

密度行列 ρ で理解する確率の世界



はじめに

小論は、Tai-Danae Bradleyの2020年の論文 “At the Interface of Algebra and Statistics” 「代数と統計の境界で」 <https://arxiv.org/abs/2004.05631> の概要を紹介したものである。

この論文で彼女は、量子論で量子の状態を記述するものとして導入された密度行列が、直接に、確率として解釈できることを示し、古典論的確率論から量子論的確率論への移行のみちすじを示した。

はじめに

「密度行列＝確率」という対応のもとで、密度行列のPartial Trace を取るという操作と、その操作の結果として生み出される還元された密度行列は、新しい確率論的解釈を得る。

「Partial Trace = 結合確率の量子論的周辺化」

「還元された密度行列 = 量子論的周辺確率」

古典論的確率と量子論的確率の差異は、結合確率と周辺確率の関係をみるとはっきりと現れる。すなわち、古典的周辺確率は元の結合確率の「記憶」を持たないが、量子論的周辺確率は、結合確率の「記憶」を持つ。

はじめに

Part 1 では、古典論的確率から量子論的確率への移行がどのようなものかを、具体的な例で説明する。二つの確率概念の違いに、まず、具体例なイメージを持ってもらうことがこの章の目的である。

Part 2 は、議論で利用される二つのノテーション、Bra-Ket 記法とテンソル・ネットワーク記法の概説に当てられている。資料が大きくなってしまい、テンソル・ネットワークの初等的説明の部分は、別資料にまとめた。

はじめに

Part 3 が、このセミナーの数学的な本論にあたる。最初に読むときには、証明の細部にこだわらず、議論の基本的流れを追うのがいいと考えている。その上では、テンソル・ネットワーク記法での図形的説明が役にたつと思う。

以前、セミナーのサブタイトルに掲げていた「意味の分散表現の数理」については、触れることができなかった。

このトピックスについては、今後のセミナーで取り上げていきたいと考えている。

密度行列 ρ で理解する確率の世界

Agenda

Part 1 結合確率と周辺確率

1. 古典論的確率の場合
2. 量子論的確率へ

Part 2 Bra-Ket記法とテンソル・ネットワーク記法

1. Bra-Ket記法
2. テンソル・ネットワークの基礎

密度行列 ρ で理解する確率の世界

Agenda

Part 3 古典論的確率と量子論的確率

1. 古典的確率分布の一般化 -- Density Operator
2. 古典論的確率と量子論的確率の基本的同一性
3. Partial traceは量子論的周辺化
4. 還元された密度行列のテンソル・ネットワーク表示

Part 1

結合確率と周辺確率



密度行列 ρ で理解する確率の世界

Part 1 Agenda

結合確率と周辺確率

1. 古典論的確率の場合
2. 量子論的確率へ

このPart I では、古典論的確率から量子論的確率への移行がどういうものかを、具体的な例で説明する。二つの確率概念の違いに、まず、具体的なイメージを持ってもらうことがこの章の目的である。

古典論的確率の場合

Part 1-1

S 上の確率分布 $\pi(s)$

有限集合 S の上で定義された関数 $\pi: S \rightarrow \mathbb{R}$ が次の条件を満たす時、

$$\sum_{s \in S} \pi(s) = 1, \quad \text{全ての } s \in S \text{ について } \pi(s) \geq 0$$

関数 π を確率分布と呼ぶ。

S の要素が、次のように順序づけられた時 $S = \{s_1, \dots, s_n\}$

確率分布は、次のようにも表現される。

$$(\pi(s_1), \dots, \pi(s_n))$$

S 上の確率分布 $\pi(s)$ の例

- コイン投げ $S = \{\text{表}, \text{裏}\}$

$$\pi(\text{表}) = \frac{1}{2}, \pi(\text{裏}) = \frac{1}{2} \Rightarrow \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

- サイコロ $S = (1, 2, 3, 4, 5, 6)$

$$\pi(1) = \pi(2) = \pi(3) = \pi(4) = \pi(5) = \pi(6) = \frac{1}{6}$$

$$\Rightarrow \left(\frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}, \frac{1}{6}\right)$$

- ある学校の男女の分布 $S = \{\text{男子}, \text{女子}\}$

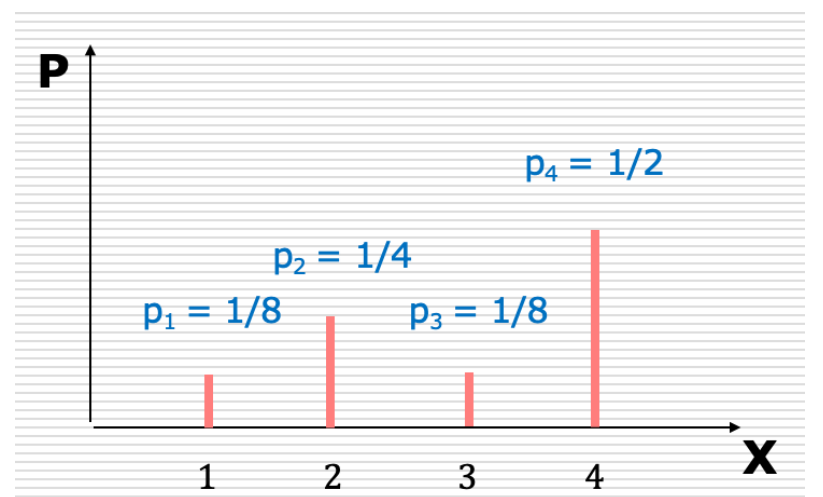
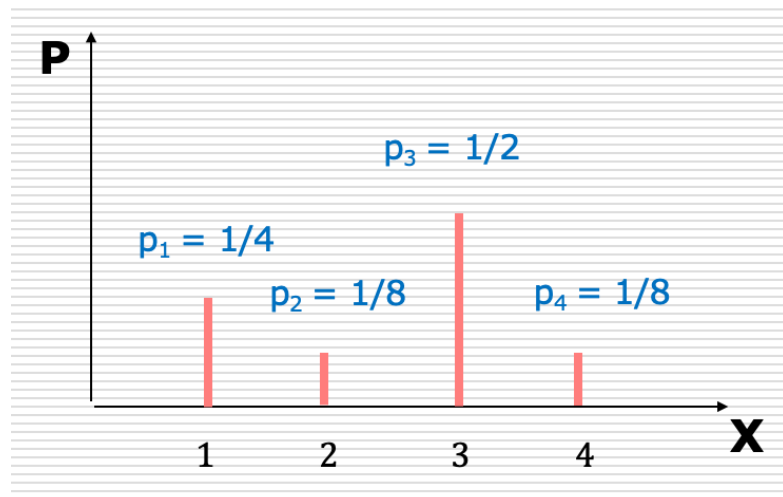
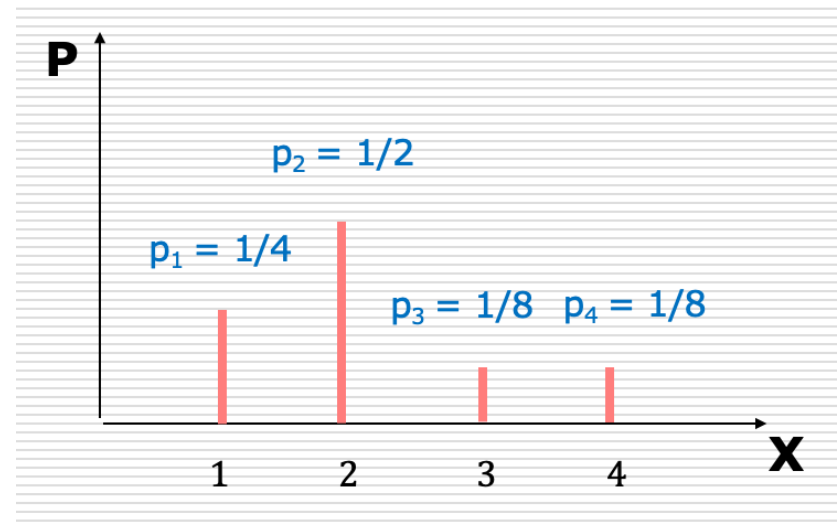
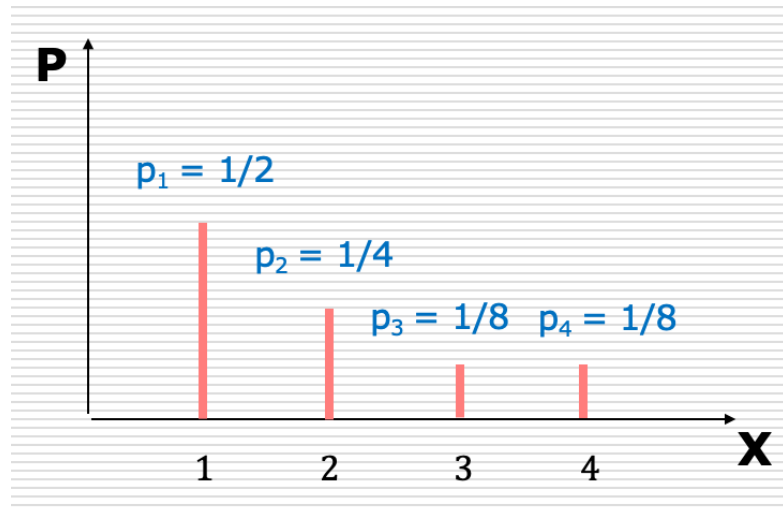
男子在籍数 17名、女子在籍数 13名

$$\pi(\text{男子}) = 17/30, \pi(\text{女子}) = 13/30 \Rightarrow (17/30, 13/30)$$

- ある学校の学年別の分布 $S = \{\text{一年生}, \text{二年生}, \text{三年生}\}$

$$\pi(\text{一年生}) = \dots, \pi(\text{二年生}) = \dots, \pi(\text{三年生}) = \dots$$

次の確率分布は、分布の形は違っていても
同じエントロピーを持つ



$X \times Y$ 上の結合確率分布と 周辺確率分布

- 結合確率分布 Joint Distribution

$X \times Y \rightarrow \mathbb{R}$ の関数 $\pi(x, y)$ が、次の条件を満たす時、 $\pi(x, y)$ を、 $X \times Y$ 上の結合確率分布という。

$$\sum_{(x,y) \in X \times Y} \pi(x, y) = 1$$

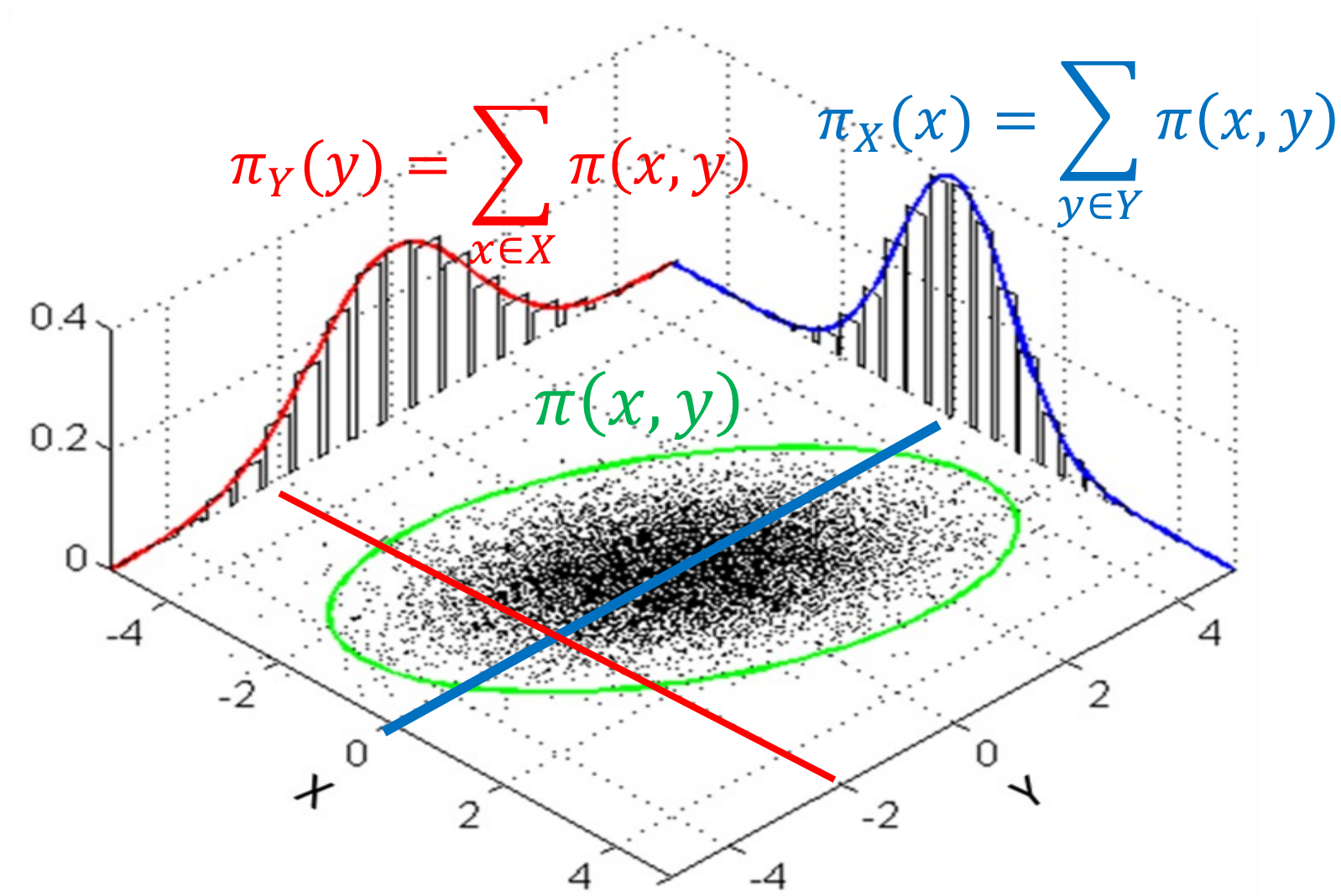
- 周辺確率分布 Marginal Distribution

上記の $X \times Y$ 上の結合確率分布 $\pi(x, y)$ について、次の式で定義される $\pi_X(x) : X \rightarrow \mathbb{R}$, $\pi_Y(y) : Y \rightarrow \mathbb{R}$ を

$$\pi_X(x) = \sum_{y \in Y} \pi(x, y), \quad \pi_Y(y) = \sum_{x \in X} \pi(x, y),$$

それぞれ、 X, Y 上の周辺確率分布という。

$X \times Y$ 上の結合確率分布 $\pi(x, y)$ と 周辺確率分布 $\pi_X(x), \pi_Y(y)$ のイメージ



$X \times Y$ 上の結合確率分布 $\pi(x, y)$ と 周辺確率分布 $\pi_X(x), \pi_Y(y)$ の例1

- 小さな小学校の、学年別・男女別の在籍者数が次の表で与えられているとする。

	1年	2年	3年	4年	5年	6年	合計
男子	1	2	0	1	2	1	7
女子	0	1	3	1	0	2	7
合計	1	3	3	2	2	3	14

- $X = \{1\text{年}, 2\text{年}, 3\text{年}, 4\text{年}, 5\text{年}, 6\text{年}\} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$
 $Y = \{\text{男子}, \text{女子}\} = \{1, 2\}$ としよう。
- この小学校から一人をランダムに選んだ時、その生徒が3年生の女子である確率 $\pi(3, 2)$ は $3/14$ 、5年生の男子である確率 $\pi(5, 1)$ は、 $2/14$ であることが上の表からわかる。

$X \times Y$ 上の結合確率分布 $\pi(x, y)$ と 周辺確率分布 $\pi_X(x), \pi_Y(y)$ の例1

- 結合確率分布 $\pi(1,1), \pi(1,2), \dots, \pi(6,1), \pi(6,2)$ の値を表に書きいれてみよう。
緑の枠で囲まれたのが、結合確率分布 $\pi(x, y)$ である。

	1	2	3	4	5	6	
1	1/14	2/14	0/14	1/14	2/14	1/14	7/14
2	0	1/14	3/14	1/14	0/14	2/14	7/14
	1/14	3/14	3/14	2/14	2/14	3/14	14/14

- 青い枠で囲まれたのが、周辺確率分布 $\pi_X(x) = \sum_{y \in Y} \pi(x, y)$,
赤い枠で囲まれたのが、周辺確率分布 $\pi_Y(y) = \sum_{x \in X} \pi(x, y)$
である。
- 周辺確率分布から、元の結合確率分布の情報を復元できない。その情報は、周辺化によって失われる。

Tai-Danaeのあげた例

ここでは、Tai-Danaeのあげた例を紹介する。

$X = \{\text{orange, green, purple}\}$ という3色の分類と、
 $Y = \{\text{fruit, vegetable}\}$ という果物/野菜の分類の
組み合わせで結合確率分布を計算するのだが、対象が3個しか
ない。結合確率分布の最小のサンプルとっていい。

同時にこの例は、あとで見るように、次のような三つのフレーズ だ
けからなる、極小のコーパスとしても解釈できるのだ。

{ orange fruit, green fruit, purple vegetable }

$X \times Y$ 上の結合確率分布 $\pi(x, y)$ と 周辺確率分布 $\pi_X(x), \pi_Y(y)$ の例2

	orange	green	purple	合計
fruit	1	1	0	2
vegetable	0	0	1	1
合計	1	1	1	3



結合確率分布 $\pi(x, y)$ を計算

	orange	green	purple	π_Y
fruit	1/3	1/3	0	2/3
vegetable	0	0	1/3	1/3
π_X	1/3	1/3	1/3	3/3

$X \times Y$ 上の結合確率分布 $\pi(x, y)$ から
次のような行列をつくる

	orange	green	purple	π_Y
fruit	1/3	1/3	0	2/3
vegetable	0	0	1/3	1/3
π_X	1/3	1/3	1/3	3/3

結合確率
 $\pi(X, Y)$

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix}$$

周辺確率は、次のようになる

	orange	green	purple	π_Y
fruit	1/3	1/3	0	2/3
vegetable	0	0	1/3	1/3
π_X	1/3	1/3	1/3	3/3

周辺確率 $\pi_X = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right)$ \leftrightarrow

orange
green
purple

周辺確率 $\pi_Y = \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}\right)$ \leftrightarrow

fruit
fruit
vegetable

周辺確率は、「記憶」を持たない

- Fruitの周辺確率は $2/3$ になっているが、この数字には、fruitの半分はorangeで、残りの半分がgreenであることは、反映されていない。
- Vegetableの周辺確率は $1/3$ になっているが、この数字には全てのvegetableがpurpleであることは反映されない。

量子論的確率へ

Part 1-2

記憶を持つ周辺確率

ただ、記憶を持つ周辺確率を計算する別の方法がある。

次にそれを紹介しよう。

$X \times Y$ 上の結合確率分布 $\pi(x, y)$ から
次のような行列を作る

	orange	green	purple	π_Y
fruit	1/3	1/3	0	2/3
vegetable	0	0	1/3	1/3
π_X	1/3	1/3	1/3	3/3



$$M = \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{bmatrix}$$

結合確率分布を表現する行列を 少し変更する

古典論での
結合確率の行列表現

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix}$$



新しい
結合確率の表現

$$M = \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{bmatrix}$$

何が変わったのか？

基本的には、変わっていない。

ただ、これまでは、結合確率を表現する行列のエントリーは、直接に、確率 $\pi(x, y)$ を表していたのだが、新しい表現では、それはその確率のルートをとった $\sqrt{\pi(x, y)}$ に変わっている。

新しい行列表現で、実際の結合確率を得るためには、それぞれのエントリーを二乗すればいい。

この新しい結合確率の表現 M から、
どのように周辺確率を求めるのか？

次の手順で、表現 M から周辺確率を求めることができる。

- M と共役な M^\dagger を作る。
- $M^\dagger M$ を計算すると、その対角成分に、 X についての周辺確率が現れる。
- MM^\dagger を計算すると、その対角成分に、 Y についての周辺確率が現れる。

実際に計算してみよう！

M と共役な M^\dagger を作る

$$M = \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{bmatrix}$$

$$M^\dagger = \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{bmatrix}$$

$M^\dagger M$ を計算する

$$M^\dagger M = \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix}$$

注意すべきこと

$M^{\dagger}M$ も MM^{\dagger} も、正方行列になる

M を $n \times m$ (n 行 m 列)の行列としよう。
この時、 M^{\dagger} は、 $m \times n$ の行列である。

だから、 $M^{\dagger}M$ は、 $m \times n$ の行列と $n \times m$ の行列の積で、
 $m \times m$ の行列になる。

同様に、 MM^{\dagger} は、 $n \times m$ の行列と $m \times n$ の行列の積で、
 $n \times n$ の行列になる。

いずれも、正方行列である。

$M^\dagger M$ の対角成分は、 $\pi_X = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right)$

$$M^\dagger M = \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix}$$

	orange	green	purple	π_Y
fruit	1/3	1/3	0	2/3
vegetable	0	0	1/3	1/3
π_X	1/3	1/3	1/3	3/3

$M^\dagger M$ の対角成分は、 $\pi_X = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}\right)$

$$M^\dagger M = \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix}$$

	orange	green	purple	π_Y
fruit	1/3	1/3	0	2/3
vegetable	0	0	1/3	1/3
π_X	1/3	1/3	1/3	3/3

MM^{\dagger} を計算する

$$MM^{\dagger} = \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix}$$

MM^\dagger の対角成分は、 $\pi_Y = \begin{pmatrix} 2 \\ 3, \frac{1}{3} \end{pmatrix}$

$$MM^\dagger = \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}} & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix}$$

	orange	green	purple	π_Y
fruit	1/3	1/3	0	2/3
vegetable	0	0	1/3	1/3
π_X	1/3	1/3	1/3	3/3

周辺確率が「記憶」を持つというのは、 どういうことか？

- $M^\dagger M$ 、 MM^\dagger を、結合確率の新しい表現 M から導かれた新しい周辺確率の表現と考えることにする。
- 例えば、 $M^\dagger M$ は、古典論での周辺確率を表す対角成分以外の要素を含んでいる。このことは、 $M^\dagger M$ が古典論の周辺確率だけではない情報を含んでいることを示している。

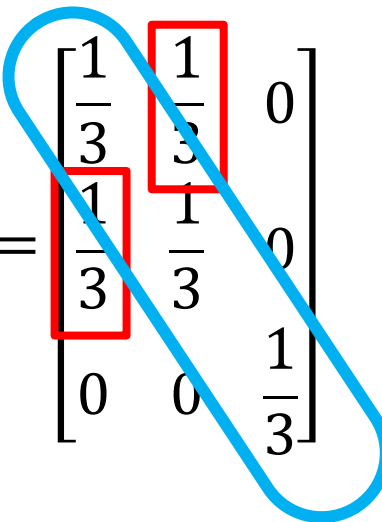
非対角成分

$$M^\dagger M = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix}$$

対角成分

周辺確率が「記憶」を持つというのは、 どういうことか？

- この情報は、どんなものなのだろうか？
(残念ながら MM^+ は既に対角化されているので、周辺確率以上の情報を含まない。)
- 実は、その情報は、 M^+M の固有ベクトルの中に含まれている。

$$M^+M = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ & & \frac{1}{3} \end{bmatrix}$$


M^+M の固有ベクトルを
計算してみよう

古典的周辺確率

$M^\dagger M$ の固有ベクトルを計算してみよう まず、固有値を求める

行列 $M^\dagger M$ の固有ベクトルと固有値を求める。

$$M^\dagger M = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix}$$

$M^\dagger M$ の固有値 λ は、次の式を解いて得られる。

$$\begin{vmatrix} \lambda - \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & 0 \\ -\frac{1}{3} & \lambda - \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda - \frac{1}{3} \end{vmatrix} = 0$$

$$\begin{vmatrix} \lambda - \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & 0 \\ -\frac{1}{3} & \lambda - \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda - \frac{1}{3} \end{vmatrix} = \left(\lambda - \frac{1}{3}\right) \begin{vmatrix} \lambda - \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \lambda - \frac{1}{3} \end{vmatrix} \\ = \left(\lambda - \frac{1}{3}\right) \left(\left(\lambda - \frac{1}{3}\right)^2 - \frac{1}{9} \right) = \left(\lambda - \frac{1}{3}\right) \lambda \left(\lambda - \frac{2}{3}\right) = 0$$

これから、 $M^\dagger M$ の固有値は、 $\lambda = \frac{1}{3}$, $\lambda = \frac{2}{3}$ であることがわかる。

$\lambda = \frac{1}{3}$ の場合の固有ベクトル

行列Aの固有値を λ , 固有ベクトルを x とすれば、 $(\lambda I - A)x = 0$ である。

$$\lambda = \frac{1}{3} \text{ の場合の } M^{\dagger}M = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ の固有ベクトル}$$

$x = (x_1, x_2, x_3)^T$ は、次の式から求められる。

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{3} - \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & 0 \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} - \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} - \frac{1}{3} \end{pmatrix} x = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 0$$

この時、 $x_1 = x_2 = 0$ となる。

$M^\dagger M$ の固有ベクトル x は、固有値 $\lambda = \frac{1}{3}$ の時、次の形をしている。

$$x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ k \end{pmatrix}$$

$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$ となるように k を選べば、

$x = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ が、 $M^\dagger M$ の固有ベクトルとなる。

$\lambda = \frac{2}{3}$ の場合の固有ベクトル

$x = (x_1, x_2, x_3)^T$ は、次の式から求められる。

$$\begin{pmatrix} \frac{2}{3} - \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & 0 \\ -\frac{1}{3} & \frac{2}{3} - \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{3} - \frac{1}{3} \end{pmatrix} x = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{aligned} 2x_1 - x_2 &= 0 \\ -x_1 + 2x_2 &= 0 \\ x_3 &= 0 \end{aligned}$$

これから、 $M^\dagger M$ の $\lambda = \frac{2}{3}$ の場合の固有ベクトル x は、次の形をしていることがわかる。

$$x = \begin{pmatrix} t \\ t \\ 0 \end{pmatrix}$$

$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$ となるように t を選べば、

$$x = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix} \text{が、} M^\dagger M \text{の固有ベクトルとなる。}$$

これらの M^+M の固有ベクトルは、
どんな意味を持っているだろうか？

$$\begin{matrix} \pi(\text{orange}|\text{fruit}) \\ \pi(\text{green}|\text{fruit}) \\ \pi(\text{purple}|\text{fruit}) \end{matrix} \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\frac{1}{2}} \\ 0 \end{bmatrix}$$

fruit
↔

orange fruit
green fruit

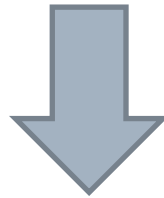
$$\begin{matrix} \pi(\text{orange}|\text{vegetable}) \\ \pi(\text{green}|\text{vegetable}) \\ \pi(\text{purple}|\text{vegetable}) \end{matrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

vegetable
↔

purple vegetable

先に、(古典論的)周辺確率は、 「記憶」を持たないと次のように述べた

- Fruitの周辺確率は $2/3$ になっているが、この数字には、fruitの半分はorangeで、残りの半分がgreenであることは、反映されていない。
- Vegetableの周辺確率は $1/3$ になっているが、この数字には全てのvegetableがpurpleであることは反映されない。



$M^\dagger M$ の固有ベクトルは、みごとに、これらの失われた情報を復元していることがわかる。確率に戻すために、エントリーの値の二乗を行っている。

$M^\dagger M$ と MM^\dagger の固有値は一致する

$M^\dagger M$ の固有値は、今見てきたように、 $\frac{1}{3}$ と $\frac{2}{3}$ である。

$$MM^\dagger = \begin{bmatrix} \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} \end{bmatrix} \text{ であるので、}$$

MM^\dagger の固有値は、やはり、 $\frac{1}{3}$ と $\frac{2}{3}$ である。

$M^\dagger M$ と MM^\dagger の固有値は一致している。



Part 2

Bra-Ket記法とテンソル・ネットワーク記法



密度行列 ρ で理解する確率の世界

Part 2 Agenda

Bra-Ket記法とテンソル・ネットワーク記法

1. Bra-Ket記法
2. テンソル・ネットワークの基礎

Part 2 は、議論で利用される二つのノテーション、Bra-Ket記法とテンソル・ネットワーク記法の概説に当てられている。資料が大きくなってしまい、テンソル・ネットワークの初等的説明の部分は、別資料にまとめた。

Bra-Ket 記法

Part 2-1

ケット記法について 参考資料

ケット記法については、次のMaruLabo の資料も参考にされたい。

「ケット $|k\rangle$ で理解する量子の世界」
<https://www.marulabo.net/docs/ket-talk/>

S 上のベクトル空間 V

S を有限集合 $\{s_0, s_1, \dots, s_{n-1}\}$ とする時、 S の要素上で定義され複素数 \mathbb{C} に値を持つ関数 $\mathbb{C}^S: S \rightarrow \mathbb{C}$ の集まり V を、 S 上のベクトル空間という。ここでは有限次元の場合のみを扱う。

$$V = \mathbb{C}^S$$

内積 $\langle v|w \rangle$ が定義されたベクトル空間をヒルベルト空間という。

$$\langle v|w \rangle = \sum_{s \in S} \overline{v(s)} w(s)$$

$|s\rangle$ は、 S から \mathbb{C} への関数 計算基底

$s \in S$ の時 $|s\rangle$ で S から \mathbb{C} への関数であるベクトルを表す。
これを、ket 記法という。

$$S = \{s_0, s_1, \dots, s_{n-1}\} \text{ で } |s\rangle \in \mathbb{C}^S \text{ である}$$

$|s\rangle$ は、次の値を取ることができる。

$$s \mapsto 1, \quad s' \neq s \text{ に対して } s' \mapsto 0$$

これを計算基底と呼ぶ。

$$|s_i\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \leftarrow i \text{ 番目のエントリー}$$

基底 $|s\rangle$ が与えられた時の 任意のベクトル $|v\rangle \in V$ の表示

基底 $|s\rangle$ が与えられた時、任意のベクトル $|v\rangle \in V$ は、次の形で表現できる。

$$|v\rangle = \sum_{s \in S} v(s) |s\rangle = \begin{bmatrix} v(s_1) \\ \vdots \\ v(s_n) \end{bmatrix} \quad v(s) \in \mathbb{C}$$

$bra \langle v|$ の定義

全ての $|v\rangle \in V$ について、 $V^* := \text{hom}(V, \mathbb{C})$ で、 $|v'\rangle \in V$ 上の値が $\langle v|v'\rangle$ である線形関数 $\langle v|$ が存在する。

$$\begin{array}{ccc} V & \xrightarrow{\langle v|} & \mathbb{C} \\ |v'\rangle & \longmapsto & \langle v|v'\rangle \end{array}$$

この線形関数 $\langle v| \in V^*$ を bra と呼ぶ。

$$V \cong V^*$$

BraとKetの二対二対応

$$|v\rangle^\dagger = \langle v| \quad \langle v|^\dagger = |v\rangle$$

で次のような対応が存在する。

$$|v\rangle \longleftrightarrow \langle v|$$

$$V \cong V^*$$

$$\langle v| = \sum_{s \in S} \overline{v(s)} \langle s| = [\overline{v(s_1)} \quad \cdots \quad \overline{v(s_n)}] \quad v(s) \in \mathbb{C}$$

テンソル積

$|v\rangle \in V, |w\rangle \in W$ の時、

テンソル積 $V \otimes W$ の要素を

$|v\rangle \otimes |w\rangle$ あるいは $|vw\rangle$ と表す。

テンソル積 $V \otimes W^*$ の要素を、

$|v\rangle \langle w|$ あるいは $|v\rangle \otimes \langle w|$ と表す。

$V \otimes W^*$ は、次のような $V \rightarrow W$ の写像となる。

$$\begin{array}{ccc} V & \xrightarrow{|w\rangle \langle v|} & W \\ |v'\rangle & \longmapsto & |w\rangle \langle v|v'\rangle \end{array}$$

$End(V)$ と直交射影演算子

$End(V)$ は、 V 上の全ての線形演算子の空間を表す。

$|v\rangle\langle v| \in End(V)$ である。

$|\psi\rangle$ が単位ベクトルの時、 $|\psi\rangle\langle\psi|$ は、 $|\psi\rangle$ 自身の上への直交射影演算子である。

$$|w\rangle \otimes |v\rangle = |w\rangle\langle v|$$

ベクトルのテンソル積は、その列ベクトルの外積である。

テンソル積 $W \otimes V^*$ の要素 $|w\rangle\langle v|$ は、線型写像 $V \rightarrow W$ に対応している。

$$\begin{array}{ccc} V & \xrightarrow{|w\rangle\langle v|} & W \\ |v'\rangle & \longmapsto & |w\rangle\langle v|v'\rangle \end{array}$$

$V \cong V^*$ と同一視すれば、

これは、 $W \otimes V$ の要素 $|w\rangle \otimes |v\rangle$ にも対応している。

$|w\rangle \otimes |v\rangle$ の二つ計算 サンプルでの計算例

$$|w\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3i \end{bmatrix} \quad |v\rangle = \begin{bmatrix} 4i \\ 5 \end{bmatrix} \quad \text{とする。}$$

$$|w\rangle \otimes |v\rangle = |w\rangle \langle v| = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3i \end{bmatrix} \overset{\text{行列の積}}{[-4i \quad 5]} = \begin{bmatrix} -4i & 5 \\ -8i & 10 \\ 12 & 15i \end{bmatrix}$$

$$|w\rangle \otimes |v\rangle = |wv\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3i \end{bmatrix} \overset{\text{テンソル積}}{\otimes} [-4i \quad 5] = \begin{bmatrix} 4i \\ 5 \\ -8i \\ 10 \\ 12 \\ 15i \end{bmatrix}$$

$$\text{tr}(|v' \rangle \langle v|) = \langle v|v' \rangle$$

すべてのベクトル $|v \rangle, |v' \rangle \in V$ について
線形演算子 $|v' \rangle \langle v|$ の trace は、内積 $\langle v|v' \rangle$ に等しい。

$\{|s \rangle\}$ を V の直交基底とする。 $|v' \rangle \langle v|$ の 行列表現は、次の外積である。

$$|v' \rangle \langle v| = \begin{bmatrix} \vdots \\ v'(s) \\ \vdots \end{bmatrix} [\dots \overline{v(s)} \dots]$$

この trace は、

$$\sum_{s \in S} \overline{v(s)} v'(s) = \langle v|v' \rangle$$

$$|vw\rangle\langle v'w'| = |v\rangle\langle v'| \otimes |w\rangle\langle w'|$$

テンソル積の外積は、外積のテンソル積である。

$|v\rangle, |v'\rangle \in V, |w\rangle, |w'\rangle \in W$ で、 V, W の基底を s, t としよう。

左辺 $|vw\rangle\langle v'w'|$ は、 $V \otimes W \rightarrow V \otimes W$ の線形演算子で、 $|st\rangle$ を $|vw\rangle\langle v'w'|st\rangle$ に写す。

$$\begin{aligned} \langle v'w'|st\rangle &= (\langle v'| \otimes \langle w'|) |s\rangle \otimes |t\rangle = (v'|s)(w'|t) \\ &\quad \because (f \otimes f')|a\rangle \otimes |a'\rangle := f(a) \otimes f(a') \end{aligned}$$

よって左辺の線形演算子は、 $|st\rangle$ を $|vw\rangle (v'|s)(w'|t)$ に写す。

右辺を考えよう。

右辺の演算子に、 $|s\rangle \otimes |t\rangle$ を与える。

$$\begin{aligned} & (|v\rangle\langle v'| \otimes |w\rangle\langle w'|) |s\rangle \otimes |t\rangle \\ &= |v\rangle\langle v'|s\rangle \otimes |w\rangle\langle w'|t\rangle \\ &\because (f \otimes f')|a\rangle \otimes |a'\rangle := f(a) \otimes f(a') \\ &= |v\rangle \otimes |w\rangle \langle v'|s\rangle \langle w'|t\rangle \\ &\because \langle v'|s\rangle, \langle w'|t\rangle \text{ は scalar} \\ &= |vw\rangle \langle v'|s\rangle \langle w'|t\rangle \end{aligned}$$

こちらにも、 $|st\rangle$ を $|vw\rangle (v'|s)(w'|t)$ に写す。

	star	bra-ket	array
ベクトル	v	$ v\rangle$	$\begin{bmatrix} \vdots \end{bmatrix}$
コベクトル	v^*	$\langle v $	$[\dots]$
$V \otimes W$ の要素	$v \otimes w$	$ v\rangle \otimes w\rangle$	$\begin{bmatrix} \vdots \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} \vdots \end{bmatrix}$
内積	$\langle v, w \rangle$	$\langle v w\rangle$	$[\dots] \begin{bmatrix} \vdots \end{bmatrix}$
線型写像 $W \rightarrow V$	$w \otimes v^*$	$ w\rangle \langle v $	$\begin{bmatrix} \vdots \end{bmatrix} [\dots] \begin{bmatrix} \vdots \end{bmatrix}$
直交射影	$\psi \otimes \psi^*$	$ \psi\rangle \langle \psi $	$\begin{bmatrix} \vdots \end{bmatrix} [\dots]$

テンソル・ネットワーク

Part 2-2

「テンソル・ネットワーク入門」について

テンソル・ネットワークの初等的な入門については、別資料にまとめている。次の資料を参照されたい。

「テンソル・ネットワーク入門」

<https://drive.google.com/file/d/1MbrfWwfV0-GMjpiu2PWAIAnO8KAokl0k/view?usp=sharing>

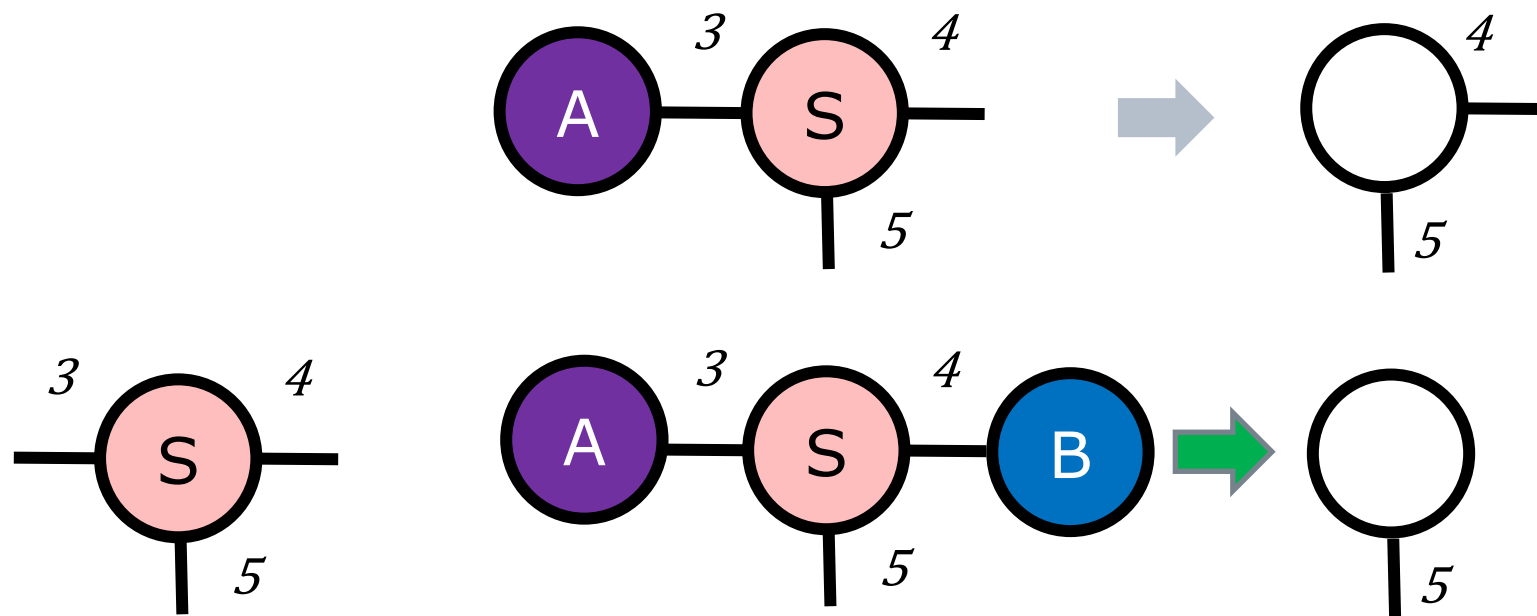
同じ内容が、次のページにまとめられている。

「テンソルとは何か？ Tensor Network 入門」

<https://www.marulabo.net/video/tensor-network/>

「腕」の「指数」の省略

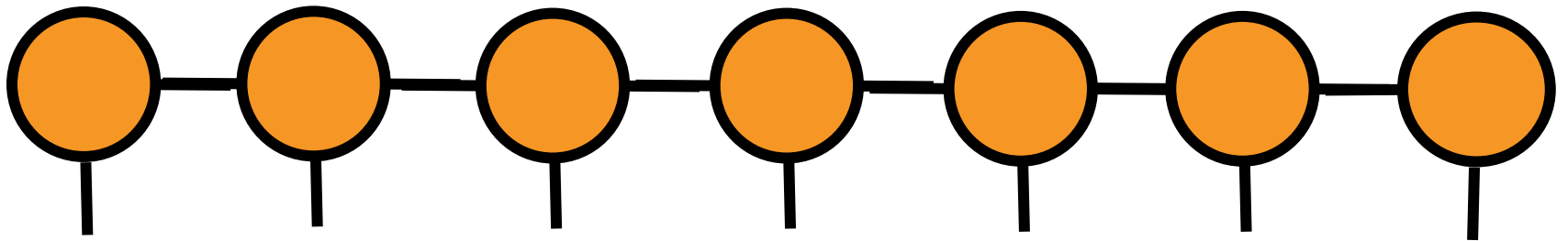
「テンソル・ネットワーク入門」では、次のように、「腕」には「指数」を併記してきた。



今度は、それを省略しよう。

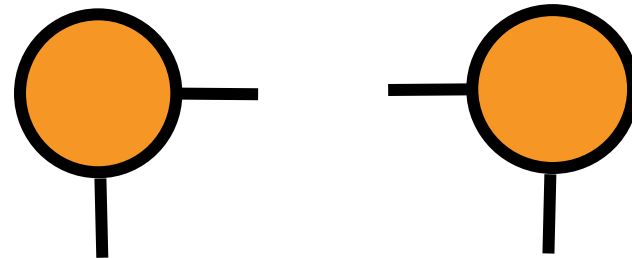
Tensor Train

次のように。

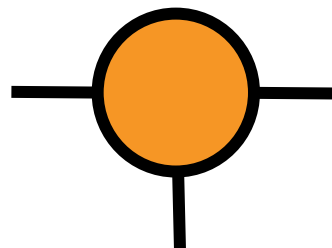


これをTensor Train と呼ぶことがある。

この図形は、両端の 2-テンソル



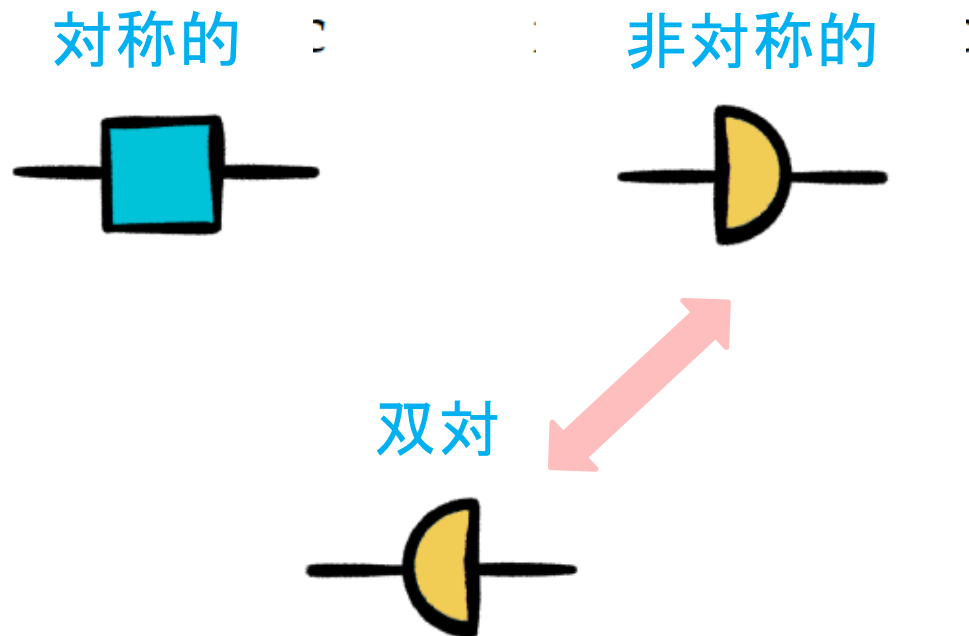
の間に、3-テンソル
のである。



の5個の並びが
つらなったも

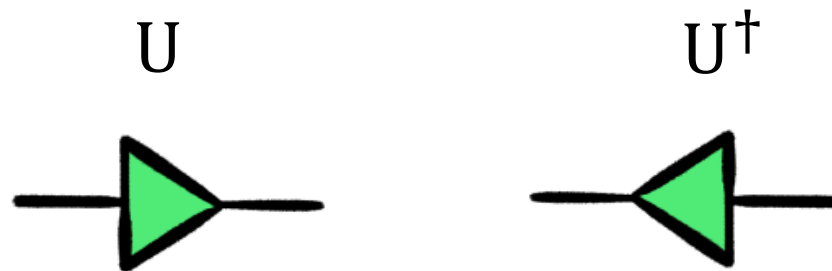
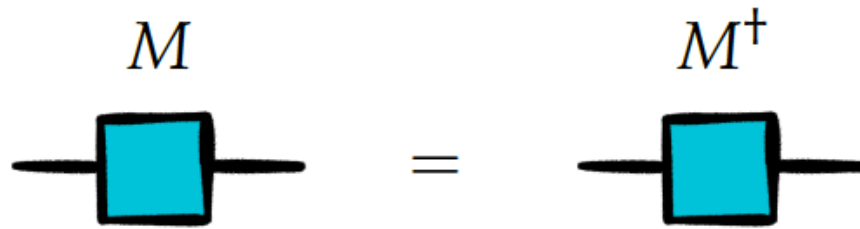
ノードの形に意味を持たせよう

ノードの形は何でもいいのだが、ここでは意味を持たせよう。
例えば、次のように。



対称行列と等長埋め込み写像

このノテーションで、例えば 対称行列 M と、等長埋め込み写像 U は、次のように表現される。

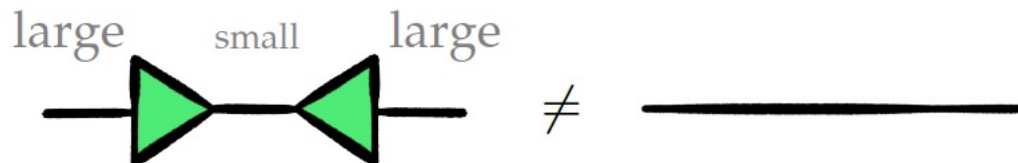
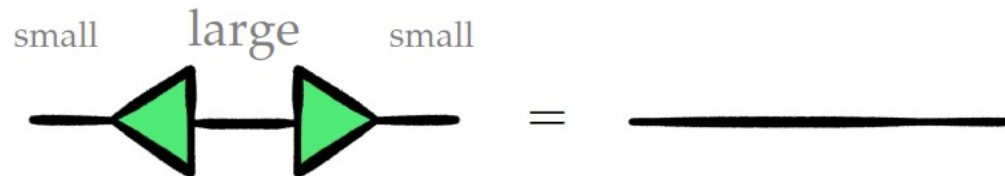


等長埋め込み写像の性質 Isometry Embedding

等長埋め込み写像 U は、空間 V からより高い次元の空間 W へのベクトルの長さを保存する線型写像である。

$$U: V \rightarrow W$$
$$U^\dagger U = id_V, \text{ただし、} UU^\dagger \neq id_W$$

この性質は次のように表現される。



ユニタリ演算子

等長埋め込み写像 $U: V \rightarrow W$ で、 $V = W$ の時、

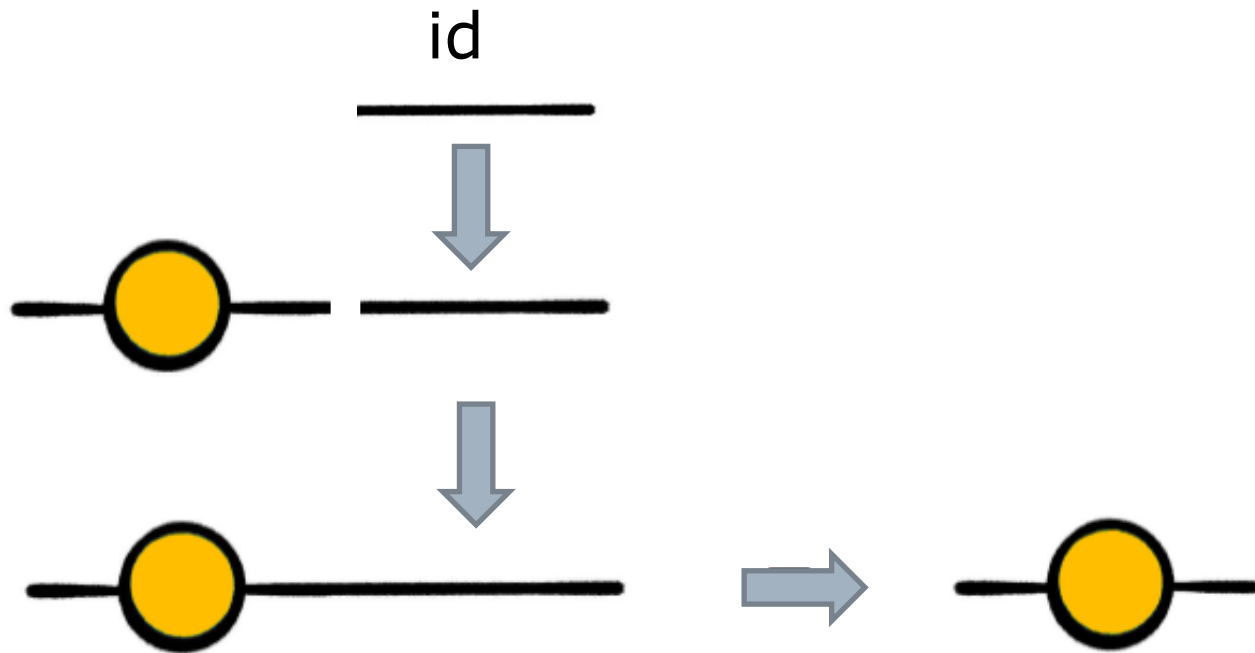
$$UU^\dagger = U^\dagger U = id_V$$

となる。

こうした U を、**ユニタリ演算子** と呼ぶ。

同一写像

同一写像 $\text{id}_V : V \rightarrow V$ はノードのない直線で表される。
同一写像との合成は、テンソルも対応する図形も、変えない。



Singular Value Decomposition

行列MのSVD (Singular Value Decomposition 特異値分解) は、次のように表現される。

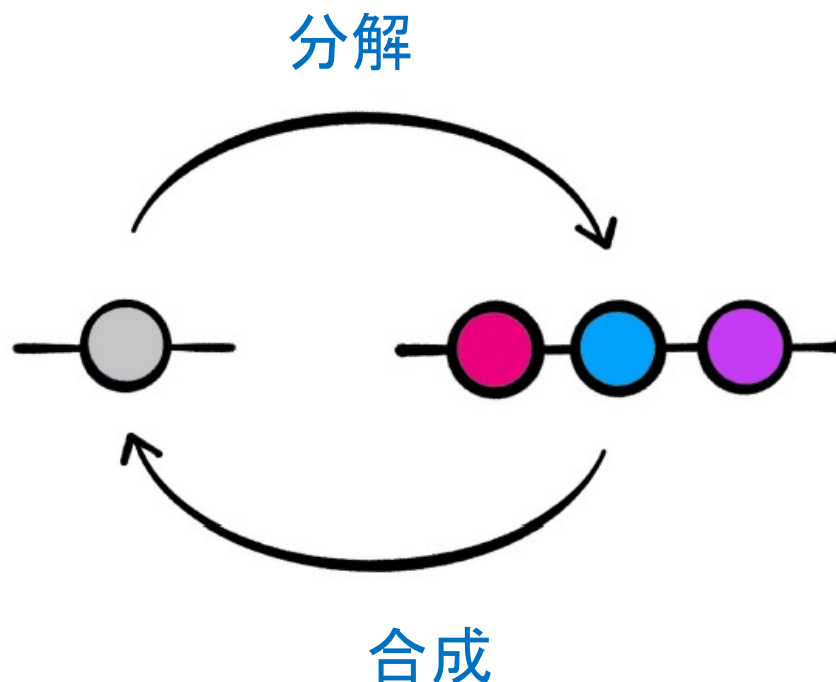
$$M = VDU^\dagger$$



SVDでU, VはユニタリだからIsometry、だから三角形で表現される。対角行列Dは、円で表現されている。


テンソルの分解はノードの分解

テンソルの分解は、一つのノードを複数のノードに分解することで、
テンソルの合成は、複数のノードを一つのノードにまとめること。

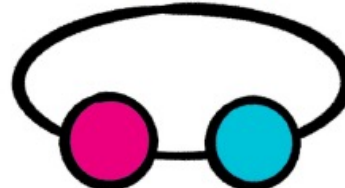


証明が単純な図形で可能になる

例えば、行列のtraceを考える。それは、行列の*i*行*i*列目の要素の和だから、その図形は次のようなループになる。

$$\text{tr}(M) = \sum_i M_{ii}$$


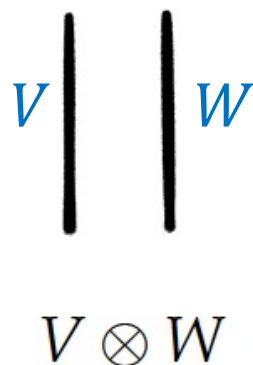
この図形を使えば、次のことは簡単に証明できる。

$$\text{tr}(NM) = \text{tr}(MN)$$


テンソル積の表現

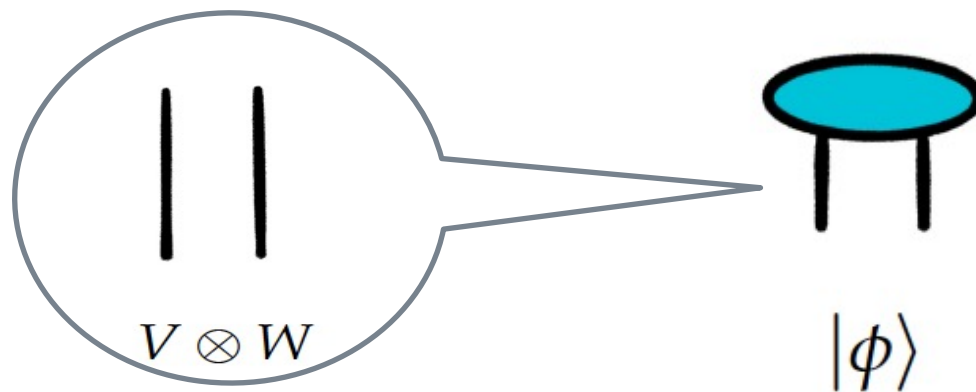
テンソル積は 平行に積み上げることで表現される

ベクトル空間のテンソル積 $V \otimes W$ は、 V に対応する直線と W に対応する直線を、二つ平行に並べることで表現される。



空間 $V \otimes W$ 上の任意のベクトル $|\phi\rangle$

空間 $V \otimes W$ 上の任意のベクトル $|\phi\rangle$ は、 $V \otimes W$ を表す二つの直線を持つノードとして表現される。



もし、 $|\phi\rangle$ が分解可能なら

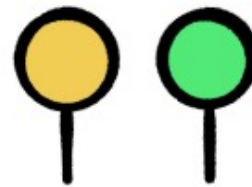
もし $|\phi\rangle$ が、 $|v\rangle \in V, |w\rangle \in W$ という二つのベクトルで、
 $|\phi\rangle = |v\rangle \otimes |w\rangle$

と分解可能なら、 $|\phi\rangle$ を二つのベクトル $|v\rangle, |w\rangle$ を並列に並べる形で表現する。



$|\phi\rangle$

分解可能



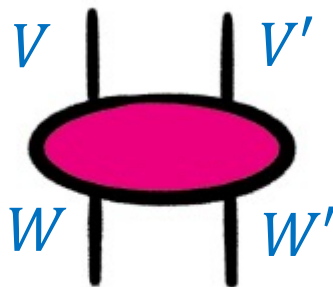
$|v\rangle \otimes |w\rangle$

テンソル積の間の線型写像

テンソル積の間の線型写像 h があったとする。

$$h: V \otimes V' \rightarrow W \otimes W'$$

この時、 h は四つのエッジを持つノードとして表現される。
四つのエッジは、四つの空間 V, V', W, W' に対応している。

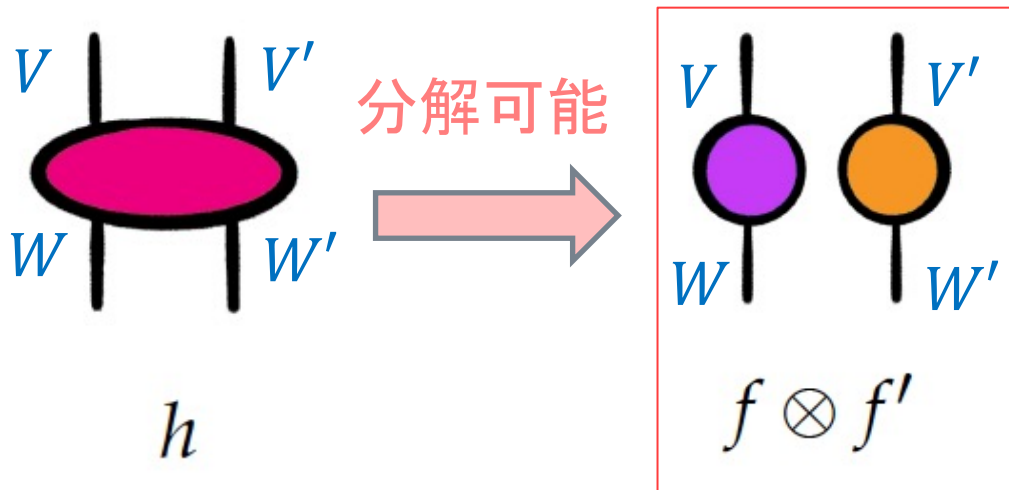


h

もし、 h が分解可能なら

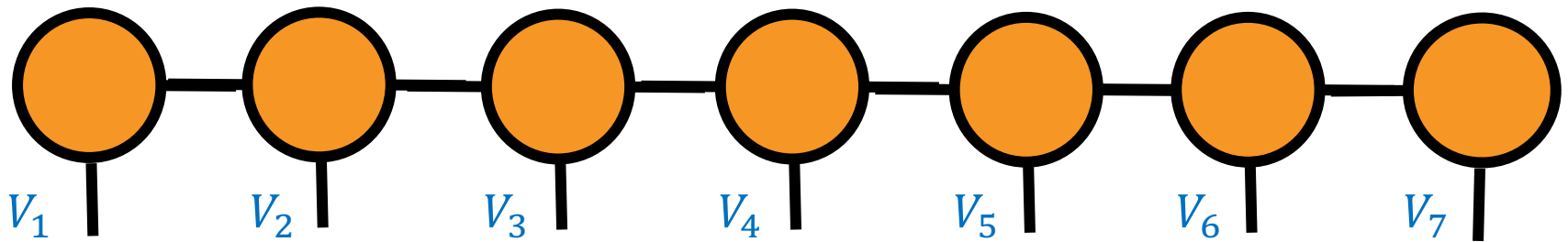
もし h が、 $f:V \rightarrow W, f':V' \rightarrow W'$ という二つの線型写像に、
$$h = f \otimes f'$$

と分解されるのなら、 h の図式は、 f の図式と f' の図式を、並行に横に並べたものになる。



Tensor Train

このTensor Train は、



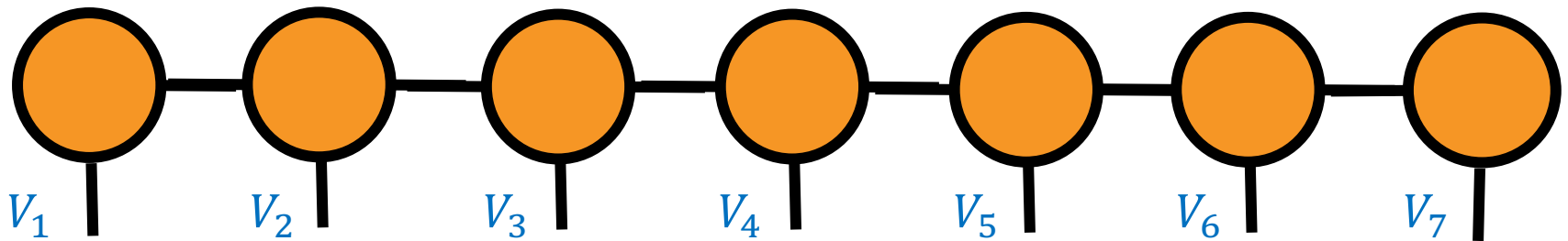
ベクトル空間 V_1, V_2, \dots, V_7 の7重のテンソル積のベクトルである。
このTensor Train をTR とすると、

$$TR \in V_1 \otimes V_2 \otimes V_3 \otimes V_4 \otimes V_5 \otimes V_6 \otimes V_7$$

である。

Tensor Train = Matrix Product Space

このTensor Train TRは、



$$TR \in V_1 \otimes V_2 \otimes V_3 \otimes V_4 \otimes V_5 \otimes V_6 \otimes V_7$$

である。

こうした形を、Matrix Product Space (MPS) という



Part 3

古典論的確率と量子論的確率



密度行列 ρ で理解する確率の世界

Part 3 Agenda

古典論的確率と量子論的確率

1. 古典的確率分布の一般化 -- Density Operator
2. 古典論的確率と量子論的確率の基本的同一性
3. Partial traceは量子論的周辺化
4. 還元された密度行列のテンソル・ネットワーク表示

古典的確率分布の一般化 Density Operator

Part 3-1

Density Operatorの定義

V から V への線型写像 $D: V \rightarrow V$ が、次の条件を満たす時、 D は、Density Operator であるという。

1. D は、Hermiteである。
2. D は、positive semidefiniteである。
3. D のtraceは、1である。

以下、それぞれの条件を見ていこう。

Density operatorの条件 1

Dは、Hermite

$H=H^\dagger$ である時、 H をエルミート行列という。

c が複素数の時、 $c=c^*$ ($=c^\dagger$) は、 c が実数であることと同値である。 $H=H^\dagger$ は、 $c=c^*$ の行列バージョンと考えていい。

量子の世界では、量子の状態は直接観測できず、物理的に観測可能な量(Observable)は、実数に近い性質を持つエルミートな線形演算子として記述される。

実際に観測される量は、エルミート演算子の固有値である。
エルミート演算子の固有値は、実数である。

エルミート行列の固有値は、実数である

エルミート行列 L の固有ベクトルを $|\lambda\rangle$ 、固有値を λ とする。

$$\begin{array}{cc} \text{エルミート行列} & \text{固有値} \\ \mathbf{L}|\lambda\rangle & = \lambda|\lambda\rangle \\ \text{固有ベクトル} & \text{固有ベクトル} \end{array}$$

この時、 $\langle\lambda|\mathbf{L}^\dagger = \langle\lambda|\lambda^*$ である。
最初の式に左から $\langle\lambda|$ 、二つ目の式に右から $|\lambda\rangle$ をかけて、

$$\begin{aligned} \langle\lambda|\mathbf{L}|\lambda\rangle &= \lambda \langle\lambda|\lambda\rangle \\ \langle\lambda|\mathbf{L}|\lambda\rangle &= \lambda^* \langle\lambda|\lambda\rangle \end{aligned}$$

ここで、 $L^\dagger=L$ (L はエルミートだから)を使った。

これから、 $\lambda^*=\lambda$ 。すなわち、 **λ は実数である。**

Density operatorの条件 2 Dは、positive semidefinite

V から V への線型写像 $D: V \rightarrow V$ が **positive semidefinite** (半正定値)であるというのは、任意の(ゼロでない) $v \in V$ にたいして、

$$\langle v|D|v \rangle \geq 0$$

が成り立つことである。

この時、 D の固有値も非負となる。

positive semidefinite行列の 固有値は、非負である

positive semidefinite行列 \mathbf{L} の固有ベクトルを $|\lambda\rangle$ 、固有値を λ とする。

$$\mathbf{L}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

左から $\langle\lambda|$ をかけて、

$$\langle\lambda|\mathbf{L}|\lambda\rangle = \lambda \langle\lambda|\lambda\rangle = \lambda$$

\mathbf{L} はpositive semidefiniteだから、

$$\langle\lambda|\mathbf{L}|\lambda\rangle \geq 0$$

これから、 \mathbf{L} の固有値 $\lambda \geq 0$

Density operatorの条件 3 Dのtraceは1である

traceは、operator D の行列の対角成分の和である。
それは、 D の固有値の和に等しい。

Density operator D のtraceが1だということは、 D の固有値の和が1だということである。

古典的確率分布 π の定義

有限集合 S の上で定義された関数 π が次の条件を満たす時、関数 π を S 上の確率分布という。

1. 関数 π は、実数値を取る。 $\pi: S \rightarrow \mathbb{R}$
2. 全ての $s \in S$ について $\pi(s) \geq 0$
3. $\sum_{s \in S} \pi(s) = 1$

Density Operatorの定義

V から V への線型写像 $D: V \rightarrow V$ が、次の条件を満たす時、 D は、Density Operator であるという。

1. D は、Hermiteである。
2. D は、positive semidefiniteである。
3. D のtraceは、1である。

Density operatorは、 古典的確率分布の一般化である

Density operator

- 実数の固有値
- 非負の固有値
- 固有値の和は 1

古典的確率分布

- 実数値を取る
- 非負の値を取る
- 和は 1

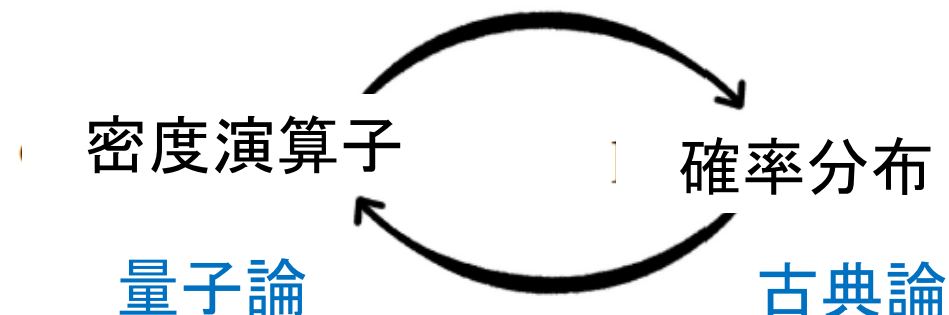
古典論的確率と 量子論的確率の基本的同一性

Part 3-2

古典論的確率と 量子論的確率の基本的同一性

ここでは、古典論的確率と量子論的確率の同一性を示す次の関係が成り立つことを示す。

- 量子論から古典論へ
全ての \mathbb{C}^S 上の密度演算子は、 S 上の確率分布を定義する。
- 古典論から量子論へを
全ての S 上の確率分布は、 \mathbb{C}^S 上の密度演算子定義する



全ての \mathbb{C}^S 上の密度演算子は、
 S 上の確率分布を定義する。

S を有限集合とする。任意の密度演算子 $\rho: \mathbb{C}^S \rightarrow \mathbb{C}^S$ は、次のBorn Ruleで確率分布 $\pi_\rho: S \rightarrow \mathbb{R}$ を定義する。

$$\pi_\rho(s) = \langle s | \rho | s \rangle$$

$\pi_\rho(s)$ は、基底 $\{|s\rangle\}$ についての ρ の行列表示の対角要素である。

ρ は*Hermite*でpositive semidefiniteであるから、これらの値は、実数で非負である。また、 $\text{tr}(\rho) = 1$ だから、 $\sum \pi_\rho(s) = 1$ 。

これから、 $\pi_\rho(s)$ が、 S 上の確率分布であることがわかる。

全てのS上の確率分布は、 \mathbb{C}^S 上の密度演算子を定義する

S上の確率分布 π が与えられているとする。

ここで、 \mathbb{C}^S 上の密度演算子 ρ で、 ρ によって誘導されるBornの分布が、与えられた確率分布 ρ と一致する性質を持つものに注目しよう。

$$\pi(s) = \pi_\rho(s) = \langle s | \rho | s \rangle$$

ただ、こうした

$$\pi = \pi_\rho$$

を与えるやり方は、一つだけではない。

次に、 $\pi = \pi_\rho$ を与える、代表的なやり方を二つ紹介する。

对角密度演算子 ρ_{diag}

対角密度演算子 ρ_{diag}

確率分布 $\pi: S \rightarrow \mathbb{R}$ が与えられた時、

$$\rho_{diag} := \sum_{s \in S} \pi(s) |s\rangle\langle s|$$

とする。

この ρ_{diag} は、単純に確率分布 $\pi(s)$ を、行列 ρ の対角線上に並べたものである。対角線上以外の成分は、ゼロとする。

$$\rho_{diag} = \begin{bmatrix} \pi(s_1) & & & \\ & \pi(s_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & \pi(s_n) \end{bmatrix}$$

ρ_{diag} の例

次は、確率分布 π と、それから定義される、density ρ_{diag} の簡単な例である。

$$\pi = \left(\frac{3}{5}, \frac{1}{5}, \frac{1}{5} \right) \quad \longleftrightarrow \quad \begin{bmatrix} \frac{3}{5} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{5} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{5} \end{bmatrix} = \rho_{diag}$$

ρ_{diag} の性質

$$\rho_{diag} := \sum_{s \in S} \pi(s) |s\rangle \langle s|$$

この ρ_{diag} がdensityであるのを見るのはやさしい。

対称行列なのでHermiteだし、Traceが1なのは与えられている。

これが、半正値であることは、次のようにしてわかる。

任意のベクトル

$$|v\rangle = \sum_{s \in S} v(s) |s\rangle$$

に対して、

$$\langle v | \rho_{diag} | v \rangle = \sum_{s \in S} |v(s)|^2 \pi(s) \geq 0$$

$$\langle v | \rho_{diag} | v \rangle = \sum_{s \in S} |v(s)|^2 \pi(s)$$

$$\rho_{diag} := \sum_{s \in S} \pi(s) |s\rangle \langle s|$$

$$|v\rangle = \sum_{s \in S} v(s) |s\rangle, \quad \langle v| = \sum_{s \in S} \overline{v(s)} \langle s|$$

$$\rho_{diag} |v\rangle = \sum_{s_1 \in S} \pi(s_1) |s_1\rangle \langle s_1| \sum_{s_2 \in S} v(s_2) |s_2\rangle$$

$$= \sum_{s_1, s_2 \in S} \pi(s_1) v(s_2) |s_1\rangle \langle s_1 | s_2\rangle$$

$$= \sum_{s \in S} \pi(s) v(s) |s\rangle$$

$$\langle v | \rho_{diag} | v \rangle = \sum_{s \in S} |v(s)|^2 \pi(s)$$

$$\langle v | \rho_{diag} | v \rangle$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{s \in S} \overline{v(s)} | \langle s | \sum_{s \in S} \pi(s) v(s) | s \rangle \\ &= \sum_{s_1, s_2 \in S} \overline{v(s_1)} v(s_2) \pi(s_2) \langle s_1 | s_2 \rangle \\ &= \sum_{s \in S} |v(s)|^2 \pi(s) \end{aligned}$$

直交射影密度演算子

$$\rho_\pi := |\psi\rangle\langle\psi|$$

直交射影密度演算子

$$\rho_\pi := |\psi\rangle\langle\psi|$$

$\pi: S \rightarrow \mathbb{R}$ が与えられているとしよう。

次の式で単位ベクトル $|\psi\rangle$ を定義する。

$$|\psi\rangle = \sum_{s \in S} \sqrt{\pi(s)} |s\rangle$$

この時、 $|\psi\rangle$ 自身への、次の直交射影演算子 ρ_π を考える。

$$\rho_\pi := |\psi\rangle\langle\psi|$$

$\rho_\pi := |\psi\rangle\langle\psi|$ がdensityであることを示そう。

$\rho_\pi := |\psi\rangle\langle\psi|$ はdensityである

$$\rho_\pi^\dagger = (|\psi\rangle\langle\psi|)^\dagger = (\langle\psi|^\dagger|\psi\rangle^\dagger) = (|\psi\rangle\langle\psi|) = \rho_\pi$$

ρ_π はHermite

$$\langle v|\rho_\pi|v\rangle = \langle v|\psi\rangle\langle\psi|v\rangle = |\langle v|\psi\rangle|^2 \geq 0$$

ρ_π はpositive semidefinite

$$\text{tr}(|\psi\rangle\langle\psi|) = \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

$\text{tr}(\rho_\pi) = 1$

$$\pi_{\rho_\pi}(s) = \langle s|\rho_\pi|s\rangle = \langle s|\psi\rangle\langle\psi|s\rangle = \left(\sqrt{\pi(s)}\right)^2 = \pi(s)$$

$\pi_{\rho_\pi}(s) = \pi(s)$

$\rho_\pi := |\psi\rangle\langle\psi|$ の例

$$\rho_\pi = \begin{bmatrix} \vdots \\ \sqrt{\pi(s)} \\ \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cdots & \sqrt{\pi(s)} & \cdots \end{bmatrix}$$

この形である。

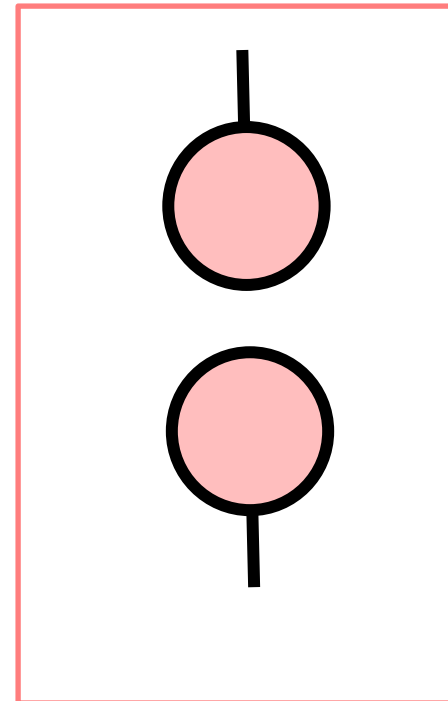
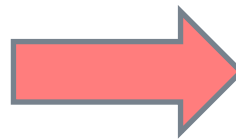
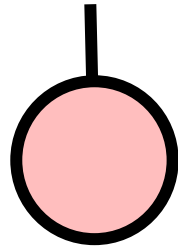
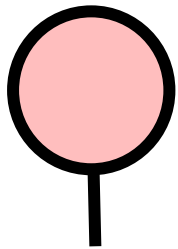
$$\begin{aligned} \pi = \left(\frac{3}{5}, \frac{1}{5}, \frac{1}{5} \right) &\iff \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{3}{5}} \\ \sqrt{\frac{1}{5}} \\ \sqrt{\frac{1}{5}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{3}{5}} & \sqrt{\frac{1}{5}} & \sqrt{\frac{1}{5}} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{3}{5} & \frac{\sqrt{3}}{5} & \frac{\sqrt{3}}{5} \\ \frac{\sqrt{3}}{5} & \frac{1}{5} & \frac{1}{5} \\ \frac{\sqrt{3}}{5} & \frac{1}{5} & \frac{1}{5} \end{bmatrix} = \rho_\pi \end{aligned}$$

$\rho_\pi := |\psi\rangle\langle\psi|$
Tensor Network での表現

$$|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\otimes\langle\psi|$$

$|\psi\rangle$

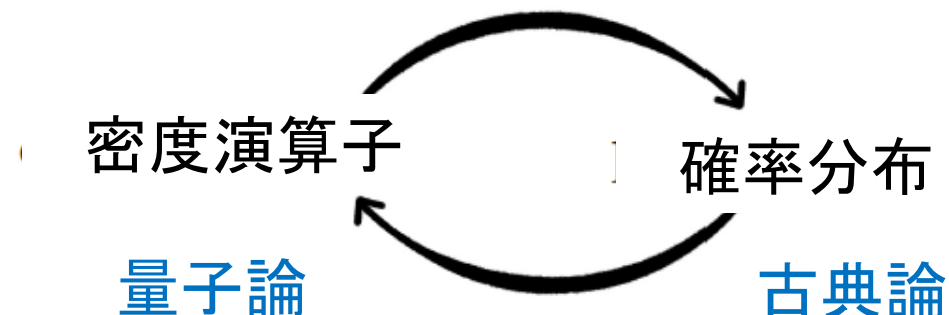
$\langle\psi|$



古典論的確率と 量子論的確率の基本的同一性

こうして、古典論的確率と量子論的確率の同一性を示す次の関係が成り立つことが示された。

- 量子論から古典論へ
全ての \mathbb{C}^S 上の密度演算子は、 S 上の確率分布を定義する。
- 古典論から量子論へ
全ての S 上の確率分布は、 \mathbb{C}^S 上の密度演算子を定義する



Partial traceは量子論的周辺化

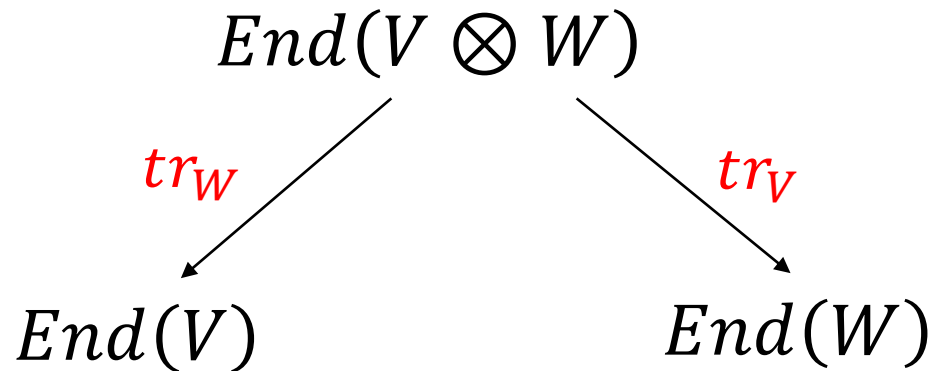
Part 3-3

Endomorphism

Endomorphismは、自分自身への写像である。

$f \in \text{End}(V)$ は、 $f: V \rightarrow V$ を意味する。

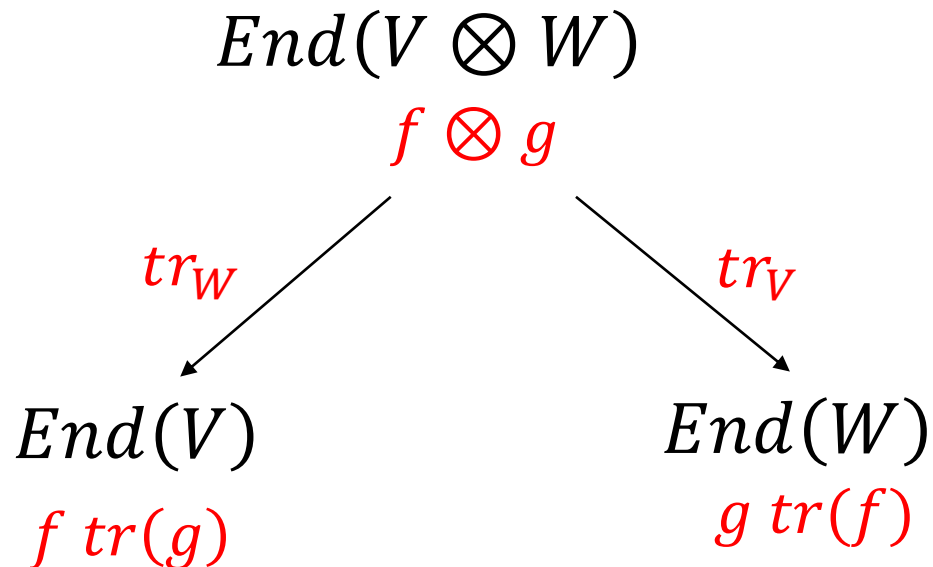
V, W をベクトル空間とすると、次のような線型写像 tr_W, tr_V が存在する。



Partial Trace (= Trace Out)

この tr_W, tr_V を次のように定義して、**partial trace** と呼ぶ。

任意の $f \in \text{End}(V), g \in \text{End}(W)$ に対して、
 $tr_W(f \otimes g) = f \text{tr}(g), \quad tr_V(f \otimes g) = g \text{tr}(f)$



$$\text{End}(V \otimes W) \cong \text{End}(V) \otimes \text{End}(W)$$

$$\text{hom}(A, B) \cong A \otimes B^*$$

$$\begin{aligned} \text{End}(V \otimes W) &\cong (V \otimes W) \otimes (V \otimes W)^* \\ &\cong V \otimes W \otimes V^* \otimes W^* \\ &\cong V \otimes V^* \otimes W \otimes W^* \\ &\cong \text{End}(V) \otimes \text{End}(W). \end{aligned}$$

$$tr_W := id_{End(V)} \otimes tr$$

$$tr_V := tr \otimes id_{End(W)}$$

$$End(V) \otimes End(W)$$



$$tr_W := id_{End(V)} \otimes tr$$

$$End(V) \otimes \mathbb{C}$$



$$\cong$$

$$End(V)$$

$$End(V) \otimes End(W)$$



$$tr_V := tr \otimes id_{End(W)}$$

$$\mathbb{C} \otimes End(W)$$



$$\cong$$

$$End(W)$$

tr_W : W をtrace out する

tr_V : V をtrace out する

Partial trace $tr_W f$ の導出

V の正規直交基底を $\{|x_i\rangle\}$ 、 W の正規直交基底を $\{|y_\alpha\rangle\}$ とすると、 $f \in \text{End}(V \otimes W)$ は、次の形をしている。

$$f = \sum_{i,j;\alpha,\beta} f_{i\alpha,j\beta} |x_i y_\alpha\rangle \langle x_j y_\beta|$$

$(V \otimes W) \otimes (V \otimes W)^*$

$$\begin{aligned} tr_W f &= \sum_{i,j;\alpha,\beta} f_{i\alpha,j\beta} tr_W |x_i \otimes y_\alpha\rangle \langle x_j \otimes y_\beta| \\ &= \sum_{i,\alpha;j,\beta} f_{i\alpha,j\beta} tr_W (|x_i\rangle \langle x_j| \otimes |y_\alpha\rangle \langle y_\beta|) \\ &= \sum_{i,\alpha;j,\beta} f_{i\alpha,j\beta} |x_i\rangle \langle x_j| \otimes tr |y_\alpha\rangle \langle y_\beta| \end{aligned}$$

テンソル積の外積は、外積のテンソル積である。

$tr_W(f \otimes g) = f tr(g)$

Partial trace $tr_W f$ の導出

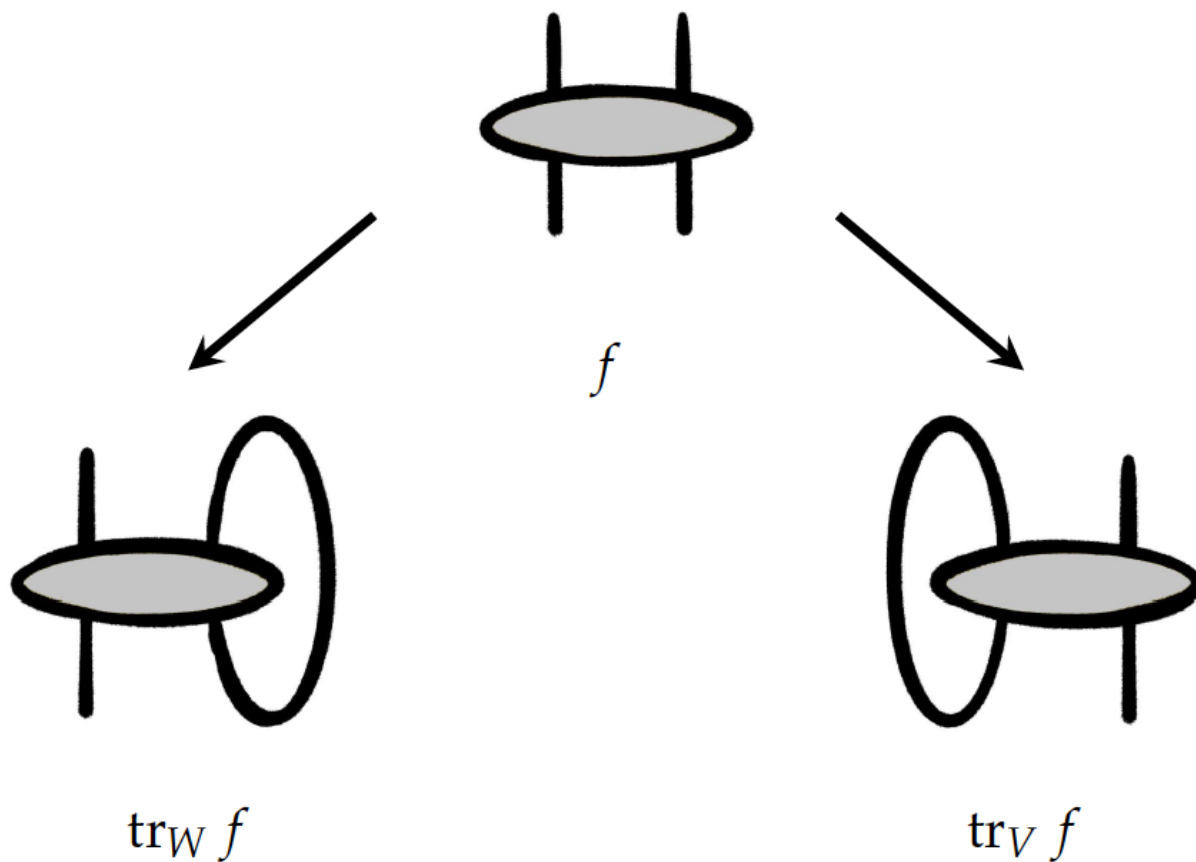
$$\begin{aligned} tr_W f &= \sum_{i,\alpha;j,\beta} f_{i\alpha,j\beta} |x_i\rangle\langle x_j| \otimes tr |y_\alpha\rangle\langle y_\beta| \\ &= \sum_{i,\alpha;j,\beta} f_{i\alpha,j\beta} |x_i\rangle\langle x_j| \otimes \langle y_\alpha|y_\beta\rangle \\ &= \sum_{i,j,\alpha} f_{i\alpha,j\alpha} |x_i\rangle\langle x_j| \end{aligned}$$

$tr(|v'\rangle\langle v|) = \langle v|v'\rangle$

同様に、

$$tr_V f = \sum_{i,\alpha,\beta} f_{i\alpha,j\beta} |y_\alpha\rangle\langle y_\beta|$$

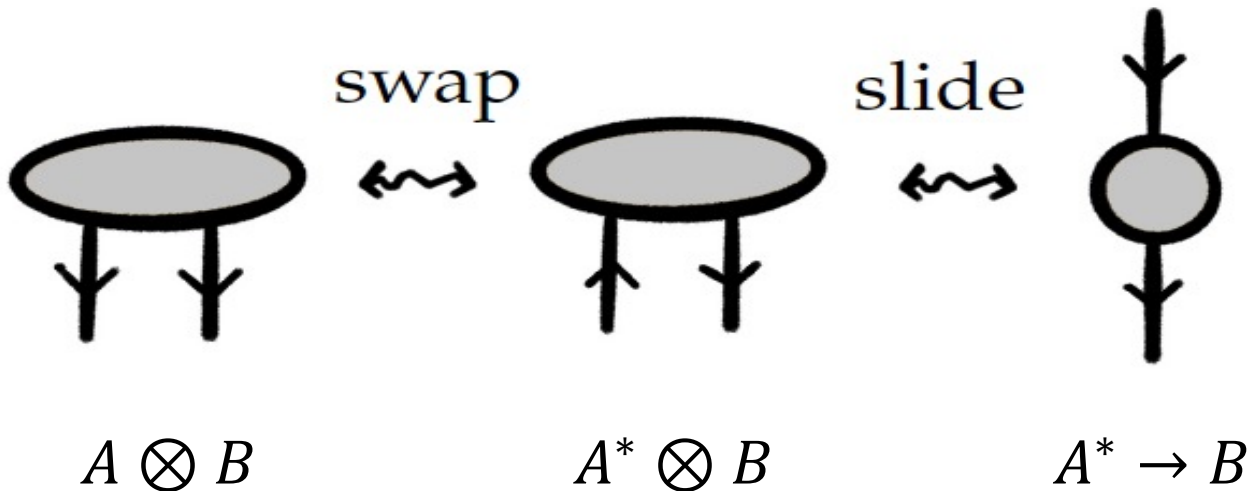
Partial traceの Tensor Network での表示



$$\text{hom}(A, B) \cong A \otimes B \cong A^* \otimes B$$

$$\text{hom}(A, B) \cong A \otimes B \cong A^* \otimes B$$

$$\text{hom}(A^*, B) \cong A^* \otimes B \cong A \otimes B$$



Partial trace $tr_W f, tr_V f$ の性質

$f \in \text{End}(V \otimes W)$ とする。この時、次のことが言える。(証明略)

1. f が Hermite なら、 $tr_W f, tr_V f$ も Hermite である。
2. f が positive semidefinite なら、 $tr_W f, tr_V f$ も positive semidefinite である。
3. $tr_W f, tr_V f$ の trace は、 f の trace に等しい。

すなわち、 f が density なら、 $tr_W f, tr_V f$ も density である。

還元されたdensity operator

ρ が $V \otimes W$ 上のdensity operator なら、

$$\rho_V := \text{tr}_W \rho, \quad \rho_W := \text{tr}_V \rho$$

は、density operator である。

これらを、 ρ に関連した還元されたdensity operator と呼ぶ。

還元されたdensity operatorを 確率として解釈する

Density operatorを、古典論的な確率分布の量子論的一般化として解釈できるように、還元されたdensity operatorも確率解釈を持つ。

還元されたdensity operatorは、古典的な周辺確率の量子論的一般化である。Partial traceは、古典論的周辺化の量子版である。

次の命題が成り立つ。

ρ_X は周辺化する

X 、 Y を有限集合とする時、 ρ を $\mathbb{C}^X \otimes \mathbb{C}^Y$ 上の任意のdensity operatorとする。この時、次の式が成り立つ。

$$\pi_{\rho_X} = (\pi_\rho)_X \text{ かつ } \pi_{\rho_Y} = (\pi_\rho)_Y$$

すなわち、 ρ_X 上でBorn Ruleで導かれる確率分布は、 ρ の上で導かれる結合確率分布の周辺化である。 ρ_Y についても同様のことが成り立つ。

証明

$\mathbb{C}^X \otimes \mathbb{C}^Y$ 上の任意の density operator

$$\rho = \sum_{\substack{x,y \\ x',y'}} \rho_{xy,x'y'} |xy\rangle \langle x'y'|$$

は、Born Rule $\pi_\rho(x, y) := \langle xy | \rho | xy \rangle = \rho_{xy,xy}$ で、
 $\pi_\rho: X \times Y \rightarrow \mathbb{R}$ の結合確率分布を定義する。

還元された density ρ_X は、 Y 上で和をとることで得られる。
この xx' の要素は、

$$\langle x | \rho_X | x' \rangle = \sum_y \rho_{xy,x'y}$$

証明(続き)

ここで、 $x = x'$ とおくと、次のように、Born Rule が確率分布 $\pi_{\rho_X}: X \rightarrow \mathbb{R}$ を定義する。

$$\pi_{\rho_X}(x) := \langle x | \rho_X | x \rangle = \sum_y \rho_{xy,xy} = \sum_y \pi_\rho(x, y) = (\pi_\rho)_X$$

ここで、 $(\pi_\rho)_X: X \rightarrow \mathbb{R}$ は、 π_ρ から得られた周辺確率分布である。

還元された密度行列の テンソル・ネットワーク表示

Part 3-4

Singular Value Decomposition

全ての $m \times n$ の行列 M は、次の形に分解できる。

$$M = V \Sigma U^\dagger$$

ここに、 V は $m \times m$ の、 U は $n \times n$ ユニタリ行列

Σ は、 D を $m \times m$ の対角行列とした時、 $[D|0]$ の形で表される。

Σ の0の作用で、 U^\dagger の一部は機能しないのでそれを省いたもの U_0^\dagger とすると

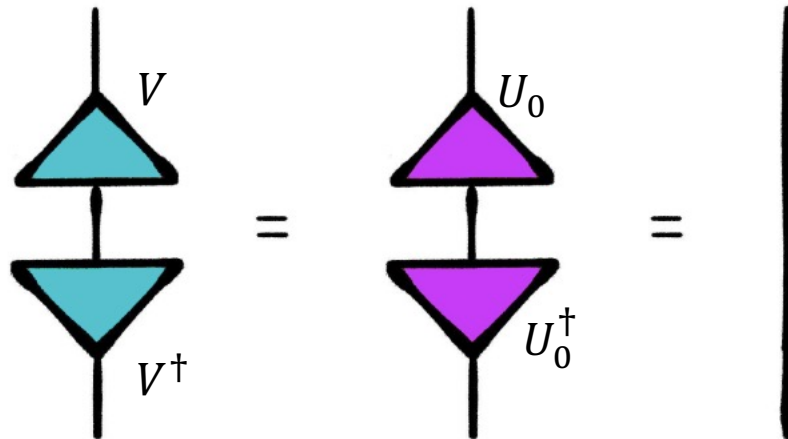
$$M = V D U_0^\dagger$$

$$\begin{bmatrix} * & * & * \\ * & * & * \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * & * \\ * & * \end{bmatrix} \begin{bmatrix} * & & \\ & * & \\ & & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{bmatrix}$$

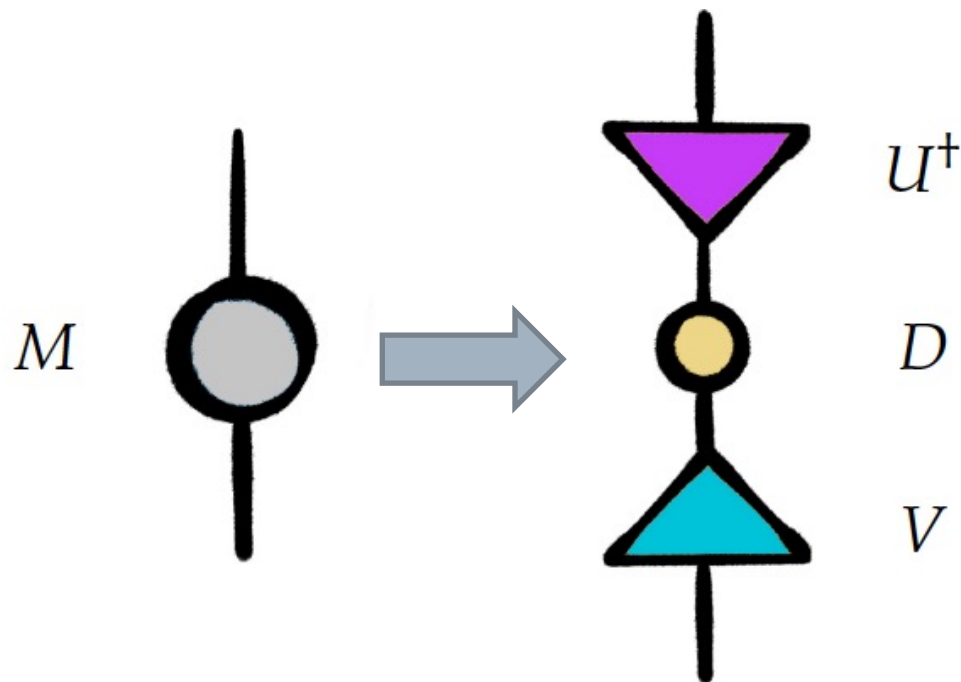
$M = V D U_0^\dagger$

U_0 は isometry, V はunitary

U_0 はもはやユニタリではないが、 $U_0 U_0^\dagger = id$ で isometry である。
また、 V はユニタリであるので、次の図式が成り立つ。



Singular Value Decomposition の tensor network での表現



Schmidt decomposition

V, W を内積空間として、 $\dim(V)=n$, $\dim(W)=m$ 、 $n \leq m$ としよう。

すべてのベクトル $|\psi\rangle \in V \otimes W$ に対して、正規直交な V のベクトル $|e_1\rangle, \dots, |e_n\rangle$ と W のベクトル $|f_1\rangle, \dots, |f_m\rangle$ と、非負で実数の係数 σ_i が存在して、

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^m \sigma_i |f_i\rangle \otimes |e_i\rangle$$

と表すことができる。

証明

$\{|x_1 \rangle, \dots, |x_n \rangle\}$, $\{|y_1 \rangle, \dots, |y_m \rangle\}$ を、それぞれ V , W の正規直交基底としよう。この時、

$$|\psi \rangle = \sum_{i,\alpha} \psi_{i\alpha} |x_i \rangle \otimes |y_\alpha \rangle$$

と表すことができる。

M を $\psi_{i\alpha}$ を $i\alpha$ 番目の要素に持つ $m \times n$ の行列として、 $M = VDU^\dagger$ という M のSingular Value Decompositionを考える。

ここで、 V は正規直交カラム $|f \rangle$ を持つ $m \times m$ 行列、 U は正規直交カラム $|e \rangle$ を持つ $n \times m$ 行列、 D は σ を要素とする $m \times m$ 対角行列である。

証明(続き)

この時、

$$M = \sum_{i=1}^m \sigma_i |f_i\rangle \langle e_i|$$

が、

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^m \sigma_i |f_i\rangle \otimes |e_i\rangle$$

を定義する。

$$|f_i\rangle \langle e_i| = |f_i\rangle \otimes |e_i\rangle \text{ である。}$$

証明(続き)

$V \otimes W$ の任意のベクトル $|\psi\rangle$ は、線型写像 $M: V \rightarrow W$ に対応し、その SVD は V の正規直交集合 $\{|e\rangle\}$ と W の正規直交集合 $\{|f\rangle\}$ を生成し、基底 $\{|e\rangle \otimes |f\rangle\}$ に対する $|\psi\rangle$ の係数が M の特異値となる。。

還元されたdensity operator ρ_V, ρ_W の固有値と固有ベクトル

V, W を有限次元の内積空間とし、 $|\psi\rangle \in V \otimes W$ とする。
この時、直交射影演算子 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ の還元された
density operator ρ_V, ρ_W は、同じ固有値を持ち、その固有
ベクトルは一対一に対応する。

証明

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^m \sigma_n |e_n\rangle \otimes |f_n\rangle$$

を、 $|\psi\rangle$ のSchmidt分解としよう。

ここで、 m は $\dim(V), \dim(W)$ の最小値である。

$|\psi\rangle$ への直交射影は、次のように表現される。

$$\begin{aligned} \rho &= |\psi\rangle\langle\psi| \\ &= \left(\sum_{i=1}^m \sigma_i |e_i\rangle \otimes |f_i\rangle \right) \left(\sum_{j=1}^m \sigma_j \langle f_j| \otimes \langle e_j| \right) \\ &= \sum_{i,j=1}^m \sigma_i \sigma_j |e_i\rangle\langle e_j| \otimes |f_i\rangle\langle f_j| \end{aligned}$$

証明(続き)

$$\rho_V = \text{tr}_W \rho$$

$$\begin{aligned} &= \text{tr}_W \left(\sum_{i,j=1}^m \sigma_i \sigma_j |e_i\rangle\langle e_j| \otimes |f_i\rangle\langle f_j| \right) \\ &= \sum_{i,j=1}^m \sigma_i \sigma_j |e_i\rangle\langle e_j| \cdot \text{tr} |f_i\rangle\langle f_j| \\ &= \sum_{i,j=1}^m \sigma_i \sigma_j |e_i\rangle\langle e_j| \langle f_i | f_j \rangle \\ &= \sum_{i=1}^m \sigma_i^2 |e_i\rangle\langle e_i| \end{aligned}$$

証明(続き)

$$\rho_W = \text{tr}_V \rho$$

$$\begin{aligned} &= \text{tr}_V \left(\sum_{i,j=1}^m \sigma_i \sigma_j |e_i\rangle\langle e_j| \otimes |f_i\rangle\langle f_j| \right) \\ &= \sum_{i,j=1}^m \sigma_i \sigma_j \text{tr} |e_i\rangle\langle e_j| \cdot |f_i\rangle\langle f_j| \\ &= \sum_{i,j=1}^m \sigma_i \sigma_j \langle e_i | e_j \rangle |f_i\rangle\langle f_j| \\ &= \sum_{i=1}^m \sigma_i^2 |f_i\rangle\langle f_i| \end{aligned}$$

証明(続き)

$$\rho_V = \sum_{i=1}^m \sigma_i^2 |e_i\rangle \langle e_i|, \quad \rho_W = \sum_{i=1}^m \sigma_i^2 |f_i\rangle \langle f_i|$$

$$\rho_V |e_i\rangle = \lambda_i |e_i\rangle, \quad \rho_W |f_i\rangle = \lambda_i |f_i\rangle$$

ここで、 $\lambda_i = \sigma_i^2$ である。

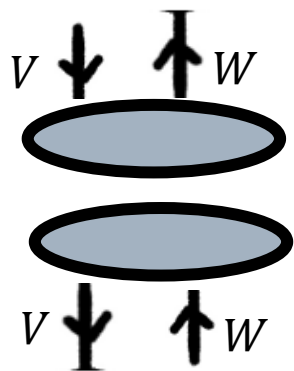
よって、 ρ の還元された二つのdensityは、同じ固有値を持ち、その固有ベクトルは、一対一に対応する。

$$|e_i\rangle \xrightleftharpoons{\lambda_i} |f_i\rangle$$

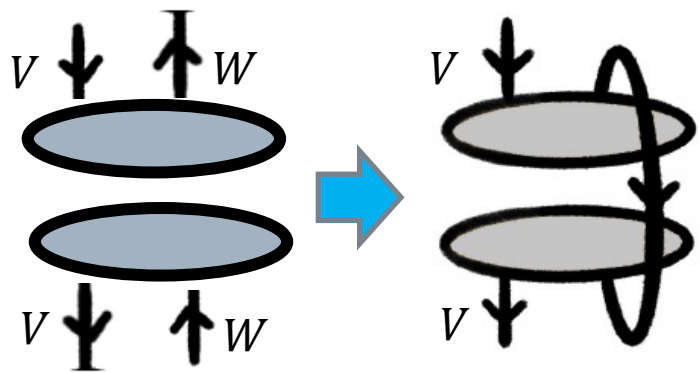
その対応は、次のMとその随伴によって与えられる。

$$M |e_i\rangle = \lambda_i |f_i\rangle, \quad M^\dagger |f_i\rangle = |e_i\rangle$$

ρ_V, ρ_W を tensor network で表示する

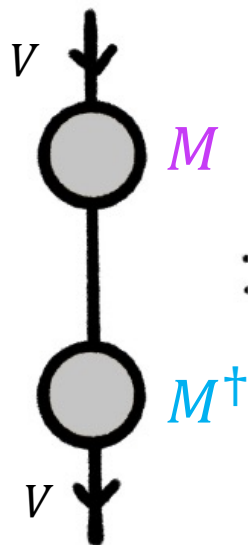
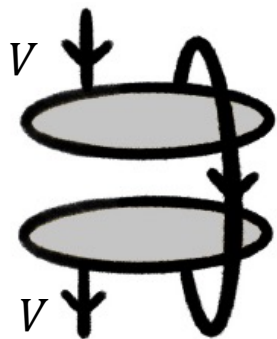
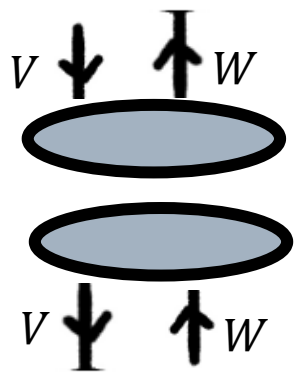


$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$



$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

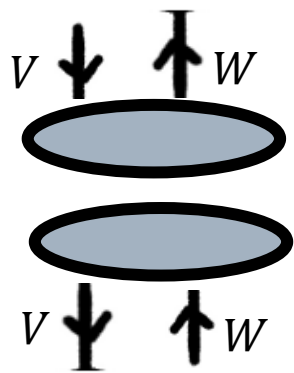
$$\rho_V$$



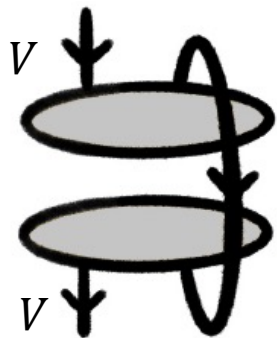
$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

$$\rho_V$$

$$M^\dagger M$$

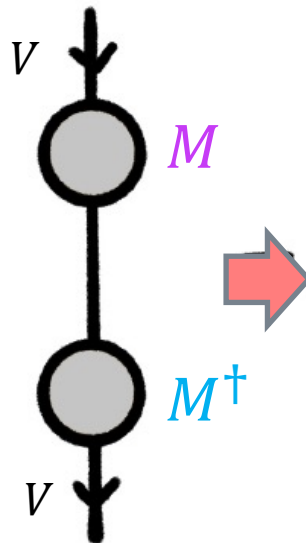


$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

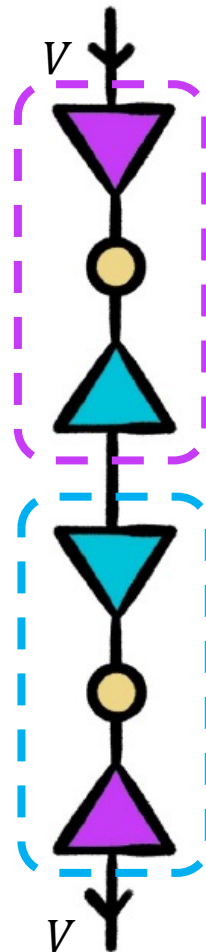


$$\rho V$$

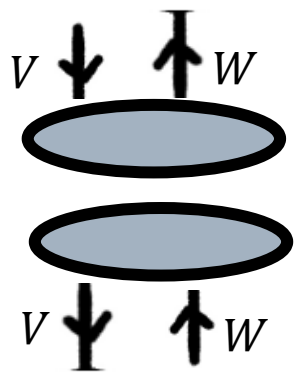
=



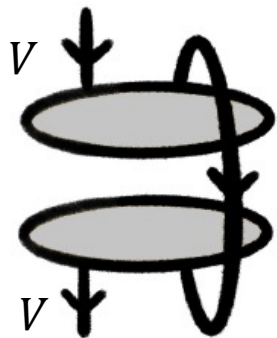
$$M^\dagger M$$



$$UD^\dagger V^\dagger VDU^\dagger$$

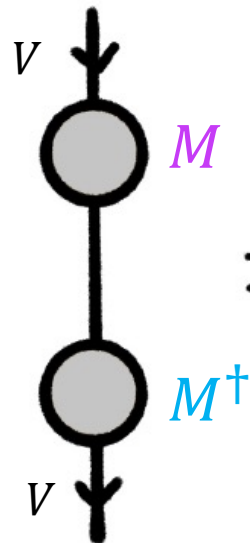


$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$



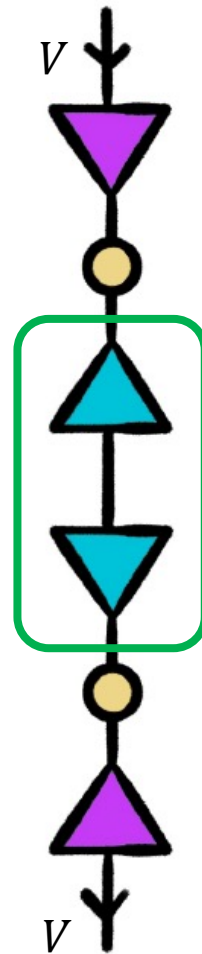
$$\rho_V$$

=



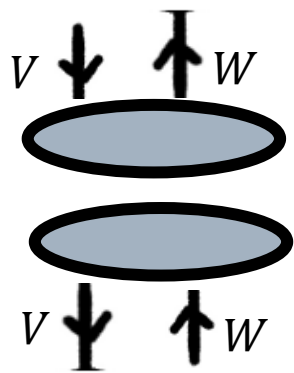
$$M^\dagger M$$

=

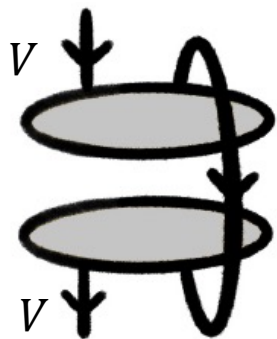


$$UD^\dagger V^\dagger VDU^\dagger$$

$$\rho_V = M^\dagger M = UD^2U^\dagger$$

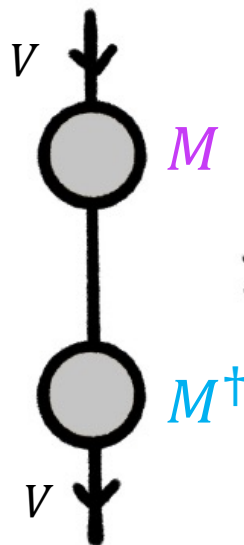


$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$



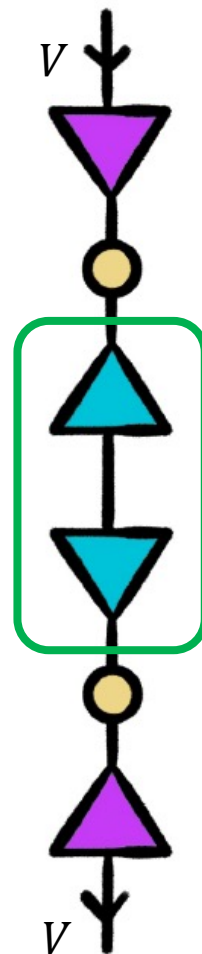
$$\rho_V$$

=

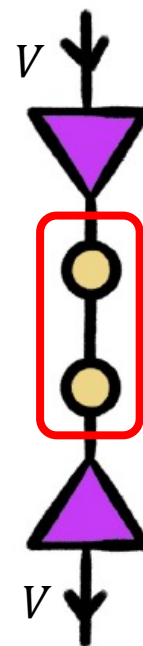


$$M^\dagger M$$

=

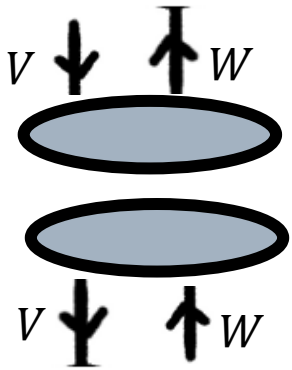


$$UD^\dagger V^\dagger V D U^\dagger$$

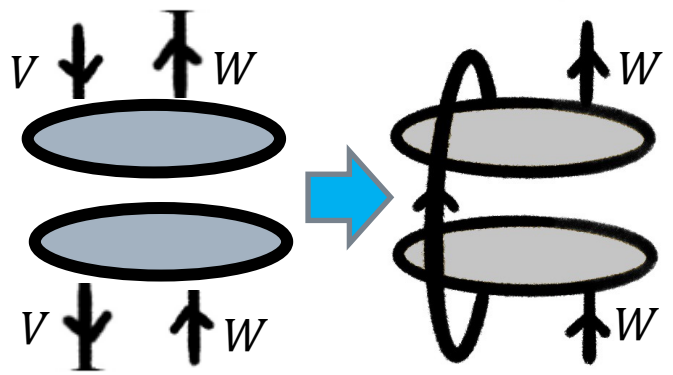


$$UD^2U^\dagger$$

ρ_V, ρ_W を tensor network で表示する

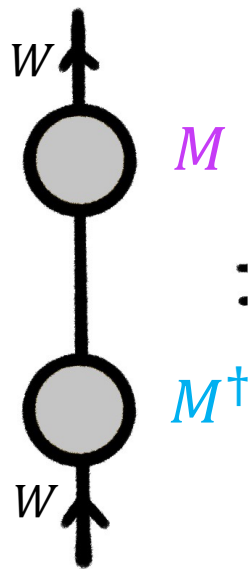
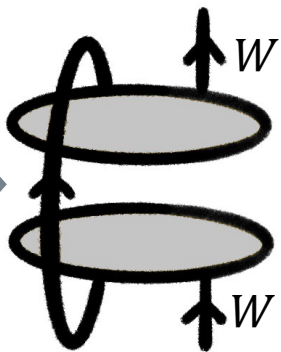
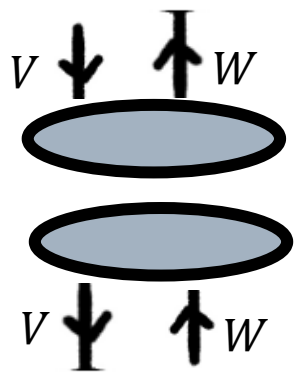


$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$



$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

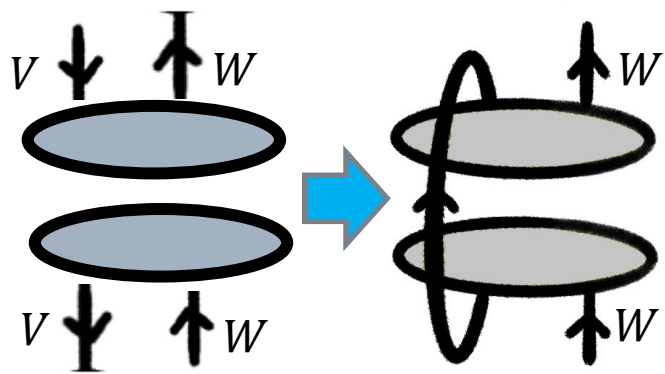
$$\rho_W$$



$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

$$\rho_W$$

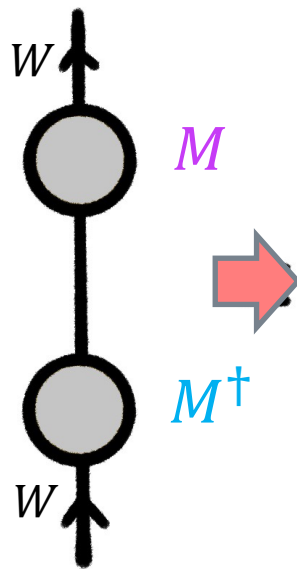
$$MM^\dagger$$



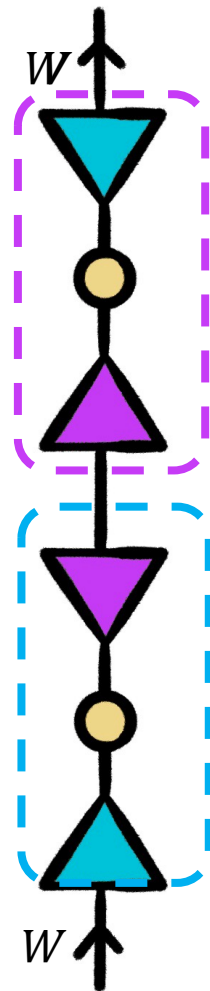
$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

$$\rho_W$$

=

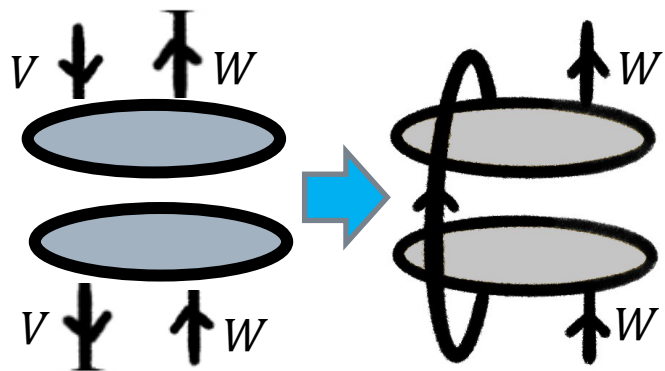


$$MM^\dagger$$



$$VDU^\dagger UD^\dagger V$$

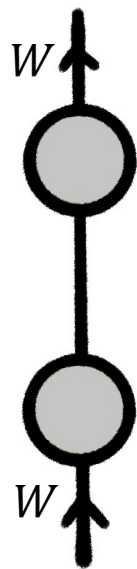
$$\rho_V = MM^\dagger = VD^2V^\dagger$$



$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$$

$$\rho_W$$

=

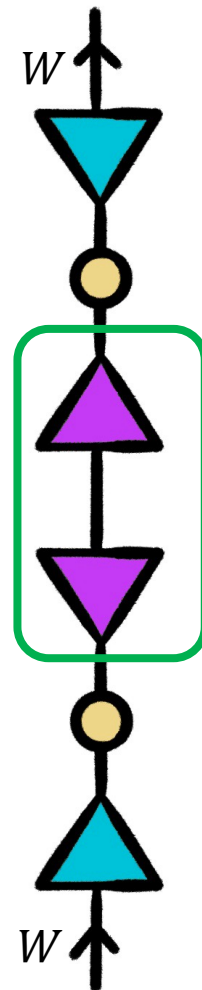


$$MM^\dagger$$

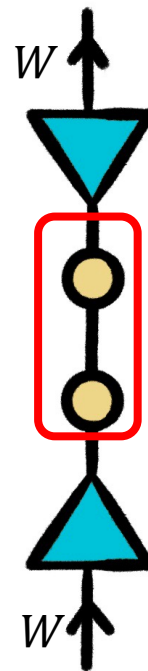
M

M^\dagger

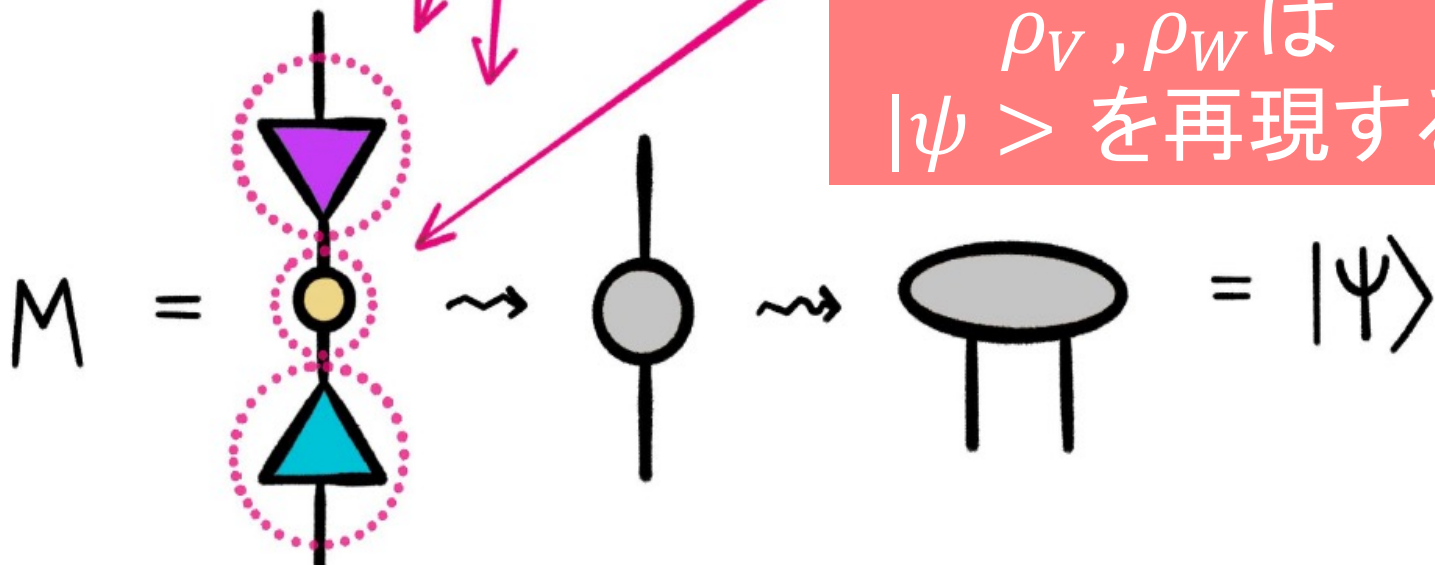
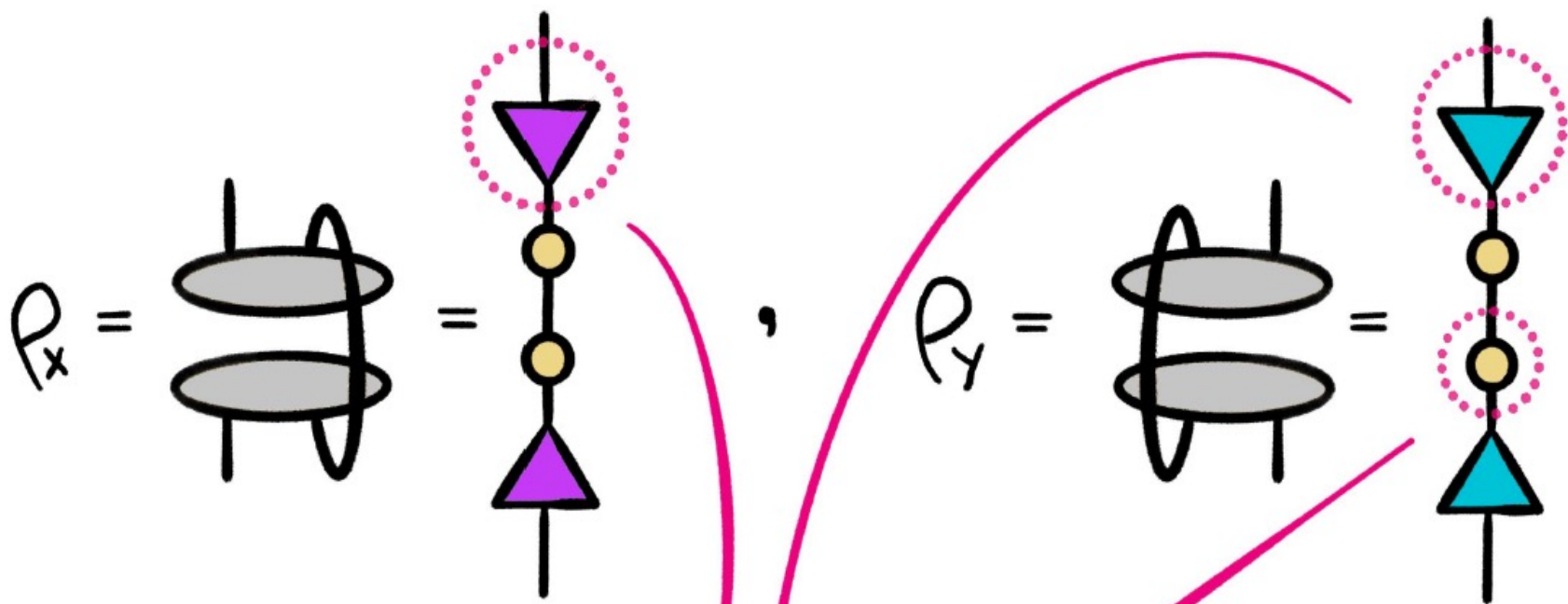
=



$$VD^\dagger U D^\dagger V^\dagger$$



$$VD^2V^\dagger$$



還元されたdensity operator まとめ

$|\psi\rangle \in V \otimes W$ の単位ベクトルとし、直交射影演算子
 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ を考える

- ρ の還元されたdensity operator ρ_V, ρ_W は、同じ固有値を持ち、その固有ベクトルは一対一に対応する。
- $M = VDU^\dagger$ を $|\psi\rangle$ に対応する $\dim(W) \times \dim(V)$ 行列のSVDとすると、 U のカラムは ρ_V の固有ベクトル、 V のカラムは ρ_W の固有ベクトル、 D の対角エントリの二乗はそれらの共通な固有値となる。

還元されたdensity operator まとめ

- ρ の還元されたdensity operator ρ_V, ρ_W は、行列Mとその共役な行列 M^\dagger の積としてあたえられる。
すなわち $\rho_V = M^\dagger M$ で $\rho_W = M M^\dagger$ である。
- 元のdensity operatorは、その還元された ρ_V と ρ_W のスペクトル分解から再構成することができる

マクロな世界での量子論的確率論

これまで見たような確率概念の拡大は、ミクロな量子論の世界に大きな変更を強いるものではない。

問題は、我々の日常のマクロな世界の中でも、古典論的ではない量子論的確率論が、大きな役割を果たしている領域が存在する可能性があるということである。

意味の分散表現論

僕は、ことばの意味を密度行列で表現しようという「意味の分散表現論」の新しい進展が、マクロな世界で量子論的な確率論が機能している舞台だと考えている。

それについては、3月以降のセミナーで展開できればと思う。

