数理解析研究所講究録
第2059巻 2017年 78-83

孤立多体量子系の平衡化の量子仮説検定からの再考
Thermal-equilibration of Isolated Many-body Quantum Systems Revisited from Quantum Hypothesis Testing Theory

渡辺 優
京都大学 基礎物理学研究所
Yu Watanabe
Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University

2017 年 8 月 8 日

概要

量子統計力学の基礎付けとして注目されている孤立した多体量子系の平衡化現象について、量子仮説検定の枠組みから再考する。任意の時刻の量子状態とその平衡状態である長時間平均状態との間の識別の精度は、それらの状態を測定した際の確率分布間の相対エントロピーで測られる。本研究では、相対エントロピーの長時間平均と測定の分解能の間の関係を明らかにし、マクロな物理量の射影測定や部分系の測定を行う限りにおいてはほとんどの時刻における状態と平衡状態は識別不可能であること、任意の測定を行える場合においては時間依存した状態と平衡状態が区別できる場合があることを示した。

1 Introduction

外界から孤立した量子系を考える。その系の Hilbert 空間を $\mathcal{H}$ とし、その次元を $D := \dim \mathcal{H}$ とする。系の Hamiltonian H は時間に依存しないとし、その固有値展開を

$$H = \sum_{i=1}^{D} E_i \left|E_i\right\rangle \left\langle E_i\right| \tag{1}$$

と表すことにする。ここでは、簡単のため、H は非縮退かつ non-resonant 条件を満たすものとする。つまり、$E_i \neq E_j$ for $i \neq j$、また、$i \neq j$ かつ $(i,j) \neq (k,l)$ ならば $E_i - E_j \neq E_k - E_l$ を仮定する。

今、孤立した系を考えているので、量子状態 ρ は Hamiltonian によって定められるユニタリ時間発展をする。後のために、その長時間平均 $\overline{\rho}$ を求めておく。

$$\overline{\rho} := \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \rho(t) = \sum_i \left|E_i\right\rangle \left\langle E_i|\rho|E_i\right\rangle \left\langle E_i\right| \tag{2}$$

Reimann[1] によれば、任意の物理量 A の時刻 t における期待値 $\langle A\rangle_t := \mathrm{Tr}[\rho(t)A]$ とその長時間平均 $\overline{\langle A\rangle}$ の差に関して、

$$\overline{|\langle A\rangle - \overline{\langle A\rangle}|^2} \leq \Delta A^2 D_{\mathrm{eff}} \tag{3}$$

が成り立つ。ここで、$\Delta A := \max_i a_i - \min_i a_i$ であり、a_i は A の固有値、D_{eff} は ρ の effective dimension と呼ばれ、以下で与えられる。

$$D_{\mathrm{eff}} := \left(\sum_i \left\langle E_i|\rho|E_i\right\rangle^2\right)^{-1} = \left(\mathrm{Tr}[\overline{\rho}^2]\right)^{-1}. \tag{4}$$

Effective dimension は定義より、$1 \le D_{\rm eff} \le D$ を満たす。不等式 (3) から、$D_{\rm eff} \gg 1$ ならば、物理量 A の期待値を見る限り、ほとんどの時刻 t で ρ と $\overline{\rho}$ は識別が出来ないことが得られる。

しかし、実験的に A の期待値を得るためには量子測定を行わなければならず、その過程では A の値 (測定値) の分布も得られる。物理量 A の期待値だけ比べるということは、分布の情報を "縮約" して捨ててしまっている。分布の情報をフルに使えば ρ と $\overline{\rho}$ は識別できるのだろうか？ それとも、情報をフルに使ってもやはり識別できないのだろうか？ 本論文では量子検定の枠組みから、ρ と $\overline{\rho}$ の識別可能性と我々が行える測定の精度との間の関係性を論ずる。

2 量子仮説検定のセットアップと Stein's Lemma

2 つの量子状態 $\rho(t)$ と $\overline{\rho}$ のどちらかが i.i.d. で n 個用意されているとする (t は fix)。つまり、$\rho(t)^{\otimes n}$ か $\overline{\rho}^{\otimes n}$ のどちらかが与えられている。ここでは、与えられたサンプルに対して collective な測定は行わず、1 つの量子状態に対して 1 回ずつ POVM 測定 $\boldsymbol{M} = \{M_i\}_{i=1}^m$ を行うものとする。量子状態 $\rho(t), \overline{\rho}$ に対する測定結果の確率分布をそれぞれ $p_t(\cdot), \overline{p}(\cdot)$ とする:

$$p_t(j) := \mathrm{Tr}[\rho(t)M_j], \qquad \overline{p}(j) := \mathrm{Tr}[\overline{\rho}M_j]. \tag{5}$$

このとき、n 回の測定結果から被測定状態が ρ であったか $\overline{\rho}$ であったかを決めなければならないわけだが、そこには 2 種類のエラーが存在する。1 つめは $\rho(t)^{\otimes n}$ が与えられたにも関わらず誤って $\overline{\rho}^{\otimes n}$ だと判断してしまう第一種誤り確率 α_n:

$$\alpha_n := \mathrm{Prob}_n\{\text{accept } \overline{\rho}^{\otimes n} \text{ when } \rho(t)^{\otimes n} \text{ is true}\} \tag{6}$$

もう 1 つは $\overline{\rho}^{\otimes n}$ が与えられたにも関わらず誤って $\rho(t)^{\otimes n}$ だと判断してしまう第二種誤り確率 β_n:

$$\beta_n := \mathrm{Prob}_n\{\text{accept } \rho(t)^{\otimes n} \text{ when } \overline{\rho}^{\otimes n} \text{ is true}\} \tag{7}$$

である。任意の n に依らない定数 $\varepsilon > 0$ に対して $\alpha_n \le \varepsilon$ を満たすように判断する際、最適な検定における β_n の漸近的な振る舞いは

$$\beta_n \xrightarrow{n\to\infty} e^{-nD(p_t\|\overline{p})} \tag{8}$$

で与えられることが Stein's Lemma として知られている。ここで、$D(p_t\|\overline{p})$ は相対エントロピー (Kullback-Leibler divergence)

$$D(p_t\|\overline{p}) := \sum_i p_t(i) \log \frac{p_t(i)}{\overline{p}(i)} \tag{9}$$

である。

したがって、相対エントロピーが充分に小さければ (例えば $O(D^{-1})$) 正確な判定を行うために必要な測定の回数が膨大になり、事実上判別出来なくなってしまう。逆に、相対エントロピーが大きければ、そこそこの回数の測定を行うだけで正確な判定が出来ることとなる。以降では、相対エントロピーの長時間平均と測定の精度についての関係性について議論する。

3 相対エントロピーの長時間平均の上限

3.1 任意の測定が実行可能な場合の上限

まず、今後度々用いる不等式を示しておく。

補題 1. 任意の量子状態 ρ および線形演算子 A, B に対して、以下の不等式が成り立つ:

$$\overline{\langle A\rangle\langle B\rangle} \leq \overline{\langle A\rangle}\ \overline{\langle B\rangle} + \sqrt{\mathrm{Tr}[\overline{\rho}A\overline{\rho}A^\dagger]\mathrm{Tr}[\overline{\rho}B\overline{\rho}B^\dagger]}. \tag{10}$$

特に、$A = A^\dagger$ の場合、

$$\overline{\langle A\rangle^2} \leq \overline{\langle A\rangle}^2 + \mathrm{Tr}[(\overline{\rho}A)^2]. \tag{11}$$

Proof. Hamiltonian が非縮退かつ non-resonant 条件を満たしていること、および、Schwarz の不等式と

$$|\langle E_i|\rho|E_j\rangle|^2 \leq \langle E_i|\rho|E_i\rangle\langle E_j|\rho|E_j\rangle, \tag{12}$$

を用いて、

$$\begin{aligned}
\overline{\langle A\rangle\langle B\rangle} &= \sum_{i,j,k,l}\langle E_i|\rho|E_j\rangle\langle E_j|A|E_i\rangle\langle E_k|\rho|E_l\rangle\langle E_l|B|E_k\rangle\,\overline{e^{-i(E_i-E_j+E_k-E_l)t}} \\
&= \sum_i\langle E_i|\rho|E_i\rangle\langle E_i|A|E_i\rangle\sum_i\langle E_i|\rho|E_i\rangle\langle E_i|B|E_i\rangle + \sum_{i\neq j}|\langle E_i|\rho|E_j\rangle|^2\langle E_j|A|E_i\rangle\langle E_i|B|E_j\rangle \\
&\leq \mathrm{Tr}[\overline{\rho}A]\mathrm{Tr}[\overline{\rho}B] + \sqrt{\sum_{i\neq j}|\langle E_i|\rho|E_j\rangle|^2|\langle E_j|A|E_i\rangle|^2}\sqrt{\sum_{i\neq j}|\langle E_i|\rho|E_j\rangle|^2|\langle E_i|B|E_j\rangle|^2} \\
&\leq \overline{\langle A\rangle}\ \overline{\langle B\rangle} + \sqrt{\sum_{i,j}\langle E_i|\rho|E_i\rangle\langle E_j|\rho|E_j\rangle|\langle E_j|A|E_i\rangle|^2}\sqrt{\sum_{i,j}\langle E_i|\rho|E_i\rangle\langle E_j|\rho|E_j\rangle|\langle E_i|B|E_j\rangle|^2} \\
&= \overline{\langle A\rangle}\ \overline{\langle B\rangle} + \sqrt{\mathrm{Tr}[\overline{\rho}A\overline{\rho}A^\dagger]\mathrm{Tr}[\overline{\rho}B\overline{\rho}B^\dagger]}.
\end{aligned}$$

■

なお、これを用いれば Reimann の結果 (3) が直ちに求まる。

以下の定理は、effective dimmension が充分に大きい場合であったとしても、$\rho(t)$ と $\overline{\rho}$ を識別出来る測定が存在する可能性を示している。

定理 2. 任意の POVM 測定 $\boldsymbol{M}$ に対して、

$$\overline{D(p\|\overline{p})} \leq \log 2. \tag{13}$$

Proof. KL-divergence の単調性より、POVM 測定 $\boldsymbol{M} = \{M_i\}_{i=1}^m$ として全ての演算子 M_i の rank が 1 である場合のみ考えればよい。すなわち、$M_i = r_i|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ と書ける場合のみを考えて一般性を失わない。このとき、補題 1 より、

$$\overline{p_t(i)^2} = \overline{\langle M_i\rangle^2} \leq \overline{\langle M_i\rangle}^2 + \mathrm{Tr}[(\overline{\rho}M_i)^2] = \overline{\langle M_i\rangle}^2 + \mathrm{Tr}[(\overline{\rho}M_i)^2] = 2\overline{p}(i)^2. \tag{14}$$

対数関数の凸性より、

$$\overline{D(p_t\|\overline{p})} \leq \overline{\log\left(\sum_i\frac{p_t(i)^2}{\overline{p}(i)}\right)} \leq \log\left(\sum_i\frac{\overline{p_t(i)^2}}{\overline{p}(i)}\right) \leq \log\left(2\sum_i\overline{p}(i)\right) = \log 2.$$

■

式 (13) において、上限がシステムサイズ、すなわちヒルベルト空間の次元 D に依存していないことが重要であり、したがって、熱力学極限においても上限は消えること無く有限に留まる。しかし、上の定理はあくまでも上限を示しただけであり、KL-divergence がシステムサイズに依存しないような状況が本当にあるのか、ということについては答えていない。そこで、以下の定理において具体的に KL-divergence がシステムサイズに依存しないセットアップが存在することを示す。

定理 3. $\overline{D(p_t\|\overline{p})} = O(D^0)$ となるセットアップ、すなわち、状態と POVM 測定の組 $(\rho(t), \boldsymbol{M})$ が存在する。

Proof. 具体的に $\overline{D(p_t\|\overline{\rho})}=O(D^0)$ となる具体例を構成すればよい。

次元 D は偶数とし、次のような初期状態を考える。

$$\rho=\frac{1}{D}\sum_{i=1}^{D/2}\left(|E_{2i-1}\rangle+|E_{2i}\rangle\right)\left(\langle E_{2i-1}|+\langle E_{2i}|\right) \tag{15}$$

これの effective dimension は $D_{\mathrm{eff}}=D$, 長時間平均は $\overline{\rho}=1/D$ である。したがって、Reimann らの結果から、物理量の期待値を見ていただけでは ρ と $\overline{\rho}$ は識別できない。ここで、PVM 測定 $\boldsymbol{P}$ として、

$$\boldsymbol{P}=\{P_{i,+},P_{i,-}\}_{i=1}^{D/2}, \tag{16a}$$

$$P_{i,+}=\frac{1}{2}\left(|E_{2i-1}\rangle+|E_{2i}\rangle\right)\left(\langle E_{2i-1}|+\langle E_{2i}|\right), \tag{16b}$$

$$P_{i,-}=\frac{1}{2}\left(|E_{2i-1}\rangle-|E_{2i}\rangle\right)\left(\langle E_{2i-1}|-\langle E_{2i}|\right). \tag{16c}$$

を考える。時刻 t における量子状態は、$\omega_i:=E_{2i}-E_{2i-1}$ として、

$$\rho(t)=\frac{1}{D}\sum_{i=1}^{D/2}\left(|E_{2i-1}\rangle+e^{-i\omega_i t}|E_{2i}\rangle\right)\left(\langle E_{2i-1}|+e^{i\omega_i t}\langle E_{2i}|\right) \tag{17}$$

より、確率分布は

$$p_t(i,\pm)=\mathrm{Tr}[\rho(t)P_{i,\pm}]=\frac{1}{D}(1\pm\cos\omega_i t), \tag{18a}$$

$$\overline{p}(i,\pm)=\mathrm{Tr}[\overline{\rho}P_{i,\pm}]=\frac{1}{D}. \tag{18b}$$

である。このとき、KL-divergence は、

$$D(p_t\|\overline{p})=\frac{1}{D}\sum_{i=1}^{D/2}\left[(1+\cos\omega_i t)\log(1+\cos\omega_i t)+(1-\cos\omega_i t)\log(1-\cos\omega_i t)\right]. \tag{19}$$

ここで、

$$\overline{(1\pm\cos\omega t)\log(1\pm\cos\omega t)}=1-\log 2, \tag{20}$$

より、

$$\overline{D(p_t\|\overline{p})}=1-\log 2=O(D^0). \tag{21}$$

を得る。ここで、$1-\log 2\sim 0.306853$ であり、(13) の上限には達していないが、しかしながら、システムサイズに依存せず、熱力学極限でも有限の値である。したがって、状態 $\rho(t)$ と $\overline{\rho}$ は熱力学極限においても測定 $\boldsymbol{P}$ によって識別可能である。 ■

ここまでは、任意の測定を行うことが出来る場合の状態の識別性について議論した。しかしながら、多体量子系に対して任意の測定を行うということはほぼ不可能である。そこで、以降では、行える測定を制限した際に、どの程度状態が識別できるのかについて述べる。

3.2 測定の分解能による相対エントロピーの上限

まず、以下の補題を示しておく。

補題 4. 任意の量子状態 $\rho(t)$ に対して、その長時間平均 $\overline{\rho}$ は以下の不等式を満たす。

$$\overline{\rho}\le\frac{1}{D}+\sqrt{\left(1-\frac{1}{D}\right)\left(\frac{1}{D_{\mathrm{eff}}}-\frac{1}{D}\right)}\le\frac{1}{\sqrt{D_{\mathrm{eff}}}}. \tag{22}$$

Proof. 拘束条件 $\mathrm{Tr}\,\overline{\rho}=1$, $\mathrm{Tr}\,\overline{\rho}^2=D_{\mathrm{eff}}^{-1}$ の下で $\langle E_1|\overline{\rho}|E_1\rangle$ を最大化すればよい。 ■

次の定理は、POVM 測定の分解能と相対エントロピーの間の関係性を与える。

定理 5. 任意の量子状態 $\rho(t)$ および POVM 測定 $\boldsymbol{M}$ に対して、

$$\overline{D(p_t\|\overline{p})}<\frac{\|\boldsymbol{M}\|}{\sqrt{D_{\mathrm{eff}}}} \tag{23}$$

が成り立つ。ただし、$\|\boldsymbol{M}\|:=\sum_i\|M_i\|$ とした。

Proof. 対数関数の凸性、および、補題 1、補題 4 より、

$$\begin{aligned}\overline{D(p_t\|\overline{p})}&\leq\log\left(\sum_i\frac{\overline{p_t(i)^2}}{\overline{p}(i)}\right)\leq\log\left(\sum_i\frac{\overline{p}(i)^2+\mathrm{Tr}[(\overline{\rho}M_i)^2]}{\overline{p}(i)}\right)\\&\leq\log\left(1+\|\overline{\rho}\|\sum_i\|M_i\|\right)<\frac{\|\boldsymbol{M}\|}{\sqrt{D_{\mathrm{eff}}}}\end{aligned}$$ ■

ここで、$\|\boldsymbol{M}\|$ は測定の分解能を特徴付ける量であり、$\sum_i M_i=1$ より、$1\leq\|\boldsymbol{M}\|\leq D$ を満たす。したがって、用いる測定器の分解能 $\|\boldsymbol{M}\|$ があまり高くなければ、2 つの量子状態 $\rho(t)$ と $\overline{\rho}$ は識別できないということがわかる。以降では、もう少し具体的な測定過程とその時の $\|\boldsymbol{M}\|$ について見てみよう。

3.3 マクロな物理量の測定

前章では任意の測定を許せば、ρ と $\overline{\rho}$ は識別出来る (かもしれない) ことを示した。しかし、マクロな系に対して任意の測定が出来るという設定は非現実的である。本章では "マクロ" な物理量を測定する場合においては、ρ と $\overline{\rho}$ が識別出来ないことを示す。

典型的には粒子数等システムサイズを表すパラメタを N としたとき、一般にヒルベルト空間の次元は $D=e^{O(N)}$ である。このような巨大なヒルベルト空間において、マクロな物理量を以下のように定義する。

定義 6. 物理量 $A=A^\dagger$ のスペクトル分解を

$$A=\sum_{i=1}^m a_iP_i\qquad(a_i\neq a_j\ \text{for}\ i\neq j) \tag{24}$$

と表したとき、互いに異なる固有値の個数 m が $m=\mathrm{Poly}(N)$ を満たすとき、A はマクロスコピックであるという。

マクロな物理量の定義は様々な流儀があるが、ほとんどの流儀は少なくともこの定義を満たしており、したがって、この定義は最も緩い定義の一つであると言える。

このスペクトル分解に対応した射影測定 $\boldsymbol{P}=\{P_i\}_{i=1}^m$ を行った場合を考える。

系 7. マクロな物理量 A のスペクトル分解 (24) に対応した射影測定 $\boldsymbol{P}=\{P\}_{i=1}^m$ に対して、

$$\overline{D(p_t\|\overline{p})}<\frac{m}{\sqrt{D_{\mathrm{eff}}}}. \tag{25}$$

Proof. 定理 5 および $\|\boldsymbol{P}\|=m$ より直ちに示される。 ■

特に、$D_{\mathrm{eff}}=e^{O(N)}$ であるような量子状態に対しては、熱力学極限で

$$\overline{D(p_t\|\overline{p})}\xrightarrow{N\to\infty}0. \tag{26}$$

したがって、マクロな物理量を測定している限り、期待値だけでなくその分布の情報を使ったとしても、2 つの状態を識別することは不可能である。

3.4 部分系の測定

系 $\mathcal{H}_{\mathrm{tot}}$ が着目系 $\mathcal{H}_{\mathrm{S}}$ と環境系 $\mathcal{H}_{\mathrm{E}}$ の合成で表されるとする。すなわち、$\mathcal{H}_{\mathrm{tot}} = \mathcal{H}_{\mathrm{S}} \otimes \mathcal{H}_{\mathrm{E}}$. このとき、以下の定理が成り立つ。

系 **8.** 着目系 $\mathcal{H}_S$ 上の任意の POVM 測定に対して、

$$\overline{D(p_t\|\overline{p})} < \frac{D_S}{\sqrt{D_{\mathrm{eff}}}} \tag{27}$$

Proof. 着目系に対する任意の測定は $\|\boldsymbol{M}\| \leq D_{\mathrm{S}}$ であることから、定理 5 より直ちに示される。 ■

特に、例えば、着目系と合成系の体積が $V_{\mathrm{S}} \ll V_{\mathrm{tot}}$ であり、$D_{\mathrm{eff}} = e^{O(V_{\mathrm{tot}})}$ であれば、$D_{\mathrm{S}} = e^{O(V_{\mathrm{S}})}$ より、

$$\overline{D(p_t\|\overline{p})} \xrightarrow{V\to\infty} 0. \tag{28}$$

したがって、着目系をどんなに精密に測定したとしても熱力学極限では 2 つの状態を識別することは不可能である。

4 まとめ

本論文では、孤立した多体量子系の平衡化現象に対して、任意の時刻の量子状態とその平衡状態である長時間平均状態との間の状態識別の問題を、量子仮説検定の枠組みを用いて再考した。状態識別の精度を特徴付ける、それらの状態を測定した際の確率分布間の相対エントロピーと、測定の分解能の間の関係を明らかにした。その結果、マクロな物理量の射影測定や部分系の測定を行うといった、現実的なセットアップにおいては、ほとんどの時刻における状態と平衡状態は識別不可能であることが示された。また、現実的には実現は困難ではあるが、任意の測定を行える場合においては、時間依存した状態と平衡状態が区別できる状態の組と測定が存在することを示した。

参考文献

[1] P. Reimann, Phys. Rev. Lett. **101**, 190403 (2008).