

量子エントロピー

1 フォンノイマンエントロピー

von Neumann entropy

$$S = -\text{Tr} \rho \log \rho = -\sum_{\lambda} \lambda \log \lambda \quad (1)$$

について言っとくことがまず。 $|\nu\rangle$ を任意の完全基底としてもし、 $f(x) = -x \log x$ の様な上凸関数なら一般に

$$\text{Tr} f(\rho) \leq \sum_{\nu} f(\langle \nu | \rho | \nu \rangle) \quad (2)$$

は直ちに証明できる。なぜなら $|\lambda\rangle$ を ρ の固有基底として

$$\begin{aligned} \text{Tr} f(\rho) &= \sum_{\nu} \langle \nu | f(\sum_{\lambda} \lambda |\lambda\rangle\langle\lambda|) | \nu \rangle = \sum_{\nu, \lambda} |\langle \nu | \lambda \rangle|^2 f(\lambda) \\ &\leq \sum_{\nu} f(\sum_{\lambda} |\langle \nu | \lambda \rangle|^2 \lambda) = \sum_{\nu} f(\langle \nu | \rho | \nu \rangle) \end{aligned}$$

が言えるから。(等号は $|\nu\rangle$ が ρ の固有状態のときのみ成立。 $\sum_{\lambda} |\langle \nu | \lambda \rangle|^2 = 1$ 故不等号が現れる。)

注: Jensen の不等式上の不等式は、即ち、「上凸関数に対して $p_i \geq 0, \sum_i p_i = 1$ ならば

$$\sum_i p_i f(x_i) \leq f(\sum_i p_i x_i) \quad (3)$$

という有名な不等式」から出る。この不等式は、古典情報理論で使う基本不等式。 $p_1 + p_2 = 1$ という2変数なら x_1, x_2 の内分点での f の値が $f(x_1), f(x_2)$ の内分点より小さいという上凸関数の基本定義であり、n変数の場合は2変数の場合から帰納的に証明可能。

<使用例> $q_i = 1/N$ において $f(x) = -x \log x$ の上凸性から最大エントロピー原理 $\sum f(p_i) = N \sum q_i f(p_i) \leq N f(\sum_i q_i p_i) = \log N$ 等が導かれる。情報量に関する不等式の殆んどが後にも見るように Jensen の不等式から導出される。

要するに、VN-entropy 不等式は、任意の base で観測して得られるエントロピーの最小値が神さまの用意した基底 $|\lambda\rangle$ で観測したエントロピーを上回るという訳です。しかし $|\lambda\rangle$ を設計しようとするれば、 ρ の詳細を知らねばならず、そのためには ρ を発展させる法則の詳細をしつてなきゃならん。

もし ρ が純粋状態なら神さまの基底が雑音で汚れたときどれだけ情報を失うか?? 問題は汚し方の canonical な形式があるかってことです。例えばランダム行列によって (Gaussian unitary etc.) ρ が汚れた時、どれだけ entropy が上昇するか? というのが entropy の壁。

神さまの entropy の汚れ方は最低次で系の個性を反映しない。

(河原屋 031122) 神さまの基底で観測する場合、古典エントロピーも ρ が純粋状態 $\rho_0 = |0\rangle\langle 0|$ ならば0になる。神さまの基底 $\{|\lambda\rangle\}$ は $|0\rangle$ とそれに直交する状態 $|\lambda'\rangle$ からなる。今、神さまの基底 $|\lambda\rangle$ が e^{iT} なる Unitary 変換でわずかに歪んだとする。歪んだ神さま系で測定した古典エントロピー

は系の個性を反映するだろうか? 否。この設定は状態が歪んで $e^{-iT} \rho_0 e^{iT}$ になったと見なしでもよい。それを元の神基底 $\{|\lambda\rangle\} = |0\rangle + \{|\lambda'\rangle\}$ で観測すれば $|\lambda'\rangle$ での測定確率は歪み T が小さいとして

$$P_{\lambda'} = |\langle \lambda' | e^{-iT} |0\rangle|^2 \sim |\langle \lambda' | -iT |0\rangle|^2, \quad P_0 = 1 - \sum_{\lambda'} P_{\lambda'}$$

であろう。よって、測定に伴う<古典>エントロピーは

$$S = - \sum_{\lambda'} |\langle \lambda' | T |0\rangle|^2 \log |\langle \lambda' | T |0\rangle|^2 \geq 0$$

となる。この値は T の選び方で任意にとれるので汚れ方は系の特徴を含まない。この事実はエントロピーの他の定義にも当てはまる。Tsallis エントロピーのような非加法型 (非 log 型) のエントロピーにしても、確率 $P_{\lambda'}$ で作られるのであれば、同様である。

2 Ohyaの量子相互エントロピー

2.1 古典確率におけるエントロピーのまとめ

古典的に分割 (例えば相空間の分割) a の状態 i をとる確率を p_i 、その分割 b での状態を j として、 $i \rightarrow j$ の条件付き確率を $p(i/j)$ とした時、 a のある状態 i にいた事が仮に分かっているも b に向かう過程で増える<制御できない多様さ>

$$H(b/i) = - \sum_j p(i/j) \log p(i/j)$$

の平均値 (条件つき情報量)

$$H(b/a) = \sum_i p_i H(b/i)$$

を b の多様さ

$$H(b) = - \sum_j p_j \log p_j$$

から除いたものが、「 a から b に伝えられた多様さ」

$$I(a : b) = H(b) - H(b/a)$$

であり、これが a, b に共有される多様さ = 相互情報量。つまり

相互情報量 = b という枠組で観測した時の多様さ - [枠 $a \rightarrow$ 枠 b の過程で生成された多様さ]

という訳です。(図1) 右辺第2項が生成エントロピーでありKSエントロピーに対応。これは、 a と b を入れ替えても成立する。

$$I(a : b) = H(b) - H(b/a) = H(a) - H(a/b) \geq 0$$

また、この量は次のようにして導入してもよい。まず、二つの異なる確率分布 $\{p_i\}, \{q_i\}$ の違いを表すものとして、古典相対エントロピー

$$S(p, q) = \sum_i p_i (\log p_i - \log q_i) \quad (\geq 0)$$

を用いる。この量の非負性は上凸関数 $\log x$ に対する Jensen の不等式

$$S(p, q) = -\sum_i p_i \log(q_i/p_i) \geq -\log[\sum p_i(q_i/p_i)] = 0$$

からただちに証明できる。実際の証明は大矢相互エントロピーの節をみよ。

2.2 量子エントロピーの基本的性質

よく使われる公式

Schatten – decomposition $\rho = \sum_{\lambda} \lambda |\lambda\rangle\langle\lambda|$, $\sigma = \sum_{\mu} \mu |\mu\rangle\langle\mu|$

$F(\sum_{\lambda} \lambda |\lambda\rangle\langle\lambda|) = \sum_{\lambda} |\lambda\rangle\langle\lambda| F(\lambda)$, example $\log \rho = \sum |\lambda\rangle\langle\lambda| \log \lambda$,

$F(\sum_{\lambda} |\lambda\rangle\langle\lambda| \times A_{\lambda}) = \sum |\lambda\rangle\langle\lambda| \times F(A_{\lambda})$,

$\log(\rho_1 \times \rho_2) = \log(\rho_1 \times \mathbf{1}_2) + \log(\mathbf{1}_1 \times \rho_2)$

$$= \sum_{\lambda} |\lambda\rangle\langle\lambda| \log \lambda \times \mathbf{1}_2 + \mathbf{1}_1 \times \sum_{\mu} |\mu\rangle\langle\mu| \log \mu \tag{4}$$

$$\log k\rho \quad (k : \text{const}) = \log k\mathbf{1} + \log \rho, \text{ identity – operator } \mathbf{1} = \sum |\lambda\rangle\langle\lambda|. \tag{5}$$

$$\tag{6}$$

加法性が成り立つ：

$$S(\rho_1 \times \rho_2) = S(\rho_1) + S(\rho_2) \tag{7}$$

証明は上の式から明らか。また、 $\rho_1 \times \rho_2$ の Schatten 分解は $\rho_1 \times \rho_2 = \sum_{n,m} \lambda_n^{(1)} \lambda_m^{(2)} E_n^{(1)} \times E_m^{(2)}$ である。一般の合成系の密度行列 ρ_{12} に関しては劣加法性 (subadditivity)

$$S(\rho_{12}) \leq S(\rho_1) + S(\rho_2) \tag{8}$$

が成り立つ。これは後で示す相対エントロピーの非負性 $-S(\rho_{12}/(\rho_1 \times \rho_2)) \leq 0$ から自明。
von-Neumann entropy

$$S(\rho) = -\text{Tr} \rho \log \rho$$

凸性

$$S(x\rho + (1-x)\sigma) \geq S(\rho) + (1-x)S(\sigma) \tag{9}$$

Araki-Lieb の不等式

$$|S(\rho_1) - S(\rho_2)| \leq S(\rho_{12}) \leq S(\rho_1) + S(\rho_2) \tag{10}$$

$\rho_1 = Tr_2 \rho_{12}$ $\rho_1 = Tr_1 \rho_{12}$ である。\\

梅垣-Lindblad 相対エントロピー (量子相互エントロピー) を $s(\rho) \leq s(\sigma)$ の場合 (ただし、記号スモールエス $s(\cdot)$ は support を表す)、

$$S(\rho|\sigma) = Tr \rho(\log \rho - \log \sigma) \quad (11)$$

で定義する。これは σ から測った ρ との距離であって、当然三角不等式を満たす。 $s(\rho) \leq s(\sigma)$ でない場合は ∞ として定義する。\\

この場合、古典確率系での相対エントロピーと同様の性質をみたく。台 $s(\rho)$ の正確な定義は、 $tr \rho(I - E) = 0$ をみたす最小射影 E です。以下、channel を Λ や Λ_t^* で表しますが、量子力学的な channel では unitary evolution のことを意味します。量子相対エントロピーの非負性も Jensen の不等式から導かれる。実際 $\sigma = \sum_\nu \nu |\nu\rangle\langle\nu|$ とすれば：

$$\begin{aligned} S(\rho|\sigma) &= \sum_\lambda \lambda (\log \lambda - \sum_\nu |\langle \lambda|\nu\rangle|^2 \log \nu) \\ &\geq \sum_\lambda \lambda (\log \lambda - \log \sum_\nu |\langle \lambda|\nu\rangle|^2 \nu) \\ &= \sum_\lambda \lambda (\log[\lambda / \langle \lambda|\sigma|\lambda\rangle]) \end{aligned} \quad (12)$$

ここで、上凸関数である \log への Jensen 不等式を使った。右辺は古典相対エントロピーに他ならない。かくして、\\

量子相対 entropy は古典相対 entropy より大きい

これは off-diagonal 成分 $|\langle \lambda|\nu\rangle|^2$ が $\delta_{\lambda,\nu}$ に等しくない、即ち非可換性の為にそうなる事に注意!! つまり量子的な確率距離の方が古典的確率距離より大きい。古典相対エントロピーに対する非負性から量子相対エントロピーも非負。証明終わり。vn-Entropy と古典 entropy の差も非可換性から来ている。量子論的エントロピーはこの非可換性の分、古典エントロピーからずれる。Araki-Lieb の不等式とともに、量子論におけるベルの不等式の破れに関わる事実である。

定義

Λ が乱雑とは任意の直交 vector を全て同じ vector に変えてしまうような時間発展である。これに対して、直交系を直交系に写す時間発展は決定論的という。\\

2.3 大矢の相互エントロピー：相対エントロピーを用いた古典相互エントロピー、相互情報量の定義

大矢合成状態は古典系の同時確率分布に対応する状態として導入されている。古典相互エントロピーの量子版を組み立てるために古典情報量を再考察。 $q(x, t) = \Lambda_t^* p(x)$ (Λ_t^* は古典確率の時間発展を記述する Unitary 変換) とする。即ち、 $q_j = \int_{x \in j} q(x, t) dx$ 。一方、 $x \in i$ にいたとき t で j に発見される確率に、 $p_i (\equiv p(x \in j))$ を掛けた結合確率 $r_{ij} = p_i \int_{x \in j} dx \Lambda_t^* p_i(x)$ と直積状態分布 $p \times q = (p_i q_j)$ を考え、これらの相対エントロピーが相互情報量である。

$$I(p : \Lambda) = S(r, p \times q)$$

実際

$$\begin{aligned}
 S(r, p \times q) &= \sum_{i,j} r_{i,j} [\log r_{i,j} - \log(p_i q_j)] \\
 &= \sum_{i,j} r_{i,j} \log r_{i,j} - \sum_i p_i \log p_i - \sum_j q_j \log q_j \\
 &= -H(a, b) + H(a) + H(b) = H(b) - H(b/a)
 \end{aligned} \tag{13}$$

となる。($\sum_j r_{i,j} = p_i, \sum_i r_{i,j} = p_j$ を用いた。) 当然、基本不等式 $S(r, p \times q) \leq \min(S(p), S(q))$ が成立する。 \ \

上の古典相互情報量を量子論に翻訳する。まず分割の代わりに Shatten 分解を考える。従って、古典の場合と異り分割 (分解) は ρ と共に変化してしまう。これは不満だが一応認めよう。古典量子対応は

$$\{r_{i,j}\} = \{p_i p_{ij}\} \iff \sigma_E = \sum_{\lambda} \lambda E_{\lambda} \times \Lambda_t^* E_{\lambda} \tag{14}$$

となる。この代案として分割 (観測ベース) $|i\rangle$ を固定させた

$$\{r_{i,j}\} = \{p_i p_{ij}\} \iff \sigma'_E = \sum_{ij} \langle i | \rho | j \rangle E_{ij} \times \Lambda_t^* E_{ij} \quad E_{ij} = |i\rangle \langle j| \tag{15}$$

という対応も考えられる (池田案) がそれには言及していない。大矢案の相関状態と無相関状態

$$\{p_i q_j\} \iff \sigma_0 = \rho \times \Lambda_t^* \rho \tag{16}$$

とのエントロピー距離を測る。つまり、

$$\begin{aligned}
 I(\rho; \Lambda) &= \sup S(\sigma_E, \sigma_0) \\
 &= \sup \text{Tr} \left[\left(\sum_{\lambda} \lambda E_{\lambda} \times \Lambda_t^* E_{\lambda} \right) \left\{ \log \left(\sum_{\lambda} \lambda E_{\lambda} \times \Lambda_t^* E_{\lambda} \right) - \log(\rho \times \rho_t) \right\} \right]
 \end{aligned} \tag{17}$$

の事を大矢相互エントロピーという。($\rho_t = \Lambda_t^* \rho$) \sup は分解に対してとる??? つまり ρ に対してとるのか? 違う!!! 分解は縮退がなければ一義的である。この \sup 操作が問題なのであるがはっきりしない。しかし、大矢氏の解説をみると、密度行列 ρ の固有値が縮退する場合も含めて一般化するために導入しておくようだ。

量子力学的 channel の線形性

$$S(\sigma_E, \sigma_0) = \sum_n \lambda_n S(\Lambda_t^* E_n, \Lambda_t^* \rho) \tag{18}$$

が成立。これは容易に証明できる。故に

$$S(\sigma_E, \sigma_0) = S(\Lambda_t^* \rho) - \sum_{\lambda} \lambda S(\Lambda_t^* E_{\lambda}) \tag{19}$$

も成立。証明は以下の通り \ \

$$\sum_{\lambda} \lambda E_{\lambda} \times \Lambda^* E_{\lambda} \log(\sum_{\lambda} \lambda E_{\lambda} \times \Lambda^* E_{\lambda}) - \sum_{\lambda} \lambda \log \lambda - S(\rho_t)$$

一方, 次の変形 \ \

$$\log(\sum_{\lambda} \lambda E_{\lambda} \times \Lambda^* E_{\lambda}) = \sum_{\lambda} E_{\lambda} \times \log(\lambda \Lambda^* E_{\lambda}) = \sum_{\lambda} E_{\lambda} \times [\log(\Lambda^* E_{\lambda}) + \log(\lambda \mathbf{1})]$$

を上のに式に代入し Tr を取れば求めるものを得る。(大矢氏の本 p177 に詳しい。)

これは以下の基本不等式の証明に使われるだけでなく大矢 entropy なるものがどういう代物か如実に表している。実際、量子論では密度行列 $\rho(0)$ の Shatten 分解を $\rho = \sum \lambda E_{\lambda}$ とすれば、 E_{λ} に居た事を知った時の多様さ $S(\Lambda^* E_{\lambda})$ が $H(b/i)$ に相当し、その vN-entropy の平均値

$$H(t/0) = \sum_{\lambda} \lambda S(\Lambda^* E_{\lambda}) \tag{20}$$

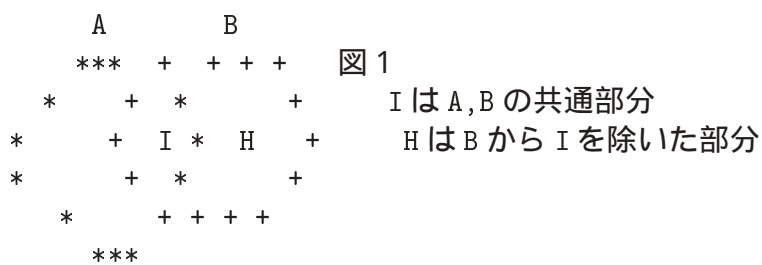
が $H(b/a)$ に相当。即ち、生成エントロピーである。生成エントロピーを相対エントロピーで表現すると

$$S(\sigma_E, \rho_0 \times \mathbf{1}) = \sum_{\lambda} \lambda S(\Lambda^* E_{\lambda}) = H(t/0) \tag{21}$$

になる事は (19) を導出した計算から直に分かる。むろん、大矢相互エントロピー

$$I(\rho_t : \rho(t=0)) = I(t : 0) = S(\rho(t)) - \sum_{\lambda} \lambda S(\Lambda^* E_{\lambda})$$

が相互情報量に対応。



次の基本不等式が成り立つ。これは重要である。

$$0 \leq S(\sigma_E, \sigma_0) \leq \min[S(\rho_0), S(\rho_t)] \tag{22}$$

完全 mixing 系 (自動的に混合状態になるということ)

$$\Lambda^* E \implies \sum_{\lambda} \lambda E_{\lambda}$$

では $S = 0$ は自明。一方、unitary 変換 $\Lambda^* E_{\lambda} = U E_{\lambda} U^{-1}$ における生成 entropy $H(t/0) = 0$ は自明:

$$\Lambda_t^* = \text{unitary} \implies S(\sigma_E, \sigma_0) = S(\rho)$$

純粋状態 $\rho = |\phi\rangle\langle\phi|$ の任意時間発展に関する Ohya 相互情報量は 0 である!!!!

$$\begin{aligned}\rho(0) = \text{pure state} &\Rightarrow S(\sigma_E, \sigma_0) = 0 \\ \rho(t) = \text{pure state} &\Rightarrow H(t/0) = S(\rho_t)\end{aligned}\quad (23)$$

実際 $S(\sigma_E, \sigma_0) = S(\lambda_t^*|\phi\rangle\langle\phi|) - S(\Lambda_t^*|\phi\rangle\langle\phi|) = 0$ (ここで式(18)を用い、 $t=0$ で $\lambda=1$ に対する $|\phi\rangle$ 状態にいたものとした。) これは基本不等式からも support される。又、unitary 時間発展はエントロピーを生成しない、つまり $H(t/0) = 0$ なので

$$\begin{aligned}\Lambda_t^* = \text{unitary} &\Rightarrow S(\sigma_E, \sigma_0) = S(\rho_0) = S(\rho_t) \\ \Lambda_t^* = \text{unitary} &\Rightarrow H(t/0) = 0\end{aligned}\quad (24)$$

単調性

$$S(\Lambda_t^*\rho, \Lambda_t^*\sigma) \leq S(\rho, \sigma)\quad (25)$$

Λ_t^* が unitary なら あきらかに、上記の単調性は等号が成立。

2.4 031204 追加

大矢エントロピーにしても Schutzen basis で観測すると解釈する。つまり、Von-Neumann の観測過程

$$\rho(= \sum_{j,i} |i\rangle\langle i|\rho|j\rangle\langle j|) \rightarrow \sum_i |i\rangle\langle i| \langle i|\rho|i\rangle\quad (26)$$

をやっても $|i\rangle = |\lambda\rangle$ に取ると、観測によって ρ は変化しません。観測は非破壊測定になるわけです。なので Schutzen(S)-basis によって $|\lambda\rangle$ にいる確率が λ である事が観測され波束は $|\lambda\rangle\langle\lambda| = E_\lambda$ に収斂するので、そこを始状態にして発展させた Λ^*E_λ のエントロピーが $|\lambda\rangle$ に系を発見したという条件の下でのエントロピーとなりそれを $|\lambda\rangle$ に発見した確率 λ を掛けて平均したものが条件付きエントロピーになって

$$S^*(\Lambda^*\rho/\rho) = \sum_\lambda \lambda S(\Lambda^*E_\lambda)\quad (27)$$

という訳です。これは古典条件付きエントロピーを量子力学にそのまま (観測過程もふくめて) 素直に拡張したものだということになります。

観測過程も含めて条件付きエントロピーを再考します。S-basis 以外の任意の basis $|i\rangle, E_i = |i\rangle\langle i|$ で、観測する過程を考えます。この場合観測による波束の収縮がおきそれは von-Neumann 観測過程 eqn.(26) になる訳で系を $|i\rangle$ に確率 $\langle i|\rho|i\rangle$ で観測した場合の以降の発展は Λ^*E_i なのでそれを同じ観測装置で観測したとして

$$S(\Lambda^*\rho/\rho) = \sum_i \langle i|\rho|i\rangle [-\sum_j \langle j|\Lambda^*E_i|j\rangle \log \langle j|\Lambda^*E_i|j\rangle]\quad (28)$$

とするのは自然でしょう。これを S-basis という非常に特殊な basis で観測したものが eqn.(28) でここでは $|\lambda\rangle\langle\lambda|$ に波束収斂するたびに新しい S-basis を用意するという事をやっている。おそらく

$$S^*(\Lambda^*\rho/\rho) = \inf S(\Lambda^*\rho/\rho)\quad (29)$$

となっていると思われます。つまり条件付きエントロピーの全観測過程に対する最小値が S-basis で定義したエントロピー S^* だという訳です。(確認：つまり、観測装置を神様が操作する非破壊測定が可能だ。実際は観測装置の量子状態を制御できないと、これは不可能。) 一方、KS-entropy は、系を Λ で発展するたびに n 回連続観測して $|i_1\rangle |i_2\rangle \dots |i_n\rangle$ に系を発見したという条件の下で $n+1$ 回目の観測がかかえる不確定性、つまり条件付きエントロピーです。 $|i_1\rangle |i_2\rangle \dots |i_n\rangle$ に系を発見する確率は

$$P_{i_1, i_2, \dots, i_n} = \langle i_n | \Lambda^* E_{n-1} | i_n \rangle \langle i_3 | \Lambda^* E_{i_2} | i_3 \rangle \langle i_2 | \Lambda^* E_{i_1} | i_2 \rangle \langle i_1 | \rho_0 | i_1 \rangle \quad (30)$$

なので観測過程を考慮した量子KSエントロピーは

$$S_n^{KS} = - \sum_{i_1, i_2, \dots, i_n} P_{i_1, i_2, \dots, i_n} \sum_{i_{n+1}} \langle i_{n+1} | \Lambda^* E_{i_n} | i_{n+1} \rangle \log \langle i_{n+1} | \Lambda^* E_{i_n} | i_{n+1} \rangle \quad (31)$$

で定義できそうです。むろん厳密には平均操作

$$S^{KS} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_i S_i^{KS} \quad (32)$$

が必要ですが。問題は古典論との整合性を考慮するなら観測する base に対する sup をとらねばならない事です。大矢流だと最小エントロピーがKSエントロピーになるのに対し古典では最大エントロピーがKSエントロピーって事になります。まあそれはいいとしても、観測過程が入ると、そのたびに摂動を受けるわけで時間発展が観測しないのと全く違ってきてしまいます。KSエントロピーが観測を受けるのと受けないので全く変わってしまうというのはどうも気にいらん。

3 参考メモ

- P.A.Miller + S.Sarker(1999) では、状態 σ の entanglement measure として、

$$E(\sigma) = \min_{\rho \in D} D(\rho | \sigma) \quad (33)$$

$D(\rho | \sigma)$ は状態 σ と ρ の距離を測る相対エントロピー

$$D(\rho | \sigma) = \text{Tr}[\sigma(\ln \sigma - \ln \rho)] \quad (34)$$

で、 D は disentangled states 全ての集合をあらわす。全系の状態 σ_{A+B} が pure state の時 ($\text{Tr} \sigma_{A+B} = \text{Tr} \sigma_{A+B}^2 = 1$)、この相対エントロピーは VN-entropy に reduce される。そのとき、

$$E(\sigma) = -\text{Tr}[\sigma_A \ln \sigma_A] = -\text{Tr}[\sigma_B \ln \sigma_B]$$

ここで、 $\sigma_B = \text{Tr}_A[\sigma_{A+B}]$ 、 $\sigma_A = \text{Tr}_B[\sigma_{A+B}]$ である。Coupled kicked top に対してこの entangled rate を計算して、t-linear な振る舞いを観測している。

コメント (池田 030920) disentangled state を $\rho = \rho_A \times \rho_B$ とすれば相対エントロピーに関する不等式

$$\text{Tr} \sigma_A (\ln \sigma_A - \ln \rho_A) \geq 0$$

と、それにおいて $A \rightarrow B$ にしたものを使えば

$$D(\rho|\sigma) \geq \text{Tr}[\sigma \ln \sigma - \sigma_A \ln \sigma_A - \sigma_B \ln \sigma_B]$$

で右辺が最小値になって、特に、純粋状態に対しては

$$E(\sigma) = D_{\min}(\rho|\sigma) = \text{Tr}[-\sigma_A \ln \sigma_A - \sigma_B \ln \sigma_B]$$

だと思うが、貴君の表式違ってないか? $-\text{Tr}[\sigma_A \ln \sigma_A] = -\text{Tr}[\sigma_B \ln \sigma_B]$ となる理由は無いと思うが。この量は結構面白い。むろん十分時間たてば飽和するんだろう?? 我々の系だと飽和しないだろう。\\

(山田 031029) 実はすぐには証明できませんが、Lieb-荒木の不等式、というものがあります。

$$S_N(\rho_A) + S_N(\rho_B) \geq S_N(\rho_{AB}) \geq |S_N(\rho_A) - S_N(\rho_B)|$$

つまり、三角不等式。 pure state なら $S_N(\rho_{AB}) = 0$ ゆえ、 $-\text{Tr}[\sigma_A \ln \sigma_A] = -\text{Tr}[\sigma_B \ln \sigma_B]$ が成立します。量子相互エントロピー関係の最近の Review があります。(V. Vedral, Rev. Mod. Phys. 74, 197(2002)) \\

(河原屋 031123):以上の議論の結果次のようになった。

どうも Vedral らの disentangled state の定義は $\sigma = \sigma_A \times \sigma_B$ より広いらしい。 $\sigma = \sigma_A \times \sigma_B$ は disentangled state の中心にあってそれより距離が小さい disentangled state が存在しそれも込めて σ との距離が最小になる disentangled state が存在しそれとの最小距離が

$$D(\rho|\sigma) = -\sigma_A \ln \sigma_A = -\sigma_B \ln \sigma_B \quad (35)$$

らしい。\\

• Furuya et al(1998) Linear entropy を次式で定義して

$$\delta(t) = 1 - \text{Tr}_B[\sigma_B^2] \quad (36)$$

(当然 $0 \leq \delta \leq 1$), N-atom Jaynes-Cummings model に対して、零から増大する様子を観測している。(振動はあるが t-linear から飽和している。)

• H.Tasaki(1998) 系 S が熱欲 B と相互作用している閉じた系を考える。

$$H = H_s + H_B + H_{int}$$

それぞれ、 $H_s|\Phi_i\rangle = E_i|\Phi_i\rangle$, $H_B|\Psi_j\rangle = B_j|\Psi_j\rangle$, $H|\Xi\rangle = E|\Xi\rangle$ として、 $|\Xi\rangle$ を完全系で次のように展開する。

$$|\Xi\rangle = \sum_{i,j} \zeta_{i,j} |\Phi_i\rangle |\Psi_j\rangle$$

ここで、展開係数 $\zeta_{i,j}$ の振る舞いに仮定をする。まず、条件 $\Delta\varepsilon \gg \lambda \gg \Delta B$ とする。それぞれ、系 S のエネルギーレベル、相互作用の大きさ、熱欲系のエネルギーレベル。全系のエネルギーは一定なので、相互作用で結合できる準位に関して、等重率の原理を仮定するつまり、 $|\zeta_{i,j}| \sim const$ 。これらの条件で、カノニカル分布を導けるということを証明している。また、その条件を満たす人工的モデルを提示している。

• F.Izrailev et al(1998) 有限個の Fermi 系で FD 分布を観測している。

(山田) 河原屋でも少し展開係数に関する議論をしましたが、田崎氏の話も含めて、展開係数の大きさでつながってしまうというのは必要条件であり、展開係数の位相に特殊な関係がない

などの位相の条件がいるのではないかと思うのですが。
(池田 0920) 当然それは仮定されてる筈じゃないんですか?

References

- [1] P. Billingsley, *Ergodic Theory and Information*, (John Wiley and Sons, New York, 1960).
「確率論とエントロピー」 渡辺毅、十時東生、吉岡書店 1968.
- [2] 大矢雅則・渡辺昇、「量子通信理論の基礎」 牧野書店 1998
- [3] 大矢雅則・小島泉 編、「量子情報と進化の力学」 牧野書店 1996.
- [4] 足立聡、観測問題とカオス、数理科学, 「ベルの不等式の破れ」
- [5] 清水明、環境による干渉の破壊、数理科学
- [6] R. Omnes, "Quantum interpretation of quantum mechanics" Rev. Mod. Phys. **64**, 339(1993).
- [7] V. Vedral, Rev. Mod. Phys. **74**, 197(2002).
- [8] V. Vedral and M. B. Plenio, Phys. Rev. A **57**, 1619(1998).
- [9] J. Bouda and V. Buzek, Phys. Rev. A **65**, 034304(2002). purification
- [10] M.B. Ruskai, quant-ph/0205064. "Inequalities for Quantum Entropy: A Review with Conditions for Equality". Araki-Lieb 不等式
- [11] M.A. Nielsen and I.L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, (Cambridge Univ. Press, 2000).
- [12] A. Connes, H. Narnhofer and W. Thirring, Commun. Math. Phys. **112**, 691(1987).
- [13] U. Schwengelbeck and F.H.M. Faisal, Phys. Lett. A **199**, 281(1995). qKS entropy
- [14] W. Slomczynski and K. Zyczkowski, Phys. Rev. Lett. **80**, 1880(1998). Coherent State entropy
- [15] H. Kubotani, quant-ph/9911002. "Quantum trajectory in Multi-Dimensional Non-Linear System".
- [16] F. Izrailev et al(1998)

4 実践的感覚での波動関数の情報消失及び生成エントロピー

4.1 host-helper 系の波動関数

Phonon 系の位相固有状態を $|\phi\rangle$ として、

$$\begin{aligned} e^{-i(H(x,\phi)+\nu Jt)/\hbar}\Psi_0(x)|\phi_0\rangle &= e^{-i\nu Jt/\hbar}|\phi_0\rangle T \exp\{-iH(\phi_0+\nu t)\}\Psi_0(x) \\ &= |\phi_0+\nu t\rangle \Psi_0(x, \phi_0+\nu t) \end{aligned} \quad (37)$$

である ($|\phi(t=0)\rangle = |\phi_0\rangle$)。又、number 状態からの時間発展は $\langle\phi|n\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}}e^{in\phi}$ より、

$$\begin{aligned} \langle m|e^{-i(H(x,\phi)+\nu Jt)/\hbar}\Psi_0(x)|n\rangle &= \int d\phi \langle m|\phi+\nu t\rangle \langle\phi|n\rangle \Psi_0(x, \phi+\nu t) \\ &= \int_0^{2\pi} d\phi e^{i(n-m)\phi-i\nu mt} \Psi_0(x, \phi+\nu t)/2\pi \end{aligned}$$

これらを基に例えば、位相の敏感性を捉えるような MI をつukれないか？

$$R = I(\sigma_E, \sigma_0)/\min(S(\rho_b), S(\rho_a)) \quad (38)$$

で情報損失の割合を特徴づける。 $\sigma_0 = \rho_a \times \rho_b$ ($\rho_b = \Lambda\rho_a$) で $\sigma_E = \sum_\lambda \lambda|\lambda\rangle\langle\lambda| \times \Lambda|\lambda\rangle\langle\lambda|$ または Λ は何らかの操作である。当然 $0 \leq R \leq 1$ を満たす。

ちなみに、大矢氏は、

$$R = I(\sigma_E, \sigma_0)/S(\rho) \quad (39)$$

という量を通信仮定の効率として用いている。unitary 発展では上と同じものになる。

phonon が位相固有状態から出発した時間発展の場合、純粋状態のブラケットで作られる密度行列に関して、phonon の情報を trace out しても電子に関して純粋状態 ($|\Psi(x, \phi_0+\nu t)\rangle \langle\Psi(x, \phi_0+\nu t)|$) になるのでその von-Neumann entropy は依然 0 である。

これに対して、決められた number state 状態に発する波動関数から時間発展で作られる純粋状態のブラケットで定義された density operator

$$\int d\phi d\phi' |\phi+\nu t\rangle \Psi(x, \phi+\nu t) \langle\phi|n\rangle \langle n|\phi'\rangle \Psi^*(x', \phi'+\nu t) \langle\phi'+\nu t| \quad (40)$$

の phonon に対する trace を取ると $\int \langle\phi''|\dots|\phi''\rangle d\phi''$ と積分して

$$\text{Tr}_{\text{phonon}}\rho(t) = \frac{1}{2\pi} \int \Psi(x, \phi)\Psi^*(x', \phi)d\phi \quad (41)$$

となり、通常縮約された電子状態の密度行列になる。この von-Neumann entropy は河原屋で議論したように理解しやすい。この場合、系の entropy は phonon を切る事によって 0 から突然増えたように見える。時間発展させながら、平均をとっていくと徐々に増大する様子が観測されないか？ 初期過程は t-linear か。このとき phonon の entropy も t-linear で増大か？ (実際の数値計算では、モンテカルロを効率よく使えば平均値の計算は容易になるかもしれない。以前の計算の ϕ 依存性とどう結びつくか??) これは phonon と電子の entanglement が起きているため？

density operator に partial trace をとって、粗視化したとたん MI が最大 entropy からどれだけ減るかを定量化したい。

4.2 Ohya Entropy

例えば、phonon の情報を切ると MI がどれほどになるか？ 少し一般的に考える。電子も phonon も mixed state。例として

$$\text{composite density - operator at } t = 0 \quad \rho_0 = \sum_{\phi} g(\phi) |\phi\rangle\langle\phi| \rho_{el} \quad (42)$$

$$\text{composite density - operator at } t = t \quad \rho_t = \sum_{\phi} g(\phi) |\phi + \nu t\rangle\langle\phi + \nu t| \rho_{el}(t, \phi + \nu t) \quad (43)$$

$$\text{where electron density operator is} \quad \rho_{el}(t, \phi + \nu t) = U(t, \phi + \nu t) \rho_{el} U^+(t, \phi + \nu t) \quad (44)$$

$E_{\phi} = |\phi\rangle\langle\phi|$ として非相関、相関合成密度は

$$\sigma_0 = \sum_{\phi} \rho_{el}(\phi) g(\phi) E_{\phi} \times \sum_{\phi} \rho_{el}(t, \phi + \nu t) g(\phi) E_{\phi + \nu t} \quad (45)$$

$$\sigma_E = \sum_{\phi, \mu} g(\phi) \rho_{el}(\mu) |\mu\rangle\langle\mu| E_{\phi} \times U(t, \phi + \nu t) |\mu\rangle\langle\mu| U^+(t, \phi + \nu t) E_{\phi + \nu t} \quad (46)$$

を基に時間発展の MI が一応計算できる。電子密度行列の Shatten 分解を

$$\rho_{el} = \sum_{\mu} \rho_e(\mu) |\mu\rangle\langle\mu| \quad (47)$$

とした。これを基にすれば一応大矢のエントロピーは計算できる。電子の $t = 0$ での密度行列は例えば

$$\rho_{el} = \frac{1}{N} \sum_i^N |i\rangle\langle i| \quad (48)$$

とサイト対角状態を念頭に置くと計算が楽である。これは、電子 phonon を全部 dynamical に考慮した時の entropy。

上記の表記で、大矢エントロピーを計算すると

$$S(\sigma_E, \sigma_0) = \sum_{\mu, \phi} g(\phi) \rho_e(\mu) S(\Lambda_t^* E_{\mu, \phi}, \Lambda_t^* \rho) \quad (49)$$

$$S(\Lambda_t^* E_{\mu, \phi}, \Lambda_t^* \rho) = \text{Tr} \Lambda_t^* E_{\mu, \phi} \{ \log(\Lambda_t^* E_{\mu, \phi}) - \log(\Lambda_t^* \rho) \} \quad (50)$$

ここで

$$\begin{aligned} \text{Tr} \Lambda_t^* E_{\mu, \phi} \log(\Lambda_t^* E_{\mu, \phi}) &= \sum_{\mu_1, \mu_2} \langle \mu_1 | \mu, t, \phi + \nu t \rangle \langle \mu, t, \phi + \nu t | \mu_2 \rangle \\ &\quad \cdot \log \langle \mu_2 | \mu, t, \phi + \nu t \rangle \langle \mu, t, \phi + \nu t | \mu_1 \rangle \end{aligned} \quad (51)$$

$$\begin{aligned} \text{Tr} \Lambda_t^* E_{\mu, \phi} \log(\Lambda_t^* \rho) &= \sum_{\mu_1, \mu_2} \langle \mu_1 | \mu, t, \phi + \nu t \rangle \langle \mu, t, \phi + \nu t | \mu_2 \rangle \\ &\quad \cdot \log \sum_{\mu_3} g(\phi - \nu t) \rho_e(\mu_3) \langle \mu_2 | \mu_3, t, \phi \rangle \langle \mu_3, t, \phi | \mu_1 \rangle \end{aligned} \quad (52)$$

(山田) ただし、 $U(t, \phi + \nu t)|\mu\rangle \equiv |\mu, t, \phi + \nu t\rangle$ とおいた。これを元に考えると、 $\rho_{el}(\mu) = const. = 1/N$ と site 表示をとっても全てのサイトからの摂動付時間発展、摂動無し時間発展が必要ということです。さらに、phonon が mixed state ということからくる、 ϕ 平均が加わる。十分な数値計算は苦しいかも??? 検討が要りますね。しかし、電子を混合状態に用意すれば、phonon は位相状態でもいいのではないかと? \ \

(池田) phonon が純粋状態だと多分だめでしょう。一度計算してみてください。

(山田) 電子の $t = 0$ での vN-entropy が出てくるだけではなんにもなりません。直感的にも当たり前で、phonon は租視化されないといけないということ。 \ \

ところで位相に関する敏感性を相互情報量で捉えるのはあかんかなあ?

(山田 030820+030901)

これも、デジャブです。メモしておきます。計算に関しては、エントロピーにしても密度行列の計算をすることになるわけですから、以前議論した相関関数と同じようなことになるわけです。あのときは、多色摂動による効果をノイズによる cut との analogy で考察していました。

これを kicked Anderson の単色摂動でより鮮明にできないか、という問題にもなります。結局、計算でカギになる量として、 $t=0$ で電子が局在状態 $\rho_0 = |\mu\rangle\langle\nu|$ とし phonon を作用固有状態とし、条件付密度行列 $\rho_{\mu\nu}$, の $\text{Tr}_{\text{phonon}} \dots$ をとったものや時間平均をしたものということになります。そもそもエントロピーはこういう量から作られるマクロな量です。ミクロに見て現象を表現するもっとわかりやすい量は、この密度行列の対角成分の時間変化と非対角成分の時間変化（減衰の仕方）ということではないでしょうか。「よく出てくるエネルギー緩和（縦緩和）、位相緩和（横緩和）に対応させると、密度行列の対角要素の緩和がエネルギー緩和、非対角要素の緩和が位相緩和であり、この緩和に時間スケールの違いが存在し $\tau_{\text{phase}} \leq \tau_{\text{energy}}$ が確認できるのではないかと。いづれにしろ、具体的に計算する量として相関関数談義のときにワイルの定理などを利用して計算をやればどうか、と議論したものと同じになります。」

$$\rho_{\mu\nu}(t) = \int_0^{2\pi} d\phi U_t \rho_0 U_t^\dagger \quad (53)$$

(池田 030920) kicked Anderson model を使って片端からいろんな entropy を計算するのも面白いかもしれない。entropy の観点からあのモデルの異常性を探る。局在状態を base にするのは賛成。entropy の生成率が一定になる事が示せないか?? ある時刻 t で Shatten 分解してそれからの平均 vn-Entropy 生成なんてえのがいいかなあ。

ところで、量子エントロピーと古典エントロピーは異なるはずですよええ。つまり t-linear で増えるにしても、

量子エントロピーの増大係数 < 古典エントロピーの増大係数

となってしまうべきじゃないのでしょうか? それ为非対角要素に関係するはずと思わんですか?

(山田 031026) 確かに、非可換性から量子と古典の違いが生じるとすると、この対応が自然な気がします。もしかすると、パラメータの設定によっては「量子 > 古典」の場合もあるかもしれないかもしれませんが?? また、気になるのは、kicked Anderson で見るには古典の意味(対応)が不明なこと。

4.3 位相敏感性の計量

phonon の位相に対する波動関数の敏感性という chaos 特有の面白い現象の敏感定量に使いた

い。

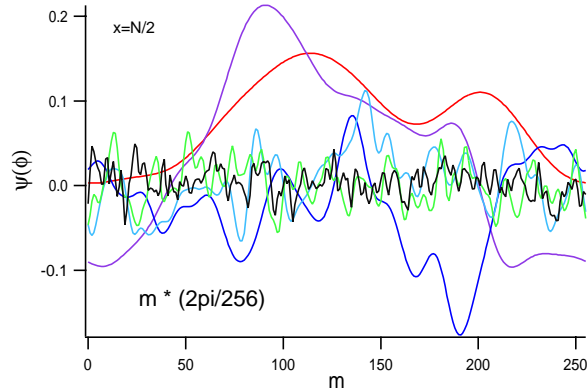


Figure 1: *zu6.eps* $x = N/2$ での振幅の実部の摂動初期位相に対する変化。時間を 4 倍、4 倍と 4^6 まで増やして色を変えてみている。1 サンプル。 $t \rightarrow \infty$ で非解析的なものを有限時間近似している。自然境界関数を解析関数近似して、数値的に自然境界をみる。

(河原屋 031122) 位相情報を粗視化することによって、発生する不確定性をエントロピー生成で定量化できないかという素朴な問題を考えよう。位相 ϕ を粗視化する操作によって ρ が $\Lambda^* \rho$ に変化したとすると生成エントロピー eq.(20) は：

$$H(\Lambda^* \rho / \rho) = \sum_{\lambda} \lambda S(\Lambda^* |\lambda\rangle \langle \lambda|) \quad (54)$$

が生成される entropy である。こういう量によって発生する entropy を計量する事によって、位相情報を塗りつぶす事による情報損失を計量できる。代表例として全初期位相 ϕ に発する波動関数が分かるとすれば、作用固有状態に発する波動関数は $\rho = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|, |\Psi(t)\rangle = \int d\phi |\Psi(x, \phi, t)\rangle \langle \phi|$ になる。この場合を例に考えよう。位相情報を塗りつぶす操作を Λ_N^* としよう。この操作によって精度 $2\pi/2^N$ 以下の位相情報が消えたとする。純粋状態から出発するこの操作によって発生する Entropy は von-Neumann entropy そのものであって、

$$H(\Lambda_N^* \rho / \rho) = S(\Lambda_N^* \rho) \quad (55)$$

である。(この場合、 Λ_N^* は位相情報の塗りつぶしを表す。) 塗りつぶす操作として ϕ, ϕ' を明示的に書いて $\langle \phi | \rho | \phi' \rangle$ となる密度行列を $2^N \times 2^N$ のブロック行列に分解して各ブロック行列の対角成分について trace を取る。かくして m ($1 \leq m \leq 2^N$) 行、 n ($1 \leq n \leq 2^N$) 列の粗視化行列成分 $\langle m | \rho | n \rangle$ が求まりこいつのフォンノイマンエントロピーが求めるものになる。 $N = 0$ の場合が

$$H(\Lambda_0^* \rho / \rho) = S(\text{Tr}_{\text{phonon}} \rho) \quad (56)$$

phonon に関して trace をとった密度行列の entropy である。 \ \

4.4 妄想: $\Psi(\phi) \rightarrow \Psi_m$ 指数減衰の特異性

(池田 030807) かえりみれば位相 ϕ_0 に発した状態は eqn.(37) $|\phi_0 + \nu t\rangle \rightarrow \Psi(x, \phi_0 + \nu t)$ になります。そして係数 $\Psi(x, \phi_0 + \nu t)$ は ϕ_0 のモーレツに敏感な関数になるわけだ。こんなすばらしい材料をもってながらそれを量子的に料理する方法が無いのはなんとも遺憾でっせ。これをなんか通信チャンネルにして phonon の位相情報をこわす。すると状態のもつた情報量が消えてしまう(相互情報量 0)。そのこわれ方で位相に対する鋭敏さを特徴づけられないか?

更に妄想はふくらむ。いま phonon の number-state ladder(基底状態: $n = 0$) から出発して波束が時間発展したとしてみよう。実際、位相表示の波動関数 $\Psi(x, \phi_0 + \nu t)$ の Fourier 変換

$$\int \Psi(x, \phi + \nu t) e^{-im\phi} d\phi \Rightarrow \Psi_m \quad (57)$$

が number state の m 成分振幅である。一方、これを係数にして

$$\sum_m \Psi_m e^{-im\phi} = \Psi(\phi) \quad (58)$$

は元の ϕ -表示波動関数に戻る。この状態で ϕ を複素化するとそれは波動関数の複素への解析接続となるはずである。想像だが Ψ_m は $m = 0$ 近傍では Gaussian だが $m = 0$ から十分離れると exp 的に減衰しているのではないか? どうですか山田氏? もっともランダム系では綺麗な指数減衰は見えにくいだろうがサンプル平均(実行は難)をすればはっきりするかも。減衰定数が収束半径を与える。\\

(山田 030810) 以前、kicked Anderson の使用動機は、上記のような作用空間での拡散描像を確認したいということに一端がありました。つまり、指数関数的かベキ的な減衰を見れないかということから始めたわけです。 ϕ 依存性の構造がフラクタル的ならばベキ的減衰を期待したわけですが、いまのところほぼ「ランダム」だったわけです。(x をかえても、 $Im\Psi, |\Psi|$ をみても同様。) これを、実際 F-変換したデータもあったんですが、現在搜索中。\\

(山田 041020) 典型的な初期位相 ϕ 依存性の時間変化が *zu6.eps* である。モデルは kicked Anderson で $x^* = N/2$ サイトでの波動関数の実部を ϕ 空間 (2π) を 2^8 分割。摂動強度 $\epsilon = 0.1$ 。念のため、ハミルトニアンは以下のとおり。 $L = 1, \epsilon = 0.1(or 0.2), \Omega = 0.8$

$$H_0(t) = T(\hat{p}) + \sum_n |n\rangle V(n) \langle n| \sum_m \delta(t - m), \quad (59)$$

$$H^{osc}(t) = H_0(t) + \sum_n |n\rangle \frac{\epsilon V(n)}{\sqrt{L}} \sum_j^L \cos(\Omega_j t + \phi_j) \langle n| \sum_m \delta(t - m). \quad (60)$$

(池田 030817) なるほど。デジャブってわけか。でも少しは進化してるように思いまっせ。ところで、ランダムってどういう意味かい? 数学的に有限時間でフラクタルはむろんあり得ないし、ベキ減衰もあり得ない。時間無限大では ϕ 依存性の構造がフラクタル的である事と有限時間での作用空間での指数関数的減衰はまったく矛盾しない。KAM トーラスがそうになっている。但し波動関数が収束しないだろう。\\

数学的には、実変数 ϕ に関して波動関数は C^∞ 級ゆえ、波動関数は実軸を含む有限の複素領域で解析的であり、よって Fourier 級数である Ψ_m は

$$|\Psi_m| = \left| \int_0^{2\pi} e^{im\phi} \Psi(\phi) d\phi \right| < const.e^{-\gamma m} \quad (61)$$

であることはすぐに証明できる。(積分経路を実軸からそれに平行な複素経路に変更すればよい。) ここに ρ は収束半径である。従ってこれは絶対に観測されねばならない。

もっとも指数関数より早く落ちればいいので、ひょっとして central part 同様ガウス関数のまま落ちる?? そんなアホな。だって古典の場合でさえ、分布の裾は大数の法則が効かないんだぜ。\\ともかく、一般に十分滑らかな、関数の F-級数展開係数が指数関数的に落ちる事は、しょっちゅう経験する事である。\\

(山田 030820) 結局数値実験の結果: *zu7.eps* をみよ。位相敏感性の F - 像を log をとってからサンプル平均したもの。(サンプル平均してから対数をとるよりも、きれいになる。) 河原屋で見たものより、きれいです。これくらいなら、ガウス域と指数域を分けられるかもしれません。すくなくとも、裾野のほうを指数関数 fit して指数を評価できると思います。ただ、長時間ほど、位相刻みが足りないので、満足いくためにはより長時間計算が必要。すぐ、一ヶ月のオーダーになります。*zu7* のデータは、 $N = 2^{12}$, 時間は $t = 4^6$ までのものを用いている。

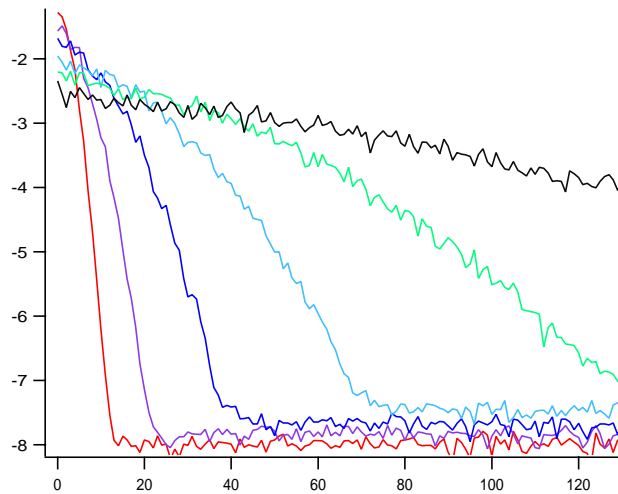


Figure 2: *zu7.eps*: $\langle \log |\Psi_m| \rangle$ versus m . サンプル平均 10 個。長時間対応部分ほど数値計算の精度が居る。 ϕ -依存性を $2^9, 2^{10}$ と mesh を細かくして信憑性を check する。

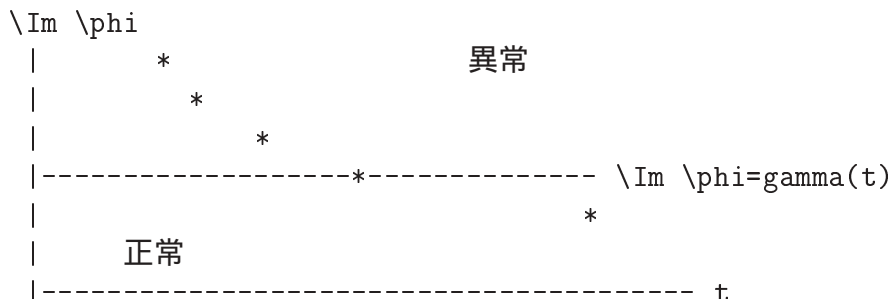
m が大きい極限で常に指数減衰を示す傾向が判明した。

$$\begin{aligned} |\Psi_m| &= const.e^{-\gamma(t)m} & \text{for } |m| \gg m_c(t) \\ |\Psi_m| &= const.e^{-m^2/D_{ph}t} & \text{for } |m| \ll m_c(t) \end{aligned} \quad (62)$$

領域を別ける境 $m_c(t)$ が時間とともにどう変化するか? $\gamma(t)$ が時間とともにどう小さくなるか? $x = m/\sqrt{Dt}$ と scale すれば裾の指数減衰はどう見えるか? 完全に $D_{ph}t$ で scale されるのか?(時間に依存した自然境界に対応) といった問題はこれからの問題である。\\

4.5 特異性

(河原屋 031120) むろんわざわざ ϕ 表示を m 表示に直し解析接続するようなまだるっこいことする必要もないかも知れない。外力位相 ϕ を複素数にしておいて wave packet を走らせれば、あるステップで波動関数に異常が発生(おそらく発散)するような $\text{Im}\phi$ が各 $\text{Re}\phi$ に対して存在するのではなからうか? むろんあつという間に指数関数的に発散し、規格化不能になろう。しかしこの発散を再規格化しつつ ($\text{Im}\phi$ が同じものは同じ規格化) $\text{Re}\phi$ を固定して $\text{Im}\phi$ を scan して



波動関数を運転すると、上図の様に波動関数に異常が見られるラインにぶつかると思われる。これが自然境界になってるはず。ここで一体何がおこるのか???? 対角項に複素ポテンシャルが入り、unitary ではなくなる。

全貌をみようとするれば、 $\text{Im}\phi$ を $\gamma(t)$ より少し小さめにしておいて固定し t ステップまで運動させ $\text{Re}\phi$ で scan すればよい。 ϕ のどんな関数がみえるのだろうか?

散逸が発生してしまった後は、有限時間で観測するという <フィルターをかけた観測> が波動関数を regularize しているという事かもしれない。古典カオスではそういう概念はないが量子論ではある!!!

おそらく散逸が発生した状況では波動関数の解析性は時間無限大で無くなっており(即ち定常解は ϕ 表示で特異的、すなわち Hilbert 空間から溢れてしまった。)それに向かって有限時間での収束半径が漸減する事になるのであろう。\\

- エントロピーの鋭敏さと特異性を関係づけられれば、閉じた量子系での非可逆過程論の動的モデルになる。

- 系を純粋状態に用意する事は可能である。系を発展させる。明らかに <散逸> は発生している。しかしエントロピー (von-Neumann の意味で) は 0 である。熱はどこに行った???? これは Annals の論文の conclusion でも発せられている最大の疑問だ。\\

- ensemble 平均をとるという操作はエントロピーにどう影響するのか? この操作は統計演算子による trace と解釈する事もできるが。

5 思いつき

5.1 位相時間発展のマルコフ化と波動関数のゼロ点

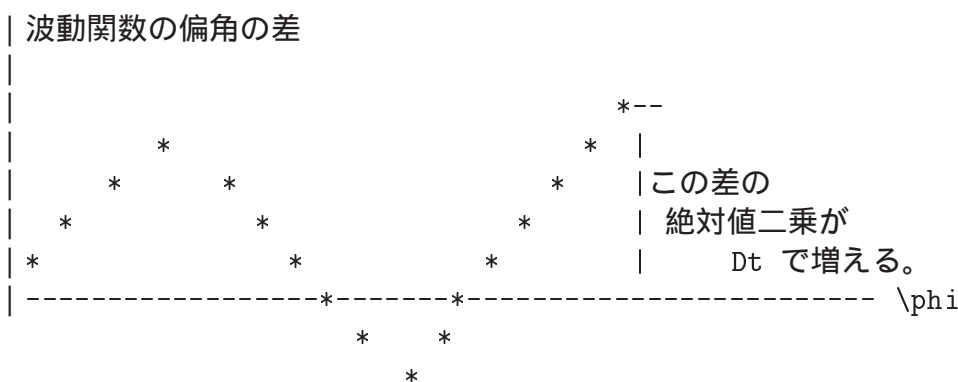
ずばり質問です。Anderson map の波動関数を phonon の位相 ϕ の関数 $\Phi_n(x, \phi)$ と見たときその実部 $Re\Phi_n(x, \phi)$ (虚部でもいい) の ϕ 軸上でのゼロ点の数は概ね $n^{1/2}$ (n はステップ数) に比例してふえるのでしょうか? もしそうならば位相差の発展過程でエントロピー生成がおきていると見なす事ができるのではないかと思えるのです。\\

波動関数を $\phi = 0$ と $\phi = \pi$ の極端に離れた 2 点で観測します。そして波動関数の位相差 $\theta_n = \arg\{\Phi_n(\pi)/\Phi_n(0)\}$ (注: 生の Φ ゆえ、これは complex) を観察したとするとそれは拡散過程になっていると思われま。即ち

$$\langle \theta_n^2 \rangle = D_\theta n$$

です。平均は電子側初期波束のアンサンブルでとります。(この位相差は $\phi = 0$ から $\phi = \pi$ までの波動関数を連続的に観察する事によって、容易に計算できます。) 適当な step 間隔で見ると、 θ_n の運動は Markov 的な酔歩運動してるのではないのでしょうか? Markov 的な酔歩運動が起きてるならそこで entropy 生成が起きている筈です。

(池田) 非常に見事にできています。 $\arg\Psi(x, \phi)/\Psi(x, \phi = 0)$ (x は電子座標) が Brown 運動してることは間違いなさそうです。つまりつまり波動関数の位相差がのたうち回る。



時間連続な系で想像すると位相差が酔歩運動してるのが連続的に観察されるってこっす。

上の式を認めれば、位相差は $n^{1/2}$ で増えますから、波動関数の実(虚)成分の 0 点は概ね $n^{1/2}$ で増加するでしょう。これは正しいですか\\

なるほど。実は、昔(7, 8年前)摂動なし(だったと思いますが)波束の node 数の増大の時間変化を追って拡散を特徴づけようと試みたことがあります。つまり、平均二乗変位で使うのは振幅の情報のみなので、位相の情報から周期系との違いを特徴づけたい、というのが動機でした。 $n^{1/2}$ で増えていき飽和したような気がしますが、調べ直さないとはっきりしません。このコメントは勘違いがありました。このとき観たのは x 空間での位相変化でした。(関連はあるでしょうが。) また、ふと思ったのが、 ϕ 空間の位相増大のマルコフ化にしても、一般には表示に依存するわけです。適当に選んだどんな表示にしてもそれが確認されるべきですね。\\

(河原屋 031120+041020) 最近の計算によって節の数 (Zero) が予想どおり

$$Zero \propto \sqrt{t} \tag{63}$$

で増えてゆく事が判明した。図 (zu8.eps) をみよ。河原屋でも見た拡散の t 依存性です。赤、青は実部と虚部に対応。(b) は log-log plot。ここでは、zu6, zu7 と同じく kicked Anderson モ

デルでの拡散は波動関数について節数の変化を plot してある。 $Z_{\text{ero}} = k(\epsilon)\sqrt{t}$ に対する係数 k の系統的摂動強度依存性が観測されるかもしれない。節の数に変え極値の数で計算しても傾向は同じ。

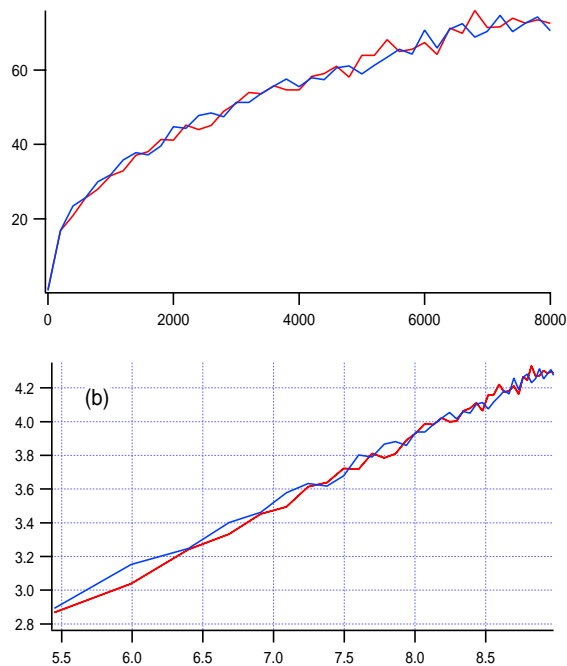


Figure 3: *zu8.eps* 節点の数 versus 時間. サンプル 10 個. kicked Anderson

また、ランダムなサイトのエネルギー列を二元周期系 $(v, -v, v, -v, v, \dots)$ にかえて、同様に節数をみると、短時間に 10 くらいまで増大して停滞することが観測される。これは、拡散が Ballistic にあつという間に生じて、境界の影響で飽和する事とどう関わるか。 *zu9.eps(b)* をみよ。(図が行方不明、そのうち取り直します。) (a) は Anderson の場合も含めた、平均二乗変位の変化を示す。

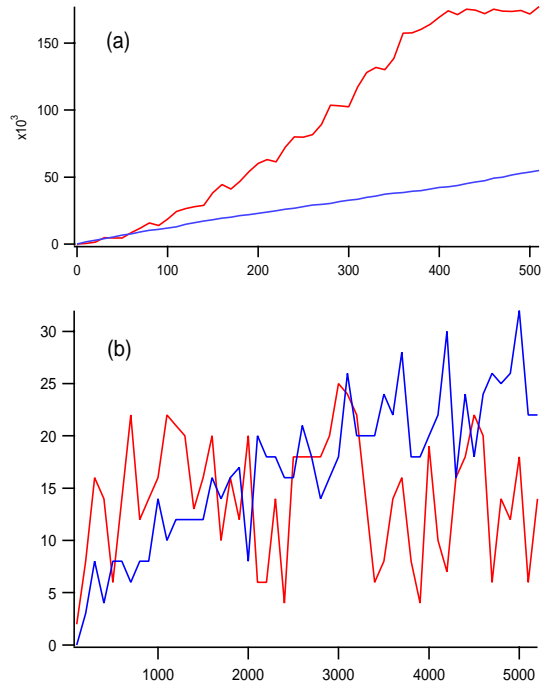


Figure 4: *zu9.eps* 節点の数 versus 時間. 短時間データ. サンプル 1 個. 赤は 2 元周期系、青は Anderson. (a) は平均 2 乗変位. 横軸 (時間) は (a) が正しい.

この事は次の事実とも consistent である. 即ち phonon- m 空間では拡散がocこり

$$\langle\langle |\Psi(x, m, t)|^2 \rangle\rangle_x \sim e^{-m^2/D_{ph}t} \quad (64)$$

なのであるが ϕ の相関関数にもこれは反映されて当然

$$\langle\langle \Psi(x, \phi, t)^* \Psi(x, \phi', t) \rangle\rangle_x = e^{-(\phi - \phi')D_{ph}t} \quad (65)$$

となる. ϕ の相関距離は $1/\sqrt{t}$ で減る. 相関を支配するのはゼロ点の間隔であろう. よってゼロ点の数が \sqrt{t} で増える事. ゼロ点の位置がランダムになる事を強く示唆する.

(池田 030920) そもそも、なにをいいたくてこういう議論をしてるかと言えば、もう少し付け加えると ϕ を 0 から 2π まで変えて波動関数の一点の位相 $\theta_t(\phi)$ (t はステップ) をみるとそいつは ϕ の関数として増減をくり返し $\phi = 2\pi$ で元に戻る. その deviation は $\phi = \pi$ あたりで最大になるんだろうが、

```

\theta
|
|      *
|     * * *
| *-----*----- \phi
|
|           *      *
|          * * *
|
|           *      * *

```



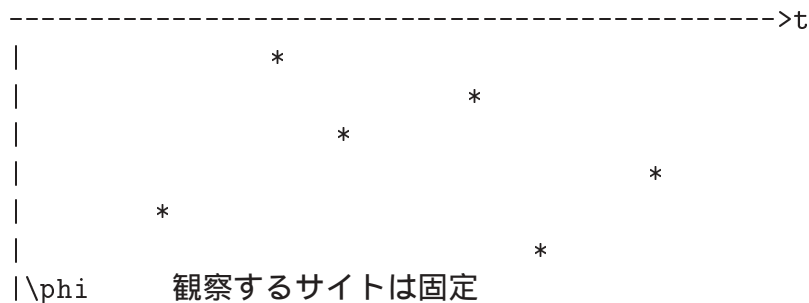
図のように蛇みたいにならねている場合、距離みたいなもの $\int_0^\pi |d\theta_t(\phi)/d\phi| d\phi$ は t とともに linear に増えるが、位相差 $\int_0^\pi (d\theta_t(\phi)/d\phi) d\phi = \theta_t(\pi) - \theta_t(0)$ はといえば拡散的

$$\langle (\theta_t(\pi) - \theta_t(0))^2 \rangle = D_\theta t$$

$\langle \rangle$ は site 平均、となるだろうって事です。ひもの長さは t に比例するがのたうちまわるのでひもの両端の長さの平均は \sqrt{t} になる。 ϕ を N 分点に粗視化して、 ϕ_n の位相を $\theta_t(n)$ とすると適当に粗視化すれば $\theta_t(n)$ はあたかも独立変数と見なせて一ステップ当たり $\pm\Delta\theta$ 変化するがその変化は確率的で + に進むも - に進むも $1/2$ の確率でおきているという一番杜撰な確率モデルでモデル化できるようなブラウン運動してるんじゃないだろうか？ 量子論では波動関数に関する二乗平均 (例えば波束の空間拡散) は計算可能だが、直接に Brown 運動をみれる事はまずないと言っていい。軌跡が存在しないから。しかし、上の例は量子論としては珍しくも Brown 運動が \langle 軌道的に \rangle 見えてる例になってるんじゃないか？ だからそれを使うとちょうど古典カオスが粗視化によって情報生成 = 軌道パターンの多様性が定常的に生成される様相 を見せたように、時空粗視化によってマルコフ化と時 (t) 空 (ϕ) 的多様さ生成している事が直接に示せるんじゃないだろうか？ じゃあその意味はなんだろう?? という問題提起です。連続時間なら、わずかの ϕ のずれで、偏角のおおきさの変化の時間依存性はどうなるか？

5.2 位相 slip

ここで以前高橋君とやっていて、彼がみつけた時間摂動量子カオス系での面白い現象を思い出しました。我々の場合に翻訳するとこうなります。もし時間連続な系を Anderson map の代わりにとれば時間的に連続的に θ_t ののたうちまわりが観察される。この場合連続観察すると位相 $\theta_t(\phi)$ の slip が観察されるのです。つまり (t, ϕ) の関数として位相 $\theta_t(\phi)$ を観察すると、位相が 2π 不連続に飛ぶような点がポツポツ現われるのです。 (t, ϕ) でその点を囲む経路を考えて連続的に辿ると、位相は連続的に 2π 変化するのですが、点をよぎるような経路に沿って進むとその点上で位相が 2π 不連続変化しており、むしろ波動関数そのもの $\Psi(x, \phi, t) = |\Psi(x, \phi, t)| \exp^{i\theta(x, \phi, t)}$ は (ϕ, t) に関して連続なのでその点では振幅が 0 にならざるを得ない。つまり波動関数の 0 点になってるという訳です。そういう位相 slip が時間連続系ではランダムにおきておりそれが位相の Brown 運動の底にあると思われる。むしろ Anderson map ではそれが観察できませんが、結果的にそれに相当する事がおきているかもしれない。Phase defect のあるところで回転数をかせぐ。またこの defect の並び方がランダムでガラス的。



位相差 θ の空間を例えば $(0, \pi), (\pi, 2\pi)$ に祖視化して $(0, \pi)$ にくれば 0, $(\pi, 2\pi)$ にくれば 1 と coding すれば、時間発展の binary coding が 0,1,0,0,1..... のようになりますが、様々な初期波束に対して、コード列を採集して異なるコード列の数を count した時(もっとも大変長い計算が必要で実際できるかどうかは???) 異なる code を持つ軌道の数 n (ステップ数) と共に、指数関数的に増えるならばその数の自然対数を n で割ったものが、エントロピー生成率という事になります。むろんここでいう entropy は <量子力学的に正しい> entropy ではなく、非常に conventional な entropy ですが、それでも、波動関数が複雑さを生成する傍証にはなると思われます。

(山田 041020) kicked Anderson は離散時間、離散空間という特殊なモデルといえるかもしれませんが。しかし、この 4 章、5 章での結果に対応するものを”そのうち”五十嵐君が、連続時間、連続空間の double-well 系で check する予定。Ghern 数も境界条件による波動関数のねじれ回数ゆえ、類似の情報をもつか。

6 再び VN -Entropy

6.1 思いつき 2

これは von-Neumann entropy に関するものですが、純粋状態から出発した時の entropy はむろん 0 です。

$$S = -\text{Tr} \rho \log \rho \quad (66)$$

とする限り。しかしそれはベストな観測をした時に 0 になるだけです。任意の観測量 A を観測してその固有値 A_i が得られる確率を $P(A_i)$ とするならば、

$$P(A_i) = \langle A_i | \rho | A_i \rangle \quad (67)$$

なので、このような観測によって観測者は系の entropy を

$$S(A) = - \sum_i P(A_i) \log P(A_i) \quad (68)$$

と観測するでしょう。(注：一般に $\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A) = \sum_{n,m} \langle n | \rho | m \rangle \langle m | A | n \rangle$ だが、 A の固有状態をベースにとれば $\langle A \rangle = \sum_n \langle n | \rho | n \rangle A_n$ となる。) これはむろん 0 ではなく 0 という最低値を観測するのは

$$A = \sum_k A(\lambda_k) E_{\lambda_k} \quad (69)$$

のように A が ρ と可換な非常に希な場合だけです。 $(\rho = \sum_k \lambda_k E_{\lambda_k})$ いいかえれば E_{λ_k} という < Shutten basis > が設計できなければ、entropy は 0 ではないわけです。そこで次のようなプロセスを考えます。

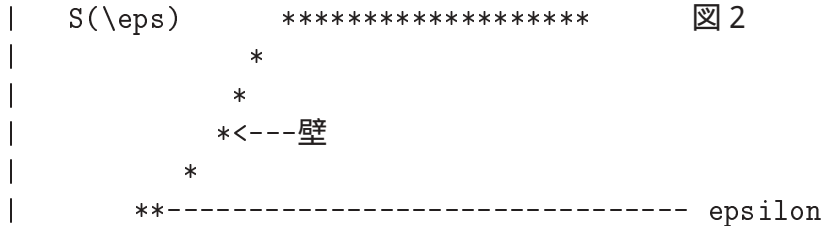
6.2 ノイズによるエントロピー生成

われわれが Shutten basis を設計できたと仮定しましょう。それなら 0-entropy を count する筈です。ところがこの装置にバグがあって Shutten basis が歪んだとします。あるいは全く同じ

事だが、Shutten basis にはバグはないのだが ρ を通信チャネルで移送する過程で雑音が入り $\rho \rightarrow \rho' = \Lambda^*(\epsilon)\rho$ になってしまったと言ってもいい。それをもとの Schutten basis で観測すると

$$S(\epsilon) = - \sum_k P'_k \log P'_k \quad (70)$$

がエントロピーになる ($P'_k = \langle \lambda_k | \rho' | \lambda_k \rangle$)。このエントロピーは ϵ が 0 では 0 だが有限の値になると急激に大きくなるでしょう。つまりちょっとでもミスがはいると、



図のようになる。これを entropy の壁とよべば、壁の鋭さが、カオスの大きさを特徴づけるのではないかと。むしろどうい雑音を取るかには任意性があるので、普遍の見方にはならないですが例えば、phonon の位相に雑音が入ったなんていうのを考えると phonon 位相 に関する鋭敏さを特徴づけられる可能性がある。(図 2)

(山田 030901) Noise が入った場合の租視化した vN-entropy などとの本質的な違いがまだよくわかりませんが、こらの量も密度行列の off-diagonal の減衰をみる事と関わるわけですが、どのベースで見るかによって off-diagonal のあり方が違うので、面倒なんですね。もしかしたら、site ベースか局在ベースでも異なるかもしれません。

一方、全く違うが ρ が何らかの雑音にさらされて、 $\rho' = \Lambda^*(\epsilon)\rho$ になった時の条件付きエントロピー

$$- \sum_k \lambda_k S(\Lambda^*(\epsilon) E_{\lambda_k}) \quad (71)$$

を計算してみるという手もある。ここでも、phonon 位相 に関する鋭敏さを特徴づけたければ、位相に関する何らかの操作を Λ^* とすべきである。例えば位相に関して average するとか。
\\

少し物理的な過程をいう。Anderson map Hamiltonian の kick part を確率過程

$$U(\omega t + \phi_0 + \delta\phi_t) = \exp\{-iv(\omega n + \phi_0 + \delta\phi_n)/\hbar\} \quad (72)$$

としてしまう。 $n = t - 1$ まで雑音無し、 $n = t$ に於いてでだけこういう雑音が入ったとすると

$$\Phi_t(\delta\phi) = U(\omega t + \phi_0 + \delta\phi_t)\Phi_{t-1}(\phi_0) \quad (73)$$

として noise average

$$\rho' = \epsilon \int d\delta\phi |\Phi_t(\delta\phi)\rangle \langle \Phi_t(\delta\phi)| e^{-\delta\phi^2/\epsilon^2} / \sqrt{\pi} \quad (74)$$

が <汚れた> 密度行列になる。 $t-1$ では純粋状態なので条件付き entropy はこれの Von-Neumann entropy である。これは helper の位相ゆらぎを受けた系が稼ぐ entropy の最小値を表す (即ち best measurement をした時の entropy 生成である。)

これは一瞬雑音が入っただけでつまらんならば、 $t = 0$ から t まで雑音なし。 t から時間反転。但し ϵ ランダム雑音が入りっぱなしという系 ($t = 0$ までもどした系) と初期波束の間のエントロピー生成の ϵ 依存性などが考えられる。大矢の MI は共有する多様さを特徴づけるが、<条件付き entropy 生成>の方がより系の複雑性を量的に捉えられるように思う。\\ それではいっその事 $n = 0$ から $n = t$ まで ϵ 位相ランダムノイズをかけつづけた時の単位ステップ当たりの entropy 生成率 = KS-entropy が測定できないか? なんか定義できそうだ。いい加減に言えばそのような過程 $t-1 \rightarrow t$ での entropy 生成率を計算すればいい。ノイズ平均した $\rho(t-1)$ の Shatten 分解

$$\rho(t-1) = \sum_i \lambda_i(t) E_i(t) \quad \lambda_i(t) \quad (75)$$

を考え、それらの各々からの 1-step 発展した時の密度行列の t -step 雑音での平均密度行列 $\langle\langle U_t^\dagger E_i(t) U_t \rangle\rangle$ の entropy を用いて

$$\sum_i \lambda_i(t) S(\langle\langle U_t^\dagger E_i(t) U_t \rangle\rangle) \quad (76)$$

が t での entropy 生成率になりそうだがもう少し考えた方がいい。