



北京大学

# 本科生毕业论文

题目: 深度热化现象及其应用

Deep Thermalization  
and Applications

姓名: 杨天骅

学号: 2000011469

院系: 物理学院

专业: 物理学

指导教师: 杨志成

二〇二三年五月



## 版权声明

任何收存和保管本论文各种版本的单位和个人，未经本论文作者同意，不得将本论文转借他人，亦不得随意复制、抄录、拍照或以任何方式传播。否则，引起有碍作者著作权之问题，将可能承担法律责任。

---

## 摘要

量子热化理论表明，一个热化系统的波函数约化到其子系统上构成的密度矩阵会等于系综理论给出的密度矩阵。随着量子技术的发展，在实验平台上，可以在观测子系统的同时获得系统其它部分的信息。在保留这一些信息时，可以发现，子系统的热化呈现出超出传统热化的现象，这被称为深度热化。深度热化现象可以利用量子信息中的投影系综和  $k$ -设计等概念刻画。具体来说，将一个量子系统针对其一个子系统作投影测量，得到的量子态系综被称为投影系综。深度热化现象可以表述为：投影系综作为概率分布的  $k$ -阶矩与均匀 Haar 系综完全相同，即构成  $k$ -设计。可以证明，深度热化现象存在于许多理论、实验上熟知的模型中，如，一般的混沌量子多体模型中都存在深度热化现象。深度热化的理论还与量子动力学中的对偶么正性、动力学纯化等现象有着深刻的联系。由于随机量子态系综的概念在量子技术和量子动力学、尤其是以量子线路刻画的量子动力学中非常常用，借用深度热化和投影系综的思想，可以对量子实验系统和量子动力学提出许多新的见解。本文对深度热化领域现存的文献做了一个简要的综述，介绍了深度热化现象的概念和相关理论，并给出其两个在实际量子体系中的应用。

关键词：统计物理、量子热化、量子技术、 $k$ -设计。

## ABSTRACT

The quantum theory of thermalization states that a thermalizing system's wavefunction reduces to the density matrix given by statistical mechanics when restricted to a spatially local subsystem. With current quantum technologies, while measuring properties on this subsystem, we may also obtain information on the complementary subsystem concurrently. With this additional information, one finds that the subsystem thermalization behaves in a way beyond the paradigm of traditional thermalization, giving rise to a phenomenon dubbed “deep thermalization”. Deep thermalization can be formulated with the concepts of projected ensembles and  $k$ -designs borrowed from quantum information theory. Projected ensembles refer to the quantum state ensembles formed by performing projective measurements on a subset of the given system under a fixed basis. Deep thermalization means that this projected ensemble has the same  $k$ -th statistical moment as the Haar ensemble, forming the so-called  $k$ -design. It is shown that deep thermalization exists in a wide range of systems of theoretical and practical interest. In particular, a generic chaotic quantum many-body system shall be deep-thermalizing. The theory of deep thermalization also has deep connections with the concepts of dual unitarity and dynamical purification in quantum dynamics. Given that random state (or unitary) ensembles are widely used in quantum technologies and circuit-based quantum dynamics, the idea of deep thermalization and projected ensembles has the potential to offer many new insights in this field. In this manuscript, I will provide a brief introduction to the phenomena of deep thermalization and related theories. I will also offer two examples of its application to realistic quantum systems.

**KEY WORDS:** Statistical mechanics, quantum thermalization, quantum simulations,  $k$ -design.

# 目录

一 绪论	1
二 量子热化简述	2
2.1 随机矩阵理论	2
2.2 可观测量的热化	3
2.3 本征态热化假说	4
2.4 可观测量的选取与可积系统	5
三 投影系综与 $k$ -设计、深度热化的概念	6
3.1 $k$ -设计及其物理涵义	6
3.1.1 从密度矩阵到 $k$ 阶矩	6
3.1.2 Haar 测度给出的 $k$ 阶矩与 $k$ -设计	7
3.2 投影系综与深度热化的概念	8
四 实现深度热化的典型模型	10
4.1 Haar 分布波函数对子系统投影	10
4.1.1 混沌哈密顿量的本征态及时间演化	10
4.2 驱动 Ising 模型	11
4.3 深度热化现象出现的时空条件	13
4.3.1 Haar 系综有限子集 $\Delta^{(k)}$ 大小的推导	14
五 深度热化与动力学纯化	16
5.1 动力学纯化的概念	16
5.2 用动力学纯化理解深度热化	17
5.2.1 时一空对偶下的动力学纯化	17
5.2.2 动力学纯化与深度热化	17
六 深度热化的应用	20
6.1 探测量子体系保真度	20
6.1.1 $P(q)$ 分布函数的推导	21
6.2 用深度热化改良量子影子层析	22
6.2.1 传统量子影子层析	22
6.2.2 利用深度热化在模拟量子系统中实现影子层析	24
七 对深度热化的其它研究	26
八 小结	27
术语	28
参考文献	29
附录 A 矩阵的范数及其性质	32
1.1 Frobenius 范数	32
1.2 迹范数	32

## 第一节 绪论

在量子统计物理中，我们熟知的系综理论 [1, 2] 告诉我们，对于一个处在一定温度  $T = \frac{1}{\beta}$  的系统，其密度矩阵  $\rho_{\text{GE}} = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}$ ，其中  $Z = \text{tr}[e^{-\beta H}]$ 。下标“GE”表示吉布斯系综，也称正则系综。在给出密度矩阵后，即可计算算符的期望值。对于任意算符  $O$ ，其期望值  $\langle O \rangle = \text{tr}[\rho_{\text{GE}} O]$ 。

在统计物理中，我们预期，不论系统初始时处于什么状态，只要经过足够长的时间，系统中任意可观测量的测量值均会趋于系综给出的期望值，这一现象被称为热化。在经典统计物理中，热化的出现由各态历经假说保证。而对于量子系统，各态历经假说并不成立。事实上，对于一个孤立系统，薛定谔方程给出么正的时间演化，波函数在哈密顿量的每一个本征态上的投影分量的模长为定值，从而各态历经是不可能的。热化在量子力学中之所以仍然成立，是由于我们对于量子系统进行的测量大多是局域的，即算符  $O$  是只作用在一个有限大小子系统上面的“局域算符”。研究表明，对于“一般性”<sup>1</sup>的系统，在测量局域算符时，系综理论是成立的<sup>2</sup>[3]。

我们可以对这样的“局域系统热化”现象给出更加一般性的描述。把系统分为两部分，将  $O$  所作用的有限部分称为子系统 A，将剩余部分称为子系统 B，其中 B 的大小远远大于 A 的大小。则  $O$  的期望值与 B 上的状态无关，而只依赖于系统 A 上的约化密度矩阵  $\rho_A = \text{tr}_B[\rho]$ ，其中  $\text{tr}_B$  代表对子系统 B 求迹。于是，热化现象可以表述为：任给一个初态  $\rho(0)$ ，则对于足够大的  $t$ ，有  $\text{tr}_B[\rho(t)] \approx \text{tr}_B[\rho_{\text{GE}}]$ 。这构成了量子统计理论的基石。

随着近年来量子技术的发展，对量子系统进行制备、操控的空间越来越大。这使得我们有可能对量子系统进行比“测量某个算符的期望值”更加精细的操作。这对于热化的图像提出了新的问题：如果不止考虑约化密度矩阵，而考虑子系统上更多的信息，是否存在超越传统热化的更多普遍规律？具体来说，Cotler 等人在 2021 年提出 [4, 5]，与其将子系统 B 通过求迹完全约化，可以考虑取 B 中的一组基，对其进行测量，由此得到一个量子态集合，称为投影系综。投影系综包含有严格多于约化密度矩阵的信息。借用量子信息中  $k$ -设计的概念，可以证明，在一定意义下，投影系综确实有着超出传统热化的更高随机性，这一现象被称为“深度热化”。

深度热化现象对于热化现象给出了更加深入的描述，在理论上亦有诸多有趣之处，其可以自然地与对偶么正性 [6, 7] 的概念和动力学纯化现象 [8] 产生联系。此外，它还能够为人造量子系统中提供更多的研究手段。Choi 等人提出，利用投影系综的性质与理论预言的差别，可以探测一个实验系统的保真度 [9]。近来，McGinley 等和 Tran 等基于这一理论，分别提出了将量子影子层析拓展至模拟量子体系的方法 [10, 11]。本文将对深度热化现象的背景、理论及应用作一个简要的介绍。

<sup>1</sup>反例是存在的，目前已知的包括可积系统、多体局域化系统、量子多体疤痕（quantum many-body scar）系统等。

<sup>2</sup>事实上，系综理论不止对局域算符成立，具体讨论见 2.4 节。

## 第二节 量子热化简述

热力学和以系综理论为代表的统计力学在描述宏观系统的性质方面取得了巨大的成功。基于还原论的思想，人们一直试图从微观粒子的图像重构出统计物理的规律。目前，人们描述微观粒子（非相对论性）运动的一般理论是量子力学。在量子力学建立后不久，Von Neumann[12] 就顺着还原论的思路证明了“量子各态历经定理”，表明了用量子力学推导出系综理论的可行性。此后，人们对这一理论进行了一系列的发展，建立了以本征态热化假说为代表的量子热化理论。本节将简要回顾这一系列理论。

### 2.1 随机矩阵理论

关于量子热化的许多理论基于这样一个事实（或称猜测）：一个一般的量子多体系统的哈密顿量非常类似于一个随机矩阵。这里的“随机矩阵”，指的是矩阵的每一个元素独立地在一个概率分布函数下取值得到的矩阵。我们将这个概率分布函数取为高斯分布。注意到量子力学中的哈密顿量必须是厄米矩阵，事实上矩阵的下三角部分可以由上三角部分决定，因此只有一半的矩阵元是独立地从概率分布函数中取得的。等价地，我们认为矩阵以概率分布函数

$$P(H) \propto \exp \left[ -\frac{1}{a^2} \text{tr} H^2 \right] = \exp \left[ -\frac{1}{a^2} \sum_{i,j} H_{ij} H_{ji} \right] = \exp \left[ -\frac{1}{a^2} \sum_{i,j} |H_{ij}|^2 \right] \quad (1)$$

从所有厄米矩阵中选取，其中  $a$  是一个整体因子。这一矩阵分布被称为高斯么正系综。如果系统满足时间反演不变性，则哈密顿量的矩阵元都是实数，此时构成的系综称为高斯正交系综。

对于这两种系综，我们可以计算其能谱的性质，特别地，对于矩阵维数较大的情况，其相邻特征值的间隔的分布遵循一种名为 Wigner-Dyson 分布的普适规律 [3]。这一结论与实际物理系统中观测到的能谱性质有着惊人的一致性。图 1 中显示了约 30 种重原子核的能谱间隔分布构成的频数图与 Wigner-Dyson 分布的拟合结果，二者符合性相当之高；此外，对于磁场中的氢原子、一维格点模型等的计算也展现出了类似的结果。这在一定程度上证实了本节开头的猜想：量子多体系统的哈密顿量非常类似于一个随机矩阵。

对于随机矩阵的本征态，容易想象，其应该是在希尔伯特空间中均匀分布的。数学上，其本征态在任意一组基<sup>3</sup>下的分量  $\psi_i$  的概率分布函数为

$$P(\psi_1, \dots, \psi_N) \propto \delta \left( \sum_j |\psi_j|^2 - 1 \right) \quad (2)$$

这一分布也被叫做 Haar 分布，或 Haar 测度 [13]。对于两个不同的本征态  $\psi^m$  和  $\psi^n$ ，有

$$\overline{(\psi_i^m)^* (\psi_j^n)} = \frac{1}{N} \delta_{mn} \delta_{ij} \quad (3)$$

进一步，有利用高斯分布的性质，有<sup>4</sup>

$$\overline{|\psi_i^m|^4} = 2 \left( \overline{|\psi_i^m|^2} \right)^2 \quad (4)$$

<sup>3</sup>本文中提到的所有“基”，在未经特别说明的情况下，均默认为正交归一基。

<sup>4</sup>式 (4) 是针对高斯么正系综。对于高斯正交系综，系数 2 应改为 3。



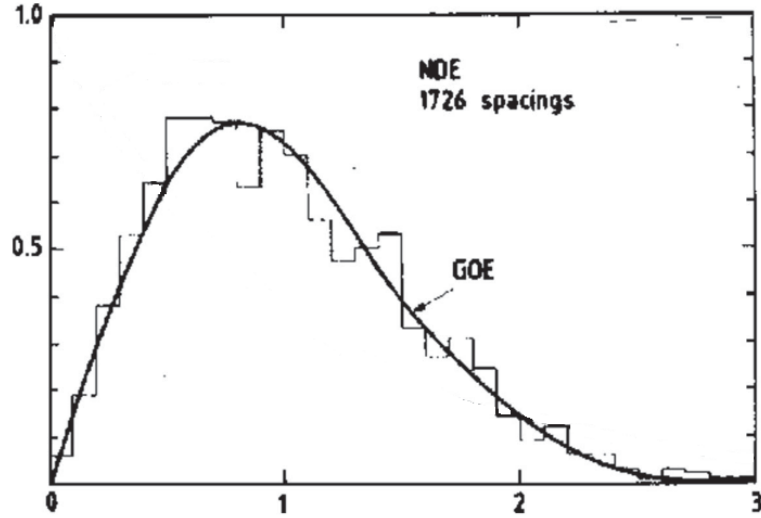


图 1: 重原子核的本征值间隔分布频数图与高斯正交系综给出的 Wigner-Dyson 分布的拟合, 图片取自 [3]。

考虑一个固定的算符  $O$  在这一随机矩阵的本征基下的矩阵元。将随机矩阵的本征态  $\psi_i^m$  写在  $O$  的本征基下, 则有

$$\langle \psi^m | O | \psi^n \rangle =: O_{mn} = \sum_i O_i (\psi_i^m)^* \psi_i^n \quad (5)$$

于是

$$\overline{O_{mn}} = \delta_{mn} \frac{1}{N} \sum_i O_i = \overline{O} \delta_{mn} \quad (6)$$

其中  $\overline{O} = \text{tr} O$ 。进一步, 有

$$\overline{|O_{mn}|^2} = \sum_i O_i^2 |\psi_i^m|^2 |\psi_i^n|^2 = \frac{1}{N} \overline{O^2} \quad (7)$$

于是可以认为:

$$O_{mn} = \overline{O} \delta_{mn} + \sqrt{\frac{\overline{O^2}}{N}} R_{mn} \quad (8)$$

其中  $R_{mn}$  是独立的<sup>5</sup>、标准差为 1 的 (复) 高斯随机变量<sup>6</sup>。在下一节中, 我们会看到, 这一性质与量子热化有着非常密切的联系。

## 2.2 可观测量的热化

考虑一个孤立的<sup>7</sup>量子系统, 其时间演化由一个哈密顿量给出。记这个哈密顿量的本征谱为  $\{E_m\}$ , 对应的波函数为  $\{|m\rangle\}$ 。设该系统在初始时刻处在态  $|\psi(t=0)\rangle = \sum_m C_m |m\rangle$ ,

<sup>5</sup>为保证  $O$  的厄米性, 要求  $R_{mn}^* = R_{nm}$ 。

<sup>6</sup>这里的标准差指的是  $\sqrt{\mathbb{E}|R_{mn}|^2}$ 。若单独考虑  $R_{mn}$  的实部和虚部, 其标准差均为  $\frac{1}{\sqrt{2}}$ 。

<sup>7</sup>在绪论中讨论量子热化时, 我们使用的是正则系综的语言, 但对于微量量子系统, 显然考虑不带热库的微正则系综更为简便。一个熟知的结论是, 正则系统和微正则系综在热力学极限下是等价的 [14]。

那么在时刻  $t$  有  $|\psi(t)\rangle = \sum_m C_m e^{-iE_m t} |m\rangle$ 。对于任意一个可观测量  $O$ ，其在时刻  $t$  的期望值为

$$\begin{aligned} O(t) &= \langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle = \sum_{m,n} C_m^* C_n e^{i(E_m - E_n)t} \underbrace{\langle m | \hat{O} | n \rangle}_{=: O_{mn}} \\ &= \sum_m |C_m|^2 O_{mm} + \sum_{m \neq n} C_m^* C_n e^{i(E_m - E_n)t} O_{mn} \quad (9) \end{aligned}$$

由于  $C_m$  与初态波函数有关，不是系统的本征属性、可以任意选取，关于系统热化的性质应该包含在  $O_{mn}$  和  $E_m$  中。

首先注意到，若哈密顿量是一个随机矩阵，从 (9) 中可以直接推出量子热化现象。利用 (8)，在最低阶项意义上，可以直接得到

$$\overline{O(t)} = \overline{O} \sum_m |C_m|^2 = \overline{O} = \text{tr} O = \text{tr}[e^{-\beta H} O] |_{\beta=0} \quad (10)$$

于是可以认为  $O(t)$  会给出热化后的可观测量期望值。但注意到由于随机矩阵系综不包含温度，此处给出的期望值永远是无穷温的期望值，与实际系统并不相符。尽管如此，这一推导对于如何从微观量子力学的表达式 (9) 给出宏观系综预测提供了重要线索。

### 2.3 本征态热化假说

基于上两节的结论，我们知道，形如 (8) 的表达式可以将量子力学的微观表达式 (9) 转化为宏观的系综平均表达式，但 (8) 不包含温度的信息，无法给出一般的系综平均。为此，我们将 (8) 作如下试探性的推广：

$$O_{mn} = O(\overline{E}) \delta_{mn} + e^{-S(\overline{E})} f_O(\overline{E}, \omega) R_{mn} \quad (11)$$

其中  $\overline{E} = (E_m + E_n)/2$ ,  $\omega = E_n - E_m$ ， $O$ 、 $S$  和  $f_O$  均是关于其参数的光滑函数，每个  $R_{mn}$  均是标准差为 1 的高斯随机变量。为确保厄米性，要求  $R_{mn} = R_{nm}^*$ ,  $f_O(\overline{E}, -\omega) = f_O(\overline{E}, \omega)^*$ 。与式 (8) 对比，我们可以认为  $O(\overline{E})$  对应  $\overline{O}$ 、 $e^{-S(\overline{E})} f_O(\overline{E}, \omega)$  对应  $\sqrt{\frac{O^2}{N}}$ ，此处的推广在于令这两个系数随着  $\overline{E}$  (和  $\omega$ ) 连续变化。函数  $S$  和  $f_O$  控制可观测量的涨落，此处不予详细讨论。对于  $O(\overline{E})$ ，考虑将 (11) 代入 (9)，容易得到

$$\overline{O(t)} = \sum_m |C_m|^2 O(E_m) \quad (12)$$

为了让这一结果与微正则系综的结果相符，我们要求  $O(\overline{E})$  等于能量为  $\overline{E}$  的能量壳上算符  $\hat{O}$  的微正则系综期望值。附加以上条件后的 (11) 称为本征态热化假说。数值上，人们在少体系统中验证了 (11) 的正确性。

如果 (11) 成立，则由 (12)，我们可以推知：在系统的能量涨落  $\delta E = \sqrt{\langle \psi | H^2 | \psi \rangle - \langle \psi | H | \psi \rangle^2}$  较小时，就会有  $O(t) \approx O(\langle E \rangle)$ ，其中  $\langle E \rangle = \langle \psi | H | \psi \rangle$ 。而在统计物理中我们熟知，在热力学极限下，能量的涨落趋近于零。于是我们可以推知，在本征态热化假说下，可观测量的期望值可以由系综理论给出。

## 2.4 可观测量的选取与可积系统

绪论中提到，在量子热化中，我们一般考虑局域的可观测量，但在前几节的讨论中，并没有明显体现出“局域”这一特点。事实上，对于一些非局域的可观测量，如动量空间的占据数，本征态热化假说也是成立的。Von Neumann 在其最早的论文中 [12] 证明了，对于“典型的”可观测量，微正则系综的预测都是成立的。

但可以从一个最为显而易见的例子中看出“不典型”的可观测量的存在。考虑可观测量  $O = |m\rangle\langle m|$ ，其中  $|m\rangle$  是哈密顿量  $H$  的一个本征态。那么有  $O_{nl} = \delta_{nm}\delta_{lm}$ ，显然不满足本征态热化假说 (11)。进一步，有  $O(t) = |C_m|^2$ ，不依赖于时间，即  $O$  的期望值完全由其初态决定，从而不可能发生热化。一般来说，如果一个算符  $O$  和哈密顿量满足对易关系  $[O, H] = 0$ ，那么二者可以同时对角化，于是容易证明  $O(t)$  不依赖于  $t$ ，从而必然违背热化条件。

对比 2.1 节的讨论，可以提炼出上面的例子中热化被违背的原因：对于一般的  $O$ ， $O$  和本征基和  $H$  的本征基可以认为没有关联，于是  $H$  的矩阵元变换到  $O$  的本征基下时经过了一个高维空间中非常复杂的变化，于是可以近似视为随机矩阵；但如果  $O$  的本征基和  $H$  的本征基一致，那么我们显然无法在  $O$  的本征基下把  $H$  看作随机矩阵，于是本征态热化假说无法成立。在这个意义上，容易理解 Von Neumann 的结论： $O$  和  $H$  的本征基一致应当是一个小概率事件，于是对于一个“一般”的可观测量  $O$ ，热化理论是成立的。

但事实上，在实际中，我们观测的  $O$  往往不具有一般性。我们常感兴趣的可观测量包括占据数、关联函数等，均是有限个格点上的算符相乘得到的，或可以称为空间上局域的。这类算符往往在各个格点的希尔伯特空间直积构成的这一组基底（称为“计算基”）下具有简单的形式，或可以说，其本征基和计算基具有高度的关联性。幸运的是，对于大部分哈密顿量，其本征基与计算基基本无关，从而对于局域的可观测量，本征态热化假说均是成立的。这样的哈密顿量一般称为“混沌的”。反之，对于本征基与计算基有高度关联的哈密顿量，本征态热化假说有可能不再对局域可观测量成立。这类哈密顿量包括可积系统和多体局域化系统，其特点是哈密顿量具有指数多个<sup>8</sup>局域守恒量，即在计算基下有简单形式的、满足和哈密顿量对易关系的算符。在下述讨论中，我们将关注点集中在混沌的哈密顿量上。

<sup>8</sup>指其数量与系统尺寸  $L$  成指数关系。

### 第三节 投影系综与 $k$ -设计、深度热化的概念

在本节中，我们介绍本文涉及的两个重要概念： $k$ -设计和投影系综，并由此引出深度热化的概念。

#### 3.1 $k$ -设计及其物理涵义

$k$ -设计<sup>9</sup>是对一个量子态系综的均匀性的一种描述。所谓量子态系综，指的是一系列量子态构成的集合，其中每一个量子态附有一个概率。一般将一个量子态系综记为  $\mathcal{E} = \{(p_i, |\psi_i\rangle)\}$ ，其中  $i$  是指标，概率需要满足归一条件： $\sum_i p_i = 1$ 。例如，对于一个对角化了的密度矩阵  $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ ，可以给出一个对应的量子态系综  $\{(p_i, |\psi_i\rangle)\}$ 。但在一般情况下，一个量子态系综并不要求各个  $|\psi_i\rangle$  之间满足任何正交性关系。

在设计量子态系综时，会涉及到两种“平均”操作，一种是对概率分布  $p_i$  的平均，另一种是算符对量子态取期望值的平均。我们用上划线  $\overline{\phantom{x}}$  代表前一种平均，用尖括号  $\langle O \rangle$  代表后一种平均。

##### 3.1.1 从密度矩阵到 $k$ 阶矩

对于一个量子态系综所包含的信息，实验上能够提取的即是可观测量在这个量子态系综下的测量值。首先考虑单个波函数  $|\psi\rangle$ ，将其在某一组基下展开，展开系数记为  $\psi_i$ 。若对这个波函数进行测量，我们可以得到可观测量在这一波函数下的期望值  $\langle O \rangle = \langle \psi | O | \psi \rangle$ ，用展开系数表示为

$$\langle O \rangle = \sum_{i,j} O_{ij} \psi_i^* \psi_j \quad (13)$$

这是一个关于波函数的厄米二次型。这可以改写为

$$\langle O \rangle = \text{tr}[O|\psi\rangle\langle\psi|] \quad (14)$$

若我们对一个量子态系综  $\{(p_i, |\psi_i\rangle)\}$  求  $\langle O \rangle$  的期望值，则有

$$\overline{\langle O \rangle} = \sum_i p_i \text{tr}[O|\psi_i\rangle\langle\psi_i|] = \text{tr}\left[O\left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\right)\right] \quad (15)$$

容易看出， $\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \rho$  为这一系综对应的密度矩阵，(15) 式即是对一个混态进行可观测量测量时给出期望值的公式  $\langle O \rangle = \text{tr}[\rho O]$ 。

更一般地，我们可以考虑关于  $\psi_i$  的高次齐次多项式函数：

$$f[\psi] = \sum_{I,J} c_{IJ} \psi_{i_1}^* \dots \psi_{i_k}^* \psi_{j_1} \dots \psi_{j_k} \quad (16)$$

其中的全局相位任意性要求  $\psi$  的次数和  $\psi^*$  的次数是相等的，求和的超指标定义为  $I = (i_1, \dots, i_k), J = (j_1, \dots, j_k)$ 。例如，Renyi 纠缠熵 [15] 就是  $\psi$  的高次函数。我们注意到，这可以写成

<sup>9</sup> “设计”这一名称来自于“组合设计问题”(combinatorial design)，后者指的是一些以“对称性”和“均衡性”为条件的组合问题，这里取其中“对称”和“均衡”的意思用在量子信息当中。

$$f[\psi] = \text{tr} \left[ C (|\psi\rangle\langle\psi|)^{\otimes k} \right] \quad (17)$$

其中  $C$  是一个作用在  $H^{\otimes k}$  上的算符，其矩阵形式即为  $c_{IJ}$ 。若对量子态系综  $\{(p_i, |\psi_i\rangle)\}$  求  $f[\psi]$  的期望值，则有

$$\bar{f} = \sum_i \text{tr} \left[ C \left( \sum_i p_i (|\psi_i\rangle\langle\psi_i|)^{\otimes k} \right) \right] \quad (18)$$

定义该系综的  $k$  阶矩为

$$\rho^{(k)} = \sum_i p_i (|\psi_i\rangle\langle\psi_i|)^{\otimes k} \quad (19)$$

则所有的  $k$  次齐次多项式的期望值均可由  $\rho^{(k)}$  给出。

### 3.1.2 Haar 测度给出的 $k$ 阶矩与 $k$ -设计

对于一阶矩，即密度矩阵，存在一个最特殊的密度矩阵：单位阵  $\rho = \text{id}$ 。在吉布斯系综中，这对应着温度为无穷大时的密度矩阵，亦即可以认为希尔伯特空间中任何一个态出现的概率都是相同的。此时，可观测量的期望值为  $\overline{\langle O \rangle} = \text{tr} O$ 。如果一个量子态系综给出的密度矩阵为单位阵，那么它对任何可观测量给出的期望值均与无限温吉布斯系综给出的相同，此时我们认为这个系综“足够均匀”，称其为一个 1-设计。

相应地，对于高阶矩，我们也可以定义一个特殊的  $\rho^{(k)}$ 。对于一个完全均匀的态分布，即 Haar 分布，其  $k$  阶矩记为

$$\rho_{\text{Haar}}^{(k)} = \int_{\text{Haar}} d|\psi\rangle (|\psi\rangle\langle\psi|)^{\otimes k} \quad (20)$$

由于其高度对称性， $\rho_{\text{Haar}}^{(k)}$  有解析表达式 [4]：

$$\rho_{\text{Haar}}^{(k)} = \frac{(d-1)!}{(d+k-1)!} \sum_{\pi \in S_k} \text{Perm}(\pi) \quad (21)$$

其中  $\text{Perm}(\pi)$  指在  $H^{\otimes k}$  空间内对各个  $H$  的分量作  $\pi$  对应的置换：对于  $H^{\otimes k}$  的任意一个基  $e_{i_1} \otimes \cdots \otimes e_{i_k}$ ，有  $\text{Perm}(\pi) : e_{i_1} \otimes \cdots \otimes e_{i_k} \mapsto e_{i_{\pi(1)}} \otimes \cdots \otimes e_{i_{\pi(k)}}$ 。由群的重排定理，容易得知对于任意置换  $\sigma$ ，有  $\text{Perm}(\sigma) \circ \rho_{\text{Haar}}^{(k)} = \rho_{\text{Haar}}^{(k)} \circ \text{Perm}(\sigma) = \rho_{\text{Haar}}^{(k)}$ 。于是  $\rho_{\text{Haar}}^{(k)}$  事实上正比于一个投影算符：

$$\rho_{\text{Haar}}^{(k)} = \frac{k!(d-1)!}{(d+k-1)!} \Pi_{\text{sym}} \quad (22)$$

其中  $\Pi_{\text{sym}}$  为投影算符，投影到  $H^{\otimes k}$  在  $\text{Perm}$  作用下的不变子空间。

如果某个量子态系综的  $\rho^{(k)}$  等于  $\rho_{\text{Haar}}^{(k)}$ ，由上一节的推导，可知对其测量任何  $k$  阶多项式函数的结果均与 Haar 分布给出的结果相同。此时称这个系统为一个  $k$ -设计。由于低阶多项式函数可以视为特殊的高阶多项式函数， $k$ -设计一定是  $(k-1)$ -设计。

对于实际系统， $\rho^{(k)}$  与  $\rho_{\text{Haar}}^{(k)}$  完全相等的情况是少见的。我们可以考虑近似的  $k$ -设计。具体来说，对于一个量子态系综  $\mathcal{E}$ ，有

$$|\mathbb{E}_{\mathcal{E}} f - \mathbb{E}_{\text{Haar}} f| = \left| \text{tr} \left[ C \left( \rho_{\mathcal{E}}^{(k)} - \rho_{\text{Haar}}^{(k)} \right) \right] \right| \leq \|C\|_F \left\| \rho_{\mathcal{E}}^{(k)} - \rho_{\text{Haar}}^{(k)} \right\|_F \quad (23)$$

其中  $\|\cdot\|_F$  代表矩阵的 Frobenius 范数。矩阵的范数有若干种不同的定义，具体的讨论参见附录 A。于是，若  $\|\rho_{\mathcal{E}}^{(k)} - \rho_{\text{Haar}}^{(k)}\|_F$  较小，对于有界的算符  $C$ ，可以预期  $|\mathbb{E}_{\mathcal{E}} f - \mathbb{E}_{\text{Haar}} f|$  也较小。定义

$$\Delta^{(k)} := \frac{\|\rho_A^{(k)} - \rho_{\text{Haar}}^{(k)}\|}{\|\rho_{\text{Haar}}^{(k)}\|} \quad (24)$$

则  $\Delta^{(k)}$  较小的量子态系综被称为近似  $k$ -设计。注意到在 (24) 中我们略去了矩阵范数的下标：尽管式 (23) 只对 Frobenius 范数成立，式 (24) 可以对不同种类的范数均有定义。

事实上，利用上面描述的 Perm 作用的性质，(23) 中的  $\|C\|_F$  还可以进一步优化：由于  $(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|)^{\otimes k}$  和  $\rho_{\text{Haar}}^{(k)}$  均是对于  $H^{\otimes k}$  的各个子空间全对称的， $C$  的非全对称部分与之相乘应当没有贡献，于是  $\|C\|_F$  可以优化为  $\|\Pi_{\text{sym}} C \Pi_{\text{sym}}\|_F$ ，其中  $\Pi_{\text{sym}}$  为上述投影算符。

### 3.2 投影系综与深度热化的概念

在经典统计物理当中，系综事实上是一个假想的辅助概念：由于经典力学的演化是决定论的，任意一个实际系统必然有着确定的相空间轨迹。因此，并不自然地存在一系列满足一定概率分布的不同系统。对于量子系统，薛定谔方程给出的时间演化亦是决定论的，但测量过程有着内在的随机性，因而在量子系统中，系综会自然地出现。具体来说，一个纯态  $|\psi\rangle$  在对某一可观测量  $O$  进行测量后即会变为一个量子态系综  $\{(p_i, |\psi_i\rangle)\}$ ，其中  $p_i = \langle\psi|P_i|\psi\rangle$ 、 $|\psi_i\rangle = P_i|\psi\rangle$ ， $P_i$  是向  $O$  的第  $i$  个本征子空间作投影的算符。这样构成的系综被称为投影系综。

投影系综的概念与局域算符的测量密切相关。如前所述，考虑一个被分为 A、B 两部分的系统，我们测量的算符局域在子系统 A 上。为简单起见，考虑一个一维链，链上每一个格点对应的希尔伯特空间均为  $H$ 。给定整个系统的某个态  $|\psi\rangle$ ，则子系统 A 上的约化密度矩阵为

$$\rho_A = \text{tr}_B [|\psi\rangle\langle\psi|] \quad (25)$$

其中  $\text{tr}_B$  定义为：对 B 系统的希尔伯特空间取一组基  $\{|Z\rangle\}$ ，有  $\text{tr}_B \rho = \sum_Z \langle Z|\rho|Z\rangle$ 。对于 (25)，有

$$\rho_A = \sum_Z \langle Z|\psi\rangle\langle\psi|Z\rangle = \sum_Z p_Z |\psi_Z\rangle\langle\psi_Z| \quad (26)$$

其中  $p_Z = \langle\psi|(\text{id}_A \otimes |Z\rangle\langle Z|)|\psi\rangle$  是  $|Z\rangle$  态在  $|\psi\rangle$  中的占比， $|\psi_Z\rangle = \frac{1}{\sqrt{p_Z}} \langle Z|\psi\rangle$  为 B 子系统投影至  $|Z\rangle$  后在 A 上约化出的波函数<sup>10</sup>。

容易验证， $\rho_A$  不依赖于基  $\{|Z\rangle\}$  的选取；但在 (26) 中， $\rho_A$  可以看作一个依赖基选取的量子态系综  $\{(p_Z, |\psi_Z\rangle)\}$  的一阶矩。我们将这一系综称为波函数  $|\psi\rangle$  由子系统 B 的基  $\{|Z\rangle\}$  给出的投影系综。那么，我们可以对应地定义其高阶矩：

$$\rho_A^{(k)} = \sum_Z p_Z (|\psi_Z\rangle\langle\psi_Z|)^{\otimes k} = \sum_Z \frac{(\langle Z|\psi\rangle\langle\psi|Z\rangle)^{\otimes k}}{p_Z^{k-1}} \quad (27)$$

在  $k > 1$  的情况下，这一般是依赖于  $\{|Z\rangle\}$  的选取的。

<sup>10</sup>按照上面给出的定义，在全系统上约化出的波函数应该是  $(\text{id}_A \otimes |Z\rangle\langle Z|)|\psi\rangle$ ，其进而正比于  $|\psi_Z\rangle \otimes |Z\rangle$ 。

在较简单的模型中, 考虑  $H$  是二维的, 其基记为  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$ , 即每一个格点是一个量子比特; 进一步, 将  $\{|Z\rangle\}$  取为计算基, 即  $|Z\rangle = |\mathbf{z}_B\rangle = |z_{B,1}\rangle \otimes \cdots \otimes |z_{B,N_B}\rangle$ , 其中每一个  $z_{B,i}$  等于 0 或 1。

对于有热化现象的系综, 其子系统的约化密度矩阵, 亦即其投影系综的一阶矩, 应当有  $\text{tr}_B [e^{-\beta H}]$  的形式。对于一个混沌的哈密顿量的一般<sup>11</sup>本征态, 对应的温度  $\beta$  非常高, 则  $e^{-\beta H} \approx \text{id}$ , 于是  $\rho_A^{(1)} \approx \frac{1}{d_A} \text{id}_A = \rho_{\text{Haar}}^{(1)}$ , 其中  $d_A$  为子系统对应的希尔伯特空间维数。这意味着, 热化至无穷温对应着投影系综构成一个 1-设计。于是可以自然提出一个问题: 热化的物理系统在子系统上构成的投影系综是否也具有  $k$ -设计 ( $k > 1$ ) 的性质? 若有, 则意味着子系统中波函数分布的随机性比传统意义上的热化更强, 从而这一现象被称为深度热化。

---

<sup>11</sup>指处在连续谱中、距离能谱顶端和底端距离不太近的态。

## 第四节 实现深度热化的典型模型

### 4.1 Haar 分布波函数对子系统投影

沿用上一节的设定，考虑一个一维的量子比特链，其分为 A 和 B 两部分，长度分别为  $N_A$  和  $N_B$ 。Cotler 等 [4] 给出的第一个结论为：在  $N_B$  足够大时，给定子系统 B 的一组特定的基，则在 Haar 测度下，全系统的一个随机波函数  $|\psi\rangle$  给出的投影系综将以任意接近于 1 的概率构成误差任意小的近似  $k$ -设计，亦即 (24) 式定义的  $\Delta^{(k)}$  可以任意小。为此，需要证明两点。其一， $\mathbb{E}[\rho_A^{(k)}] = \rho_{\text{Haar}}^{(k)}$ ；其二， $\text{Var}[\rho_A^{(k)}]$  是小的。这里  $\mathbb{E}$  和  $\text{Var}$  指对 Haar 分布下的随机变量  $|\psi\rangle$  取期望值和方差。

$\mathbb{E}[\rho_A^{(k)}] = \rho_{\text{Haar}}^{(k)}$  的证明是简单的。直观上，由于大系统的波函数是 Haar 分布的，A 子系统的希尔伯特空间中没有任何一个方向是具有特殊地位的，于是  $\mathbb{E}[\rho_A^{(k)}]$  必然对于任何么正变换不变，而唯一满足这一条件的就是  $\rho_{\text{Haar}}^{(k)}$ 。于是， $\Delta^{(k)} \propto \left\| \rho_A^{(k)} - \mathbb{E}[\rho_A^{(k)}] \right\|$ 。为了证明  $\Delta^{(k)}$  小，考虑如下引理：

**Levy 引理：** 对于一个函数  $f: S^{2d-1} \rightarrow \mathbb{R}$ ，若其满足 Lipschitz 连续条件  $|f(v) - f(w)| \leq \eta \|v - w\|$ （其中  $S^{2d-1}$  上的度量从  $\mathbb{R}^{2d}$  继承），则有

$$\text{Prob} [ |f(\Phi) - \mathbb{E}f(\Phi)| \geq \delta ] \leq 2 \exp \left( -\frac{2d\delta^2}{9\pi^3\eta^2} \right) \quad (28)$$

这一引理说明了，在维度足够高时，Haar 测度对任何 Lipschitz 连续的函数给出的分布都是高度集中的。应用这一引理，可以证明：

$$\text{Prob} \left[ \left\| \rho_A^{(k)} - \rho_{\text{Haar}}^{(k)} \right\|_1 \geq \epsilon \right] \leq 2d_A^{2k} \exp \left( -\frac{d_B \epsilon^2}{18\pi^3(2k-1)d_A^{4k}} \right) \quad (29)$$

其中  $d_A, d_B$  分别指 A、B 子系统上希尔伯特空间的维数，范数的下标“1”指迹范数，参见附录 A。如果采用 Frobenius 范数，可以证明

$$\text{Prob} \left[ \left\| \rho_A^{(k)} - \rho_{\text{Haar}}^{(k)} \right\|_F \geq \epsilon \right] \leq 2d_A^{2k} \exp \left( -\frac{d_B \epsilon^2}{18\pi^3(2k-1)d_A^{2k}} \right) \quad (30)$$

这说明了，当  $d_B > d_A^{2k(4k)}$  时， $\Delta^{(k)}$  将会趋于零。也就是说， $d_B$  足够大时，Haar 测度下随机给定的一个态将以高概率拥有极小的  $\Delta^{(k)}$ 。在这个意义上，可以认为，深度热化是普遍的。

#### 4.1.1 混沌哈密顿量的本征态及时间演化

以上的论证，是对于输入量子态的分布服从一定性质时，计算  $\Delta^{(k)}$  的期望值和方差。因此，得到的结论应该理解为：在这些分布当中，“典型”的态有着较小的  $\Delta^{(k)}$ ，但仅从这一结论中我们无法构造性地得到这样的态是什么。事实上，这一“大概率”未必可靠，因为如 2.4 节中所述，在实际计算和实验中，我们能够选用的往往是计算基，这样的基在测度意义下出现的概率是极小的，因而我们难以用测度意义下的结论预言这类基的表现。

为了验证深度热化现象对于实际的系统有意义，Cotler 等 [4] 取了若干个呈现量子混沌现象的哈密顿量，包括混合场 Ising 模型、随机跃迁模型，以及限制在一个对称性子空间内讨论的含  $U(1)$  对称性的随机跃迁模型。数值结果显示，对于这些哈密顿量，其典型本征态、以及一个任意的初态经过其一段时间演化之后得到的态所产生的投影系综均存在



深度热化现象。这几个代表性的模型说明了，上述关于“深度热化是普适的”的论证对于实际的混沌量子系统来说确实成立。

## 4.2 驱动 Ising 模型

4.1.1节所给出的例子均是数值的结果，对于从理论上理解深度热化现象的帮助是有限的。为了给出一个具体的、可解的实现深度热化的例子，Ho 和 Choi[6] 考虑了驱动 Ising 模型，一个呈现量子混沌行为的模型，并证明了一个简单的直积态在经过该模型时间演化足够久后得到的态就有着较小的  $\Delta^{(k)}$ 。驱动 Ising 模型是一个 Floquet 的模型，其希尔伯特空间是一个由自旋 1/2 粒子<sup>12</sup>构成的、长度为  $N$  的一维链，其 Floquet 么正演化算符为

$$U_F = U_h e^{-iH_{\text{Ising}}\tau} \quad (31)$$

其中

$$H_{\text{Ising}} = J \sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + g \sum_{i=1}^N \sigma_i^z + (b_1 \sigma_1^z + b_N \sigma_N^z) \quad (32)$$

是一个纵场 Ising 模型的哈密顿量， $b_1$  和  $b_N$  两个常数是为了此后计算方便而引入，容易看出在热力学极限下这两个参数不影响系统的宏观性质；

$$U_h = \exp \left[ -ih \sum_{i=1}^N \sigma_i^y \right] \quad (33)$$

是对每个格点做的一个旋转操作。驱动 Ising 模型可以视为在自旋链按照哈密顿量  $H_{\text{Ising}}$  演化的基础上，每隔时间  $\tau$  每个格点上的自旋会受到一个绕  $y$  方向旋转的驱动。

在一组特殊的参数下，驱动 Ising 模型可以用一个简洁的量子线路（或称张量网络）表出。取  $J = h = b_1 = b_N = \frac{\pi}{4}$ ， $g \notin \mathbb{Z}\frac{\pi}{8}$ 。<sup>13</sup>定义量子线路的结点如图 2(a) 所示，则利用图 2(b) 的关系式， $U_F$  给出的时间演化可以被改写为如图 2(c) 的量子线路。

Ho 和 Choi 证明了，由一个特定的<sup>14</sup>初态经过一段时间的时间演化后得到的态对其子系统投影会发生深度热化。如图 2(d) 所示，考虑一个初态  $|+\rangle^{\otimes N}$ ，其中  $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ ， $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  分别是自旋  $z$  向下和向上对应的本征态。使用  $U_F$  将其演化  $t$  个周期，在量子线路中即体现为张量网络有  $t$  层高。对于演化结束的态，将系统分为 A 和 B 两个部分，对于系统 B 上的每个自旋在  $z$  基下做测量，得到一个结果  $\mathbf{z}_B = \{z_{B,i} | i = 1, \dots, N_B\}$ 。则线路左上角系统 A 部分剩余的自由的边所对应的就是投影系综中对应的波函数  $|\tilde{\psi}(\mathbf{z}_B)\rangle$ 。

证明深度热化的发生需要用到驱动 Ising 模型的一个重要性质：对偶么正性。具体来说，在将驱动 Ising 模型改写为张量网络后，时间和空间两个方向即失去了原先的意义：在张量网络中，只有拓扑是重要的。于是，我们可以等效地将时间方向的格点看作系统的格点，而将空间方向的格点看作时间，即作一种“时一空对偶”，得到的结果仍然是一个合法的张量网络。一般来说，一个么正的时间演化在经过时空对偶后会变为一个非么正的模型。但利用图 2(e) 所示的张量网络关系，对于这一特定参数的驱动 Ising 模型，我们发现，时一空对偶后的张量网络仍然描述一个如图 2(f) 所示的么正的时间演化，这一性质被称为对偶么正性。

<sup>12</sup>与量子比特等价。

<sup>13</sup> $g \in \mathbb{Z}\frac{\pi}{8}$  会导致深度热化现象无法发生，参见 4.3节。

<sup>14</sup>更多的初态在 Ho 和 Choi 的论文中补充材料部分有讨论，本文从略。

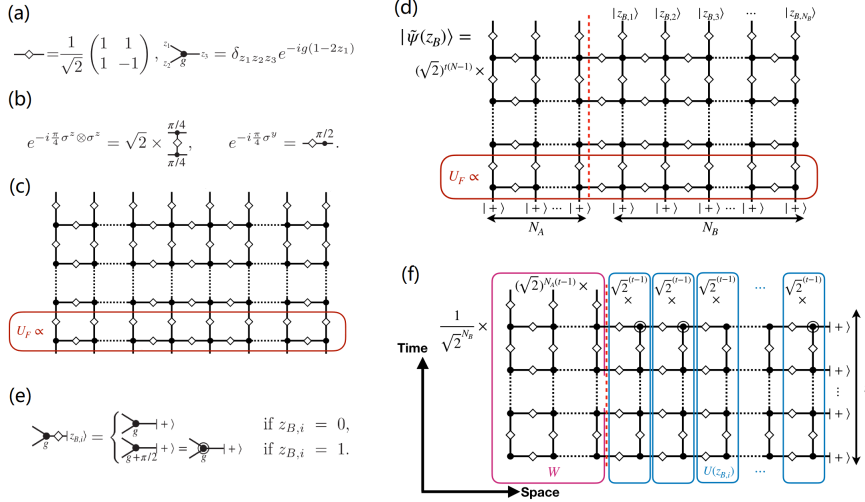


图 2: 驱动 Ising 模型的量子线路改写及对偶么正性。(a) 定义的量子门; (b) 驱动 Ising 模型中包含的么正算符均可以用定义的两个量子门表出; (c) 驱动 Ising 模型给出的时间演化可以完全用量子门表出; (d) 驱动 Ising 模型发生深度热化示意; (e) 端点处的测量投影可以进行改写; (f) 时一空对偶视角下的量子线路。图片取自 [6]。

如图 2(d) 所示的过程在时一空对偶视角下拥有一种简单的描述。如图 2(f) 所示, 经过变换,  $|\tilde{\psi}(z_B)\rangle$  可以视为由如下过程得到: 一个初态  $|+\rangle^{\otimes t}$  从张量网络的右侧输入, 经过  $N_B$  层么正的“时间”演化<sup>15</sup> $U(z_{B,i})$ , 再输入一个么正的变换  $W$ , 最终得到  $|\tilde{\psi}(z_B)\rangle$ 。在数学上, 可以写为  $|\psi_A(z_{B,i})\rangle \propto W \prod_{i=1}^{N_B} U(z_{B,i})|+\rangle^{\otimes t}$ 。Ho 和 Choi 证明了两点结论: (一) 当  $N_B$  足够大时,  $\prod_{i=1}^{N_B} U(z_{B,i})$  关于  $\{z_{B,i}\}$  的分布会近似于一个 Haar 系综; (二) 当演化时间层数  $t$  大于 A 子系统的大小  $N_A$  时,  $W$  是一个投影算符。于是,  $\prod_{i=1}^{N_B} U(z_{B,i})|+\rangle^{\otimes t}$  给出一个  $2^t$  维希尔伯特空间上的 Haar 随机向量,  $W$  将其投影为  $2^{N_A}$  维希尔伯特空间中的 Haar 随机向量, 从而  $|\psi_A(z_{B,i})\rangle$  构成 Haar 系综, 亦即对于所有的  $k$  都有  $\Delta^{(k)} = 0$ , 发生完全的深度热化。

上述结论二的证明是较为直接的。结论一的证明运用了一些技巧。具体来说, 证明  $\mathcal{U}(\{z_{B,i}\}) := \prod_{i=1}^{N_B} U(z_{B,i})$  是 Haar 随机的, 等价于证明它对于任意  $k$  都构成  $k$ -设计。这进一步等价于, 对于所有定义在  $H^{\otimes k}$  上的算符  $X$ ,  $\mathcal{U}(\{z_{B,i}\})$  对其作用和 Haar 系综对其作用是相同的, 其中“作用”代表共轭作用  $X \mapsto U^{\otimes k} X (U^\dagger)^{\otimes k}$ 。而  $\sum_{z_B} \mathcal{U}(\{z_{B,i}\}) = \prod_{i=1}^{N_B} \sum_{z_{B,i} \in \{0,1\}} U(z_{B,i})$ , 于是

$$\sum_{z_B} \mathcal{U}(\{z_{B,i}\})^{\otimes k} X (\mathcal{U}(\{z_{B,i}\})^\dagger)^{\otimes k} = (\mathbb{T}^{(k)})^{N_B} [X] \quad (34)$$

其中

$$\mathbb{T}^{(k)}[X] = \frac{1}{2} \sum_{z \in \{0,1\}} U(z)^{\otimes k} X (U(z)^\dagger)^{\otimes k} \quad (35)$$

式 (34) 是一个线性映射的高次幂。因此, 当  $N_B$  足够大时, 迭代的结果应当位于  $\mathbb{T}$  的最大特征值的特征子空间内。进一步可以证明, 最大特征值即为单位模长的特征值, 且

<sup>15</sup>这里每一层“时间”演化显然依赖于该格点处测量给出的投影, 从而依赖于该点处的测量结果  $z_{B,i}$ 。

这一特征子空间内的向量均是 Haar 变换下不变的，这就证明了在  $N_B$  足够大时  $\mathcal{U}(\{z_{B,i}\})$  的演化会给出一个 Haar 随机的分布。具体证明细节见论文 [6] 的附录部分，此处从略。

事实上，这一证明不只限于驱动 Ising 模型，而是对一系列具有类似性质的量子线路模型均适用 [7, 8]。具体来说，假如一个线路本身是对偶么正的，且其边界<sup>16</sup>条件满足一定性质（Ippoliti 等将这一条件称为 DU+），则当线路在时间方向的演化层数  $t$  超过子系统 A 的大小  $N_A$  时，子系统  $N_A$  上就会发生深度热化。

### 4.3 深度热化现象出现的时空条件

在上一节的论述中，我们提到了这样一个条件：深度热化发生要求系统的演化时间  $t$  大于子系统  $N_A$  的大小。并且，在推导这一结论时，我们隐含地假设了  $N_B \rightarrow +\infty$  的热力学极限。这便引出一个问题：对一般的系统，深度热化发生的时间  $t$  有何规律？如果  $N_B$  有限大，深度热化能否发生、对应的  $\Delta^{(k)}$  和  $N_B$  的关系如何？

对于前一个问题，Ippoliti 等在研究对偶么正系统时指出，这些系统在  $t = N_A$  时，所有的  $\Delta^{(k)}$  都同时衰减到零。如果我们取一个很小的  $\epsilon$ ，并定义  $t_k$  达到为  $\Delta^{(k)} < \epsilon$ （即“系统形成  $k$ -设计”）所需的时间，那么对于 DU+ 系统有  $t_k = N_A \forall k$ 。反之，对于不满足 DU+ 的系统，即使其存在深度热化现象，也可能出现不同的  $k$  有  $t_k$  不同的情况。这已经被具体的例子所证实：Ippoliti 和 Ho 在 [16] 中构造了一个不满足 DU+ 条件的可解模型，证明了该模型有深度热化现象，但  $t_k$  随  $k$  递增。

对于第二个问题，首先考虑 4.1 节中最简单的情形：从 Haar 系综中随机选择一个向量，取其投影系综。考虑公式 (29)，若要求  $\|\rho^{(k)} - \rho_{\text{Haar}}^{(k)}\|_1$  大于  $\epsilon$  的概率小于  $\delta$ ，则需要有

$$N_B \geq 4kN_A + 2\log \frac{1}{\epsilon} + \log \log \frac{1}{\delta} + O(\log N_A) \quad (36)$$

若把迹范数改为 Frobenius 范数，则  $4kN_A$  改为  $2kN_A$ 。这是对于  $N_B$  的所需大小一个最简单的估算： $N_B = O(kN_A)$ 。

我们尝试从另一个角度理解这个结论。注意到对于有限大的  $N_B$ ，投影系综中的态的个数是有限的，而 Haar 系综是连续的，因此二者之间必然有误差。在统计学中，有熟知的结论：对于一个随机变量  $x$ ，对其进行  $M$  次采样  $x_i$ ，定义  $\bar{x} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M x_i$  为这  $M$  次采样结果的平均值，则有  $\text{Var} \bar{x} = \mathbb{E}[(\bar{x} - \mathbb{E}x)^2] = \frac{\text{Var}x}{M}$ ，于是  $|\bar{x} - \mathbb{E}x| \sim \frac{\sigma_x}{\sqrt{M}}$ 。类似地，考虑从 Haar 系综中随机选取  $M$  个向量构成一个有限系综，对于这一有限系综，应该有  $\Delta^{(k)} \sim M^{-\frac{1}{2}}$ 。此处  $M = 2^{N_B}$ ，于是  $\Delta^{(k)} \sim 2^{-N_B/2}$ 。事实上，如果取 Frobenius 范数，可以解析地得到

$$\Delta_F^{(k)} = \sqrt{\frac{1}{M} \left( \frac{(d+k-1)!}{(d-1)!k!} - 1 \right)} \quad (37)$$

推导细节参见 4.3.1 节。如果  $M = 2^{N_B}$ ,  $d = 2^{N_A}$ ，且  $2^{N_A \cdot N_B} \gg k$ ，那么有  $\Delta_F^{(k)} \approx 2^{\frac{1}{2}(kN_A - N_B)}$ 。从这里我们再次看出  $\Delta^{(k)} \rightarrow 0$  要求  $N_B > O(kN_A)$ 。

数值计算显示，从 Haar 系综中选取一个向量构成的投影系综得到的  $\Delta_F^{(k)}$  非常接近于 (37)。粗略地说，这意味着投影系综几乎是“最大均匀”的，其与 Haar 系综的偏差几乎全部来自于其大小有限性。Cotler 等 [4] 还数值计算了常见的混沌哈密顿量的本征态、或经

<sup>16</sup>这里的“边界”也包括时间方向的边界，即初态和末态的测量基底。

这些哈密顿量时间演化得到的态形成的投影系综，其  $\Delta^{(k)}$  亦呈现随系统大小以  $2^{-N_B/2}$  衰减的特性。

Ho 和 Choi[6] 在研究其构造的驱动 Ising 模型时亦考虑了这一问题。其数值分析表明，在经过足够长时间的演化后，投影系综的密度矩阵会和对应的 Haar 系综完全相同，更高阶矩的  $\Delta^{(k)}$  则随着  $N_B$  指数衰减。利用 4.2 节提出的转移矩阵方法可以推知，这一指数衰减行为与转移矩阵  $\mathbb{T}$  的非单位特征值有关：假设转移矩阵最大的非单位特征值的绝对值为  $1 - \Delta$ ，则  $\Delta^{(k)}$  应该大约按照  $(1 - \Delta)^{N_B}$  衰减。在这一特定模型中， $\lambda$  会连续地依赖于参数  $g$ ，而在  $g \in \mathbb{Z}\frac{\pi}{8}$  时，会有  $\Delta \rightarrow 0$ ，于是深度热化现象无法发生。

### 4.3.1 Haar 系综有限子集 $\Delta^{(k)}$ 大小的推导

在本节中，我们给出式 (37) 的推导。考虑 Frobenius 范数  $\|A\|_F = \sqrt{\text{tr}A^\dagger A}$ 。对于这一范数，考虑一个随机矩阵  $X$ ，有

$$\mathbb{E}\|X - \mathbb{E}X\|_F^2 = \text{tr}\mathbb{E}(X^\dagger - \mathbb{E}X^\dagger)(X - \mathbb{E}X) = \mathbb{E}\text{tr}X^\dagger X - \mathbb{E}X^\dagger \mathbb{E}X = \mathbb{E}\|X\|_F^2 - \|\mathbb{E}X\|_F^2 \quad (38)$$

考虑从 Haar 系综中随机选取  $M$  个态  $\{|\psi_i\rangle | i = 1, \dots, M\}$ 。记  $\rho_i^{(k)} = (|\psi_i\rangle\langle\psi_i|)^{\otimes k}$ ， $M$  个态构成的系综的  $k$  阶矩记为  $\rho_M^{(k)} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \rho_i^{(k)}$ 。容易看出  $\mathbb{E}\rho_M^{(k)} = \rho_{\text{Haar}}^{(k)}$ ，只需要再计算  $\mathbb{E}\|\rho_M^{(k)}\|_F^2$ 。我们直接利用定义式：

$$\mathbb{E}\|\rho_M^{(k)}\|_F^2 = \frac{1}{M^2} \sum_{i,j=1}^M \mathbb{E}\text{tr} \left[ \rho_i^{(k)} \rho_j^{(k)} \right] \quad (39)$$

我们其中利用到了  $\rho_i^{(k)}$  是厄米的的事实。直接由定义可知  $\text{tr} \left[ \rho_i^{(k)} \rho_j^{(k)} \right] = |\langle\psi_i|\psi_j\rangle|^{2k}$ ，那么

$$\mathbb{E}\|\rho_M^{(k)}\|_F^2 = \frac{1}{M} + \left(1 - \frac{1}{M}\right) \mathbb{E}|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^{2k} \quad (40)$$

若希尔伯特空间为  $d$  维，取一组标准正交基  $\{|e_j\rangle | j = 1, \dots, d\}$  使得  $|\psi_i\rangle$  是其中一个向量（不妨设为  $|e_1\rangle$ ），那么如果  $|\psi_j\rangle = \sum_i (x_{2i-1} + ix_{2i})|e_i\rangle$ ，有  $|\langle\psi_i|\psi_j\rangle| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$ 。考虑到两个不同向量的相互独立性， $\mathbb{E}|\langle\psi_i|\psi_j\rangle|^{2k}$  相当于在  $2d$  维空间中的单位球上取  $(x_1^2 + x_2^2)^k$  的期望值。利用高斯积分技巧，可以得到

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} r^{2(d+k)-1} e^{-r^2} dr \int_{S^{2d-1}} (x_1^2 + x_2^2)^k dA &= \int d^{2d} \mathbf{x} (x_1^2 + x_2^2)^k e^{-\mathbf{x}^2} \\ &= \pi^{d-1} \iint_{-\infty}^{+\infty} dx_1 dx_2 (x_1^2 + x_2^2)^k e^{-x_1^2 - x_2^2} \quad (41) \end{aligned}$$

于是

$$\begin{aligned} \mathbb{E}|\langle\psi_i|\psi_j\rangle|^{2k} &= \frac{\int_{S^{2d-1}} (x_1^2 + x_2^2)^k dA}{\int_{S^{2d-1}} dA} \\ &= \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 dx_2 (x_1^2 + x_2^2)^k e^{-(x_1^2 + x_2^2)}}{\int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 dx_2 e^{-x_1^2 - x_2^2}} \frac{\int_0^{+\infty} r^{2d-1} e^{-r^2} dr}{\int_0^{+\infty} r^{2(d+k)-1} e^{-r^2} dr} \\ &= \frac{\Gamma(d)\Gamma(k+1)}{\Gamma(d+k)\Gamma(1)} = \frac{(d-1)!k!}{(d+k-1)!} \quad (42) \end{aligned}$$

最终得到

$$\mathbb{E}\|\rho_M^{(k)}\|_F^2 = \frac{1}{M} + \left(1 - \frac{1}{M}\right) \frac{(d-1)!k!}{(d+k-1)!} \quad (43)$$

于是

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\|\rho_M^{(k)} - \rho_{\text{Haar}}^{(k)}\|_F^2 &= \frac{1}{M} + \left(1 - \frac{1}{M}\right) \frac{(d-1)!k!}{(d+k-1)!} - \frac{k!(d-1)!}{(d+k-1)!} \\ &= \frac{1}{M} \left(1 - \frac{(d-1)!k!}{(d+k-1)!}\right) \end{aligned} \quad (44)$$

另一方面，利用 (22)，容易得到

$$\|\rho_{\text{Haar}}^{(k)}\|_F^2 = \frac{(d-1)!k!}{(d+k-1)!} \quad (45)$$

于是得到

$$\Delta_F^{(k)} = \sqrt{\frac{1}{M} \left( \frac{(d+k-1)!}{(d-1)!k!} - 1 \right)} \quad (46)$$

即为式 (37)。

## 第五节 深度热化与动力学纯化

从第 4.2 节中可以看出，时一空对偶为理解深度热化提供了一种全新的视角。本节将进一步剖析这一视角，并指出：在时一空对偶下，深度热化与非么正动力学中的动力学纯化现象有着紧密的联系。

### 5.1 动力学纯化的概念

“动力学纯化”是非么正系统中存在的一种动力学现象，其概念最早由 Gullans 和 Huse[17] 提出。粗略来说，该现象指的是非么正的动力学过程会将一个混态变为纯态，即“纯化”。考虑一个系统由密度矩阵  $\rho$  描述。如果密度矩阵具有形式  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ ，则  $\rho$  刻画的是一个纯态  $|\psi\rangle$ 。而一般来说， $\rho$  不能写为一个左右矢直积的形式。比如，若是两个不同的态  $|\psi\rangle$  和  $|\phi\rangle$  以一定概率幅度相混，得到的密度矩阵则是  $\rho = p_\psi|\psi\rangle\langle\psi| + p_\phi|\phi\rangle\langle\phi|$ ，这刻画地是一个混态。

一个密度矩阵的“纯度”一般由纠缠熵给出。纠缠熵有若干种定义，其中计算较为方便的一种是二阶 Renyi 纠缠熵，定义为

$$S = -\ln \text{tr}\rho^2 \quad (47)$$

对于纯态，密度矩阵为投影算符，故归一化条件  $\text{tr}\rho = 1$  给出  $\text{tr}\rho^2 = 1$ ，于是纠缠熵  $S = 0$ 。反之，混态的纠缠熵一般大于零。对于一个维度为  $d$  的希尔伯特空间，有“最大混合态”  $\rho_{\max} = \frac{1}{d}\text{id}$ ，其纠缠熵为  $S_{\max} = \ln d$ 。可以认为，纠缠熵越小，系统越接近纯态；反之，纠缠熵越大，系统越“混”。

下面考虑纠缠熵在时间演化过程中的变化。么正的时间演化由  $\rho(t) = U(t)\rho U(t)^\dagger$  给出，其中  $U(t)$  是一个么正的演化算符。容易发现， $\text{tr}\rho(t)^2 = \text{tr}\rho^2$ ，从而纠缠熵在么正的时间演化下是不变的。这意味着，么正时间演化不改变一个系统的纯度。如果一个系统开始时是纯态，则其演化后还是纯态；如果开始时是混态，演化后仍然是“同等程度混合的”混态。

如果在系统中引入非么正性，上述结论将不再成立。一种常见的非么正性即是量子测量。一般来说，测量会让态的纯度上升。对于最简单的情况，考虑测量系统的某个可观测量  $O$ ，测得某个本征值  $\lambda$ ，则系统必然坍缩到  $\lambda$  对应的本征态。如果该本征值是非简并的，则本征态是唯一的，于是无论系统的初态如何（是否为混态），测量后系统都将处于该本征态（一个纯态）。因此，测量可以把混态转化为纯态。一般来说，如果一个测量只作用在系统的一部分上，则测量无法将系统完全转化为纯态，但依然可以提高其纯度。

Gullans 和 Huse 考虑了一个带有随机测量的量子线路模型，其构型如图 3 所示。在每一个单位时间内，系统被一层 Clifford 量子门<sup>17</sup>作用发生么正演化，随后，每一个点都有一定概率  $p$  被测量。令系统初始时处在最大混合态，通过数值方法模拟系统的时间演化，可以发现：存在一个  $p$  的临界值  $p_c$ ，当  $p$  在临界值以下时，经过一段时间的演化，系统的纠缠熵会稳定到一个依赖于  $p$  的值，且在该值上至少维持  $O(e^L)$  的时间；当  $p$  在临界值以上时，经过一段时间的演化，系统的纠缠熵会变得很小，即演化到几乎是一个纯态，这就是所谓的“动力学纯化”。这一现象被称为“动力学纯化相变”， $p$  小于和大于  $p_c$  分别被叫做混合相和纯化相。如果定义系统的纠缠熵演化到几乎为零（即  $o(L)$  大小）的用时为纯

<sup>17</sup>即所有 CNOT 门、Hadamard 门和相位门拼接而成的线路的集合，参见 [18]。

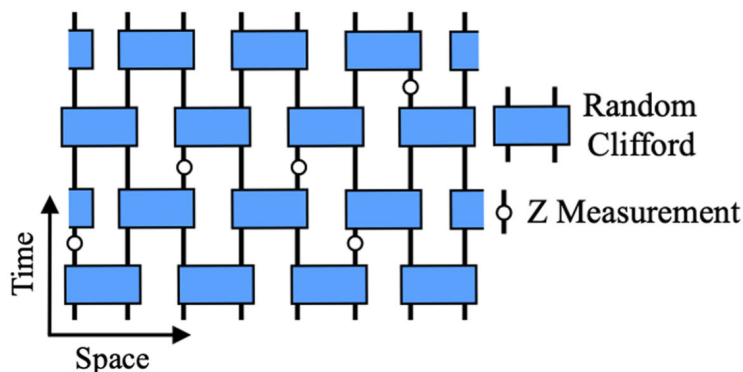


图 3: 实现动力学纯化的一个量子线路模型。图中蓝色矩形为随机 Clifford 量子门, 白色圆点表示在  $Z$  自旋基下的一个测量, 线路中每一条竖线上以概率  $p$  存在一个这样的测量。图片取自 [17]。

化时间  $t_p$ , 那么在纯化相中有  $t_p \leq O(\ln L)$ , 在混合相中有  $t_p = O(e^L)$ , 在二者的临界相上有  $t_p = \text{poly}(L)$ <sup>18</sup>。这给出了非么正时间演化下系统的纠缠熵变化的一般规律。

## 5.2 用动力学纯化解深度热化

### 5.2.1 时一空对偶下的动力学纯化

上一节中提到的实现动力学纯化的模型是较为理想化的演化—测量模型, 其实验实现面临着严重的后选择问题<sup>19</sup>。Ippoliti 等 [19] 进一步提出, 类似的非么正动力学可以通过时一空对偶在普通的么正系统中实现。具体来说, 考虑一个墙砖构型<sup>20</sup>的量子线路, 如 4.2 节一样, 将其原本的时间方向视为空间方向、空间方向视为时间方向, 得到的仍然是一个墙砖构型的量子线路, 这一线路称为原线路的时一空对偶。一般来说, 即使一个系统的时间演化是么正的, 其时一空对偶未必仍然是么正的。因此, 如果我们考虑对偶线路的时间演化 (即原线路沿着空间方向的“演化”), 其将会对应一个非么正的动力学演化。对于纠缠熵的数值计算显示, 一般来说, 如果原先的动力学演化是么正的, 则其时一空对偶会处在动力学纯化相变中的混合相, 即其纯化时间是指数发散的。特别地, 如果原演化的时一空对偶仍然是么正的, 则演化过程中完全不会发生任何的动力学纯化, 此时纯化时间是无穷长。

### 5.2.2 动力学纯化与深度热化

利用上一节的结论, 我们可以理解并预测深度热化系统的一些性质。我们考虑一个由  $A$  和  $B$  两部分构成的一维系统, 其在对  $B$  进行投影测量后构成一个投影系综。我们进一步将  $B$  分为  $B_1$  和  $B_2$  两部分, 其中  $B_1$  的长度记为  $r$ 。将  $B$  上的比特串  $\mathbf{z}$  拆分为其在  $B_1$

<sup>18</sup>  $\text{poly}(L)$  代表  $L$  的多项式函数。

<sup>19</sup> 后选择问题是测量相关的量子动力学实验中的一个核心概念。一般来说, 对于一个包含测量的量子线路模型, 我们考虑其动力学时均是假设每一次测量得到了一个特定的结果。但在实验中, 每一个测量的结果都是随机的, 因此, 每一个测量的结果等于我们想要得到的结果的概率为  $\frac{1}{n}$ , 其中  $n$  测量的可能结果数量。那么, 如果线路中存在  $N$  个测量, 预期要重复  $n^N$  次实验才能获得一个与我们的理论模型一致的实验样本, 这一指数大的实验开销是实际中不可接受的。

<sup>20</sup> 墙砖构型指每一层均由一系列两比特量子门构成、相邻层之间的两比特量子门为交错关系的量子线路, 图 3 中的线路即是一个墙砖构型的线路。

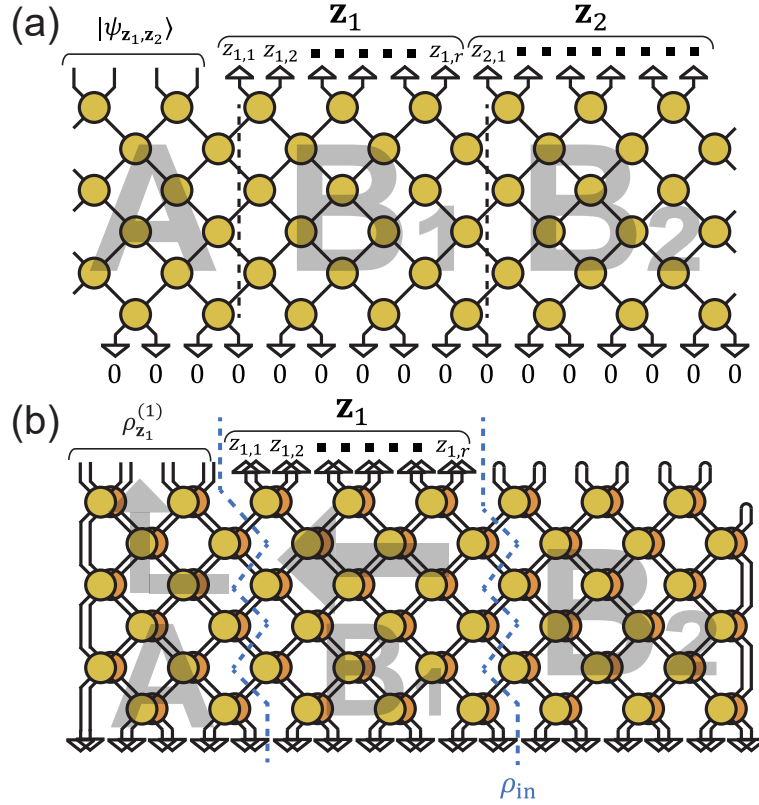


图 4: 动力学纯化与深度热化。(a) 系统示意图, 其中每一个黄色圆圈代表一个对偶么正的二比特量子门, 端点处连接的三角形代表将此处波函数投影至  $|z\rangle$  上; (b) 用动力学纯化理解深度热化示意。由于此时考虑密度矩阵, 所有演化对右矢和左矢均有作用, 对应图中有黄色和橙色两套量子门的线路。图片基于 [8] 中图片绘制。

和  $B_2$  上的部分  $z_1$  和  $z_2$ , 此时投影系统记为  $\{(p(z_1, z_2), |\psi_{z_1, z_2}\rangle)\}$ , 如图 4(a) 所示。我们有如下关系式:

$$\text{tr}(\rho^{(k)})^2 \geq \frac{1}{2^r} \left( \mathbb{E}_{z_1} \text{tr}(\rho_{z_1}^{(1)})^2 \right)^k \quad (48)$$

其中  $\rho_{z_1}^{(k)} = \sum_{z_2} p(z_2|z_1) (|\psi_{z_1, z_2}\rangle \langle \psi_{z_1, z_2}|)^{\otimes k}$  是固定  $z_1$ 、约化  $B_2$  得到的  $k$  阶矩, 满足  $\mathbb{E}_{z_1} \rho_{z_1}^{(k)} = \sum_{z_1} p(z_1) \rho_{z_1}^{(k)} = \rho^{(k)}$ 。注意到  $\text{tr}(\rho_{z_1}^{(1)})^2$  表征了密度矩阵  $\rho_{z_1}^{(1)}$  的纯度, 而  $\text{tr}(\rho^{(k)})^2$  表征了  $\rho^{(k)}$  的“纯度”。又注意到形成  $k$ -设计意味着最大混合, 关系式 (48) 可以这样理解: 如果投影系统的总均匀性足够高, 则在固定子系统  $z_1$  时得到的密度矩阵的均匀性应该亦很高; 因此, 如果  $\rho_{z_1}^{(1)}$  的平均纯度很高, 就说明投影系统的总均匀性并不高。(48) 的推导是直接的, 证明细节在 [8] 的 IV.A 节和附录 D 中给出。

考虑  $\rho_{z_1}^{(1)}$  的意义, 其相当于只对  $B_1$  部分作测量得到的投影系统的密度矩阵, 其用量子线路表示如图 4(b) 所示。可以将  $\rho_{z_1}^{(1)}$  视作如下时空对偶演化得到的密度矩阵:  $B_2$  部分的线路在  $B_2$  和  $B_1$  的交界处给出一个高度混合的初态  $\rho_{in}$ , 随后该态经过  $B_1$  部分的时空对偶演化, 再经由  $A$  部分的线路输出为  $\rho_{z_1}^{(1)}$ 。由于  $A$  部分不含测量, 这一部分不改变态的纯度, 故输出态的纯度应该与从  $B_1$  输出到  $A$  的态的纯度相当。利用 (5.2.1) 节的结论,  $B_1$  部分会给出一个混合相的动力学纯化 [8], 对应的纯化时间  $\xi_p$  是体系“大小”<sup>21</sup> $t$

<sup>21</sup> 由于时空对偶, 这里的“大小”实际应该是演化的层数。



的指数函数。可以假设  $\xi_p \sim 2^{v_p t}$ ，其中  $v_p$  称为纯化速度。

利用量子线路和统计物理模型的对偶 [20, 21] 可以进一步证明，在  $B_1$  的长度  $r$  较大时，纠缠熵会具有形式

$$S(r) = -\log_2 \mathbb{E}_{\mathbf{z}_1} \text{tr}(\rho_{\mathbf{z}_1}^{(1)})^2 \sim e^{-2r/\xi_p} \quad (49)$$

可以将 (48) 改写为

$$-\ln \text{tr}(\rho^{(k)})^2 \leq \ln 2(kS(r) + r) \quad (50)$$

这一不等式必须对于所有的  $r$  均成立。利用 (49)，对  $r$  取极小值后消去  $r$ ，得到

$$-\ln \text{tr}(\rho^{(k)})^2 \leq \xi_p \frac{\ln 2}{2} \ln \frac{2ek}{\xi_p} \quad (51)$$

若要求  $\|\rho^{(k)} - \rho_{\text{Haar}}^{(k)}\| \leq \epsilon \|\rho_{\text{Haar}}^{(k)}\|$ ，则有  $\text{tr}(\rho^{(k)})^2 \leq (1 + \epsilon^2) \text{tr}(\rho_{\text{Haar}}^{(k)})^2 = (1 + \epsilon^2) \frac{k!(d-1)!}{(2^{N_A+k-1})!}$ 。于是，系统形成  $\epsilon$ -近似  $k$ -设计的必要条件为

$$\ln \frac{(2^{N_A+k-1})!}{k!(d-1)!} - \ln(1 + \epsilon^2) \leq \xi_p \frac{\ln 2}{2} \ln \frac{2ek}{\xi_p} \quad (52)$$

从而我们可以得知系统对任意大的  $k$  均形成近似  $k$ -设计的条件：对上式取大  $k$  极限，再利用  $N_A$  亦很大，得到

$$t_\infty \geq \frac{N_A}{v_p} \quad (53)$$

从这一式子亦容易看出“纯化速度”这一名称的物理意义。作为对比，对于传统热化，有熟知的结论：系统达到传统热化的时间尺度为

$$t_1 = \frac{N_A}{v_E} \quad (54)$$

其中  $v_E$  称为纠缠速度 [22]。因此，(53) 告诉我们：系统发生深度热化的“速度”即是纯化速度  $v_p$ 。进而，如果  $v_p < v_E$ ，就必然有  $t_\infty > t_1$ ，从而深度热化的时间尺度大于传统热化的时间尺度；反之，则深度热化的时间尺度有可能等于传统热化的时间尺度。事实上，正如前面提到的 [16]，确实存在  $t_\infty > t_1$  的模型。

## 第六节 深度热化的应用

### 6.1 探测量子体系保真度

保真度是量子模拟中的一个重要概念。在制备一个量子体系时，我们的实验系统往往存在噪声和误差，使得实际制备得到的态并不完全等于我们制备的目标。假设我们制备的目标为一个纯态  $|\psi\rangle$ ，实际制备的结果可能是一个混态，一般来说可以用一个密度矩阵  $\rho$  来描述。我们定义系统的保真度为

$$F = \langle \psi | \rho | \psi \rangle \quad (55)$$

容易看出  $0 \leq F \leq 1$ ，且  $F = 1$  当且仅当  $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ ，即制备过程完美地得到了目标态。一般来说， $F$  越接近 1，代表制备过程越理想。

对于一个给定的实际系统，如何测量其保真度是一个重要问题，这关系到我们可以在多大范围内应用这个系统制备出的态。Choi 等提出，可以利用在一个体系中测量其深度热化现象来确定这一系统的保真度，并在一个 Rydberg 原子实验平台上验证了这一理论 [9]。

Choi 等考虑的实验平台可以等价地视为一个一维的自旋链，Rydberg 系统的哈密顿量在这个链上给出一个混沌的时间演化。按照 4.1.1 节的结论，任意一个初态经过一段时间的时间演化后给出的投影系综均应发生深度热化现象。特别地，考虑我们把子系统 A 取为一个格点。按照深度热化的结论，投影系综应该给出 A 的希尔伯特空间上的一个 Haar 随机分布。特别地，设 A 的希尔伯特空间维数为  $D_A$ ，取空间的一组本征基为  $\{|z_A\rangle | z_A = 0, \dots, D_A - 1\}$ 。我们考虑  $p(z_A = 0 | z_B) = |\langle \psi_A(z_B) | z_A = 0 \rangle|^2$ ，即是  $|\psi_A(z_B)\rangle$  在这一组本征基下的第一个坐标分量的模方。下面考虑  $p(z_A = 0 | z_B)$  对  $z_B$  的概率分布，由深度热化性质，这等价于  $|\langle \psi | z_A = 0 \rangle|^2$  这一随机变量在  $|\psi\rangle$  是 Haar 随机向量时的概率分布。记这一分布函数为

$$p_{z_B}(p(z_A = 0 | z_B) = q) =: P(q) \quad (56)$$

采用类似 4.3.1 节的推导方式，有

$$P(q) = (D_A - 1)(1 - q)^{D_A - 2} \quad (57)$$

具体推导见 6.1.1 节。如果不考虑控制  $z_B$ ，直接考虑 A 上的约化密度矩阵，则其应该为单位阵  $\rho_A = \frac{1}{D_A} \text{id}$ ，于是

$$P(q) = \delta\left(q - \frac{1}{D_A}\right) \quad (58)$$

实验上，假如系统的保真度较好，实验结果应该接近于 (57)；反之，如果系统中噪声很大，造成了退相干，在 A 系统上进行的观测愈会“忘记”其控制的  $z_B$  结果，于是实验结果应该更接近于 (58)。

实验结果如图 5 所示。在演化时间较短时，噪声造成的退相干现象不明显，于是  $P(q)$  的表现与 Haar 理论的预期接近；演化时间较长时，噪声会显著地造成退相干，使得  $P(q)$  向 (58) 的结果靠拢。从中我们可以看出： $P$  函数与 Haar 理论的偏差可以表征这一系统噪声的大小，亦即保真度。

Choi 等提出了如下公式：

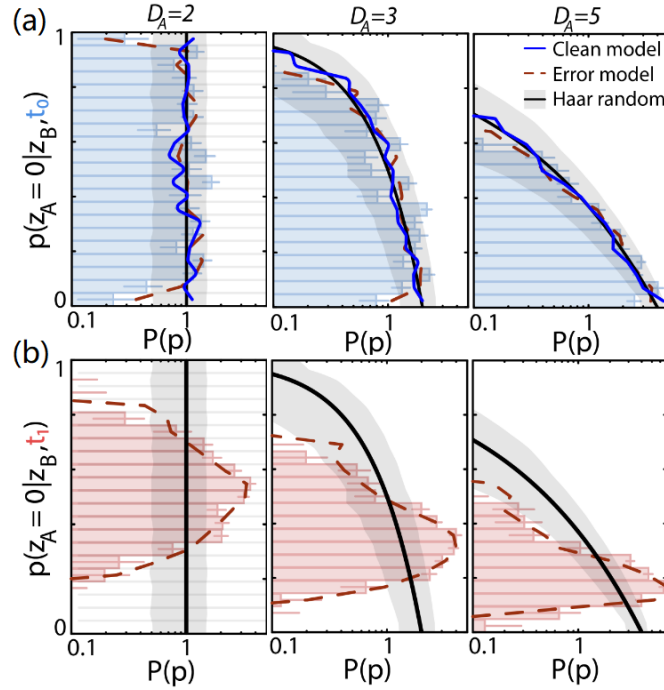


图 5: Choi 等对  $P$  函数的实验测量与理论对照。图中黑色实线为 Haar 系综结果 (式 (57)), 浅色直方图为实验结果, 浅色虚线为考虑了噪声时的数值模拟结果。(a) 在演化时长较短时,  $P$  函数非常接近 Haar 系综的预测; (b) 在演化时长较长时, 实验测得的  $P$  函数分布向  $P = 1/D_A$  聚拢。图片取自 [9]。

$$F_c = 2 \frac{\sum_{\mathbf{z}} p_0(\mathbf{z}) p(\mathbf{z})}{\sum_{\mathbf{z}} p_0(\mathbf{z})^2} - 1 \quad (59)$$

其中  $\mathbf{z}$  指整个系统的比特,  $p_0(\mathbf{z})$  指理论上  $\mathbf{z}$  测量结果出现的概率,  $p(\mathbf{z})$  指实验中测得的概率。式 (59) 的推导见 [9] 的附录部分。在实验上, 若我们进行了  $M$  次实验、每一次实验得到一个比特串结果  $z_{\text{exp}}^{(i)}$ , 则可以估算

$$F_c \approx 2 \frac{\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M p_0(z_{\text{exp}}^{(i)})}{\sum_{\mathbf{z}} p_0(\mathbf{z})^2} - 1 \quad (60)$$

Choi 等将在实验装置上利用 (60) 测得的保真度与数值模拟存在的噪声的系统得到的保真度进行对照, 发现二者高度一致, 说明了本方法的可靠性。这一测量方式不需要任何特殊的实验技巧, 是一种容易在实际实验系统中实现的探测保真度的方式。

### 6.1.1 $P(q)$ 分布函数的推导

本节中我们给出 (57) 的推导。类似于 4.3.1 节的方式, 展开  $|\psi\rangle = \sum_{j=0}^{D_A-1} (x_{2j+1} + ix_{j+2})|z_A = j\rangle$ , 则有

$$P(q) = \frac{\int_{S^{2d-1}} \delta(x_1^2 + x_2^2 - q) dA}{\int_{S^{2d-1}} dA} \quad (61)$$

注意到

$$\int_0^{+\infty} r^{2D_A-3} e^{-r^2} dr \int_{S^{2d-1}} \delta(x_1^2 + x_2^2 - q) dA = \int d^{2D_A} \mathbf{x} \delta(x_1^2 + x_2^2 - q\mathbf{x}^2) e^{-\mathbf{x}^2} \quad (62)$$

令  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \mathbf{y})$ , 则有  $x_1^2 + x_2^2 - q\mathbf{x}^2 = (1-q)(x_1^2 + x_2^2) - q\mathbf{y}^2$ 。依次完成对  $x_2, x_1$  的积分, 得到

$$\begin{aligned} \int d^{2D_A} \mathbf{x} \delta(x_1^2 + x_2^2 - q\mathbf{x}^2) e^{-\mathbf{x}^2} &= \int d^{2D_A-2} \mathbf{y} e^{-\mathbf{y}^2} \int_{-\sqrt{\frac{q}{1-q}}\mathbf{y}^2}^{\sqrt{\frac{q}{1-q}}\mathbf{y}^2} dx_1 \frac{e^{-\frac{q}{1-q}\mathbf{y}^2}}{(1-q)\sqrt{\frac{q\mathbf{y}^2}{1-q} - x_1^2}} \\ &= \frac{\pi}{1-q} \int d^{2D_A-2} \mathbf{y} e^{-\frac{\mathbf{y}^2}{1-q}} = \pi^{D_A} (1-q)^{D_A-2} \quad (63) \end{aligned}$$

于是

$$\begin{aligned} P(q) &= \frac{\int_{S^{2d-1}} \delta(x_1^2 + x_2^2 - q) dA}{\int_{S^{2d-1}} dA} = \frac{\int d^{2D_A} \mathbf{x} \delta(x_1^2 + x_2^2 - q\mathbf{x}^2) e^{-\mathbf{x}^2} \int_0^{+\infty} r^{2D_A-1} e^{-r^2} dr}{\int d^{2D_A} \mathbf{x} e^{-\mathbf{x}^2} \int_0^{+\infty} r^{2D_A-3} e^{-r^2} dr} \\ &= (1-q)^{D_A-2} \frac{\Gamma(D_A)}{\Gamma(D_A-1)} = (D_A-1)(1-q)^{D_A-2} \quad (64) \end{aligned}$$

即为式 (57)。

## 6.2 用深度热化改良量子影子层析

### 6.2.1 传统量子影子层析

量子力学的基本假设告诉我们, 一个处于纯态的量子系统的一切性质由其所处的量子态  $|\psi\rangle$  给出; 对于有可能处在混态的系统, 其一切性质由密度矩阵  $\rho$  给出。因此, 在对量子系统的实验中, 最自然的问题就是如何测量密度矩阵  $\rho$ 。一般来说,  $\rho$  是一个维数非常高的矩阵。而对量子系统进行测量, 得到的是  $\rho$  投影到某一个可观测量的本征态上的概率幅。可以想象, 取足够多的可观测量后, 这一些概率幅信息就可以重构出  $\rho$ , 这便是量子态层析的思路。“层析”一词在传统语境下, 指的是通过一层一层地扫描, 得到一个空间物体的三维信息; 在这里, 每一个可观测量对应的测量即是“一层扫描”, 通过很多层“扫描”的数据拼接起来, 即可得到密度矩阵的全貌。

但量子态层析面临着一个根本的难题: 密度矩阵的大小随着量子系统的大小指数增长, 从而确定密度矩阵所需要的测量成本也指数增长, 这意味着在实验上不可能实现对大系统的态层析。为此, Preskill 等 [23] 提出影子层析的方法。其大致想法是: 随机选取一系列可观测量, 并对这些可观测量分别进行一次观测。每一次观测会得到密度矩阵投影到一个可观测量的本征基上的概率幅的信息, 这被叫做一个“影子”。只要选取的可观测量系列的分布足够广, 这些“影子”就可以涵盖任何我们想要得知的目标可观测量的信息, 并且存在一套算法可以从每一个“影子”上信息提取出目标可观测量的信息。

下面简要介绍量子影子层析的具体实现。为简化起见, 考虑  $n$  个量子比特构成的一维系统, 其希尔伯特空间维数为  $d = 2^n$ 。每一个格点上的希尔伯特空间作为量子比特有一组基  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ , 总的希尔伯特空间有计算基  $\{|\mathbf{z}\rangle\}$ , 其中  $\mathbf{z} \in \{0, 1\}^n$  为长度  $n$  的比特串。把目标系统的密度矩阵记为  $\rho$ 。考虑对目标系统做一个么正变换  $U$ , 其密度矩阵变为  $U\rho U^\dagger$ , 然后在计算基下对系统进行测量。测得结果为  $\mathbf{z}$  的概率应为

$$p(\mathbf{z}; U, \rho) = \text{tr} [U\rho U^\dagger |\mathbf{z}\rangle\langle \mathbf{z}|] = \langle \mathbf{z}|U\rho U^\dagger |\mathbf{z}\rangle = \text{tr} [\rho (U^\dagger |\mathbf{z}\rangle\langle \mathbf{z}|U)] \quad (65)$$

于是我们猜测， $U^\dagger |\mathbf{z}\rangle\langle \mathbf{z}|U$  这一量可以给出关于  $\rho$  的信息。事实上，给定一个么正变换构成的集合  $\mathcal{U}$ ，我们可以考虑如下映射  $\mathcal{M}$ ，给定密度矩阵  $\rho$ ，有

$$\mathcal{M}(\rho) = \mathbb{E}_{U \in \mathcal{U}} \sum_{\mathbf{z}} p(\mathbf{z}; U, \rho) \cdot U^\dagger |\mathbf{z}\rangle\langle \mathbf{z}|U \quad (66)$$

$\mathcal{M}$  作为一个线性映射若是可逆的，则称  $\mathcal{U}$  是层析完备的。容易看出，层析完备的一个必要条件是：对于任意两个不同的密度矩阵  $\rho$  和  $\sigma$  都存在  $U \in \mathcal{U}$  和  $\mathbf{z}$  使得  $\langle \mathbf{z}|U\rho U^\dagger |\mathbf{z}\rangle \neq \langle \mathbf{z}|U\sigma U^\dagger |\mathbf{z}\rangle$ 。

对于特殊的  $\mathcal{U}$ ，可以得到  $\mathcal{M}$  的解析表达式，进而可以计算出  $\mathcal{M}^{-1}$  的解析表达式。于是，若在一次实验测量过程中，我们作用了一个特定的  $U_i$ ，得到了测量结果  $\mathbf{z}_i$ ，我们可以定义

$$\hat{\rho}_i = \mathcal{M}^{-1} \left( U_i^\dagger |\mathbf{z}_i\rangle\langle \mathbf{z}_i|U_i \right) \quad (67)$$

这被叫做  $\rho$  的一个经典影子。利用  $\mathcal{M}$  的线性性，容易知道：

$$\mathbb{E} \hat{\rho} = \mathbb{E}_{U \in \mathcal{U}} \sum_{\mathbf{z}} p(\mathbf{z}; U, \rho) \mathcal{M}^{-1} (U^\dagger |\mathbf{z}\rangle\langle \mathbf{z}|U) = \mathcal{M}^{-1}(\mathcal{M}(\rho)) = \rho \quad (68)$$

因此，每一个经典影子给出对  $\rho$  的一个估计。进行足够多次的测量，即可重构出  $\rho$ 。然而，如本节开头处的讨论所述，直接重构  $\rho$  的代价是非常大的，或者说，在测量次数有限的情况下，重构出的  $\rho$  与真实的  $\rho$  的误差是相当大的。但一般来说，我们并不需要整个密度矩阵的信息。考虑某个可观测量<sup>22</sup> $O$ ，经典影子可以给出其期望值的预测  $\hat{o} = \text{tr}(O\hat{\rho})$ 。我们可以发现，当  $\mathcal{U}$  选取得较好时， $\hat{o}$  可以在较少次数的测量内还原出  $O$  在原密度矩阵下的期望值。事实上，有如下定理：

**定理：**  $\hat{o}$  的方差满足

$$\text{Var}[\hat{o}] = \mathbb{E} \left[ (\hat{o} - \mathbb{E}\hat{o})^2 \right] \leq \|O - \frac{\text{tr}O}{2^n} \text{id}\|_{\text{shadow}} \quad (69)$$

其中影子范数定义为

$$\|O\|_{\text{shadow}} = \max_{\sigma} \sqrt{\mathbb{E}_U \sum_{\mathbf{z}} p(\mathbf{z}; U, \sigma) p(\mathbf{z}; U, \mathcal{M}^{-1}(O))} \quad (70)$$

证明参见 [23] 的补充材料。如果对于我们想要测量的算符  $O$ ，有  $\|O\|_{\text{shadow}}$  较小，那么我们就可以在较少的测量次数内获得对  $O$  的期望值较好的估计。

可以看出，无论是  $\mathcal{M}$  的计算，还是影子范数的大小，都高度依赖于么正变换集合  $\mathcal{U}$  的选取。有两个特殊的集合值得关注。第一个是 Clifford 群，可以证明其构成一个量子 3-设计 [24]，亦即其可以近似认为是在所有么正变换中的集合中均匀分布。第二个是单比特 Pauli 群，即在每个比特上作用若干泡利矩阵算符、并将每个比特上的作用直积起来得到的变换的集合。这两个集合均易在量子计算平台上实现。在这两个集合下， $\mathcal{M}$  和影子范数的表达式列于表 1。可以看出，Clifford 门集合适用于几乎所有算符的测量，而单比特 Pauli 群对于测量局域算符非常高效。

<sup>22</sup> 此处考虑的都是对  $\rho$  线性的可观测量。有一些对  $\rho$  超出线性关系的量（如纠缠熵）亦可通过影子层析的方法测量，此处从略。

$\mathcal{U}$	$\mathcal{M}^{-1}(U^\dagger \mathbf{z}\rangle\langle\mathbf{z} U)$	影子范数
Clifford 群	$(2^n + 1)U^\dagger \mathbf{z}\rangle\langle\mathbf{z} U - \text{id}$	$\ O - \frac{\text{tr}O}{2^n}\text{id}\ _{\text{shadow}} \leq 3\text{tr}O^2$
单比特 Pauli 群	$\bigotimes_{j=1}^n (3U_j^\dagger z_j\rangle\langle z_j U_j - \text{id})$	$\ O - \frac{\text{tr}O}{2^n}\text{id}\ _{\text{shadow}} \leq 4^{\text{loc}(O)}\ O\ _\infty^2$

表 1: 两种特殊的么正变换集合选取下  $\mathcal{M}^{-1}$  和影子范数的表达式。其中,  $\text{loc}(O)$  代表一个局域算符作用的格点的数目,  $\|O\|_\infty$  代表  $O$  作为矩阵的矩阵元最大值。

### 6.2.2 利用深度热化在模拟量子系统中实现影子层析

上面提到的影子层析方案中, Clifford 群和 Pauli 群的实现均要求我们有对单个或几个特定的量子比特作用一个固定的量子门的能力。这对于模拟量子系统来说是难以实现的——在模拟量子系统中, 唯一自然的操作是以系统的哈密顿量进行时间演化。而一般来说, 时间演化所构成的么正变换的集合难以构成一个可精确控制的、分布性质好的集合。因此, 传统的影子层析难以在模拟量子系统中实现。

利用投影系综的深度热化性质, Tran 等 [11] 和 McGinley 与 Fava[10] 各自提出了一种改进量子影子层析的方法: 在系统中加入一些辅助自由度后, 则只需要对系统作一个特定的整体么正时间演化, 即可实现影子层析。

具体来说, 考虑一个系统 A 上有密度矩阵  $\rho_A$ , 我们欲实现对  $\rho_A$  的影子层析。为简便起见, 仍假设 A 是  $N_A$  个量子比特构成的一维链。选取  $N_B$  个辅助量子比特构成系统 B, 与系统 A 共同构成一个长度  $N = N_A + N_B$  的比特链。不妨设 B 系统的所有比特在初始时刻处于  $|0\rangle$  态。我们作如下操作: 对整个系统作一个么正变换  $U$ , 然后在计算基下进行测量, 得到一串比特数  $\mathbf{z} = z_1 z_2 \dots z_N$ , 其中  $z_i = 0, 1$ 。比特串  $\mathbf{z}$  出现的概率应该等于

$$p_{\mathbf{z}} = \text{tr} [|\mathbf{z}\rangle\langle\mathbf{z}|U(\rho_A \otimes |0^{\otimes N_B}\rangle\langle 0^{\otimes N_B}|)U^\dagger] = \text{tr} [\langle 0^{\otimes N_B}|U^\dagger|\mathbf{z}\rangle\langle\mathbf{z}|U|0^{\otimes N_B}\rangle\rho_A] \quad (71)$$

记

$$q_{\mathbf{z}} = \frac{1}{d_A} \langle\mathbf{z}|U|0^{\otimes N_B}\rangle\langle 0^{\otimes N_B}|U^\dagger|\mathbf{z}\rangle, \quad |\phi_{\mathbf{z}}\rangle = \frac{\langle\mathbf{z}|U|0^{\otimes N_B}\rangle}{\sqrt{d_A q_{\mathbf{z}}}} \quad (72)$$

则  $\{(q_{\mathbf{z}}, |\phi_{\mathbf{z}}\rangle)\}$  构成一个投影系综<sup>23</sup>。于是, 我们得到:  $p_{\mathbf{z}} = d_A \text{tr} [q_{\mathbf{z}}|\phi_{\mathbf{z}}\rangle\langle\phi_{\mathbf{z}}|\rho_A]$ 。由投影系综的均匀分布性质, 我们知道,  $q_{\mathbf{z}}|\phi_{\mathbf{z}}\rangle\langle\phi_{\mathbf{z}}|$  均匀地遍历了厄米矩阵的流形, 于是可以认为  $p_{\mathbf{z}}$  包含了所有  $\rho_A$  包含的信息。于是我们猜测: 可以从  $p_{\mathbf{z}}$  重构出  $\rho_A$ 。

严格来说, 可以重构出  $\rho_A$  的条件是: 线性映射  $S: \rho_A \mapsto \{p_{\mathbf{z}}\}$  可逆。由维数分析可知, 可逆的必要条件是  $N_B \geq N_A$ 。在  $N_B \geq N_A$  且  $U$  的对应的时间演化足够让 A 上的局域信息充分传播到 B 上的情况下, 一般可以假设  $S$  有逆映射  $R$ , 且  $R$  可以通过计算得到。注意到  $S$  一般来说并不是一个方阵:  $\rho_A$  包含  $2^{2N_A}$  个参量,  $p_{\mathbf{z}}$  包含  $2^{N_A+N_B}$  个, 因此逆映射  $R$  若存在则一般不是唯一的。我们不加论证地给出  $R$  的最佳构造, 具体的证明和讨论参见 [11]。容易验证, 形如

$$R = (S^\dagger \Gamma S)^{-1} S^\dagger \Gamma \quad (73)$$

的矩阵均满足  $RS = \text{id}$ , 其中  $\Gamma$  是  $2^{N_A+N_B}$  维的正定矩阵。对于一个给定的  $\rho_A$ , 取

<sup>23</sup>这和此前提到的投影系综有所不同: 这里的编号  $\mathbf{z}$  是整个系统的一组基, 而非子系统 B 的基。但可以仿照此前的方法论证: 当么正变换  $U$  在 Haar 系综中取值时, 若  $N_B > O(kN_A)$ , 则  $\{(q_{\mathbf{z}}, |\phi_{\mathbf{z}}\rangle)\}$  将大概率构成一个  $k$ -设计。于是, 若  $U$  是一个混沌的时间演化, 其给出的  $\{(q_{\mathbf{z}}, |\phi_{\mathbf{z}}\rangle)\}$  也大概率构成一个  $k$ -设计。

$$\Gamma_{\mathbf{z}, \mathbf{z}'} = \delta_{\mathbf{z}, \mathbf{z}'} \left( \langle \mathbf{z} | U (|0^{\otimes N_B}\rangle \langle 0^{\otimes N_B}| \otimes \rho_A) U^\dagger | \mathbf{z} \rangle \right)^{-1} \quad (74)$$

则对应的  $R$  是最佳的  $R$ 。一般来说，我们构造  $R$  时并不知道确切的  $\rho_A$ ，此时可以估算一个  $\rho_A$  后利用 (73) 和 (74) 计算出  $R$ 。

那么，假设我们对系统做了  $m$  次测量，每次得到了一个比特串  $\mathbf{z}_i$ ，则我们每一次均可以得到一个对密度矩阵的估计  $\hat{\rho}_i = R(\mathbf{z}_i)$ ，其中  $R(\mathbf{z}_i)$  代表  $R$  作用在  $p_{\mathbf{z}} = \begin{cases} 1 & \mathbf{z} = \mathbf{z}_i \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$  这个元素上。从而我们可以得到对一个可观测量  $O$  的估计值  $\hat{o}_i = \text{tr}(\hat{\rho}_i O)$ 。多次测量进行平均，即可获得对该可观测量期望值的估计。在不假定  $U$  具有特定形式的前提下，难以对  $R$  和  $\hat{o}$  的方差做出更多描述。在具体数值层面，可以计算得到，对于目前实验中常见的量子模拟体系，测量局域可观测量所需要的重复实验次数约为  $10^3$ ，测量全局可观测量所需要的次数约为  $10^5$ [11]。

## 第七节 对深度热化的其它研究

Wilming 等 [25] 从另一个角度说明了深度热化的普遍性。我们认为, 传统热化, 即密度矩阵的热化, 是普遍的, 即在测度意义下几乎所有的系统都是热化的。而 Wilming 等说明了, 传统热化几乎一定意味着深度热化。具体来说, 若一个系统对于子系统 A 近似热化至无穷温, 即其密度矩阵与单位阵的差别足够小, 且进一步  $N_B$  足够大, 则子系统 B 的任意一组基在 Haar 测度意义下几乎一定给出子系统 A 上的  $k$ -设计。但正如 2.4 节所述, “Haar 测度下几乎任意一组基” 并不一定涵盖我们常用的计算基, 因此这一结论未必能够说明计算基下深度热化现象的普遍性。

Lucas 等考虑了存在守恒量 (准确来说, 是局域守恒量) 时投影系综的性质 [26]。研究表明, 此时的投影系综与广义吉布斯系综类似, 即任意的  $k$  阶矩等于整个系统满足守恒量要求的波函数集合投影得到的  $k$  阶矩相同; 但文中没有就这一  $k$  阶矩的具体形式做出描述。



## 第八节 小结

本文回顾了量子热化的基本理论，介绍了深度热化及其与相关的  $k$ -设计和投影系综等概念。进一步，本文介绍了 Haar 系综波函数投影和驱动 Ising 模型两个实现深度热化的具体体系，以及在这些体系中深度热化现象对子系统大小、混沌演化时长的依赖关系。从驱动 Ising 模型出发，利用时一空对偶和动力学纯化的概念，可以对深度热化给出更加深刻的解释，同时给出关于纯化时间的限制条件。最后，本文介绍了深度热化的两个应用：保真度探测与量子影子层析。深度热化的概念是对传统热化概念的一个创新性推广，且与非么正动力学中的若干概念有着深刻的联系，可以预期，对深度热化的研究能够推动我们对于量子系统动力学的更多理解。

## 术语

k-设计	k-design
保真度	fidelity
动力学纯化	dynamical purification
可积	integrable
吉布斯系综	Gibbs ensemble
墙砖	brickwork
多体局域化	many-body localization
密度矩阵	density matrix
对偶么正	dual unitary
张量网络	tensor network
投影系综	projected ensemble
时一空对偶	spacetime dual
最大混合态	maximally mixed state
本征态热化假说	eigenstate thermalization hypothesis
比特串	bit-string
深度热化	deep thermalization
混沌的	chaotic
纠缠熵	entanglement entropy
约化密度矩阵	reduced density matrix
范数	norm
计算基	computational basis
量子影子层析	quantum shadow tomography
量子态系综	quantum state ensemble
量子线路	quantum circuit
高斯么正系综	Gaussian unitary ensemble
高斯正交系综	Gaussian orthogonal ensemble

## 参考文献

- [1] Raj K. Pathria and Paul D. Beale. *Statistical mechanics*. Academic Press, an imprint of Elsevier, London San Diego Cambridge, MA Oxford, fourth edition edition, 2022.
- [2] James Sethna. *Statistical mechanics: entropy, order parameters, and complexity*. Oxford University Press, New York, 2021.
- [3] Luca D’Alessio, Yariv Kafri, Anatoli Polkovnikov, and Marcos Rigol. From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics. *Advances in Physics*, 65(3):239–362, May 2016.
- [4] Jordan S. Cotler, Daniel K. Mark, Hsin-Yuan Huang, Felipe Hernandez, Joonhee Choi, Adam L. Shaw, Manuel Endres, and Soonwon Choi. Emergent quantum state designs from individual many-body wavefunctions, March 2021. arXiv:2103.03536 [cond-mat, physics:hep-th, physics:physics, physics:quant-ph].
- [5] Joonhee Choi, Adam L. Shaw, Ivaylo S. Madjarov, Xin Xie, Ran Finkelstein, Jacob P. Covey, Jordan S. Cotler, Daniel K. Mark, Hsin-Yuan Huang, Anant Kale, Hannes Pichler, Fernando G. S. L. Brandão, Soonwon Choi, and Manuel Endres. Emergent Quantum Randomness and Benchmarking from Hamiltonian Many-body Dynamics, July 2022. arXiv:2103.03535 [cond-mat, physics:physics, physics:quant-ph].
- [6] Wen Wei Ho and Soonwon Choi. Exact Emergent Quantum State Designs from Quantum Chaotic Dynamics. *Physical Review Letters*, 128(6):060601, February 2022.
- [7] Pieter W. Claeys and Austen Lamacraft. Emergent quantum state designs and biunitarity in dual-unitary circuit dynamics. *Quantum*, 6:738, June 2022.
- [8] Matteo Ippoliti and Wen Wei Ho. Dynamical purification and the emergence of quantum state designs from the projected ensemble, May 2022. arXiv:2204.13657 [cond-mat, physics:quant-ph].
- [9] Joonhee Choi, Adam L. Shaw, Ivaylo S. Madjarov, Xin Xie, Ran Finkelstein, Jacob P. Covey, Jordan S. Cotler, Daniel K. Mark, Hsin-Yuan Huang, Anant Kale, Hannes Pichler, Fernando G. S. L. Brandão, Soonwon Choi, and Manuel Endres. Preparing random states and benchmarking with many-body quantum chaos. *Nature*, 613(7944):468–473, January 2023.
- [10] Max McGinley and Michele Fava. Shadow tomography from emergent state designs in analog quantum simulators, December 2022. arXiv:2212.02543 [cond-mat, physics:quant-ph].
- [11] Minh C. Tran, Daniel K. Mark, Wen Wei Ho, and Soonwon Choi. Measuring Arbitrary Physical Properties in Analog Quantum Simulation, December 2022. arXiv:2212.02517 [cond-mat, physics:quant-ph].

- [12] J. Von Neumann. Proof of the ergodic theorem and the H-theorem in quantum mechanics: Translation of: Beweis des Ergodensatzes und des H-Theorems in der neuen Mechanik. *The European Physical Journal H*, 35(2):201–237, November 2010.
- [13] Joe Diestel and Angela Spalsbury. *The joys of Haar measure*. Number volume 150 in Graduate studies in mathematics. American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 2014.
- [14] V. Gurarie. The equivalence between the canonical and microcanonical ensembles when applied to large systems. *American Journal of Physics*, 75(8):747–751, August 2007.
- [15] Tiff Brydges, Andreas Elben, Petar Jurcevic, Benoît Vermersch, Christine Maier, Ben P. Lanyon, Peter Zoller, Rainer Blatt, and Christian F. Roos. Probing Rényi entanglement entropy via randomized measurements. *Science*, 364(6437):260–263, April 2019.
- [16] Matteo Ippoliti and Wen Wei Ho. Solvable model of deep thermalization with distinct design times, August 2022. arXiv:2208.10542 [cond-mat, physics:quant-ph].
- [17] Michael J. Gullans and David A. Huse. Dynamical Purification Phase Transition Induced by Quantum Measurements. *Physical Review X*, 10(4):041020, October 2020.
- [18] Daniel Gottesman. Stabilizer Codes and Quantum Error Correction, May 1997. arXiv:quant-ph/9705052.
- [19] Matteo Ippoliti, Tibor Rakovszky, and Vedika Khemani. Fractal, Logarithmic, and Volume-Law Entangled Nonthermal Steady States via Spacetime Duality. *Physical Review X*, 12(1):011045, March 2022.
- [20] Adam Nahum, Jonathan Ruhman, Sagar Vijay, and Jeongwan Haah. Quantum Entanglement Growth under Random Unitary Dynamics. *Physical Review X*, 7(3):031016, July 2017.
- [21] Tianci Zhou and Adam Nahum. Emergent statistical mechanics of entanglement in random unitary circuits. *Physical Review B*, 99(17):174205, May 2019.
- [22] Horacio Casini, Hong Liu, and Márk Mezei. Spread of entanglement and causality. *Journal of High Energy Physics*, 2016(7):77, July 2016.
- [23] Hsin-Yuan Huang, Richard Kueng, and John Preskill. Predicting many properties of a quantum system from very few measurements. *Nature Physics*, 16(10):1050–1057, October 2020.
- [24] Huangjun Zhu. Multiqubit Clifford groups are unitary 3-designs. *Physical Review A*, 96(6):062336, December 2017.
- [25] Henrik Wilming and Ingo Roth. High-temperature thermalization implies the emergence of quantum state designs, February 2022. arXiv:2202.01669 [cond-mat, physics:math-ph, physics:quant-ph].

- [26] Maxime Lucas, Lorenzo Piroli, Jacopo De Nardis, and Andrea De Luca. Generalized Deep Thermalization for Free Fermions, July 2022. arXiv:2207.13628 [cond-mat, physics:quant-ph].

## 附录 A 矩阵的范数及其性质

矩阵的范数，一般记为  $\|\cdot\|$ ，是描述矩阵元素大小的一种度量。抽象的范数需要满足四条定义：

- $\|A\| \geq 0$ ，且  $\|A\| = 0 \iff A = 0$
- $\|kA\| = k\|A\|$
- $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$
- $\|AB\| \leq \|A\|\|B\|$

本文中使用的矩阵范数主要有两种，Frobenius 范数和迹范数（也称 nuclear 范数）。

### 1.1 Frobenius 范数

Frobenius 范数定义为

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i,j} |a_{ij}|^2} = \sqrt{\text{tr}[A^\dagger A]} \quad (75)$$

这是由正定厄米内积  $(A, B) = \text{tr}[A^\dagger B]$  给出的范数，从而由 Cauchy-Schwarz 不等式，其满足性质

$$|\text{tr}[A^\dagger B]| \leq \|A\|_F \|B\|_F \quad (76)$$

对  $A$  作奇异值分解，可以证明

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_i \sigma_i^2} \quad (77)$$

其中  $\{\sigma_i\}$  为  $A$  的奇异值。

### 1.2 迹范数

迹范数的定义为

$$\|A\|_1 = \sum_i \sigma_i \quad (78)$$

这等价于

$$\|A\|_1 = \text{tr}[\sqrt{A^\dagger A}] \quad (79)$$

其中由于  $A^\dagger A$  是正定矩阵，对其开根号是良定的运算。容易看出，迹范数和 Frobenius 范数满足关系

$$\|A\|_1 \geq \|A\|_F \geq \frac{1}{\sqrt{\text{rank}A}} \|A\|_1 \quad (80)$$

其中， $A$  的奇异值高度集中时， $\|A\|_1 \approx \|A\|_F$ ； $A$  的非零奇异值大小接近时， $\|A\|_F \approx \frac{1}{\sqrt{\text{rank}A}} \|A\|_1$ 。

# 北京大学学位论文原创性声明和使用授权说明

## 原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品或成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本声明的法律结果由本人承担。

论文作者签名：杨天骅 日期：2023年5月23日

## 学位论文使用授权说明

本人完全了解北京大学关于收集、保存、使用学位论文的规定，即：

- 按照学校要求提交学位论文的印刷本和电子版；
- 学校有权保留学位论文的印刷本和电子版，并提供目录检索与阅览服务，在校园网上提供服务；
- 学校可以采用影印、缩印、数字化或其它复制手段保存论文；
- 因某种特殊原因需要延迟发布学位论文电子版，授权学校一年/两年/三年以后，在校园网上全文发布。

(保密论文在解密后遵守此规定)

论文作者签名：杨天骅 导师签名：杨志成

日期：2023年5月23日