi}\big)=\prod_{u<v}\big\langle P_{\phi(V_u)},P_{\phi(V_v)}\big\rangle^{\mathrm{inv}(V_u,V_v)}, \tag{52}$$

并且由于 $\langle P、\ P'\rangle^2 = 1$，只需证明 (51)，这正是使指数成为 $g(\pi)$的一条边的指示函数的原因。

对于 $a < a'$ 中 A，令 $n(< a)$、$n(a, a')$ 和 $n(> a')$ 分别表示 B 中小于 a、严格介于 a 与 a'之间，以及大于 a'的元素个数。两个 A元素为a、a'的交替四元组，其数量由 $n(a, a')\, n(> a') + n(< a)\, n(a, a')$ 计数。由于 $|B|$ 为偶数，$n(> a') \equiv n(< a) + n(a, a')$（模 2），因此该数量同余于 $n(a, a')^2 + 2n(< a)n(a, a') \equiv n(a, a') = n(< a') - n(< a)$。对所有配对 $a < a'$求和，并将 $\rho(a)$记为 A中 a 的秩，

$$\begin{aligned}\mathrm{cr}(A, B) &\equiv \sum_{a\in A} n(< a)\big[(\rho(a) - 1) - (|A| - \rho(a))\big] = \sum_{a\in A} n(< a)\,(2\rho(a) - 1 - |A|)\\ &\equiv \sum_{a\in A} n(< a) = \mathrm{inv}(A, B) \pmod 2,\end{aligned} \tag{53}$$

在最后一步用到了 $|A|$ 为偶数这一点。 □

注意，在（45）中，每一项都是对易图中一组边的对易符号之积，因此矩 $\mathrm{Tr}(H^k)$ 的值完全由以下各图对应的 $C[g]$ 值决定：图 g 的顶点数至多为 $k/2$。因此，对于所有偶数 $k \le 2m$，

$$\overline{\mathrm{Tr}}(H^k) = \frac{1}{m^{k/2}} \sum_{\pi\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)} (m)_{|\pi|}\, C[g(\pi)] \qquad \text{if } H \text{ loop-free through order } k. \tag{54}$$

为了在D 节中界定自由累积量的集中性，我们先利用 $C[g]$ 关于对易图统计量的随机性，推导其混合二阶矩的上界，方法是使用引理 B.7。

引理 C.6 (对易图统计量的混合二阶矩)。 考虑任意一对顶点数至多为 m 的图g 和 g'。对易图统计量满足以下关系：

$$\mathbb{E}\left[C[g]\, C[g']\right] = \begin{cases} \frac{|\mathrm{Aut}(\overline{g})|}{(m)_{|\overline{g}|}} \pm \mathcal{O}(4^{-n}) & \text{if } \overline{g} \cong \overline{g}', \\ \pm\mathcal{O}(4^{-n}) & \text{if } \overline{g} \ncong \overline{g}'. \end{cases} \tag{55}$$

证明。 给定一个单射 $\iota : V(g) \hookrightarrow [m]$，定义

$$X_{g,\iota} \equiv \prod_{\{u,v\}\in E(g)} \langle P_{\iota(u)}, P_{\iota(v)}\rangle. \tag{56}$$

对于两个单射 $\iota : V(g) \hookrightarrow [m]$ 和 $\iota' : V(g') \hookrightarrow [m]$，将它们的带标记边集的对称差记为

$$S_{\iota,\iota'} \equiv \iota(E(g)) \triangle \iota'(E(g')). \tag{57}$$

由于每个重复出现的对易符号平方后都等于一，引理 B.7给出

$$\left|\mathbb{E}\left[X_{g,\iota}\, X_{g',\iota'}\right]\right| \le 4^{-n}, \quad \text{if } S_{\iota,\iota'} \neq \varnothing. \tag{58}$$

当 $g \ncong g'$, $S_{\iota,\iota'}$ 对每一对单射都非空时。因此，由期望的线性性和三角不等式可得

$$\left|\mathbb{E}\left[C[g]\, C[g']\right]\right| \le \frac{1}{(m)_{|g|}(m)_{|g'|}} \sum_{\iota,\iota'} \left|\mathbb{E}\left[X_{g,\iota}\, X_{g',\iota'}\right]\right| \le \mathcal{O}(4^{-n}), \tag{59}$$

因为唯一注入 ι 的总数为 $(m)_{|g|}$： $V(g) \hookrightarrow [m]$。情形 2 到此完成。

对于情形 1，我们取 $g \cong g'$，因此，由于对易图统计量与其边诱导子图等价，我们只需考虑 $\mathbb{E}\,[C[g]\,C[g]]$。当且仅当两个单射在自同构意义下等价时，对称差 $S_{\iota,\ \iota'}$ 才为空。这样的有序对共有 $(m)_{|g|}|\mathrm{Aut}(g)|$ 个。对于其中每一对， $\mathbb{E}\left[X_{g,\iota}\,X_{g,\iota'}\right] = 1$。如前所示，其他所有对只要 $S_{\iota,\ \iota'}$ 非空，便会贡献 $\mathbb{E}\left[X_{g,\iota}\,X_{g,\iota'}\right] = \mathcal{O}(4^{-n})$。将这两项贡献相加，得到

$$\mathbb{E}\left[C[g]\,C[g']\right] = \frac{1}{(m)_{|\overline{g}|}^{2}} \sum_{\iota,\iota'} \mathbb{E}\left[X_{\overline{g},\iota}\,X_{\overline{g},\iota'}\right] = \frac{1}{(m)_{|\overline{g}|}} |\mathrm{Aut}(\overline{g})| \pm \mathcal{O}(4^{-n}), \tag{60}$$

如所述。 □

C.2 χ 函数

我们定义以下系数，它源自自由累积量展开中的莫比乌斯变换。回顾一下， $\tau \equiv \mathrm{cl}_{NC}(\tau)$ 表示比 τ 更粗的最小非交叉划分。

定义 C.7. 对于 $\tau \in \mathcal{P}(k)$，定义

$$\chi(\tau) \equiv \sum_{\substack{\rho \in NC(k) \\ \rho \le \overline{\tau}}} \mathbf{1}_{\mathcal{P}_{\mathrm{even}}}(\tau \wedge \rho) \cdot \mu_{NC}(\rho, \overline{\tau}), \tag{61}$$

wh其中 $\mathbf{1}_{\mathcal{P}_{\mathrm{even}}} : \mathcal{P}(k) \to \mathbb{Z}$ 是用于判断该划分是否为偶分拆的指示函数 .

注 C.8. 对于 连通偶分拆 $\tau \in \mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)$，系数可简化为

$$\chi(\tau) = \sum_{\substack{\rho \in NC(k) \\ \tau \wedge \rho \text{ even}}} \mu_{NC}(\rho, 1_k). \tag{62}$$

注 C.9. 设 ϵ_1， ϵ_2，……， ϵ_k 为独立可交换均匀符号。对于划分 τ和$\rho \in NC(k)$,

$$\mathop{\mathbb{E}}_{\rho}[\epsilon_{\tau(1)}, \ldots, \epsilon_{\tau(k)}] = \mathbf{1}_{\mathcal{P}_{\mathrm{even}}}(\tau \wedge \rho).$$

莫比乌斯反演给出

$$\chi(\tau) = \kappa_{\overline{\tau}}[\epsilon_{\tau(1)}, \ldots, \epsilon_{\tau(k)}].$$

当 τ 连通时，这会化简为单个自由累积量 $\kappa_k[\epsilon_{\tau(1)}, \ldots, \epsilon_{\tau(k}$ $)]$.

为了给出两种等价的组合描述，令 $\mathrm{icr}_{\pi}(D)$ 表示 D 中包含在 π 同一块中的两条弦之间的交叉数。另外，对于偶分拆 τ 和 π，当 $\tau \le \pi$ 且 π 的任何块都不包含属于 τ 同一连通分量的两个不同块时，记作 $\tau \preceq \pi$；若还满足 $\tau \neq \pi$，则记作 $\tau \prec \pi$。

命题 C.10 （ χ 的等价刻画）。 令 $\pi \in \mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)$。

1. (a) 如果 π_1、……、 π_s 是 π 的连通分量，那么

$$\chi(\pi) = \prod_{i=1}^{s} \chi(\pi_i). \tag{63}$$

(b) 如果 π 是连通的，那么

$$\chi(\pi) = \sum_{\substack{D\in\mathcal{P}_2(k)\\ D\le\pi,\ D\ \text{connected}}} (-1)^{\mathrm{icr}_\pi(D)}. \tag{64}$$

2. 系数 χ 满足递归恒等式

$$\sum_{\substack{\tau\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)\\ \tau\preceq\pi}} \chi(\tau) = 1. \tag{65}$$

证明。小于 π 的非交叉划分区间可按 π的块分解，而这些块正是 π的连通分量。指示函数 $\mathbf{1}_{\mathcal{P}_{\mathrm{even}}}$ 和莫比乌斯函数 μ_{NC} 在（61）中也按 π的连通分量分解，从而证明了第 (1a) 部分。

对于任意偶数基数的有限有序集 A，有如下带符号的弦图恒等式

$$\sum_{D\in\mathcal{P}_2(A)} (-1)^{\mathrm{cr}(D)} = 1, \tag{66}$$

其中，cr(D) 是 D中的交叉数。例如，可以通过展开斜对称矩阵的帕菲安来证明该式，其中矩阵主对角线上方的元素全为 1，下方的元素全为 -1。然后，我们可以在 $\pi\wedge\rho$的每个块中应用（66）；非交叉划分 ρ 的不同块内的弦不会交叉，因此所有符号的乘积为 $(-1)^{\mathrm{icr}_\pi(D)}$。因此，对于每个 $\rho\in NC(k)$,

$$\mathbf{1}_{\mathcal{P}_{\mathrm{even}}}(\pi\wedge\rho) = \sum_{\substack{D\in\mathcal{P}_2(k)\\ D\le\pi\wedge\rho}} (-1)^{\mathrm{icr}_\pi(D)}. \tag{67}$$

若 π 是 c 连通，将此恒等式代入（61）并交换求和次序，可得

$$\chi(\pi) = \sum_{\substack{D\in\mathcal{P}_2(k)\\ D\le\pi}} (-1)^{\mathrm{icr}_\pi(D)} \sum_{\substack{\rho\in NC(k)\\ D\le\rho}} \mu_{NC}(\rho, 1_k) = \sum_{\substack{D\in\mathcal{P}_2(k)\\ D\le\pi}} (-1)^{\mathrm{icr}_\pi(D)} \mathbf{1}\{\overline{D} = 1_k\}, \tag{68}$$

其中 t 最后一个等式是在区间 $[D, 1_k]$ 上进行莫比乌斯反演。这证明了（1b）).

最后，在66）中每个块内分别应用（ π ，得到

$$1 = \sum_{\substack{D\in\mathcal{P}_2(k)\\ D\le\pi}} (-1)^{\mathrm{icr}_\pi(D)}. \tag{69}$$

将每个 D 分解为其连通分量，并根据这些连通分量拆分 π 的每个块。所得偶分拆是唯一的 $\tau\preceq\pi$。反过来，选取这样的 τ，并在 τ 的每个连通分量下方选取一个连通弦图，即可重构 D。符号按连通分量分解，因此（1a）和（1b）确定了每个 τ 对 $\chi(\tau)$ 的贡献。这证明了（2）。

□

在本小节的剩余部分中，我们推导 χ-函数的一些性质，这些性质将有助于自由累积量推导。我们首先证明 χ 绝对值的一个一致上界：

引理 C.11（χ-函数的一致上界）。 $|\chi(\sigma)| \le 6^k$ 对所有偶数 k 和 $\sigma \in \mathcal{P}(k)$。

证明。令 $NC_{\text{even}}(k)$ 表示 $[k]$ 上所有非交叉偶分拆的集合。每当 $\sigma \wedge \rho$ 为偶数时，ρ 本身也是偶数，因此 $|\rho| \le k/2$。若没有偶数 ρ 位于 σ 之下，则 $\chi(\sigma) = 0$；否则，根据三角不等式，这个和至多有 $|NC_{\text{even}}(k)|$ 个非零项。非交叉偶分拆的数量为福斯–卡塔兰数 [100]

$$|NC_{\text{even}}(k)| = \frac{1}{k+1}\binom{3k/2}{k/2} \le 8^{k/2}. \tag{70}$$

非交叉分拆格中区间的标准分解给出 s

$$|\mu_{NC}(\rho, \overline{\sigma})| \le 4^{|\rho|-|\overline{\sigma}|} \le 4^{|\rho|} \le 4^{k/2}.$$

结合这两个界，

$$|\chi(\sigma)| \le 32^{k/2} \le 6^k,$$

如所声称。 □

命题 C.12. 对于任意固定的 $\pi \in \mathcal{P}_{\text{even}}(k)$ $\sigma \in NC(k)$，

$$\sum_{\substack{\rho \in NC(k) \\ \rho \le \sigma \\ \pi \wedge \rho \in \mathcal{P}_{\text{even}}(k)}} \mu_{NC}(\rho, \sigma) = \begin{cases} \chi(\pi \wedge \sigma) & \text{if } \overline{\pi \wedge \sigma} = \sigma, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{71}$$

证明。令 $\tau \equiv \pi \wedge \sigma$。对于每个 $\rho \le \sigma$，有 $\pi \wedge \rho = \tau \wedge \rho$。由于 $\tau \le \sigma$ 且 σ 是不交叉的，$\tau \le \sigma$。情形 $\underline{\tau} = \sigma$ 可直接由（61）得出。接下来只需证明当 $\tau < \sigma$ 时，该表达式为零。

^令 $\mathbf{1}_{\mathcal{P}_{\text{even}}} : \mathcal{P}(k) \to \mathbb{Z}$ 为 $\mathbf{1}_{\mathcal{P}_{\text{even}}}$ 在 $\mathcal{P}(k)$上的莫比乌斯变换，使得

$$\mathbf{1}_{\mathcal{P}_{\text{even}}}(\tau \wedge \rho) = \sum_{\substack{\eta \in \mathcal{P}(k) \\ \eta \le \tau \wedge \rho}} \widehat{\mathbf{1}}_{\mathcal{P}_{\text{even}}}(\eta). \tag{72}$$

因为 $\eta \le \rho$ 等价于不交叉 $\eta \le \rho$ 的 ρ，交换求和次序可得

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{\rho \in NC(k) \\ \rho \le \sigma}} \mathbf{1}_{\mathcal{P}_{\text{even}}}(\tau \wedge \rho)\mu_{NC}(\rho, \sigma) &= \sum_{\substack{\eta \in \mathcal{P}(k) \\ \eta \le \tau}} \widehat{\mathbf{1}}_{\mathcal{P}_{\text{even}}}(\eta) \sum_{\substack{\rho \in NC(k) \\ \overline{\eta} \le \rho \le \sigma}} \mu_{NC}(\rho, \sigma) \\ &= \sum_{\substack{\eta \in \mathcal{P}(k) \\ \eta \le \tau}} \widehat{\mathbf{1}}_{\mathcal{P}_{\text{even}}}(\eta)\delta(\overline{\eta}, \sigma) = 0. \end{aligned}$$

最后一个等式成立是因为 $\eta \le \tau$ 蕴含 $\eta \le \tau < \sigma$。 − □

最后，我们证明具有一个与其他每个块均发生交叉且奇偶性为偶的弦块的连通划分 $\pi \in \mathcal{P}_{\text{even}}(k)$、$k \ge 4$满足 $\chi(\pi) = 0$。

引理 C.13（χ的消失条件）。设 $\pi \in \mathcal{P}_{\text{even}}$（$k$） 是 $[k]$ 的连通偶分拆，其中 $k \ge 4$。如果 g（π） 包含一个对应于弦块 $V_j \in \pi$ 的孤立顶点，则χ（π） $= 0$。

证明。 将 $V_j = \{a, b\}$ 写作 $a < b$，并令 $I = \{a+1, \ldots, b-1\}$。对于每个块 $V_i \neq V_j$，

$$\mathrm{cr}(V_j, V_i) = |V_i \cap I| \big(|V_i| - |V_i \cap I|\big) \equiv |V_i \cap I| \pmod 2, \tag{73}$$

因为 $|V_i|$ 是偶数。由于 V_j 是 $g(\pi)$的一个孤立顶点，因此每个 $|V_i \cap I|$ 也都必须是偶数 .

由于 π 是连通的，(64) 将 $\chi(\pi)$ 表示为连通弦图$D \le \pi$的带符号和。我们利用一个对合 $D \mapsto D'$ 证明其各项两两抵消；该对合没有不动点，并且反转符号 $(-1)^{\mathrm{icr}_\pi(D)}$。

每个 $D \le \pi$ 都包含弦 V_j，而 D 的一条弦与 V_j 交叉，当且仅当它恰有一个端点位于 I中。其他每条弦在 I中都有零个或两个端点，因此，块 V_i 中与 V_j 交叉的弦数与 $|V_i \cap I|$具有相同的奇偶性，而该奇偶性为偶数。若 D 是连通的，那么必有一条弦与 V_j交叉，因为 D 有 $k/2 \ge 2$ 条弦。令 x_1 为 I 中位于与V_j交叉的弦上的最小位点，令 V_i 为其所在的块；再令 x_2 为 $V_i \cap I$ 中除 x_1 之外、位于与 V_j 交叉的弦上的最小位点，根据奇偶计数，该位点必定存在。将这两条弦分别记为 $\{x_1, y_1\}$ 和 $\{x_2, y_2\}$，于是 $y_1, y_2 \notin I$，令 D'由 D替换这两条弦为 $\{x_1, y_2\}$和 $\{x_2, y_1\}$得到。

新的弦位于 V_i 中，仍与 V_j 交叉，其他弦均保持不变。因此 $D' \le \pi$，将该构造应用于 D' 时，会选取相同的位点 x_1、x_2，并返回 D；又因为 $y_1 \neq y_2$，所以 $D' \neq D$。要看出符号发生了反转，请回想，只有同一块中弦之间的交叉才计入 icr_π。由于 I 是一个区间，按照位点 x_1、x_2、y_1、y_2 的顺序，x_1 和 x_2 相邻，因此在这些位点上将 x_1 与 x_2 配对的弦图是不交叉的，而另外两种配对中恰有一种会交叉。此外，弦 $\{u, v\}$（其 $u < v$）与弦 $\{x, y\}$ 交叉，当且仅当 x、y 中恰有一个严格位于 u 和 v 之间。因此，对于任意其他弦 $\{u, v\}$，它与交换后的两条弦的交叉数的奇偶性，等于交换前后分别严格位于 u 和 v之间的位点 x_1、x_2、y_1、y_2 的数量的奇偶性。因此 $\mathrm{icr}_\pi(D')$ –$\mathrm{icr}_\pi(D)$ 为奇数。

接下来仍需证明 D' 是连通的。在 D 和 D'中，与 V_j 交叉的弦都与 V_j相邻，而其他弦及其之间的交叉关系均保持不变。由于 D 是连通的，其他弦的每个连通分量都与一条和 V_j交叉的弦相连，因此只需证明它们中的每条弦与新弦交叉的数量，等于其与被交换弦交叉的数量。若某条弦$\{u, v\}$ 位于 I 内部，则 I 外部没有任何位点严格位于 u 和 v之间；若它位于 I外部，则 I 要么全部位于其中，要么完全不位于其中。因此，在第一种情况下，$\{u, v\}$ 是否与一条端点分别位于 $x \in I$ 和 $y \notin I$ 的弦交叉，仅取决于 x；在第二种情况下，则仅取决于 y，所以这种交换保持了交叉数量不变。

□

C.3 推导无环情形下的自由累积量表达式 e

现在我们介绍本节的主定理，它给出了哈密顿量实例 H 的符号平均自由累积量 $\mathbb{E}_{\vec{\mathbf{J}}}\kappa_k$ 的表达式，并将其明确表示为其对易图 $G^{(H)}$的边：

定义 C.14（自由累积量的无环表达式）。 对于任意（不一定无环的）稀疏泡利哈密顿量实例 H 和偶整数 $2 \le k \le 2m$，我们将其 k 阶自由累积量的无环表达式 $\tilde{\kappa}_k$定义为

$$\tilde{\kappa}_k(\mathbf{P}) \equiv \frac{1}{m^{k/2}} \sum_{\pi \in \tilde{\mathcal{P}}_{\mathrm{even}}(k)} (m)_{|\pi|} \chi(\pi)\, C[g(\pi)]. \tag{74}$$

定理 C.15（来自对易图统计的自由累积量）。 设 H 是一个稀疏泡利哈密顿量实例，含有 n 个量子比特、 m 项，其自由累积量为（κ_k）$_{k\in\mathbb{N}}$，且截至 $k \le 2m$ 阶均无环。当 k 为奇数时，符号平均自由累积量满足 $\mathbb{E}_{\vec{\mathbf{J}}}\kappa_k = 0$；当 k 为偶数时，它等于其无环表达式 $\mathbb{E}_{\vec{\mathbf{J}}}\kappa_k = \tilde{\kappa}_k$（$\mathbf{P}$）。

定理 C.15 的证明定理 C.15依赖于我们的主引理（及其直接推论），该引理给出了符号平均自由累积量（及其乘法扩张）的精确表达式，将其写成泡利单项式的迹之和：

引理 C.16。 设 H 是一个具有 n 个量子比特、 m 个项和自由累积量 $(\kappa_k)_{k\in\mathbb{N}}$的稀疏泡利哈密顿量实例。对于每个偶整数 $k \le 2m$，若 H 在阶数 k 以内无环，且对于每个 $\sigma \in NC(k)$，符号平均自由累积量 $\mathbb{E}_{\vec{\mathbf{J}}}\kappa_\sigma$ 由下式给出

$$\sum_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)\\ \pi\wedge\sigma=\sigma}} \frac{\chi(\pi\wedge\sigma)}{m^{k/2}} \sum_{\iota:\pi\hookrightarrow[m]} \prod_{V\in\sigma} \overline{\mathrm{Tr}}\big(P_{\iota\circ\pi}[V]\big). \tag{75}$$

直接令 $\sigma = 1_k$，即可得到：

推论 C.17（无环情形下来自对易图的自由累积量）。 设 H 是一个具有 n 个量子比特、 m 个项和自由累积量 $(\kappa_k)_{k\in\mathbb{N}}$的稀疏泡利哈密顿量实例。对于每个偶整数 $2 \le k \le 2m$，若 H 在阶数 k 以内无环，则符号平均自由累积量 $\mathbb{E}_{\vec{\mathbf{J}}}\kappa_k$ 由下式给出

$$\sum_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)\\ \pi\ \textit{connected}}} \frac{\chi(\pi)}{m^{k/2}} \sum_{\iota:\pi\hookrightarrow[m]} \overline{\mathrm{Tr}}\big(P_{\iota\circ\pi}\big). \tag{76}$$

引理 *C.16* 的证明。 根据定义，对于所有 $\sigma \in NC(k)$，

$$\tau_\sigma[H,H,\dots,H] \equiv \prod_{V\in\sigma} \tau_{|V|}(H,\dots,H) = \frac{1}{m^{k/2}} \sum_{i_1,\dots,i_k\in[m]} J_{i_1}\cdots J_{i_k} \prod_{V\in\sigma} \overline{\mathrm{Tr}}(P_{i_{V_1}}P_{i_{V_2}}\cdots P_{i_{V_{|V|}}}), \tag{77}$$

其中 $V_1 < \cdots < V_{|V|}$ 是 V 的元素。对符号取平均后，只保留每个指标出现偶数次的指标元组。每个这样的元组都唯一地表示为 $i_t = \iota(\pi(t))$，对应一个唯一的偶分拆 $\pi \in \mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)$（即相同指标位置的分划），以及其块的一个唯一标记 $\iota:\ \pi \hookrightarrow [m]$。因此

$$\mathop{\mathbb{E}}_{\vec{\mathbf{J}}} \tau_\sigma[H,H,\dots,H] = \frac{1}{m^{k/2}} \sum_{\pi\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)} \sum_{\iota:\pi\hookrightarrow[m]} \prod_{V\in\sigma} \overline{\mathrm{Tr}}\big(P_{\iota\circ\pi}[V]\big). \tag{78}$$

对于块 $V \in \sigma$，子字 $P_{\iota\circ\pi}[V]$ 中出现的标签，就是与 V相交的各个块 $W \in \pi$的标签，每个标签的重数为 $|V \cap W|$。根据无环假设，除非这些重数全为偶数，否则子字的迹为零，因此只有满足 $\pi \wedge \sigma$ 为偶数的划分才有贡献：

$$\mathop{\mathbb{E}}_{\vec{\mathbf{J}}} \tau_\sigma[H,H,\dots,H] = \frac{1}{m^{k/2}} \sum_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)\\ \pi\wedge\sigma\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)}} \sum_{\iota:\pi\hookrightarrow[m]} \prod_{V\in\sigma} \overline{\mathrm{Tr}}\big(P_{\iota\circ\pi}[V]\big). \tag{79}$$

如果 $\rho \le \sigma$ 和 $\pi \wedge \rho$ 为偶数，那么每个标签在每个子字 $P_{\iota\circ\pi}[U]$、$U \in \rho$中出现的次数都是偶数，因此每个这样的子字都是恒等算符的标量倍。由于 ρ在 σ 的每个块上的限制都是不交叉的，递归地移除其区间块可得

$$\prod_{U\in\rho} \overline{\mathrm{Tr}}\big(P_{\iota\circ\pi}[U]\big) = \prod_{V\in\sigma} \overline{\mathrm{Tr}}\big(P_{\iota\circ\pi}[V]\big). \tag{80}$$

现在应用标准的矩-累积量公式

$$\mathop{\mathbb{E}}_{\vec{\mathbf{J}}} \kappa_\sigma[H,\dots,H] = \sum_{\substack{\rho\in NC(k)\\ \rho\le\sigma}} \mu_{NC}(\rho,\sigma)\cdot \mathop{\mathbb{E}}_{\vec{\mathbf{J}}} \tau_\rho[H,\dots,H] \tag{81}$$

$$= \frac{1}{m^{k/2}} \sum_{\substack{\rho\in NC(k)\\ \rho\le\sigma}} \mu_{NC}(\rho,\sigma) \sum_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)\\ \pi\wedge\rho\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)}} \sum_{\iota:\pi\hookrightarrow[m]} \prod_{U\in\rho} \overline{\mathrm{Tr}}\big(P_{\iota\circ\pi}[U]\big) \tag{82}$$

$$= \frac{1}{m^{k/2}} \sum_{\pi\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)} \sum_{\iota:\pi\hookrightarrow[m]} \prod_{V\in\sigma} \overline{\mathrm{Tr}}\big(P_{\iota\circ\pi}[V]\big) \sum_{\substack{\rho\in NC(k)\\ \rho\le\sigma\\ \pi\wedge\rho\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)}} \mu_{NC}(\rho,\sigma), \tag{83}$$

其中最后一行使用了（80）。为完成证明，我们使用命题 C.12中的表达式，代入后得到

$$\mathop{\mathbb{E}}_{\vec{\mathbf{J}}} \kappa_\sigma[H,\dots,H] = \sum_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)\\ \overline{\pi\wedge\sigma}=\sigma}} \frac{\chi(\pi\wedge\sigma)}{m^{k/2}} \sum_{\iota:\pi\hookrightarrow[m]} \prod_{V\in\sigma} \overline{\mathrm{Tr}}\big(P_{\iota\circ\pi}[V]\big), \tag{84}$$

正如所需。 □

现在我们完成定理 C.15的最终证明：

定理 *C.15*的证明。 根据对称性，符号平均使所有奇数阶矩和所有奇数阶自由累积量均消失。对于偶数 k，每个保留下来的泡利指标都以偶数重数出现。根据引理 C.5，

$$\overline{\mathrm{Tr}}(P_{j_{\pi(1)}}\dots P_{j_{\pi(k)}}) = \prod_{(u,v)\in E(g(\pi))} \langle P_{j_u}, P_{j_v}\rangle. \tag{85}$$

推论 C.17 和定义 C.3完成了证明。 □

D 稀疏泡利模型自由累积量的集中性

本节中，我们证明偶数阶自由累积量 $\tilde{\kappa}_k$的无环区域表达式的二阶矩上界，相关定义见C 节。这将基于两个主要前提：(a) 定义 C.14的无环表达式可表示为H的对易图统计量，且 (b) 引理 B.7表明，对易图 $G^{(H)}$ 的边几乎是 k阶独立的。

我们的主要结果证明了稀疏泡利模型中自由累积量的无环表达式的二阶矩具有紧的渐近标度界，直至阶数 $\sim\min\{m^{1/3}, n/\log n\}$。作为

推论，我们证明了 κ_k中定理 D.9所述真实自由累积量绝对级数的一个高概率界。这将是我们分析经典算法时所用的主要结果。此外，我们还认为，阶数条件可以提高至 m ，而非 $m^{1/3}$；我们还提出了一个纯组合数学猜想（猜想 D.7），它足以证明这一结论。

定理 D.1（自由累积量的无环表达式的二阶矩标度）。设 H 是一个具有 n 个量子比特、 m 个项以及自由累积量 $(\kappa_k)_{k\in\mathbb{N}}$ 的稀疏泡利哈密顿量实例。存在常数 $\gamma>0$ ，使得对于满足以下条件的所有偶整数 k 和整数 m

$$4 \le k \le 2\gamma n/\log n, \quad (k/2)^3 \le m \le \mathrm{poly}(n), \tag{86}$$

自由累积量的无环表达式 $\tilde{\kappa}_k$ 满足

$$\mathop{\mathbb{E}}_{\mathbf{P}}\left[(\tilde{\kappa}_k)^2\right] = \left(\frac{\Theta(k/2)}{m}\right)^{k/2}. \tag{87}$$

D.1 界定占主导地位的二阶矩贡献

影响 $\tilde{\kappa}_k$ 的唯一剩余随机性是对易图 $G^{(H)}$ 的分布，而该分布本身仅取决于随机泡利算符 $\mathbf{P}$。我们证明，二阶矩的主要贡献由具有同构的边诱导子图的图对所决定。

命题 D.2（占主导地位的二阶矩贡献）。设 H 是一个具有 n 个量子比特、 m 个项以及自由累积量 $(\kappa_k)_{k\in\mathbb{N}}$ 的稀疏泡利哈密顿量实例。存在常数 $\gamma>0$ ，使得对于满足 $k \le 2\gamma n/\log n$ 的所有偶整数 $4 \le k \le 2m$，无环表达式 $\tilde{\kappa}_k(\mathbf{P})$ 满足

$$\left|\mu_2^*(k) - \mathop{\mathbb{E}}_{\mathbf{P}}\left[\tilde{\kappa}_k^2\right]\right| \le e^{-\Omega(n)}, \tag{88}$$

其中我们定义

$$\mu_2^*(k) \equiv \frac{1}{m^k} \sum_{\substack{\pi,\sigma\in\tilde{\mathcal{P}}_{\mathrm{even}}(k)\\ \bar{g}(\pi)\cong\bar{g}(\sigma)}} (m)_{|\pi|}(m)_{|\sigma|}\chi(\pi)\chi(\sigma)\cdot\frac{|\mathrm{Aut}(\bar{g})|}{(m)_{|\bar{g}|}}. \tag{89}$$

注意，我们用 $\bar{g}$ 表示图 $\bar{g}(\pi)$ 以及 $\bar{g}(\sigma)$，当 $\bar{g}(\pi)\cong\bar{g}(\sigma)$时。

证明。展开 定义 C.14 中的二阶矩表达式可得

$$\mathop{\mathbb{E}}_{\mathbf{P}}[\tilde{\kappa}_k^2] = \frac{1}{m^k} \sum_{\pi,\sigma\in\tilde{\mathcal{P}}_{\mathrm{even}}(k)} (m)_{|\pi|}(m)_{|\sigma|}\chi(\pi)\chi(\sigma)\mathop{\mathbb{E}}_{\mathbf{P}}[C[g(\pi)]C[g(\sigma)]]. \tag{90}$$

将引理 C.6 应用于每一对 $(\pi、\ \sigma)$。减去 μ_2^* 后，对于 $g(\pi)$ 和$g(\sigma)$中的同构和非同构边诱导子图，均可得到由某个常数 $C>0$控制的一致误差 $C4^{-n}$ 。因此，

$$\left|\mathop{\mathbb{E}}_{\mathbf{P}}[\tilde{\kappa}_k^2] - \mu_2^*(k)\right| \le \frac{C}{4^n}\left(\frac{1}{m^{k/2}}\sum_{\pi\in\tilde{\mathcal{P}}_{\mathrm{even}}(k)}(m)_{|\pi|}|\chi(\pi)|\right)^2. \tag{91}$$

应用 χ 引理 C.11 给出的上界，并利用 $|\tilde{\mathcal{P}}_{\text{even}}(k)| \le (k/2)^k$，可得

$$\left|\mathop{\mathbb{E}}_{\mathbf{P}}[\tilde{\kappa}_k^2] - \mu_2^*(k)\right| \le \frac{C}{4^n}\left(6^k|\tilde{\mathcal{P}}_{\text{even}}(k)|\right)^2 \le \frac{C(3k)^{2k}}{4^n}. \tag{92}$$

当 $\gamma > 0$ 和 $k \le 2\gamma n/\log n$ 足够小时，这个最终表达式的上界为 $e^{-\Omega(n)}$。 □

由此，我们还证明了 $\mu_2^*(k)$ 的一个下界，这也将直接给出 $\mathbb{E}_{\mathbf{P}}[\tilde{\kappa}_k^2]$ 的一个下界。我们利用连通弦图总数的渐近表达式：

命题 D.3 ([101,定理 4。6])。 对于偶数 k,

$$\left|\tilde{\mathcal{P}}_2(k)\right| = (k-1)!!(e^{-1} - o(1)). \tag{93}$$

引理 D.4 (主导贡献下界)。 设 H 是一个在 n 个量子比特上、从稀疏泡利模型中抽取的实例，包含 m 个项，且自由累积量为 $(\kappa_k)_{k\in\mathbb{N}}$。存在一个常数 $\gamma > 0$，使得对于所有满足 $4 \le k \le 2\gamma n/\log n$ 的偶整数,

$$\mu_2^*(k) \ge \Omega\left(\left(\frac{e^{-2}k}{m}\right)^{k/2}\right). \tag{94}$$

证明。 按同构类对 (89) 进行分组 $\bar{g}$，其中同构类对应于边诱导子图,

$$\mu_2^*(k) = \frac{1}{m^k}\sum_{\bar{g}} \frac{|\mathrm{Aut}(\bar{g})|}{(m)_{|\bar{g}|}} \left(\sum_{\substack{\pi\in\tilde{\mathcal{P}}_{\text{even}}(k)\\ \bar{g}(\pi)\cong\bar{g}}} (m)_{|\pi|}\chi(\pi)\right)^2. \tag{95}$$

我们对偶数连通划分中属于连通弦图（$|\bar{g}| = k/2$）的子集所作的贡献给出一个下界。由于此求和中的每一项均非负，这也构成了整个和的一个下界。

˜对于任意连通弦图 $\pi \in \mathcal{P}_2$, $\chi(\pi) = 1$。我们得到

$$\mu_2^* \ge \frac{1}{m^k}\sum_{\substack{\pi,\sigma\in\tilde{\mathcal{P}}_2(k)\\ \bar{g}(\pi)\cong\bar{g}(\sigma)}} (m)_{k/2}^2 \frac{|\mathrm{Aut}(\bar{g})|}{(m)_{k/2}} \ge \frac{(m)_{k/2}}{m^k}\left|\tilde{\mathcal{P}}_2(k)\right| \ge \frac{(m)_{k/2}(k-1)!!}{m^k}\left(e^{-1} - o(1)\right) \tag{96}$$

其中最后一个不等式用到了命题 D.3。应用界$(m)_{k/2} \ge (m/e)^{k/2}$ 和$(k-1)!! \ge (k/e)^{k/2}$得到最终的下界 $\Omega\left(\left(\frac{e^{-2}k}{m}\right)^{k/2}\right)$。 —— □

现在我们完成上界的证明。证明的核心是对以下组合集合的大小进行上界估计：

定义 D.5。 令 $Z_{q,b} \subseteq \mathcal{P}_{\text{even}}(2q)$ 为由 $2q$ 个元素组成的偶分拆的子集，其中恰有 b 个块，并满足以下条件：

- 每个块的大小至少为 4,

- 每个块与其他每个块相交的次数均为偶数，即对于所有$i \neq j$，$\mathrm{cr}(V_i,\ V_j)$ 都是偶数（奇交图为空）。

我们将使用以下引理来给出上界$|Z_{q,\ b}|$，其证明推迟至R 节：

引理 D.6. 存在一个绝对常数 $C > 0$，使得对于所有 $q \geq 2$ 和 $1 \leq b \leq \lfloor q/2 \rfloor$,

$$|Z_{q,b}| \leq C^q b!\, q^{2q-4b}. \tag{97}$$

此外，我们给出关于$|Z_{q,\ b}|$的改进界猜想；该猜想的证明将放宽 m中定理 D.1的项数条件：

猜想 D.7. 存在一个绝对常数 $C > 0$，使得对于所有 $q \geq 2$ 和 $1 \leq b \leq \lfloor q/2 \rfloor$ ，

$$|Z_{q,b}| \leq C^q \frac{q!}{b!}. \tag{98}$$

使用引理 D.6 或猜想 D.7，我们现在证明主导的二阶矩贡献的上界。

引理 D.8 (主导项上界)。存在绝对常数 C、$\gamma > 0$，使得对于所有整数 m 以及满足条件的偶整数 k

$$(k/2)^3 \leq m \leq \mathrm{poly}(n), \quad 4 \leq k \leq 2\gamma n/\log n,$$

我们有

$$\mu_2^*(k) \leq \left(\frac{Ck}{2m}\right)^{k/2}. \tag{99}$$

此外，若进一步假设 猜想 *D.7*，则只需满足 $m \geq k/2$ ，而无需满足$m \geq (k/2)^3$ （这总是成立，因为 $k/2 \leq n \leq m$） 。

证明。由公式（89）和引理 C.6 证明中的计数论证可知， $\mu_2^*(k)$ 等于权重 $\chi(\pi)\chi(\sigma)$ 之和的 m^{-k} 倍，其中求和遍历满足条件的单射标记划分对 (π, ι) 和 (σ, ι')，并且$\pi, \sigma \in \mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)$,

$$\iota(E(g(\pi))) = \iota'(E(g(\sigma))).$$

舍去满足 $\chi(\pi)\chi(\sigma) = 0$ 的划分对。取绝对值并应用 引理 C.11 后，只需对剩余的划分对进行计数，整体因子为 $36^k m^{-k}$。

将这两个带标签的词连接起来，得到

$$w = (\iota \circ \pi)(\iota' \circ \sigma) \in [m]^{2k}.$$

该映射是单射，因为每一半都决定了其划分及标记。携带相同标签的 w的位置构成了一个将 $[2k]$ 划分为 b 个块的划分 π_w，其中 b 是不同标签的数量。我们声称$\pi_w \in Z_{k,\ b}$。

公共边集中的每个标签 $\iota(E(g(\pi))) = \iota'(E(g(\sigma)))$ 都出现在两半中，且在每一半中至少出现两次。根据引理 C.13，其他每个标签在任何包含它的半边中至少出现四次。因此， π_w 的每个块的大小都是至少为四的偶数，并且 $b \leq k/2$。对于不同标签 x，y，设 $X = X_1 \sqcup X_2$和 $Y = Y_1 \sqcup Y_2$ 分别为包含它们的 π_w （可能为空）块，这些块被分配到两半中

的 π_w两半。所有四个集合的大小都是偶数，并且由于带标记边集相等以及等式 (51)，同一半中集合的两个逆序奇偶性相同。因此，

$$\mathrm{inv}(X,Y) = \mathrm{inv}(X_1,Y_1) + \mathrm{inv}(X_2,Y_2) + |X_2|\,|Y_1| \equiv 0 \pmod 2.$$

应用公式（51）再次可得 $\bar{g}(\pi_w) \cong \varnothing$，从而证明了该结论。

Z_k中的每个划分，b 都有 $(m)_b$ 种单射标记，因此

$$\mu_2^*(k) \le \frac{36^k}{m^k} \sum_{b=1}^{k/2} (m)_b |Z_{k,b}| \le 36^k \sum_{b=1}^{k/2} m^{b-k} |Z_{k,b}|. \tag{100}$$

无条件地，在引理 D.6中取阶数 k，利用 $b! \le (k/2)^b$，并将数值指数因子吸收到 $C^{k/2}$ 中，得到

$$\mu_2^*(k) \le \frac{C^{k/2}}{m^k} \sum_{b=1}^{k/2} m^b b!\,(k/2)^{2k-4b} \le \left(\frac{Ck}{2m}\right)^{k/2} \sum_{b=1}^{k/2} \left(\frac{(k/2)^3}{m}\right)^{k/2-b}. \tag{101}$$

在猜想 D.7下，改用 $k!/b! \le k^{k-b}$ 可得

$$\mu_2^*(k) \le \frac{C^{k/2}}{m^k} \sum_{b=1}^{k/2} m^b \frac{k!}{b!} \le \left(\frac{Ck}{2m}\right)^{k/2} \sum_{b=1}^{k/2} \left(\frac{k}{2m}\right)^{k/2-b}. \tag{102}$$

当 $m \ge (k/2)^3$ 和 $m \ge k/2$ 时，这些和分别至多为 $k/2$。由于 $k/2 \le 2^{k/2}$，增大C 即可吸收该因子，从而证明这两个结论。 □

D.2 完成证明并转换为自由累积量

在此，我们最终完成对无环表达式二阶矩渐近增长计算的完整证明。

证明定理 *D.1*。应用命题 D.2，$\mu_2^*(k)$与 $\tilde{\kappa}_k(\mathbf{P})$的二阶矩相差一个加法 $e^{-\Omega(n)}$ 因子；当 $k \le 2\gamma n/\log n$对于足够小的常数 γ （该常数取决于多项式指数） $m = \mathrm{poly}(n)$时，这一因子不会改变最终的渐近表达式。因此，结合引理 D.4 和D.8 即可得到完整证明。 □

最后，作为定理 D.1的一个推论，我们给出指定值域内所有自由累积量 $|\kappa_k|$ 绝对值总和的高概率界。我们给出任意固定的逆多项式失败概率下的界，并包含低阶数固定时可获得的改进。

定理 D.9 （自由累积量的集中性）。设 H 是一个包含 n 个量子比特、$m \le \mathrm{poly}(n)$ 项且自由累积量为 $(\kappa_k)_{k\in\mathbb{N}}$ 的稀疏泡利哈密顿量实例。存在常数 A、C、$\gamma > 0$，使得对于所有充分大的 n、任意失败概率 $\delta = 1/\mathrm{poly}(n)$、满足 $4 \le k_0 \le k_1 \le L$ 的所有偶整数 k_0、k_1，以及

$$Ak_1^3 \le m \le \mathrm{poly}(n), \qquad L \le \gamma n/\log n, \tag{103}$$

以至少 $1-\delta$ 的概率（对 H 的抽样而言），我们有：

$$\sum_{\substack{k_0\le k\le k_1\\ k\ even}} |\kappa_k| \le 4\delta^{-1/2}\left(\frac{Ck_0}{m}\right)^{k_0/4}. \tag{104}$$

证明。定义 $a_k \equiv (Ck/m)^{k/4}$。根据 定理 D.1， $\mathbb{E}_{\mathbf{P}}[\tilde{\kappa}_k^2] \le a_k^2$ 在所述值域内始终成立。对于连续的偶数阶，当 $k+2\le k_1$时，由于 $m \ge Ak_1$，

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} = \left(1+\frac{2}{k}\right)^{k/4}\left(\frac{C(k+2)}{m}\right)^{1/2} \le e^{1/2}\left(\frac{C}{A}\right)^{1/2} \le \frac{1}{2}, \tag{105}$$

对于 $A \ge 4eC$。因此

$$\sum_{\substack{k_0\le k\le k_1\\ k\ \text{even}}} a_k \le a_{k_0}\sum_{j=0}^{\infty} 2^{-j} = 2a_{k_0}. \tag{106}$$

利用柯西–施瓦茨不等式，

$$\mathop{\mathbb{E}}_{\mathbf{P}}\left[\left(\sum_{\substack{k_0\le k\le k_1\\ k\ \text{even}}} |\tilde{\kappa}_k|\right)^2\right] \le \left(\sum_{\substack{k_0\le k\le k_1\\ k\ \text{even}}} \mathop{\mathbb{E}}_{\mathbf{P}}[\tilde{\kappa}_k^2]^{1/2}\right)^2 \le 4a_{k_0}^2. \tag{107}$$

根据 命题 B.4、定理 C.15和 引理 B.2， $\kappa_k = \tilde{\kappa}_k$ 对所有 $k \le L$同时成立，失败概率至多为 $e^{-\Omega(n)}$。对于任意 $0<\eta<1$，对和的平方应用马尔可夫不等式可得

$$\Pr_H\left(\sum_{\substack{k_0\le k\le k_1\\ k\ \text{even}}} |\kappa_k| > \frac{2a_{k_0}}{\sqrt{\eta}}\right) \le e^{-\Omega(n)} + \frac{\eta}{4a_{k_0}^2}\mathop{\mathbb{E}}_{\mathbf{P}}\left[\left(\sum_{\substack{k_0\le k\le k_1\\ k\ \text{even}}} |\tilde{\kappa}_k|\right)^2\right] \le e^{-\Omega(n)} + \eta. \tag{108}$$

取 $\eta = \delta/4$ 和 n 足够大，使得 $e^{-\Omega(n)}$ 项至多为 $\delta/4$，即可证明（104），且失败概率至多为 $\delta/2$。 □

推论 D.10（更强的超收缩性界）。如果 k_0 独立于 n固定，则对于 H的抽取，以至少 $1-\delta-e^{-\Omega(n)}$ 的概率，

$$\sum_{\substack{k_0\le k\le k_1\\ k\ even}} |\kappa_k| \le Cm^{-k_0/4}(\log n)^{\binom{k_0/2}{2}/2}. \tag{109}$$

证明见T 节。

注 D.11。如果进一步假设 猜想 D.7，那么可以将 $m \ge Ak_1^3$ 在 定理 D.9 和 推论 D.10 中的假设替换为 $m \ge Ak_1$（对于足够小的常数 $k_1 \le \gamma n/$，由于 $n \le m/A\log\ \gamma$，该条件总是成立）。

在 $k_0 = 4$ 中取 推论 D.10 可得

$$\sum_{\substack{4\le k\le k_1\\ k\ \text{even}}} |\kappa_k| \le C\sqrt{\log n}/m \tag{110}$$

在任意固定的多项式置信度下；在无环值域内，这个和就是 $\mathcal{K}(k_1)$ 中使用的量E 节。

E 稀疏泡利模型的福克空间解释

在分析用于计算谱振幅的算法之前，我们先介绍一个关键框架，它将非交换算子映射到相应的单粒子量子系统。该算子的矩对应于福克空间上一维量子行走的步数。我们首先在E.1小节中，将这一构造应用于精确半圆元素的矩，作为热身。接着在 E.2小节中，我们考察稀疏泡利模型的矩，并为我们的算法给出一种物理解释，这对后续分析至关重要。

定义 E.1 (全福克空间 [66, 定义 7。13])。 令 $\mathcal{H}$ 表示一个希尔伯特空间。基于 全福克空间 $\mathcal{H}$ 是由下式给出的希尔伯特空间

$$\mathcal{F}(\mathcal{H}) \equiv \bigoplus_{n=0}^{\infty} \mathcal{H}^{\otimes n}. \tag{111}$$

直和项 $\mathcal{H}^{\otimes 0}$ 是一个一维希尔伯特空间，我们将其记作 $\mathbb{C}\Omega$，其中 Ω 是一个特殊的单位向量，称为真空向量。

给定一个希尔伯特空间 $\mathcal{H}$，令 $B(\mathcal{H})$表示 $\mathcal{H}$上所有有界算子的集合。由下式定义的 $B(\mathcal{F}(\mathcal{H}))$ 上的线性泛函 ψ

$$\psi(T) \equiv \langle \Omega, T\Omega \rangle, \qquad T \in B(\mathcal{F}(\mathcal{H})), \tag{112}$$

称为真空期望态。于是 $\left(B(\mathcal{F}(\mathcal{H})),\ \psi\right)$ 构成一个非交换概率空间。

这一构造可视为非交换概率空间 [66, 定理 21.4]上针对具有任意（有限）非零自由累积量序列的一般元素所作福克空间构造的简化版本。有趣的是，从稀疏泡利模型到一维福克空间的映射，与双重缩放 SYK 模型中的边界到体映射十分相似 [79], ；当其相互作用项完全非局域且经过随机稀疏化时，该模型在极限下会化为稀疏泡利模型。

E.1 预备说明：半圆元素的福克空间

设 H 是一个半圆元素——它恰好具有单位方差的半圆谱密度。可以计算得出， H 的矩由卡特兰数给出：

$$\overline{\mathrm{Tr}}(H^k) = C_{k/2} \equiv \frac{1}{k/2+1}\binom{k}{k/2}, \qquad k \text{ even} \tag{113}$$

卡特兰数 $C_{k/2}$ 计数的是在偶数 k 个位点上非交叉弦图 的数量。

在本预备说明中，我们将介绍如何为半圆元素 H构造一个具体的福克空间。我们考虑 定义 E.1 在 $\mathcal{H} = \mathbb{C}$的特例。福克空间 $\mathcal{F}(\mathbb{C})$具有由以下向量构成的标准正交基 $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \ldots$，其中 $|0\rangle \equiv \Omega$ 表示真空向量。

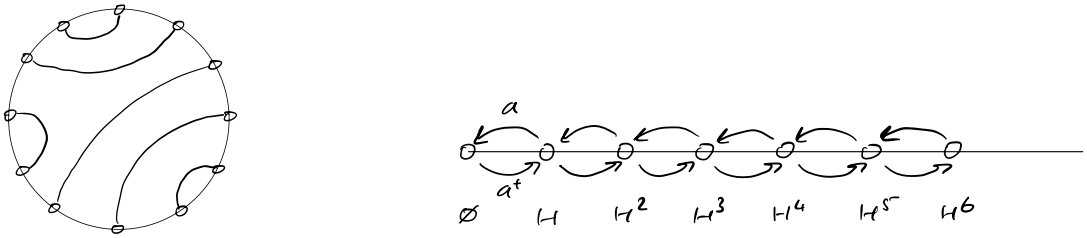
记产生与湮灭算子 $\{a^\dagger, a\}$，其作用方式如下

$$\begin{aligned} a^\dagger |n\rangle &= |n+1\rangle \qquad \forall n \geq 0, \\ a\,|n\rangle &= |n-1\rangle \qquad \forall n \geq 1, \\ a\,|0\rangle &= 0. \end{aligned} \tag{114}$$

我们将福克空间理解为一个在半无限直线上跳跃的单个量子粒子 $\ell_2(\mathbb{N})$；产生与湮灭算子使这个粒子向左或向右移动（见 图 4b）。现在考虑跳跃算子 $\mathcal{T} \equiv a^\dagger + a$。 $\mathcal{T}$的矩恰好给出卡特兰数：

$$\langle 0| \mathcal{T}^k |0\rangle = C_{k/2}, \qquad k \text{ even},$$

其中，我们使用 $\psi(T) \equiv \langle 0| T |0\rangle$ 表示真空期望。因此，算子 $\mathcal{T}$ 作用于真空态时的期望，与半圆分布的矩完全一致。对真空期望的另一种解释是对所有*Dyck*路径求和：粒子从真空态出发并最终回到真空态，且在此过程中从不移动到 $|0\rangle$的左侧。对于偶数 k ，长度为k 的Dyck路径数量恰好是卡特兰数 $C_{k/2}$。



(a) 十二个位点上的非交叉弦图。　　(b) Fock空间表示。

图4：半圆元素的矩和自由累积量的图示表示。

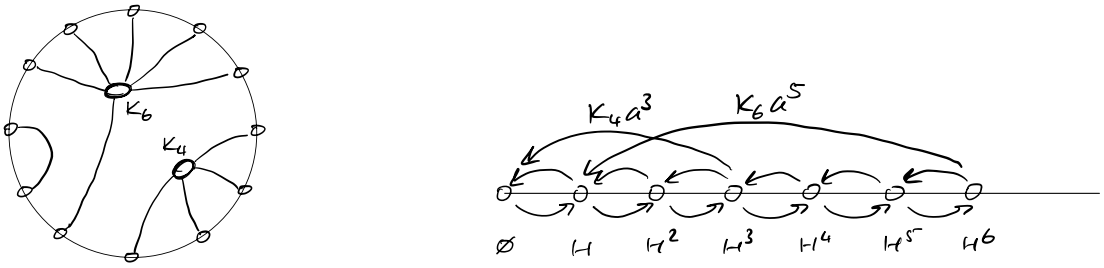
我们可以通过以下方式将粒子跳跃图景与不交叉弦图的计数联系起来。设想从圆的底部图 4a 开始，沿逆时针方向前进。每当粒子向上跳跃时，我们就创建一条腿；每当粒子向下跳跃时，就消去最近打开的那条腿。由于粒子不能从真空态向下跳跃，因此总会有一条腿可供消去。粒子的每条有效路径都会产生一个不交叉弦图。这便重现了不交叉弦图与 Dyck路径之间广为人知的同构 [102]。

E.2 一般非交换元素的福克空间

稀疏泡利模型 H 的实际实例并不会具有精确的半圆谱，但在无环值域内，其奇数阶自由累积量会消失，而偶数阶自由累积量 κ_k则会随着 k 的增大而衰减（定理 D.9）。本小节将构建一个福克空间，使我们能够根据自由累积量分析谱性质。

构建自由累积量福克空间的第一步，是将自由累积量视为非交叉划分的权重。大小为四的块权重为 κ_4，大小为六的块权重为 κ_6，依此类推。

现在，我们可以着手构建一个福克空间，对这些非交叉划分按适当的权重求和。我们将使用（114）中定义的同一组产生与湮灭算子。设想从 图 5a 的圆底部开始，沿逆时针方向前进。任何不是非交叉块末位的位点，都可以与向上跳跃 $a^\dagger$相关联。如上一节所述，弦的湮灭与向下跳跃 a 相关联。现在，我们还需要湮灭大小大于二的块。一个大小为四的块的末位实际上



（a）十二个位点上的非交叉划分。　　（b）Fock空间表示。

图 5：稀疏泡利模型实例的矩和自由累积量的图示表示。

会一次湮灭三条腿，因此我们可以将其与一个向下三步的跳跃 a^3 相关联。与此同时，还会有相应的权重 κ_4，合起来得到一项 $\kappa_4 a^3$；对于更大的块和更高阶的累积量，情况同样如此。在这种情况下，我们的福克空间跳跃算子刻画了*Łukasiewicz* 路径；这类路径通过允许任意大小的向下步长推广了 Dyck路径：

定义 E.2（Łukasiewicz 路径）。“近似下降路径[6]”是位于 $\mathbb{Z}^2$ 上的一条路径，该路径从 $(0,\ 0)$ 出发，且只采取向量 $(1,\ i)$ 所表示的步长，$i \in \mathbb{Z}_{\leq 0} \cup \{+1\}$。一条长度为 k 的 Łukasiewicz 路径是以 $(k,\ 0)$ 为终点且从不低于 x 轴的近似下降路径。

Fock空间的每条有效路径都遵循一条长度为 k 的 Łukasiewicz 路径（见 图 5b），从而重现了非交叉划分与 Łukasiewicz 路径之间众所周知的同构关系 [102]。Voiculescu [98]首次阐述了 Łukasiewicz 路径与自由概率之间的概念联系。Fock空间上的跳跃算子刻画了一般非交换元素的矩。我们定义一个特定的跳跃算子，并对其自由累积量设定一个“截断” ℓ，将高于该截断的自由累积量设为零。

定义 E.3（福克空间跳跃算子）。设 H 是一个有界厄米算子，其自由累积量为 $(\kappa_k)_{k\in\mathbb{N}}$，满足 $\kappa_2 = 1$，且截至 L 阶的所有奇数阶自由累积量均为零。对于所有偶数 $2 \leq \ell \leq L$，定义（不一定是厄米的）福克空间算子

$$\mathcal{T}_\ell \equiv a^\dagger + a + \sum_{\substack{4\leq k\leq \ell \\ k \text{ even}}} \kappa_k a^{k-1}. \tag{115}$$

注 E.4（大误差近似下的半圆情形）。在全文中，自由累积量截断始终会保留已知的二阶自由累积量 κ_2。因此 $\ell = 0$ 对应于直接输出半圆分布，而在标量情形下，$\ell = 2$ 也会得到相同结果。对于颜色累积量（见 第一部分），当 $\ell = 2$ 时会保留混合颜色二阶自由累积量，而当 $\ell = 0$时则将其舍弃。

当算法将 $\ell = 0$（$\ell = 2$ 在标量情形下）设为半圆情形 时，我们称之为半圆情形。在这种情况下，我们的算法直接根据卡特兰数计算矩。[7]

[6]更常见的定义使用步长取自 $\mathbb{Z}_{\geq 0} \cup \{-1\}$的“近似上升”路径，但这与对路径进行水平反射是等价的。[7]对于 TOC 和 OTOC（见 J 节），我们计算颜色各段上的卡特兰级数乘积。对于 L节中的尖峰泡利模型，其矩是半圆分布与尖峰自由和的矩，可以通过递推关系计算。 M节 中的热期望值同样使用这一递推关系。

误差界和运行时间界在所有情形下仍然成立。因此，不失一般性，我们假设不属于半圆情形。

命题 E.5。 定义 $\hat{}\mu_k^{(\ell)} \equiv \langle 0| \mathcal{T}_\ell^k |0\rangle$，其中 $\mathcal{T}_\ell$ 定义于 定义 *E.3*。则

$$\hat{\mu}_k^{(\ell)} = \overline{\mathrm{Tr}}(H^k)$$

对所有偶数 $k \le \ell$ 均成立。

证明。 令 $\mathbf{1}_E$ 表示事件 E 的示性随机变量。将真空期望按 Łukasiewicz 路径展开，得到

$$\hat{\mu}_k^{(\ell)} = \sum_{\pi \in NC(k)} \prod_{V \in \pi} \kappa_{|V|} \mathbf{1}_{[|V| \le \ell]} \tag{116}$$

对每个 $k \ge 0$ 均成立（奇数大小的块在等式两边都贡献零，因为奇数阶自由累积量直到 $L \ge \ell$ 阶都为零），也就是说，$\hat{}\mu_k^{(\ell)}$ 是自由累积量序列 $(\kappa_{k'} \cdot \mathbf{1}_{[k' \le \ell]})_{k' \ge 1}$ 的第 k 阶矩（上下文明确时，我们将省略 (ℓ) 上标）。当 $k \le \ell$ 为偶数时，两个自由累积量序列之间的 k 阶矩相同。 □

注 E.6 （自由累积量截断的组合解释）。 跳跃算子 $\mathcal{T}_\ell$ 满足以下关于偶数 k 的矩-累积量递推关系：

$$\langle 0| \mathcal{T}_\ell^k |0\rangle = \sum_{\substack{\pi \in NC(k) \\ \forall V \in \pi : |V| \le \ell}} \prod_{V \in \pi} \kappa_{|V|}. \tag{117}$$

从自由概率的组合视角来看，矩阶 k 对应于非交叉图中的顶点数，而自由累积量对应于非交叉图中每个块的大小。截断算子 $\mathcal{T}_\ell$ 对应于 H 的所有非交叉图，其中包含大小不超过 ℓ 的块。由于含有 ℓ 个顶点的非交叉图，其块的大小至多为 ℓ，因此对于所有偶数 $k \le \ell$，矩 $\mathbf{Tr}(H^k)$ 和 $\langle 0| \mathcal{T}_\ell^k |0\rangle$ 都精确匹配。 —

我们将使用对应于自由累积量截断的跳跃算子来分析我们的算法，详见F 节。

F 一种用于谱振幅的经典算法

本节将介绍我们用于谱振幅的完整经典算法。首先，我们在F.1 小节中概述整个算法。在F.2 小节中，我们结合D 节所示的自由累积量的集中性以及E 节的福克空间解释，分析自由累积量截断带来的误差。最后，我们在F.3 小节中汇总所有证明。我们还将在Q 节 中进一步推广这些结果，从而得到用于估计配分函数的算法。

F.1 算法概述与运行时间

现在我们概述该算法。

计算低阶自由累积量。 步骤 (1) 和 (2) 的目标是计算低阶自由累积量，之后将用它们来近似高阶矩。我们使用泡利基中的标准稀疏乘法来计算 H 的偶数阶矩，例如 [103, 算法 1]中所实现的那样。每个算子都存储为一个以规范泡利字符串为索引的字典，所有相位均作为系数存储。对于偶数 k，$\mathrm{Tr}(H^k)$ 的值可由 $H^{k/2}$中泡利项的展开精确确定，这是因为泡利串在泡利基中正交。

在 $1 \le j \le m/2$ 的情况下， H^j 中出现的泡利串数量至多为

$$\sum_{i=0}^{j} \binom{m}{i} \le \left(\frac{em}{j}\right)^j .$$

每次迭代都会将当前存储的每个元素与来自 H 的 m 个不同泡利项相乘，每次乘积的计算成本为 $\mathcal{O}(n)$。对幂次 H^0 、 ..... 、 $H^{\frac{\ell}{2}-1}$ 的这些成本求和，可在时间 $\ell \ge 4$ 内计算至 $\ell \ge 4$ 阶的矩

$$\mathcal{O}\left(n\ell\binom{m}{\ell/2}\right) \le \mathcal{O}\left(n\ell\left(\frac{2em}{\ell}\right)^{\ell/2}\right),$$

其中，若常数 A 足够大，则 $m \ge A\ell$ 。

备注 F.1。 采用这种标准的泡利算符计算方法，得到我们的$(1/\varepsilon)^{2+o(1)}$算法的渐近复杂度。关于使用快速矩阵乘法计算低阶矩的另一种方法，见 S 节。

我们利用这些矩计算 H 到 ℓ 阶的自由累积量。对式（37）取系数可得

$$\overline{\mathrm{Tr}}(H^k) = \sum_{s=1}^{k} \kappa_s [z^{k-s}] M_H(z)^s. \tag{118}$$

对于 $k \le \ell$， $s = k$ 项为 κ_k，而其他各项只涉及低阶累积量和矩。因此，我们通过求解关于 κ_k 的这个递推关系，按递增顺序计算累积量。

近似高阶矩。我们使用相同的递推关系计算所有$k \le L$的近似矩$\hat{\mu}_k$，保留第二自由累积量 $\kappa_2 = 1$ ，并将所有高于 ℓ 阶的其他累积量设为零。对于任一转换，存储矩级数 $1 \le s \le \ell$的幂 M^s的系数数组，并按次数递增、再按 s递增的顺序填充。更新

$$[z^d]M^s = \sum_{j=0}^{d} \hat{\mu}_j [z^{d-j}] M^{s-1}$$

每个系数的成本为 $\mathcal{O}(d+1)$ 。由于每个新矩只使用这些数组中次数更低的项，因此两次转换的总成本为 $\mathcal{O}(\ell L^2)$。近似矩与 $\mathrm{Tr}(H^k)$ 在 $k \le \ell$时一致；更高阶时的误差界见 F.2 小节。

近似谱振幅。利用近似矩，我们计算

$$\widehat{Z}(t) \equiv \sum_{k=0}^{L} \frac{(-it)^k}{k!} \hat{\mu}_k.$$

计算此和需要时间 $\mathcal{O}(L)$。当$m \geq AL^3$时，转换成本满足 $\ell L^2 \leq L^3 = \mathcal{O}(m)$，而这相较于泡利传播可以忽略。对于偶数 $2 \leq \ell < L$ 和 $m \geq AL^3$，总运行时间为

$$\mathcal{O}\left(n\ell \binom{m}{\ell/2}\right). \tag{119}$$

F.2 截断矩和自由累积量的近似误差 s

在本小节中，我们将分析将自由累积量截断到某个阶数 ℓ 并将矩截断到某个阶数 $L \gg \ell$时所产生的谱振幅误差。我们的分析将关键地利用E 节中的福克空间映射。

证明中将用到以下引理:

引理 F.2（微扰演化）。设 S 是希尔伯特空间上的有界自伴算子，N 是希尔伯特空间上的有界算子。那么对于所有 $z \in \mathbb{C}$,

$$\|e^{i(S+N)z}\| \leq e^{|\operatorname{Im}(z)|\|S\|+|z|\|N\|}. \tag{120}$$

证明。固定 $z \in \mathbb{C}$和一个向量 ψ_0，并定义 $\psi(u) \equiv e^{i(S+N)zu}\psi_0$，其中 $u \in [0,1]$。由于 $\langle \psi,\ S\psi\rangle$是实数,

$$\begin{aligned}\frac{d}{du}\|\psi(u)\|^2 &= 2\operatorname{Re}\langle \psi,\, iz(S+N)\psi\rangle \\ &= -2\operatorname{Im}(z)\,\langle \psi, S\psi\rangle + 2\operatorname{Re}\big(iz\langle \psi, N\psi\rangle\big) \\ &\leq 2\big(|\operatorname{Im} z|\,\|S\| + |z|\,\|N\|\big)\|\psi(u)\|^2.\end{aligned}$$

由Grönwall不等式可得

$$\|\psi(1)\| \leq e^{|\operatorname{Im} z|\,\|S\|+|z|\,\|N\|}\|\psi_0\|, \tag{121}$$

证明完毕。 □

推论 F.3 (微扰幺正演化)。设 S 是一个有界自伴算子，N 是希尔伯特空间上的有界算子。那么对所有 $t \in \mathbb{R}$,

$$\|e^{i(S+N)t}\| \leq e^{|t|\|N\|}. \tag{122}$$

证明。通过在 $z = t \in \mathbb{R}$ 中令 引理 F.2，即可作为推论得证。 □

引理 F.4（泰勒逼近定理）。设 X 是希尔伯特空间上的有界算子，$L \geq 1$ 是整数，且 $t \geq 0$。则有以下界:

$$\begin{aligned}&\textit{(Operator norm)} && \left\| e^{-itX} - \sum_{k=0}^{L-1} \frac{(-it)^k}{k!} X^k \right\| \leq \frac{t^L \|X\|^L}{L!} \sup_{0\leq u\leq t} \left\| e^{-iuX} \right\|, \\ &\textit{(Trace)} && \left| \overline{\operatorname{Tr}}(e^{-itX}) - \sum_{k=0}^{L-1} \frac{(-it)^k}{k!} \overline{\operatorname{Tr}}(X^k) \right| \leq \frac{t^L}{L!} \overline{\operatorname{Tr}}(|X|^L), \quad \textit{if } X \textit{ is Hermitian.}\end{aligned} \tag{123}$$

证明。 由泰勒公式 [104, 第 XIII 章] 应用于 $u \mapsto e^{-iutX}$,

$$e^{-itX} - \sum_{k=0}^{L-1} \frac{(-it)^k}{k!} X^k = \frac{(-itX)^L}{(L-1)!} \int_0^1 (1-u)^{L-1} e^{-iutX}\, du. \tag{124}$$

取算子范数即可得到第一个界；对 tX 的每个特征值应用方程的标量版本，则可得到迹界。 □

定义 $\mathcal{K}(k') \equiv \sum_{4\le k\le k'} |\kappa_k|$。 在分析中，我们将使用以下中间界。

引理 F.5。 设 $\mathcal{T}_\ell$ 和 $\mathcal{T}_L$ 是 定义 *E.3*中定义的标量跳跃算子，其中 $2 \le \ell < L$为偶整数。则对每个 $t \ge 0$,

$$\left| \langle 0|\, e^{-i\mathcal{T}_\ell t}\, |0\rangle - \langle 0|\, e^{-i\mathcal{T}_L t}\, |0\rangle \right| \le \big(\mathcal{K}(L) - \mathcal{K}(\ell)\big)\, e^{t\mathcal{K}(L)}. \tag{125}$$

证明。 </style>当 $t = 0$ 时结论显然成立，因此设 $t > 0$。定义

$$K_{\ell_0}(w) \equiv \frac{1}{w} + w + \sum_{4\le k\le \ell_0} \kappa_k w^{k-1}.$$

矩－累积量关系 [66] 和拉格朗日反演 [102, 定理 5.4.2]给出 $\hat{}\mu^{(\ell_0)}\ k$ $=(k+1)^{-1}[w^{-1}]K_{\ell_0}(w)^{k+1}$。因此，在 $|w| = 1$ 上对指数级数求和可得

$$\langle 0|\, e^{-it\mathcal{T}_{\ell_0}}\, |0\rangle = -\frac{1}{it} \cdot \frac{1}{2\pi i} \oint_{|w|=1} e^{-itK_{\ell_0}(w)}\, dw.$$

写出 $\Delta(w) = K_L(w) - K_\ell(w)$。沿着 $K_\ell + s\Delta$, $0 \le s \le 1$ 相减并积分，会消去因子 $-it$:

$$\langle 0|\, e^{-it\mathcal{T}_L}\, |0\rangle - \langle 0|\, e^{-it\mathcal{T}_\ell}\, |0\rangle = \frac{1}{2\pi i} \int_0^1 \oint_{|w|=1} e^{-it(K_\ell(w)+s\Delta(w))} \Delta(w)\, dw\, ds.$$

在单位圆上， $w^{-1} + w$ 是实数，因此

$$\left| e^{-it(K_\ell(w)+s\Delta(w))} \right| \le e^{t\mathcal{K}(L)}, \qquad |\Delta(w)| \le \mathcal{K}(L) - \mathcal{K}(\ell).$$

围道的长度为 2π，从而得到公式（125）。 □

现在我们证明以下界，它量化了在谱振幅中同时截断自由累积量和矩所产生的误差。我们将这一截断论证推广到复时间演化的一般乘积，以及带有引理 P.3 的P 节尖峰模型，以供后续各节使用。

引理 F.6 （截断的近似误差）。 设 H 是一个具有自由累积量的厄米矩阵$\{\kappa_k\}_{k\in\mathbb{N}}$ 其中 $\kappa_2 = 1$ 且奇数阶自由累积量直至 L阶均为零。取正偶整数ℓ， L 其中 $2 \le \ell < L$，并根据 定义 *E.3*定义截断的 *Fock* 空间算子 $\mathcal{T}_\ell$ 。那么，对每个 $t \ge 0$,

$$\begin{aligned} &\left| \overline{\mathrm{Tr}}(e^{-iHt}) - \sum_{k=0}^{L} \frac{(-it)^k}{k!} \langle 0|\, \mathcal{T}_\ell^k\, |0\rangle \right| \\ &\qquad \le e^{t\mathcal{K}(L)} \left[\mathcal{K}(L) - \mathcal{K}(\ell) + \frac{\big(2t + t\mathcal{K}(L)\big)^L}{L!} \left(2 + \frac{2t + t\mathcal{K}(L)}{L+1} \right) \right]. \end{aligned} \tag{126}$$

证明。 首先，命题 E.5 结合三角不等式可得，对每个偶数 $2 \le \ell_1 \le L$以及 $0 \le k \le \ell_1$,

$$|\overline{\mathrm{Tr}}(H^k)| = |\langle 0| \mathcal{T}_{\ell_1}^k |0\rangle| \le \left\| a^\dagger + a + \sum_{\substack{4 \le k' \le \ell_1 \\ k' \text{ even}}} \kappa_{k'} a^{k'-1} \right\|^k \le \left(2 + \sum_{\substack{4 \le k' \le \ell_1 \\ k' \text{ even}}} |\kappa_{k'}|\right)^k = (2 + \mathcal{K}(\ell_1))^k. \quad (127)$$

此外 y，因为 $a^\dagger + a$ 是自伴的，推论 F.3 给出，对于 $t = -u$ 任意 $u \ge 0$,

$$\left\| e^{-i\mathcal{T}_{\ell_1} u} \right\| \le e^{u \left\| \sum_{4 \le k \le \ell_1} \kappa_k a^{k-1} \right\|} \le e^{u\mathcal{K}(\ell_1)}. \quad (128)$$

我们的证明将 $\langle 0| e^{-i\mathcal{T}_\ell t} |0\rangle$ 的泰勒级数近似与实际的谱振幅 $\mathbf{Tr}(e^{-iHt})$ 进行比较。为此，我们使用一个中间的福克空间截断，定义为

$$\mathcal{T}_L \equiv a^\dagger + a + \sum_{4 \le k \le L} \kappa_k a^{k-1}. \quad (129)$$

直观地说， L 将是我们的矩截断阶数，而 ℓ 将是自由累积量截断阶数。我们的目标是证明混合序列

$$\overline{\mathrm{Tr}}(e^{-iHt}) \xrightarrow{(1)} \langle 0| e^{-i\mathcal{T}_L t} |0\rangle \xrightarrow{(2)} \langle 0| e^{-i\mathcal{T}_\ell t} |0\rangle \xrightarrow{(3)} \sum_{k=0}^{L} \frac{(-it)^k}{k!} \langle 0| \mathcal{T}_\ell^k |0\rangle \quad (130)$$

i在每一步都会产生较小的加性误差，然后应用三角不等式 y.

现在，我们证明 式（130）中混合方法的每一步。

步骤（1）：初始累积量截断。从 $\mathbf{Tr}(e^{-iHt})$ 出发，我们首先考虑厄米矩阵 H 的泰勒级数截断:

$$\left| \overline{\mathrm{Tr}}(e^{-iHt}) - \sum_{k=0}^{L-1} \frac{(-it)^k}{k!} \overline{\mathrm{Tr}}(H^k) \right| \le \frac{t^L}{L!} \overline{\mathrm{Tr}}(H^L) \le \frac{(2t + t\mathcal{K}(L))^L}{L!}, \quad (131)$$

其中我们应用了引理 F.4 和（127）中的迹界。另请回顾

$$\sum_{k=0}^{L-1} \frac{(-it)^k}{k!} \overline{\mathrm{Tr}}(H^k) = \sum_{k=0}^{L-1} \frac{(-it)^k}{k!} \langle 0| \mathcal{T}_L^k |0\rangle . \quad (132)$$

现在我们希望回到截断累积量福克空间算子 $\mathcal{T}_L$上的指数函数。为此，我们再次使用泰勒级数近似，只是这一次方向相反:

$$\left| \sum_{k=0}^{L-1} \frac{(-it)^k}{k!} \langle 0| \mathcal{T}_L^k |0\rangle - \langle 0| e^{-i\mathcal{T}_L t} |0\rangle \right| \le \frac{t^L \|\mathcal{T}_L\|^L}{L!} \sup_{0 \le u \le t} \left\| e^{-iu\mathcal{T}_L} \right\| \le \frac{(2t + t\mathcal{K}(L))^L}{L!} e^{t\mathcal{K}(L)}, \quad (133)$$

其中我们应用了来自引理 F.4 以及公式 (127)和(128)的算子范数界。将这两个近似结合起来，再利用三角不等式，可得

$$\left| \overline{\mathrm{Tr}}(e^{-iHt}) - \langle 0| e^{-i\mathcal{T}_L t} |0\rangle \right| \le (1 + e^{t\mathcal{K}(L)}) \frac{(2t + t\mathcal{K}(L))^L}{L!} \le 2e^{t\mathcal{K}(L)} \frac{(2t + t\mathcal{K}(L))^L}{L!}. \quad (134)$$

步骤（2）：二阶累积量截断。应用引理 F.5 可得

$$\left|\langle 0|\, e^{-i\mathcal{T}_\ell t}\,|0\rangle - \langle 0|\, e^{-i\mathcal{T}_L t}\,|0\rangle\right| \le \big(\mathcal{K}(L)-\mathcal{K}(\ell)\big)e^{t\mathcal{K}(L)}.$$

这是式（1　25）；标量比较避免了 tDuhamel 界中的额外因子　.

步骤（3）：矩截断。现在，我们已将自由累积量截断至 ℓ阶，接下来要界定对这个截断算子的谱振幅进行泰勒级数近似所产生的误差。应用引理 F.4的算子范数界，

$$\begin{aligned}\left|\langle 0|\, e^{-i\mathcal{T}_\ell t}\,|0\rangle - \sum_{k=0}^{L}\frac{(-it)^k}{k!}\langle 0|\,\mathcal{T}_\ell^k\,|0\rangle\right| &\le \left\| e^{-i\mathcal{T}_\ell t} - \sum_{k=0}^{L}\frac{(-it)^k}{k!}\mathcal{T}_\ell^k\right\| \\ &\le \frac{\big(2t+t\mathcal{K}(\ell)\big)^{L+1}}{(L+1)!}e^{t\mathcal{K}(\ell)}.\end{aligned} \tag{135}$$

综上所述。最后，我们合并来自 式（125）、（134）和（135）的贡献。利用 $\mathcal{K}(\ell) \le \mathcal{K}(L)$ 并应用三角不等式，即可得到最终界并完成证明。

□

为了使用引理 F.6，我们需要以高概率给出 $\mathcal{K}(L)$、$\mathcal{K}(L)-\mathcal{K}(\ell)$ 的上界。对于无条件证明的情形和猜想情形，我们都可以做到这一点：

1.（无条件）只要满足 $m = \Omega(L^3)$，我们就可以应用 定理 D.1，并利用定理 D.9来界定 $\mathcal{K}(L)$ 和 $\mathcal{K}(L)-\mathcal{K}(\ell)$。

2.（猜想）假设猜想 D.7 成立，定理 D.1 还在以下情况下成立$m = \Omega(L)$，因此我们可以再次应用定理 D.9 来界定 $\mathcal{K}(L)$，并且 $\mathcal{K}(L)-\mathcal{K}(\ell)$。

F.3 完整的谱振幅算法

现在我们介绍算法 1中的完整算法，并证明它满足定理 1。

算法 1 谱振幅算法

要求： $H \sim$稀疏泡利哈密顿量，时间 $t \ge 0$，偶数 $2 \le \ell < L \le \gamma n/\log n$。

1: 设定$\hat{}\mu_0^{(\ell)} = \hat{}\mu_2^{(\ell)} = 1$，并通过直接泡利展开计算精确矩$\hat{}\mu_k^{(\ell)}$，其中 $4 \le k \le \ell$ 为偶数。2: 设定 $\kappa_2 = 1$，并使用矩-累积量递推计算自由累积量 κ_k，其中 $4 \le k \le \ell$ 为偶数。设定

$$\kappa_k = 0 \qquad k > \ell$$

对于: 使用$\hat{}\mu_k^{(\ell)}$ 计算所有偶数 $k \le L$ 的近似矩，方法为公式[3]（37）。4: **返回**

$$\hat{Z}(t) \equiv \sum_{\substack{0\le k\le L\\ k \text{ even}}} \frac{(-it)^k}{k!}\hat{\mu}_k^{(\ell)} \tag{136}$$

$\hat{}$对于稀疏泡利哈密顿量实例 H，令 $Z(t)$（其取决于 ℓ 和 L）表示 算法 1的输出。现在给出关于谱振幅经典近似算法的完整定理。

定理 F.7 （谱振幅近似的运行时间）。 固定任意 $\delta = 1/\mathrm{poly}(n)$。存在一个充分小的常数 $c > 0$，使得对于所有充分大的 n、 $2n \le m \le \mathrm{poly}(n)$、$t \ge 0$ 和满足以下条件的 $0 < \varepsilon < 1$

$$1 + t + \log(1/\varepsilon) \le c \min\left\{ m^{1/3}, \frac{n}{\log n} \right\}, \tag{137}$$

ˆ存在一种经典算法，可输出一个近似值 $Z(t)$，满足

$$\left| \hat{Z}(t) - \overline{\mathrm{Tr}}(e^{-iHt}) \right| \le \varepsilon$$

以至少 $1 - \delta - e^{-\Omega(n)}$ 的概率（在 H 上），且总运行时间至多为

$$\mathcal{O}(n/\delta)(1/\varepsilon)^{2+\mathcal{O}(1/\log m)}. \tag{138}$$

证明。 取一个充分大的固定常数 C_0，并令 $\ell \ge 2$ 为满足以下条件的最小偶整数

$$\delta^{-1/2} \left(\frac{C_0(\ell+2)}{m} \right)^{(\ell+2)/4} \le \frac{\varepsilon}{C_0}. \tag{139}$$

由于 $2n \le m$ 且 $\log(1/\varepsilon) = \mathcal{O}(m^{1/3})$，因此 $1 + \log(1/\varepsilon)/\log m$ 的一个充分大的常数倍满足（139）。因此

$$\ell = \mathcal{O}\left(1 + \frac{\log(1/\varepsilon)}{\log m} \right). \tag{140}$$

取一个偶数 $L = \Theta(1 + t + \log(1/\varepsilon))$，其隐含常数充分大，并且 $L \ge \ell + 4$。在（ c137）中取充分小的 $m \ge AL^3$，可确保 $L \le \gamma n/\log n$，因此 定理 D.9 适用。

近似。 在阶数 109处应用固定低阶估计（4 ），失败概率为δ/n^2；并在较低阶 $\ell + 2$ 处应用（108），其中 n。当 n 充分大时，这些估计同时给出

$$\mathcal{K}(L) \le C\frac{\sqrt{\log n}}{m}, \qquad \mathcal{K}(L) - \mathcal{K}(\ell) \le \delta^{-1/2} \left(\frac{C(\ell+2)}{m} \right)^{(\ell+2)/4}, \tag{141}$$

除非发生概率至多为 $\delta + e^{-\Omega(n)}$ 的情况。由于 $t \le L$ and $L \le (m/A)^{1/3}$，我们利用 $m \ge 2n$ 得到 $t\mathcal{K}(L) \le \mathcal{O}(m^{-2/3}\sqrt{\log n}) = o(1)$。因此，引理 F.6 中的指数前因子有界，泰勒基数为 $\mathcal{O}(1+t)$。根据式 (139)，累积量贡献至多为 $\varepsilon/2$；根据 $L! \ge (L/e)^L$ 以及 L 的选取，泰勒贡献至多为 $\varepsilon/2$。由此得到所述误差和成功概率。在 $t = 0$，也可以直接返回精确值 1。

运行时间。 每个选定截断处的极小性 ℓ 意味着 $\ell - 2$ 不成立（139），因此得到

$$\left(\frac{m}{C_0 \ell} \right)^{\ell/2} < C_0^2 \delta^{-1} \varepsilon^{-2}. \tag{142}$$

利用 $\binom{m}{\ell/2} \le (2em/\ell)^{\ell/2}$ 在式（119）中可得运行时间上界为

$$\mathcal{O}\left(\frac{n}{\delta} \varepsilon^{-2} e^{\mathcal{O}(\ell)} + L \right) \le \mathcal{O}(\frac{n}{\delta})(1/\varepsilon)^{2+\mathcal{O}(1/\log m)}, \tag{143}$$

其中不等式用到了式（140）、 $L \le n$和 $\varepsilon < 1$。这证明了式（138）。 □

这就证明了定理 Theorem 1中用于近似谱振幅的算法的论断。

第二部分

颜色框架与关联函数

前面的章节讨论了稀疏泡利哈密顿量实例H，该实例来自 公式 (1)。现在，我们将允许在迹计算中，于 H 的多个副本之间插入固定的泡利算符；通过不同泡利算符对 H 进行共轭，将被视为具有不同“颜色” H。

在 G 节中，我们将形式化定义颜色这一概念，并展示它如何应用于稀疏泡利哈密顿量。不同颜色之间的联合矩和联合自由累积量，是对第一部分中的单变量矩和自由累积量的推广。在非交叉分拆图和对易图（H节）中，每个顶点也将关联一种颜色。我们将在I节中进一步扩展福克空间构造，以纳入这一新的自由度。

我们将看到，这个简单的框架如何帮助我们计算时序关联函数和非时序关联函数（J 节）、尖峰泡利模型的谱振幅（L节）以及热期望值（M节）。

我们在表2中总结了G 节所定义的记号。

	Name	描述
$\mathbf{Q}$	生成元	模相位独立的泡利算符序列 $\mathbf{问} \equiv (Q_1, \ldots, Q_s)$
$\mathcal{C}$	颜色群	模相位的所有可能泡利插入项的集合 $\mathcal{C} \equiv \langle [Q_1]、\ \ldots\ldots、\ [Q_s] \rangle \cong \mathbb{F}_2^s$
$\vec{\mathbf{c}}$	标签	模去相位后表示泡利算符的二进制字符串 $\vec{\mathbf{c}} \in \mathbb{F}_2^s$，与 $[Q_{\vec{\mathbf{c}}}] \in \mathcal{C}$ 等同
$Q_{\vec{\mathbf{c}}}$	颜色代表元	表示颜色群元素的泡利算符 $Q_{\vec{\mathbf{c}}} \equiv Q_1^{c_1} \cdots Q_s^{c_s} \in M_{2^n}(\mathbb{C})$
$H_{\vec{\mathbf{c}}}$	带颜色的哈密顿量	经颜色代表元共轭的泡利哈密顿量实例 $H_{\vec{\mathbf{c}}} \equiv Q_{\vec{\mathbf{c}}} H Q_{\vec{\mathbf{c}}}^\dagger$
$\mathbf{C}$	标签序列	表示颜色代表元的标签序列 $\mathbf{C} \equiv (\vec{\mathbf{c}}_1, \ldots, \vec{\mathbf{c}}_k) \in (\mathbb{F}_2^s)^k \cong \mathcal{C}^k$
$\tau_k^{(\mathbf{C})}$	颜色矩	带有共轭颜色代表元的 H 的联合矩 $\tau_{(\mathbf{C})k} \equiv \tau_k(H_{\vec{\mathbf{c}}_1}, \ldots, H_{\vec{\mathbf{c}}_k})$
$\kappa_k^{(\mathbf{C})}$	颜色累积量	带有共轭颜色代表元的 H 的联合自由累积量 $\kappa_k^{(\mathbf{C})} \equiv \kappa_k(H_{\vec{\mathbf{c}}_1}, \ldots, H_{\vec{\mathbf{c}}_k})$

表2：对G 节中引入的主要颜色框架符号和定义的总结。我们将每个标签 $\vec{\mathbf{c}} \in \mathbb{F}_2^s$ 与相应的颜色 $[Q_{\vec{\mathbf{c}}}] \in \mathcal{C}$对应，而 $Q_{\vec{\mathbf{c}}}$ 表示其从泡利群中选取的矩阵代表元。

G 稀疏泡利模型的颜色框架

本节概述我们的颜色框架，并介绍我们在第一部分中所建立的若干主要工具和结果的扩展。为建立直观认识，我们首先在G.1 小节中给出 2^s 种不同颜色的双色情形的一般构造，这足以满足我们所考虑的大多数应用。在G.2 小节中，我们将该框架形式化为任意 2^s 种不同颜色的情形。

G.1 预备说明：两种颜色

我们先从一个简单的例子入手，介绍颜色的概念。设 Q 是一个固定的 n量子比特泡利算符。记 $H_0 \equiv H$ 和 $H_1 = QHQ$。恒等算符

$$QH_c = H_{c\oplus 1}Q, \quad c \in \{0,1\}$$

表明，将一个插入项移过 H 的一个因子时，其下标会交换。例如，将左侧的泡利算符 Q 一直移到最右侧，得到

$$H_0^r Q H_0^s Q H_0^t Q H_0^u Q = H_0^r H_1^s H_0^t H_1^u.$$

H 定义了一个稀疏泡利哈密顿量实例，而其下标则将其标记为一种标记，我们称之为“颜色”；例如， H_0 标为黑色， H_1 标为红色。这样，我们就能在遵循泡利算符关系的同时，系统地处理（H_0、 H_1）的联合矩。

对于双颜色序列 $\mathbf{C} = (c_1, \ldots, c_k) \in \mathbb{F}_2^k$，我们定义其颜色矩和颜色累积量如下：

$$\tau_k^{(\mathbf{C})}[H,\ldots,H] \equiv \tau(H_{c_1}\cdots H_{c_k}), \qquad \kappa_k^{(\mathbf{C})}[H,\ldots,H] \equiv \kappa_k(H_{c_1},\ldots,H_{c_k}). \tag{144}$$

全 0 序列还原了原始的矩和自由累积量定义，即

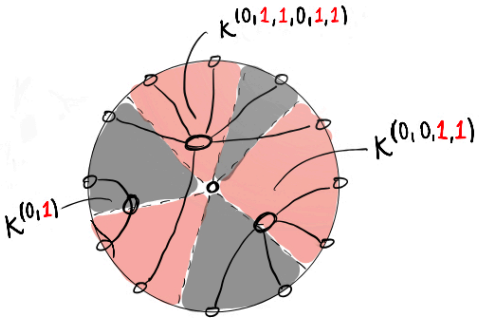
$$\tau_k^{(0^k)}[H,\ldots,H] = \tau(H^k).$$

这是来自附录 A 的联合矩和联合自由累积量，其中包含两个变量。特别地，矩－累积量关系变为

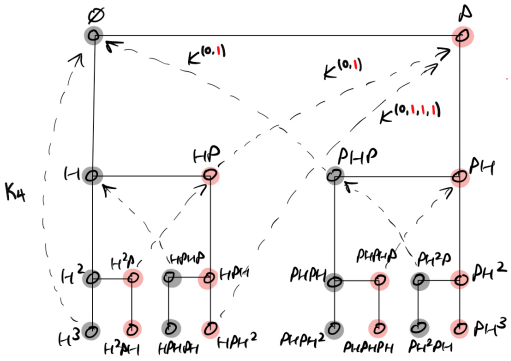
$$\tau_k^{(\mathbf{C})}[H,\ldots,H] = \sum_{\pi\in NC(k)} \prod_{V\in\pi} \kappa_{|V|}^{(\mathbf{C}|_V)}[H,\ldots,H], \tag{145}$$

其中 $\mathbf{C}|_V$ 是块 V中所包含位置按递增顺序排列的颜色序列。与单变量展开的唯一不同之处在于，现在每个块还带有一个颜色序列；参见图 6a。

迹性质保证颜色矩和颜色累积量在颜色序列循环旋转下保持不变。将每个参数都用一个固定的泡利算符 Q 进行共轭也不会改变迹，因此处处交换两种颜色也不会改变矩。由于（145），自由累积量也具有这些对称性。因此，不失一般性，我们可以将第一个颜色规范化为0 。此外，当 $\tau_k^{(\mathbf{C})}$ 和$\kappa_k^{(\mathbf{C})}$ 可由上下文得知时，我们有时也将颜色矩和颜色累积量分别简写为 H 。



(a) 对颜色矩有贡献的带颜色的非交叉划分。颜色区分每个顶点处 H 和QHQ 的副本，而每个块贡献其顶点的颜色累积量。



（b）来自I节的双色 Fock 空间构造。实线竖边表示产生和同色湮灭，横边表示颜色变化（泡利插入）。虚线边表示由高阶或混合颜色累积量加权的湮灭。

图 6：颜色矩$\mathrm{Tr}(H^2QH^3QHQH^2QH^2QH^2Q)$的图示表示。将泡利插入项 Q 全部移至右侧，得到 $H_0^2H_1^3H_0H_1^2H_0^2H_1^2$。

固定颜色序列递推关系。对于颜色序列$\mathbf{C} \in \mathbb{F}_2^k$，我们将连续子序列矩表示为

$$\tau_{p:q}^{(\mathbf{C})}[H,\dots,H] \equiv \begin{cases} \tau(H_{c_p}\cdots H_{c_q}), & p \le q, \\ 1, & p > q. \end{cases} \tag{146}$$

（34）给出了一个递推关系，可利用自由累积量计算矩。现在，我们在颜色框架下给出一个推广。像之前一样，按照包含元素1 的块对非交叉划分进行分解，可得

$$\tau_{1:k}^{(\mathbf{C})}[H,\dots,H] = \sum_{k'=1}^{k} \sum_{1=i_1<\cdots<i_{k'}\le k} \kappa_{k'}^{(\mathbf{C}|_I)} \prod_{j=1}^{k'} \tau_{i_j+1:i_{j+1}-1}^{(\mathbf{C})}, \qquad I \equiv (i_1,\dots,i_{k'}), \quad i_{k'+1} \equiv k+1. \tag{147}$$

等式右侧的每个矩都涉及 $\mathbf{C}$的一个严格更短的子序列。因此，147）给出了递归计算颜色矩的方法，只要提供所需的颜色累积量即可。

G.2 一般颜色框架设置

现在，我们将前面的双色构造扩展到任意数量的颜色 2^s 其中 $s \geq 0$。考虑一列固定的 n 量子比特泡利算符 $\mathbf{Q} \equiv (Q_1, \ldots, Q_s)$，它们在模相位意义下线性无关。我们称这些泡利算符为颜色生成元；s 个线性无关的泡利算符总共生成 2^s 种颜色。我们将 $\mathcal{C} \equiv \langle [Q_1], \ldots, [Q_s] \rangle$ 称为颜色群，其中 $[Q]$ 表示泡利算符 Q 在模相位意义下的等价类。对于每个标签 $\vec{\mathbf{c}} = (c_1, \ldots, c_s) \in \mathbb{F}_2^s$，固定其有序代表元

$$Q_{\vec{\mathbf{c}}} \equiv Q_1^{c_1} \cdots Q_s^{c_s}.$$

模相位意义下的线性无关性意味着映射 $\vec{\mathbf{c}} \mapsto [Q_{\vec{\mathbf{c}}}]$ 是从 $\mathbb{F}_2^s$ 到 $\mathcal{C}$的群同构。我们交替使用标签及其对应的颜色，而 $Q_{\vec{\mathbf{c}}}$ 始终表示 $M_{2^n}(\mathbb{C})$中的选定矩阵代表元。给定一个标签为 $\vec{\mathbf{c}}$的颜色代表元，其对应的共轭哈密顿量为

$$H_{\vec{\mathbf{c}}} \equiv Q_{\vec{\mathbf{c}}} H Q_{\vec{\mathbf{c}}}^\dagger.$$

对于 H 中每个采样泡利项，共轭 $H_{\vec{\mathbf{c}}}$ 只会引入它与该颜色的对易符号：

$$Q_{\vec{\mathbf{c}}} P_j Q_{\vec{\mathbf{c}}}^\dagger = \langle Q_{\vec{\mathbf{c}}}, P_j \rangle \, P_j, \qquad \langle Q_{\vec{\mathbf{c}}}, P_j \rangle = \prod_{a=1}^{s} \langle Q_a, P_j \rangle^{c_a}, \tag{148}$$

其中第二个恒等式成立是因为对易符号对每个自变量都是乘法的 .

颜色矩和累积量的定义、它们的对称性以及（147）基本保持不变：

定义 G.1（颜色矩和颜色累积量）。固定一个哈密顿量 H 和生成元$\mathbf{Q} \equiv (Q_1, \ldots, Q_s)$。对于标签序列 $\mathbf{C} = (\vec{\mathbf{c}}_1, \ldots, \vec{\mathbf{c}}_k) \in \mathcal{C}^k$，定义关于序列 $\mathbf{C}$的颜色矩为

$$\tau_k^{(\mathbf{C})}[H, \ldots, H] \equiv \tau(H_{\vec{\mathbf{c}}_1} \cdots H_{\vec{\mathbf{c}}_k}), \tag{149}$$

关于序列$\mathbf{C}$ 的颜色累积量定义为

$$\kappa_k^{(\mathbf{C})}[H, \ldots, H] \equiv \kappa_k(H_{\vec{\mathbf{c}}_1}, \ldots, H_{\vec{\mathbf{c}}_k}). \tag{150}$$

与之前的唯一区别在于，现在颜色群是一个一般的集合 $\mathcal{C} \cong \mathbb{F}_2^s$ 而不再只是表示单个泡利算符的单个位。令 $\vec{\mathbf{e}}_a$ 为 a的第 $\mathbb{F}_2^s$个标准基向量。对于一般颜色，G.1 小节中恒等算符的推广为

$$Q_a H_{\vec{\mathbf{c}}} = H_{\vec{\mathbf{c}} \oplus \vec{\mathbf{e}}_a} Q_a,$$

其中 $\oplus$ 表示模 2 逐元素加法（异或）。对于指标 $g_1, \ldots, g_r \in [s]$ 以及非负整数 $k_0, \ldots, k_r$，令 $\vec{\mathbf{c}}_0 = \vec{\mathbf{0}}$和 $\vec{\mathbf{c}}_j = \vec{\mathbf{e}}_{g_1} \oplus \cdots \oplus \vec{\mathbf{e}}_{g_j}$。将泡利算符移至乘积右侧可得

$$H^{k_0} Q_{g_1} H^{k_1} \cdots Q_{g_r} H^{k_r} = H_{\vec{\mathbf{c}}_0}^{k_0} H_{\vec{\mathbf{c}}_1}^{k_1} \cdots H_{\vec{\mathbf{c}}_r}^{k_r} Q_{g_1} \cdots Q_{g_r}. \tag{151}$$

因此，颜色记录了这一过程中产生的对易符号，而右侧的乘积则记录了插入的泡利算符之间的关系。我们通常将这一项称为边界项。在第二部分中，我们只处理边界项 $Q_{g_1}\cdots Q_{g_r}$ 在（151）中等于模相位恒等元（$[Q_{g_1}\cdots Q_{g_r}]=[\mathbb{I}]$）的情况。在这种情况下，除相位外，我们可以忽略边界项，只保留插入项产生的颜色。例如，在双色情形下，任意偶数个泡利插入都会使 $Q^{2k}=\mathbb{I}$留在边界处，而非时序关联函数会留下边界项 $ABAB=\langle A,\ B\rangle\mathbb{I}$（在第三部分中，我们将考虑一般情况，即 $Q_{g_1}\cdots Q_{g_r}$不一定等于模相位恒等元）。

H Conc稀疏泡利模型的颜色累积量衰减 l

本节将证明颜色累积量随其阶数增加而衰减，从而扩展C 节和D 节。

H.1 来自对易图的颜色累积量

设 $H=m^{-1/2}\sum_{i=1}^{m}J_iP_i$ 如常为一个泡利哈密顿量。根据（148），颜色不会改变 H中的泡利项，只会改变它们的符号：

$$H_{\vec{\mathbf{c}}}=\frac{1}{\sqrt{m}}\sum_{i=1}^{m}J_i\,\langle Q_{\vec{\mathbf{c}}},P_i\rangle\,P_i. \tag{152}$$

在图表示中，我们通过为每个顶点附加一种颜色来记录这些符号。

定义 H.1（颜色对易图统计量）。固定颜色生成元 $\mathbf{Q}=(Q_1,\ \ldots\ldots,\ Q_s)$。对于具有 $r\equiv|V(g)|\le m$ 个顶点的简单图 g 以及顶点着色 $\mathbf{D}:\ V(g)\to\mathcal{C}$，定义

$$C^{(\mathbf{D})}[g]\equiv\frac{1}{(m)_r}\sum_{\iota:V(g)\hookrightarrow[m]}\left(\prod_{v\in V(g)}\langle Q_{\mathbf{D}(v)},P_{\iota(v)}\rangle\right)\left(\prod_{(u,v)\in E(g)}\langle P_{\iota(u)},P_{\iota(v)}\rangle\right). \tag{153}$$

因此，顶点的颜色会贡献一个额外的对易符号，其中使用固定的泡利算符 $Q_{\mathbf{D}(v)}$ 代替采样得到的算符。着色 $\mathbf{D}\equiv\vec{\mathbf{0}}$ 恢复了 $C[g]$ 定义 C.3中的；每个 $C^{(\mathbf{D})}[g]$ 都属于 $[-1,1]$，而空图的统计量为 1。不同于 $C[g]$，只有当孤立顶点的颜色为 $\vec{\mathbf{0}}$时，才能将其从 g 中移除。

长度为偶数的标签序列 $\mathbf{C}=(\vec{\ }\mathbf{c}_1,\ \ldots\ldots,\ \vec{\ }\mathbf{c}_k)$ 为泡利字的每个位置指定一种颜色。对于 $\pi\in\mathcal{P}_{\text{even}}(k)$，我们按块收集这些颜色，从而得到 $g(\pi)$ 的着色，定义为

$$\mathbf{C}_\pi(V)\equiv\bigoplus_{a\in V}\vec{\mathbf{c}}_a,\qquad V\in\pi. \tag{154}$$

由于对易符号在每个自变量上都是乘法的，$\prod_{a\in V}\langle Q_{\vec{\mathbf{c}}_a},\ P\rangle=\langle Q_{\mathbf{C}_\pi(V)}\ P\rangle$ 对于每个泡利算符 P 都成立，因此泡利算符在其顶点处的所有出现所贡献的符号会合并为一种颜色。按照（45）展开乘积后，再次对拉德马赫符号取平均，留下的仍是其相等指标划分为偶数的词。将 π 的块标记为 π

通过单射 $\iota:\ \pi \hookrightarrow [m]$，这些颜色贡献的标量为 $\prod_{V\in\pi}\langle Q_{\mathbf{C}_\pi(V)}\ P_{\iota(V)}\rangle$，而 引理 C.5计算剩余的迹。因此

$$\mathop{\mathbb{E}}_{\vec{\mathbf{J}}}\tau(H_{\vec{\mathbf{c}}_1}\cdots H_{\vec{\mathbf{c}}_k}) = \frac{1}{m^{k/2}}\sum_{\pi\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)}(m)_{|\pi|}\,C^{(\mathbf{C}_\pi)}[g(\pi)]. \tag{155}$$

此恒等式对所有偶数 $k\le 2m$ 均成立，无需假设无环性。假设截至阶数 k具有无环性，则任何包含某个泡利算符奇数次的词，其迹都为零，因此左侧等于固定实例的颜色矩，恰如式（54）所示。

接下来，我们将介绍无环表达式向颜色累积量的扩展：

定义 H.2（颜色累积量的无环表达式）。对于任意（不一定无环的）稀疏泡利哈密顿量实例 H、偶整数 $2\le k\le 2m$ 以及标签序列 $\mathbf{C}\ \in\mathcal{C}^k$，我们将其 k 阶颜色累积量的无环表达式定义为

$$\tilde{\kappa}_k^{(\mathbf{C})}(\mathbf{P}) \equiv \frac{1}{m^{k/2}}\sum_{\pi\in\tilde{\mathcal{P}}_{\mathrm{even}}(k)}(m)_{|\pi|}\,\chi(\pi)\,C^{(\mathbf{C}_\pi)}[g(\pi)]. \tag{156}$$

对于常值标签序列 $\mathbf{C}\ =(\vec{\mathbf{0}},\dots,\vec{\mathbf{0}})$，这就是 $\tilde{\kappa}_k(\mathbf{P})$，即定义 C.14中的无环表达式。

定理 H.3（对易图统计量给出的颜色累积量）。设 H 是一个稀疏泡利哈密顿量实例，含有 n 个量子比特、m 个项，其自由累积量为 $(\kappa_k)_{k\in\mathbb{N}}$，且截至 $k\le 2m$ 阶具有无环性。对于固定标签序列 $\mathbf{C}\ \in\mathcal{C}^k$，当 k 为奇数时，符号平均颜色累积量满足$\mathbb{E}_{\vec{\mathbf{J}}}\,\kappa_k^{(\mathbf{C})}=0$；当 k 为偶数时，它等于其无环表达式 $\mathbb{E}_{\vec{\mathbf{J}}}\,\kappa_k^{(\mathbf{C})}=\tilde{\kappa}_k^{(\mathbf{C})}(\mathbf{P})$。此外，$\kappa_k^{(\mathbf{C})}=\mathbb{E}_{\vec{\mathbf{J}}}\,\kappa_k^{(\mathbf{C})}$。

证明。证明过程沿用定理 C.15，但每个词多出一个标量。将每个 $H_{\vec{\mathbf{c}}_a}$ 展开为其泡利项后，一个由相同指标的块构成 π 并由ι 标记的词：$\pi\hookrightarrow[m]$ 会因颜色而得到因子 $\prod_{V\in\pi}\langle Q_{\mathbf{C}_\pi(V)}\ P_{\iota(V)}\rangle$。该因子是词中所有位置上的乘积，因此对将该词拆分为非交叉划分的块的任意方式都相同。因此，引理 C.16的证明可原样适用，并给出系数$\chi(\pi)$以及对连通划分 π的限制。利用引理 C.5 对剩余迹按标记求和，得到 $(m)_{|\pi|}\,C^{(\mathbf{C}_\pi)}[g(\pi)]$。

最后，由于无环性，任何长度至多为 k 、且某个泡利算子出现奇数次的词，其迹都为零，因此，阶数至多为 k的颜色矩以及颜色累积量均不依赖于拉德马赫符号。

□

H.2 颜色累积量的集中性

现在，我们利用定义 H.2 中的无环表达式，并将D 节 中的集中性论证扩展到颜色累积量。在本小节中，生成元 $\mathbf{Q}$均固定，且与采样泡利算符 $\mathbf{P}$相互独立；g 表示忽略着色后的 g 的边诱导子图。唯一的新要素是引理 C.6的单侧版本。

引理 H.4（颜色图统计量的混合二阶矩）。设 g 和 g' 为顶点数至多为m 的图，其着色分别为 $\mathbf{D}$ 和 $\mathbf{D}'$。那么

$$\left|\mathop{\mathbb{E}}_{\mathbf{P}}\left[C^{(\mathbf{D})}[g]\,C^{(\mathbf{D}')}[g']\right]\right| \le \begin{cases}\dfrac{|\mathrm{Aut}(\overline{g})|}{(m)_{|\overline{g}|}}+4^{-n}, & \overline{g}\cong\overline{g}',\\ 4^{-n}, & \overline{g}\ncong\overline{g}'.\end{cases} \tag{157}$$

证明。 按照 ι、ι' 引理 C.6的证明，对标记的所有成对组合展开这两个统计量。带标记边集相同的组合按之前的方法计数，每一项的绝对值至多为1；而 4^{-n} 对于满足S_{ι}、$_{\iota'} \neq \varnothing$ 的组合，其界由引理 B.7给出。对标记采用相同的计数方法，即可证明（157）。

□

定理 H.5 （颜色累积量集中）。 令 k_0、k_1 为满足 $4 \le k_0 \le k_1 \le L$ 的偶整数，并设

$$A \max\{k_1^3,\, 2^{4s} k_1\} \le m \le \mathrm{poly}(n), \qquad L \le \gamma n / \log n, \tag{158}$$

其中，当 $A > 0$ 足够大且 $\gamma > 0$ 足够小时。则对于每个 $0 < \eta < 1$，

$$\sum_{\substack{k_0 \le k \le k_1 \\ k \ even}} \sum_{\substack{\mathbf{C} \in \mathcal{C}^k \\ \vec{\mathbf{c}}_1 = \mathbf{0}}} |\kappa_k^{(\mathbf{C})}| \le \frac{2}{\sqrt{\eta}} \left(\frac{C\, 2^{4s} k_0}{m} \right)^{k_0/4} \tag{159}$$

以至少 $1 - \eta - e^{-\Omega(n)}$ 的概率，对于某个绝对常数 $C > 0$，有

证明。 对于每个偶 $4 \le k \le k_1$ 以及固定的颜色序列 $\mathbf{C}$，引理 D.8 的证明适用，只需将其中的无颜色对应结果替换为引理 H.4 。事实上，取绝对值后，粘合论证仅取决于底层划分和 χ，而它们不受颜色影响。因此，引理 D.8给出

$$\mathop{\mathbb{E}}_{\mathbf{P}} \left[|\tilde{\kappa}_k^{(\mathbf{C})}|^2 \right] \le \left(\frac{Ck}{m} \right)^{k/2}. \tag{160}$$

对所有 $\mathbf{C}$ 均成立。

首个颜色为 $\mathbf{0}$ 的颜色序列共有 $2^{s(k-1)}$ 个。展开平方并对每个交叉项应用柯西–施瓦茨不等式，可得

$$\mathop{\mathbb{E}}_{\mathbf{P}} \left[\left(\sum_{\substack{k_0 \le k \le k_1 \\ k \text{ even}}} \sum_{\substack{\mathbf{C} \in \mathcal{C}^k \\ \vec{\mathbf{c}}_1 = \mathbf{0}}} |\tilde{\kappa}_k^{(\mathbf{C})}| \right)^2 \right] \le \left(\sum_{\substack{k_0 \le k \le k_1 \\ k \text{ even}}} 2^{s(k-1)} \left(\frac{Ck}{m} \right)^{k/4} \right)^2 \le 4 \left(\frac{C\, 2^{4s} k_0}{m} \right)^{k_0/2}. \tag{161}$$

最后一个不等式可通过与定理 D.9证明中相同的几何求和得到，因为$m \ge A\, 2^{4s} k_1$ 对于充分大的 A成立。

对该和的平方应用马尔可夫不等式，可得无环表达式的所需界，其失败概率至多为 η。最后，引理 B.2和定理 H.3将这些表达式与实际的颜色累积量同时对应起来，除以概率 $e^{-\Omega(n)}$之外。

□

推论 H.6 (更强的超收缩性界)。 如果另外固定了 k_0 和 s，且生成元除相位外相互独立，那么对于每个充分大的 n，$\delta = 1/\mathrm{poly}(n)$，以及$m \le \mathrm{poly}(n)$，

$$\sum_{\substack{k_0 \le k \le k_1 \\ k \ even}} \sum_{\substack{\mathbf{C} \in \mathcal{C}^k \\ \vec{\mathbf{c}}_1 = \vec{\mathbf{0}}}} \left| \kappa_k^{(\mathbf{C})} \right| \le C m^{-k_0/4} (\log n)^{D_{k_0,s}/2}, \qquad D_{k,s} \equiv \binom{k/2}{2} + \frac{sk}{2}, \tag{162}$$

其概率至少为 $1 - \delta - e^{-\Omega(n)}$。

推论 H.6的证明见T 节。

注 H.7。 假设 猜想 D.7成立，则定理 H.5 $m \ge A\max\{k_1^3,\, 2^{4s} k_1\}$ in中的下界假设，以及 推论 H.6 中的下界假设，均可替换为 $m \ge \max\{A\, 2^{4s} k_1, n\}$。

I 多色福克空间构造

我们还可以通过量子行走来诠释颜色矩和累积量，从而扩展 E 节中的标量构造。该构造将用于分析后续的若干算法，包括 J 节中的相关函数以及 L节中的尖峰泡利模型。

定义希尔伯特空间

$$\mathcal{H}_{\mathcal{C}} \equiv \ell^2(\mathcal{C}) \cong \mathrm{span}_{\mathbb{C}}\{|c\rangle : \vec{\mathbf{c}} \in \mathbb{F}_2^s\}, \tag{163}$$

其中，基向量 $|c\rangle$由颜色群中颜色代表元的标签索引。我们采用定义 E.1中的完整福克空间构造，并加入一个寄存器，用于表示当前行走的颜色：

$$\mathcal{F}(\mathcal{H}_{\mathcal{C}}) \otimes \mathcal{H}_{\mathcal{C}}, \qquad |\mathbf{W}; c\rangle \equiv |\mathbf{W}\rangle \otimes |c\rangle\,. \tag{164}$$

$\mathbf{W}$ 是一个任意长度的标签序列，按产生顺序记录开放腿的颜色； $|c\rangle$ 表示一个标签 $\vec{\mathbf{c}}$ ，用于记录状态的当前颜色。在本节中，我们只使用 $s = 1$ （2 种颜色，用于 TOC、尖峰泡利模型和热期望）和 $s = 2$ （4 种颜色，用于 OTOC）的显式特例，但也给出一种完全一般的构造，该构造可以推广到例如任意多体关联和任意多个 Pauli 尖峰。

用于 TOC 的双色 Fock 空间构造。在双色情形中，我们有一个非（模相位）恒等的泡利生成元。我们在福克空间中用一个算子 b 表示这个泡利算符，并将其称为尖峰算子（类似于尖峰泡利模型）。标签序列$\mathbf{W}$ 可以表示为长度为 k 的二进制字符串，其中 $k \geq 0$，而当前颜色 c 可以用一个比特表示。

因此，产生、湮灭和尖峰算子分别作用为

$$\begin{aligned} &a^\dagger\,|\mathbf{W}; c\rangle = |\mathbf{W}c; c\rangle\,, \quad a\,|\mathbf{W}c'; c\rangle = \delta_{c,c'}\,|\mathbf{W}; c\rangle\,, \\ &a\,|\emptyset; c\rangle = 0, \qquad\qquad b\,|\mathbf{W}; c\rangle = |\mathbf{W}; c \oplus 1\rangle\,, \end{aligned} \tag{165}$$

其中 $\mathbf{W}c$ 表示将比特 c 追加到字符串 $\mathbf{W}$的末尾。我们有 $a = (a^\dagger)^\dagger$、 $b = b^\dagger$、$b^2 = \mathbb{I}$，并且这三个算子的范数均为一。尖峰算子会改变当前颜色，但不会影响词中已经存储的腿；而产生算子和湮灭算子则根据当前颜色发挥作用。真空态为 $|\emptyset;\ 0\rangle$。

用于 OTOC 的四色 Fock 空间构造。在四色情形中，我们有两个相互独立的泡利生成元，二者在模相位意义下都不等于恒等元。我们用两个尖峰算子 b_1， b_2在福克空间中表示这些泡利算符。标签序列 $\mathbf{W}$ 可以表示为长度为 $2k$ 的二进制字符串，其中 $k \geq 0$，而 $|c\rangle$ 表示当前颜色的标签 $\vec{\mathbf{c}} = c_1 c_2$，该标签由两个比特组成。

因此，产生、湮灭和尖峰算子作用为

$$\begin{aligned} &a^\dagger\,|\mathbf{W}; c\rangle = |\mathbf{W}c; c\rangle\,, && a\,|\mathbf{W}c'; c\rangle = \delta_{c,c'}\,|\mathbf{W}; c\rangle\,, && a\,|\emptyset; c\rangle = 0, \\ &b_1\,|\mathbf{W}; c_1c_2\rangle = |\mathbf{W}; (c_1 \oplus 1)c_2\rangle\,, && b_2\,|\mathbf{W}; c_1c_2\rangle = \langle Q_1, Q_2\rangle^{c_1}\,|\mathbf{W}; c_1(c_2 \oplus 1)\rangle\,. \end{aligned} \tag{166}$$

其中， $\mathbf{W}c$ 表示将比特 c_1 和 c_2 追加到字符串 $\mathbf{W}$的末尾。类似地，我们有$a = (a^\dagger)^\dagger$, $b_i = b_i^\dagger$, $b_i^2 = \mathbb{I}$对于 $i \in \{1, 2\}$，且这四个算子的范数均为 1。尖峰算子 b_1和 b_2 的定义遵循 Q_1, Q_2 经由 $b_1 b_2 = \langle Q_1, Q_2\rangle b_2 b_1$所满足的（反）对易关系。真空态为 $|\emptyset; 00\rangle$。

广义颜色福克空间与跳跃算子。 对于一般的颜色生成元序列 $\mathbf{Q} \equiv (Q_1, \dots, Q_s)$，$\mathbf{W}$ 是 $\mathcal{C} \cong \mathbb{F}_2^s$中的一个标签序列，而 $|c\rangle$ 由带有标签 $\vec{\mathbf{c}} \in \mathcal{C}$的颜色索引。现在我们有一组尖峰算子 $b_1, \dots b_s$，它们是厄米算子、对合，并遵循泡利算符 $Q_1, \dots Q_s$各自的对易关系。我们将真空态记为 $\Omega_s \equiv |\emptyset; 0^s\rangle$。

定义按颜色索引的产生算子和湮灭算子会很方便，它们模拟用泡利算符对哈密顿量 H 进行共轭：

$$a_{\vec{\mathbf{c}}} \equiv b_1^{c_1} \cdots b_s^{c_s}\, a\, b_s^{c_s} \cdots b_1^{c_1}, \qquad \vec{\mathbf{c}} \equiv (c_1, \dots, c_s) \tag{167}$$

以及 $a^\dagger_{\vec{\mathbf{c}}} = (a_{\vec{\mathbf{c}}})^\dagger$。利用这些按颜色索引的算子，我们可以定义定义 E.3的类比，它可推广到任意颜色群：

定义 I.1 （福克空间颜色跳跃算子）。固定生成元 $\mathbf{Q} \equiv (Q_1, \dots, Q_s)$。设 H 为一个有界厄米算子，其颜色累积量为 $(\kappa_k^{(\mathbf{C})})_{k \in \mathbb{N}, \mathbf{C} \in \mathcal{C}^k}$，满足 $\kappa_2 = 1$，并且任意颜色的所有不超过 L 阶的奇数阶颜色累积量均为零。对于所有偶数截断值 $2 \le \ell \le L$，我们定义福克空间颜色跃迁算子：

$$\mathcal{T}_\ell^{(\mathbf{Q})} \equiv a^\dagger + a + \sum_{\substack{4 \le k \le \ell \\ k \text{ even}}} \kappa_k a^{k-1} + \sum_{\substack{2 \le k \le \ell \\ k \text{ even}}} \sum_{\substack{\mathbf{C} \in \mathcal{C}^k,\ \vec{\mathbf{c}}_1 = \vec{\mathbf{0}} \\ \mathbf{C} \neq (\vec{\mathbf{0}}, \dots, \vec{\mathbf{0}})}} \kappa_k^{(\mathbf{C})} a_{\vec{\mathbf{c}}_k} \cdots a_{\vec{\mathbf{c}}_2}, \quad \mathbf{C} \equiv (\vec{\mathbf{c}}_1, \dots, \vec{\mathbf{c}}_k). \tag{168}$$

类比命题 E.5 $\hat{}$ $\mu_k^{(\ell)}$ 中的截断矩，对于标签序列$\mathbf{C} \in \mathcal{C}^k$，我们定义截断颜色矩

$$\hat{\mu}^{(\ell; \mathbf{C})} \equiv \sum_{\pi \in NC(k)} \prod_{V \in \pi} \kappa_{|V|}^{(\mathbf{C}|_V)}\, \mathbf{1}_{[|V| \le \ell]}. \tag{169}$$

截断颜色矩是递推关系 (147) 的输出，其中所有阶数大于 ℓ 的颜色累积量都设为零；根据 (145)，它们等于 $\tau_k^{(\mathbf{C})}$ 在 $k \le \ell$ 下的颜色矩。

下面的命题表明，该福克空间跳跃算子与阶数不超过 ℓ 的颜色矩相匹配。

命题 I.2. 固定一个满足 $\mathcal{T}_\ell^{(\mathbf{Q})}$ 定义 *I.1* 条件的颜色跃迁算子。设$g_1, \dots, g_r \in [s]$ 为插入指标，且每个生成元出现偶数次，因此 $\bigoplus_{i=1}^r \vec{\mathbf{e}}_{g_i} = \vec{\mathbf{0}}$且 $Q_{g_1} \cdots Q_{g_r} = \zeta \mathbb{I}$，其中相位为 $|\zeta| = 1$。那么对所有满足 $k_1, \dots, k_r \ge 0$ 且满足$\sum_{i=1}^r k_i \le \ell$ 的整数，

$$\langle \Omega_s | \left(\mathcal{T}^{(\mathbf{Q})}_\ell\right)^{k_1}_{g_1} \left(\mathcal{T}_\ell^{(\mathbf{Q})}\right)^{k_2} b_{g_2} \cdots b_{g_{r-1}} \left(\mathcal{T}_\ell^{(\mathbf{Q})}\right)^{k_r} b_{g_r} |\Omega_s\rangle = \overline{\mathrm{Tr}}(H^{k_1} Q_{g_1} H^{k_2} Q_{g_2} \cdots Q_{g_{r-1}} H^{k_r} Q_{g_r}) \tag{170}$$

证明。 将探针移至右侧，得到边界因子 ζ 和标签序列 $\mathbf{C}$，根据（151）；假设 $\bigoplus_i \vec{\mathbf{e}}_{g_i} = \vec{\mathbf{0}}$ 意味着边界项是标量值。按照从右向左的应用顺序读取 Fock 乘积，会在哈密顿量位置产生相同的颜色，而插入项 b_{g_i} 会使当前颜色寄存器返回到 $\vec{\mathbf{0}}$，且相位相同 ζ。

如命题 E.5所述，每个返回游走都对应于哈密顿量 $k \equiv \sum_i k_i$位点的一个非交叉划分。大小为 k' 的块中最右侧的位点产生腿，而其最左侧的位点则移除前面的开放腿及其颜色累积量。由于产生操作会追加字母，系数

按当前颜色在前、存储的后缀按产生顺序逆序排列。因此，这正是$a_{\vec{\mathbf{c}}_{k'}}\cdots a_{\vec{\mathbf{c}}_2}$在定义 I.1中的作用，只是在此之前将当前颜色转换为 $\vec{\mathbf{0}}$。

每个块都继承 $\mathbf{C}$的一个子序列。每个块的大小至多为 $k\le\ell$，且奇块的贡献为零。因此，对权重求和得到$\zeta\sum_{\pi\in NC(k)}\prod_{V\in\pi}\kappa^{(\mathbf{C}|_V)}{}_{|V|}$，根据（145），这等于所需的迹。

□

J 计算关联函数

本节中，我们将利用颜色累积量和颜色 Fock 空间构造，为稀疏泡利模型的时间序关联函数和非时间序关联函数的计算提供高效的经典算法。（155）给出了符号平均系数的偶划分展开；在（标准的）无环性成立至 L 阶的条件下，该展开与固定实例的系数在 L 阶以内一致，而定理 H.3和H.5则给出了它们的集中界。

时间序关联函数和非时间序关联函数所规定的标签序列族有限，因此我们可以利用（147）中的标量递推关系直接计算各阶矩，而无需在运行时间上付出乘法 2^L 因子。我们将在第三部分讨论这种直接方法不适用、需要采用优化方法的情形。

在本节中，$A,\ B\in\{\mathbb{I},X,Y,Z\}^{\otimes n}$是两个不同的非恒等算符 n 量子比特泡利算符（等价地，A 和 B 在模相位意义下独立），且它们的选取独立于采样得到的泡利项。回顾我们在 $\beta=0$ 处对时间序关联函数的定义；我们计算其泰勒展开，得到

$$G_0^A(t)\equiv\overline{\mathrm{Tr}}(A(t)A(0))=\sum_{h_0,h_1=0}^{\infty}\frac{(-1)^{h_1}(it)^{h_0+h_1}}{h_0!\,h_1!}\overline{\mathrm{Tr}}(H^{h_0}AH^{h_1}A).$$

将 A 的第一个副本移过 H^{h_1} 项，会交换其颜色，并使它与第二个副本 A相消：

$$G_0^A(t)=\sum_{h_0,h_1=0}^{\infty}\frac{(-1)^{h_1}(it)^{h_0+h_1}}{h_0!\,h_1!}\overline{\mathrm{Tr}}(H_0^{h_0}H_1^{h_1})=\sum_{h_0,h_1=0}^{\infty}\frac{(-1)^{h_1}(it)^{h_0+h_1}}{h_0!\,h_1!}\tau_{h_0+h_1}^{(\mathbf{C}_{h_0,h_1})}[H,\dots,H],\quad(171)$$

其中，我们定义 $H_0\equiv H$、$H_1\equiv AHA$ 和 $\mathbf{C}_{h_0,\ h_1}\equiv 0^{h_0}1^{h_1}$。

对于非时间序关联函数，我们按颜色索引 H 四段的重数，颜色是它们各自获得的颜色。令 $\mathbf{Q}=(A,\ B)$，得到四个共轭算符

$$H_{00}=H,\qquad H_{10}=AHA,\qquad H_{01}=BHB,\qquad H_{11}=ABHBA,$$

对于 $\vec{\mathbf{h}}\equiv(h_{00},\ h_{10},\ h_{11},\ h_{01})\in\mathbb{N}^4$，我们记作 $|\vec{\mathbf{h}}|\equiv h_{00}+h_{10}+h_{11}+h_{01}$，$\vec{\mathbf{h}}!\equiv h_{00}!\,h_{10}!\,h_{11}!\,h_{01}!$，并且

$$\mathbf{C}_{\vec{\mathbf{h}}}\equiv(00)^{h_{00}}(10)^{h_{10}}(11)^{h_{11}}(01)^{h_{01}}.$$

展开指数函数，并根据（151）将四个插入项移至右侧后，得到 $ABAB=$

$\langle A,\ B\rangle_{\mathbb{I}}$，因此

$$
\begin{aligned}
F_0^{A,B}(t) \equiv \overline{\mathrm{Tr}}(A(t)B(0)A(t)B(0)) &= \sum_{\vec{\mathbf{h}}\in\mathbb{N}^4} \frac{(-1)^{h_{10}+h_{01}}(it)^{|\vec{\mathbf{h}}|}}{\vec{\mathbf{h}}!}\,\overline{\mathrm{Tr}}(H^{h_{00}}AH^{h_{10}}BH^{h_{11}}AH^{h_{01}}B) \\
&= \sum_{\vec{\mathbf{h}}\in\mathbb{N}^4} \frac{(-1)^{h_{10}+h_{01}}(it)^{|\vec{\mathbf{h}}|}}{\vec{\mathbf{h}}!}\,\overline{\mathrm{Tr}}\big(H_{00}^{h_{00}}H_{10}^{h_{10}}H_{11}^{h_{11}}H_{01}^{h_{01}}\,ABAB\big) \qquad (172) \\
&= \sum_{\vec{\mathbf{h}}\in\mathbb{N}^4} \frac{(-1)^{h_{10}+h_{01}}(it)^{|\vec{\mathbf{h}}|}}{\vec{\mathbf{h}}!}\,\langle A,B\rangle\,\tau_{|\vec{\mathbf{h}}|}^{(\mathbf{C}_{\vec{\mathbf{h}}})}[H,\dots,H].
\end{aligned}
$$

这个恒等式对每个实例和每个阶数都精确成立，即使不满足无环性也是如此。

J.1 截断颜色矩和累积量的近似误差

现在我们证明引理 F.6 在关联函数中的对应结果：仅计算至 ℓ 阶的颜色累积量，以及仅计算至 L 阶的颜色矩所造成的误差。对于偶整数 $\ell \geq 2$，我们记 $\mathcal{T}_\ell \equiv \mathcal{T}_\ell^{(\mathbf{Q})}$ 为定义 I.1 中的颜色跃迁算子，它由所有阶数不超过 ℓ的颜色累积量构成；该算子对每个标签序列求和，只有算法会限制为其所需的标签序列。对于时间序关联函数，我们取$\mathbf{Q} = (A)$，对于非时间序关联函数，我们取$\mathbf{Q} = (A, B)$，并在 $b \equiv b_1$ 时记为 $s = 1$。

仿照 $\mathcal{K}(k')$ 中引理 F.6的做法，我们定义

$$
\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(k') \equiv \sum_{\substack{2\leq k\leq k' \\ k \text{ even}}} \sum_{\substack{\mathbf{C}\in\mathcal{C}^k,\ \vec{\mathbf{c}}_1=\vec{\mathbf{0}} \\ (k,\mathbf{C})\neq(2,(\vec{\mathbf{0}},\vec{\mathbf{0}}))}} \left|\kappa_k^{(\mathbf{C})}\right|. \qquad (173)
$$

该求和取 $\mathcal{T}_{k'} - (a^\dagger + a)$中所有系数的绝对值之和。与 $\mathcal{K}(k')$相比，它还包含非零颜色的标签序列，包括$\kappa_2^{(\vec{\mathbf{0}},\vec{\mathbf{c}})} = \tau(HH_{\vec{\mathbf{c}}})$ 在 $\vec{\mathbf{c}} \neq \vec{\mathbf{0}}$时对应的混合颜色二次累积量；定理 H.5 并未涵盖这一项，其上界将由引理 J.3 单独给出。

引理 J.1（截断颜色矩的福克空间矩阵元）。设 H 满足 定义 *I.1* 中关于截断 ℓ的假设。对于所有整数 $h_0,\ h_1 \geq 0$ 以及所有 $\vec{\mathbf{h}} \in \mathbb{N}^4$,

$$
\langle\Omega_1|\,\mathcal{T}_\ell^{h_0}\,b\,\mathcal{T}_\ell^{h_1}\,b\,|\Omega_1\rangle = \hat{\mu}^{(\ell;\mathbf{C}_{h_0,h_1})}, \qquad (174)
$$

$$
\langle\Omega_2|\,\mathcal{T}_\ell^{h_{00}}\,b_1\,\mathcal{T}_\ell^{h_{10}}\,b_2\,\mathcal{T}_\ell^{h_{11}}\,b_1\,\mathcal{T}_\ell^{h_{01}}\,b_2\,|\Omega_2\rangle = \langle A,B\rangle\,\hat{\mu}^{(\ell;\mathbf{C}_{\vec{\mathbf{h}}})}. \qquad (175)
$$

特别地，对于 $h_0 + h_1 \leq \ell$ 和 $|\vec{\mathbf{h}}| \leq \ell$，左侧等于方程 $\mathrm{Tr}(H^{h_0}AH^{h_1}A)$和 $\mathrm{Tr}(H^{h_{00}}\overline{A}H^{h_{10}}BH^{h_{11}}AH^{h_{01}}B)$ 中的系数 式 (171) 和(172)中的系数。

证明。 命题 I.2 的证明中的游走展开 对任意阶数均成立：返回游走是哈密顿量位置的一个非交叉划分，每个块都携带其标签子序列对应的颜色累积量，而插入项会使颜色寄存器返回到 $\vec{\mathbf{0}}$，其边界相位为 1，当 AA 且 $\langle A$时，$B\rangle$，当 $ABAB$ 时，由式（172）可得。一个块仅当其大小不超过 ℓ时才有贡献，这给出了式（169）中的指示函数。最后一条陈述由 命题 I.2 以及 式（171）和 （172）得出。 □

引理 J.2（关联函数截断的近似误差）。设 H 是一个有界厄米算子，其颜色累积量为 $(\kappa_k^{(\mathbf{C})})_{k\in\mathbb{N},\ \mathbf{C}\in\mathcal{C}^k}$ 相对于$\mathbf{Q}$定义，其中 $\kappa_2 = 1$，且所有奇数阶颜色累积量在阶数 L 以内均为零。固定偶整数 ℓ、L，其中 $2 \le \ell < L$，并取时间 $t \ge 0$。则对于$\mathbf{Q} = (A)$，

$$\begin{aligned}&\left| G_0^A(t) - \sum_{\substack{h_0,h_1\ge 0\\ h_0+h_1\le L}} \frac{(-1)^{h_1}(it)^{h_0+h_1}}{h_0!\,h_1!}\,\hat{\mu}^{(\ell;\mathbf{C}_{h_0,h_1})} \right| \\ &\qquad \le e^{2t\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L)} \left[2t\big(\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L) - \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell)\big) + \frac{\big(4t + 2t\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L)\big)^L}{L!} \left(2 + \frac{4t + 2t\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L)}{L+1}\right)\right],\end{aligned} \tag{176}$$

且对于 $\mathbf{Q} = (A, B)$,

$$\begin{aligned}&\left| F_0^{A,B}(t) - \langle A, B\rangle \sum_{\substack{\vec{\mathbf{h}}\in\mathbb{N}^4\\ |\vec{\mathbf{h}}|\le L}} \frac{(-1)^{h_{10}+h_{01}}(it)^{|\vec{\mathbf{h}}|}}{\vec{\mathbf{h}}!}\,\hat{\mu}^{(\ell;\mathbf{C}_{\vec{\mathbf{h}}})} \right| \\ &\qquad \le e^{4t\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L)} \left[4t\big(\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L) - \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell)\big) + \frac{\big(8t + 4t\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L)\big)^L}{L!} \left(2 + \frac{8t + 4t\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L)}{L+1}\right)\right].\end{aligned} \tag{177}$$

证明。我们应用 引理 P.3。由于 a, $a^\dagger$ 和 $b_1, \dots, b_s$ 的范数均为一，因此每个单项式 a^{k-1} 和 $a_{\vec{\mathbf{c}}_k} \cdots a_{\vec{\mathbf{c}}_2}$ 在 定义 I.1 中的范数至多为一，所以由三角不等式可得 $\|\mathcal{T}_{\ell'} - (a^\dagger + a)\| \le \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell')$ 且对于所有偶数 $0 \le \ell' \le L$,

$$\|\mathcal{T}_{\ell'}\| \le 2 + \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell'), \qquad \|\mathcal{T}_L - \mathcal{T}_\ell\| \le \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L) - \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell), \tag{178}$$

且 推论 F.3 应用于自伴部分 $a^\dagger + a$ 后，对所有实数 u,

$$\left\| e^{i\mathcal{T}_{\ell'} u} \right\| \le e^{|u|\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell')}. \tag{179}$$

由于 L 是偶数，(127) 和 $\mathcal{K}(L) \le \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L)$ 给出

$$\overline{\mathrm{Tr}}(|H|^L) = \overline{\mathrm{Tr}}(H^L) \le (2 + \mathcal{K}(L))^L \le (2 + \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L))^L. \tag{180}$$

因此，通用引理中的算子界和偶数阶矩界对于 $S = a^\dagger + a$、$R = 2$ 以及颜色和 $\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell)$、$\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L)$ 和 $\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L) - \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell)$ 均成立。

对于时间序关联函数，取 $X = H$、$(t_1, t_2) = (t, -t)$、$(U_1, U_2) = (A, A)$、$(V_1, V_2) = (b, b)$，以及 $|\Omega\rangle = |\Omega_1\rangle$。由引理 J.1，矩匹配假设成立，且截至次数$L$ 的泰勒多项式就是式 (176) 中的和。应用引理 P.3，并取 $T = 2t$，即可证明式 (176)。

对于非时间序关联函数，取 $(t_1, t_2, t_3, t_4) = (t, -t, t, -t)$ 和 $(U_1, U_2, U_3, U_4) = (A, B, A, B)$。令 $(V_1, V_2, V_3, V_4) = (b_1, b_2, b_1, b_2)$，且 $|\Omega\rangle = |\Omega_2\rangle$。同一个矩匹配引理将泰勒多项式与式 (177) 中的和对应起来，其中包括边界相位 $\langle A, B\rangle$。应用引理 P.3，取 $T = 4t$，即可证明 (177)。 □

为应用 引理 J.2，我们以高概率界定 $\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L)$和 $\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L) - \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell)$。定理 H.5涵盖所有自由累积量阶数 $k \ge 4$，我们将用以下引理界定混合颜色二次累积量。

引理 J.3（混合二次颜色累积量）。 设生成元 $Q_1,\dots,Q_s$ 彼此独立（模去相位），且独立于所采样的泡利项固定，因此对于 $\vec{\mathbf{c}}\neq\vec{\mathbf{0}}$，有 $[Q_{\vec{\mathbf{c}}}]\neq[\mathbb{I}]$。对于任意 $\delta\in(0,1)$，以至少 $1-\delta$ 的概率（对泡利项而言），

$$\sum_{\vec{\mathbf{c}}\neq\vec{\mathbf{0}}}\left|\frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m}\langle Q_{\vec{\mathbf{c}}},P_j\rangle\right|\le 2^s\sqrt{\frac{2\log(2^{s+1}/\delta)}{m}}. \tag{181}$$

此外，只要 H 在阶数 2 以内无环，我们就有

$$\kappa_2^{(\vec{\mathbf{0}},\vec{\mathbf{c}})}=\tau(HH_{\vec{\mathbf{c}}})=\frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m}\langle Q_{\vec{\mathbf{c}}},P_j\rangle$$

对于每个 $\vec{\mathbf{c}}$，这意味着 (181) 左侧等于 $\sum_{\vec{\mathbf{c}}\neq\vec{\mathbf{0}}}\left|\kappa_2^{(\vec{\mathbf{0}},\vec{\mathbf{c}})}\right|$。

证明。 根据（148），

$$\tau(HH_{\vec{\mathbf{c}}})=\frac{1}{m}\sum_{i,k}J_iJ_k\langle Q_{\vec{\mathbf{c}}},P_k\rangle\tau(P_iP_k).$$

无环 性阻止了 $P_i\propto\mathbb{I}$和 $P_i\propto P_k$对于 $i\neq k$，因此 $\tau(P_iP_k)=\delta_{ik}$，$\tau(H)=0$，一 d

$$\kappa_2^{(\vec{\mathbf{0}},\vec{\mathbf{c}})}=\tau(HH_{\vec{\mathbf{c}}})-\tau(H)\tau(H_{\vec{\mathbf{c}}})=\frac{1}{m}\sum_{j}\langle Q_{\vec{\mathbf{c}}},P_j\rangle.$$

对于固定的泡利算符 $Q_{\vec{\mathbf{c}}}\neq\mathbb{I}$，所有泡利串中恰有一半与其反对易，因此符号$\langle Q_{\vec{\mathbf{c}}},\ P_j\rangle$、 $j\in[m]$在 $\{\pm1\}$ 上相互独立且服从均匀分布。Hoeffding 不等式给出

$$|\sum_{j}\langle Q_{\vec{\mathbf{c}}},P_j\rangle|\le\sqrt{2m\log(2^{s+1}/\delta)}$$

除非以概率 $\delta/2^s$，并对 2^s-1 个标签 $\vec{\mathbf{c}}\neq\vec{\mathbf{0}}$ 应用并集界可得（181）。 □

推论 J.4（关于颜色截断和的界）。 固定任意 $s\ge0$ 个模相位独立且与 H独立的生成元。存在常数 A、C、$\gamma>0$，使得对于充分大的 n，当 $n\le m\le\mathrm{poly}(n)$时，失败概率为 $\delta=1/\mathrm{poly}(n)$，且对于偶数 $2\le\ell<L\le\gamma n/\log n$ 满足$m\ge AL^3$，我们同时有

$$\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L)\le C\sqrt{\frac{\log n}{m}},\qquad \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L)-\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell)\le\delta^{-1/2}\left(\frac{C(\ell+2)}{m}\right)^{(\ell+2)/4} \tag{182}$$

以至少 $1-\delta-e^{-\Omega(n)}$ 的概率成立。

证明。 应用 推论 H.6，其失败概率为 δ/n^2，并应用引理 J.3，其失败概率为δ/n^2。高阶和至多为 $C(\log n)^{s+1/2}/m$，由于 s 是固定的、 $m\ge n$，且 $\delta=1/\mathrm{poly}(n)$，因此该项可由混合二次界 $C\sqrt{\log n/m}$ 吸收。我们在较低阶 $\ell+2$ 处应用 定理 H.5，并取 $\eta=\delta/2$ 来控制省略和。由并集界可得这两个不等式均成立。

□

算法 2 时间序列关联算法 要求： $H \sim$ 稀疏泡利哈密顿量、非恒等泡利算符 A、时间 $t \geq 0$、偶数 $2 \leq \ell < L \leq \gamma n / \log n$。1：使用直接泡利展开计算所有 $1 \leq h_0 + h_1 \leq \ell$ 对应的（精确）颜色矩 $\hat{\mu}^{(\ell;\mathbf{C}_{h_0,h_1})}$。2：使用矩-累积量递推计算所有 $1 \leq h_0 + h_1 \leq \ell$ 对应的颜色累积量 $\kappa^{(\mathbf{C}_{h_0,h_1})}$ $_{h_0+h_1}$。3：使用（147）和命题 J.5 计算所有 $\ell < h_0 + h_1 \leq L$ 对应的（近似）颜色矩 $\hat{\mu}^{(\ell;\mathbf{C}_{h_0,h_1})}$。

4: **返回**

$$\hat{G}_0^A(t) \equiv \sum_{\substack{h_0,h_1 \geq 0 \\ h_0+h_1 \leq L}} \frac{(-1)^{h_1}(it)^{h_0+h_1}}{h_0!\, h_1!}\, \hat{\mu}^{(\ell;\mathbf{C}_{h_0,h_1})}. \tag{183}$$

算法 3 非时间序关联算法

要求： $H \sim$ 稀疏泡利哈密顿量、互不相同的非恒等泡利算符 A、B、时间 $t \geq 0$、偶数 $2 \leq \ell < L \leq \gamma n /$对数 n。1：使用直接泡利展开，计算所有满足 $\vec{\mathbf{h}} \in \mathbb{N}^4$ 且 $1 \leq |\vec{\mathbf{h}}| \leq \ell$ 的（精确）颜色矩 $\hat{\mu}^{(\ell;\mathbf{C}_{\vec{\mathbf{h}}})}$。2：使用矩-累积量递推关系，计算所有满足 $1 \leq |\vec{\mathbf{h}}| \leq \ell$ 的颜色累积量 $\kappa^{(\mathbf{C}_{\vec{\mathbf{h}}})}$ $_{|\vec{\mathbf{h}}|}$。3：使用（147）和命题 J.5，计算所有满足 $\ell < |\vec{\mathbf{h}}| \leq L$ 的（近似）颜色矩 $\hat{\mu}^{(\ell;\mathbf{C}_{\vec{\mathbf{h}}})}$。

4: **返回**

$$\hat{F}_0^{A,B}(t) \equiv \langle A, B \rangle \sum_{\substack{\vec{\mathbf{h}} \in \mathbb{N}^4 \\ |\vec{\mathbf{h}}| \leq L}} \frac{(-1)^{h_{10}+h_{01}}(it)^{|\vec{\mathbf{h}}|}}{\vec{\mathbf{h}}!}\, \hat{\mu}^{(\ell;\mathbf{C}_{\vec{\mathbf{h}}})}. \tag{184}$$

J.2 完整关联函数算法

这些算法仅计算标签序列 $\mathbf{C}_{h_0,\, h_1}$分别对应的 $\mathbf{C}_{\vec{\mathbf{h}}}$颜色矩和累积量；它们出现在公式（171）和（172）中；分析中的跳跃算子包含所有其他标签序列，但它们不会进入输出。

这些标签序列的每个子序列和连续子字都属于同一族，并允许指数为零。因此，递推关系所需的每个矩和累积量都包含在已存储的量中。

命题 J.5（固定截断下的运行时间）。 设 $r = 2$ 表示 *TOC*，且 $r = 4$ 表示 *OTOC*。对于满足 $2 \leq \ell < L$ 和 $m \geq CL^3$ 以及 $L \leq \gamma n / \log n$的偶整数算法 *2* 和 *3* 可以在至多

$$\mathcal{O}\left(n \ell^{r+1} \left(\frac{2em}{\ell} \right)^{\ell/2} \right). \tag{185}$$

证明。 共有 $\mathcal{O}(\ell^r)$ 个低阶颜色词。将每个词的两半在

泡利基中展开并收缩其系数，每个词需要 $\mathcal{O}(n\ell)\binom{m}{\ell/2}$ 的计算量，因此总计算量为 $\mathcal{O}\big(n\ell^{r+1}\binom{m}{\ell/2}\big)$。固定探针的对易符号需要 $\mathcal{O}(nm)$ 的计算量，而 OTOC 边界相位需要 $\mathcal{O}(n)$ 的计算量；这些开销均已吸收。

对于 $\ell = 2$，只保留二阶颜色累积量。记 $c_{ij} \equiv \kappa_2^{(\vec{\mathbf{c}}_i, \vec{\mathbf{c}}_j)}$，并令$F_{a:b}(z_a, \ldots\ldots, z_b)$ 为 $\vec{\mathbf{c}}_a^{\,h_a} \cdots \vec{\mathbf{c}}_b^{\,h_b}$在指数 $h_a, \ldots\ldots, h_b$下截断矩的普通生成级数。单段级数是卡特兰级数，对第一个位置进行配对可得，对于 $a < b$,

$$F_{a:b} = \frac{F_{a+1:b} + \sum_{j=a+1}^{b-1} c_{aj} z_a z_j F_{a:j} F_{j:b}}{1 - z_a^2 F_{a:a} - c_{ab} z_a z_b F_{b:b}}. \tag{186}$$

右侧的每个级数都涉及较短的区间，且分母的常数项为一。因此，快速多元乘法和幂级数求逆即可计算总次数不超过 L 在 $\mathcal{O}(L^r \log L)$ 次 [105, 第 8–9]章。

对于 $\ell \geq 4$，对于存储的 $\mathcal{O}(L^r)$ 个词，递推关系会选取一个包含第一个位置且大小至多为 ℓ 的块。最多有 $\sum_{j=1}^{\ell} \binom{L-1}{j-1} \leq \ell L^{\ell-1}$ 种选择，每个加项至多将 ℓ 个先前计算出的区间矩相乘。游程编码索引可在 $\mathcal{O}(\ell)$ 时间内确定所选颜色子序列及其中间区间。包括低阶累积量求逆和最终泰勒和在内，总开销为 $\mathcal{O}(\ell^2 L^{\ell+r-1})$。

为吸收递推关系，使用 $\binom{m}{\ell/2} \geq (m/\ell)^{\ell/2}$, $m \geq L^3$ 和 $4 \leq \ell \leq L$。然后

$$\frac{n\ell^{r+1}(m/\ell)^{\ell/2}}{\ell^2 L^{\ell+r-1}} \geq \frac{n\ell^{r-1}}{L^{r-1}} \left(\frac{L}{\ell}\right)^{\ell/2} \geq n\ell^{r-3} L^{3-r} \geq 1, \tag{187}$$

其中最后一个不等式用到了 $r \in \{2, 4\}$ 和 $n \geq L$。二项式上界 $\binom{m}{\ell/2} \leq (2em/\ell)^{\ell/2}$证明了（185）。

□

定理 J.6（关联函数近似的运行时间）。令泡利探针独立于所抽样的哈密顿量，其中 $A \neq \mathbb{I}$ 用于时间序关联函数，A, B 则对非时间序关联函数而言模相位独立。存在一个足够小的常数 $c > 0$，使得对于所有足够大的 n,$2n \leq m \leq \mathrm{poly}(n)$，$t \geq 0$、失败概率 $\delta = 1/\mathrm{poly}(n)$ 以及满足以下条件的近似 $0 < \varepsilon < 1$

$$1 + t + \log(1/\varepsilon) \leq c \min\left\{m^{1/3}, \frac{n}{\log n}\right\}, \tag{188}$$

算法 2 和 算法 3 分别输出满足以下条件的近似

$$|\hat{G}_0^A(t) - G_0^A(t)| \leq \varepsilon \qquad and, \qquad |\hat{F}_0^{A,B}(t) - F_0^{A,B}(t)| \leq \varepsilon \tag{189}$$

概率至少为 $1 - \delta - e^{-\Omega(n)}$，超过 H，且总运行时间至多

$$\mathcal{O}\left(\frac{n}{\delta}(1+t)^2 (1/\varepsilon)^{2+\mathcal{O}(1/\log m)}\right). \tag{190}$$

证明。选取一个足够大的固定常数 C_0。若半圆情形成立，则使用 注 E.4。否则，令 $\ell \geq 2$ 为满足条件的最小偶整数

$$(1+t)\delta^{-1/2} \left(\frac{C_0(\ell+2)}{m}\right)^{(\ell+2)/4} \leq \frac{\varepsilon}{C_0}. \tag{191}$$

由于 $t=\mathcal{O}(m^{1/3})$、$m\geq 2n$ 和 $\delta=1/\mathrm{poly}(n)$，我们有 $(1+t)\delta^{-1/2}\leq m^{\mathcal{O}(1)}$。与 (140) 中相同的论证给出 $\ell=\mathcal{O}(1+\log(1/\varepsilon)/\log m)$。选取一个偶数 $L=\Theta(1+t+\log(1/\varepsilon))$，其隐含常数足够大，且满足 $L\geq\ell+4$。令 c 足够小，可确保 $m\geq CL^3$ 和 $L\leq\gamma n/\log n$。

近似。应用推论 J.4。由于 $t\leq L$ and $L\leq(m/A)^{1/3}$，其总和界给出$t\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L)\leq\mathcal{O}(m^{-1/6}\sqrt{\log n})=o(1)$，其中使用了 $m\geq 2n$。因此，引理 J.2 中的指数前因子有界，泰勒基数为 $\mathcal{O}(1+t)$。(182) 和 (191) 中的一般省略尾项界使累积量贡献至多为 $\varepsilon/2$。根据 L，泰勒贡献也至多为 $\varepsilon/2$！$\geq(L/e)^L$以及对 L 的选择。这就证明了所述近似以至少 $1-\delta-e^{-\Omega(n)}$ 的概率成立。在 $t=0$ 时，则可以直接返回精确值 $G_0^A(0)=1$ 和 $F^{A,\ 0\ B}(0)=\langle A,\ B\rangle$。

运行时间。根据极小性，前一个截断 $\ell-2$ 不满足（191），因此

$$\left(\frac{m}{C_0\ell}\right)^{\ell/2}<C_0^2(1+t)^2\delta^{-1}\varepsilon^{-2}. \tag{192}$$

应用命题 J.5 结合 $r=4$ 因此可得运行时间上界为

$$\mathcal{O}\left(\frac{n}{\delta}(1+t)^2\varepsilon^{-2}e^{\mathcal{O}(\ell)}\right).$$

使用 $\ell=\mathcal{O}(1+\log(1/\varepsilon)/\log m)$ 和 $L\leq\gamma n/\log n$，可得

$$\mathcal{O}\left(\frac{n}{\delta}(1+t)^2(1/\varepsilon)^{2+\mathcal{O}(1/\log m)}\right),$$

证明（190）。 □

一般热关联函数（$\beta>0$）的分析见Q 节。

第三部分

尖峰泡利模型

我们先介绍尖峰泡利模型，回顾其定义如下：

$$H_{\text{spiked}} = H + \lambda Q, \quad \lambda \geq 0,$$

其中 H 是来自公式 (1)的稀疏泡利哈密顿量， Q是一个固定的、非恒等 n量子比特泡利算符，称为“尖峰”。我们的目标是使用第二部分的颜色框架以及 $H_0 = H$ 和 $H_1 = QHQ$的双色累积量来计算矩$\mathrm{Tr}\big((H+\lambda Q)^k\big)$ 。这带来了一个问题：关联函数只规定了一组有限的标签序列（例如 TOC 的 $0^{h_0}1^{h_1}$ ），但如果展开$\mathrm{Tr}\big((H+\lambda Q)^k\big)$，最终会得到几乎所有可能的标签序列。采用与关联函数算法相同的方法行不通，因为通过颜色矩计算 $H+\lambda Q$ 的 L 阶矩，需要对 H 大约2^L 个标签序列求和。

相反，我们的解决方案是采用一种更直接的方法来计算 $H+\lambda Q$的矩和自由累积量。为此，我们利用算子值自由概率的数学形式体系，并在K节中对其进行介绍。L节中的经典算法通过计算其尖峰累积量来计算尖峰泡利模型的谱振幅；这些累积量是第一部分中所使用的自由累积量的算子值推广，专门针对尖峰泡利模型。值得注意的是，随后我们能够重新利用相同的技术，计算标准稀疏泡利模型在M节中的热期望值。

K 算子值自由概率

算子值自由概率是自由概率的一种推广，它将标量值期望泛函替换为算子值的条件期望。该理论（也）由 Voiculescu 提出 [83], ，其组合学视角（也）由 Speicher 给出 [84]。我们将简要介绍这一理论，并重点说明将要使用的工具。本小节中介绍的所有结果和定义均来自 Speicher 的讲义 [106] 以及 Mingo 和 Speicher 的专著 [107]。

定义 K.1（算子值非交换概率空间）。 一个算子值非交换概率空间 $(\mathcal{A},\mathcal{B},E)$由一个代数 $\mathcal{A}$、一个包含 $\mathbb{1}_{\mathcal{A}}$ 的子代数 $\mathcal{B}\subseteq\mathcal{A}$ ，以及一个条件期望组成；条件期望即一个满足双模性质的幺线性映射 $E:\mathcal{A}\to\mathcal{B}$ ：

$$E(b_1 A b_2) = b_1 E(A) b_2 \qquad \forall b_1, b_2 \in \mathcal{B}, A \in \mathcal{A}. \tag{193}$$

双模性质还意味着，对于所有 $b\in\mathcal{B}$，都有 $E(b)=b$ 。

$\mathcal{A}$ 中的元素称为算子值（或 $\mathcal{B}$ 值）非交换随机变量。随机变量 $X\in\mathcal{A}$ 的算子值矩 由下式给出

$$E(X), \quad E(Xb_1X), \quad E(Xb_1Xb_2X), \quad E(Xb_1Xb_2Xb_3X), \ldots \qquad \forall b_1, b_2, b_3, \ldots \in \mathcal{B}, \tag{194}$$

以及收集 所有算子值矩构成 X的算子值分布 .

自由独立性的概念也扩展到算子值情形：

定义 K.2（算子值自由独立性）。 设 $(\mathcal{A}, \mathcal{B}, E)$ 是一个算子值非交换概率空间。子代数 $(\mathcal{A}_i)_{i\in[s]}$ 其中 $\mathcal{B} \subset \mathcal{A}_i$ 称为关于 $\mathcal{B}$ 自由独立（或在 $\mathcal{B}$上合并自由），如果

$$E(a_1) = E(a_2) = \cdots = E(a_k) = 0 \implies E(a_1 a_2 \dots a_k) = 0 \tag{195}$$

对于所有 $a_j \in \mathcal{A}_{i_j}$，当相邻元素来自不同的子代数（$i_j \neq i_{j+1}$）时， $\mathcal{B}$值非交换随机变量 $a_1, \dots, a_s \in \mathcal{A}$ 也称为关于自由独立于 $\mathcal{B}$，如果子代数 $\big(\mathcal{B}\langle a_i\rangle\big)_{i\in[s]}$ 关于 $\mathcal{B}$ 自由独立。

K.1 算子值自由累积量

自由累积量也有算子值类比。首先，我们引入一个刻画算子值自由累积量映射的定义：

定义 K.3（$\mathcal{B}$平衡的映射）。 给定一个代数 $\mathcal{A}$ 和一个子代数 $\mathcal{B} \subset \mathcal{A}$， $\mathcal{B}$平衡的映射 $T\colon\ \mathcal{A}^k \to \mathcal{B}$是一个 $\mathbb{C}$多线性映射，它满足对于所有 a_1， a_2，…， $a_k \in \mathcal{A}$、 b， $b' \in \mathcal{B}$和 $j \in [k-1]$:

1. $T[ba_1, a_2, \dots, a_k b'] = bT[a_1, a_2, \dots, a_k]b'$
2. $T[a_1, \dots, a_j b, a_{j+1}, \dots, a_k] = T[a_1, \dots, a_j, ba_{j+1}, \dots, a_k]$

给定一列 $\mathcal{B}$-平衡映射 $(T_k)_{k\in\mathbb{N}}$，我们可以将其扩展为一个乘法族 $(T_\pi)_{k\in\mathbb{N},\ \pi\in NC(k)}$。令 $T_{1_k} \equiv T_k$。对于 $\pi \neq 1_k$，选取 π 的一个不含 1 的区间块 $V = \{q+1, q+2, \dots, q+r\}$，并令 $\sigma \in NC(k-r)$ 为删除 V 后对剩余位置按顺序重新标记所得到的划分。定义 T_π 为满足插入性质的 T_k 的唯一扩展：

$$T_\pi[a_1, \dots, a_k] \equiv T_\sigma\big[a_1, \dots, a_q \cdot T_r[a_{q+1}, \dots, a_{q+r}], a_{q+r+1}, \dots, a_k\big], \tag{196}$$

其中 $q \geq 1$。所得乘法族 $(T_\pi)_{k\in\mathbb{N},\ \pi\in NC(k)}$ 是乘法的且为 $\mathcal{B}$-平衡的。请注意，与标量乘法函数（即 定义 A.6）不同，算子值乘法函数并不只是各个块值的乘积。之所以需要嵌套规则，是因为内层块会向其外围块提供算子值输入（这一性质同样适用于算子值自由累积量）。

对于任意 $\mathcal{B}$-平衡映射的乘法族，我们可以定义新的乘法族

$$S_\pi[a_1, \dots, a_k] \equiv \sum_{\substack{\sigma\in NC(k)\\ \sigma\leq\pi}} T_\sigma[a_1, \dots, a_k]. \tag{197}$$

这个关系可以通过莫比乌斯反演求逆，

$$T_\pi[a_1, \dots, a_k] = \sum_{\substack{\sigma\in NC(k)\\ \sigma\leq\pi}} \mu(\sigma, \pi)\, S_\sigma[a_1, \dots, a_k]. \tag{198}$$

现在，我们可以使用 $\mathcal{B}$-平衡映射来定义算子值自由累积量：

定义 K.4（算子值自由累积量）。 设 $(\mathcal{A},\mathcal{B},E)$ 是一个算子值非交换概率空间。令 $E_k^{\mathcal{B}}\colon \mathcal{A}^k \to \mathcal{B}$ 表示 $\mathcal{B}$-平衡映射

$$(a_1,\dots,a_k) \mapsto E_k^{\mathcal{B}}[a_1,\dots,a_k] \equiv E(a_1 a_2 \cdots a_k), \tag{199}$$

并将序列 $(E_k^{\mathcal{B}})_{k\in\mathbb{N}}$ 扩展为 $\mathcal{B}$-平衡的乘法族 $(E_\pi^{\mathcal{B}})_{k\in\mathbb{N},\ \pi\in NC(k)}$。算子值自由累积量 $(\kappa_k^{\mathcal{B}})_{k\in\mathbb{N}}$ 定义为

$$\kappa_k^{\mathcal{B}}[a_1,\dots,a_k] \equiv \sum_{\pi\in NC(k)} \mu(\pi,1_k)\, E_\pi^{\mathcal{B}}[a_1,\dots,a_k], \tag{200}$$

其中 μ 是 $NC(k)$ 莫比乌斯函数。

一般的分割算子值矩-累积量关系可由一般的 $\mathcal{B}$-平衡构造得到：

$$\begin{aligned} \kappa_\pi^{\mathcal{B}}[a_1,\dots,a_k] &= \sum_{\substack{\sigma\in NC(k)\\ \sigma\le\pi}} \mu(\sigma,\pi)\, E_\sigma^{\mathcal{B}}[a_1,\dots,a_k], \\ E_\pi^{\mathcal{B}}[a_1,\dots,a_k] &= \sum_{\substack{\sigma\in NC(k)\\ \sigma\le\pi}} \kappa_\sigma^{\mathcal{B}}[a_1,\dots,a_k]. \end{aligned} \tag{201}$$

考虑单个非交换变量 $a\in\mathcal{A}$的算子值自由累积量时，只需考虑

$$\kappa_\pi^{\mathcal{B}}[a, b_2 a, b_3 a, \dots, b_k a],$$

由于双模性质，第一个 $\mathcal{B}$ 项可以提取出来。

K.2 算子值 R-变换

算子值 R-变换是我们为尖峰泡利模型构造高效算法时使用的关键工具。

定义 K.5（算子值 R-变换）。 给定一个元素 $a\in\mathcal{A}$，它的算子值R-变换[8] 是形式幂级数，

$$R_a^{\mathcal{B}}(b) \equiv \sum_{k=1}^{\infty} \kappa_k^{\mathcal{B}}[a, ba, \dots, ba]\, b \tag{202}$$

令 $M_a^{\mathcal{B}}$为由下式定义的 $\mathcal{B}$-值矩生成级数

$$M_a^{\mathcal{B}}(z) \equiv \sum_{k=0}^{\infty} E(a^k) z^k \tag{203}$$

对任意 $a\in\mathcal{A}$。这两个级数之间的关系为（例如，利用 [106, 命题 9。6]）：

$$M_a^{\mathcal{B}}(z) = \mathbb{1}_{\mathcal{B}} + R_a^{\mathcal{B}}\big(z M_a^{\mathcal{B}}(z)\big). \tag{204}$$

[8]为保持一致，我们采用与 [66] 中的标量 R-变换相同的约定；这与算子值自由概率文献中的约定相差一个 b因子。

当级数收敛时，该表达式既可视为形式幂级数，也可视为零点附近的解析函数。它是公式（37）中关系的算子值类比。

再次强调，算子值自由概率 R变换的一个关键性质是，它对自由独立变量具有可加性 [107, 第9章，定理 11]：对于变量 a_1， $a_2 \in \mathcal{A}$ 相对于 $\mathcal{B}$自由独立时， R的变换 $a_1 + a_2$ 为

$$R^{\mathcal{B}}_{a_1+a_2}(b) = R^{\mathcal{B}}_{a_1}(b) + R^{\mathcal{B}}_{a_2}(b). \tag{205}$$

L 尖峰泡利模型的谱振幅

本节给出计算 $H + \lambda Q$谱振幅的经典算法。我们首先采用与L.1小节相同的方法，介绍第二部分中尖峰模型的颜色矩和累积量。随后，在L.2小节中，我们将扩展颜色框架，将算子值自由概率纳入其中，从而实现更高效的算法。最后，我们将在L.3小节中完整构建该算法并对其进行分析。

L.1 尖峰泡利模型的颜色矩和累积量

对于每个 $k \geq 1$，迹的循环性给出

$$\overline{\mathrm{Tr}}\big((H+\lambda Q)^k\big) = \overline{\mathrm{Tr}}(H^k) + \sum_{r=1}^{k} \frac{k\lambda^r}{r} \sum_{\substack{h_1,\ldots,h_r \geq 0 \\ h_1+\cdots+h_r = k-r}} \overline{\mathrm{Tr}}\left(H^{h_1} Q \cdots H^{h_r} Q\right). \tag{206}$$

对于偶数个 r，将尖峰移至右侧并成对消去，可得

$$\overline{\mathrm{Tr}}\left(H^{h_1} Q H^{h_2} Q \cdots H^{h_r} Q\right) = \overline{\mathrm{Tr}}\left(H_0^{h_1} H_1^{h_2} \cdots H_0^{h_{r-1}} H_1^{h_r}\right),$$

这给出了颜色矩

$$\tau^{(\mathbf{C})}_{k_0}[H,\ldots,H], \qquad k_0 \equiv h_1 + \cdots + h_r, \quad \mathbf{C} \equiv 0^{h_1} 1^{h_2} \cdots 0^{h_{r-1}} 1^{h_r}. \tag{207}$$

我们同样可以使用标量递推关系（147）在给定必要的颜色累积量后，计算每个偶数尖峰贡献。对于奇数个 r，消去后留下的边界项为 Q 而不是 $\mathbb{I}$

$$\overline{\mathrm{Tr}}\left(H^{h_1} Q H^{h_2} Q \cdots H^{h_r} Q\right) = \overline{\mathrm{Tr}}\left(H_0^{h_1} H_1^{h_2} \cdots H_1^{h_{r-1}} H_0^{h_r} Q\right).$$

下面给出一种情形，其中（151）中的边界项不一定会消去为恒等算符。在 H 上对拉德马赫符号取平均时，这些项会消失：每个从 H 中保留下来的采样泡利字都具有偶数重数，因此留下一个标量值的词，后面跟着无迹算子 Q。为了说明在 H的采样实例上以高概率同样成立，我们需要扩展无环性的定义，使其包含尖峰算子。更一般地，固定一组颜色生成元 $\mathbf{Q} = (Q_1, \ldots\ldots, Q_s)$：

定义 L.1（相对无环性）。给定一个由 m 泡利算符组成的序列 $\mathbf{P} = (P_1、\ldots\ldots、P_m)$，如果$\mathbf{P}$ 满足相对于 $\mathbf{Q}$ 在 L 阶以内无环（或简称$\mathbf{Q}$-无环），则

$$[P_{i_1} P_{i_2} \cdots P_{i_k}] \notin \mathcal{C}, \tag{208}$$

对于任意 $1 \le k \le L$ 和任意一组互不相同的指标 i_1、i_2、……、$i_k \in [m]$。如果一个泡利哈密顿量实例 H 的泡利串支撑集在 L 阶以内是**Q**-无环的，则称其在 L 阶以内是**Q**-无环的。

我们将定义 B.1 中的原始定义称为“标准无环性”，以便与这个新定义区分。当 $s = 0$ 时，便回到标准无环性的定义；而当 $s = 1$ 时，则对应我们所需的尖峰泡利模型设定。

此外，引理 B.2 的证明可直接推广到此情形，并推出 H 以高概率**Q**-无环，阶数达到 $L \le \gamma n/\log n$，其中 $\gamma > 0$为某个常数。[9] 事实上，对于任意非空的互异采样指标集合，其乘积模去相位后在所有 4^n 泡利算符上均匀分布。因此

$$\begin{aligned}&\Pr\big(H \text{ is not loop-free relative to } (Q) \text{ through order } L\big)\\ &\le 2\cdot 4^{-n}\sum_{j=1}^{L}\binom{m}{j} \le 2\cdot 4^{-n}\left(\frac{em}{L}\right)^{L} = e^{-\Omega(n)},\end{aligned} \tag{209}$$

其中，第二个不等式利用了 $L \le m/2$，而最后的界在常数γ充分小时成立。现在我们来看看，相对无环性如何像标准无环性一样简化颜色矩表达式。

命题 L.2 (环无颜色矩)。若 H 在阶数 L以内是**Q**-无环的，那么，对于 $k \le L$，满足 $[Q] \in \mathcal{C}$的泡利算符 Q，以及$\mathbf{C} = (\vec{\mathbf{c}}_1, \ldots, \vec{\mathbf{c}}_k)$，

$$\tau(H_{\vec{\mathbf{c}}_1}\cdots H_{\vec{\mathbf{c}}_k}Q) = \tau_k^{(\mathbf{C})}[H,\ldots,H]\,\tau(Q). \tag{210}$$

证明。 将哈密顿量展开为泡利项。共轭只会改变标量符号，因此每个单项式模去相位后，都化为其重数为奇数的不同泡利项之积。（标准的）无环性迫使该集合在标量迹非零时为空。

根据 **Q**-无环性，任何不超过 k 个泡利项的非空集合都不可能相乘得到 $[Q]$。因此，如果 $[Q] \ne [\mathbb{I}]$，则泡利串中没有一个等于恒等算符，所以迹为零。如果 $[Q] = [\mathbb{I}]$，则 $\tau(Q)$ 是一个非零标量，我们可以将其从迹中提出。两种情况都能得到所需的恒等式。 □

回到尖峰泡利模型，命题 L.2 意味着直到 $L = \Omega(n/\log n)$阶为止，只有包含偶数个尖峰插入项的词会产生贡献。这给出了我们在第一部分中看到的完全相同的“偶数性”性质：如果 H 是 **Q**-无环至偶数阶 k，那么

$$\overline{\mathrm{Tr}}\big((H+\lambda Q)^k\big) = \overline{\mathrm{Tr}}(H^k) + \sum_{q=1}^{k/2}\frac{k\lambda^{2q}}{2q}\sum_{\substack{h_1,\ldots,h_{2q}\ge 0\\ h_1+\cdots+h_{2q}=k-2q}}\overline{\mathrm{Tr}}\left(H^{h_1}Q\cdots H^{h_{2q}}Q\right). \tag{211}$$

即使现在，我们也可以使用第二部分中的相同算法来计算尖峰泡利模型的谱振幅：计算所有颜色序列直到 $\ell = \mathcal{O}(1+\log(1/\varepsilon)/\log n)$阶的颜色累积量，计算所有颜色序列直到 $L = \mathcal{O}(1+(2+\lambda)t+\log(1/\varepsilon))$，使用 147），

[9]参见注 B.3；唯一的区别是，现在我们有总共 $m+s$ 个泡利算符，而不是 m。由于我们只考虑 s 是一个较小的固定常数的情况，因此忽略这一点，直接使用 引理 B.2。

然后计算 $\mathrm{Tr}(e^{-i(H+\lambda Q)t})$ 的泰勒级数近似。不幸的是，将所有颜色序列枚举到 L 阶会产生 $\Omega(2^L)$ 的开销；当 $t=\mathrm{poly}(n)$ 时，该开销呈指数增长。作为替代方案，我们设计了一种利用算子值概率的专用递推关系，从而能够直接高效地计算尖峰泡利模型的矩。

L.2 算子值颜色框架与递推关系

固定一组有效的颜色生成元 $\mathbf{Q}=(Q_1,\dots,Q_s)$。从非交换概率空间开始

$$(\mathcal{A},\tau)=\big(M_{2^n}(\mathbb{C}),\overline{\mathrm{Tr}}\big)$$

贯穿 第一部分 和 第二部分的讨论，我们通过考虑子代数，将其扩展为算子值非交换概率空间

$$\mathcal{B}=\mathrm{span}_{\mathbb{C}}\{Q_{\vec{\mathbf{c}}}:\vec{\mathbf{c}}\in\mathbb{F}_2^s\}$$

以及条件期望

$$E:\mathcal{A}\to\mathcal{B},\qquad E(X)\equiv\sum_{\vec{\mathbf{c}}\in\mathbb{F}_2^s}\tau\big(Q_{\vec{\mathbf{c}}}^{\dagger}X\big)Q_{\vec{\mathbf{c}}}. \tag{212}$$

根据定义，颜色生成元在相位意义下相互独立，因此集合 $(Q_{\vec{\mathbf{c}}})^{\vec{\mathbf{c}}\in\mathbb{F}_2^s}$ 构成 $\mathcal{B}$ 的标准正交基。因此，条件期望 E 可视为一个保迹的 $(\tau\big(E(X)\big)=\tau(X))$，即投影到 $\mathcal{B}$ 上的正交投影。遵循K节中的构造，我们可以定义算子值颜色矩映射和累积量映射 $(E_\pi^{\mathcal{B}})_{k\in\mathbb{N},\pi\in NC(k)}$ 以及 $(\kappa_\pi^{\mathcal{B}})_{k\in\mathbb{N},\pi\in NC(k)}$。我们可以证明算子值累积量与颜色累积量之间存在以下关系：

命题 L.3（算子颜色累积量等价性）。设 H 相对于 $\mathbf{Q}=(Q_1、\dots...、Q_s)$ 在阶数 L 内无环。对于所有 $k\le L$ 和 $\mathbf{C}=(\vec{}\mathbf{c}_1、\dots...、\vec{}\mathbf{c}_k)\in\mathcal{C}^k$，

$$\kappa_k^{\mathcal{B}}(H_{\vec{\mathbf{c}}_1},\dots,H_{\vec{\mathbf{c}}_k})=\kappa_k^{(\mathbf{C})}[H,\dots,H]\,\mathbb{I}. \tag{213}$$

证明。 根据 命题 L.2 以及式（212）中条件期望的定义，

$$E_k^{\mathcal{B}}[H_{c_1},\dots,H_{c_k}]=\tau(H_{c_1}\cdots H_{c_k})\,\mathbb{I}.$$

矩映射的乘法扩张也满足同一恒等式。事实上，我们可以计算一个内部区间块，提取其标量值，然后对剩余位置递归。因此 $E_\pi^{\mathcal{B}}(H_{c_1}、\dots...、H_{c_k})=\tau_\pi(H_{c_1}、\dots...、H_{c_k})\,\mathbb{I}$。莫比乌斯反演给出

$$\kappa_k^{\mathcal{B}}(H_{c_1},\dots,H_{c_k})=\left(\sum_{\pi\in NC(k)}\mu_{NC}(\pi,1_k)\tau_\pi(H_{c_1},\dots,H_{c_k})\right)\mathbb{I},$$

从而证明所需的方程。 □

这使我们能够给出泡利哈密顿量截至其无环阶的任意算子值自由累积量的表达式。

引理 L.4。 假设 H 相对于 $\mathbf{Q}=(Q_1、\ldots、Q_s)$ 截至 L 阶是无环的，并且 $(\vec{\mathbf{c}}_1、\ldots、\vec{\mathbf{c}}_k)\in\mathcal{C}^k$ 是一个标签序列。那么对于所有 $k\leq L$,

$$\kappa_k^{\mathcal{B}}\left[Q_{\vec{\mathbf{c}}_1}H,Q_{\vec{\mathbf{c}}_2}H,\ldots,Q_{\vec{\mathbf{c}}_{k-1}}H,Q_{\vec{\mathbf{c}}_k}H\right]=\kappa_k^{(\mathbf{B})}[H,\ldots,H]\prod_{i=1}^{k}Q_{\vec{\mathbf{c}}_i},\tag{214}$$

其中

$$\mathbf{B}\equiv(\vec{\mathbf{b}}_1,\vec{\mathbf{b}}_2,\ldots,\vec{\mathbf{b}}_k)\qquad and\qquad \vec{\mathbf{b}}_j\equiv\bigoplus_{i=1}^{j}\vec{\mathbf{c}}_i.$$

证明。 由于 $Q^{\dagger}_{\subseteq\mathbf{c}}Q_{\vec{\mathbf{c}}}=\mathbb{I}$，我们可以将相邻对 $Q^{\dagger}_{\subseteq\mathbf{c}}Q_{\vec{\mathbf{c}}}$ （以粗体标出）插入算子值累积量映射中，如下所示：

$$\kappa_k^{\mathcal{B}}\left[Q_{\vec{\mathbf{c}}_1}H\mathbf{Q}^{\dagger}_{\vec{\mathbf{c}}_1}\mathbf{Q}_{\vec{\mathbf{c}}_1},Q_{\vec{\mathbf{c}}_2}H\mathbf{Q}^{\dagger}_{\vec{\mathbf{c}}_2}\mathbf{Q}_{\vec{\mathbf{c}}_2},\ldots,Q_{\vec{\mathbf{c}}_{k-1}}H\mathbf{Q}^{\dagger}_{\vec{\mathbf{c}}_{k-1}}\mathbf{Q}_{\vec{\mathbf{c}}_{k-1}},Q_{\vec{\mathbf{c}}_k}H\mathbf{Q}^{\dagger}_{\vec{\mathbf{c}}_k}\mathbf{Q}_{\vec{\mathbf{c}}_k}\right],$$

这不会改变算子值自由累积量的值。现在利用 $H_{\vec{\mathbf{c}}}\equiv Q_{\vec{\mathbf{c}}}HQ^{\dagger}_{\subseteq\mathbf{c}}$，得到表达式

$$\kappa_k^{\mathcal{B}}\left[H_{\vec{\mathbf{c}}_1}Q_{\vec{\mathbf{c}}_1},H_{\vec{\mathbf{c}}_2}Q_{\vec{\mathbf{c}}_2},\ldots,H_{\vec{\mathbf{c}}_{k-1}}Q_{\vec{\mathbf{c}}_{k-1}},H_{\vec{\mathbf{c}}_k}Q_{\vec{\mathbf{c}}_k}\right].$$

利用（151）以及双模性质在各个参数之间移动，将所有颜色移到右侧，

$$\kappa_k^{\mathcal{B}}\left[H_{\vec{\mathbf{c}}_1},H_{\vec{\mathbf{c}}_1\oplus\vec{\mathbf{c}}_2},\ldots,H_{\vec{\mathbf{c}}_1\oplus\cdots\oplus\vec{\mathbf{c}}_k}\right]\prod_{i=1}^{k}Q_{\vec{\mathbf{c}}_i}.\tag{215}$$

应用命题 L.3 即可完成证明。 □

现在，我们终于来说明为什么要介绍这些关于算子值自由概率的背景项：我们将利用一个关键事实，即自由独立变量之和的 R-变换等于它们各自 R-变换之和。作为一个初步示例，考虑变量 $H+\lambda\mathbb{1}_{\mathcal{A}}$，其中$\lambda\geq 0$。由于标量集 $\mathbb{C}\mathbb{1}_{\mathcal{A}}$ 与所有其他非交换随机变量 [107,第 1 章，命题 16], 的 R-变换 $H+\lambda$ 就是

$$R_{H+\lambda}(z)=R_H(z)+\lambda R_{\mathbb{1}_{\mathcal{A}}}(z)=R_H(z)+\lambda z.$$

因此，计算 $H+\lambda\mathbb{1}_{\mathcal{A}}$ 的自由累积量可归结为计算其自身的自由累积量。

现在我们可以考虑完整的尖峰泡利模型 $H+\lambda Q$。遗憾的是，对于固定的非恒等泡利算符 Q，H 和 λQ 并非自由独立。然而，当我们转而考虑一个算子值自由概率空间时，子代数 $\mathcal{B}$ 与其他每个非交换随机变量 [106, 关于 $\mathcal{B}$ 合并自由（见备注 5.4]）；从某种意义上说， $\mathcal{B}$ 的作用类似于一组“非交换标量”！利用算子值 R-变换的可加性，我们得到

$$R^{\mathcal{B}}_{H+\lambda Q}(b)=R^{\mathcal{B}}_{H}(b)+\lambda R^{\mathcal{B}}_{Q}(b)=R^{\mathcal{B}}_{H}(b)+\lambda Qb.\tag{216}$$

这意味着， $H+\lambda Q$ 的所有算子值自由累积量都与 H的相同，唯一的例外是 $\kappa^{\mathcal{B}}_1(H+\lambda Q)=\kappa^{\mathcal{B}}_1(H)+\lambda Q$。

更一般地，考虑尖峰泡利模型 $E\big((H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*})^k\big)=\sum_{\vec{\mathbf{c}}\in\mathbb{F}_2^s}\tau\big(Q^{\dagger}_{\subseteq\mathbf{c}}(H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*})^k\big)Q_{\vec{\mathbf{c}}}$，其中 $\vec{\mathbf{c}}_*\in\mathbb{F}_2^s$。由于 E 是正交投影

到 $\mathcal{B}$ 上，$(H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*})^k$ 沿每个颜色基向量 $Q_{\vec{\mathbf{c}}}$ 的系数是内积$\tau\big(Q_{\vec{\mathbf{c}}}^{\dagger}(H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*})^k\big)$。以下引理给出了一个递推关系，使我们能够根据 H的颜色累积量直接计算这些内积：

引理 *L.5*（算子值递推关系）。固定一个交换颜色生成元序列 $Q=(Q_1,\dots,Q_s)$，其模相位独立，并固定一个尖峰算子 $\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}$，其中 $\vec{\mathbf{c}}_*\in\mathbb{F}_2^s$ *and* $\lambda\geq 0$。记 $\mu(\vec{\mathbf{c}};k)\equiv\tau\big(Q_{\vec{\mathbf{c}}}^{\dagger}(H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*})^k\big)\in\mathbb{C}$，以及形式幂级数 $\alpha_{\vec{\mathbf{c}}}(z)\equiv\sum_{k\geq 0}\mu(\vec{\mathbf{c}};k)z^k\in\mathbb{C}[[z]]$。如果 H 在阶数 L以内是 Q-环无的，那么对所有标签 $\vec{\mathbf{c}}\in\mathbb{F}_2^s$，

$$\alpha_{\vec{\mathbf{c}}}(z)\equiv\delta_{\vec{\mathbf{c}},\vec{\mathbf{0}}}+\lambda z\,\alpha_{\vec{\mathbf{c}}_*\oplus\vec{\mathbf{c}}}(z)+\sum_{k=2}^{L}z^k\sum_{\vec{\mathbf{c}}_2,\dots,\vec{\mathbf{c}}_k\in\mathbb{F}_2^s}\kappa_k^{(\vec{\mathbf{b}}_1,\dots,\vec{\mathbf{b}}_k)}[H,\dots,H]\prod_{i=2}^{k+1}\alpha_{\vec{\mathbf{c}}_i}(z)\pmod{z^{L+1}},\tag{217}$$

其中 $\vec{\mathbf{b}}_1\equiv\vec{\mathbf{0}}$和 $\vec{\mathbf{b}}_j\equiv\bigoplus_{i=2}^{j}\vec{\mathbf{c}}_i$是由颜色变化 $\vec{\mathbf{c}}_2$、…、 $\vec{\mathbf{c}}_k$生成的颜色，而 $\vec{\mathbf{c}}$最后一次变化 $\vec{\mathbf{c}}_{k+1}\equiv\mathbf{b}_k\oplus\vec{\mathbf{c}}$ 使颜色变为$\mathbf{b}_{k+1}=\vec{\mathbf{c}}$。

证明。根据上述论证，$H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}$ 的算子值 R-变换为

$$R^{\mathcal{B}}_{H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}}(b)=R^{\mathcal{B}}_{H}(b)+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}b.\tag{218}$$

利用矩生成级数与 R-变换（204）之间的关系，

$$\begin{aligned}M^{\mathcal{B}}_{H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}}(z)&=\mathbb{I}+R^{\mathcal{B}}_{H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}}\big(zM^{\mathcal{B}}_{H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}}(z)\big)\\&=\mathbb{I}+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}zM^{\mathcal{B}}_{H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}}(z)+R^{\mathcal{B}}_{H}\big(zM^{\mathcal{B}}_{H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}}(z)\big)\\&=\mathbb{I}+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}zM^{\mathcal{B}}_{H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}}(z)\\&\qquad+\sum_{k=1}^{\infty}\kappa^{\mathcal{B}}_k\big[H,zM^{\mathcal{B}}_{H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}}(z)H,\dots,zM^{\mathcal{B}}_{H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}}(z)H\big]zM^{\mathcal{B}}_{H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}}(z).\end{aligned}$$

根据自由累积量映射的多线性

$$\begin{aligned}M^{\mathcal{B}}_{H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}}(z)&=\mathbb{I}+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}zM^{\mathcal{B}}_{H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}}(z)\\&\qquad+\sum_{k=1}^{\infty}z^k\kappa^{\mathcal{B}}_k\big[H,M^{\mathcal{B}}_{H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}}(z)H,\dots,M^{\mathcal{B}}_{H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}}(z)H\big]M^{\mathcal{B}}_{H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}}(z).\end{aligned}\tag{219}$$

算子值矩生成函数是一个系数取值于 $\mathcal{B}$ 的形式幂级数，因此我们按照其颜色群基将其显式分解：

$$M^{\mathcal{B}}_{H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}}(z)=\sum_{\vec{\mathbf{c}}\in\mathbb{F}_2^s}\alpha_{\vec{\mathbf{c}}}(z)\,Q_{\vec{\mathbf{c}}},\tag{220}$$

根据矩生成级数的定义以及不同颜色代表元彼此正交这一事实；特别地，$\alpha_{\vec{\mathbf{c}}}(0)=\mu(\vec{\mathbf{c}};0)=\delta_{\vec{\mathbf{c}},\vec{\mathbf{0}}}$。将 (220) 代入 (219)，并利用多重线性展开，其中 $\vec{\mathbf{c}}_i$表示第 k 项中 $M^{\mathcal{B}}_{H+\lambda Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}}(z)$ 的第 $i-1$ 个副本的颜色标签，得到累积量 $\kappa^{\mathcal{B}}_k[H,Q_{\vec{\mathbf{c}}_2}H,\dots,Q_{\vec{\mathbf{c}}_k}H]$。利用无环性下的一阶矩和自由累积量均为零这一事实，$k=1$ 项消失，而含有 $k>L$ 的项为 z^{L+1} 阶。对剩余项（即 $\kappa^{\mathcal{B}}_k[H,Q_{\vec{\mathbf{c}}_2}H,\dots,Q_{\vec{\mathbf{c}}_k}H]=$）应用引理 L.4。

对于 $2 \le k \le L$，并利用 $\prod_{i=2}^{k+1} Q_{\vec{\mathbf{c}}_i} = Q_{\vec{\mathbf{b}}_{k+1}}$（因为所有颜色生成元都彼此对易，且平方后等于 $\mathbb{I}$），我们得到

$$\begin{aligned}\sum_{\vec{\mathbf{c}}\in\mathbb{F}_2^s} Q_{\vec{\mathbf{c}}}\,\alpha_{\vec{\mathbf{c}}}(z) &\equiv \mathbb{I} + \lambda z\, Q_{\vec{\mathbf{c}}_*} \sum_{\vec{\mathbf{c}}\in\mathbb{F}_2^s} Q_{\vec{\mathbf{c}}}\,\alpha_{\vec{\mathbf{c}}}(z) \\ &\quad + \sum_{k=2}^{L} z^k \sum_{\substack{\vec{\mathbf{c}}_2,\dots,\vec{\mathbf{c}}_k\in\mathbb{F}_2^s \\ \vec{\mathbf{c}}_{k+1}\in\mathbb{F}_2^s}} \kappa_k^{(\mathbf{B})}[H,\dots,H]\, Q_{\vec{\mathbf{b}}_{k+1}} \prod_{i=2}^{k+1} \alpha_{\vec{\mathbf{c}}_i}(z) \pmod{z^{L+1}},\end{aligned} \tag{221}$$

其中

$$\mathbf{B} \equiv (\vec{\mathbf{0}}, \vec{\mathbf{b}}_2, \dots, \vec{\mathbf{b}}_k) \qquad \text{and} \qquad \vec{\mathbf{b}}_j \equiv \bigoplus_{i=2}^{j} \vec{\mathbf{c}}_i.$$

由于颜色代表元 $Q_{\vec{\mathbf{c}}}$ 构成 $\mathcal{B}$的一组基，我们可以令式（221）中每个颜色代表元的系数相等；为此，先将右侧第二项改写为 $\sum_{\mathbf{c}\in\mathbb{F}_2^s} Q_{\vec{\mathbf{c}}}\,\alpha_{\vec{\mathbf{c}}_*\oplus\vec{\mathbf{c}}}(z)$，其中使用了$Q_{\vec{\mathbf{c}}_*}Q_{\vec{\mathbf{c}}} = Q_{\vec{\mathbf{c}}_*\oplus\vec{\mathbf{c}}}$ 以及代换 $\vec{\mathbf{c}} \mapsto \vec{\mathbf{c}}_* \oplus \vec{\mathbf{c}}$。在最后一项中，仅当 $Q_{\vec{\mathbf{b}}_{k+1}} = Q_{\vec{\mathbf{c}}}$ 恰好在$\vec{\mathbf{c}}_{k+1} = \mathbf{b}_k \oplus \vec{\mathbf{c}}$时成立，因此只有这个 $\vec{\mathbf{c}}_{k+1}$ 值保留下来，从而得到递推关系

$$\alpha_{\vec{\mathbf{c}}}(z) \equiv \delta_{\vec{\mathbf{c}},\vec{\mathbf{0}}} + \lambda z\,\alpha_{\vec{\mathbf{c}}_*\oplus\vec{\mathbf{c}}}(z) + \sum_{k=2}^{L} z^k \sum_{\vec{\mathbf{c}}_2,\dots,\vec{\mathbf{c}}_k\in\mathbb{F}_2^s} \kappa_k^{(\mathbf{B})}[H,\dots,H] \prod_{i=2}^{k+1} \alpha_{\vec{\mathbf{c}}_i}(z) \pmod{z^{L+1}}, \tag{222}$$

其中 $\vec{\mathbf{c}}_{k+1} = \vec{\mathbf{b}}_k \oplus \vec{\mathbf{c}}$，这就是（217），因为 $\mathbf{B} = (\vec{\mathbf{b}}_1, \dots, \vec{\mathbf{b}}_k)$。引理 L.5 的证明至此完成。 □

除累积量外，颜色变化仅通过乘积 $\prod_{i=2}^{k+1} \alpha_{\vec{\mathbf{c}}_i}(z)$ 进入（217），该乘积只取决于变化 $\vec{\mathbf{c}}_2, \dots, \vec{\mathbf{c}}_{k+1}$ 中有多少个等于每个标签（对于 $s=1$，则取决于 $(\vec{\mathbf{c}}_2, \dots, \vec{\mathbf{c}}_{k+1})$ 的汉明重量）。由于 $\vec{\mathbf{c}}_2 \oplus \cdots \oplus \vec{\mathbf{c}}_{k+1} = \vec{\mathbf{c}}$，这些计数也决定了某一项归入哪个方程（对于 $s=1$，由重量的奇偶性决定）。因此，内层求和可按这些计数分组，并在每组内对仅取决于 $\vec{\mathbf{c}}_2, \dots, \vec{\mathbf{c}}_k$ 的累积量 $\kappa_k^{(\vec{\mathbf{b}}_1,\dots,\vec{\mathbf{b}}_k)}[H,\dots,H]$ 求和。

在接下来的小节中，我们将考虑尖峰泡利模型在双色情形下的特例，并展示如何引理 L.5 可用于构造一种求谱振幅的高效算法。

L.3 尖峰泡利模型算法的分析

在双色尖峰泡利模型设定中，$\mathbf{Q} = (Q)$，其中 Q 是一个固定的非恒等厄米泡利算符，且 $\lambda \ge 0$。假设 H 相对于 (Q) 在阶数 L下无环。引理 L.5中的递推关系给出

$$\begin{aligned}\alpha_0(z) &\equiv 1 + \lambda z\,\alpha_1(z) + \sum_{k=2}^{L} z^k \sum_{c_2,\dots,c_k\in\{0,1\}} \kappa_k^{(b_1,\dots,b_k)}[H,\dots,H] \prod_{i=2}^{k+1} \alpha_{c_i}(z), \quad c_{k+1} \equiv b_k, \\ \alpha_1(z) &\equiv \lambda z\,\alpha_0(z) + \sum_{k=2}^{L} z^k \sum_{c_2,\dots,c_k\in\{0,1\}} \kappa_k^{(b_1,\dots,b_k)}[H,\dots,H] \prod_{i=2}^{k+1} \alpha_{c_i}(z), \qquad c_{k+1} \equiv b_k \oplus 1,\end{aligned} \tag{223}$$

模 z^{L+1}，其中 $b_1 \equiv 0$ 和 $b_j \equiv \bigoplus_{i=2}^{j} c_i$。迹正交性给出读出

$$[z^k]\alpha_0(z) = \tau\big((H+\lambda Q)^k\big), \qquad [z^k]\alpha_1(z) = \tau\big(Q(H+\lambda Q)^k\big), \tag{224}$$

对于所有 $0 \le k \le L$。

对于 $\mathbf{C} = (0,\ c_2,\ \ldots,\ c_k)$，乘积 $\prod_{i=2}^{k} \alpha_{c_i}(z)$ 仅取决于汉明重量 $|\mathbf{C}|$。其奇偶性也决定了 b_k，进而决定最终因子 $\alpha_{c_{k+1}}(z)$。因此，对于 $2 \le k \le L$ 和 $0 \le w \le k-1$，定义

$$G_k^{(w)}(z) \equiv \alpha_0(z)^{k-1-w}\alpha_1(z)^w \sum_{\substack{\mathbf{C}\in\{0,1\}^k \\ c_1=0,\ |\mathbf{C}|=w}} \kappa_k^{(b_1,\ldots,b_k)}[H,\ldots,H], \tag{225}$$

and

$$G_k^{(\mathrm{odd})}(z) \equiv \sum_{\substack{0\le w\le k-1 \\ w\ \mathrm{odd}}} G_k^{(w)}(z), \qquad G_k^{(\mathrm{even})}(z) \equiv \sum_{\substack{0\le w\le k-1 \\ w\ \mathrm{even}}} G_k^{(w)}(z). \tag{226}$$

Then

$$\begin{aligned} \alpha_0(z) &\equiv 1 + \lambda z\,\alpha_1(z) + \sum_{k=2}^{L} z^k \left(G_k^{(\mathrm{even})}(z)\alpha_0(z) + G_k^{(\mathrm{odd})}(z)\alpha_1(z)\right), \\ \alpha_1(z) &\equiv \lambda z\,\alpha_0(z) + \sum_{k=2}^{L} z^k \left(G_k^{(\mathrm{odd})}(z)\alpha_0(z) + G_k^{(\mathrm{even})}(z)\alpha_1(z)\right) \end{aligned} \tag{227}$$

模 z^{L+1}。

对于偶数截断 $2 \le \ell \le L$，令 $\alpha_c^{(\ell)}(z)$、$c \in \{0,1\}$ 表示由 (223) 得到的形式幂级数：将求和上限 L 替换为 ℓ，并令 $\mathbb{C}[[z]]$ 中取等号。因此，所有高于 ℓ 阶的颜色累积量均设为零，而其他颜色累积量保持不变。右侧每个非恒定项都含有 z 的正次幂，因此常数项为 $\alpha_0^{(\ell)}(0) = 1$、$\alpha_1^{(\ell)}(0) = 0$，而系数 k 仅取决于次数低于 k 的系数。由此可在每个阶数上唯一确定这两个级数。也可以使用 (227) 计算它们，并将求和截断至 ℓ，且每个 $G_k^{(w)}$ 均使用 $\alpha_0^{(\ell)}$、$\alpha_1^{(\ell)}$ 计算。特别地，计算它们直到 L 次的系数，无需枚举长度为 L 的颜色序列。

算法 4 尖峰泡利模型的谱振幅算法。

要求： H ∼稀疏泡利哈密顿量、固定的非恒等厄米泡利算子 Q、尖峰强度 $\lambda \ge 0$、时间 $t \ge 0$，以及偶数 $2 \le \ell < L$。1：使用直接泡利展开，计算 $\tau_k^{(\mathbf{C})}[H,\ldots,H]$ 关于 $1 \le k \le \ell$ 的精确颜色矩，以及所有满足 $c_1 = 0$的 $\mathbf{C} \in \{0,1\}^k$。2：使用颜色矩-累积量递推关系，计算偶数阶 $2 \le k \le \ell$ 对应的颜色累积量 $\kappa_k^{(\mathbf{C})}[H,\ldots,H]$。将奇数阶颜色累积量及高于阶数 ℓ的颜色累积量设为零。3：使用式（227）计算 $[z^k]\alpha_c^{(\ell)}(z)$，其中 $c \in \{0,1\}$ 和 $0 \le k \le L$，累积量求和截断于 ℓ。4

: **return**

$$\hat{Z}^{(\lambda)}(t) \equiv \sum_{k=0}^{L} \frac{(-it)^k}{k!}[z^k]\alpha_0^{(\ell)}(z). \tag{228}$$

Fock 空间表示。 我们使用双色Fock空间、真空 Ω_1, 以及尖峰算子 b，来自（165）。对于每个偶数 $2 \le \ell \le L$，定义

$$\mathcal{T}_\ell^{(\lambda)} \equiv \mathcal{T}_\ell^{(\mathbf{Q})} + \lambda b, \qquad \mathbf{Q} = (Q), \tag{229}$$

其中 $\mathcal{T}_\ell^{(\mathbf{Q})}$ 是 定义 I.1中的颜色跃迁算子。相对无环性蕴含标准无环性，因此 $\kappa_2 = 1$ 以及直到 L 阶的所有奇数阶颜色累积量均为零，正如该定义所要求的那样。

引理 L.6 （截断尖峰矩的 Fock空间矩阵元）。 假设 H 相对于（Q）直到 L阶均具有无环性，并令 $2 \le \ell \le L$ 为偶数。那么，对于每个整数 $k \ge 0$ 和$c \in \{0, 1\}$,

$$[z^k]\alpha_c^{(\ell)}(z) = \langle \Omega_1 | \, b^c \big(\mathcal{T}_\ell^{(\lambda)}\big)^k \, | \Omega_1 \rangle \, . \tag{230}$$

对于 $0 \le k \le \ell$，这些矩阵元还满足

$$\langle \Omega_1 | \, b^c \big(\mathcal{T}_\ell^{(\lambda)}\big)^k \, | \Omega_1 \rangle = \tau\big(Q^c (H + \lambda Q)^k\big). \tag{231}$$

证明。 我们使用与命题 I.2 和引理 J.1中相同的游走展开，但现在允许尖峰步 λb 出现在任意位点。将 $\big(\mathcal{T}_\ell^{(\lambda)}\big)^k$ 展开为 $\mathcal{T}_\ell^{(\mathbf{Q})}$ 和 λb中的词。每个尖峰都会改变当前颜色，并具有权重 λ。对于固定的尖峰词，哈密顿量位置上的返回游走给出非交叉划分，其中每个块都带有其标签子序列的颜色累积量。大小大于 ℓ 的块没有对应的下降步，因此贡献为零。最后的因子 b^c 选出当前颜色最终为 c的游走。

为确定生成级数，按照引理 L.5的证明，对游走按包含其最左位点的块进行分解。 λz 该位点处的尖峰会交换两个端点的颜色。否则，该位点属于一个偶数大小的哈密顿量块 $k' \le \ell$。如果这 k' 个中间区间具有颜色变化 c_2、……、 $c_{k'+1}$，则相对于块的第一个位点，该块的颜色为$b_1 = 0$ 和 $b_j = \bigoplus_{i=2}^{j} c_i$。端点条件为 $c_{k'+1} = b_{k'} \oplus c$，该块的贡献为其颜色累积量乘以各个 k' 区间级数的乘积。因此，矩阵元的两个生成级数恰好满足带有截断223的（ ℓ），现在在每个阶数上均视为形式恒等式。由上述逐系数唯一性可得（230）。

根据引理 L.5，尖峰Pauli哈密顿量的矩级数满足相同的递推关系，模$z^{\ell+1}$，因为 H 相对于(Q)在阶数 ℓ之前是无环的。因而，它们在次数 ℓ之前的系数与 $\alpha_c^{(\ell)}$一致，而（224）证明了（231）。 □

截断的近似误差。我们使用 $\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell')$ 中的量（173），并将其专门应用于$\mathbf{Q} = (Q)$。

引理 L.7 （尖峰模型的截断近似误差）。 设 H 是一个稀疏泡利哈密顿量实例，相对于（Q）在阶数 L以内无环，其中 Q 是一个非恒等厄米泡利算符。固定偶整数 ℓ、 L ，使得 $2 \le \ell < L$成立。则对于每个 $\lambda \ge 0$ 和 $t \ge 0$,

$$\begin{aligned} &\left| \overline{\mathrm{Tr}}\big(e^{-it(H+\lambda Q)}\big) - \sum_{k=0}^{L} \frac{(-it)^k}{k!} \langle \Omega_1 | \, \big(\mathcal{T}_\ell^{(\lambda)}\big)^k \, | \Omega_1 \rangle \right| \\ &\quad \le e^{t\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L)} \left[t\big(\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L) - \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell)\big) + \frac{\big(t(2 + \lambda + \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L))\big)^L}{L!} \left(2 + \frac{t(2 + \lambda + \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L))}{L+1}\right) \right]. \end{aligned} \tag{232}$$

根据引理 *L.6*，左侧的有限和恰好是$\hat{}Z^{(\lambda)}(t)$ 的输出算法 *4*。

证明。 首先，(178) 和 $\|b\| = 1$ 给出，对每个偶数 $2 \le \ell' \le L$，

$$\|\mathcal{T}_{\ell'}^{(\lambda)}\| \le 2 + \lambda + \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell'), \qquad \|\mathcal{T}_{L}^{(\lambda)} - \mathcal{T}_{\ell}^{(\lambda)}\| \le \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L) - \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell). \tag{233}$$

两个截断处的尖峰相同，因此在它们的差中抵消。此外，

$$\mathcal{T}_{\ell'}^{(\lambda)} = \big(a^\dagger + a + \lambda b\big) + \big(\mathcal{T}_{\ell'}^{(\mathbf{Q})} - (a^\dagger + a)\big). \tag{234}$$

第一项是自伴的，因为 $\lambda \ge 0$ 且 $b = b^\dagger$，而第二项的范数至多为$\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell')$。因此推论 F.3 给出，对每个实数 u，

$$\left\| e^{iu\mathcal{T}_{\ell'}^{(\lambda)}} \right\| \le e^{|u|\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell')}. \tag{235}$$

尖峰包含在自伴项中，因此不会对这个指数前因子产生贡献。

由于 $H + \lambda Q$ 是厄米的，且 L 是偶数，式 (231) 和 (233) 推出

$$0 \le \overline{\mathrm{Tr}}\big(|H + \lambda Q|^L\big) = \overline{\mathrm{Tr}}\big((H + \lambda Q)^L\big) = \langle \Omega_1 | \left(\mathcal{T}_L^{(\lambda)}\right)^L |\Omega_1\rangle \le \big(2 + \lambda + \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L)\big)^L. \tag{236}$$

应用引理 P.3，其中 $X = H + \lambda Q$、 $r = 1$、 $t_1 = -t$、 $T = t$、 $U_1 = V_1 = \mathbb{I}$，真空为 $|\Omega_1\rangle$。前述界给出了其算子及偶阶矩假设，其中 $S = a^\dagger + a + \lambda b$、 $R = 2 + \lambda$，以及和式 $\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell')$ 和 $\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L) - \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell)$。根据引理 L.6，所需的矩匹配成立，且辅助泰勒多项式即为所述输出。因此，引理 P.3 给出 (232)。 □

应用引理 L.7 所需的集中估计与推论 J.4中的相同，只使用一个颜色生成元。

L.4 尖峰模型算法的运行时间

我们使用与F 节相同的稀疏泡利乘法过程来分析算法 4。

命题 L.8 (固定截断下的运行时间)。 固定偶整数 $2 \le \ell < L$，并假设$m \ge CL^3$ 其中 C为充分大的常数。则算法 *4* 的运行时间为

$$\mathcal{O}\left(n\ell 2^\ell \binom{m}{\ell/2}\right). \tag{237}$$

证明。 我们对算法 4的每一步的开销进行估计。

计算低阶颜色矩。 共有 $\sum_{k=1}^{\ell} 2^{k-1} = 2^\ell - 1$ 个长度至多为 ℓ且首个颜色为0的二元颜色序列。对于每个序列，将相应的带颜色哈密顿量乘积分成两半，分别将每一半按泡利基展开，并对匹配的泡利系数进行收缩，以得到其归一化迹。用 Q 对 H 进行共轭只会改变其泡利系数的符号，因此F 节中的支撑集和乘法界对两半均适用。每一半的长度至多为 $\ell/2$，因此 $\mathcal{O}(n\ell)\binom{m}{\ell/2}$ 为每个颜色矩的开销，总开销为

$$\mathcal{O}\left(n\ell 2^\ell \binom{m}{\ell/2}\right). \tag{238}$$

Q 与采样项之间的对易符号可在 $\mathcal{O}(nm)$ 时间内一次性计算，其开销已计入此界。

计算并分组颜色累积量。通过在（147）中分离出全块项，我们按递增顺序恢复累积量。对于一个长度为 k的固定词，递推关系对至多 2^{k-1} 个包含其首个位置的子集求和。每个真子集都使用此前计算出的累积量以及中间区间的矩。扫描一次该词，即可在 $\mathcal{O}(k)$次操作内提取这些子序列和区间；颜色平移会将每个所需的词规范化为以0开头。因此，计算截至阶数 ℓ的所有累积量需要

$$\sum_{k=1}^{\ell} \mathcal{O}(k)\, 2^{k-1} 2^{k-1} = \mathcal{O}\left(\ell 4^{\ell}\right). \tag{239}$$

$G_k^{(w)}$ 中的标量系数和随后可以在 $\mathcal{O}(\ell 2^{\ell})$ 时间内预先计算。具体而言，将由 $(b_1、\ldots\ldots、\ b_k)$ 索引且满足 $b_1 = 0$ 的累积量分配到组

$$w = \sum_{i=2}^{k} (b_{i-1} \oplus b_i). \tag{240}$$

这是其变化序列的汉明重量 $(c_2、\ldots\ldots、\ c_k)$ 在 (223) 中。最终只有 $\mathcal{O}(\ell^2)$个组。

计算高阶矩。 为计算 (227)，存储所有单项式的系数数组

$$\big(\alpha_0^{(\ell)}(z)\big)^a \big(\alpha_1^{(\ell)}(z)\big)^b, \qquad a, b \geq 0, \quad a + b \leq \ell. \tag{241}$$

共有 $\mathcal{O}(\ell^2)$ 个这样的数组。按递增顺序处理系数次数 $k = 0、\ldots\ldots、\ L$。在次数 k 处，首先根据分组递推关系计算 $[z^k]\alpha_0^{(\ell)}$ 和 $[z^k]\alpha_1^{(\ell)}$。尖峰项使用次数 $k-1$，每个累积量项都带有 $z^{k'}$，且满足 $k' \geq 2$，因此此步骤只需读取先前计算出的单项式系数。

接下来，按 $a + b$ 递增的顺序更新已存储单项式的次数为 k 的系数。对于 $a \geq 1$，使用

$$\big(\alpha_0^{(\ell)}\big)^a \big(\alpha_1^{(\ell)}\big)^b = \alpha_0^{(\ell)} \big(\alpha_0^{(\ell)}\big)^{a-1} \big(\alpha_1^{(\ell)}\big)^b,$$

而对于 $a = 0$，则改为乘以 $\alpha_1^{(\ell)}$。每个次数为 k 的系数都需要进行一次长度至多为 $k+1$ 的卷积。它唯一可能引用的同次数项，是一个总次数更小且已更新的单项式。因此，在次数为 k 时，代价为 $\mathcal{O}(\ell^2(k+1))$，并且

$$\mathcal{O}\left(\ell^2 L^2\right) \tag{242}$$

一直计算到次数 L。最后，计算泰勒和需要 $\mathcal{O}(L)$ 次运算 .

对于 $m \geq 2\ell$,

$$\binom{m}{\ell/2} \geq \left(\frac{2m}{\ell}\right)^{\ell/2} \geq 2^{\ell},$$

因此，累积量转换成本被低阶矩计算所吸收。此外，$\binom{m}{\ell/2} \geq m$， $L^2 \leq m$，以及 $\ell \leq 2^{\ell}$ 给出 $\ell^2 L^2 \leq \ell 2^{\ell} \binom{m}{\ell/2}$，因此高阶矩计算也同样被吸收。综合起来，这就证明了（237）。

□

颜色矩、累积量和分组系数取决于 H 和 Q，但与 λ 和 t 无关。计算一次之后，每增加一个尖峰强度，只需进行 $\mathcal{O}(\ell^2 L^2)$ 次运算即可得到其两个矩级数。在固定的尖峰强度下，每增加一个时间点，只需进行 $\mathcal{O}(L)$ 次运算即可完成泰勒读出。

将这一计算复杂度上界与推论 J.4 和引理 L.7 结合，即可得到依赖于精度的运行时间。

定理 L.9（尖峰模型近似的运行时间）。固定任意非恒等算符的厄米泡利算符 Q。存在一个充分小的常数 $c > 0$，使得对于所有充分大的 n，$2n \le m \le \mathrm{poly}(n)$、近似 $0 < \varepsilon < 1$、尖峰 $\lambda \ge 0$、演化时间 $t \ge 0$ 和失败概率 $\delta = 1/\mathrm{poly}(n)$满足

$$1 + (2+\lambda)t + \log(1/\varepsilon) \le c \min\left\{ m^{1/3}, \frac{n}{\log n} \right\}, \tag{243}$$

可以选择算法 4 中的截断，使得

$$\left| \hat{Z}^{(\lambda)}(t) - \overline{\mathrm{Tr}}\big(e^{-it(H+\lambda Q)}\big) \right| \le \varepsilon \tag{244}$$

以至少 $1 - \delta - e^{-\Omega(n)}$ 的概率，且运行时间至多为

$$\mathcal{O}\left(\frac{n}{\delta} (1+t)^2 (1/\varepsilon)^{2+\mathcal{O}(1/\log m)} \right). \tag{245}$$

证明。选取一个充分大的固定常数 C_0。假设不属于半圆形输出情形，令 $\ell \ge 2$ 为满足以下条件的最小偶整数

$$(1+t)\delta^{-1/2} \left(\frac{C_0(\ell+2)}{m} \right)^{(\ell+2)/4} \le \frac{\varepsilon}{C_0}. \tag{246}$$

与（191）中的截断选择相同，界（$1+t$）$\delta^{-1/2} \le m^{\mathcal{O}(1)}$ 和$\log(1/\varepsilon) = \mathcal{O}$（$m^{1/3}$）意味着

$$\ell = \mathcal{O}\left(1 + \frac{\log(1/\varepsilon)}{\log m} \right). \tag{247}$$

第一个界由 $m \ge 2n$ 和 $t = \mathcal{O}$（$m^{1/3}$）推出。取$1 + \log$（$1/\varepsilon$）$\log m$ 的一个足够大的常数倍，可满足（246），因为在整个该值域内，log（$m/$（C_0（$\ell + 2$））都被某个正数乘以$\log m$所下界。

选择一个偶数

$$L = \Theta\big(1 + (2+\lambda)t + \log(1/\varepsilon)\big), \qquad L \ge \ell + 4. \tag{248}$$

其中隐含常数足够大。将 c 在（243）中取足够小，可确保 $m \ge CL^3$以及 $L \le \gamma n/\log n$。

近似。应用推论 J.4 和 $s = 1$，并与式 (209) 的相对无环事件取交。由于 $m \ge 2n$ 和 $t = \mathcal{O}$（$m^{1/3}$），我们有 $t\mathcal{K}^{\mathrm{col}}$（$L$）$\le \mathcal{O}$（$m^{-1/6}\sqrt{\log n}$）$= o$（1）。因此，稳定性指数项有界。省略尾项估计相同，因此式 (246) 将式 (232) 中的累积量项界定为 $\varepsilon/2$。利用 $L! \ge$（L/e）^{L} 和式 (248)，泰勒项也至多为 $\varepsilon/2$。由此得到所述精度和成功概率。

运行时间。 截断的极小性 ℓ 意味着 $\ell-2$ 不满足（246），因此

$$\binom{m}{\ell/2} \le C_0^2 (2eC_0)^{\ell/2} (1+t)^2 \delta^{-1} \varepsilon^{-2}. \tag{249}$$

将此不等式代入（237）可得

$$\mathcal{O}\left(\frac{n}{\delta}(1+t)^2\varepsilon^{-2}e^{\mathcal{O}(\ell)}\right) \le \mathcal{O}\left(\frac{n}{\delta}(1+t)^2(1/\varepsilon)^{2+\mathcal{O}(1/\log m)}\right). \tag{250}$$

其中，最后一个不等式用到了（247）以及 $L \le \gamma n$/对数 n，证明完毕 . □

M 计算热期望值

现在，我们将尖峰模型递推应用于正文条目 3 中的热期望值。令

$$H = \frac{1}{\sqrt{m}} \sum_{k=1}^{m} J_k P_k, \qquad \rho_\beta = \frac{e^{-\beta H}}{\mathrm{Tr}(e^{-\beta H})},$$

并固定一个非恒等算符的采样泡利算符 P_i。我们的目标是

$$\langle P_i \rangle_\beta = \frac{\overline{\mathrm{Tr}}(P_i e^{-\beta H})}{\overline{\mathrm{Tr}}(e^{-\beta H})}. \tag{251}$$

我们使用尖峰算法的耦合级数计算分子，并使用（ˆz_β 306）中的通用标量配分函数近似来计算分母。

移除观测到的泡利项。定义残余哈密顿量

$$H^{(i)} \equiv H - \frac{J_i}{\sqrt{m}} P_i, \qquad H = H^{(i)} + \frac{J_i}{\sqrt{m}} P_i. \tag{252}$$

因此，我们使用背景项为 $H^{(i)}$、生成元为 $\mathbf{Q} = (P_i)$ 且尖峰强度为$\lambda = J_i/\sqrt{m}$的尖峰递推。

如果 H 的完整采样支撑在阶数 $L+1$ 内无环，那么 $H^{(i)}$ 的支撑集相对于 (P_i) 在阶数 L 内无环，且对每个 i 都同时成立。根据标准无环性，至多包含 L 个残余项的非空子集不可能在射影意义下相乘得到恒等算符。如果它们在射影意义下相乘得到 P_i，那么再添上索引 i 就会产生一个大小至多为 $L+1$ 的环，这同样会导致矛盾。

残差保持原始归一化。其标量二阶累积量为

$$\kappa_2[H^{(i)}, H^{(i)}] = \frac{m-1}{m} \tag{253}$$

在无环事件上。引理 L.5 中的算子值递推并未假设此累积量等于 1，因此我们保留其实际值，以及其他残余颜色累积量。

两个矩级数。对于偶数截断 $2 \le \ell \le L$，令 $\alpha_{c\,i}^{(\ell)}{}_{,}\,(z)$， $c \in \{0,1\}$，为使用 227 中的 $H^{(i)}$ 至 ℓ 阶颜色累积量（包括其方差$(m-1)/m$）得到的截断级数，并将所有更高阶累积量设为零，尖峰强度为 $J_i/\sqrt{m}$。由此得到的形式递推关系唯一确定了各阶的级数。

命题 M.1（热矩读出）。 如果 H 的采样支撑集截至阶数 $\ell+1$均为无环的，则

$$[z^k]\alpha_{0,i}^{(\ell)}(z) = \overline{\mathrm{Tr}}(H^k), \qquad [z^k]\alpha_{1,i}^{(\ell)}(z) = \overline{\mathrm{Tr}}(P_i H^k), \qquad 0 \le k \le \ell. \tag{254}$$

证明。 由（252）以及残差的相对无环性，引理 L.5 给出了截至次数 ℓ 、背景项为 $H^{(i)}$ 且尖峰强度为 $J_i/\sqrt{m}$的矩递推关系。应用累积量截断不会改变截至次数 ℓ的任何系数。因此，将（224）中的迹读出应用于该背景项，可得（254）。 □

Fock空间表示。 假设 $m \ge 2$ ，并且完整采样支撑集截至阶数 $L+1$均为无环的，令 $2 \le \ell \le L$ 为偶数。为应用单位方差尖峰构造，将残差归一化为

$$\widetilde{H}^{(i)} \equiv \sqrt{\frac{m}{m-1}} H^{(i)}, \qquad H = \sqrt{\frac{m-1}{m}} \left(\widetilde{H}^{(i)} + \frac{J_i}{\sqrt{m-1}} P_i \right). \tag{255}$$

令$\mathcal{T}_{\ell,\ i}$ 为缩放尖峰跃迁算子

$$\mathcal{T}_{\ell,i} \equiv \sqrt{\frac{m-1}{m}}\, \mathcal{T}_\ell^{(J_i/\sqrt{m-1})}, \tag{256}$$

其中，右侧的算子由 $\widetilde{H}^{(i)}$构造而成。（227）中的齐次性和引理 L.6给出，对于 $c \in \{0,1\}$ 以及任意 $k \ge 0$,

$$[z^k]\alpha_{c,i}^{(\ell)}(z) = \langle \Omega_1 |\, b^c \mathcal{T}_{\ell,i}^k \,| \Omega_1 \rangle\,. \tag{257}$$

事实上，将归一化的背景项和尖峰乘以 $\sqrt{(m-1)/m}$ 会将每个次数为 k 的系数乘以 $((m-1)/m)^{k/2}$。根据 命题 M.1，(ℓ 257) 中的截断矩阵元因此等于 $\mathrm{Tr}(P_i^c H^k)$ ，其中 $0 \le k \le \ell$。

由于两个递推关系相互耦合，因此同时计算这两个级数。对于分子，我们使用 $\alpha_{1\,i}^{(\ell)}{}_{,}$ 对于分母则使用共享近似 $\hat{}z_\beta$ ：

$$\widehat{\langle P_i \rangle}_\beta \equiv \frac{\displaystyle\sum_{k=0}^{L} \frac{(-\beta)^k}{k!} [z^k]\alpha_{1,i}^{(\ell)}(z)}{\hat{z}_\beta}, \tag{258}$$

当且仅当 $\hat{}z_\beta > 0$ 时，否则返回零。级数 α_0 仍是分子计算的一部分，而最终的归一化可在相同逆温度下的所有可观测量之间重复使用。因子 2^n 在比值中抵消。

算法 5 热期望算法

要求：$H = m^{-1/2}\sum_{k=1}^{m} J_k P_k$、一个采样得到的非恒等泡利算符 P_i、逆温度 $\beta \geq 0$、偶数截断 $2 \leq \ell < L$。1：使用生成元 P_i，根据式 (252) 计算所有归一化二元颜色序列截至 ℓ 阶的颜色矩和颜色累积量，以及 $\kappa_2 = (m-1)/m$。2：使用式 (227)，在尖峰强度 $\lambda = J_i/\sqrt{m}$ 和累积量截断 ℓ 下，计算截至 L 次数的 $\alpha_{0\,i}^{(\ell)}$ 和 $\alpha_{1\,i}^{(\ell)}$。3：使用式 (306) 和相同的截断计算 $\hat{z}_\beta$。4：如果 $\hat{z}_\beta > 0$，则返回式 (258) 中的 $\langle P_i \rangle_\beta$，否则返回零。

运行时间。 热算法使用与尖峰算法相同类型的低阶颜色数据和相同的分组级数计算，但现在使用 $m-1$ 背景项。获取两个矩级数的过程已包含在命题 L.8中。

命题 M.2 （热计算的运行时间）。 固定偶数截断 $2 \leq \ell < L$，并假设 $m - 1 \geq CL^3$ 对于足够大的常数 C。那么 算法 *5* 计算 式 (258)的总运行时间为

$$\mathcal{O}\left(n\ell 2^{\ell}\binom{m-1}{\ell/2}\right). \tag{259}$$

证明。 应用 命题 L.8 的证明，其中包含 $m-1$ 背景项。这些项的系数为 $J_k/\sqrt{m}$ 对于所有 $k \neq i$；改变它们的归一化会影响其标量值，但不会改变任何支撑大小和运行时间。

计算式（258）中的分子需要 $\mathcal{O}(L)$ 次运算，依次计算权重 $(-\beta)^k/k!$ 这部分成本已计入级数成本中。分母满足（307）；由于 $\binom{m}{\ell/2} \leq 2\binom{m-1}{\ell/2}$ 在 $m - 1 \geq CL^3$下，该成本也已计入其中，从而证明了（259）。 □

第四部分

数值研究

这里，我们将详细介绍正文图 3 和 2 中的数值研究，以及对小精度下剩余量子-经典差距所进行的小规模启发式研究；在该研究中， ε 在 m 中呈指数级变小，并且 $m = \Theta(n)$ 。

N 正文中数值研究的细节

在图3 和2中，我们通过用大量（$R = 200$–$20{,}000$个 Haar 随机态 $|\psi\rangle$的经验平均值替代无限温度迹，来模拟精确的可观测量。这样做是为了数值上的便利，因为它可以模拟大小为 2^n 的希尔伯特空间中的状态向量，而不是大小为 4^n 的空间中的算子。经验平均值是无偏的，但会带来量级为 $2^{-n/2}/\sqrt{R}$的小随机数值误差。这就是 (d) 中顶部图内嵌图标出的“数值误差下限”；对于所有其他图，该下限足够小，不会造成任何视觉差异。

图2(c) 底部图中的误差统计使用了 10 个哈密顿量随机实例，而顶部图中的累积量统计使用了 60 个随机实例，以验证其与理论预测的精确吻合。理论预测基于以下假设：哈密顿量矩无环，且泡利项的对易图可视为埃尔德什-雷尼[式 (89)]。图 y2(d) 中的轴值是通过对 100 个随机实例取中位数得到的：计算每个宽度为 $Z_\ell(t)$ 与 $Z_{\ell-2}(t)$ 之间的均方根差，并在每个宽度为5 的时间窗口内计算。选择该时间窗口是为了平滑谱振幅中的贝塞尔函数式振荡。图2(d) 顶部图的内嵌图显示了 5 个哈密顿量随机实例的逐点绝对误差中位数，其中 $R = 500$ 并采用相同的宽度为5 的时间平均。

小精度下剩余优势的启发式研究

我们的经典算法在以下范围内是严格的： $t = \mathcal{O}(n/\log\ n)$、 $\varepsilon = 1/2^{\mathcal{O}(n/\log n)}$，以及 $m = \Omega(n^3)$（完全严格）或 $m = \Omega(n)$（在额外的组合数学猜想成立时严格）。超出这些范围后，我们并不总能确定是算法本身失效了，还是证明方法失效了。

例如，使用现有的编码理论技术，我们已无法严格证明无环近似在近线性时间之后仍然适用。然而，泡利项的反对易性倾向于 favor 交叉数较小的无环贡献，而数值结果表明，我们的算法在较晚时刻或许也能适用。

本节讨论一种特定的范围，在此范围内，我们的算法似乎从根本上无法匹配量子运行时间（也就是说，性能下降似乎并非源于证明方法）。该范围设定为 $m = 2n$、 $\varepsilon = 2^{-\Omega(n)}$ 和 $t = \Omega(n)$。因此，这与中等规模的系统有关，其中量子比特数 n 和项数 m 仅随运行时间 poly$(1/\varepsilon)$ 对数增长。

对于如此小的 ε，会发生两个重要事件。首先，正如引言和正文讨论中提到的，自由累积量展开从阶数 $\ell = \Theta(m)$开始发散；超过这一阶后，大量图的影响会压过每幅图贡献的指数衰减。对于 $m = 20$ ，这一发散可见于图 2(c) 上图。这种失效类似于

物理学和数学中其他图示展开的失效。在这些情况下，人们通常假定展开的最优阶数是在发散开始前、展开项达到最小值时取得的 [108]。在我们的语境中，回想一下，典型自由累积量的大小按 $\mathcal{O}((C\ell/m)^{\ell/4})$ 缩放，其最小值出现在 $\ell = am$，大小为 $b2^{-cm}$，其中常数为$a = 1/(eC)$ b, c。这种处理并不严谨，因为它使用了我们对自由累积量所做的无环计算，而该计算仅在 $\ell = \mathcal{O}(n/\log\ n)$ 的情况下得到了严格证明。尽管如此，如果相信这一结果，它就表明我们的自由累积量展开存在一个有限的误差下限 $b2^{-cm}$，无法进一步降低。若再假定这一误差下限会在我们的算法预测中造成类似的误差下限，即 $\mathcal{O}(2^{-cm})$，那么这意味着，对于低于该值的精度以及较晚时刻，唯一已知的经典算法是态矢量模拟。这需要经典运行时间 $\mathcal{O}(2^{m/2})$（见下文），而量子运行时间为 $1/\varepsilon^2 = 2^{2cm}$。因此，只要 $c < 1/4$，多项式量子优势 $2^{m/2} = (2^{2cm})^{1/(4c)}$ 依然存在。

其次，即使在精度降至该误差下限之前，我们的自由累积量算法的运行时间也会呈指数级增长。在 $\ell = am$ 区域中，下面给出的传播成本关于 m 呈指数增长，态矢量模拟也是如此。因此，对于足够大的 a，我们的算法成本可能会超过态矢量模拟，此时应改用态矢量模拟。这再次为潜在的多项式量子优势打开了大门，其情形与上述情况完全相同。

我们对自由累积量进行了适度的数值研究，具体描述如下并展示于图7中；研究结果表明，上述常数因子确实以一种支持超二次多项式量子优势的方式发挥作用。我们的研究使用了自由累积量及其在无环近似下的二阶矩的精确表达式 [式（74）和（89）] 。这涉及对图进行求和；对于任意 m，n 均可进行数值计算，直至截断值 $\ell = 20$。（对于更高阶的情形，图的数量过多，无法在合理时间内完成计算。）我们的研究采用了一些启发式近似，其中最重要的是假设自由累积量的无环表达式在所关注的线性阶数下仍然适用，并假设我们的算法预测误差与被截断的主导自由累积量项的大小成正比。这些近似是否适当，以及如何更全面地理解这一小精度区域，超出了我们方法的能力范围，仍是未来工作中一个有趣的挑战。

我们的研究按以下步骤进行。首先，我们估算经典算法计算谱振幅时的误差随截断 ℓ 在各种 m [图7(a)]中的变化。为此，我们假设无环近似成立，将对易图视为埃尔德什-雷尼图，并利用方程（89），估算均方根累积量。我们还在无环埃尔德什-雷尼近似下，得到了均方根累积量的一个严格下界：该下界仅保留完全由弦组成的图；这有助于对较大 ℓ时的行为给出下界，而这些情况无法通过直接枚举图来处理。随后，我们在 $Z(t)$处对谱振幅的半圆值作泰勒展开，展开点取为第一个截断自由累积量在 $\ell + 2$阶时的值，并保留一阶项，从而将这一幅度转化为估算的算法误差。一阶导数是贝塞尔函数，$(-i)^{\ell+2}\mathcal{J}_{\ell+2}(2t)$由此得到最大误差的估算值

$$\varepsilon_\ell(m)^2 = \max_{t\geq 0} |\mathcal{J}_{\ell+2}(2t)|^2\, \mathbb{E}[\tilde{\kappa}^2_{\ell+2}], \tag{260}$$

其绘制于图 7(a) 中，展示了完整数值估计和下界。最大值出现在 $t = j'_{\ell+2,\ 1}/2$，其中 $j'_{k,\ 1}$ 是 $\mathcal{J}'_k$ 的第一个正零点，其大小按$|\mathcal{J}_{\ell+2}(2t)| \sim \ell^{-1/3}$的尺度变化。我们还在尖峰模型中重复这一过程，结果见 $\lambda = 1$ [图 7(c)]；为了处理尖峰模型中的众多颜色累积量，我们计算以下各项之间的互相关：

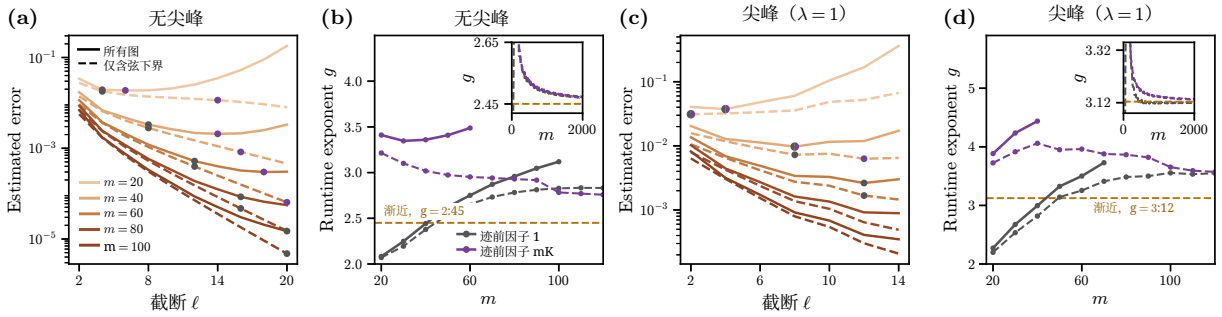


图 7：小精度下经典运行时间的启发式研究。**（a）**根据公式（260）估计的算法误差随自由累积量截断值 ℓ 的变化。实线曲线包含所有图扇区；虚线表示仅纳入只含弦的图后得到的严格下界。灰色和紫色圆点标出了 ℓ 的交叉值，在这些值处，态矢量模拟比我们的算法更高效。**（b）**交叉点处的运行时间指数 g，使用迹前因子1 （灰色）或 mK（紫色），其中 $K = m/2$。插图将范围扩展到更大的 m，以展示仅含弦下界结果（虚线）向其渐近值（金色虚线）收敛的过程2。45。**（c、d）**尖峰模型的类似计算。更多细节请参阅正文。

所有阶数为 $\ell + 2$ 的颜色累积量与谱振幅的导数，并对时间取其均方误差的最大值。为了在无环 Erdős–Rényi 模型中得到解析上易于处理的严格下界，我们只保留仅含弦图的贡献，其中图中出现的所有 $q = (\ell + 2)/2$ 个不同哈密顿量项均与尖峰对易。由此得到估计均方误差的一个下界。

其次，我们估计直接经典模拟的成本，以便今后进行比较。直接映射表明，任何 m 项泡利哈密顿量都可以压缩为至多作用于 m 个量子比特。因此，任何 m 项哈密顿量都可以通过态矢量模拟，在大小为 2^m 的希尔伯特空间上进行模拟。通过结合文献 [109] 的思想与我们所研究的特定哈密顿量的随机性，还可以进一步将规模缩减至 $\mathcal{O}(2^{m/2})$。这是因为稀疏随机泡利哈密顿量的对易矩阵秩为 $m - d$，其中 d 以高概率很小。在 $m/2$ 个量子比特上的哈密顿量的谱振幅，可以通过将迹替换为对 R 个 Haar 随机态的经验平均来估计，其标准差为 $\mathcal{O}(2^{-m/4}/R^{1/2})$，运行时间为 $T_{\mathrm{tr}} \sim A(2^{m/2} + \varepsilon^{-2})$。参数 A 计入了每次 Haar 随机态模拟相对于希尔伯特空间维度的额外开销；例如，一个合理的估计是 $A = mK$，其中 m 是哈密顿量项的数量，K 是时间演化所需的最大矩。我们在图 7 中评估了两种选择 $A = 1$ 和 $A = mK = m^2/2$ 下的这一经典成本，以了解这一非指数前因子对数值估计范围的影响。这里，我们将 $K = m/2$ 设为一个粗略估计。

第三，我们比较这两种成本，以确定算法误差阈值以及态矢量模拟开始比我们的算法更有优势时的阶数 ℓ。我们假设我们的算法的经典运行时间为 $C(m,\ \ell) = m\sum_{j=0}^{\ell/2-1}\sum_{0\le k\le j,\ k\equiv j \bmod 2}\binom{m}{k}$，这精确地统计了可能出现在 $H^{\ell/2}$ 中的泡利算符数量。对于每个要求的精度，我们选取估计误差低于期望精度的最小截断值 ℓ。然后，我们将算法在此 ℓ 下的经典运行时间与 T_{tr} 进行比较。我们的算法转向态矢量模拟的交叉点在

图 7（a）和（c）的每条曲线上。

最后，我们利用这个交叉点，结合精度来估算经典算法运行时间的有效次数。我们采用极为粗略的估算方法，假设经典成本等于 $(1/\varepsilon)^g$，其中 ε 是期望精度，我们已按上述方法进行了估算。对于每个ε，我们对上文得到的阈值处的经典运行时间取以 $1/\varepsilon$ 为底的对数，从而得到有效次数 g。无尖峰模型和尖峰模型的结果分别见图 7(b) 和 (d)。对于无尖峰模型，所得次数在 $\ell = 20$之前介于 2 和 3.5 之间；对于尖峰模型，在 $\ell = 14$之前介于 2 和 4.5 之间。这些结果对应的项数介于 $m = 20$ 和 $m = 100$之间。渐近地，我们的仅含弦下界预测，无尖峰模型的指数 g 趋近于 $g \approx 2.45$ ，尖峰模型的指数 $g \approx 3.12$ 趋近于相应的值。尽管如此，我们观察到，随着 m 增大，仅含弦下界与根据所有图估算得到的 g 之间的差距不断扩大；这表明，计入所有图的真实渐近 g 趋近于一个更大的值。

第五部分

选择性技术性证明

在本部分中，我们完成前几节中暂缓给出的若干技术性证明。其中大多数证明对于算法的正确性或其核心思想并非严格必要；相反，它们只是针对某些参数提供了略微的优化。

在P 节中，我们将F 节中的矩和自由累积量截断分析扩展为一种可用于我们许多证明的一般形式。在Q 节中，我们将J 节和L节的无限温度结果扩展到有限温度热态，包括M 节中的有限温度热态。在R 节中，我们给出D 节中所用组合引理的证明。最后，在S 节中，我们针对某些参数范围提供一种运行时间更短的替代算法，并在T 节中利用超收缩性对我们所有算法的成功概率进行更紧致的分析。

P 福克空间截断界

本节给出关于截断矩和自由累积量时近似保证的一般结果。我们首先给出实时间演化乘积的通用截断误差界，然后将其扩展到一般复数值。引理 P.3以一般形式陈述，从而既可用于第二部分中的 TOC/OTOC 算法，也可用于第三部分中的尖峰泡利算法。

在以下设定中，函数 $\mathcal{K}$ 将用于表示自由累积量求和。不过，我们暂且将其视为一般的上界函数。我们考虑实时间和复时间情形共有的以下设定：

设定 P.1。 取偶整数 $2 \le \ell < L$。设 X 为厄米算子， $U_1, \dots, U_r$ 为作用于同一空间的算子，且满足 $\|U_j\| \le 1$。设 $\mathcal{T}_\ell, \mathcal{T}_L, V_1, \dots, V_r, S$ 为希尔伯特空间上的有界算子， $|\xi\rangle, |\zeta\rangle$ 为单位向量，其中 $\|V_j\| \le 1$ 且 S 为自伴算子。假设对于某个单调不减函数 $\mathcal{K} : \mathbb{Z}_{\ge 0} \to \mathbb{R}_{\ge 0}$，

$$\|S\| \le R, \qquad \|\mathcal{T}_\ell - S\| \le \mathcal{K}(\ell), \qquad \|\mathcal{T}_L - S\| \le \mathcal{K}(L), \qquad \|\mathcal{T}_L - \mathcal{T}_\ell\| \le \mathcal{K}(L) - \mathcal{K}(\ell), \tag{261}$$

其中 $R \ge 2$。另假设，对于所有满足 $\sum_j h_j < L$的非负整数 $h_1, \dots, h_r$ ，

$$\overline{\mathrm{Tr}}(X^{h_1} U_1 \cdots X^{h_r} U_r) = \langle \xi | \, \mathcal{T}_L^{h_1} V_1 \cdots \mathcal{T}_L^{h_r} V_r \, | \zeta \rangle \, . \tag{262}$$

对于 $z_1, \dots, z_r \in \mathbb{C}$，定义

$$N \equiv \overline{\mathrm{Tr}} \left(\prod_{j=1}^{r} e^{i z_j X} U_j \right), \qquad N_\ell \equiv \langle \xi | \prod_{j=1}^{r} e^{i z_j \mathcal{T}_\ell} V_j \, | \zeta \rangle \, , \qquad N_L \equiv \langle \xi | \prod_{j=1}^{r} e^{i z_j \mathcal{T}_L} V_j \, | \zeta \rangle \, , \tag{263}$$

$\widehat{}$和 N 分别为 N_ℓ 的 L次泰勒多项式。

我们还将使用以下标准结果：

命题 P.2 (Duhamel公式)。 设 A 和 B 是希尔伯特空间上的有界算子，且$t \ge 0$。那么

$$e^{iAt} - e^{iBt} = i \int_0^t e^{iA(t-s)} \, (A - B) \, e^{iBs} \, ds. \tag{264}$$

我们的一般截断引理如下：

引理 P.3 (截断的近似误差（实时）)。 考虑 设定 *P.1* 其中 $|\xi\rangle = |\zeta\rangle = |\Omega\rangle$ 且 $z_j = t_j \in \mathbb{R}$。定义 $T \equiv \sum_j |t_j|$，并假设 $\mathrm{Tr}(|X|^L) \le (R + \mathcal{K}(L))^L$。那么

$$|N - \widehat{N}| \le e^{T\mathcal{K}(L)} \left[T\big(\mathcal{K}(L) - \mathcal{K}(\ell)\big) + \frac{\big(T(R + \mathcal{K}(L))\big)^L}{L!} \left(2 + \frac{T(R + \mathcal{K}(L))}{L+1} \right) \right]. \tag{265}$$

证明。 首先，式 (261) 以及三角不等式界 $\|\mathcal{T}_{\ell'}\| \le \|S\| + \|\mathcal{T}_{\ell'} - S\|$ 对于 $\ell' \in \{\ell, L\}$。此外，由于 S 是自伴的，推论 F.3 适用于 $\mathcal{T}_{\ell'} = S + (\mathcal{T}_{\ell'} - S)$ （以及 $-S$ 和 $-(\mathcal{T}_{\ell'} - S)$ 当 $u < 0$时）。综合这些结果，对于 $\ell' \in \{\ell, L\}$ 以及每个 $u \in \mathbb{R}$,

$$\|\mathcal{T}_{\ell'}\| \le R + \mathcal{K}(L), \qquad \left\| e^{iu\mathcal{T}_{\ell'}} \right\| \le e^{|u|\,\|\mathcal{T}_{\ell'} - S\|} \le e^{|u|\mathcal{K}(L)}. \tag{266}$$

为了比较演化算子的乘积，我们用一个公共参数 $u \in [0,1]$ 对所有时间进行重新缩放。定义

$$f(u) \equiv \overline{\mathrm{Tr}} \left(\prod_{j=1}^{r} e^{iut_j X} U_j \right), \qquad f_{\ell'}(u) \equiv \langle \Omega | \prod_{j=1}^{r} e^{iut_j \mathcal{T}_{\ell'}} V_j \, |\Omega\rangle, \tag{267}$$

使得 $N = f(1)$ 和 $N_{\ell'} = f_{\ell'}(1)$。$(t_1, \ldots\ldots, t_r)$ 中总次数为 k 的单项式对 $\sim f_\ell(u)$ 的贡献为 u^k，因此 N_ℓ 的次数为 L 的泰勒多项式 N 为

$$\widehat{N} = \sum_{k=0}^{L} \frac{f_\ell^{(k)}(0)}{k!}. \tag{268}$$

由莱布尼茨法则，对于每个 $k \ge 0$,

$$f^{(k)}(u) = \sum_{\substack{h_1, \ldots, h_r \ge 0 \\ h_1 + \cdots + h_r = k}} \frac{k!}{h_1! \cdots h_r!} \left(\prod_{j=1}^{r} (it_j)^{h_j} \right) \overline{\mathrm{Tr}} \left(\prod_{j=1}^{r} X^{h_j} e^{iut_j X} U_j \right), \tag{269}$$

将 X、U_j 和 Tr 分别替换为 $f_{\ell'}$、$\mathcal{T}_{\ell'}$、V_j 和 $\langle\Omega| \cdot |\Omega\rangle$，也有相同的公式。对于 $k = L$，指数为 L/h_j 的归一化 Schatten 范数的赫尔德不等式将式 (269) 中的每个迹限制为 $\mathrm{Tr}(|X|^L)$，因为每个 $e^{iut_j X} U_j$ 都是压缩算子。对于 $f_{\ell'}$，每个矩阵元都至多为 $\prod_j \|\mathcal{T}_{\ell'}\|^{h_j} \|e^{iut_j \mathcal{T}_{\ell'}}\|$。因此，由多项式定理、关于 $\mathrm{Tr}(|X|^L)$ 的假设以及式 (266)，对所有 $0 \le u \le 1$ 和 $k \ge 0$,

$$|f^{(L)}(u)| \le T^L \, \overline{\mathrm{Tr}}(|X|^L) \le \big(T(R + \mathcal{K}(L))\big)^L, \qquad |f_{\ell'}^{(k)}(u)| \le \big(T(R + \mathcal{K}(L))\big)^k e^{uT\mathcal{K}(L)}. \tag{270}$$

我们的目标是证明混合序列

$$N \xrightarrow{(1)} N_L \xrightarrow{(2)} N_\ell \xrightarrow{(3)} \widehat{N} \tag{271}$$

每一步都会产生一个较小的加性误差，然后应用三角不等式。

步骤（1）：初始累积量截断。令 $u=0$ 在式（269）中，矩匹配假设式（262）给出 $f_{(k)}(0) = f_L^{(k)}(0)$ 对所有 $k<L$都成立，因此 f和 f_L在 P_{L-1} 处的 $L-1$ 次 $u=0$泰勒多项式相同。我们首先截断 f的泰勒级数。根据带积分余项的泰勒公式及式（270），

$$|N - P_{L-1}(1)| \le \frac{1}{L!}\sup_{0\le u\le 1}|f^{(L)}(u)| \le \frac{\big(T(R+\mathcal{K}(L))\big)^L}{L!}. \tag{272}$$

然后，我们通过同一泰勒近似的逆过程，回到 $\mathcal{T}_L$ 的指数乘积：

$$|P_{L-1}(1) - N_L| \le \frac{1}{L!}\sup_{0\le u\le 1}|f_L^{(L)}(u)| \le \frac{\big(T(R+\mathcal{K}(L))\big)^L}{L!}e^{T\mathcal{K}(L)}. \tag{273}$$

结合这两种近似并利用三角不等式，得到

$$|N - N_L| \le \big(1+e^{T\mathcal{K}(L)}\big)\frac{\big(T(R+\mathcal{K}(L))\big)^L}{L!} \le 2e^{T\mathcal{K}(L)}\frac{\big(T(R+\mathcal{K}(L))\big)^L}{L!}. \tag{274}$$

步骤（2）：二阶累积量截断。将定义N_L 和 N_ℓ 的两个乘积之差展开为望远镜和，得到

$$N_L - N_\ell = \sum_{j=1}^{r}\langle\Omega|\Big(\prod_{i<j}e^{it_i\mathcal{T}_L}V_i\Big)\big(e^{it_j\mathcal{T}_L}-e^{it_j\mathcal{T}_\ell}\big)V_j\Big(\prod_{i>j}e^{it_i\mathcal{T}_\ell}V_i\Big)|\Omega\rangle. \tag{275}$$

根据命题 P.2 （应用于 $-\mathcal{T}_L$ 和 $-\mathcal{T}_\ell$，当 $t_j<0$时），再结合公式（261）和（266），

$$\big\|e^{it_j\mathcal{T}_L}-e^{it_j\mathcal{T}_\ell}\big\| \le \int_0^{|t_j|} e^{(|t_j|-s)\mathcal{K}(L)}\,\|\mathcal{T}_L-\mathcal{T}_\ell\|e^{s\mathcal{K}(L)}\,ds \le |t_j|\,\big(\mathcal{K}(L)-\mathcal{K}(\ell)\big)e^{|t_j|\mathcal{K}(L)}. \tag{276}$$

进行界定利用公式（266）和 $\|V_i\|\le 1$对其余因子作界定，并对 j求和，得到

$$|N_L - N_\ell| \le T\big(\mathcal{K}(L)-\mathcal{K}(\ell)\big)e^{T\mathcal{K}(L)}. \tag{277}$$

步骤（3）：矩截断。现在我们已将累积量截断到 ℓ 阶，接下来估计对这一截断量进行泰勒级数近似所产生的误差。根据 公式（268），$\widehat{N}$ 是 f_ℓ 的 L次泰勒多项式，在 $u=1$处取值。利用带积分余项的泰勒公式以及 公式（270）（其中 $k=L+1$），可得

$$|N_\ell - \widehat{N}| \le \frac{1}{(L+1)!}\sup_{0\le u\le 1}\big|f_\ell^{(L+1)}(u)\big| \le \frac{\big(T(R+\mathcal{K}(L))\big)^{L+1}}{(L+1)!}e^{T\mathcal{K}(L)}. \tag{278}$$

汇总各项。最后，我们将 公式（274）、（277）和 （278）中的各项贡献合并起来。应用三角不等式可得

$$|N - \widehat{N}| \le e^{T\mathcal{K}(L)}\left[2\frac{\big(T(R+\mathcal{K}(L))\big)^L}{L!} + T\big(\mathcal{K}(L)-\mathcal{K}(\ell)\big) + \frac{\big(T(R+\mathcal{K}(L))\big)^{L+1}}{(L+1)!}\right], \tag{279}$$

即公式 (265)。 □

参数	谱振幅	TOC	OTOC	尖峰谱振幅
X	H	H	H	$H+\lambda Q$
(t_j)	$(-t)$	$(t,\ -t)$	$(t,-t,t,-t)$	$(-t)$
(U_j)	$(\mathbb{I})$	$(A,\ A)$	(A,B,A,B)	$(\mathbb{I})$
(V_j)	$(\mathbb{I})$	$(b,\ b)$	(b_1,b_2,b_1,b_2)	$(\mathbb{I})$
$\lvert\Omega\rangle$	$\lvert 0\rangle$	$\lvert\Omega_1\rangle$	$\lvert\Omega_2\rangle$	$\lvert\Omega_1\rangle$
S	$a^\dagger+a$	$a^\dagger+a$	$a^\dagger+a$	$a^\dagger+a+\lambda b$
R	2	2	2	$2+\lambda$
T	t	$2t$	$4t$	t

表 3： 引理 P.3中使用的参数。谱振幅证明使用自由累积量和以及引理 F.5；其他可观测量则使用颜色累积量和以及 Duhamel界。

表 3　展示了每种算法所采用的引理 P.3中的参数　m.

引理 P.4 (截断的近似误差（复时间）)。 在 设定 *P.1*中，假设 X满足 (296) 且参数为 $0<\eta<1$。令 $\beta=\sum_j|\operatorname{Im} z_j|$ 并选择 $T\geq\sum_j|z_j|$ 使得 $T\leq L/C$，其中 C 是引理 *Q.3*中的常数。则有

$$|N-\widehat{N}|\leq\eta^{-1}2^{1-L}+e^{R\beta+T\mathcal{K}(L)}\left[T\big(\mathcal{K}(L)-\mathcal{K}(\ell)\big)+\frac{\big(T(R+\mathcal{K}(L))\big)^L}{L!}\left(1+\frac{T(R+\mathcal{K}(L))}{L+1}\right)\right]. \tag{280}$$

证明。 根据 引理 F.2 和 式 (261)，对于 $\ell'\in\{\ell,L\}$,

$$\|\mathcal{T}_{\ell'}\|\leq R+\mathcal{K}(\ell'),\qquad \|e^{iuz\mathcal{T}_{\ell'}}\|\leq e^{uR|\operatorname{Im} z|+u|z|\mathcal{K}(\ell')},\qquad 0\leq u\leq 1. \tag{281}$$

我们使用与实时间证明中相同的三个混合序列:

$$N\xrightarrow{(1)}N_L\xrightarrow{(2)}N_\ell\xrightarrow{(3)}\widehat{N}. \tag{282}$$

步骤 (1)：初始累积量截断。 插入总次数小于 L的公共泰勒多项式，使用（262）。根据（ X ）的余项至多为 $\eta^{-1}2^{1-L}$ （297）。对于辅助余项，令 $f_{\ell'}(u)=\langle\xi|\prod_j e^{iuz_j\mathcal{T}_{\ell'}}V_j|\zeta\rangle$。应用莱布尼茨法则、（281）和多项式定理可得

$$|f_{\ell'}^{(k)}(u)|\leq\big(T(R+\mathcal{K}(\ell'))\big)^k e^{R\beta+T\mathcal{K}(\ell')},\qquad 0\leq u\leq 1. \tag{283}$$

因此，带积分余项的泰勒公式将这一步界定为

$$\eta^{-1}2^{1-L}+e^{R\beta+T\mathcal{K}(L)}\frac{\big(T(R+\mathcal{K}(L))\big)^L}{L!}. \tag{284}$$

步骤（2）：二阶累积量截断。对定义N_L 和 N_ℓ的两个乘积之差作望远镜展开。对每一对 $z_j\mathcal{T}_L$, $z_j\mathcal{T}_\ell$ 在时刻应用命题 P.2，并用（281）估计其余因子。由于，可得

$$|N_L-N_\ell|\leq T\big(\mathcal{K}(L)-\mathcal{K}(\ell)\big)e^{R\beta+T\mathcal{K}(L)}. \tag{285}$$

步骤（3）：矩截断。输出是 f_ℓ 的泰勒多项式，截断到 L次，在 $u=1$处取值。令（283）中的，可将余项估计为

$$|N_\ell - \widehat{N}| \le e^{R\beta + T\mathcal{K}(\ell)} \frac{\big(T(R+\mathcal{K}(\ell))\big)^{L+1}}{(L+1)!}. \tag{286}$$

将这三项误差相加，并利用 $\mathcal{K}(\ell) \le \mathcal{K}(L)$，即可证明该结论。 □

热态可观测量的 Q 扩展

我们将第 I、II 和 III 部分中的算法扩展到逆温度为 $\beta \ge 0$ 的吉布斯态。首先，我们为近似分析所需的稀疏泡利哈密顿量建立一般的矩界，见 Q.1 小节。然后，我们给出配分函数近似，并将相同的截断论证应用于关联函数和热期望值。

Q.1 矩界与泰勒级数截断

我们首先为热算法所需的泡利哈密顿量给出泰勒余项界。我们采用 Bandeira 等人的矩界。 [110, 定理 4。2], 将其专门化到稀疏泡利模型，并结合 B.2 小节中的对易符号估计。

引理 Q.1（符号平均矩）。固定泡利支撑集 $\mathbf{P} = (P_1, \ldots, P_m)$，并令 $H = m^{-1/2}\sum_{i=1}^m J_i P_i$ 具有相互独立的均匀符号 $J_i \in \{\pm 1\}$。令 W 为其对易符号矩阵（定义 *B.6*）。那么，对于每个偶整数 $k \ge 2$,

$$\left(\mathop{\mathbb{E}}_{\vec{\mathbf{J}}} \overline{\mathrm{Tr}}(H^k)\right)^{1/k} \le 2\sqrt{1 + \frac{k}{2m}\lambda_{\max}^{+}(W - 2\mathbb{I}_m)}, \tag{287}$$

其中，对于厄米矩阵 M，$\lambda_{\max}^{+}(M) \equiv$最大值$\{0, \lambda_{\max}(M)\}$。

证明。 我们将 [110, 定理 42] 专门应用于相互独立的 Rademacher 变量。在标准正交基 $\{|S\rangle : S \subseteq [m]\}$上，令 $\ell_i |S\rangle = |S \cup \{i\}\rangle$ 当 $i \notin S$时，令 $\ell_i |S\rangle = 0$，否则令其为$\ell_i + \ell_i^*$。这些算符在真空态 $|\varnothing\rangle$中的联合分布与相互独立的 Rademacher 变量相同：一个乘积恰好在每个指标出现偶数次时返回真空。它们的产生与湮灭算子满足

$$\ell_i^* \ell_j - (1 - 2\delta_{ij})\ell_j \ell_i^* = \delta_{ij}\mathbb{I}. \tag{288}$$

数算符 $\sum_i \ell_i \ell_i^*$ 通过乘以 $|S|$作用于 $|S\rangle$，因此其在满足$|S| \le k/2$ 的子空间上的范数至多为 $k/2$。

应用该定理，其中 $q = 0$ 和矩阵系数为 $P_i/\sqrt{m}$。它们的平方和为 $\mathbb{I}$，该定理中的部分对易子为

$$C_0 = \left[\frac{1 - 2\delta_{ij}}{m} P_j P_i\right]_{i,j=1}^{m}. \tag{289}$$

块对角矩阵 $D = \mathrm{diag}(P_1, \ldots, P_m)$ 是幺正的，并满足

$$DC_0 D = \frac{W - 2\mathbb{I}_m}{m} \otimes \mathbb{I}, \tag{290}$$

因为 $P_i P_j P_i P_j = \langle P_i, P_j\rangle \mathbb{I}$。因此 $\lambda_{\max}^{+}(C_0) = m^{-1}\lambda_{\max}^{+}(W - 2\mathbb{I}_m)$，这就证明了（287）。 □

这一估计在任意矩阶下都成立，无需假设无环性。接下来，我们利用与第一部分中相同的对易符号近似独立性，来界定对易符号矩阵。

引理 Q.2（对易符号矩阵的范数）。存在常数 $C>0$，使得当 $n\ge 2$, $C\log n\le m\le \mathrm{poly}(n)$ 且 $\delta=1/\mathrm{poly}(n)$时，随机泡利支撑的对易符号矩阵满足

$$\|W\|\le C\sqrt{m} \tag{291}$$

在 $\mathbf{P}$ 上以至少 $1-\delta-e^{-\Omega(n)}$ 的概率成立。

证明。令 S 为一个对称的 $m\times m$ 矩阵，其对角线为零，且对角线上方的元素是相互独立的均匀符号。对于偶数 k，将 $\mathrm{Tr}\big((W-\mathbb{I}_m)^k\big)$ 展开为长度为 k的闭游走之和。只有不含对角步的游走才有贡献。如果此类游走的每条无向边都出现偶数次，则其贡献为 1，对于 $W-\mathbb{I}_m$ 如此，对于 S 的期望也是如此。其余每个非零项都可化为若干互不相同的对易符号的非空乘积；根据 4^{-n}，其期望至多为引理 B.7；而对于 S，其期望为零。这样的游走至多有 m^k 个，因此

$$\mathop{\mathbb{E}}_{\mathbf{P}}\mathrm{Tr}\big((W-\mathbb{I}_m)^k\big)\le \mathbb{E}\,\mathrm{Tr}\Big(S^k\Big)+4^{-n}m^k. \tag{292}$$

对于每个实单位向量 x，将 Hoeffding 不等式应用于 $x^\top Sx=2\sum_{a<b}S_{ab}x_ax_b$，可得 $\Pr\big(|x^\top Sx|>u\big)\le 2e^{-u^2/4}$。因而，单位球面的一个至多包含 9^m 个点的 $1/4$-网给出 $\Pr(\|S\|>u)\le 2\cdot 9^m e^{-u^2/16}$。对该尾部概率进行积分可得

$$\mathbb{E}\,\mathrm{Tr}\Big(S^k\Big)\le m\big(C(\sqrt{m}+\sqrt{k/2})\big)^k. \tag{293}$$

选取一个偶整数 $k=\Theta(\log n)$，其中隐含常数足够大。假设$m\ge C\log n$ 保证了 $k/2\le m$。将马尔可夫不等式应用于（292），并增大范数阈值中的常数，可得

$$\Pr_{\mathbf{P}}\big(\|W-\mathbb{I}_m\|>C\sqrt{m}\big)\le m\,4^{-k/2}+4^{-n}m^{k/2}\le \delta+e^{-\Omega(n)}. \tag{294}$$

最后一个不等式使用了 $\frac{k}{2}\log m=\mathcal{O}(\log^2 n)=o(n)$。最后，$\|W\|\le 1+\|W-\mathbb{I}_m\|$，通过增大 C将其吸收。 □

引理 Q.3（稀疏泡利哈密顿量的泰勒级数截断）。存在一个常数$C>0$，使得对于每个 $n\ge 2$，失败概率 $\delta=1/\mathrm{poly}(n)$，$0<\eta<1$，整数 $L\ge 1$ 和满足条件的 m

$$\max\{L^2,C\log n\}\le m\le \mathrm{poly}(n), \tag{295}$$

稀疏泡利哈密顿量 H 满足

$$\sum_{k=L}^{\infty}\frac{(L/C)^k}{k!}\overline{\mathrm{Tr}}(|H|^k)\le \eta^{-1}2^{1-L} \tag{296}$$

其概率至少为 $1-\delta-\eta-e^{-\Omega(n)}$。

在同一事件上，对于每个整数 $r \geq 1$，所有满足 $\|U_j\| \leq 1$ 的 n 量子比特算符 U_1、……、U_r，以及所有满足 $\sum_j |z_j| \leq L/C$ 的 z_1、……、$z_r \in \mathbb{C}$

$$\left| \overline{\mathrm{Tr}} \left(e^{iz_1 H} U_1 \cdots e^{iz_r H} U_r \right) - \sum_{\substack{h_1,\ldots,h_r \geq 0 \\ h_1+\cdots+h_r<L}} \left(\prod_{j=1}^{r} \frac{(iz_j)^{h_j}}{h_j!} \right) \overline{\mathrm{Tr}} \left(H^{h_1} U_1 \cdots H^{h_r} U_r \right) \right| \leq \eta^{-1} 2^{1-L}. \quad (297)$$

证明。关于 满足以下支撑集条件 (291)。根据引理 Q.1，对每个偶整数 $k' \geq 2$，

$$\left(\mathop{\mathbb{E}}_{\vec{\mathbf{J}}} \overline{\mathrm{Tr}}(H^{k'}) \right)^{1/k'} \leq 2\sqrt{1 + \frac{C_0 k'}{2\sqrt{m}}}. \quad (298)$$

对于任意整数 $k \geq 1$，对归一化迹和符号期望应用赫尔德不等式，其中 $k' = 2\lceil k/2 \rceil$，得到

$$\left(\mathop{\mathbb{E}}_{\vec{\mathbf{J}}} \overline{\mathrm{Tr}}(|H|^k) \right)^{1/k} \leq C_1 \left(1 + \frac{\sqrt{k}}{m^{1/4}} \right). \quad (299)$$

对于 $k \geq L$，界 $k! \geq (k/e)^k$ 以及假设 $m \geq L^2$ 可推出

$$\left(\frac{(L/C)^k}{k!} \mathop{\mathbb{E}}_{\vec{\mathbf{J}}} \overline{\mathrm{Tr}}(|H|^k) \right)^{1/k} \leq \frac{eC_1 L}{C} \left(\frac{1}{k} + \frac{1}{m^{1/4}\sqrt{k}} \right) \leq \frac{2eC_1}{C} \leq \frac{1}{2}, \quad (300)$$

对于足够 大的 C。单调收敛以及几何级数求和给出

$$\mathop{\mathbb{E}}_{\vec{\mathbf{J}}} \left[\sum_{k=L}^{\infty} \frac{(L/C)^k}{k!} \overline{\mathrm{Tr}}(|H|^k) \right] \leq \sum_{k=L}^{\infty} 2^{-k} = 2^{1-L}. \quad (301)$$

马尔可夫不等式证明了 (296) 在条件概率至少为 $1-\eta$ 的情况下，对 $\vec{\mathbf{J}}$成立。结合 引理 Q.2 即可得到所述的概率，对 H。

为证明 (297，将每个指数函数展开为泰勒级数，并按总次数$k = h_1 + \cdots + h_r$对各项分组。在 引理 P.3 的证明中使用的归一化 Schatten 霍尔德不等式给出

$$\left| \overline{\mathrm{Tr}} \left(H^{h_1} U_1 \cdots H^{h_r} U_r \right) \right| \leq \prod_{j:h_j>0} \left(\overline{\mathrm{Tr}}(|H|^k) \right)^{h_j/k} = \overline{\mathrm{Tr}}(|H|^k), \qquad k \geq 1, \quad (302)$$

其中，含有 $h_j = 0$ 的因子在算子范数下有界。根据多项式定理，所有次数为 k 的项的绝对值之和至多为

$$\frac{\left(\sum_j |z_j| \right)^k}{k!} \overline{\mathrm{Tr}}(|H|^k) \leq \frac{(L/C)^k}{k!} \overline{\mathrm{Tr}}(|H|^k). \quad (303)$$

对 $k \geq L$ 求和并应用 (296，即可同时证明所有所述选择均满足结论。

□

取 $r = 1$ 和 $U_1 = \mathbb{I}$ 可得配分函数和谱振幅的泰勒余项；取 $U_1 = P_i$ 可得热期望所需的插入迹。对于 TOC 和 OTOC 分子，将热因子与相邻的演化项结合后，总复时间绝对值分别至多为 $\beta + 2|t|$ 和 $\beta + 4|t|$。因此，在这四种应用中，同一事件都能控制 H 的泰勒余项。该界针对实际采样的哈密顿量，不使用无环截断；有限阶累积量假设则用于比较这些泰勒系数与辅助矩。

Q.2 配分函数

我们首先计算配分函数，它是热谱振幅、关联函数和期望值的共同归一化。回忆 $\mathcal{Z}(\beta) \equiv \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}\right)$，并记

$$z_\beta \equiv \overline{\mathrm{Tr}}(e^{-\beta H}) = 2^{-n}\mathcal{Z}(\beta). \tag{304}$$

我们将 z_β 近似到相对精度；乘以 2^n 后，对于 $\mathcal{Z}$（β）仍具有相同的相对精度。

计算使用与 $\hat{\mu}_k^{(\ell)} = \langle 0|\, \mathcal{T}_\ell^k \,|0\rangle$ 相同的矩，这些矩来自 算法 1。对于偶数 $2 \le \ell < L$，定义标量泰勒多项式

$$\widehat{Z}_L(z) \equiv \sum_{k=0}^{L} \frac{(iz)^k}{k!}\hat{\mu}_k^{(\ell)}, \qquad z \in \mathbb{C}. \tag{305}$$

我们的配分函数算法执行 算法 1 的步骤 (1)–(3)，并将其最终读出替换为

$$\hat{z}_\beta \equiv \widehat{Z}_L(i\beta), \qquad \widehat{\mathcal{Z}}_\beta \equiv 2^n \hat{z}_\beta. \tag{306}$$

对于 $m \ge CL^3$，固定截断下的运行时间为

$$\mathcal{O}\left(n\ell\binom{m}{\ell/2}\right). \tag{307}$$

系数递推的计算成本为 $\mathcal{O}(\ell L^2) \le \mathcal{O}(L^3) \le \mathcal{O}(m)$，并包含在低阶矩计算中。接下来，我们在真实配分函数的尺度上界定误差。

引理 Q.4 （配分函数下界）。 设 H 为厄米矩阵，满足 $\kappa_2 = 1$ 且所有奇数阶自由累积量直到偶数阶 $L \ge 4$ 均为零，并设 $\mathcal{K}$（L） 如 引理 *F.6*所述。若

$$(L+1)\mathcal{K}(L) \le \log(3/2), \qquad L \ge 2\beta + 2, \tag{308}$$

那么，对于某个绝对常数 $c > 0$,

$$z_\beta \ge \max\left\{1, \frac{ce^{2\beta}}{(1+\beta)^{3/2}}\right\}. \tag{309}$$

证明。 对（37）应用拉格朗日反演，并将截至偶数阶 k的奇数阶累积量设为零，可得

$$\overline{\mathrm{Tr}}(H^k) = \frac{1}{k+1}[u^{k/2}]\left(1 + u + \sum_{\substack{4\le k'\le k\\ k' \text{ even}}} \kappa_{k'} u^{k'/2}\right)^{k+1}. \tag{310}$$

不含高阶累积量因子的项为 $C_{k/2}$。若选取 $h \ge 1$ 个高阶累积量因子，则其乘积的绝对系数和至多为 $\mathcal{K}(L)^h$，剩余 $(1+u)^{k+1-h}$ 的每个系数至多为 $\binom{k+1}{k/2}$。因此，

$$|\overline{\mathrm{Tr}}(H^k) - C_{k/2}| \le C_{k/2}\sum_{h=1}^{k+1}\binom{k+1}{h}\mathcal{K}(L)^h = C_{k/2}\big((1+\mathcal{K}(L))^{k+1} - 1\big). \tag{311}$$

在 (308) 下，这至多为 $C_{k/2}/2$，因此 $\mathrm{Tr}(H^k) \geq C_{k/2}/2$ 在整个受控值域内。

由于 $\mathrm{Tr}(H) = 0$，由詹森不等式可得 $z_\beta \geq 1$。对于 $\beta \geq 4$，令 $k = 2\lfloor\beta\rfloor$ and $h = \lfloor\sqrt{\beta}\rfloor$。泰勒积分余项给出，对每个实数 x，都有 $e^x \geq \sum_{k'=0}^{k+1} x^{k'}/k'!$。将此不等式应用于 $-\beta H$ 的特征值。多项式中的所有奇数阶矩均为零，因为 $k+1 \leq L-1$，而每个偶数阶矩均非负。因此，保留满足 $k-2h \leq k' \leq k$ 的偶数次项 k'，可得

$$z_\beta \geq \frac{1}{2} \sum_{\substack{k-2h \leq k' \leq k \\ k' \text{ even}}} \frac{\beta^{k'}}{(k'/2)!(k'/2+1)!} \geq \frac{c(h+1)e^{2\beta}}{(1+\beta)^2} \geq \frac{ce^{2\beta}}{(1+\beta)^{3/2}}, \tag{312}$$

其中，斯特林界在整个值域上统一给出中间的不等式，因为 $0 \leq \beta - k'/2 \leq \sqrt{\beta}+1$ and $k'/2 \asymp \beta$。对于 $0 \leq \beta < 4$，将 c 化简后，由 $z_\beta \geq 1$ 可得同样的界。 □

下界将共同的截断估计转化为配分函数尺度上的误差。

推论 Q.5 （截断误差的归一化）。 在 引理 *P.4* 的假设下，设 （309）成立，并且

$$2 \leq R \leq 3, \qquad \beta(R-2) + T\mathcal{K}(L) \leq 1, \qquad L \geq C(1+T), \tag{313}$$

对于充分大的常数 C。则

$$\frac{|N - \widehat{N}|}{z_\beta} \leq C(1+\beta)^{3/2} \left[T\big(\mathcal{K}(L) - \mathcal{K}(\ell)\big) + \eta^{-1} 2^{-L} \right]. \tag{314}$$

证明。 将（280）的第一项除以 $z_\beta \geq 1$。对于其余各项，式（309）和（313）给出

$$\frac{e^{R\beta + T\mathcal{K}(L)}}{z_\beta} \leq C(1+\beta)^{3/2} e^{\beta(R-2)+T\mathcal{K}(L)} \leq C(1+\beta)^{3/2}. \tag{315}$$

此外， $T(R+\mathcal{K}(L)) \leq 3T+1$。因此 $L! \geq (L/e)^L$，并且对 L 的选择将辅助泰勒项控制在 $C2^{-L}$ 以内。由于 $\eta < 1$，这些项可被所显示的界所吸收。 □

引理 Q.6。 设 H 为厄米矩阵，满足 $\kappa_2 = 1$，且所有奇数阶自由累积量均消失，直至偶数阶 L。固定偶数 $2 \leq \ell < L$ 和 t， $\beta \geq 0$，并令 $z = -t + i\beta$。设泰勒尾事件（296）对于参数 $0 < \eta < 1$成立，并且

$$(L+1)\mathcal{K}(L) \leq \log(3/2), \qquad L \geq C(1+\beta+t), \tag{316}$$

对于一个足够大的常数 C，且该常数也足以适用于引理 *Q.3* 中的复时间域。那么，对于 $w = z$ 和 $w = i\beta$，以下结论同时成立：

$$\frac{|\widehat{Z}_L(w) - \overline{\mathrm{Tr}}(e^{iwH})|}{z_\beta} \leq C(1+\beta)\big(\mathcal{K}(L) - \mathcal{K}(\ell)\big) + C(1+\beta)^{3/2}\eta^{-1}2^{-L}. \tag{317}$$

证明。 应用 引理 P.4，取 $r = 1$、 $z_1 = w$、 $U_1 = V_1 = \mathbb{I}$、 $|\xi\rangle = |\zeta\rangle = |0\rangle$ 和 $T = \beta + t$。矩匹配假设由 命题 E.5 得出。由引理 F.6 中的范数界可得

通用引理中取 $S = a^\dagger + a$、 $R = 2$ 时的微扰界，以及标量和 $\mathcal{K}(\ell')$和 $\mathcal{K}(L) - \mathcal{K}(\ell)$。这些假设意味着 $T\mathcal{K}(L) \le 1$，且满足 引理 Q.4的假设。

我们仅改进通用证明的步骤 (2)，使用 引理 F.5中的标量围道恒等式。记

$$K_{\ell'}(u) \equiv \frac{1}{u} + u + \sum_{4 \le k \le \ell'} \kappa_k u^{k-1}, \qquad \Delta(u) \equiv K_L(u) - K_\ell(u). \tag{318}$$

该证明中的留数恒等式可通过同一个绝对收敛级数推广到任意复时间。对于 $w \neq 0$，它给出

$$\langle 0|\, e^{iw\mathcal{T}_L}\, |0\rangle - \langle 0|\, e^{iw\mathcal{T}_\ell}\, |0\rangle = \frac{1}{iw} \cdot \frac{1}{2\pi i} \oint_{|u|=1} e^{iwK_\ell(u)} \big(e^{iw\Delta(u)} - 1\big)\, du. \tag{319}$$

对于 $u = e^{i\theta}$ 和 $w \in \{-t + i\beta, i\beta\}$，我们有

$$|e^{iwK_\ell(u)}| \le e^{-2\beta\cos\theta + |w|\mathcal{K}(\ell)}, \qquad |e^{iw\Delta(u)} - 1| \le |w|\big(\mathcal{K}(L) - \mathcal{K}(\ell)\big) e^{|w|\left(\mathcal{K}(L) - \mathcal{K}(\ell)\right)}. \tag{320}$$

由于 $1 + \cos\theta \ge 2(\theta - \pi)^2/\pi^2$ for $0 \le \theta \le 2\pi$，高斯积分给出的界可将剩余的角积分估计为

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-2\beta\cos\theta}\, d\theta \le \frac{Ce^{2\beta}}{\sqrt{1+\beta}}. \tag{321}$$

因此，因子 $|w|$抵消，且

$$\big|\langle 0|\, e^{iw\mathcal{T}_L}\, |0\rangle - \langle 0|\, e^{iw\mathcal{T}_\ell}\, |0\rangle\big| \le \frac{Ce^{2\beta + T\mathcal{K}(L)}}{\sqrt{1+\beta}} \big(\mathcal{K}(L) - \mathcal{K}(\ell)\big). \tag{322}$$

在 $w = 0$ 处同样成立，此时差为零。将两边除以 (309)，并利用$T\mathcal{K}(L) \le 1$，可将归一化中间混合项界定为 $C(1+\beta)\big(\mathcal{K}(L) - \mathcal{K}(\ell)\big)$。步骤 (1) 和 (3) 保持不变；与 推论 Q.5 的证明相同，它们的归一化泰勒误差至多为$C(1+\beta)^{3/2}\eta^{-1}2^{-L}$。将这三项误差相加，即可证明对于 317， w 两种取值均成立。 □

接下来，我们选择截断值，并进行所有四种应用中使用的运行时间优化。

定义 Q.7 (自由累积量截断值)。 假设 $n \le m \le \mathrm{poly}(n)$、 $0 < \varepsilon < 1$，且 $\delta = 1/\mathrm{poly}(n)$。令 C_0 为一个充分大的常数，并令 $T \ge \beta \ge 0$ 满足

$$T + \log(n/\varepsilon) \le c \min\left\{ m^{1/3}, \frac{n}{\log n} \right\}, \tag{323}$$

对于充分小的常数 $c > 0$。然后，我们将彩色截断定义为满足以下条件的最小正偶整数 ℓ

$$(1+\beta)^{3/2}(1+T)\delta^{-1/2} \left(\frac{C_0(\ell+2)}{m} \right)^{(\ell+2)/4} \le \frac{\varepsilon}{C_0}, \tag{324}$$

以及满足条件的最小正偶整数 ℓ作为标量截断

$$(1+\beta)\delta^{-1/2} \left(\frac{C_0(\ell+2)}{m} \right)^{(\ell+2)/4} \le \frac{\varepsilon}{C_0}. \tag{325}$$

在这两种情况下，我们都选择一个偶整数

$$L = \Theta\big(T + \log(n/\varepsilon)\big), \qquad L \geq \ell + 4, \tag{326}$$

对于一个充分大的常数。

命题 Q.8（自由累积量截断性质）。 我们有以下关于 ℓ 和 L（定义见 定义 *Q.7*）的性质：

1. $\ell = \mathcal{O}\left(1 + \frac{\log(1/\varepsilon)}{\log m}\right)$, $m \geq CL^3$, $L{+}1 \leq \gamma n/\log n$, $L\sqrt{\log n/m} = o(1)$, *and* $(L{+}1)\sqrt{\log n}/m = o(1)$.

2. 如果

$$\mathcal{K}(L) - \mathcal{K}(\ell) \leq \delta^{-1/2}\left(\frac{\mathcal{O}(\ell+2)}{m}\right)^{(\ell+2)/4}, \tag{327}$$

那么，取 $\eta = \delta$ 并将这些常数选取得充分大之后，（314）（彩色截断）和（317）（标量截断）的右侧分别至多为 $\varepsilon/4$。

3. 此外，除输出半圆背景之外，使用

$$\mathcal{O}\left(n\mathrm{poly}(\ell)C_1^{\ell}\binom{m}{\ell/2}\right) \tag{328}$$

次操作进行计算时，对于固定常数 $C_1 > 0$，其运行时间至多为

$$\mathcal{O}\left(\frac{n}{\delta}(1+\beta)^3\right)(1+T)^2(1/\varepsilon)^{2+\mathcal{O}(1/\log m)} \tag{329}$$

对于彩色截断和

$$\mathcal{O}\left(\frac{n}{\delta}(1+\beta)^2\right)(1/\varepsilon)^{2+\mathcal{O}(1/\log m)} \tag{330}$$

对于标量截断。

证明。 由于 $n \leq m$ 和 $\delta = 1/\mathrm{poly}(n)$，$(1+\beta)^{3/2}(1+T)\delta^{-1/2} = m^{\mathcal{O}(1)}$ 且 $\log(1/\varepsilon) = \mathcal{O}(m^{1/3})$，因此 (324) 中前置因子的对数为 $\mathcal{O}(\log m)$。与 (140) 中一样，取 $1 + \log(1/\varepsilon)/\log m$ 的一个足够大的常数倍即可满足截断不等式：对于这样的候选值，$C_0(\ell+2) \leq m^{1/2}$，因此其 $m^{-1/2}$ 次幂足以吸收前置因子并达到所需精度。这证明了 $\ell = \mathcal{O}\left(1 + \log(1/\varepsilon)\log m\right)$。选择 L 并取足够小的 c，即可得到关于 m 和 $L{+}1$ 的所述界。由于 $L = \mathcal{O}(m^{1/3})$ 且 $m \geq n$，两个所述稳定性量都趋于零。

近似。 (314) 中的累积量项至多为 $\varepsilon/8$，根据式 (324) 和 (327)，增大 C_0 以吸收固定常数后即可。泰勒项至多为 $\varepsilon/8$，因为

$$C(1+\beta)^{3/2}\delta^{-1}2^{-L} \leq \varepsilon/8 \tag{331}$$

对于选择（326）。因此，它们的和至多为 $\varepsilon/4$。标量估计可由（325）和（317）以相同方式得出。

运行时间。 彩色截断的极小性给出

$$\binom{m}{\ell/2} \le C_0^2 (2eC_0)^{\ell/2} (1+\beta)^3 (1+T)^2 \delta^{-1} \varepsilon^{-2}. \tag{332}$$

这里我们利用前一个截断 $\ell-2$ 和 $\binom{m}{\ell/2} \le (2em/\ell)^{\ell/2}$ 失效这一事实。将其代入操作计数，并将关于 ℓ 的固定多项式吸收到 $e^{\mathcal{O}(\ell)}$ 中，得到

$$\mathcal{O}\left(\frac{n}{\delta}(1+\beta)^3(1+T)^2\varepsilon^{-2}e^{\mathcal{O}(\ell)}\right) \le \mathcal{O}\left(\frac{n}{\delta}(1+\beta)^3(1+T)^2(1/\varepsilon)^{2+\mathcal{O}(1/\log m)}\right), \tag{333}$$

因为 $\ell = \mathcal{O}\left(1+\log(1/\varepsilon)\log m\right)$。这就证明了 (329)。

同样的截断大小论证适用于 (325)。对于其余的标量截断，前一个截断失效可得

$$\binom{m}{\ell/2} \le C_0^2 (2eC_0)^{\ell/2} (1+\beta)^2 \delta^{-1} \varepsilon^{-2}. \tag{334}$$

在操作计数中作同样的代换，即可证明 (330)。 □

定理 Q.9 (配分函数算法)。 存在常数 $c > 0$，使得对于充分大的 n， $2n \le m \le \mathrm{poly}(n)$， $0 < \varepsilon < 1$， $\delta = 1/\mathrm{poly}(n)$，以及满足以下条件的 $\beta \ge 0$

$$\beta + \log(n/\varepsilon) \le c \min\left\{m^{1/3}, \frac{n}{\log n}\right\}, \tag{335}$$

可以选取 (306)中的截断，使得

$$|\hat{z}_\beta - z_\beta| \le \varepsilon z_\beta, \qquad |\widehat{\mathcal{Z}}_\beta - \mathcal{Z}(\beta)| \le \varepsilon \mathcal{Z}(\beta), \tag{336}$$

以至少 $1 - \mathcal{O}(\delta) - e^{-\Omega(n)}$ 的概率，且运行时间至多为

$$\mathcal{O}(\frac{n}{\delta}(1+\beta)^2)(1/\varepsilon)^{2+\mathcal{O}(1/\log m)}. \tag{337}$$

证明。 取 命题 Q.8 中的标量截断 式 (325) 和 (326)，满足 $T = \beta$。在阶数 4处应用 (109)，并在较低阶数 $\ell+2$处应用 (108)，失败概率均为 δ量级 。结合截至阶数 L的无环性，可得

$$\mathcal{K}(L) \le \mathcal{O}\left(\frac{\sqrt{\log n}}{m}\right), \qquad \big(\mathcal{K}(L) - \mathcal{K}(\ell)\big) \le \delta^{-1/2}\left(\frac{\mathcal{O}(\ell+2)}{m}\right)^{(\ell+2)/4} \tag{338}$$

以至少 $1 - \mathcal{O}(\delta) - e^{-\Omega(n)}$ 的概率成立。将此事件与 引理 Q.3相交，并取 $\eta = \delta$。截断命题保证其假设成立，并给出 $(L+1)\mathcal{K}(L) = o(1)$，因此对于充分大的 n，(308) 成立。于是，引理 Q.6 和同一命题将相对误差界定为 ε。乘以 2^n 即可得到 $\mathcal{Z}(\beta)$的保证。

对于运行时间，将 (330)应用于 (307)。得到 (337)。 □

在选定的逆温度下，同一近似 $\hat{}z_\beta$ 可用于所有可观测量。我们记录了每次应用中使用的归一化估计。

引理 Q.10（近似分子的归一化）。设 $D>0$，$|N|\le D$，且

$$|\widehat{D}-D|\le \eta D,\qquad |\widehat{N}-N|\le \xi D,\qquad 0\le\eta<1,\quad \xi\ge 0. \tag{339}$$

然后 $|D|\ge(1-\eta)D$ 以及

$$\left|\frac{\widehat{N}}{\widehat{D}}-\frac{N}{D}\right|\le\frac{\xi+\eta}{1-\eta}. \tag{340}$$

如果 D 为实数，则其为正数。特别地，ξ、$\eta\le\varepsilon/4$ 意味着对于 $0<\varepsilon\le 1$，加性误差至多为 ε。证明。反三角不等式给出 $|D|\ge(1-\eta)D$。利用 $|N|\le D$，

$$\left|\frac{\widehat{N}}{\widehat{D}}-\frac{N}{D}\right|\le\frac{|\widehat{N}-N|}{|\widehat{D}|}+\frac{|N|\,|D-\widehat{D}|}{D|\widehat{D}|}\le\frac{\xi+\eta}{1-\eta}. \tag{341}$$

□

对于 $D=z_\beta$<style id="4">以及 $N=\mathrm{Tr}(Ue^{-\beta H})$满足 $\|U\|\le 1$时，不等式 $|N|\le D$由迹范数界推出。因此 引理 Q.10 适用于全部四个可观测量。如果计算得到的配分函数为非正数，我们便将每个经过归一化的算法输出设为零；近似事件保证不会出现这种情况。

Q.3 关联函数

现在我们将J 节 扩展到热时间序和非时间序关联函数。我们保留约定 $A(t)=e^{iHt}Ae^{-iHt}$、颜色词 $\mathbf{C}_{h_0,\,h_1}$ 以及 $\mathbf{C}_{\vec{\mathbf{h}}}$，还有重数记号 $|\vec{\mathbf{h}}|$和 $\vec{\mathbf{h}}!$ 来自 公式（171）和（172）。采用共同归一化 $z_\beta=\mathrm{Tr}(e^{-\beta H})$，定义如下

$$\begin{aligned} N_\beta^{A}(t)&\equiv z_\beta G_\beta^{A}(t)=\overline{\mathrm{Tr}}\big(e^{(it-\beta)H}Ae^{-itH}A\big),\\ N_\beta^{A,B}(t)&\equiv z_\beta F_\beta^{A,B}(t)=\overline{\mathrm{Tr}}\big(e^{(it-\beta)H}Ae^{-itH}Be^{itH}Ae^{-itH}B\big). \end{aligned} \tag{342}$$

因此，热因子只会改变 H 第一段的系数。将插入项移至右侧后，得到的颜色词与 $\beta=0$ 处相同，其中也包括 OTOC 的边界相位 $ABAB=\langle A,\ B\rangle\mathbb{I}$。

对于偶整数 $2\le\ell<L$，按照与 $\hat{}\mu^{(\ell;\mathbf{C})}$ 相同的递推关系计算截断颜色矩 算法 2和3，并设

$$\hat{N}_\beta^{A}(t)\equiv\sum_{\substack{h_0,h_1\ge 0\\ h_0+h_1\le L}}\frac{(it-\beta)^{h_0}(-it)^{h_1}}{h_0!\,h_1!}\,\hat{\mu}^{(\ell;\mathbf{C}_{h_0,h_1})}, \tag{343}$$

$$\hat{N}_\beta^{A,B}(t)\equiv\langle A,B\rangle\sum_{\substack{\vec{\mathbf{h}}\in\mathbb{N}^4\\ |\vec{\mathbf{h}}|\le L}}\frac{(it-\beta)^{h_{00}}(-it)^{h_{10}}(it)^{h_{11}}(-it)^{h_{01}}}{\vec{\mathbf{h}}!}\,\hat{\mu}^{(\ell;\mathbf{C}_{\vec{\mathbf{h}}})}. \tag{344}$$

使用配分函数近似（306），输出为

$$\hat{G}_\beta^{A}(t)\equiv\frac{\hat{N}_\beta^{A}(t)}{\hat{z}_\beta},\qquad \hat{F}_\beta^{A,B}(t)\equiv\frac{\hat{N}_\beta^{A,B}(t)}{\hat{z}_\beta}. \tag{345}$$

如上所述，当 $\hat{}z_\beta\le 0$ 时，我们返回零；下面的成功事件保证了 $\hat{}z_\beta>0$。两个关联函数使用相同的 $\hat{}z_\beta$ 值。

截断的近似误差。 我们使用颜色跳跃算子 $\mathcal{T}_\ell = \mathcal{T}_\ell^{(\mathbf{Q})}$ 以及求和式 $\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L)$ 和 $\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L) - \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell)$，来自（173）。与 引理 J.2中一样，分析中的跳跃算子包含每个颜色词，而算法只计算 方程（343）和 （344）中的词。

引理 *Q.11*（热关联函数截断的近似误差）。设 H 为厄米矩阵，满足$\kappa_2 = 1$，且所有奇数阶颜色累积量在不超过 L 阶时均为零，其中 $2 \le \ell < L$ 为偶数。对于 *TOC*，取 $Q = (A)$ 和 $r = 2$；对于 *OTOC*，取 $Q = (A, B)$ 和 $r = 4$；并将相应的分子和多项式分别记为 $N_\beta(t)$ 和 $\hat{N}_\beta(t)$。令 $T \equiv \beta + r|t|$。假设 *(296)* 对参数 η 成立，标量假设 *(308)* 成立，并且

$$T\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L) \le 1, \qquad L \ge C(1+T), \tag{346}$$

对一个充分大的常数 C，有

$$\frac{|N_\beta(t) - \hat{N}_\beta(t)|}{z_\beta} \le C(1+\beta)^{3/2}\left[T\big(\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L) - \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell)\big) + \eta^{-1}2^{-L}\right]. \tag{347}$$

证明。对于 TOC，应用引理 P.4，其中取 $s = 1$、$(z_1, z_2) = (t + i\beta, -t)$、$(U_1, U_2) = (A, A)$，以及 $(V_1, V_2) = (b, b)$。对于 OTOC，取 $s = 2$、$(z_1, z_2, z_3, z_4) = (t + i\beta, -t, t, -t)$、$(U_1, U_2, U_3, U_4) = (A, B, A, B)$，以及 $(V_1, V_2, V_3, V_4) = (b_1, b_2, b_1, b_2)$。两种情形下，均使用 $|\xi\rangle = |\zeta\rangle = |\Omega_s\rangle$。复时间绝对值之和至多为 T，虚部绝对值之和为 β。

根据 引理 J.1，矩匹配假设成立，辅助的次数为 L多项式恰好是 方程 (343) 和 (344)，其中包括 OTOC 边界相位。界限 (178) 为通用引理的扰动估计提供了依据，其中用 $S = a^\dagger + a$、$R = 2$和 $\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell')$ $\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L) - \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell)$替代标量和。最后，引理 Q.4 给出 (309)，因此 推论 Q.5 证明了该结论。 □

对于实数 t，乘积 $A(t)A$和 $A(t)BA(t)B$是幺正的，因此根据赫尔德不等式，$|N_\beta^A(t)|, |N^A{}_\beta{}^B(t)| \le z_\beta$。因此，引理 Q.10 将 (347) 以及 $\hat{z}_\beta$的相对误差直接转换为 (345) 的加性误差。

热关联函数算法。 算法 2 和 3的前三个步骤保持不变。我们将它们的返回表达式替换为 (345)，并使用相同的截断，根据 (306) 计算公分母。这两个颜色词族在子序列、平移和反转下的封闭性，恰好就是 J.2 小节中所确立的；改变泰勒系数不会引入额外的颜色矩或累积量。

定理 Q.12（热关联函数算法）。对于任意非恒等算符泡利插入项 $A \neq \mathbb{I}$（用于时间序关联函数）或 A, B（在模去相位后线性无关，用于非时间序关联函数），存在一个常数 $c > 0$，使得当 n, $2n \le m \le$ 足够大时，$\mathrm{poly}(n)$，$0 < \varepsilon < 1$, $\delta = 1/\mathrm{poly}(n)$，$\beta \ge 0$ 和 $t \ge 0$ 满足

$$\beta + t + \log(n/\varepsilon) \le c \min\left\{m^{1/3}, \frac{n}{\log n}\right\}, \tag{348}$$

.....的热版本算法 *2* 和 *3* 给出

$$|\hat{G}_\beta^A(t) - G_\beta^A(t)| \le \varepsilon, \qquad |\hat{F}_\beta^{A,B}(t) - F_\beta^{A,B}(t)| \le \varepsilon \tag{349}$$

以至少 $1-\mathcal{O}(\delta)-e^{-\Omega(n)}$ 的概率在 H上。计算任一关联函数，或使用同一分母计算两者，总运行时间为

$$\mathcal{O}\left(\frac{n}{\delta}(1+\beta)^3(1+\beta+t)^2\right)(1/\varepsilon)^{2+\mathcal{O}(1/\log m)}, \tag{350}$$

包括配分函数近似的代价。

证明。 取 命题 Q.8 中的截断值，并令 $T=\beta+4t$。这也涵盖了时间序关联函数，其复时间绝对值总和至多为 $\beta+2t$。

近似。 应用 推论 J.4，它在 ℓ处成立。在其对应事件以及截至阶数 L的无环事件上，

$$\begin{aligned}\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L)-\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell) &\le \delta^{-1/2}\left(\frac{\mathcal{O}(\ell+2)}{m}\right)^{(\ell+2)/4},\\ \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L) &\le \mathcal{O}\left(\sqrt{\frac{\log n}{m}}\right).\end{aligned} \tag{351}$$

由 命题 Q.8， $T\le L$ 以及 $L\sqrt{\text{对数}}\ \overline{n/m}=o(1)$，因此当 $T\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L)\le 1$ 对充分大的 n成立。另一方面，标量集中界（338）和 $(L+1)\sqrt{\text{对数}}\, n/m=o(1)$ 给出了引理 Q.4的假设。

将这些事件与 引理 Q.3中的事件取交，令 $\eta=\delta$。由 引理 Q.11 和 命题 Q.8，每个分子误差至多为 $\varepsilon z_\beta/4$。由于

$$\mathcal{K}(L)-\mathcal{K}(\ell)\le \mathcal{K}^{\mathrm{col}}(L)-\mathcal{K}^{\mathrm{col}}(\ell),$$

相同的截断值由 $|\hat{}z_\beta - z_\beta|\le \varepsilon z_\beta/4$ 根据 引理 Q.6给出。应用 引理 Q.10 可证明（349）。由并集界可得定理中固定探针对应的所述概率。

运行时间。 根据 命题 J.5，低阶计算、延拓和热读出需要 $\mathcal{O}\big(n\ell^5\binom{m}{\ell/2}\big)$，其中 $r=4$ 涵盖两个关联函数。全零颜色词为共享分母提供标量数据，其在 (307) 中的开销也已计入。应用命题 Q.8 可得 (350)。

□

Q.4 热期望值

现在，我们分析 M节中的热期望值构造。固定一个采样得到的非恒等泡利算符 P_i，并回顾残差 $H^{(i)}$ 以及两个矩级数 $\alpha^{(\ell)}_{0\,i},\alpha^{(\ell)}_{1\,i}$，它们来自 式 (252) 和 命题 M.1。我们使用 ($\hat{}z_\beta$ 306) 中的共享近似，并在 算法 5的最终分母中使用相同的截断。因此，读出为

$$\widehat{N}_{\beta,i}\equiv\sum_{k=0}^{L}\frac{(-\beta)^k}{k!}[z^k]\alpha^{(\ell)}_{1,i}(z),\qquad \widehat{\langle P_i\rangle}_\beta\equiv\frac{\widehat{N}_{\beta,i}}{\hat{z}_\beta}. \tag{352}$$

这两个级数仍然是同时计算的，因为它们的递推关系彼此耦合。残余分解重构了原始哈密顿量 H，因此其归一化配分函数与其他可观测量的相同，为 $^{z_\beta}$。

对于 $m \geq 2$，回顾方程 (255) 和 (256) 中定义的归一化残差 $\widetilde{H}^{(i)}$ 和缩放尖峰跃迁算子 $\mathcal{T}_{\ell',i}$。令 $\mathcal{K}_i^{\mathrm{col}}(\ell')$ 和 $\mathcal{K}_i^{\mathrm{col}}(L) - \mathcal{K}_i^{\mathrm{col}}(\ell)$ 表示式 (173) 中关于 $\widetilde{H}^{(i)}$ 和生成元 Q $=(P_i)$ 的求和，其中包括混合二次累积量。若 H 的全支撑在至 $L+1$阶时无环，则由带有 $\ell' = L$ 的式 (257) 可得 $k \leq L$对应的物理矩 $\mathrm{Tr}(P_i^c H^k)$。

引理 Q.13 （热期望的近似误差）。 假设 H 在阶数 $L+1$之前无环，其中 $2 \leq \ell < L$ 均为偶数，且 (296) 在参数 η下成立。还假设

$$\begin{aligned} (L+1)\mathcal{K}(L) \leq \log(3/2), \qquad L \geq C(1+\beta), \\ \beta\big(m^{-1/2} + \mathcal{K}_i^{\mathrm{col}}(L)\big) \leq 1, \end{aligned} \tag{353}$$

其中常数 C 足够大。于是

$$\frac{|\overline{\mathrm{Tr}}(P_i e^{-\beta H}) - \widehat{N}_{\beta,i}|}{z_\beta} \leq C(1+\beta)^{3/2}\left[\beta\big(\mathcal{K}_i^{\mathrm{col}}(L) - \mathcal{K}_i^{\mathrm{col}}(\ell)\big) + \eta^{-1}2^{-L}\right]. \tag{354}$$

证明。 应用 引理 P.4 ，取 $r = 1$、 $z_1 = i\beta$、 $T = \beta$、 $U_1 = P_i$、 $V_1 = \mathbb{I}$、 $|\xi\rangle = b^\dagger|\Omega_1\rangle$，以及 $|\zeta\rangle = |\Omega_1\rangle$。因此，辅助矩阵元为 $\langle\Omega_1| b e^{-\beta\mathcal{T}_{\ell',\,i}} |\Omega_1\rangle$，而 (257) 给出了所需的矩匹配和输出多项式。

缩放半圆部分和尖峰 $J_i b/\sqrt{m}$ 构成一个范数至多为 $\overline{S}$ 的公共自伴算子 $R = 2 + m^{-1/2}$。对 (233) 进行缩放，得到

$$\|\mathcal{T}_{\ell',i} - S\| \leq \mathcal{K}_i^{\mathrm{col}}(\ell'), \qquad \|\mathcal{T}_{L,i} - \mathcal{T}_{\ell,i}\| \leq \mathcal{K}_i^{\mathrm{col}}(L) - \mathcal{K}_i^{\mathrm{col}}(\ell). \tag{355}$$

因此，通用引理适用于这些残余颜色和。标量假设由 引理 Q.4给出 (309)，而剩余的假设恰好是 $\beta(R-2) + T\mathcal{K}_i^{\mathrm{col}}(L) \leq 1$。因此， 推论 Q.5证明了该结论。

□

由于 $|\overline{\mathrm{Tr}}(P_i e^{-\beta H})| \leq z_\beta$， 引理 Q.10 将此界和 $\widehat{z}_\beta$ 的相对精度转化为期望的加性精度。

定理 Q.14 （热期望近似）。任取一个指标 $i \in [m]$。存在一个充分小的常数 $c > 0$ ，使得对于充分大的 n， $2n \leq m \leq \mathrm{poly}(n)$、 $0 < \varepsilon < 1$ $\delta = 1/\mathrm{poly}(n)$、$\beta \geq 0$，并且

$$\beta + \log(n/\varepsilon) \leq c \min\left\{m^{1/3}, \frac{n}{\log n}\right\}, \tag{356}$$

可以选择 （352）中的截断，使得

$$\left|\widehat{\langle P_i\rangle}_\beta - \langle P_i\rangle_\beta\right| \leq \varepsilon \tag{357}$$

以至少 $1 - \mathcal{O}(\delta) - e^{-\Omega(n)}$ 的概率。计入配分函数计算后，运行时间至多为

$$\mathcal{O}(\frac{n}{\delta}(1+\beta)^5)(1/\varepsilon)^{2+\mathcal{O}(1/\log m)}. \tag{358}$$

证明。 由于 $m - 1 \geq n$，将 命题 Q.8 应用于 $T = \beta$和 m，并将其替换为 $m-1$。参数值域（356）意味着在减小其常数后，该命题的窗口仍然成立，因为 $m - 1 \asymp m$。特别地， $m - 1 \geq CL^3$ 和 $L + 1 \leq \gamma n/\log n$。

近似。 全支撑在 $L+1$ 之前均为无环的，除非事件以 $e^{-\Omega(n)}$的概率发生。在 P_i取非恒等算符值的条件下，其余泡利项是相互独立的均匀字符串。将 推论 J.4应用于 $\widetilde{H}^{(i)}$，得到

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_i^{\mathrm{col}}(L) - \mathcal{K}_i^{\mathrm{col}}(\ell) &\le \delta^{-1/2} \left(\frac{\mathcal{O}(\ell+2)}{m-1} \right)^{(\ell+2)/4}, \\ \mathcal{K}_i^{\mathrm{col}}(L) &\le \mathcal{O}\left(\sqrt{\frac{\log n}{m-1}} \right) \end{aligned} \tag{359}$$

除概率为 $\mathcal{O}(\delta) + e^{-\Omega(n)}$ 外，对经过条件化的非恒等探针一致成立。原始 H 的标量估计给出 $\mathcal{K}(L) \le \mathcal{O}(\sqrt{\log n/m})$。这些估计推出 (353)：截断命题给出 $(L+1)\sqrt{\log n/m} = o(1)$，而 $\beta \le L$、$m-1 \ge CL^3$ 以及 $m-1$ 上的多项式下界给出 $\beta(m^{-1/2} + \sqrt{\log n/(m-1)}) = o(1)$。

将引理 Q.3应用于原始哈密顿量，并取 $\eta = \delta$。在共同事件上，引理 Q.13和命题 Q.8给出的分子误差至多为 $\varepsilon z_\beta/4$。根据引理 Q.6，同一组截断也足以处理共用的标量分母，因为其累积量尾部上界中，m 取代了 $m-1$。比值引理证明了加性误差保证，并且并集界给出所述概率。

运行时间。由命题 M.2可知，分子（包括两个耦合级数）的余弦 ts

$$\mathcal{O}\left(n\ell 2^{\ell} \binom{m-1}{\ell/2} \right), \tag{360}$$

使用 $m-1 \ge CL^3$。标量分母的开销可以吸收：其低阶矩计算省略了因子 2^{ℓ}，并且

$$\frac{\binom{m}{\ell/2}}{\binom{m-1}{\ell/2}} = \frac{m}{m-\ell/2} \le 2. \tag{361}$$

其矩延拓和求值的开销也小于所示开销。应用命题 Q.8，令 $m-1$ 代替 m，得到（358）。 □

R 偶数奇偶性交叉划分计数

我们证明引理 D.6，使用$Z_{q,\,b}$，它们定义于D 节。证明分为三步：我们先界定具有相同交图的弦图对的数量（引理 R.1），再界定所有块大小均为四的划分数量（引理 R.3），最后比较较大的偶数块与大小为四的块（引理 R.4）。全文中，$C > 0$ 表示一个绝对常数，可在不等式之间增大。

词与逆序奇偶性。 我们用词 w 表示块标记分拆，该词由依次读取各块的标签得到。对于标签 a，令 $V_a(w)$ 表示带有标签 a 的位置集合。对于不同标签 a，b 定义

$$\mathrm{inv}_{ab}(w) \equiv \mathrm{inv}\left(V_a(w), V_b(w)\right) \bmod 2, \qquad \text{i.e. the parity of } \left|\{(i,j) : i<j,\ w_i = b,\ w_j = a\}\right|. \tag{362}$$

当每个标签的重数均为偶数时，引理 C.5表明 $\mathrm{inv}_{ab}(w)$等于 $V_a(w)$ 和 $V_b(w)$的交叉数的奇偶性，因此奇交图 $g(w)$恰好在每个

$\mathrm{inv}_{ab}(w)$ 为零。我们将这样的词称为平衡的。平衡性在置换标签后保持不变。对于所有重数均为偶数的词，反转也保持其平衡性，因为反转会将 $\mathrm{inv}(V_a, V_b)$ 替换为 $|V_a|\,|V_b| - \mathrm{inv}(V_a, V_b)$。用这种说法，$b!|Z_{q,b}|$ 表示由 b 个标签组成、每个标签出现偶数次且总长度为 $2q$ 的平衡词的数量。

R.1 大小为二的块

对于图 G，其标记顶点集为 $[b]$，令 $N_b(G)$ 表示每个标签出现两次且交图恰为 G的词的数量。这些词是分块标记弦图，因此标记/非标记恒等式方程（46）和（47）适用于它们。

引理 R.1（交图相同的弦图）。存在一个绝对常数$C > 0$ 使得

$$\sum_{G \text{ on } [b]} N_b(G)^2 \le C^b (b!)^2 \qquad (b \ge 1). \tag{363}$$

证明。连通图。我们使用 [111,第 2.2 节和定理 12]中的圆图规范分裂树表示。对于一个连通圆图，其规范分裂树中每个顶点对应一个叶节点，且每个内部节点的次数至少为三；与内部节点相接的标记点所构成的图是素图、团或星，而该树及其标记图共同决定G。固定一条参考弦后，每个素节点至多有四种弦表示；次数为 d 的团节点或星节点有$(d-1)!$种表示。对 b 个参考标签的选择求和，

$$N_b(G) \le b\, 4^{\#\text{ prime nodes}} \prod_{\nu \text{ a clique or star node}} (d_\nu - 1)!\,, \tag{364}$$

这正是对具有固定初始位置的线性词的计数要求。

在 d 个可区分的标记点上，最多有 $(2d)!/2^d$ 个素圆图、相应的标记弦图总数，以及至多 $d+1$ 个团或星。平方后（364）并对标记图求和，次数为 $d \ge 3$ 的节点因此至多贡献

$$16\frac{(2d)!}{2^d} + (d+1)((d-1)!)^2 \le C^d ((d-1)!)^2, \tag{365}$$

使用 $(2d)!/(2^d((d-1)!)^2) = d^2\binom{2d}{d}/2^d \le d^2 2^d$。

接下来需要对分裂树求和。将每棵树以标记为 1 的叶节点为根，并删除该叶节点；所得结果是一个有根树，其中有 $b-1$ 个带标签的叶子，并且原次数为 d_ν 的内部顶点具有$d_\nu - 1 \ge 2$ 个子节点。至多有 $b-2$ 个内部顶点，因此 $\sum_\nu d_\nu \le 3b$ 中的指数因子可吸收到 C^b中。对于一棵固定的叶节点标记树，在所有内部顶点处排列子节点的方式恰好有 $\prod_\nu (d_\nu - 1)!$种；由于子树携带互不相交的非空叶标签集合，这些排列彼此不同。因此，对子节点进行排列会吸收每个节点处两个阶乘中的一个：

$$\sum_{G \text{ connected}} N_b(G)^2 \le C^b b^2 \sum_{T \text{ ordered}} \prod_{\nu \text{ internal}} (d_\nu - 1)!\,, \tag{366}$$

其中求和现遍历所有具有 $b-1$ 个带标签的叶子，且每个内部顶点至少有两个子节点的有根有序树。这样的树至多有 $2b-3$ 个顶点，因此至多有 C^b 种有序树形和 $(b-1)!$ 种叶子标记，并且

$$\prod_\nu (d_\nu - 1)! \le (b-1)!\,, \tag{367}$$

因为对于固定的无序树，不同的子节点顺序会产生带标签叶子的不同从左到右排列。因此，对于 $b \geq 3$,

$$\sum_{G \text{ connected}} N_b(G)^2 \leq C^b b^2((b-1)!)^2 = C^b(b!)^2, \tag{368}$$

通过增加 C，即可包含 $b = 1,2$ 的情形。

非连通图。根据（47），将（363）的左端除以 $b!$ 所得到的数，统计的是由两个无标记弦图及其交图之间的一个同构组成的三元组。弦图的连通分量具有不交叉的端点支撑（G 节），因此每个支撑划分至多有 $|NC(2b)| \leq 16^b$ 种选取方式； r 个连通分量之间的对应关系有 $r!$ 种选取方式；并且根据（368）及相同的标记恒等式，大小为 b_i 的一对匹配连通分量至多贡献$C^{b_i} b_i!$ 。由于 $b_i \geq 1$ 且 $\sum_i b_i = b$,

$$r! \prod_{i=1}^{r} b_i! \leq b!\,, \tag{369}$$

具体而言，可将每个连通分量标签的一个副本以任意顺序放置在前 r 个位置中，再按固定顺序附加其余副本。支撑划分和对应关系决定了连通分量的大小，因此三元组的数量至多为 $C^b b!$ ，再乘以 $b!$ 即完成证明。

□

中点计数估计。下一个引理控制将一个词切成两半时出现的交错排列；它与重数 $p = 3$ 和 $p = 4$ 一起使用。

引理 R.2（中点剖面）。固定 $p \in \{3, 4\}$ 和 $B \geq 1$。存在 $K \geq B$，使得对每个 $b \geq 2$，以下结论均成立。令 $r = \lfloor b/2 \rfloor$，并对满足以下条件的非负整数 $b_0, \ldots, b_p$ 求和

$$\sum_{i=0}^{p} b_i = b, \qquad \sum_{i=0}^{p} i b_i = pr. \tag{370}$$

对于 $s = \sum_{i=1}^{p-1} b_i$，定义

$$R_p(b_0, \ldots, b_p) \equiv \frac{\prod_{i=0}^{p} b_i!}{b!} \frac{(pr)!}{(pb_p)! \prod_{i=1}^{p-1} (ib_i)!} \frac{(p(b-r))!}{(pb_0)! \prod_{i=1}^{p-1} ((p-i)b_i)!}. \tag{371}$$

Then

$$\sum_{(b_0, \ldots, b_p)} R_p(b_0, \ldots, b_p)(B/K)^s \leq 1. \tag{372}$$

证明。我们首先证明每个分布都满足

$$R_p(b_0, \ldots, b_p) \leq \frac{C^s}{\binom{b}{r}} \binom{b}{s}^{p+1}. \tag{373}$$

如果 $s = 0$ 唯一的分布是 $b_p = r$， $b_0 = b - r$，且（373）取等号成立。设 $s > 0$。每一半包含介于 s 和 $(p-1)$ s 个由混合类 V_1、.....、 V_{p-1}以及 ps占据的位置。

总共包含这样的若干位置。选定这些位置及其对应的类后，两个多项式系数的乘积可由下式界定：

$$\frac{(pr)!}{(pb_p)!\prod_{i=1}^{p-1}(ib_i)!}\frac{(p(b-r))!}{(pb_0)!\prod_{i=1}^{p-1}((p-i)b_i)!}\le\left(\frac{ep(p-1)b}{s}\right)^{ps}. \tag{374}$$

令 $d=b-r-b_0=p^{-1}\sum_{i=1}^{p-1}(p-i)b_i$，从而有 $1\le d\le s$。由于除 V_0 之外所有类的阶乘之积至多为 $(b-b_0)!$，

$$\begin{aligned}\frac{\prod_i b_i!}{b!}&\le\frac{1}{\binom{b}{b_0}}=\frac{1}{\binom{b}{r}}\frac{\binom{r+d}{d}}{\binom{b-r}{d}}\\&\le\frac{1}{\binom{b}{r}}\left(\frac{eb}{d}\right)^d\le\frac{1}{\binom{b}{r}}\left(\frac{eb}{s}\right)^s,\end{aligned} \tag{375}$$

其中，最后一个不等式成立是因为 $x\log(eb/x)$ 在 $0<x\le b$上是递增的。结合 式（374）和 （375）以及 $\binom{b}{s}\ge(b/s)^s$ 即可证明（373）。

固定 s 时，至多有 $(p-1)^s$ 个分布，因为一个分布可由长度为 s的词在 $p-1$ 个混合类上编码，而其纯类大小则由（370）确定。将这一因子吸收到 C^s中，

$$\begin{aligned}\sum_{(b_0,\dots,b_p)}R_p(B/K)^s&\le\frac{1}{\binom{b}{r}}\sum_{s=0}^{b}\binom{b}{s}^{p+1}(CB/K)^s\le\frac{1}{\binom{b}{r}}\left(\sum_{s=0}^{b}\binom{b}{s}(CB/K)^{s/(p+1)}\right)^{p+1}\\&=\frac{\left(1+(CB/K)^{1/(p+1)}\right)^{(p+1)b}}{\binom{b}{r}}.\end{aligned} \tag{376}$$

由于 $r=\lfloor b/2\rfloor$ 且 $b\ge2$，$\binom{b}{r}\ge(b/r)^r\ge2^r\ge2^{b/3}$。取 $K\ge B$ 足够大，使得 $\left(1+(CB/K)^{1/(p+1)}\right)^{p+1}\le2^{1/3}$ 使（376）对于每个 $b\ge2$至多为 1。 □

R.2 大小为四的块

引理 R.3（块大小为四的划分）。对于某个绝对常数 $C>0$，

$$|Z_{2b,b}|\le C^b b!\qquad(b\ge1). \tag{377}$$

证明。证明的两部分都会将一个词切分为两半，根据每个标签有多少个副本落在左半部分对其分类，估计每一类中的可能性数量，并结合引理 R.2，对各类的大小求和。

辅助计数。令 T_b 表示在一个固定的、含有 b 个标签的字母表上，满足以下条件的有序对 $(u,\ w)$ 的数量：u 是这些标签的一个排列，w 中每个标签出现三次，且拼接得到的 uw 是平衡的。我们断言

$$T_b\le C^b(b!)^2. \tag{378}$$

对于固定的 w，至多存在一个可接受的 u，因为

$$\mathrm{inv}_{ab}(uw)=\mathbf{1}_{\{b\text{ precedes }a\text{ in }u\}}+\mathrm{inv}_{ab}(w)+1\pmod 2 \tag{379}$$

确定了 u中每一对标签的相对顺序。

我们通过对 b 进行归纳来证明 (378)，其中 $T_0 = T_1 = 1$。对于 $b \geq 2$，在 $3r$ 个位置之后将 w 切开，$r = \lfloor b/2 \rfloor$，并令 V_i 为在左半部分中恰好出现 i 次的标签集合，$b_i = |V_i|$。分布 $(b_0, \dots, b_3)$ 满足 (370)，其中 $p = 3$。限制在纯类 V_0 或 V_3 上时，数对 (u, w) 是一个更小的同类数对，由 T_{b_i} 计数。限制在混合类 V_1 或 V_2 上时，词为 $(u|_{V_i})\, v\, D$ 或 $(u|_{V_i})\, D\, v$，其中 v 是每个标签各出现一次的块，而 D 是每个标签出现两次的块。将 D 移过 v，对每一对标签，恰好会改变 $2 \cdot 1 + 2 \cdot 1 = 4$ 个位置对的顺序，因此保持平衡；之后，$(u|_{V_i})v$ 是一个弦图，它与 D 的交叉逆序数为偶数，且平衡条件变为

$$g\big((u|_{V_i})v\big) = g(D). \tag{380}$$

映射 $(u|_{V_i}, v, D) \mapsto ((u|_{V_i})v, D)$ 是单射（在 b_i 个位置后切分第一个词），因此根据引理 R.1，一个混合类至多有 $B^{b_i}(b_i!)^2$ 个配置，其中 B是一个绝对常数。

有 $b!/\prod_i b_i!$ 种将标签分配给各类的方式，w 的两半交错排列的方式至多有（371）中的两个多项式系数那么多；一旦这些选择和类内数据确定，w 便确定了，而 u 由（379）确定。根据归纳假设 $T_j \leq K^j (j!)^2$ 适用于$j < b$，因为每个纯类都小于 b，因此一种分布至多贡献

$$K^b (b!)^2 R_3(b_0, b_1, b_2, b_3)(B/K)^{b_1+b_2}. \tag{381}$$

对所有分布求和，并应用引理 R.2 ($p = 3$)，即可完成归纳并证明（378）。

大小为四的块。我们通过对 b 归纳，计算每个标签出现四次的 $b!|Z_{2b,b}|$ 个平衡单词，基例为 $b = 0$,1（空字计数为一次）。在 $r = \lfloor b/2 \rfloor$ 个位置之后切分这样的词；各类 $V_0, \dots, V_4$ 满足（370），其中 $p = 4$。纯类V_0, V_4 是同类的更短词。类 V_1 是由 T_{b_1} 计数的一对；反转受限词后，V_3 也是如此，因为所有重数均为偶数，反转会保持平衡。在 V_2 中，两半是弦图，且其交叉逆序为偶数，因此它们必有相同的交图，并且 引理 R.1 适用。选取 B 使其大于三个混合类的所有常数；标签分配和交错排列的计数与前述相同，因此根据归纳假设，对于 $j < b$，一种分布至多贡献 $j!|Z_{2j,j}| \leq K^j (j!)^2$

$$K^b (b!)^2 R_4(b_0, b_1, b_2, b_3, b_4)(B/K)^{b_1+b_2+b_3}; \tag{382}$$

不同类之间的平衡条件只会使这个计数减少。引理 R.2 ($p = 4$)给出 $b!\ |Z_{2b,\ b}| \leq K^b (b!\ )^2$, 再除以 $b!$ 即可证明该结论。 □

R.3 任意偶数大小的块

我们比较插入偶数个新标签副本与插入四个副本的情况。现有标签可以具有任意重数。

引理 R.4 (插入一个标签)。固定一个长度为 h 的词 w。对于偶数 $r \geq 4$，令 $I_r(w)$ 表示通过插入 r 个不可区分的新标签副本，从 w 得到的词的数量，使得新标签与每个已有标签的逆序奇偶性均为零。那么

$$I_r(w) \leq \big(2(h + r + 1)\big)^{r-4} I_4(w). \tag{383}$$

证明。 假设 w 使用了 b 个标签，对于 $0 \le j \le h$，令 $v_j \in \mathbb{F}_2^b$ 记录截至第 j 个间隙的前缀中各标签重数的奇偶性。将 c_j 个新标签副本插入该间隙，并将新标签视为小于已有标签，会对逆序奇偶性向量贡献 $c_j v_j$；相反的排序方向给出相同条件，因为 r 为偶数。因此，对 $\mathbb{F}_2^b$ 进行傅里叶反演可得

$$I_r(w) = 2^{-b} \sum_{\xi \in \mathbb{F}_2^b} [z^r] \prod_{j=0}^{h} \Big(1 - (-1)^{\langle \xi, v_j \rangle} z\Big)^{-1}, \tag{384}$$

其中各因子对应于 $h+1$ 个间隔，其插入项的重数彼此独立地选取。

固定 ξ。将每个符号替换为其相反符号不会改变偶数系数，因此不妨假设正号至少与负号一样多。将相反符号配对后，可将乘积写成

$$(1-z^2)^{-u}(1-z)^{-v}, \qquad u, v \ge 0, \quad 2u + v = h + 1, \tag{385}$$

其系数均为非负数。令 $a_j = [z^j](1-z)^{-u}$、$b_k = [z^k](1-z)^{-v}$ 和 $H_k = [z^k](1-z^2)^{-u}(1-z)^{-v}$，并约定指数为零时，序列为 1、0、0，.....。根据二项式公式，对于 $k \le r$ 和 $j \le r/2$，有

$$b_k \le (h+r+1)^2 b_{k-2} \quad (k \ge 2), \qquad a_{j+1} \le (h+r+1) a_j. \tag{386}$$

对于偶数 $4 \le k \le r-2$，展开

$$H_{k+2} = \sum_{j=0}^{k/2} a_j b_{k+2-2j} + a_{k/2+1}. \tag{387}$$

该和至多为 $(h+r+1)^2 H_k$，最后一项至多为 $(h+r+1)H_k$，因为 $a_{k/2}$ 是 H_k 的其中一项。因此

$$H_{k+2} \le 2(h+r+1)^2 H_k, \qquad H_r \le \big(2(h+r+1)\big)^{r-4} H_4, \tag{388}$$

等号成立于 $r = 4$。对 ξ 在 (384) 中取平均后，逐系数比较即可证明该引理。

□

引理 *D.6* 的证明。 固定偶数重数 $r_1, \dots, r_b \ge 4$，其中 $\sum_i r_i = 2q$，并统计具有这些重数的平衡单词。删除一个标签后，得到平衡词 w，而重新插入该标签的方式数为 $I_{r_i}(w)$。根据 引理 R.4，并且由于过程中每个词的长度至多为 $2q$，将 r_i 替换为四会使计数至多改变因子 $(6q)^{r_i - 4}$；对 w 求和仍保持这一不等式。对所有 b 标签重复此过程并应用 引理 R.3，该重数向量对应的计数至多为

$$(6q)^{2q-4b}\, b!\, |Z_{2b,b}| \le (6q)^{2q-4b} C^b (b!)^2. \tag{389}$$

记 $r_i = 4 + 2s_i$，重数向量的数量为 $\binom{q-b-1}{b-1} \le 2^q$。对它们求和并除以 $b!$，因为每个无标号划分恰有 $b!$ 种块标记，

$$|Z_{q,b}| \le 2^q C^b b!\, (6q)^{2q-4b} \le C^q b!\, q^{2q-4b} \tag{390}$$

在增加 C 之后。 □

S 矩阵乘法计算矩

算法 1 的第 (1) 步算法 1 通过在泡利基中进行稀疏乘法来计算矩$\mathrm{Tr}(H^k)$，对于偶数 $k \le \ell$，其代价为 $\mathcal{O}(n\ell\binom{m}{\ell/2})$。本节将介绍另一种算法，它利用矩阵乘法对对易图的子图求和。这种方法基于 Nešetřil 和 Poljak 为 k团问题 [75]提出的方法。

由（54）可知，在无环区域中，每个矩都是对偶分拆上的单射标记乘积的和，其中包含对易符号。将单射标记替换为非限制标记后，每一项便成为奇交图的同态和；对于含有 $\mathcal{O}(m^{\omega\lceil r/3\rceil})$ 个顶点的图样，快速矩阵乘法可在 r 内求值，而非 $(m)_r$；其中 $2 \le \omega \le 9/4$ 是方阵乘法的指数 [112]。归一化的变化对应于单射同态计数与非限制同态计数之间的莫比乌斯反演 [113, §5.2。3], [114, 式 (2)], ，其中的系数可分解为正切数。随后根据算法 1的步骤 (2) 中的递推关系，由矩得到累积量。

定义 S.1（带符号同态和）。对于顶点集 h 上的简单图 $V(h)$ 以及来自 定义 B.6的对易符号矩阵 W，定义

$$\hom_W(h) \triangleq \sum_{\phi: V(h)\to[m]} \prod_{\{u,v\}\in E(h)} W_{\phi(u)\phi(v)}, \tag{391}$$

求和遍历所有映射 ϕ。

每个 s ummand 按 h 的连通分量分解，因此 $\hom_W$ is 是乘性的 e,

$$\hom_W(h_1 \sqcup h_2) = \hom_W(h_1)\,\hom_W(h_2), \qquad \hom_W(K_1) = m.$$

对于偶分拆 $\pi \in \mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)$ 以及 H 截至阶数 k，（54）给出

$$\overline{\mathrm{Tr}}(H^k) = \frac{1}{m^{k/2}} \sum_{\pi\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)} (m)_{|\pi|}\, C[g(\pi)]. \tag{392}$$

引理 S.2（粗化恒等式）。对于每个 $\pi \in \mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)$,

$$\hom_W\big(g(\pi)\big) = \sum_{\pi'\ge\pi} (m)_{|\pi'|}\, C[g(\pi')], \tag{393}$$

求和遍历分拆格中 $[k]$ 的所有粗化 π'，且它们全都是偶分拆。

证明。根据 引理 C.5，对任意映射 ϕ 从 π 的块 $[m]$到 （391）中 ϕ 对应的求和项是一个泡利词的归一化迹，其核为 $\pi' \ge \pi$，该核由合并 π 中标签相同的块得到。将映射 ϕ 按 π'分组后，它们便成为 π'的单射标记，而 引理 C.5 应用于 π' 后，将它们的和与 $(m)_{|\pi'|}\, C[g(\pi')]$对应起来。 □

S.1 用同态和计算矩

令 T_s 表示正切数,

$$\tan x = \sum_{s\ge1} T_s \frac{x^{2s-1}}{(2s-1)!}, \qquad (T_1,T_2,T_3,T_4,T_5) = (1,2,16,272,7936),$$

并对一个偶分拆 π，定义

$$\epsilon(\pi) \triangleq \prod_{U\in\pi} (-1)^{|U|/2-1}\, T_{|U|/2}. \tag{394}$$

命题 S.3 (由同态和得到无环矩)。 若 k 是偶分拆，且 H 在至 k阶时无环，则

$$\overline{\mathrm{Tr}}(H^k) = \frac{1}{m^{k/2}} \sum_{\pi\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)} \epsilon(\pi)\, \hom_W\big(g(\pi)\big). \tag{395}$$

证明。 对分拆格（393）上的区间 $[\pi, 1_k]$ 进行莫比乌斯反演（引理 A.14 针对对偶序给出）可得

$$(m)_{|\pi|}\, C[g(\pi)] = \sum_{\pi'\geq\pi} \mu(\pi,\pi')\, \hom_W\big(g(\pi')\big),$$

关于 [113, 式（5.18）], [114,式（2）] 的单射同态计数与非限制同态计数之间的恒等式，其中加权宿主为 W，商由更粗的划分索引，见 引理 S.2。对 $\pi\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)$ 求和并交换求和顺序后，式（392）给出

$$\overline{\mathrm{Tr}}(H^k) = \frac{1}{m^{k/2}} \sum_{\pi'\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)} \hom_W\big(g(\pi')\big) \sum_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(k)\\ \pi\leq\pi'}} \mu(\pi,\pi').$$

对 π' 的偶细化是指其在每个块 $U\in\pi'$ 上的限制都是 U的偶分拆；而分拆格的莫比乌斯函数可按块分解，因此内层和等于 $\prod_{U\in\pi'} e_{|U|/2}$，其中

$$e_s \triangleq \sum_{\tau\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(2s)} \mu(\tau, 1_{2s}) = \sum_{\tau\in\mathcal{P}_{\mathrm{even}}(2s)} (-1)^{|\tau|-1}(|\tau|-1)!\,.$$

根据指数公式，$\sum_{s\geq1} e_s\, x^{2s}/(2s)! = \log\big(1+\sum_{j\geq1} x^{2j}/(2j)!\big)$ = 双曲余弦的对数 x，其导数为双曲正切 $x = \sum_{s\geq1}(-1)^{s-1}T_s\, x^{2s-1}/(2s-1)!$。因此 $e_s = (-1)^{s-1}T_s$，内层求和为$\epsilon(\pi')$。

□

S.2 另一种矩计算

我们首先给出 Nešetřil–Poljak 的一般算法结果 [75]:

引理 S.4 (Nešetřil–Poljak [75])。 设 h 是一个有 r 个顶点的简单图。那么，同态$_W(h)$ 可以在 $\mathcal{O}\big(|E(h)|\, m^{2\lceil r/3\rceil} + m^{\omega\lceil r/3\rceil}\big)$时间内计算。

证明。 将 $V(h) = A\sqcup B\sqcup C$划分为 $|A|,\ |B|,\ |C|\leq\lceil r/3\rceil$。 h的每条边要么位于某个部分内，要么连接两个不同的部分，因此每条边恰好属于六个类 AA、 BB、 CC、 AB、BC、 CA中的一个。映射 $\phi\colon V(h)\to[m]$ 是其在三个部分上的限制所组成的三元组（α， β， γ），其中$\alpha\in[m]^A$、 $\beta\in[m]^B$ 和 $\gamma\in[m]^C$。定义矩阵

$$X[\alpha,\beta] \triangleq \prod_{e\in E_{AA}\cup E_{AB}} W_e(\phi), \qquad Y[\beta,\gamma] \triangleq \prod_{e\in E_{BB}\cup E_{BC}} W_e(\phi), \qquad Z[\gamma,\alpha] \triangleq \prod_{e\in E_{CC}\cup E_{CA}} W_e(\phi), \tag{396}$$

其中 $W_e(\phi) \triangleq W_{\phi(u)\phi(v)}$ 适用于 $e=\{u,v\}$；每个矩阵仅取决于显示的两个元组。由于每条边恰好出现在三个乘积中的一个，因此

$$\hom_W(h) = \sum_{\alpha,\beta,\gamma} X[\alpha,\beta]\,Y[\beta,\gamma]\,Z[\gamma,\alpha] = \sum_{\alpha,\gamma} (XY)[\alpha,\gamma]\,Z[\gamma,\alpha] = \operatorname{Tr}(XYZ). \tag{397}$$

这些矩阵至多包含 $m^{2\lceil r/3\rceil}$ 个条目，每个条目都是至多 $|E$ 个 $h|$ 符号的乘积。乘积XY 是对边长至多为 $m^{\lceil r/3\rceil}$ 的矩阵进行乘法，其计算成本为 $\mathcal{O}(m^{\omega\lceil r/3\rceil})$，而最终的迹则是对 $m^{|A|+|C|} \le m^{2\lceil r/3\rceil}$ 对条目进行乘积后求和。 □

对于稀疏泡利模型的情形，按其奇交图的同构类对 (395) 中的划分进行分组，并利用 $\hom_W$ 的乘法性，

$$\overline{\operatorname{Tr}}(H^k) = \frac{1}{m^{k/2}} \sum_{\gamma} a_\gamma^{(k)}\, m^{i(\gamma)} \prod_{h\in \operatorname{comp}(\gamma)} \hom_W(h), \qquad a_\gamma^{(k)} \triangleq \sum_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_{\text{even}}(k)\\ g(\pi)\cong\gamma}} \epsilon(\pi), \tag{398}$$

其中，γ 遍历至多含 $k/2$ 个顶点的简单图的同构类，$i(\gamma)$ 表示 γ 的孤立顶点数，而 $\operatorname{comp}(\gamma)$ 是 γ 中含至少两个顶点的连通分量所组成的多重集。整数 $a_\gamma^{(k)}$ 和连通模式列表 h 仅取决于 k。

算法 6 基于对易图统计量计算低阶矩 要求：作用于 n 个量子比特上的泡利算符 P_1、……、P_m，偶数 $\ell \ge 4$。1：预计算：对于每个偶数 $k \le \ell$，枚举 $\pi \in \mathcal{P}_{\text{even}}(k)$，计算 $\epsilon(\pi)$ 和 $g(\pi)$，并整理出（398）的系数 $a_\gamma^{(k)}$ 以及作为连通分量出现的连通模式列表 h 。2：对于列表中的每个连通模式 h，执行 3：根据引理 S.4，计算 $\hom_W(h) = \operatorname{Tr}(XYZ)$。4：结束循环 5：对于每个偶数 $k \le \ell$，执行 6：$\hat{\mu}_k \leftarrow m^{-k/2} \sum_\gamma a_\gamma^{(k)}\, m^{i(\gamma)} \prod_{h\in}\operatorname{comp}(\gamma) \hom_W(h)$。7：结束循环 8：返回 $\hat{\mu}_2$、$\hat{\mu}_4$、……、$\hat{\mu}_\ell$。

命题 S.5（正确性与代价）。 在阶数为 ℓ （引理 *B.2*）下的无环事件中，算法 *6*输出 $\operatorname{Tr}(H^k)$ 的精确矩，适用于 H 当 $k \le \ell$为偶数时。其运行时间为

$$\mathcal{O}(m^2 n) + \sum_{\substack{2\le k\le \ell\\ k\ even}} |\mathcal{P}_{\text{even}}(k)| \cdot \mathcal{O}\big((k/2)^2 m^{\omega\lceil k/6\rceil}\big) \le \mathcal{O}\big(m^2 n\big) + \ell^{\ell+\mathcal{O}(1)} m^{\omega\lceil \ell/6\rceil}. \tag{399}$$

预计算耗时为 $\ell^{\mathcal{O}(\ell)}$，且与 n 和 m无关。

证明。 矩的正确性由 命题 S.3 结合（398）得出。我们有 $|\mathcal{P}_{\text{even}}(k)| \le k^k$，而构造 W 需要 $\mathcal{O}(m^2 n)$ 次位运算。每个模式至多包含 $k/2$ 个顶点和 $\binom{k/2}{2}$ 条边，而引理 S.4给出了每个同态和的计算开销上界。 □

推论 S.6（运行时间对 ε 的依赖）。 在 定理 *F.7* 的设定下，进一步假设 $\log(1/\varepsilon) \le m^{o(1)}$。如果将 算法 *1* 的步骤（*1*）替换为 算法 *6*，则定理 *F.7* 的结论仍然成立，且成功概率相同，总运行时间为

$$\mathcal{O}(m^2 n) + \delta^{-1}\, m^{2\omega/3+o(1)}\, (1/\varepsilon)^{2\omega/3+o(1)}. \tag{400}$$

证明。 命题 S.5 表明，算法 6 与算法 1的步骤 (1) 返回相同的矩，因此输出和误差界保持不变。对于运行时间，我们可以假设 $\ell \ge 4$，否则将直接返回半圆输出。截断 ℓ 在 (139) 中的极小性给出

$$m^{\ell/2} < C_0^2 (C_0\ell)^{\ell/2} \delta^{-1} \varepsilon^{-2}.$$

由于 ℓ 是偶数，$\lceil \ell/6 \rceil \le (\ell+4)/6$，因此

$$m^{\omega\lceil \ell/6\rceil} \le m^{2\omega/3} \big(m^{\ell/2}\big)^{\omega/3} \le m^{2\omega/3}\, \ell^{\mathcal{O}(\ell)}\, \delta^{-\omega/3}\, \varepsilon^{-2\omega/3}. \tag{401}$$

根据 (140) 以及假设 $\log(1/\varepsilon) \le m^{o(1)}$，我们有 $\ell \le m^{o(1)}$，因此 $\ell\log\ell = o(\log m) + o(\log(1/\varepsilon))$ 且 $\ell^{\mathcal{O}(\ell)} = m^{o(1)}(1/\varepsilon)^{o(1)}$。代入 (399)，并结合 $\omega \le 3$ 以及矩–累积量转换的开销为 $\mathcal{O}(\ell L^2) \le \mathcal{O}(m)$ 这一事实，即可证明 (400)。 □

T 通过超收缩性获得更强的集中性

本节证明推论 D.10 和H.6中的超收缩性界。超收缩性利用低次多项式的二阶矩（我们已经对其进行了界定），来界定布尔超立方体上低次多项式的高阶矩。我们首先考察布尔超立方体上独立符号的低次多项式，然后将这些估计转换为实际泡利模型对易符号的估计。

在本附录中，$s \ge 0$ 均固定。当 $s \ge 1$时，泡利生成元 Q_1、……、Q_s 均独立于采样支撑集，并且在忽略相位的意义下相互独立。情形 $s = 0$ 表示标量问题，此时只有一个空的颜色序列，且没有根变量。所有泡利支撑集均按照公式 (1)进行采样。定义 X_{ij} 和 Y_{ai} 为与 W具有相同指标集的矩阵，V 其定义见定义 B.6，但使用相互独立的均匀符号代替泡利对易。记 $\mathbb{E}_{\mathrm{ind}}$ 表示对$(X,\ Y)$取期望，记 $\mathbb{E}_{\mathbf{P}}$ 表示对采样泡利支撑集取期望。下文中的期望均未以无环性为条件；我们仅在证明集中界之后使用无环性。

T.1 关于独立符号的低次数多项式

对于含有限个符号变量的实多线性多项式 F，记 $\|F\|_1$ 为其系数绝对值之和。利用 $x^2 = 1$ 约化幂次不会增大该范数，而乘法后再进行约化对于此范数具有次乘性。

引理 T.1. 设 W，V 为 定义 *B.6*中的对易矩阵。对于任意化为多线性形式的实系数多项式F 以及任意偶整数 $p \ge 2$,

$$\left| \mathop{\mathbb{E}}_{\mathbf{P}} |F(W,V)|^p - \mathop{\mathbb{E}}_{\mathrm{ind}} |F(X,Y)|^p \right| \le 4^{-n} \|F\|_1^p. \tag{402}$$

证明。 在 X，Y 中的独立符号下，每个非空平方自由单项式的期望均为零，而空单项式在两个模型中的期望均为一。

展开 F^p ，并将所有幂次模二化。所得多线性多项式的系数绝对值之和至多为 $\|F\|_1^p$ 。从两个模型的期望中相减时，常数项相互抵消，而其余每个单项式所产生的差的绝对值至多为 4^{-n}。因此

$$\left|\mathop{\mathbb{E}}_{\mathbf{P}} F(W,V)^p - \mathop{\mathbb{E}}_{\mathrm{ind}} F(X,Y)^p\right| \le 4^{-n}\|F\|_1^p.$$

由于 p为偶数且 F为实数， $F^p = |F|^p$，从而证明了（402）。 □

对于偶数 $k \ge 4$ 和标签序列 $\mathbf{C} \in \mathcal{C}^k$，按照与定义 H.2相同的展开式，在独立符号上定义多项式：

$$F_{k,\mathbf{C}}(X,Y) \equiv \frac{1}{m^{k/2}} \sum_{\pi \in \tilde{\mathcal{P}}_{\mathrm{even}}(k)} \chi(\pi) \sum_{\iota:\pi \hookrightarrow [m]} \left(\prod_{\{U,V\}\in E(g(\pi))} X_{\iota(U),\iota(V)} \right) \left(\prod_{U\in\pi} \prod_{a=1}^{s} Y_{a,\iota(U)}^{(\mathbf{C}_\pi(U))_a} \right), \quad (403)$$

其中 $X_{ij} = X_{ji}$ 对应于不同标签。移除任何孤立顶点之前，该图每个块对应一个顶点。在实际符号取值下，对于每个采样支撑集，该多项式为 $F_{k,\,\mathbf{C}}(W,\,V) = \tilde{\kappa}_k^{(\mathbf{C})}$；在无环事件上，根据定理 H.3，它就是实际的累积量。在 $s = 0$ 处，同样的陈述使用定义 C.14 和标量情形。

引理 T.2。 对于任意颜色序列 $\mathbf{C} \in \mathcal{C}^k$，式 (403)中的多项式经过多线性化后满足

$$\deg F_{k,\mathbf{C}} \le D_{k,s} \equiv \binom{k/2}{2} + \frac{sk}{2}, \qquad \|F_{k,\mathbf{C}}\|_1 \le (6k)^k. \quad (404)$$

对于充分大的常数 A、C，若 $m \ge Ak^3$，则

$$\mathop{\mathbb{E}}_{\mathrm{ind}} |F_{k,\mathbf{C}}(X,Y)|^2 \le \left(\frac{Ck}{m}\right)^{k/2}. \quad (405)$$

假设 猜想 D.7成立，只需假设 $m \ge Ak$ ，而无需假设 $m \ge Ak^3$。

证明。 个位置的偶分拆至多有 $k/2$ 个块。泡利哈密顿项之间的因子次数至多为 $\binom{k/2}{2}$，而泡利哈密顿项与颜色之间至多有 $sk/2$ 个因子。这证明了次数上界。由于 $(m)_{|\pi|}/m^{k/2} \le 1$，引理 C.11 给出

$$\|F_{k,\mathbf{C}}\|_1 \le \frac{1}{m^{k/2}} \sum_{\pi\in\tilde{\mathcal{P}}_{\mathrm{even}}(k)} (m)_{|\pi|} |\chi(\pi)| \le 6^k |\tilde{\mathcal{P}}_{\mathrm{even}}(k)| \le (6k)^k.$$

对于二阶矩，将平方展开为对两个划分及其单射标记的求和。只有当带标记的泡利哈密顿边集相同，且每种颜色对应的每个符号都具有偶数重数时，乘积的独立符号期望才非零。对系数取绝对值并忽略偶数重数条件后，剩下的恰好是匹配的绝对值计数

证明中使用的带标记边集引理 D.8。根据引理 C.13，每个系数非零的孤立块大小至少为四，因此该证明中的粘合映射给出

$$\mathop{\mathbb{E}}_{\text{ind}} |F_{k,\mathbf{C}}(X,Y)|^2 \le \frac{36^k}{m^k} \sum_{b'=1}^{k/2} m^{b'} |Z_{k,b'}|. \tag{406}$$

应用引理 D.6可得几何级数（101），应用猜想 D.7 可得（102）。这些在相应的值域内蕴含（405）。 □

T.2 转换为泡利对易符号

我们回顾 Bonami–Gross 不等式 [115]:

引理 T.3 （Bonami–Gross 不等式）。 设 $f\colon \{\pm1\}^n \to \mathbb{R}$ 为次数至多为 D 的多线性多项式。则对于所有 $q \ge 2$,

$$\|f\|_q \le (q-1)^{D/2} \|f\|_2, \qquad \|f\|_q \equiv \mathop{\mathbb{E}}_{x\sim\{\pm1\}^n} \left[|f(x)|^q\right]^{1/q}. \tag{407}$$

结合引理 T.1 至T.3 可得任意偶数阶矩下的如下估计。这是证明中唯一使用超收缩性的地方。

引理 T.4 （固定阶数无环表达式的高阶矩）。 在引理 *T.2*的值域内，对于每个偶整数 $p \ge 2$ 和颜色序列 $\mathbf{C} \in \mathcal{C}^k$,

$$\mathop{\mathbb{E}}_{\mathbf{P}} \left|\tilde{\kappa}_k^{(\mathbf{C})}\right|^p \le \left[(p-1)^{D_{k,s}/2} \left(\frac{Ck}{m}\right)^{k/4}\right]^p + 4^{-n}(6k)^{kp}. \tag{408}$$

特别地，固定一个偶整数 $k \ge 4$ 和整数 $s \ge 0$。对于充分大的 n， $n \le m \le \mathrm{poly}(n)$ 以及 $\delta = 1/\mathrm{poly}(n)$,

$$\Pr_{\mathbf{P}} \left(\left|\tilde{\kappa}_k^{(\mathbf{C})}\right| > C m^{-k/4} (\log n)^{D_{k,s}/2}\right) \le \delta + e^{-cn}, \tag{409}$$

对于颜色序列和固定生成元一致地，对某些 c、$C > 0$成立。

证明。 第一个界由将 式 (405) 和 (407) 应用于 $F_{k,\mathbf{C}}(X, Y)$，然后应用 (402) 得到。对于第二个界，取 $p = 2\lceil \log(n/\delta) \rceil$ 并令

$$u = e(p-1)^{D_{k,s}/2} \left(\frac{Ck}{m}\right)^{k/4}.$$

由马尔可夫不等式可得

$$\Pr_{\mathbf{P}} \left(\left|\tilde{\kappa}_k^{(\mathbf{C})}\right| > u\right) \le e^{-p} + 4^{-n} \left(\frac{(6k)^k}{u}\right)^p. \tag{410}$$

第一项至多为 δ。由于 k、s 是固定的， $m \le \mathrm{poly}(n)$，且 $p = \mathcal{O}(\log n)$，因此第二项的对数至多为 $-n \log 4 + \mathcal{O}(\log^2 n) \le -cn$，当 n充分大时成立。最后， $u \le Cm^{-k/4}(\log n)^{D_{k,s}/2}$。这就证明了 (409)。 □

现在我们证明这两个集中性陈述。

推论 *D.10* 和 *H.6* 的证明。 固定一个偶整数 $k_0 \geq 4$。由于 $\delta = 1/\mathrm{poly}(n)$，存在一个常数 $c_\delta > 0$，使得 $\delta \geq n^{-c_\delta}$ 对所有充分大的 n，取一个偶整数 $k_* \geq k_0$，使得

$$k_* + 2 - k_0 > 2c_\delta + 4. \tag{411}$$

将无环表达式的和按阶数 $k_0 \leq k \leq \min\{k_*, k_1\}$ 和 $k_* + 2 \leq k \leq k_1$拆分。

固定的低阶。 将 引理 T.4 应用于每个偶数 δ/n^2，并对每个归一化标签序列 $\mathbf{C} \in \mathcal{C}^k$ 满足 $\vec{\mathbf{c}}_1 = \vec{\mathbf{0}}$。这样的配对至多有 $\sum_{k=k_0}^{k_*} 2^{s(k-1)}$ 个，这是一个固定数目。由并集界可知，所有这些估计同时成立，失败概率至多为$\delta/4 + e^{-cn}$，对充分大的 n成立。对该区间内的每个固定 $k > k_0$，

$$\frac{m^{-k/4}(\log n)^{D_{k,s}/2}}{m^{-k_0/4}(\log n)^{D_{k_0,s}/2}} \leq n^{-(k-k_0)/4}(\log n)^{(D_{k,s}-D_{k_0,s})/2} = o(1). \tag{412}$$

因此，计入固定数量的颜色词后，低阶和至多为 st

$$Cm^{-k_0/4}(\log n)^{D_{k_0,s}/2} \tag{413}$$

其中某个常数为 $C > 0$。

其余阶数。 若 $k_1 \leq k_*$，则这一部分为空。否则，利用失败参数为 $\delta/4$ 且低阶为 $k_* + 2$的定理 H.5二阶矩证明，可得无环表达式

$$\sum_{\substack{k_*+2 \leq k \leq k_1 \\ k \text{ even}}} \sum_{\substack{\mathbf{C} \in \mathcal{C}^k \\ \vec{\mathbf{c}}_1 = \vec{\mathbf{0}}}} |\tilde{\kappa}_k^{(\mathbf{C})}| \leq C\delta^{-1/2} m^{-(k_*+2)/4} \tag{414}$$

除非概率至多为 $\delta/4 + e^{-\Omega(n)}$。对于 $s = 0$，使用标量证明；其相同的二阶矩估计也适用于求和仅包含第一阶项的情形。这里，几何级数中的因子 2^{4s} 和 $k_* + 2$ 是常数。根据 $m \geq n$， $\delta \geq n^{-c_\delta}$，以及（411），（414）右侧至多为

$$Cm^{-k_0/4} n^{c_\delta/2 - (k_*+2-k_0)/4} \leq Cm^{-k_0/4} n^{-1}.$$

因此，它可由（413）吸收。

转换为实际的自由累积量。将这些事件与截至阶数 k_1 的引理 B.2中的无环事件取交。定理 C.15 和 H.3 随后给出 $\tilde{\kappa}_k^{(\mathbf{C})} = \kappa_k^{(\mathbf{C})}$ 对上文使用的每个阶数和颜色序列同时成立，额外的失败概率为 $e^{-\Omega(n)}$。合并两个求和式并增大 C 即可证明推论 H.6，失败概率至多为$\delta + e^{-\Omega(n)}$；令 $s = 0$ 即可得到推论 D.10。 □

参考文献

[1] Dolev Bluvstein、Simon J. Evered、Alexandra A. Geim、Sophie H. Li、Hengyun Zhou、Tom Manovitz、Sepehr Ebadi、Madelyn Cain、Marcin Kalinowski、Dominik Hangleiter、J. Pablo Bonilla Ataides、Nishad Maskara、Iris Cong、Xun Gao、Pedro Sales Rodriguez、Thomas Karolyshyn、Giulia Semeghini、Michael J. Gullans、Markus Greiner、Vladan Vuletić 和 Mikhail D. Lukin。基于可重构原子阵列的逻辑量子处理器。《自然》，626(7997):58–65，2024年。[2] Google Quantum AI 及其合作者。低于表面码阈值的量子纠错。《自然》，638(8052):920–926，2025年。[3] A. Paetznick、B. W. Reichardt、M. P. da Silva、C. Ryan-Anderson、D. Aasen、J. M. Bello- Rivas、J. P. Campora, III、R. Chao、A. Chernoguzov、W. van Dam、J. M. Dreiling、C. Foltz、F. Frachon、J. P. Gaebler、T. M. Gatterman、L. Grans-Samuelsson、D. Gresh、D. Hayes、N. Hewitt、C. Holliman、C. V. Horst、J. Johansen、D. Lucchetti、Y. Matsuoka、M. Mills、S. A. Moses、B. Neyenhuis、A. Paz、J. Pino、P. Siegfried、A. Sundaram、D. Tom、Z. Wang、S. J. Wernli、M. Zanner、R. P. Stutz 和 K. M. Svore。通过纠错与检测改进量子处理器的逻辑错误率。《自然》，654(8118):349–355，2026年。[4] Peter W. Shor。在量子计算机上进行素因数分解和离散对数的多项式时间算法。《*SIAM*计算杂志》，26(5):1484–1509，1997年。[5] Philipp Kammerlander、Thomas E. O'Brien、Robbie King、Rolando D. Somma、Mária Kiefer- ová、Brad Lackey、Alexander Schmidhuber、Siddhartha Jain、Andi Gu、Yuri Alexeev、Shouvanik Chakrabarti、Ruslan Shaydulin、Pietro M. Posta、Guang Hao Low、Dar Gilboa、Matthias Troyer、Barry C. Sanders、Matthias Christandl、Elica Kyoseva、Catherine Lefebvre 和 Ryan Babbush。《超二次计算量子优势纲要》。*arXiv* 预印本 *arXiv:2610.32595*，2026年。[6] Richard P. Feynman。用计算机模拟物理学。《国际理论物理学杂志》，21(6-7):467–488，1982年。[7] Andrew J. Daley、Immanuel Bloch、Christian Kokail、Stuart Flannigan、Natalie Pearson、Matthias Troyer 和 Peter Zoller。量子模拟中的实用量子优势。《自然》，607:667–676，2022年。[8] Edward Farhi、Jeffrey Goldstone 和 Sam Gutmann。量子近似优化算法。*arXiv* 预印本 *arXiv:1411.4028*，2014年。[9] Stephen P. Jordan、Noah Shutty、Mary Wootters、Adam Zalcman、Alexander Schmidhuber、Robbie King、Sergei V. Isakov、Tanuj Khattar 和 Ryan Babbush。通过解码量子干涉测量进行优化。《自然》，646(8086):831–836，2025年。[10] Jacob Biamonte、Peter Wittek、Nicola Pancotti、Patrick Rebentrost、Nathan Wiebe 和 Seth Lloyd。量子机器学习。《自然》，549(7671):195–202，2017年。[11] K. G. Wilson 和 J. Kogut。重整化群与 ϵ 展开。《物理学报告》，12(2):75–199，1974年。

[12] J. M. Deutsch. 封闭系统中的量子统计力学。《物理评论*A*》，43(4):2046–2049，1991年。[13] Steven R. White. 量子重整化群的密度矩阵表述。《物理评论快报》，69(19):2863–2866，1992年。[14] Guifré Vidal. 一维量子多体系统的高效模拟。《物理评论快报》，93(4)，2004年。[15] Anders W. Sandvik. 随机级数展开方法。载于 Eva Pavarini、Erik Koch 和 Shiwei Zhang 编，真实材料的多体方法，第9卷，建模与模拟，第16章。于利希研究中心出版社，2019年。[16] Giuseppe Carleo 和 Matthias Troyer. 利用人工神经网络解决量子多体问题。《科学》，355(6325):602–606，2017年。[17] Glen Evenbly、Nicola Pancotti、Ashley Milsted、Johnnie Gray 和 Garnet Kin-Lic Chan. 张量网络的圈级数展开。《物理评论研究》，8(1)，2026年。[18] Antoine Georges、Gabriel Kotliar、Werner Krauth 和 Marcelo J. Rozenberg. 强关联费米子系统的动力学平均场理论及无穷维极限。《现代物理评论》，68(1):13–125，1996年。[19] Rodney J. Bartlett 和 Monika Musiał. 量子化学中的耦合簇理论。《现代物理评论》，79(1):291–352，2007年。[20] E. Y. Loh, Jr.、J. E. Gubernatis、R. T. Scalettar、S. R. White、D. J. Scalapino 和 R. L. Sugar. 多电子系统数值模拟中的符号问题。《物理评论*B*》，41(13):9301–9307，1990年。[21] Mingpu Qin、Thomas Schäfer、Sabine Andergassen、Philippe Corboz 和 Emanuel Gull. 哈伯德模型：计算视角。《凝聚态物理年评》，13(1):275–302，2022年。[22] Sebastian Paeckel、Thomas Köhler、Andreas Swoboda、Salvatore R. Manmana、Ulrich Scholl- wöck 和 Claudius Hubig. 矩阵乘积态的时间演化方法。《物理学年鉴》，411，2019年。[23] Pasquale Calabrese 和 John Cardy. 一维系统中纠缠熵的演化。《统计力学杂志：理论与实验》，2005(04):P04010，2005年。[24] Yasuhiro Sekino 和 Leonard Susskind. 快速置乱器。《高能物理学杂志》，2008(10):065，2008年。[25] Andrew M. Childs、David Gosset 和 Zak Webb. 多粒子量子行走实现通用计算。《科学》，339(6121):791–794，2013年。[26] Leo Zhou 和 Dorit Aharonov. 一维和二维通用哈密顿量模拟器。《自然-通讯》，17(1)，2026年。

[27] Dorit Aharonov、Wim van Dam、Julia Kempe、Zeph Landau、Seth Lloyd 和 Oded Regev. 绝热量子计算等价于标准量子计算。《*SIAM*计算杂志》，37(1):166–194，2007年。[28] R. Haghshenas、E. Chertkov、M. Mills、W. Kadow、S.-H. Lin、Y. H. Chen、C. Cade、I. Niesen、T. Begušić、M. S. Rudolph、C. Cirstoiu、K. Hémery、C. Mc Keever、M. Lubasch、E. Granet、C. H. Baldwin、J. P. Bartolotta、M. Bohn、J. J. Burau、J. Cline、M. DeCross、J. M. Dreiling、C. Foltz、D. Francois、J. P. Gaebler、C. N. Gilbreth、J. Gray、D. Gresh、A. Hall、A. Hankin、A. Hansen、N. Hewitt、C. A. Holliman、R. B. Hutson、M. Iqbal、N. Kotibhaskar、E. Lehman、D. Lucchetti、I. S. Madjarov、K. Mayer、A. R. Milne、S. A. Moses、B. Neyenhuis、G. Park、A. R. Perry、B. Ponsioen、M. Schecter、P. E. Siegfried、D. T. Stephen、B. G. Tiemann、M. D. Urmey、J. Walker、A. C. Potter、D. Hayes、G. K.-L. Chan、F. Pollmann、M. Knap、H. Dreyer 和 M. Foss-Feig. 囚禁离子量子计算机上的数字量子磁性。《自然》，653(8113):56–62，2026年5月。[29] Google Quantum AI 和 Collaborators. 观测到量子遍历性边缘的相长干涉。《自然》，646(8086):825–830，2025年。[30] Scott Aaronson 和 Alex Arkhipov. 线性光学的计算复杂性。载于第四十三届*ACM*计算理论研讨会论文集，STOC ’11，第333–342页，美国纽约州纽约市，2011年。计算机协会。[31] Michael J. Bremner、Ashley Montanaro 和 Dan J. Shepherd. 平均情形复杂度与对易量子计算的近似模拟。《物理评论快报》，117(8)，2016年。[32] Adam Bouland、Bill Fefferman、Chinmay Nirkhe 和 Umesh Vazirani. 量子随机线路采样的复杂性与验证。《自然·物理》，15(2):159–163，2019年。[33] Ramis Movassagh. 随机量子线路的困难性。《自然·物理》*style>，19(11):1719–1724，2023*年。*Frank Arute*、*Kunal Arya*、*Ryan Babbush*、*Dave Bacon*、*Joseph C. Bardin*、*Rami Barends*、*Rupak Biswas*、*Sergio Boixo*、*Fernando G. S. L. Brandao*、*David A. Buell*、*Brian Burkett*、*Yu Chen*、*Zijun Chen*、*Ben Chiaro*、*Roberto Collins*、*William Courtney*、*Andrew Dunsworth*、*Edward Farhi*、*Brooks Foxen*、*Austin Fowler*、*Craig Gidney*、*Marissa Giustina*、*Rob Graff*、*Keith Guerin*、*Steve Habegger*、*Matthew P. Harrigan*、*Michael J. Hartmann*、*Alan Ho*、*Markus Hoffmann*、*Trent Huang*、*Travis S. Humble*、*Sergei V. Isakov*、*Evan Jeffrey*、*Zhang Jiang*、*Dvir Kafri*、*Kostyantyn Kechedzhi*、*Julian Kelly*、*Paul V. Klimov*、*Sergey Knysh*、*Alexander Korotkov*、*Fedor Kostritsa*、*David Landhuis*、*Mike Lindmark*、*Erik Lucero*、*Dmitry Lyakh*、*Salvatore Mandrà*、*Jarrod R. McClean*、*Matthew McEwen*、*Anthony Megrant*、*Xiao Mi*、*Kristel Michielsen*、*Masoud Mohseni*、*Josh Mutus*、*Ofer Naaman*、*Matthew Neeley*、*Charles Neill*、*Murphy Yuezhen Niu*、*Eric Ostby*、*Andre Petukhov*、*John C. Platt*、*Chris Quintana*、*Eleanor G. Rieffel*、*Pedram Roushan*、*Nicholas C. Rubin*、*Daniel Sank*、*Kevin J. Satzinger*、*Vadim Smelyanskiy*、*Kevin J. Sung*、*Matthew D. Trevithick*、*Amit Vainsencher*、*Benjamin Villalonga*、*Theodore White*、*Z. Jamie Yao*、*Ping Yeh*、*Adam Zalcman*、*Hartmut Neven* 和 *John M. Martinis.* 利用可编程超导处理器实现量子优越性。《自然》，574(7779):505–510，2019年。

[35] Sergey Bravyi、David DiVincenzo 和 Daniel Loss。弱相互作用量子自旋系统模拟的多项式时间算法。《数学物理通讯》，284(2):481–507，2008年。[36] Hongrui Chen、Cambyse Rouzé、Jielun Chen、Jiaqing Jiang、Samuel O. Scalet、Yongtao Zhan、Garnet Kin-Lic Chan、Lexing Ying 和 Yu Tong。累积量展开的收敛性与弱相互作用费米子的多项式时间算法。*arXiv*预印本 *arXiv:2512.12010*，2025年。[37] M. Kliesch、C. Gogolin、M. J. Kastoryano、A. Riera 和 J. Eisert。温度的局域性。《物理评论*X*》，4(3)，2014年。[38] Aram W. Harrow、Saeed Mehraban 和 Mehdi Soleimanifar。量子多体系统的经典算法、关联衰减与配分函数的复零点。载于第*52*届*ACM SIGACT*年度计算理论研讨会论文集，STOC 2020，第378–386页，美国纽约州纽约市，2020年。计算机协会。[39] Ainesh Bakshi、Allen Liu、Ankur Moitra 和 Ewin Tang。高温吉布斯态无纠缠且可高效制备。载于*2024*年*IEEE*第*65*届计算机科学基础年度研讨会（*FOCS*），第1027–1036页，2024年。[40] Alexander Zlokapa 和 Bobak T. Kiani。SYK热期望在任意温度下都可通过经典方法轻松计算。*arXiv*预印本 *arXiv:2602.22619*，2026年。[41] Dominik S. Wild 和 Álvaro M. Alhambra。短时量子动力学的经典模拟。*PRX Quantum*，4(2)，2023年。[42] Xun Gao 和 Luming Duan。含噪量子计算的高效经典模拟。*arXiv*预印本 *arXiv:1810.03176*，2018年。[43] Dorit Aharonov、Xun Gao、Zeph Landau、Yunchao Liu 和 Umesh Vazirani。含噪随机电路采样的多项式时间经典算法。载于第*55*届*ACM*计算理论年度研讨会论文集，第945–957页，2023年。[44] Thomas Schuster、Chao Yin、Xun Gao 和 Norman Y. Yao。含噪量子电路的多项式时间经典算法。《物理评论*X*》，15(4)，2025年。[45] Eric R Anschuetz、Chi-Fang Chen、Bobak T Kiani 和 Robbie King。强相互作用费米子具有非平凡性但非玻璃态。《物理评论快报》，135(3):030602，2025年。[46] Eric R. Anschuetz。高效学习产生的量子玻璃性。《数学物理通讯》，407:30，2026年。[47] Alexander Zlokapa、Bobak T. Kiani 和 Eric R. Anschuetz。由玻璃性导致的平均情形量子复杂性。*arXiv*预印本 *arXiv:2510.08497*，2025年。[48] Matthew Ding、Robbie King、Bobak T. Kiani 和 Eric R. Anschuetz。稀疏SYK优化。*Quantum*，10:2029，2026年。[49] Saleh Naghdi 和 Eric R. Anschuetz。从典型吉布斯态采样的（近乎）高效经典算法。*arXiv*预印本 *arXiv:2609.40250*，2026年。

[50] Matthew B. Hastings 和 Ryan O’Donnell。强相互作用费米子哈密顿量的优化。载于第*54*届*ACM SIGACT*年度计算理论研讨会论文集，STOC 2022，第776–789页，美国纽约州纽约市，2022年。计算机协会。[51] Harald Putterman、Alexander Zlokapa 和 Jordan Cotler。当量子热态看起来像经典态时。*arXiv*预印本 *arXiv:2607.28536*，2026年。[52] Chi-Fang Chen、Alexander M Dalzell、Mario Berta、Fernando GSL Brandão 和 Joel A Tropp。稀疏随机哈密顿量可通过量子方法轻松处理。《物理评论*X*》，14(1):011014，2024年。[53] Alexander Zlokapa。SYK热期望的严格拟多项式时间经典算法。*arXiv*预印本 *arXiv:2604.21089*，2026年。[54] Alexander Schmidhuber 和 Alexander Zlokapa。适用于玻璃化转变前平均场模型的多项式时间经典算法。*arXiv*预印本 *arXiv:2610.06807*，2026年。[55] Brian Swingle。Sachdev-Ye-Kitaev模型中的单实例可观测量。*arXiv*预印本 *arXiv:2609.16130*，2026年。[56] Yunchao Liu、Yihui Quek、Shreya Vardhan 和 Tianci Zhou。混沌量子动力学中计算OTOC的高效经典算法。*arXiv*预印本 *arXiv:2611.12773*，2026年。[57] Laura Lewis、Antonio A. Mele、Ronald de Wolf、Jarrod R. McClean 和 Amira Abbas。用于模拟一维中 $\mathrm{OTOC}^{(1)}$ 的可证明高效经典算法。*arXiv*预印本 *arXiv:2611.24640*，2026年。[58] Thomas Schuster 和 Andreas Elben。探究量子动力学实验的经典复杂度。*arXiv*预印本 *arXiv:2609.31830*，2026年。[59] Jordan S. Cotler、Guy Gur-Ari、Masanori Hanada、Joseph Polchinski、Phil Saad、Stephen H. Shenker、Douglas Stanford、Alexandre Streicher 和 Masaki Tezuka。黑洞与随机矩阵。《高能物理学杂志》，2017(5)，2017年。[60] Alexander Altland 和 Julian Sonner。全息量子混沌的晚期物理学。《*SciPost*物理》，11(2)，2021年。[61] Curt von Keyserlingk、Frank Pollmann 和 Tibor Rakovszky。算符回流与量子输运的经典模拟。《物理评论*B*》，105(24)，2022年。[62] Antonio A. Mele、Francesco A. Mele、Jarrod R. McClean 和 Thomas E. O’Brien。借助随机电路实现可验证量子优势：在集中性下仍然存在的可观测量。*arXiv*预印本 *arXiv:2609.37890*，2026年。[63] Armando Angrisani、Alexander Schmidhuber、Manuel S. Rudolph、M. Cerezo、Zoë Holmes 和 Hsin-Yuan Huang。经典估计无噪声量子电路的可观测量。《物理评论快报》，135(17)，2025年。[64] Dan Voiculescu。随机矩阵与自由积的极限定律。《数学创刊》，104(1):201–220，1991年。

[65] Roland Speicher. 非交叉划分格上的乘法函数与自由卷积。《数学年刊》，298(1):611–628，1994年。[66] Alexandru Nica 和 Roland Speicher。《自由概率组合学讲义》。伦敦数学学会讲义系列。剑桥大学出版社，2006年。[67] Silvia Pappalardi、Laura Foini 和 Jorge Kurchan. 本征态热化假说与自由概率。《物理评论快报》，129(17):170603，2022年。[68] Michele Fava、Jorge Kurchan 和 Silvia Pappalardi. 基于自由概率的设计。《物理评论X》，15(1):011031，2025年2月。[69] Shreya Vardhan 和 Jinzhao Wang. 自由互信息与高阶时序外关联函数。PRX Quantum，7(4)，2026年。[70] Ryogo Kubo. 广义累积量展开法。《日本物理学会志》，17(7):1100–1120，1962年。[71] Hazime Mori. 输运、集体运动与布朗运动。《理论物理学进展》，33(3):423–455，1965年。[72] Robert Zwanzig. 不可逆热力学中的记忆效应。《物理评论》，124(4):983–992，1961年。[73] Dieter Forster. 流体动力学涨落、对称性破缺与关联函数。CRC出版社，2018年。[74] 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。[75] Jaroslav Nešetřil 和 Svatopluk Poljak. 关于子图问题的复杂性。《布拉格查理大学数学评论》，026(2):415–419，1985年。[76] Volker Strassen. 高斯消元并非最优。Numerische Mathematik，13(4):354–356，1969年。[77] OpenAI. 矩阵乘法指数的一个上界 $9/4$ 。https://github .com/openai/math/tree/main/preprints/Matrix-Multiplication-Nine-Fourths-October-2-2026，2026年10月。[78] Pavel M. Bleher 和 Arno B. J. Kuijlaars. 高斯随机矩阵外部源的大 n 极限，第三部分：双重标度极限。《数学物理通讯》，270:481–517，2007年。[79] Micha Berkooz 和 Ohad Mamroud. 双标度 SYK 入门。《物理学进展报告》，88(3):036001，2025年。[80] Henry W Lin. 双标度 SYK 的体希尔伯特空间。《高能物理学杂志》，2022(11):60，2022年。[81] Terence Tao. 随机矩阵理论专题，数学研究生教程第132卷。美国数学会，罗得岛州普罗维登斯，2012年。

[82] Franz Lehner. 自由累积量与连通划分的计数。《欧洲组合数学杂志》，23(8):1025–1031，2002年11月。[83] Dan Voiculescu. 关于某些非交换算子值随机变量的运算。*Astérisque*，232(1):243–275，1995年。[84] Roland Speicher. 带合并的自由积的组合理论与算子值自由概率论。《美国数学会回忆录》，132(627)，1998年。[85] Marc Mézard 和 Andrea Montanari. 《信息、物理与计算》。牛津大学出版社，2009年。[86] Subir Sachdev 和 Jinwu Ye. 随机量子海森堡磁体中的无能隙自旋流体基态。《物理评论快报》，70:3339–3342，1993年5月。[87] Alexei Kitaev. 量子全息的一个简单模型。KITP，加州大学圣塔芭芭拉分校演讲，2015年。[88] Juan Maldacena 和 Douglas Stanford. 关于 Sachdev-Ye-Kitaev 模型的几点说明。《物理评论*D*辑》，94:106002，2016年11月。[89] Roland Speicher. 一个非交换中心极限定理。《数学杂志》，209(1):55–66，1992年。[90] Richard P. Stanley. 《枚举组合学》，第1卷。剑桥大学出版社，第2版，2011年。[91] Germain Kreweras. 关于一个循环的非交叉划分。《离散数学》，1(4):333–350，1972年。[92] Janet Simpson Beissinger. 不可约组合对象的计数。《组合理论杂志》*A*辑，38(2):143–169，1985年。[93] Octavio Arizmendi、Takahiro Hasebe、Franz Lehner 和 Carlos Vargas. 非交换概率中累积量之间的关系。《数学进展》，282:56–92，2015年9月。[94] Daniel J Kleitman. 不可约图的比例。《应用数学研究》，49(3):297–299，1970年。[95] W N Hsieh. 不可约图的比例。《应用数学研究》，52(3):277–283，1973年。[96] Gian-Carlo Rota. 组合理论基础 I：莫比乌斯函数理论。《概率论及相关领域杂志》，2:340–368，1964年。[97] Dan Voiculescu. 某些约化自由积 C*-代数的对称性。载于 Huzihiro Araki、Calvin C. Moore、Şerban-Valentin Stratila 和 Dan-Virgil Voiculescu 编，《算子代数及其与拓扑学和遍历论的联系》，第556–588页。施普林格柏林海德堡，1985年。

[98] Dan Voiculescu。某些非交换随机变量的加法。《泛函分析杂志》，66(3):323–346，1986年。[99] Rom Rubenovich Varshamov。纠错码中信号数量的估计。《苏联科学院院报》，117(5):739–741，1957年。[100] Paul H Edelman。链枚举与非交叉划分。《离散数学》，31(2):171–180，1980年。[101] Paul R Stein 和 Cornelius J Everett。关于一类连结图 II。渐近分析。《离散数学》，21(3):309–318，1978年。[102] Richard P. Stanley。《枚举组合学》，第2卷。剑桥大学出版社，第2版，2023年。[103] Nicolas Loizeau、J. Clayton Peacock 和 Dries Sels。使用 PauliStrings.jl 进行量子多体模拟。《*SciPost*物理代码库》，第54页，2025年。[104] Serge Lang。《实分析与泛函分析》，《数学研究生教材》第142卷。施普林格出版社，纽约，第3版，1993年。[105] Joachim von zur Gathen 和 Jürgen Gerhard。《现代计算机代数》。剑桥大学出版社，第3版，2013年。[106]Roland Speicher。“非交换分布”讲义。*arXiv*预印本 *arXiv:2009.03589*，2020年。[107] James A Mingo 和 Roland Speicher。自由概率与随机矩阵，第35卷。施普林格出版社，2017年。[108] Jean Zinn-Justin。《量子场论与临界现象》。牛津大学出版社，第4版，2002年。[109] Lane G. Gunderman、Andrew Jena 和 Luca Dellantonio。通过守恒荷获得哈密顿量的最小量子比特表示。《物理评论*A*》，109:022618，2024年2月。[110] Afonso S. Bandeira、Dmitriy Kunisky、Petar Nizić-Nikolac、Lucas Pesenti 和 Robert Wang。福克空间上的矩阵集中与等价算子。*arXiv*预印本 *arXiv:2610.01982*，2026年。[111] Guido Brückner、Ignaz Rutter 和 Peter Stumpf。在近线性时间内扩展圆图的部分表示。《算法学》，86(7):2152–2173，2024年。[112] Rafael Pass。由多项式打包实现矩阵乘法：关于 $\omega \le 9/4$ 的构造性初等证明。*arXiv*预印本 *arXiv:2610.28627*，2026年。[113] László Lovász。《大型网络与图极限》，《美国数学会讨论班出版物》第60卷。美国数学会，罗得岛州普罗维登斯，2012年。

[114] Radu Curticapean、Holger Dell 和 Dániel Marx。同态映射是计数小子图的良好基。在第*49*届*ACM SIGACT*计算理论年会论文集中，STOC 2017，第210–223页，美国纽约州纽约市，2017年。计算机协会。

[115] Ryan O’Donnell。《布尔函数分析》。剑桥大学出版社，2014年。