

Typicality による平衡統計力学の 基礎付け

杉田 歩
大阪市立大学工学部

神戸大学理学部セミナー
2016年5月11日

どんな話？

- 統計力学は、マクロ系の平衡状態をある種の状態の集合(アンサンブル)に関する平均として表現する(つまり混合状態)
- 実は、平均化された状態じゃなく、平均化される前の個々の状態(純粋状態)が平衡状態を表しているともいい(Thermal Pure State, TPS)
- 元々誰が言い出した話かは不明(ボルツマン?)
von Neumann (1929)
Bocchieri and Loinger (1959)
2006 ~ 2007 あたりに幾つかの論文
- 単なる基礎付けの理屈ではなく、数値計算にも使えて実用的にも色々便利

純粋状態と混合状態

- $\rho = p_1|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + p_2|\psi_2\rangle\langle\psi_2|$

$$|\psi_1\rangle \neq |\psi_2\rangle, p_1, p_2 \neq 0, 1$$

の形で分解できる状態は混合状態

(純粋状態の確率的混合)

そうでないものは純粋状態

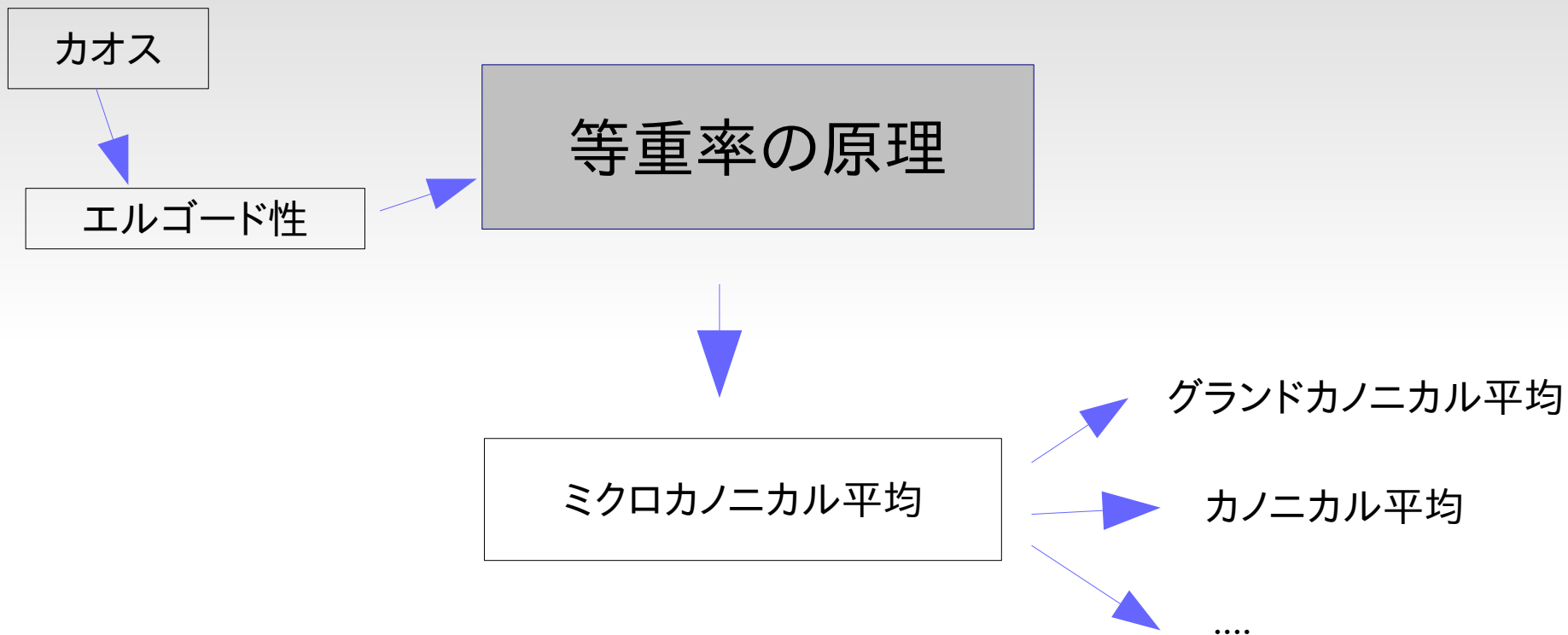
- 純粋状態はハミルトニアンによる時間発展の元では常に純粋状態

- 一般に、純粋状態の部分系は混合状態になっている。

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle)$$

$$\implies \rho_1 = \text{Tr}_2|\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \frac{1}{2}|\downarrow\rangle\langle\downarrow|$$

標準的な平衡統計力学の導出



等重率の原理: エネルギーの等しい微視的状态は、全て等確率で実現する

等重率の原理とエルゴード性

- 時間平均からミクロカノニカル平均を導く議論

エルゴード性

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(x(t)) dt = \frac{1}{V} \int f(x) \delta(E - H(x)) dx$$

(時間平均) = (アンサンブル平均)

軌道が、一様かつ稠密に等エネルギー面を埋め尽くす

→ ほぼ全ての状態が実際に出現する

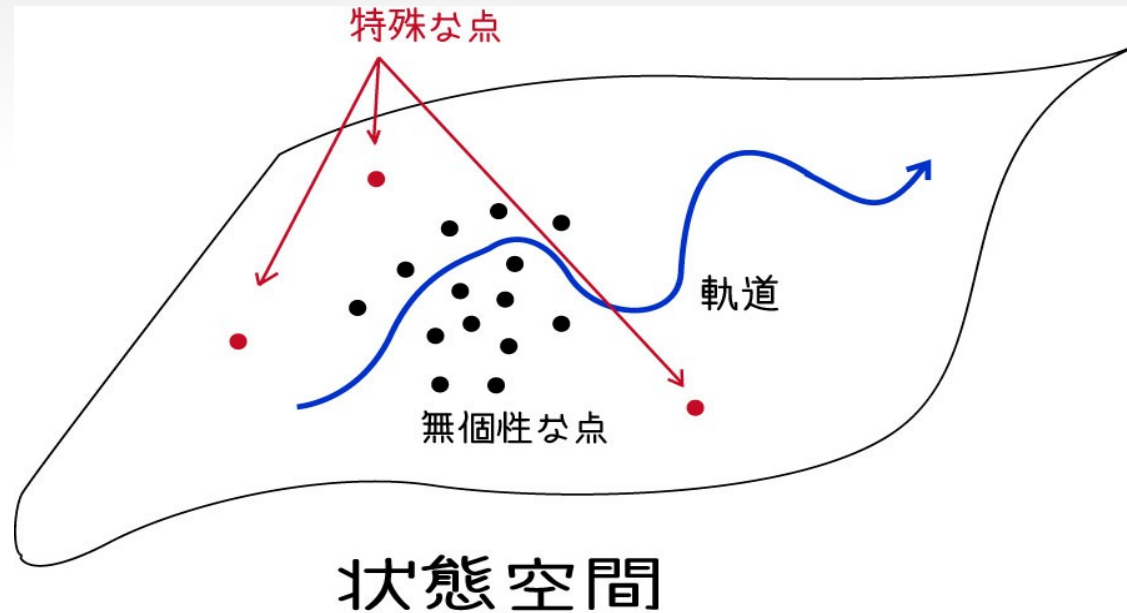
エルゴード性による議論の問題点

- エルゴード性が近似的に成立するまでに、どれぐらいの時間がかかるか？(エルゴード時間)
 - マクロ系ではとてつもなく長い！
我々が測定している間には実現しそうにない
- そもそも、我々が測定している間にエルゴード性が成立してしまうなら、非平衡状態を観察するのは不可能ではないか？
- エルゴード性が成立するには強いカオスが必要
 - 現実的にはあんまりない
そもそも量子系にカオスはない！

なぜ熱平衡が成立するのか

Typicality による描像

- マクロ系において、全ての可観測量を見ることは不可能
- 一部の物理量のみを見ると、圧倒的大多数の状態は同じに見える



- 時間平均は必要ではない
- ダイナミクスに関して強い仮定は不要

古典系と量子系の違い

複合系の状態空間



古典系(直和)

$$V = V_1 \oplus V_2$$
$$\dim V = \dim V_1 + \dim V_2$$

量子系(テンソル積) $V = V_1 \otimes V_2$

$$\dim V = \dim V_1 \times \dim V_2$$

量子系の状態空間の次元は、系のサイズに対して指数関数的に増加する

マクロ量子系の持つ潜在的な情報量

- 我々に可能な測定回数の上限
(宇宙年齢) / (プランク時間) $\approx 10^{61}$ 回

宇宙年齢 $\approx 10^{17}$ s,
プランク時間 $\approx 10^{-44}$ s

- N スピン系の密度行列の要素数 4^N

$$4^{100} \approx 10^{60}$$

状態が「似ている」ってどういうこと？

よくある考え方

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \approx 1 \quad \text{似ている}$$

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \approx 0 \quad \text{似ていない}$$

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0 \quad \longleftrightarrow \quad \begin{array}{l} \text{二つの状態を一回の測定で} \\ \text{確実に見分ける物理量} \\ \text{が存在する} \end{array}$$

$$\hat{A} = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$$

マクロ系の場合

例1

$$|\psi_1\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \otimes \dots$$

$$|\psi_2\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \otimes \dots \otimes |\downarrow\rangle \otimes \dots$$

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$$

例2

$$|\psi_2\rangle = |\phi\rangle \otimes |\phi\rangle \otimes \dots \quad \langle \uparrow | \phi \rangle = 0.999999999999$$

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = (0.999999999999)^n$$

$$(0.999999999999)^{10^{12}} \approx 2.7 \times 10^{-43}$$

マクロ系の状態の区別

考え方:

1. あらかじめ決めておいた物理量を測る
2. 状態を知った上で、物理量をうまく選ぶ

ランダムに2つのマクロ系の状態を選んだ場合、

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \simeq 0 \quad \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_1 \rangle \simeq \langle \psi_2 | \hat{A} | \psi_2 \rangle$$

1. の意味では区別不可能、2. の意味では区別可能

統計力学では普通は 1. の状況を考えるが、2. を考えないと見えない量もある。(エンタングルメント等)

密度行列とブロッホベクトル

- 量子系において、
状態が定まる
⇔ 密度行列が定まる
⇔ 全ての物理量の期待値が定まる
- ブロッホベクトル=全ての物理量の期待値のリスト
- ブロッホベクトルの L^2 ノルム
= 密度行列のヒルベルト・シュミットノルム
- 我々実際には、ブロッホベクトルの一部の成分だけを見る
- 我々が注目する成分が似ていれば、二つの状態は似た状態であると考え

ブロッホベクトルの例

1スピン系の場合

ブロッホベクトル $(\langle \sigma_x \rangle, \langle \sigma_y \rangle, \langle \sigma_z \rangle)$

$$\rho = \frac{1}{2} (\sigma_0 + \langle \sigma_x \rangle \sigma_x + \langle \sigma_y \rangle \sigma_y + \langle \sigma_z \rangle \sigma_z)$$



単位行列

トレースレス

n スピン系の場合

ブロッホベクトル $\{ \langle \sigma_{i_1} \otimes \sigma_{i_2} \otimes \cdots \otimes \sigma_{i_n} \rangle \}$ $i_k = 0, x, y, z$

基本不等式(1)

一つ物理量を固定したとき、典型的な状態に対するその期待値を考える。

マクロ系でエネルギーがほぼ E の状態を考える
(エネルギーの揺らぎは小さいとしてよい)

$$|\psi\rangle = \sum_{i \in S} c_i |E_i\rangle,$$

$$(S = \{i | E_i \in [E, E + \Delta E]\})$$

係数 c_i をランダムにとって、ある物理量の典型的な値、およびそこからズレを考える

基本不等式(2)

係数の確率分布

$$P(\{c_i\}) \propto \delta \left(\sum_{i \in S} |c_i|^2 - 1 \right)$$

→ 多次元の球面からランダムに一点をとるのと同じ
(ユニタリー変換に対する Haar measure)

平均値

$$\overline{|c_i|^2} = \frac{1}{d},$$

$$\overline{|c_i|^4} = \frac{2}{d(d+1)}, \quad d \equiv \dim \mathcal{H}_{[E, E+\Delta E]}$$

$$\overline{|c_i|^2 |c_j|^2} = \frac{1}{d(d+1)} \quad (i \neq j)$$

基本不等式(3)

物理量の期待値の平均

$$\overline{\langle \hat{\lambda} \rangle} = \frac{1}{d} \sum_{i \in S} \langle E_i | \hat{\lambda} | E_i \rangle$$

ミクロカノニカル平均と同じ

分散

$$\overline{(\Delta \langle \hat{\lambda} \rangle)^2} \leq \frac{1}{d+1} |\hat{\lambda}|^2$$

$$\Delta \langle \hat{\lambda} \rangle \equiv \langle \hat{\lambda} \rangle - \overline{\langle \hat{\lambda} \rangle}$$

$|\hat{\lambda}|$: λ の最大固有値

基本不等式(4)

チェビシエフの不等式を使って書き換えると、

$$\text{Prob} \left(\left| \langle \hat{\lambda} \rangle - \overline{\langle \hat{\lambda} \rangle} \right| \geq \epsilon \right) \leq \frac{|\hat{\lambda}|^2}{\epsilon^2(d+1)}$$

左辺: ランダムに状態を選んだとき、物理量 λ の期待値が、典型的な値から ϵ 以上ずれる確率

右辺: 区間 $[E, E + \Delta E]$ に含まれる準位の数 d は、系のサイズに対して指数関数的に増加
→ 右辺は0に収束

マクロ系では、一つの物理量に対して、圧倒的大多数の状態が同じ期待値を与える

物理量の性質(ミクロ、マクロ等)や、ハミルトニアンの性質(可積分、非可積分等)とまったく無関係に成立

物理量のクラスの選択(1)

- 統計力学の基本的対象は、マクロ物理量（ミクロ量を考えてもよいが、実験との対応をつけるには注意が必要）
- マクロ物理量は、力学量（演算子で書ける）と、非力学量（演算子で書けない、エントロピー、温度等）に分かれる
- まずは力学量のみ考える。（非力学量については後で）
- 示量変数と示強変数のどちらか一方をとればよい → ここでは示量変数を考える

物理量のクラスの選択 (2)



n サイト マクロ系

示量変数 → 局所的な物理量の和

それらの揺らぎ等も考慮して、「**局所物理量の m 次以下の多項式**」でかける物理量の集合 V_m を考える
($m \ll n$)

低次の多項式に対する「典型性」不等式

局所的ヒルベルト空間の次元
(系のサイズによらない)



$$\overline{|\lambda_m - \bar{\lambda}_m|^2} \leq \frac{N_s^m}{d+1} \dim V_m \leftarrow \begin{array}{l} \text{独立な物理量の個数} \\ \text{(系のサイズの多項式)} \end{array}$$

$$\lambda_m = \left(\langle \hat{\lambda}_1 \rangle, \langle \hat{\lambda}_2 \rangle, \dots \right)$$

m 次多項式の空間に射影したブロッホベクトル

熱力学極限で右辺は0に収束!

なぜ典型性は成り立つか

- ミクロカノニカル状態と、与えられた純粋状態のブロッホベクトルの差を考える

$$\delta \boldsymbol{\lambda} = \boldsymbol{\lambda} - \overline{\boldsymbol{\lambda}}, \quad \overline{\delta \boldsymbol{\lambda}} = 0$$

$$\boldsymbol{\lambda} = (\langle \lambda_1 \rangle, \langle \lambda_2 \rangle, \dots)$$

- 一般に、 $\delta \boldsymbol{\lambda}$ 自身は小さくない
- しかし、非常に多次元のベクトルなので、そのうちの一つの成分 $\langle \lambda_i \rangle - \overline{\langle \lambda_i \rangle}$ はほぼ確実に小さい

Microcanonical TPQ

(Sugiura & Shimizu, PRL (2012))

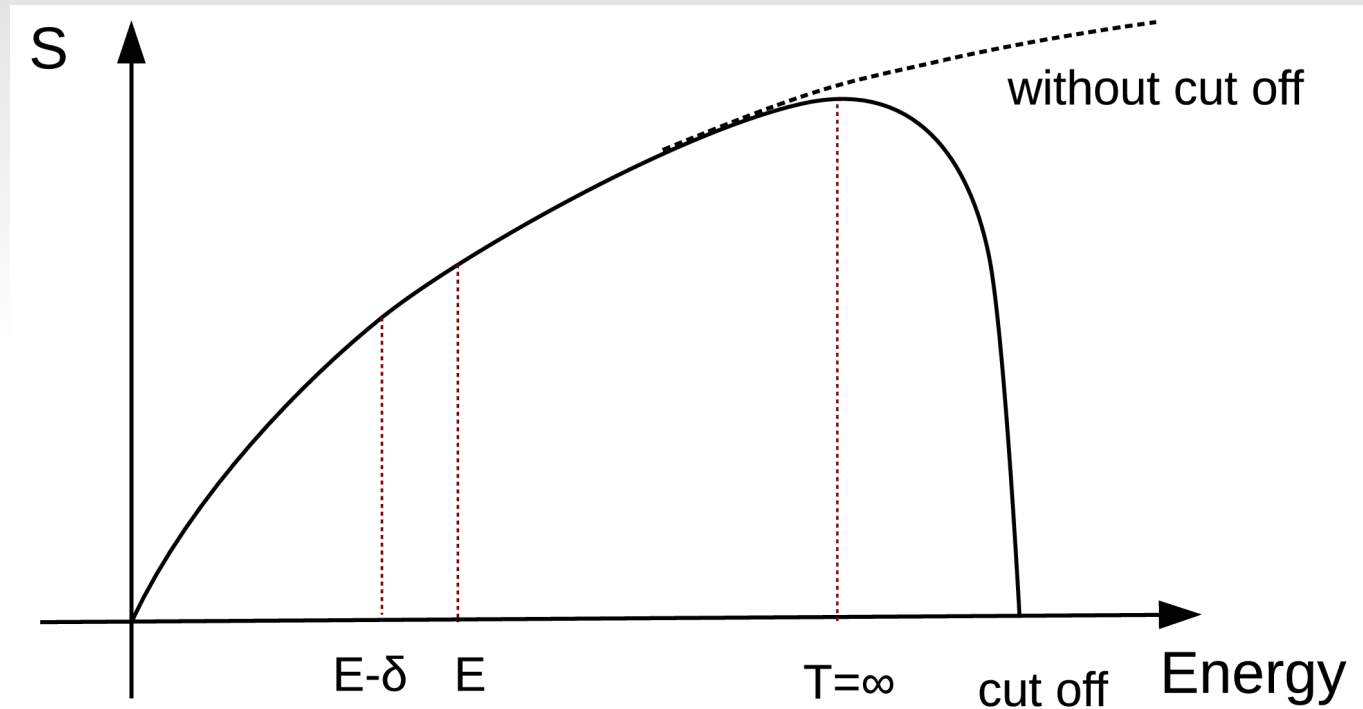
$$|\psi_0\rangle \equiv \sum_k c_k |E_k\rangle \quad \leftarrow \begin{array}{l} \text{全ヒルベルト空間から} \\ \text{ランダムに選んだベクトル} \\ \text{(基底はなんでも良い)} \end{array}$$

$$|\psi_n\rangle \equiv (L - \hat{H})^n |\psi_0\rangle = \sum_k (L - E_k)^n c_k |E_k\rangle$$

$\{c_k\}$: random coefficients

L : constant s. t. $L - H > 0$

物理系のエントロピー



準位密度

$$\rho(E) = e^{S(E)}$$

$$\beta = \frac{1}{T} = \frac{dS}{dE}$$

Canonical TPQ

(Sugiura & Shimizu, PRL (2013))

$$|\beta\rangle \equiv e^{-\beta\hat{H}/2}|\psi_0\rangle = \sum_k e^{-\beta E_k/2} c_k |E_k\rangle$$

$$|\beta\rangle = e^{-\beta L/2} e^{\beta(L-\hat{H})/2} |\psi_0\rangle$$

$$= e^{-\beta L/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{2^n n!} (L - \hat{H})^n |\psi_0\rangle$$

$$= e^{-\beta L/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{2^n n!} |\psi_n\rangle \quad \leftarrow$$

Microcanonical TPQ!

Calculation of physical quantities

- Normalization constant (partition function)

$$\langle \beta | \beta \rangle = \sum_{j,k} c_j^* c_k e^{-\beta(E_j+E_k)/2} \langle E_j | E_k \rangle \approx \frac{1}{d} \sum_k e^{-\beta E_k} = \frac{Z}{d}$$

- Mechanical variable

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\langle \beta | \hat{A} | \beta \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} \approx \frac{1}{Z} \sum_k e^{-\beta E_k} \langle E_k | \hat{A} | E_k \rangle$$

- Free energy (Nonmechanical variable)

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z \simeq -\frac{1}{\beta} \ln d \langle \beta | \beta \rangle$$

TPQ を使った数値計算の利点と欠点

- 統計力学の基本原則しか使っていないので、非常に汎用性がある
 - モンテカルロ法が使えない問題(カゴメ格子等)にも適用可能
- 行列の掛け算しか使わないので、並列計算向き
- 状態ベクトルそのものを扱う必要があるため、メモリがたくさん必要。現状スピン系だと20スピン程度が限界(しかし密度行列そのものを扱うよりははるかにマシ)

非平衡系も純粋状態で

T.Monnai and A. S., J. Phys. Soc. Jpn. (2014)

- 平衡状態から出発して、外力をかけて非平衡状態を作る

$$\rho(t) = U(t) \rho_{eq} U(t)^\dagger$$

- 物理量の期待値は、ハイゼンベルク表示の演算子に対する平衡状態の期待値として書ける
→ 状態は純粋状態で置き換えてもよい

$$\langle A \rangle = \text{Tr} \{ U(t) \rho_{eq} U(t)^\dagger A \} = \text{Tr} \{ \rho_{eq} \underbrace{U(t)^\dagger A U(t)} \}$$

ハイゼンベルク演算子

Black hole fire wall (1)

M. Hotta and A. S. PTEP(2015)

- AMPS(Almheiri, Maralf, Polchinski, Sully,2013) の議論
- ブラックホール+輻射の系が典型的な状態であるとする
→ BH+R1 は、温度 ∞ ($\beta = 0$) のカノニカル分布 (単位行列)

$$I_{BH+R1} = I_{BH} \otimes I_{R1}$$

- BH と R 1は無相関なので、境界で微分項が発散
→ 高エネルギーの壁 (Fire wall) !

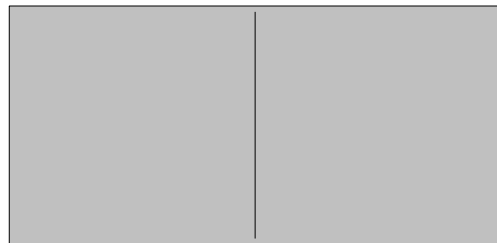


Black hole fire wall (2)

- AMPS の議論の間違い
エネルギーを無視して全ヒルベルト空間から状態を選んだこと
- エネルギーが高い状態のほうが数が多いので、ランダムに選べば高エネルギー状態が出てくるのは当然
- AMPS の議論は、horizon の性質を何も使っていない
→ 実は horizon だけでなく、全空間が高エネルギー状態

残された問題

- Haar measure を勝手に仮定したのはいいのか？
現実の状態の現れ方はもちろん Haar measure とは異なる。たとえば、平衡緩和するかどうかという問題は、実際にハミルトニアンと初期状態を決めないとなんとも言えない。
- 状態の準備と時間の矢の問題
我々にとって準備しやすい状態というのは、Haar measure で見た大小とはまったく異なる
例：気体が容器の片方だけに片寄った状態と、
5 分後に片寄る状態



まとめ

- マクロ系においてほとんど全ての微視的状态は似ている (typicality)
- カオス、エルゴード性等はあまり重要ではない
大事なのは、マクロ系のほとんどの微視的状态は、実質的に区別がつかないこと
- 統計力学は純粋状态のみで定式化できる
(エントロピー等の非力学量も計算できる)
- ある種の非平衡状态も純粋状态で計算できる
- Typicality の濫用に注意!