

量子情報入門から Single-Shot の量子熱力学まで

森

2025 年 3 月 1 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	7
1.6	色々なエントロピー	8
第 2 章	量子仮説検定	10
2.1	状況設定	10
第 3 章	Single-Shot の量子熱力学	12
3.1	状況設定	12
3.2	Exact Case	14
3.3	Approximate Case	15
3.4	Asymptotic Case	17
付録 A	CPTP 写像の 3 つの表現の同値性の証明	18

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 $\text{tr}[\rho] = 1$ 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 $\langle\psi|\rho|\psi\rangle \geq 0$ が成立することを意味し, これを $\rho \geq 0$ と表す。

\mathcal{H} 上の量子状態の集合を $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ 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. $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ 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 $\text{tr}[p\rho + (1-p)\sigma] = p\text{tr}[\rho] + (1-p)\text{tr}[\sigma] =$

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 $\{|\phi_i\rangle\}$ で以下のように対角化できる.

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

ここで $p_i \geq 0$ 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いえることができる. 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 $\text{tr}_B : \mathcal{L}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_A)$ 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

$$\text{tr}_B(|a_1\rangle \langle a_2| \otimes |b_1\rangle \langle b_2|) := |a_1\rangle \langle a_2| \text{tr}(|b_1\rangle \langle b_2|)$$

2) というか量子力学というとは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と考える.

定義 1.3.1 (CP 写像). $\mathcal{E} : \mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}')$ 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, $X \geq 0$ ならば $\mathcal{E}(X) \geq 0$. 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. $\mathcal{E}_T : \mathcal{L}(\mathcal{H}_2) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$ 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.

$$\rho_\psi = |0\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 0| \otimes |1\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| \otimes |1\rangle\langle 1|$$

とかけること注意到すれば,

$$\begin{aligned} I \otimes \mathcal{E}_T(\rho_\psi) &= |0\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 0| \otimes |1\rangle\langle 1| + |0\rangle\langle 1| \otimes |0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 1| \\ &= \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 0 & 1 & \\ & 1 & 0 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

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.

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

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

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

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). \mathcal{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 $U : \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_e \rightarrow \mathcal{H}' \otimes \mathcal{H}'_e$ 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.

例 2. 例えば, 部分トレースは CPTP 写像になっている. 部分トレースの定義 1.2.3 の文字を流用する. \mathcal{H}_B の正規直交基底を $\{|b_i\rangle\}$ と書くことにして, I を \mathcal{H}_A 上の恒等演算子とする. $M_i := I \otimes \langle b_i|$ とすると, $M_i^\dagger = I \otimes |b_i\rangle$ なのでこれは Kraus 演算子になっていて, 対応する CPTP 写像は部分トレースそのものである. 部分トレースが CPTP 写像になっていることは後で使う.

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

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

となる。

測定と混合状態の例を紹介する。

例 3 (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⁾. $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 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

$$\begin{aligned} \rho &= 1/2 |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + 1/2 |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \\ &= \text{tr}[(|\uparrow\rangle\langle\uparrow|) |0\rangle\langle 0|] \frac{(|\uparrow\rangle\langle\uparrow|) |0\rangle\langle 0| (|\uparrow\rangle\langle\uparrow|)}{\text{tr}[(|\uparrow\rangle\langle\uparrow|) |0\rangle\langle 0|]} + \text{tr}[(|\downarrow\rangle\langle\downarrow|) |0\rangle\langle 0|] \frac{(|\downarrow\rangle\langle\downarrow|) |0\rangle\langle 0| (|\downarrow\rangle\langle\downarrow|)}{\text{tr}[(|\downarrow\rangle\langle\downarrow|) |0\rangle\langle 0|]} \\ &= (|\uparrow\rangle\langle\uparrow|) |0\rangle\langle 0| (|\uparrow\rangle\langle\uparrow|) + (|\downarrow\rangle\langle\downarrow|) |0\rangle\langle 0| (|\downarrow\rangle\langle\downarrow|) \end{aligned}$$

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⁾.

定義 1.4.1 を見ると, 測定後の状態に興味がなく, 結果 m がでる確率 $p(m)$ だけわかればよい場合, $E_m := M_m^\dagger M_m$ を使えば十分だとわかる. そこで, POVM⁷⁾を以下のように定義する [1].

定義 1.4.2 (POVM). $E_m \geq 0$ かつ $\sum_m E_m = I$ を満たす演算子の集合 $\{E_m\}$ を POVM と呼び, 量子状態 ρ について結果 m が得られる確率は $p(m) = \text{tr}[E_m \rho]$ で与えられる.

例 4. $0 \leq Q \leq I$ なる演算子 Q を用意したとき, $I - Q \geq 0$ でもあり, $Q + (I - Q) = I$ なので $\{Q, I - Q\}$ は POVM になっている.

4) これを qubit の系といたりする

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) といいつつ, この導入の仕方は多分最新の考え方ではないと思う. 測定の話をするなら間接測定などを勉強する必要があるがモチベがまだなくて良く知らない. でもここで定義した演算子は POVM ではあると思うので後で使うのもあって導入した.

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⁸⁾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. $\|X\|_1 := \text{tr}(|X|) = \text{tr} \sqrt{X^\dagger X}$.

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。

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

天下りの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⁹⁾を持っている。しかし、今回は結構省略する。その中でも後で使う**データ処理不等式**だけ紹介する。

定理 1.5.3 (データ処理不等式). $\rho, \sigma \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$, \mathcal{E} を CPTP 写像とする. このとき,

$$D(\rho, \sigma) \geq D(\mathcal{E}(\rho), \mathcal{E}(\sigma)).$$

証明 [1] を参照. □

この意味するところは、量子過程を経ると量子状態は「似てくる」より他ないということである。これは直感的に納得できると思う。ちなみにこのように CPTP 写像をかませることで単調に増えたり減ったりする性質を *monotonicity* ということもある。つまり、トレース距離は *monotonicity* を満たす。

8) $X^\dagger X$ 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。

9) 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。

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。なお、 ρ の台は常に σ の台に含まれているものとする。

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。

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

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。

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

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。

$$S_0(\rho||\sigma) := -\ln(\operatorname{tr}[P_\rho \sigma]), \quad S_\infty(\rho||\sigma) := \ln(\min\{\lambda : \rho \leq \lambda \sigma\})$$

ここで P_ρ は ρ の台への射影演算子である。

この $\alpha = 0, \infty$ の Rényi- α ダイバージェンスについて、以下の定理が知られている。

定理 1.6.4.

$$0 \leq S_0(\rho||\sigma) \leq S_1(\rho||\sigma) \leq S_\infty(\rho||\sigma)$$

ここで、 $S_0(\rho||\sigma) = 0$ が成立 $\iff \rho$ と σ の台が等しいときである。また、 $S_1(\rho||\sigma) = S_\infty(\rho||\sigma) = 0$ が成立 $\iff \rho = \sigma$ のとき。

証明 前半の不等式は [2] を参照。後半の等号成立条件を検討する。この説の仮定 $\operatorname{Ker} \sigma \leq \operatorname{Ker} \rho$ より、 $S_0(\rho||\sigma) = 0 \iff \operatorname{tr}[P_\rho \sigma] = 1 \iff \operatorname{Ker} \sigma = \operatorname{Ker} \rho$ 、よって一つ目の条件は示された。二つ目について、 $\rho = \sigma$ のとき、定義 1.6.3 より $S_\infty(\rho||\sigma) = 0$ であり、かつ ρ と σ の台が等しい、つまり $S_0(\rho||\sigma) = 0$ なので、不等式より $S_1(\rho||\sigma) = 0$ 。また、 $S_\infty(\rho||\sigma) = 0$ のとき、つまり $\rho \leq \sigma$ な訳だが、どちらもトレース 1 なので、 $\rho = \sigma$ となるしかない。□

定義 1.6.5 (平滑化 Rényi 0/∞-ダイバージェンス). $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ の ε 近傍を

$$B^\varepsilon(\rho) := \{\tau : D(\tau, \rho) \leq \varepsilon, \text{tr}[\tau] = 1, \tau \geq 0\}$$

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.

$$S_\infty^\varepsilon(\rho||\sigma) := \min_{\tau \in B^\varepsilon(\rho)} S_\infty(\tau||\sigma),$$

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

第 2 章 量子仮説検定

導入のために、二つの直交しているとは限らない状態 $|a\rangle, |b\rangle$ を識別する問題を考えよう。測定を使って初めて量子状態の持つ情報にアクセスできるので、測定することで識別しようとする。

POVM を定義した後の例で触れた二値 POVM を使って、 Q が測定されたら量子状態は $|a\rangle$, $I - Q$ が測定されたら $|b\rangle$ と判断することにしよう。上手い POVM が存在して、二つの状態は必ず識別可能か？ すなわち、 $\langle a|Q|a\rangle = 1$, $\langle b|(I - Q)|b\rangle = 1$ なる $0 < Q < I$ はあるか？

検証 存在すると仮定。 $\langle a|I|a\rangle = 1$ より $\langle a|(I - Q)|a\rangle = 0$ 。従って $\sqrt{I - Q}|a\rangle = 0$ 。 $|b\rangle = \alpha|a\rangle + \gamma|c\rangle$ ($|c\rangle$ は $|a\rangle$ と直交する規格化されたベクトル) と $|b\rangle$ を展開する。 $|a\rangle, |b\rangle$ も規格化されているので $|\alpha|^2 + |\gamma|^2 = 1$ 。条件の $\langle b|(I - Q)|b\rangle = 1$ より $1 = \langle b|\sqrt{I - Q}\sqrt{I - Q}(\alpha|a\rangle + \gamma|c\rangle) = |\gamma|^2$ となるが、規格化条件より $\alpha = 0$ のときのみ成立。よって $|a\rangle, |b\rangle$ が直交しているときは良い POVM はあるが、それ以外の場合は誤差なし識別は不可能。 \square

つまり、用意された二つの状態すら一般には完全な識別は不可能！これは古典にはない量子の非自明な部分だ。この章では一番基本的な、用意された二つの状態を識別する、というタスクについて少し掘り下げる。

2.1 状況設定

2つの状態 $\rho, \sigma \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ の識別を $\text{POVM}\{Q, (I - Q)\}$ ですることを考える。 Q の測定値を 0, $I - Q$ の測定値を 1 とする。 ρ を帰無仮説, σ を対立仮説という。測定値が 0 のとき ρ が真, 測定値が 1 のとき σ が真という。前述のように完全な識別はできないので、それぞれ誤りがある。本当は ρ が用意されたのに誤って σ が用意されたと判断する確率は

$$\alpha(Q) := \text{tr}[(I - Q)\rho]$$

で与えられ、これを**第一種誤り確率**という。同じように考えて、本当は σ が用意されたのに誤って ρ が用意されたと判断する確率は

$$\beta(Q) := \text{tr}[Q\sigma]$$

で与えられ、これを**第二種誤り確率**という。

ρ が来たときに ρ と判断する成功確率 $\text{tr}[Q\rho]$ を $0 < \eta < 1$ 以上にするという条件のもと、第二種誤り確率可能な限り小さくする問題を考える。このとき、達成された最小値の対数を取り、これを量

子仮説検定ダイバージェンスと呼ぶ.

定義 2.1.1 (量子仮説検定ダイバージェンス). $0 < \eta < 1$ について量子仮説検定ダイバージェンス $S_H^\eta(\rho||\sigma)$ を次のように定義する.

$$S_H^\eta(\rho||\sigma) := -\ln \left(\frac{1}{\eta} \min_{0 \leq Q \leq I, \text{tr}[\rho Q] \geq \eta} \text{tr}[\sigma Q] \right)$$

詳細は省略するが, この仮説検定ダイバージェンスは定義 1.6.5 で定義した平滑化したダイバージェンスと関連がある.

$$S_H^{\eta \simeq 1}(\rho||\sigma) \simeq S_0^{\varepsilon \simeq 0}(\rho||\sigma), \quad S_H^{\eta \simeq 0}(\rho||\sigma) \simeq S_\infty^{\varepsilon \simeq 0}(\rho||\sigma).$$

第 3 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。

3.1 状況設定

まず、逆温度 β の熱浴に接した量子系の Gibbs 状態, Helmholtz の自由エネルギーを考える。

定義 3.1.1 (Gibbs 状態, Helmholtz の自由エネルギー). 系の Hamiltonian を \hat{H} とするとき, Gibbs 状態 $\hat{\rho}^G \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ を

$$\hat{\rho}^G := e^{-\beta\hat{H}}/Z, \quad Z := \text{tr}[e^{-\beta\hat{H}}]$$

と定義する。さらに、その系の Helmholtz の自由エネルギーを

$$F := -\beta^{-1} \ln Z$$

とする。

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いうことにする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 3.1.2 (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

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く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。

系の Gibbs 状態を以下では ρ_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する．

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}_S から \hat{H}'_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 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ で張られるとする（これは正規直交とする）． 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 $\hat{H}_S \otimes |0\rangle\langle 0|$ で， 終わりは C 系の状態が $|1\rangle$ なので状態に効く Hamiltonian は $\hat{H}'_S \otimes |1\rangle\langle 1|$ 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 $[\hat{H}_S \otimes |0\rangle\langle 0|, \hat{H}'_S \otimes |1\rangle\langle 1|] = 0$ なので SC 系の Gibbs 状態は

$$\begin{aligned} \exp(-\beta \hat{H}_{SC}) &= \exp(-\beta \hat{H}_S \otimes |0\rangle\langle 0|) \exp(-\beta \hat{H}'_S \otimes |1\rangle\langle 1|) \\ &= \exp(-\beta \hat{H}_S) \otimes |0\rangle\langle 0| + \exp(-\beta \hat{H}'_S) \otimes |1\rangle\langle 1| \end{aligned}$$

となる．

以上の状況設定の概念図を書くとするれば，以下の図 3.1 のようになる．

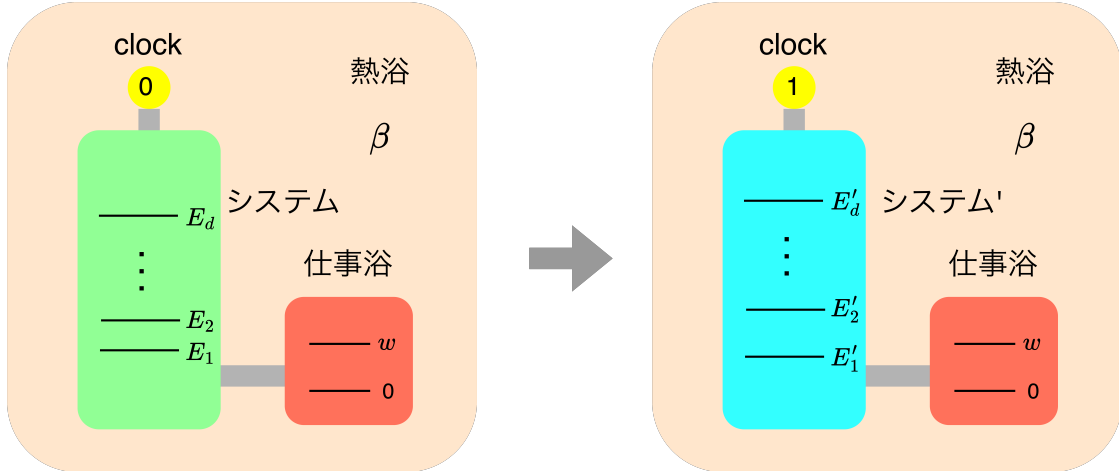


図 3.1: Single-Shot の熱力学の概念図． [4] をかなり参考にした． この図だと C 系がうまく作動して Hamiltonian もちゃんと切り替わったようになっているが， 以下に述べる Approximate Case ではうまく切り替わらない場合もあることに注意．

このとき，SC 系と W 系とを合わせた系全体の Gibbs 状態は $\rho_{SCW}^G := \rho_{SC}^G \otimes \rho_W^G$ 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。

3.2 Exact Case

まず、素直に 3.1 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 3.2.1 (Single-Shot work-assisted state transformation). $\hat{\rho}_S, \hat{\rho}'_S$ をそれぞれ S 系の Hamiltonian が H_S, H'_S であるような状態とする。 $\hat{\rho}_{SCW}^G$ についての Gibbs 保存写像 \mathcal{E}_{SCW} が存在して、

$$\mathcal{E}_{SCW}(\hat{\rho}_S \otimes |0\rangle\langle 0| \otimes |E_i\rangle\langle E_i|) = \hat{\rho}'_S \otimes |1\rangle\langle 1| \otimes |E_f\rangle\langle E_f|$$

を満たすとき、 $\hat{\rho}_S$ は $\hat{\rho}'_S$ に w -assisted transformable という。

この $\hat{\rho}_S$ は $\hat{\rho}'_S$ に w -assisted transformable であるための必要条件/十分条件を 1.6 節で導入した Rényi- α ダイバージェンスを使って与えることができる。以下、 F_S を S 系の Hamiltonian が H_S のときの Helmholtz の自由エネルギーとし、 $\Delta F_S := F'_S - F_S$ とする。

定理 3.2.2 (Single-Shot work bounds). $\hat{\rho}_S, \hat{\rho}'_S$ をそれぞれ S 系の Hamiltonian が H_S, H'_S であるような状態とする。

(a)(必要条件) : $\hat{\rho}_S$ は $\hat{\rho}'_S$ に w -assisted transformable ならば、 $\alpha = 0, 1, \infty$ について

$$\beta(w - \Delta F_S) \geq S_\alpha(\hat{\rho}'_S \| \hat{\rho}_S^G) - S_\alpha(\hat{\rho}_S \| \hat{\rho}_S^G)$$

が成立。

(b)(十分条件) : $\hat{\rho}_S, \hat{\rho}'_S$ について

$$\beta(w - \Delta F_S) \geq S_\infty(\hat{\rho}'_S \| \hat{\rho}_S^G) - S_0(\hat{\rho}_S \| \hat{\rho}_S^G)$$

ならば、 $\hat{\rho}_S$ は $\hat{\rho}'_S$ に w -assisted transformable である。

証明 [2] を参照。 □

S 系の Hamiltonian が変換前後で変わらず、

1. $\hat{\rho}_S$ を $\hat{\rho}_S^G$ に変換
2. $\hat{\rho}_S^G$ を $\hat{\rho}_S$ に変換

の 2 パターンについて考えてみる. このとき, 定義 3.1.1 より $\Delta F = 0$ である. また, 今 $\hat{\rho}_S^{G'} = \hat{\rho}_S^G$ に注意する. また, 定理 1.6.4 より $\rho = \sigma \implies S_\alpha(\rho||\sigma) = 0$ である.

1. の場合について, 定理 1.6.4 の不等式より必要条件の不等式は $\beta w \geq -S_0(\hat{\rho}_S||\hat{\rho}_S^G)$ と書き直される. 一方, 十分条件の不等式もこれと全く同じ. よって $\hat{\rho}_S$ が $\hat{\rho}_S^G$ に w -assisted transformable であることの必要十分条件は

$$\beta(-w) \leq S_0(\hat{\rho}_S||\hat{\rho}_S^G)$$

が成立することだといえる. $w < 0$ は W 系の基底状態が励起されること, つまり仕事浴に仕事が蓄えられることを意味すると思うと, これは S 系の状態が非平衡状態から平衡状態に落ち着くときに取り出せる仕事 (の β 倍) は始状態と終状態の Rényi-0 ダイバージェンスで上から押さえられるとわかる.

2. の場合について, 1. の時と同じように考えると $\hat{\rho}_S^G$ が $\hat{\rho}_S$ に w -assisted transformable であることの必要十分条件は

$$\beta w \geq S_\infty(\hat{\rho}_S||\hat{\rho}_S^G)$$

が成立することだといえる. w は S 系に仕事浴が与えるエネルギーだったので, これは S 系を平衡状態から所望の非平衡状態にするために必要な仕事は $S_\infty(\hat{\rho}_S||\hat{\rho}_S^G)$ で下から押さえられるとわかる.

3.3 Approximate Case

次に, 変換にある種「失敗」が起きうることも想定する. 例えば S 系の変換後の状態が欲しかった状態とはずれていたり, C 系がうまく作動しなかったり, 仕事浴とのエネルギーのやり取りが思い通りにならなかったりと, 色々と考え得る. それも加味した上で, 「大体」変換できる, ことを次のように定式化する.

定義 3.3.1 (ε -approximate Single-Shot thermodynamic process). $\varepsilon \geq 0$ とする. $\hat{\rho}_S, \hat{\rho}_S'$ をそれぞれ S 系の Hamiltonian が H_S, H_S' であるような状態とする. $\hat{\rho}_{SCW}^G$ についての Gibbs 保存写像 \mathcal{E}_{SCW} が存在して, $\hat{\rho} := \hat{\rho}_S \otimes |0\rangle\langle 0| \otimes |E_i\rangle\langle E_i|$, $\hat{\rho}' := \hat{\rho}_S' \otimes |1\rangle\langle 1| \otimes |E_f\rangle\langle E_f|$ とするとき,

$$D(\mathcal{E}_{SCW}(\hat{\rho}), \hat{\rho}') \leq \varepsilon$$

が成立するとき, $\hat{\rho}_S$ は $\hat{\rho}_S'$ に ε -approximate w -assisted transformable という.

この定義の意味するところは, 生成した状態が積状態かも, C 系や W 系がうまくいったのかもわからないが, ともかく全体としては欲しかった状態の ε 近傍にはいる状態は作れる, ということだ.

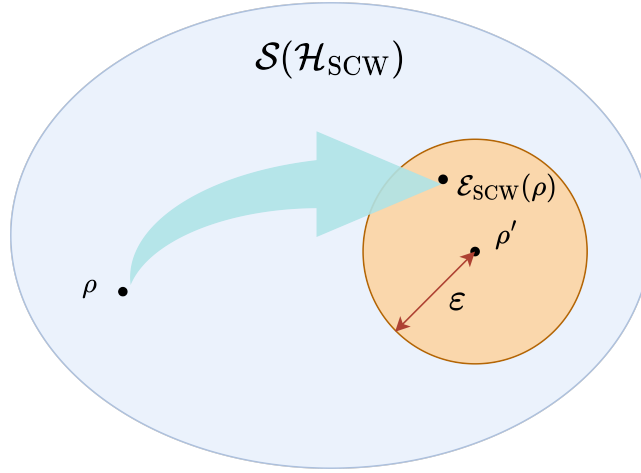


図 3.2: イメージ図

それでは、できた状態のうち、S系の部分はどのくらい欲しかった $\hat{\rho}'_S$ に似ているのだろうか？次の命題より、特にS系に絞ってみても出力された状態と欲しかった状態は ε 近傍にあることが確認できる。

命題 3.3.2. $\hat{\rho}''_S := \text{tr}_{\text{CW}}[\mathcal{E}_{\text{SCW}}(\rho)]$ とする。このとき、

$$D(\hat{\rho}''_S \| \hat{\rho}'_S) \leq \varepsilon$$

証明 部分トレースは CPTP 写像だったので、トレース距離の単調性（定理 1.5.3）より

$$\varepsilon \geq D(\mathcal{E}_{\text{SCW}}(\hat{\rho}), \hat{\rho}') \geq D(\text{tr}_{\text{CW}} \circ \mathcal{E}_{\text{SCW}}(\hat{\rho}), \text{tr}_{\text{CW}}(\hat{\rho}')) = D(\hat{\rho}''_S \| \hat{\rho}'_S)$$

示された。 □

Approximate Case にも Exact Case のときのような ε -approximate w -assisted transformable のための必要条件/十分条件を与える定理があるが、必要条件については量子仮説検定ダイバージェンスが登場し、やや綺麗ではない³⁾。十分条件の方には平滑化ダイバージェンスが登場し、良い形をしている。

定理 3.3.3 (Single-Shot work bounds). $\hat{\rho}_S, \hat{\rho}'_S$ をそれぞれ S 系の Hamiltonian が H_S, H'_S であるような状態とする。 $\varepsilon \geq 0$ とする。

(a)(必要条件) : $\hat{\rho}_S$ は $\hat{\rho}'_S$ に ε -approximate w -assisted transformable ならば、 $0 < \eta < 1 - \varepsilon$

3) ε -approximate w -assisted transformable の定義の条件を少し強めることでよりシンプルな形にすることができる。詳細は [2] を参照。定義 3.3.1 の利点は次の Asymptotic Case にうまく接続できる点にある。

において

$$\beta(w - \Delta F_S) \geq S_H^{\eta+\varepsilon}(\hat{\rho}_S' \| \hat{\rho}_S^G) - S_H^\eta(\hat{\rho}_S \| \hat{\rho}_S^G) - \ln \left(\frac{\eta + \varepsilon}{\eta} \right)$$

が成立.

(b)(十分条件) : $\hat{\rho}_S, \hat{\rho}_S'$ について

$$\beta(w - \Delta F_S) \geq S_\infty^{\varepsilon/2}(\hat{\rho}_S' \| \hat{\rho}_S^G) - S_0^{\varepsilon/2}(\hat{\rho}_S \| \hat{\rho}_S^G)$$

ならば, $\hat{\rho}_S$ は $\hat{\rho}_S'$ に ε -approximate w -assisted transformable である.

証明 [2] を参照. □

3.4 Asymptotic Case

最後に Asymptotic な状況を考える. これは後述の定義からわかるように熱力学極限に対応する操作をとることを意味している. 簡単に言えば, これまでは $\hat{\rho} \in \mathcal{H}$ の表す 1 粒子状態しか考えていなかったが, この節では $\hat{\rho}_n \in \mathcal{S}(\mathcal{H}^{\otimes n})$ について考えた後 $n \rightarrow \infty$ の極限をとる, 多粒子における状況を考えてみる.

$\hat{\rho}_n \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_S^{\otimes n})$, $\hat{\rho}_n' \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_S'^{\otimes n})$ の列を $\hat{P}_S := \{\hat{\rho}_{S,n}\}_{n \in \mathbb{N}}$, $\hat{P}_S' := \{\hat{\rho}_{S,n}'\}_{n \in \mathbb{N}}$ とする. また, 対応する Hamiltonian の列を $\hat{H}_S := \{\mathcal{H}_S^{\otimes n}\}_{n \in \mathbb{N}}$, $\hat{H}_S' := \{\mathcal{H}_S'^{\otimes n}\}_{n \in \mathbb{N}}$ とする. 対応する Gibbs 状態の列を $\hat{\Sigma}_S := \{\hat{\rho}_{S,n}^G\}_{n \in \mathbb{N}}$, $\hat{\Sigma}_S' := \{\hat{\rho}_{S,n}'^G\}_{n \in \mathbb{N}}$ とする. さらに, 以下の極限が存在すると仮定しよう.

$$F_S := \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} F_{S,n}, \quad F_S' := \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} F_{S,n}'.$$

これを自由エネルギーレートという. なお, $F_{S,n}, F_{S,n}'$ はそれぞれ $\mathcal{H}_S^{\otimes n}, \mathcal{H}_S'^{\otimes n}$ に対応する Helmholtz の自由エネルギーである. $\Delta F_{S,n} := F_{S,n}' - F_{S,n}$, $\Delta F_S := F_S' - F_S$ とする.

定義 3.4.1 (Asymptotic thermodynamic process). 列 \hat{P}_S は \hat{P}_S' に \hat{H}_S, \hat{H}_S' について, 以下の条件を満たすときに, asymptotically w -assisted transformable という.

- 列 $\{w_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ と $\{\varepsilon_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ があって, それぞれ $w_n \in \mathbb{R}$, $\varepsilon_n > 0$ を満たし, $\hat{\rho}_{S,n}$ は $\hat{\rho}_{S,n}'$ に ε_n -approximate w_n -assisted transformable である.
- $\lim_{n \rightarrow \infty} w_n = w$ かつ $\lim_{n \rightarrow \infty} \varepsilon_n = 0$ である.

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] 渡邊開人「Physics Lab. 2023 熱力学とリソース」 <https://event.phys.s.u-tokyo.ac.jp/physlab2023/pdf/sta-article01.pdf>