量子情報入門から Single-Shot の量子熱力学まで

森

2025年2月27日

目次

第1章	量子情報の枠組みミニマム・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	2
1.1	状態・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	2
1.2	合成系 ••••••	3
1.3	量子操作・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	4
1.4	測定・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	5
1.5	量子状態間の尺度 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	6
1.6	色々なエントロピー・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	7
第2章	Single-Shot の量子熱力学・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	8
2.1	状況設定 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	8
2.2	Exact Case · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	10
2.3	Approximate Case · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	10
2.4	The state of the s	10
付録 A	CPTP 写像の 3 つの表現の同値性の証明 ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	11

第1章 量子情報の枠組みミニマム

まず量子情報分野の基本的なルールについて、以降の章で使うものについて簡単な説明をする. 基本的に有限次元の量子力学が舞台になっている。主に [1], [2] を参考にした。怪しげなことを書いていたら教えて欲しいです。 あと「演算子」、「オペレータ」は適宜「行列」にでも読み替えてもらって大丈夫です。

1.1 状態

まず量子状態を線型代数の言葉を使って表すことから始める. 量子システムは Hilbert 空間 $\mathcal H$ で記述される $^{1)}$. $\mathcal H$ に作用する演算子の集合を $\mathcal L(\mathcal H)$ と書く. d を $\mathcal H$ の次元とする.

一般の量子状態は以下で定める密度演算子によって表される.

定義 1.1.1 (量子状態). 系の量子状態は $\mathcal H$ に作用する $\mathrm{tr}[\rho]=1$ かつ半正定値な演算子 $\rho\in\mathcal L(\mathcal H)$ によって表され, ρ を密度演算子と呼ぶ.

ここで半正定値とは任意のベクトル $|\psi\rangle\in\mathcal{H}$ について $\langle\psi|\,\rho\,|\psi\rangle\geq0$ が成立することを意味し、これを $\rho\geq0$ と表す.

 \mathcal{H} 上の量子状態の集合を $\mathcal{S}(\rho)$ と表すことにする. これは凸集合になっている.

命題 1.1.2. $S(\mathcal{H})$ は凸集合.

証明 $p \in [0,1], \rho, \sigma \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ とする. トレースの線形性から $\operatorname{tr}[p\rho + (1-p)\sigma] = p \operatorname{tr}[\rho] + (1-p)\operatorname{tr}[\sigma] = 1$. また, 内積の線型性から $\langle \psi | (p\rho + (1-p)\sigma) | \psi \rangle = p \langle \psi | \rho | \psi \rangle + (1-p) \langle \psi | \sigma | \psi \rangle \geq 0$.

結局, 状態を表す密度演算子の確率混合もちゃんと状態になるようになっている. 次に以下のように純粋状態と混合状態という概念を導入する.

定義 1.1.3 (純粋状態, 混合状態). $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ の端点を純粋状態, そうでない元を混合状態と呼ぶ. ここで $\rho\in\mathcal{S}(\mathcal{H})$ が端点であるとは, これが $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ の他の元の非自明な凸結合で表せないことをいう.

この定義の意味に触れる前に、密度演算子がスペクトル分解できることに触れる.

¹⁾ 内積の入った複素数上の線型空間と思ってもらって大丈夫だと思う...

命題 1.1.4 (スペクトル分解). 密度演算子 $\rho\in\mathcal{S}(\mathcal{H})$ は \mathcal{H} を張る正規直交系 $\{|\phi\rangle_i\}$ で以下のように対角化できる.

$$\rho = \sum_{i=1}^{d} p_i \left| \phi_i \right\rangle \left\langle \phi_i \right|$$

ここで $p_i \ge 0$ で, $|\phi_i\rangle\langle\phi_i|$ は射影演算子である.

証明 [1] の 2 章を参照.

この命題から、純粋状態はあるベクトル $|\phi\rangle$ で貼られる 1 次元部分空間への射影演算子だとわかる。また、1 次元部分空間への射影演算子は $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ の非自明な凸結合で書けないので、結局純粋状態は適当な $|\psi\rangle\in\mathcal{H}$ で指定できる。トレースが 1 である条件も加味して純粋状態を $\langle\psi|\psi\rangle=1$ と規格化されたベクトル $|\psi\rangle\in\mathcal{H}$ で表すことも多い²⁾.

また、混合状態はある純粋状態の集まりを古典確率混合したものだと捉えることができる. 測定の話をした後に簡単な例を紹介する.

1.2 合成系

次に量子系の合成系の記述方法を与える.

定義 1.2.1 (合成系). 量子系 \mathcal{H}_a , \mathcal{H}_b の合成系は Hilbert 空間のテンソル積 $\mathcal{H}_a\otimes\mathcal{H}_b$ で与えられる.

定義 1.1.1 より、この合成系の状態は $\mathcal{S}(\mathcal{H}_a\otimes\mathcal{H}_b)$ の元で与えられる. ついでに**積状態**、**セパラブル状態**、エンタングル状態を定義する.

定義 1.2.2. $\mathcal{S}(\mathcal{H}_a\otimes\mathcal{H}_b)$ の元 ρ_{AB} のうち, $\rho_a\in\mathcal{S}(\mathcal{H}_a)$, $\rho_b\in\mathcal{S}(\mathcal{H}_b)$ があって $\rho_{AB}=\rho_a\otimes\rho_b$ と記述できるものを積状態という.また,確率分布 $\{r_i\}$ と $\rho_a^{(i)}\in\mathcal{S}(\mathcal{H}_a)$, $\rho_b^{(i)}\in\mathcal{S}(\mathcal{H}_b)$ があって $\rho_{AB}=\sum_i r_i \rho_a^{(i)}\otimes\rho_b^{(i)}$ と記述できるものをセパラブル状態という. ρ_{AB} がセパラブル状態でないとき,これをエンタングル状態という.

部分トレースもここで定義しておく.

定義 1.2.3 (部分トレース). 部分系 B を潰す部分トレースは $\operatorname{tr}_B: \mathcal{L}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B) \to \mathcal{L}(\mathcal{H}_A)$ の線型写像で $|a_1\rangle$, $|a_2\rangle \in \mathcal{H}_A$, $|b_1\rangle$, $|b_2\rangle \in \mathcal{H}_B$ について

$$\operatorname{tr}_{B}(|a_{1}\rangle\langle a_{2}|\otimes|b_{1}\rangle\langle b_{2}|) := |a_{1}\rangle\langle a_{2}|\operatorname{tr}(|b_{1}\rangle\langle b_{2}|)$$

²⁾ というか量子力学というとほぼこのベクトルで表される状態を扱っている.

と定義される.

これは物理的には合成系 AB の状態 ρ_{AB} から部分系 A についての情報のみを取り出す操作に対応している.

1.3 量子操作

物理的に実現可能な量子操作は次の写像で表現されると考える.

定義 1.3.1 (CP 写像). $\mathcal{E}: \mathcal{L}(\mathcal{H}) \to \mathcal{L}(\mathcal{H}')$ は線型写像とする. \mathcal{E} が以下の 3 つを満たすとき、これを CP 写像と呼ぶ(Complete-Positive).

- 1. X, Yを演算子とする. このとき, $X \ge 0$ ならば $\mathcal{E}(X) \ge 0$. この条件を満たせば, その写像は Positive であるという.
- 2. n 次元 Hilbert 空間を \mathcal{H}_n として, \mathcal{I}_n を $\mathcal{L}(\mathcal{H}_n)$ 上の恒等演算子とする. このとき, $\mathcal{E}\otimes\mathcal{I}_n$ が Positive となる. これを n-positive と呼ぶ.
- 3. 任意の $n \in \mathbb{N}$ について, \mathcal{E} は n-positive.

参考のために、Positive だが CP ではない写像の例を挙げる.

例 1 (Positive but not CP). 簡単のために qubit 空間 \mathcal{H}_2 上で考える. いつも通り $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ を正規 直交基底とする. $\mathcal{E}_T: \mathcal{L}(\mathcal{H}_2) \to \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$ を $\mathcal{E}_T: |i\rangle\langle j| \mapsto |j\rangle\langle i|$ な線型写像とする. これは Positive である³⁾. 次に, $I \otimes \mathcal{E}_T$ を例えば $|\psi\rangle = |00\rangle + |11\rangle$ (規格化は無視)に作用させることを考える.

$$\rho_{\psi} = \left|0\right\rangle \left\langle 0\right| \otimes \left|0\right\rangle \left\langle 0\right| + \left|0\right\rangle \left\langle 1\right| \otimes \left|0\right\rangle \left\langle 1\right| + \left|1\right\rangle \left\langle 0\right| \otimes \left|1\right\rangle \left\langle 0\right| + \left|1\right\rangle \left\langle 1\right| \otimes \left|1\right\rangle \left\langle 1\right|$$

とかけることに注意すれば、

$$I \otimes \mathcal{E}_{T}(\rho_{\psi}) = \left|0\right\rangle \left\langle 0\right| \otimes \left|0\right\rangle \left\langle 0\right| + \left|0\right\rangle \left\langle 1\right| \otimes \left|1\right\rangle \left\langle 0\right| + \left|1\right\rangle \left\langle 0\right| \otimes \left|0\right\rangle \left\langle 1\right| + \left|1\right\rangle \left\langle 1\right| \otimes \left|1\right\rangle \left\langle 1\right| \stackrel{.}{=} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 0 & 1 & \\ & 1 & 0 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

となる. この行列の固有値は 1,1,1,-1 なので, 確かにこれは CP ではない.

次に TP (Trace Preserving) を定義する.

定義 1.3.2 (TP 写像). 線型写像 \mathcal{E} が任意の演算子 X について

$$\operatorname{tr}(\mathcal{E}(X)) = \operatorname{tr}(X)$$

3)
$$\left(\alpha^* \quad \beta^*\right) \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \geq 0$$
 であるとき両辺転置を取れば $\left(\alpha \quad \beta\right) \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha^* \\ \beta^* \end{pmatrix} \geq 0$

П

を満たすとき、これを TP という.また、任意の $X \geq 0$ について $\mathrm{tr}(\mathcal{E}(X)) \leq \mathrm{tr}(X)$ のとき、 \mathcal{E} は trace-nonincreasing という.

CP かつ TP な写像のことを CPTP 写像と呼ぶ. CPTP 写像には、理解が深まる同値な表現がある.

定理 1.3.3 (CPTP 写像の同値な表現). 線型写像 $\mathcal E$ について, 以下は同値:

- (a). E は CPTP 写像.
- (b). \mathcal{E} は $\sum_k M_k^\dagger M_k = I$ を満たす Kraus 演算子で $\mathcal{E}(\rho) = \sum_k M_k \rho M_k^\dagger$ とかける.
- (c). 環境系を表す量子状態 $\sigma \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_e)$ が存在して、ある Unitary 演算子 $U:\mathcal{H}\otimes\mathcal{H}_e\to\mathcal{H}'\otimes\mathcal{H}'_e$ を使って $\mathcal{E}(\rho)=\mathrm{tr}_{e'}(U\rho\otimes\sigma U^\dagger)$ とかける.これを Stinespring 表現という.

証明 Appendix にかけたら書く.

(b) は使い勝手の良い性質で、写像が Kraus 演算子を使ってかけていたらそれは量子操作を記述する CPTP 写像になっているとわかる. (c) は物理的な意味をより明確にしてくれていて、結局視野を環境系にまで広げれば知っているようにユニタリ時間発展をしていて、CPTP 写像は環境系をトレースアウトした着目系の間の時間発展の記述をしているとわかる.

1.4 測定

次に測定という操作を定義する.

定義 1.4.1 (測定). 量子測定は $\mathcal H$ 上のオペレータの集合 $\{M_m\}$ のうち, $\sum_m M_m^\dagger M_m = I$ を満たすものにより記述される. ここで m は測定結果を指定するラベルとする. 量子状態 $\rho \in \mathcal S(\mathcal H)$ について $\{M_m\}$ で記述される測定を行うとき, 結果 m が得られる確率 p(m) は

$$p(m)=\mathrm{tr}[M_m^\dagger M_m \rho]$$

で与えられ、測定後の状態 ρ_m は

$$\rho_m = \frac{M_m \rho M_m^{\dagger}}{\operatorname{tr}[M_m^{\dagger} M_m \rho]}$$

となる.

測定と混合状態の例を紹介する.

例 2 (Stern-Gerlach 実験). 2 次元の状態空間 \mathcal{H}_2 で記述される量子系を考える 4). $\{|0\rangle, |1\rangle\}$

⁴⁾ これを qubit の系といったりする

は \mathcal{H}_2 を張る正規直交基底とする. 始状態として $|0\rangle$ を用意する. また, $|\uparrow\rangle:=(|0\rangle+|1\rangle)/\sqrt{2}$, $|\downarrow\rangle:=(|0\rangle-|1\rangle)/\sqrt{2}$ として, $\{|\uparrow\rangle\langle\uparrow|,|\downarrow\rangle\langle\downarrow|\}$ で記述される測定をこの系に行う. 計算すると(計算しなくともこの実験を知っている人ならわかることだが), 1/2 の確率でそれぞれ \uparrow , \downarrow が測定され、測定後の状態はそれぞれ $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ になっている. そのアンサンブル平均状態 ρ は

$$\begin{split} \rho &= 1/2 \left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| + 1/2 \left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \\ &= \operatorname{tr}[(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right|) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right|) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| \right) \right| \\ &= \operatorname{tr}[(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right|) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \right] \frac{\left(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right|) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| \right) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left(\left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \right) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left(\left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \right) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \\ &= \left(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| \right) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| \right) + \left(\left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \right) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left(\left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \right) \\ &= \left(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| \right) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| \right) + \left(\left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \right) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left(\left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \right) \\ &= \left(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| \right) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| \right) + \left(\left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \right) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left(\left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \right) \\ &= \left(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| \right) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| \right) + \left(\left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \right) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left(\left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \right) \\ &= \left(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| \right) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| \right) + \left(\left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \right) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left(\left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \right) \\ &= \left(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| \right) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| \right) + \left(\left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \right) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left(\left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \right) \\ &= \left(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| \right) \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left| \left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| \right| + \left(\left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \right| \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left(\left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \right| \right) \\ &= \left(\left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| \right| \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left| \left| \uparrow \right\rangle \left\langle \uparrow \right| \right| + \left(\left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \right| \left| 0 \right\rangle \left\langle 0 \right| \left| \left| \downarrow \right\rangle \left\langle \downarrow \right| \right| \right|$$

と記述でき、これは Kraus 表示になっているため、測定のアンサンブル状態 5)は測定演算子を Kraus 演算子とする CPTP 写像で与えられるとわかる. ちなみに Stern-Gerlach 実験はこの後特に \uparrow が測定された状態のみを抽出し、 $\{|0\rangle\langle 0|, |1\rangle\langle 1|\}$ で記述される測定を行う. 同様に考えれば、1/2 の確率でそれぞれ 0.1 が測定されると分かる 6 .

1.5 量子状態間の尺度

以上は量子論の公理チックな話だった.次に、半ば人為的に「量子状態が似ているかどうか」を 定量化するための尺度として距離空間の公理を満たす関数を導入する.

まず、トレース・ノルム⁷⁾ を定義する.

定義 1.5.1 (トレース・ノルム).
$$X \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$$
 とする. $||X||_1 := \operatorname{tr}(|X|) = \operatorname{tr}\sqrt{X^{\dagger}X}$.

これがノルムになっているかの証明は省略するが、 例えば [1] の 9 章に証明がある.このノルムを使ってトレース距離を定義する.

定義 1.5.2 (トレース距離). $\rho, \sigma \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ とする. このときトレース距離を以下のように定義する.

$$D(\rho,\sigma)\coloneqq \frac{1}{2}||\rho-\sigma||_1.$$

天下り的に定義を与えたが、このトレース距離は距離になるだけでなく、色々な良い性質8)を

⁵⁾ とか、測定はされたが結果を知らない状態とか

⁶⁾ 量子論黎明期にこのような実験が実際に行われ結果が論理的に考察されたおかげで今展開しているような量子論の枠組みがある.

⁷⁾ $X^\dagger X$ は半正定値な演算子なので、固有値が 0 以上なスペクトル分解ができ、その固有値の平方根のうち正のものをとって対角に並べたものを $\sqrt{X^\dagger X}$ としている.

⁸⁾ 例えば、これは実は結構自然な距離であることが qubit の Bloch 表現からわかる. $\rho_1=\frac{I+\vec{r}_1\cdot\vec{\sigma}}{2}$, $\rho_2=\frac{I+\vec{r}_2\cdot\vec{\sigma}}{2}$ と qubit 状態を Bloch 表示する. ここで $\vec{\sigma}=(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3)$ は 3 つの Pauli 行列である. これをトレース距離の定義に代入すると、 $D(\rho_1,\rho_2)=\frac{1}{4}||(\vec{r}_1-\vec{r}_2)\cdot\vec{\sigma}||_1=\frac{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}{4}||\vec{n}\cdot\vec{\sigma}||_1=\frac{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}{2}$ となる. ここで、 \vec{n} は単位ベクトルで、 $\vec{n}\cdot\vec{\sigma}$ は \vec{n} 方向のスピン演算子であること、およびその固有値は 1, -1 であることを使った. 要は、1-qubit で考えるとトレース距離は Bloch ベクトルの 3 次元 Euclid 距離(の半分)となっている.

持っている.しかし、今回は省略する.

1.6 色々なエントロピー

この節では後の章で登場する色々なエントロピーを定義する。情報理論では情報源の持つ平均情報量を定量化する Shannon エントロピーが本質的に重要で、そこから相対エントロピー(KL ダイバージェンス)等の概念が生まれたが、以下のエントロピーはそれらを量子論に拡張したものになっている。以下では $\rho,\sigma\in\mathcal{S}(\mathcal{H})$ とする。

定義 1.6.1 (von Neumann エントロピー). von Neumann エントロピー $S_1(\rho)$ は次のように定義される.

$$S_1(\rho)\coloneqq -\operatorname{tr}(\rho\ln\rho)$$

定義 1.6.2 (量子 KL ダイバージェンス). 量子 KL ダイバージェンス $S_1(\rho||\sigma)$ は次のように定義される.

$$S_1(\rho||\sigma) \coloneqq \operatorname{tr}(\rho \ln \rho - \rho \ln \sigma)$$

ここで ρ の台は σ のそれに包含されていると考える. すなわち, $\operatorname{Ker} \sigma \subset \operatorname{Ker} \rho$ とする.

定義 1.6.3 (Rényi- α ダイバージェンス). $\alpha = 0, \infty$ について、Rényi- α ダイバージェンス $S_{\alpha}(\rho||\sigma)$ を以下のように定義する.

$$S_0(\rho||\sigma) \coloneqq -\ln\left(\mathrm{tr}[P_\rho\sigma]\right), \quad S_\infty(\rho||\sigma) \coloneqq \ln\left(\min\{\lambda: \rho \le \lambda\sigma\}\right)$$

ここで P_{ρ} は ρ の台への射影演算子である.

定義 1.6.4 (平滑化 Rényi $0/\infty$ -ダイバージェンス). $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ の ε 近傍を

$$B^{\varepsilon}(\rho) := \{ \tau : D(\tau, \rho) \le \varepsilon, \operatorname{tr}[\tau] = 1, \tau \ge 0 \}$$

とする. これを使って、平滑化 Rényi 0/∞-ダイバージェンスは以下のように定義される.

$$S^{\varepsilon}_{\infty}(\rho||\sigma) \coloneqq \min_{\tau \in B^{\varepsilon}(\rho)} S_{\infty}(\tau||\sigma),$$

$$S_0^\varepsilon(\rho||\sigma) \coloneqq \max_{\tau \in B^\varepsilon(\rho)} S_0(\tau||\sigma).$$

第2章 Single-Shot の量子熱力学

この章では 1章で導入した概念を使って、量子熱力学の文脈での Single-Shot の変換理論の話をする。 Single-Shot の変換理論とは、「ある状態を持っていて、それを別の状態に、特定のクラスの操作で変換できるかどうか」を考える理論のことを指す(と思う) 1)。 この問題を考えることで、状態遷移に必要な仕事の下界や、遷移に伴って得られるエネルギーの上界を得ることができる。

2.1 状況設定

まず、逆温度 β の熱浴に接した量子系の Gibbs 状態を考える.

定義 2.1.1 (Gibbs 状態). 系の Hamiltonian を \hat{H} とするとき, Gibbs 状態 $\hat{\rho}^G \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ を

$$\hat{\rho}^G \coloneqq e^{-\beta \hat{H}}/Z, \quad Z \coloneqq \operatorname{tr}[e^{-\beta \hat{H}}]$$

と定義する.

以下ではこの Gibbs 状態を考えている量子系の熱平衡状態だと思うことにする $^{2)}$. つまり、系を熱浴に接したまま十分時間放置したら、状態は $\hat{\rho}^{G}$ になるものだと思う.

この Gibbs 状態を不変に保つようなクラスの操作として、Gibbs 保存写像を定義する.

定義 2.1.2 (Gibbs 保存写像). Hamiltonian が \hat{H} で与えられるような、逆温度 β の熱浴に接した系に働く CPTP 写像 \mathcal{E} について、 $\mathcal{E}(\hat{\rho}^G) = \hat{\rho}^G$ であるとき、 \mathcal{E} を Gibbs 保存写像と呼ぶ.

次に,仕事浴(以下 W 系とする)を用意する. Single-Shot の枠組みでは簡単のために W 系は 2 準位系が担うものとする. W 系の 2 つのエネルギー固有状態を $\{|E_i\rangle,|E_f\rangle\}$ とし,そのエネルギー差を w と書く.始状態が励起状態,終状態が基底状態であれば w>0,逆であれば w<0 とする. W 系の Gibbs 状態を以下では $\hat{\rho}_{\rm W}^G$ と書く. W 系の状態遷移に伴い放出される w が系に受け渡される ものと考える.

最後に clock 系(以下, C 系と略す)を用意する.これは自律的にシステム系(以下, S 系と略す)の Hamiltonian を $\hat{H}_{\rm S}$ から $\hat{H}_{\rm S}$, に変えるためのシステムにくっつける補助系で,簡単のために 2 次

¹⁾ 田崎熱力学で強調されていることだが、(古典)熱力学においてエントロピーは状態間の断熱変化可能性を完全に特徴づけていた。 すなわち、断熱操作の元で系のエントロピーは増加するし、エントロピーが増加するような状態であればうまい断熱操作が存在してその状態を作ることができる.

²⁾ 今考えているのはマクロな熱浴に接したミクロな熱力学系で、そのような系について熱平衡状態が $\hat{\rho}^G$ になることは 実験的にも確かめられている(らしい)[3]. 学部でやる平衡統計力学とは扱う対象のスケールが異なっている.

元 $\{|0\rangle,|1\rangle\}$ とする(これは正規直交するとする). C 系は基本的に $|0\rangle$ の状態から $|1\rangle$ の状態に移るものとする. また, この 2 つの状態の間にエネルギー差はないとする. そして, S 系と C 系を合わせた SC 系の Hamiltonian が以下で与えられるとする.

$$\hat{H}_{SC} = \hat{H}_{S} \otimes |0\rangle \langle 0| + \hat{H}_{S}, \otimes |1\rangle \langle 1|$$

これにより、始めは C 系の状態が $|0\rangle$ なので状態に効く Hamiltonian は $\hat{H}_{\rm S}\otimes |0\rangle\langle 0|$ で、終わりは C 系の状態が $|1\rangle$ なので状態に効く Hamiltonian は $\hat{H}_{\rm S'}\otimes |1\rangle\langle 1|$ で、S 系の Hamiltonian がうまく切り替わっている。さらに $|0\rangle$ と $|1\rangle$ の直交性から $[\hat{H}_{\rm S}\otimes |0\rangle\langle 0|,\hat{H}_{\rm S'}\otimes |1\rangle\langle 1|]=0$ なので SC 系の Gibbs 状態は

$$\begin{split} \hat{\rho}_{\mathrm{SC}}^{G} &= \exp(-\beta \hat{H}_{\mathrm{S}} \otimes |0\rangle \left\langle 0|\right) \exp(-\beta \hat{H}_{\mathrm{S}}, \otimes |1\rangle \left\langle 1|\right) \\ &= \exp(-\beta \hat{H}_{\mathrm{S}}) \otimes |0\rangle \left\langle 0| + \exp(-\beta \hat{H}_{\mathrm{S}'}) \otimes |1\rangle \left\langle 1|\right. \end{split}$$

となる.

以上の状況設定の概念図を書くとすれば、以下の図 2.1 のようになる.

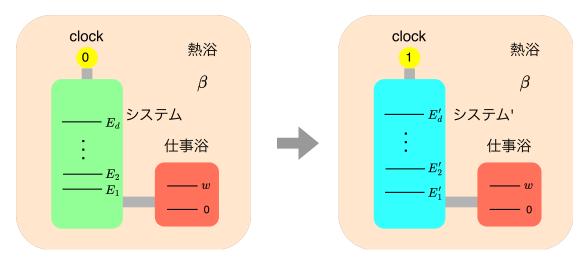


図 2.1: Single-Shot の熱力学の概念図. [4] をかなり参考にした. この図だと C 系がうまく作動して Hamiltonian もちゃんと切り替わったようになっているが, 以下に述べる Approximate Case ではうまく切り替わらない場合もあることに注意.

このとき、SC 系とと W 系とを合わせた系全体の Gibbs 状態は $\hat{\rho}_{SCW}^G := \hat{\rho}_{SC}^G \otimes \hat{\rho}_W^G$ となる.

この章の残りの節では、以上のような状況設定の中で、始状態 $\hat{\rho}_i \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_{SC} \otimes \mathcal{H}_W)$ を指定した終状態 $\hat{\rho}_f$ に写像する Gibbs 保存写像が存在するかどうか、について色々と条件を変えて議論する.物理状態を密度演算子、量子系の操作を CPTP 写像と考えることで、Single-Shot の物理を「ある密度演算子を欲しい密度演算子に map するような、特定の条件を満たす CPTP 写像が存在するか」で議論できるようになった.

2.2 Exact Case

まず、素直に 2.1 節で議論した通りのことを考える. つまり、用意した状態を、厳密に欲しい状態と一致するような状態に変換できるかどうかを議論する.

定義 2.2.1 (Single-Shot work-assisted state transformation). $\hat{\rho}_S, \hat{\rho}_S' \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_S)$ について, $\hat{\rho}_{SW}^G$ についての Gibbs 保存写像 \mathcal{E}_{SW} が存在して,

$$\mathcal{E}_{\mathrm{SW}}(\hat{\rho}_{\mathrm{S}} \otimes \left| E_{i} \right\rangle \left\langle E_{i} \right|) = \hat{\rho}_{\mathrm{S}}' \otimes \left| E_{f} \right\rangle \left\langle E_{f} \right|$$

を満たすとき, $\hat{\rho}_{\rm S}$ は $\hat{\rho}_{\rm S}'$ に w-assisted transformable という.

2.3 Approximate Case

2.4 Asymptotic Case

付録 A CPTP 写像の3つの表現の同値性の証明

参考文献

- [1] Michael A Nielsen and Isaac L Chuang. Quantum computation and quantum information. Cambridge university press, 2010.
- [2] Takahiro Sagawa. Entropy, Divergence, and Majorization in Classical and Quantum Thermodynamics. Springer Singapore, 2022.
- [3] 沙川貴大「非平衡統計力学 -ゆらぎの熱力学から情報熱力学まで-」共立出版, 2022.
- [4] 渡邉開人「Physics Lab. 2023 熱力学とリソース」https://event.phys.s.u-tokyo.ac.jp/physlab2023/pdf/sta-article01.pdf