密度行列 ρ で理解する量子の世界

21/08/05 マルゼミ

はじめに

このセミナーでは、密度行列 ρ を使って量子の世界を記述するやり方を学びます。

量子の世界を記述するには、状態ベクトルを使うやり方と密度行列を使うやり方があります。

状態ベクトルを使うアプローチは、基本的には、一つの量子の状態に注目します。一方、密度行列を使うアプローチでは、複数の量子の状態のあつまり（アンサンブル）を対象にします。

二つのアプローチは、量子の世界を記述しようという点では、基本的には同じ能力を持ちます。

はじめに

現実の量子の世界は、複数の量子の状態が入り混じった状態にあります。

その中では、二つの量子が絡み合った状態にあったり（エンタングルメント）、対象の系自身が、外部の環境の影響を受けます（ノイズ、デコヒーレント）。こうした現象に対しては、密度行列によるアプローチが力を発揮します。また、量子の世界のエントロピーは、密度行列で定義されます。

密度行列は、量子情報理論の基本的なツールです。量子の世界の理解を一歩進める上で、密度行列の理解は不可欠です。

Agenda

第一部　密度行列とTrace

- 密度行列とは何か？
- Traceと密度行列

第二部　密度行列と観測

- 密度行列と観測演算子の一般化
- 観測の確率を密度行列で表現する
- 観測の結果を観測演算子で表現する

第三部　Partial Trace

第四部　密度行列で量子論の原理を定式化する

第一部

密度行列とTrace

密度行列とは何か？

密度行列

pureな量子の状態の集まり(アンサンブル)

ある量子のシステムが、一連の状態$|\psi_i>$の中の一つの状態を、確率p_iで取ったとする。
$\{ p_i, |\psi_i >\}$を、「$pure$状態の集まり(アンサンブル」)という。
密度行列は、この状態の集まりについて定義される。

$\{ p_i, |\psi_i >\}$

$pure$な状態のアンサンブル

アンサンブル

密度行列の定義

この時、このシステムの密度行列は、次の式で定義される。

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i><\psi_i|$$

$\{p_0, |\psi_0>\}, \{p_1, |\psi_1>\}, \{p_2, |\psi_2>\}, \ldots$

*pure*な状態のアンサンブル

アンサンブル

密度行列の例

次のようなアンサンブルが与えられた時、

$\{1/2, |0>\}, \{1/2, |1>\}$

$pure$な状態のアンサンブル

アンサンブル

密度行列は次のようになる。

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i >< \psi_i| = \frac{1}{2}|0 >< 0| + \frac{1}{2}|1 >< 1| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

密度行列の例

次のようなアンサンブルが与えられた時、

$\{1/2, |+>\}, \{1/2, |->\}$

$pure$な状態のアンサンブル

アンサンブル

密度行列は次のようになる。

$$\rho = \sum_i p_i|\psi_i >< \psi_i| \;= \frac{1}{2}|+><+| + \frac{1}{2}|-><-| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

mixedな密度行列

複数のpureな状態のアンサンブル

複数の pureな状態の集まり(アンサンブル) $\{ p_{ij} , |\psi_{ij} > \}$ が与えられていたとする。この時、iを固定したpureな状態の集まり$\{ p_{ij} , |\psi_{ij} > \}$上で ρ_iを、定義できる。

ρ_0 $\{ p_{00}, |\psi_{00} > \}, \{ p_{01}, |\psi_{01} > \}, \{ p_{02}, |\psi_{02} > \}, \dots$

ρ_1 $\{ p_{10}, |\psi_{10} > \}, \{ p_{11}, |\psi_{11} > \}, \{ p_{12}, |\psi_{12} > \}, \dots$

....

ρ_i $\{ p_{i0}, |\psi_{i0} > \}, \{ p_{i1}, |\psi_{i1} > \}, \{ p_{i2}, |\psi_{i2} > \}, \dots$

アンサンブル

複数の密度行列で密度行列を定義する

ある量子システムの状態ρ が、確率p_iで密度行列ρ_iで表現されるとしよう。この時、次のように書ける。

$$\rho = \sum_i p_i \, \rho_i$$

p_0 ρ_0 $\{ p_{00}, |\psi_{00} >\}, \{ p_{01}, |\psi_{01} >\}, \{ p_{02}, |\psi_{02} >\}, \ldots$

p_1 ρ_1 $\{ p_{10}, |\psi_{10} >\}, \{ p_{11}, |\psi_{11} >\}, \{ p_{12}, |\psi_{12} >\}, \ldots$

....

p_i ρ_i $\{ p_{i0}, |\psi_{i0} >\}, \{ p_{i1}, |\psi_{i1} >\}, \{ p_{i2}, |\psi_{i2} >\}, \ldots$

アンサンブル

密度行列の定義から考える

このアンサンブルのもとでは、状態, $|\psi_{ij} >$ を取る確率は、
$p_i p_{ij}$になるから、

$$\rho = \sum_{ij} p_i p_{ij} |\psi_{ij} >< \psi_{ij}|$$

ここで、

$$\rho_i = \sum_j p_{ij} \, |\psi_{ij} >< \psi_{ij}|$$と置けば、

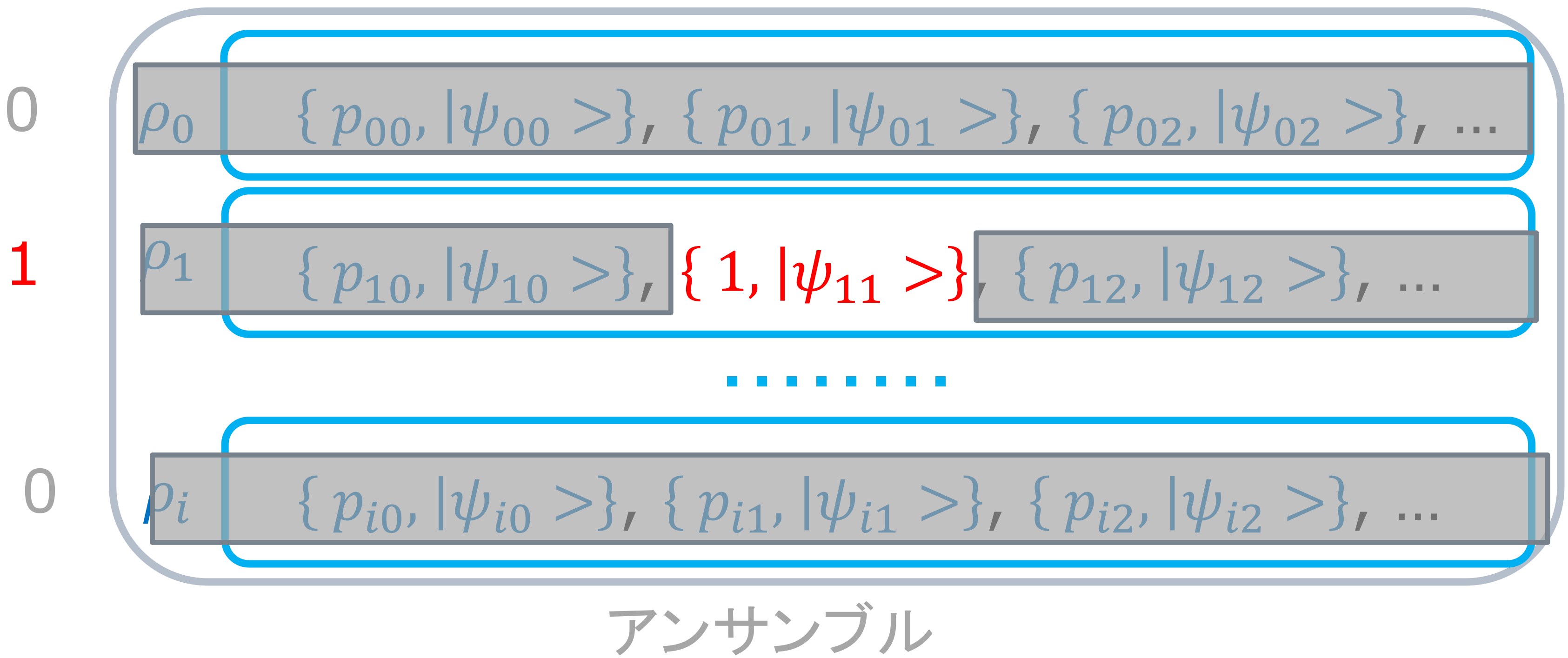
$$\rho = \sum_i p_i \rho_i$$

こうした形で表現されるのも、mixedな密度行列である。

mixedな密度行列の特殊な形としてのpureな密度行列

pureな密度行列

状態 |ψ> が確実に起きるなら、すなわち確率 1 で起きるなら、
密度行列は、p_i に 1を入れて、iについて和をとる必要もなくなる。
この例は、$|\psi_{11} >$ が確実に起きることを表している。



pureな密度行列
$\rho = |\psi><\psi|$

状態 $|\psi>$ が確実に起きるなら、すなわち確率 1 で起きるなら、
密度行列は、p_i に 1を入れて、iについて和をとる必要もなく、

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i >< \psi_i|$$

$$= \sum_i 1 * |\psi >< \psi|$$

$$= |\psi >< \psi|$$

$\rho = |\psi><\psi|$ になる。

こうした密度行列を pure な密度行列という。

pureな密度行列の例

$$|\psi> \ = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0>+|1>)$$としよう。

$$|\psi><\psi| = \frac{1}{2}(|0>+|1>)(<0|+<1|)$$
$$= \frac{1}{2}(|0><0| + |0><1| + |1><0| + |1><1|)$$
$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Traceと密度行列

Trace

Trace

Traceは、行列の対角成分の和である。
行列AのTraceを tr(A)と表す。

行列Aの i行 j列目の成分は、<i|A|j>なので、

$$tr(A) = \sum_{k} \langle k|A|k \rangle$$

<k|A|k>は、行列Aの k行 k列目、すなわち、対角成分を表している。
tr(A)は、その対角成分の和である。

ベクトルVの i番目の成分： <i|V>
行列Aの i行 j列目の成分: <i|A|j>

ベクトルと行列の成分

ベクトルVの i番目の成分 c_i : <i|V>

ベクトルVの i番目の成分 c_iの絶対値の二乗:

$|c_i|^2 = c_i^* c_i = < V|i >< i|V >$

行列Aの i行 j列目の成分 a_{ij}: <i|A|j>

行列Aの表示: $A = \sum_{ij} a_{ij} |i >< j|$

Traceは、行列に対し線形に作用する

Traceは、行列に対し線形に作用する。すなわち、nをスカラー、A, B を行列とする時、

$$tr(nA + B) = n\, tr(A) + tr(B)$$

なぜならば

$$\begin{aligned} tr(nA + B) &= \sum_k < k|(nA + B)|k > \\ &= \sum_k < k|nA|k > + \sum_k < k|B|k > \\ &= n\, tr(A) + tr(B) \end{aligned}$$

Traceの基本的性質

Traceは、行列に対し線形に作用する。

$$tr(nA + B) = n\,tr(A) + tr(B)$$

$$tr'AB) = tr(BA)$$

密度行列のTrace

pureな密度行列のTrace

pureな密度行列は、$\rho = |\psi><\psi|$ と表される。

$|\psi> = \sum_i \alpha_i |i>$ とすると、pureな密度行列ρ のTrace は、

$$tr(|\psi><\psi|) = \sum_k <k| \sum_{i,j} \alpha_i |i> \alpha_i^* <j||k>$$

$$= \sum_{i,j,k} \alpha_i \alpha_i^* <k|i><j|k> = \sum_i \alpha_i \alpha_i^* = 1$$

$$tr(|\psi><\psi|) = 1$$

pureな密度行列は、$\rho = |\psi><\psi|$ と表される。

pureな密度行列のTrace

pureな密度行列は、$\rho = |\psi><\psi|$ と表される。

$|\psi> = \sum_i \alpha_i |i>$ とすると、pureな密度行列ρ のTrace は、

$tr(\rho) = \sum_k < k|\rho|k >$

$$tr(|\psi >< \psi|) = \sum_k < k| \boxed{\sum_{i,j} \alpha_i |i > \alpha_i^* < j|} |k >$$

$|\psi><\psi|$

$$= \sum_{i,j,k} \alpha_i \alpha_i^* \boxed{< k|i >} \boxed{< j|k >} = \sum_i \alpha_i \alpha_i^* = 1$$

$$tr(|\psi >< \psi|) = 1$$

pureな密度行列のTraceの値

pureな密度行列は、$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ と表される。

pureな密度行列のtraceは、1である。

$$tr(|\psi >< \psi|) = 1$$

mixedな密度行列のTrace

$mixed$な密度行列は、$\rho = \sum_i p_i |\psi_i >< \psi_i|$と表される

$$tr(\sum_i p_i |\psi_i >< \psi_i|)$$

$$= \sum_k < k| \sum_i p_i |\psi_i >< \psi_i||k >$$

$$= \sum_i p_i \, tr\,(|\psi_i >< \psi_i|) = \sum_i p_i = 1$$

$mixed$な密度行列は、$\rho = \sum_i p_i |\psi_i >< \psi_i|$と表される

mixedな密度行列のTrace

$mixed$な密度行列は、$\rho = \sum_i p_i|\psi_i >< \psi_i|$と表される

$$tr(\sum_i p_i|\psi_i >< \psi_i|)$$

$$tr(\rho) = \sum_k < k|\rho|k >$$

$$= \sum_k \boxed{< k| \sum_i p_i|\psi_i >< \psi_i||k >}$$

$$tr((|\psi_i >< \psi_i|)$$

$$= \sum_k < k|((|\psi_i >< \psi_i|)|k >$$

$$= \sum_i p_i \boxed{tr\,(|\psi_i >< \psi_i|)} = \sum_i p_i = 1$$

$$tr(|\psi >< \psi|) = 1$$

mixedな密度行列のTraceの値

$mixed$な密度行列は、$\rho = \sum_i p_i |\psi_i >< \psi_i|$と表される

mixedな密度行列のtraceは、1である。

$$tr(\rho_{mixed}) = tr(\sum_i p_i |\psi_i >< \psi_i|) = 1$$

密度行列の二乗のTrace

密度行列の二乗を考える。

$$
\begin{aligned}
\varrho^2 &= \varrho * \varrho \\
&= \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \sum_j p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j| \\
&= \sum_{i,\,j} p_i p_j |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi_j\rangle\langle\psi_j| \\
&= \sum_i p_i^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \,.
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathrm{tr}(\varrho^2) &= \sum_k \langle k| \sum_i p_i^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i||k\rangle \\
&= \sum_i p_i^2 \mathrm{tr}(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) = \sum_i p_i^2
\end{aligned}
$$

密度行列の二乗のTrace

密度行列の二乗を考える。

$$
\begin{aligned}
\varrho^2 &= \varrho * \varrho \\
&= \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \sum_j p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j| \\
&= \sum_{i,\,j} p_i p_j |\psi_i\rangle \boxed{\langle\psi_i|\psi_j\rangle} \langle\psi_j| \\
&= \sum_i p_i^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \, .
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\mathrm{tr}(\varrho^2) &= \sum_k \langle k| \sum_i p_i^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i||k\rangle \\
&= \sum_i p_i^2 \,\mathrm{tr}(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|) = \sum_i p_i^2
\end{aligned}
$$

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i >< \psi_i|$$

$$\rho^2 = \sum_i p_i^2 |\psi_i >< \psi_i|$$

$$tr(\rho) = \sum_k < k|\rho|k >$$

$$tr(|\psi><\psi|) = 1$$

pureとmixedの密度行列の違い

pureの場合

$\rho = |\psi><\psi|$

$\rho^2 = |\psi><\psi||\psi><\psi| = |\psi><\psi|$

$\mathrm{tr}(\rho^2) = \mathrm{tr}(\rho) = \mathrm{tr}(|\psi><\psi|) = 1$

mixedの場合

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i >< \psi_i|$$

$$\mathrm{tr}(\rho^2) = \sum_i p_i^2$$

$\mathrm{tr}(\rho^2) < 1$

pureとmixedの密度行列の違い

pureな密度行列の例

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$$

$$\rho^2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix}2 & 2\\ 2 & 2\end{pmatrix}$$

$$\mathrm{tr}(\rho^2) = \frac{1}{4}(2+2) = 1$$

mixedの場合

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$\rho^2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$\mathrm{tr}(\rho^2) = \frac{1}{4}(1+1) = \frac{1}{2} < 1$$

第二部

密度行列と観測

密度行列と観測

ここでは、密度行列で表現される量子系の状態が、どのように観測されるのかを考える。

「観測演算子の一般化」というセクションでは、最初に、「観測可能量」を表現するエルミート演算子を用いて「観測の期待値」を導出する標準的なやり方を学ぶ。ついで、状態ベクトルで表現される量子系の観測で、中心的な役割を果たす「射影演算子」の働きを振り返る。

重要なのは、観測演算子の一般化としての、POVM (Positive Operator Valued Measurement)という概念である。

密度行列と観測

「観測の確率を密度行列で表現する」のセクションでは、一般化された観測演算子を用いて、状態mが観測される確率を計算する。

「観測の結果を観測演算子で表現する」のセクションでは、状態mが観測された後の、密度行列の変化を考える。


観測演算子の一般化

観測の期待値

観測値の期待値

一般に、値λ_iが確率$P(\lambda_i)$で観測される時、その観測 L の期待値を<L>で表せば、<L>は、次の式で与えられる。

$$< \boldsymbol{L} > = \sum_i \lambda_i P(\lambda_i)$$

観測値の期待値

ある量子系のシステムの状態を|A>とする。

系の観測可能量は、あるエルミートな演算子 L で表現されるのだが、観測値は、このLの固有値 λ_i である。

また、L の固有ベクトル $|\lambda_i>$は、この系の基底である。だから、|A>は、次のように表現できる。

$$|A> = \sum_i \alpha_i |\lambda_i>$$

観測値λ_iが観測される確率 $P(\lambda_i) = \alpha_i^* \alpha_i$である。

観測値の期待値

$$|A> = \sum_i \alpha_i |\lambda_i>$$

この式に、左からL を作用させると、

$$\boldsymbol{L}|A> = \sum_i \alpha_i \boldsymbol{L}|\lambda_i>$$

λ_i は、L の固有値なので、$\boldsymbol{L}|\lambda_i> = \lambda_i|\lambda_i>$
これを使うと、先の式は、次のようになる。

$$\boldsymbol{L}|A> = \sum_i \alpha_i \lambda_i |\lambda_i>$$

観測値の期待値

$$\boldsymbol{L}|A> = \sum_i \alpha_i \lambda_i |\lambda_i>$$

今度は、この式に、左から <A| をかける。

$$|A> = \sum_i \alpha_i |\lambda_i>$$ だから、

$$< A| = \sum_i \alpha_i^* < \lambda_i|$$

$$< A|\boldsymbol{L}|A> = \left(\sum_i \alpha_i^* < \lambda_i| \right)\left(\sum_i \alpha_i \lambda_i |\lambda_i>\right)$$

$$= \sum_i \alpha_i^* \alpha_i \lambda_i = \sum_i P(\lambda_i)\lambda_i =< L >$$

観測値の期待値　密度行列版

$$< L > = \sum_i p_i < \psi_i | L | \psi_i >$$

$$= \sum_i p_i \; tr(|\psi_i >< \psi_i | L)$$

$$= tr(\sum_i p_i \; |\psi_i >< \psi_i | L)$$

$$= tr(\rho L)$$

観測値の期待値　密度行列版

Lでの$|\psi_i>$の観測値

$$< L > = \sum_i p_i < \psi_i|L|\psi_i >$$

$<\psi_i|L|\psi_i>$ = tr(L $|\psi_i><\psi_i|$)

後出

$$= \sum_i p_i \ tr(|\psi_i >< \psi_i|L)$$

$$= tr(\sum_i p_i \ |\psi_i >< \psi_i|L)$$

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i >< \psi_i|$$

$$= tr(\rho L)$$

観測値の期待値

ある状態 |A> をとる系の、Observable L の観測値の期待値は、L を Aでサンドイッチした次の式で求まる。

$$<L> = <A|L|A>$$

ρ で表される状態の、Observable L の観測値の期待値は、次の式で求まる。

$$< L > = tr(\rho L)$$

観測演算子の一般化 POVM

射影演算子 $P_i = |i><i|$

qubit で考えてみる。 $|Q> = a|0> + b|1>$ としよう。

状態|0>が観測される確率は、

$|a|^2 = a^*a =< Q|0><0|Q> = < Q|P_0|Q >$

ここでは、 $a = <0|Q>, a^* =< Q|0>$ を使っている。

状態|1>が観測される確率は、

$|b|^2 = b^*b =< Q|1><1|Q> = < Q|P_1|Q >$

一般に、|ψ>を観測して、状態 |i>が観測される確率 p(i)

$p(i) = <\psi|P_i|\psi>$

射影演算子 $P_i = |i >< i|$の性質

$$\boldsymbol{P_0 + P_1 \equiv 1}$$

$$\because\ |0 >< 0| + |1 >< 1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathrm{I}$$

一般に、$\sum_i P_i = 1$

$$\boldsymbol{P_i^2 = P_i}$$

$$\because\ P_i^2 = |i >< i||i >< i| = |i >< i| = P_i$$

$\boldsymbol{P_i^\dagger = P_i}$　　**$\boldsymbol{P_i}$ はエルミートである**

$$P_i^\dagger = (|i >< i|)^\dagger = (< i|)^\dagger (|i >)^\dagger = |i >< i| = P_i$$

射影演算子　P_m

射影演算子 P_mで$|\psi>$を観測して、状態 mを観測する確率p(m)は、次の式で与えられる。

$$p(m) = <\psi|P_m|\psi>$$

先に見た射影演算子P_iの性質から、$\boldsymbol{P_i = P_i^2 = P_i^\dagger P_i}$

$$p(m) = <\psi|P_m|\psi> = <\psi|P_m^2|\psi> = <\psi|P_m^\dagger P_m|\psi>$$

$$p(m) = <\psi|P_m^\dagger P_m|\psi>$$

観測演算子　M_m

演算子 M_mで$|\psi>$を観測して、状態 mを観測する確率p(m)は、次の式で与えられるとする。

$$\mathrm{p(m)} = <\psi|M_m^{\dagger}M_m|\psi>$$

この演算子M_mも観測演算子である。

ただし、次の完全性の条件を満たすものとする。

$$\sum_{1} M_i^{\dagger}M_i = I$$

この条件は、$\boldsymbol{P_0} + \boldsymbol{P_1} \equiv \mathbf{1}$ 、あるいは、射影演算子$\boldsymbol{P_i}$について

$\sum_i P_i = I$ という条件の一般化である。

POVM
(Positive Operator Valued Measurement)

より一般に、$E_m = M_m^{\dagger} M_m$で表されて、

$$\mathrm{p(m)} = <\psi|E_m|\psi>,$$
$$\sum_i E_i = I$$

である観測演算子E_mを、**POVM**と呼ぶ。

POVM (Positive Operator Valued Measurement)

観測の確率を密度行列で表現する

traceと内積

traceと内積の関係 1

pureな密度行列、$\rho = |\psi\rangle\langle\varphi|$ を考える

$|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |i\rangle$, $|\varphi\rangle = \sum_j \beta_i |j\rangle$ とすると、

$$tr(|\psi\rangle\langle\varphi|) = \sum_k \langle k| \sum_{i,j} \alpha_i |i\rangle \beta_j^* \langle j||k\rangle$$

$$= \sum_{i,j,k} \alpha_i \beta_j^* \langle k|i\rangle\langle j|k\rangle$$

$$= \sum_i \alpha_i \beta_i^* \quad = \langle\varphi|\psi\rangle$$

$$\boxed{tr(|\psi\rangle\langle\varphi|) = \langle\varphi|\psi\rangle}$$

traceと内積の関係 1

pureな密度行列、$\rho = |\psi\rangle\langle\varphi|$ を考える

$|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |i\rangle$, $|\varphi\rangle = \sum_j \beta_j |j\rangle$ とすると、

$$tr(|\psi\rangle\langle\varphi|) = \sum_k \langle k| \boxed{\sum_{i,j} \alpha_i |i\rangle \beta_j^* \langle j|} |k\rangle$$

$tr(\rho) = \sum_k \langle k|\rho|k\rangle$

$|\psi\rangle\langle\psi|$

$$= \sum_{i,j,k} \alpha_i \beta_j^* \boxed{\langle k|i\rangle} \boxed{\langle j|k\rangle}$$

$$= \sum_i \alpha_i \beta_i^* = \langle\varphi|\psi\rangle$$

$$tr(|\psi\rangle\langle\varphi|) = \langle\varphi|\psi\rangle$$

traceと内積の関係 2

$$tr(\mathrm{A}|\psi><\varphi|) = \sum_k < k|A|\psi >< \varphi|k >$$

$$= \sum_k < k|< \varphi|k > |A|\psi >$$

$$= \sum_k < \varphi|k >< k|A|\psi >$$

$$= <\varphi|\mathrm{A}|\psi>$$

$$tr(\mathrm{A}|\psi><\varphi|) = <\varphi|\mathrm{A}|\psi>$$

$$\boxed{tr(\mathrm{A}|\psi><\psi|) = <\psi|\mathrm{A}|\psi>}$$

traceと内積の関係 2

ベクトル　スカラー

$$tr(A|\psi><\varphi|) = \sum_k <k|\boxed{A|\psi>}\boxed{<\varphi|k>}$$

$$= \sum_k <k|\boxed{<\varphi|k>}|\boxed{A|\psi>}$$

$$= \boxed{\sum_k \boxed{<\varphi|k>}<k|}A|\psi>$$

$$\sum_k <\varphi|k><k| = <\varphi|$$

$$= <\varphi|A|\psi>$$

$$tr(A|\psi><\varphi|) = <\varphi|A|\psi>$$

$$tr(A|\psi><\psi|) = <\psi|A|\psi>$$

traceと内積の関係

$$tr(|\psi><\varphi|) = <\varphi|\psi>$$

$$tr(A|\psi><\psi|) = <\psi|A|\psi>$$

密度行列と観測確率

$|\psi_i>$を観測して状態mを観測する確率

密度行列 $\rho = \sum_i p_i |\psi_i >< \psi_i|$で表される系がある。

$|\psi_i >$を観測して状態mを観測する確率を $p(m|i)$とすれば、

ある観測演算子 $M_m^\dagger M_m$ をとって、

$$p(m|i) = < \psi_i | M_m^\dagger M_m | \psi_i >$$

と表すことができる。

先に見たように、$<\psi|A|\psi> = tr(A|\psi><\psi|)$だから、この式は、
次のように変形できる。

$$= tr(M_m^\dagger M_m | \psi_i >< \psi_i |)$$

全ての$|\psi_i>$に対して状態mを観測する確率

密度行列 $\rho = \sum_i p_i |\psi_i >< \psi_i|$で表される系について、

全ての$|\psi_i>$に対して状態mを観測する確率 $p(m)$ は、

$$
\begin{aligned}
p(m) &= \sum_i p(m|i) p_i \\
&= \sum_i p_i \, tr\left(M_m^\dagger M_m |\psi_i >< \psi_i|\right) \\
&= tr\left(M_m^\dagger M_m \rho\right)
\end{aligned}
$$

$$\boxed{p(m) = tr\left(M_m^\dagger M_m \rho\right)}$$

密度行列 ρを観測して状態mを観測する確率

$$p(m) = tr\left(M_m^\dagger M_m \rho\right)$$


観測の結果を観測演算子で表現する

観測後の状態を射影演算子で考える

qubitに観測演算子を適用する

$|\psi>=a|0>+b|1>$に、観測演算子として射影演算子P_0 , P_1
を適用した後の状態$|\psi^0>,|\psi^1>$をどう表現できるかを考えよう。
もちろん、$|\psi^0>=|0>,|\psi^1>=|1>$ である。

$$P_0|\psi>=|0><0|\psi>=|0><0|(a|0>+b|1>)$$
$$=|0>(a<0|0>+b<0|1>)=a|0>$$

同様に、

$$P_1|\psi>=|1><1|\psi>=|1><1|(a|0>+b|1>)$$
$$=|1>(a<0|1>+b<1|1>)=b|1>$$

$P_0|\psi>=a|0>$、$P_1|\psi>=b|1>$は、
$|\psi^0>=|0>,|\psi^1>=|1>$と一致していない。

|0>, |1>を観測する確率

$$|\psi^0> = |0> = \frac{a|0>}{a} = \frac{P_0|\psi>}{a}$$
$$|\psi^1> = |1> = \frac{b|1>}{b} = \frac{P_1|\psi>}{b}$$

a,bは、次の式から求まる。

$$<\psi|P_0|\psi> = (a^* < 0| + b^* < 1|)(a|0>) = a^* a = |a|^2$$
$$<\psi|P_1|\psi> = (a^* < 0| + b^* < 1|)(b|1>) = b^* b = |b|^2$$

$$a = \sqrt{<\psi|P_0|\psi>}$$
$$b = \sqrt{<\psi|P_1|\psi>}$$

観測後の状態を観測演算子で表す

$$|\psi^0> = |0> = \frac{a|0>}{a} = \frac{P_0|\psi>}{\sqrt{<\psi|P_0|\psi>}}$$

$$|\psi^1> = |1> = \frac{b|1>}{b} = \frac{P_1|\psi>}{\sqrt{<\psi|P_1|\psi>}}$$

観測後の状態は、次の式で表される。

$$|\psi^i> = |i> = \frac{P_i|\psi>}{\sqrt{<\psi|P_i|\psi>}}$$

一般の観測演算子については、

$$|\psi^i> = \frac{M_i|\psi>}{\sqrt{<\psi|M_i|\psi>}} = \frac{M_i|\psi>}{\sqrt{<\psi|M_i^\dagger M_i|\psi>}}$$

状態ｉの観測後の系の状態

$$|\psi^i> = \frac{M_i|\psi>}{\sqrt{<\psi|M_i|\psi>}} = \frac{M_i|\psi>}{\sqrt{<\psi|M_i^\dagger M_i|\psi>}}$$

観測の結果の状態を、
密度行列と観測演算子で表現する

観測演算子M_mを適用した後の系の状態

初期状態が $|\psi_i>$ だったとする。$|\psi_i>$ に観測演算子M_mを適用して、mを得た後の系の状態$|\psi_i^m>$は、次のようになる。

$$|\psi_i^m> = \frac{M_m|\psi_i>}{\sqrt{<\psi_i|M_m^\dagger M_m|\psi_i>}}$$

$$<\psi_i^m| = \frac{<\psi_i|M_m^\dagger}{\sqrt{<\psi_i|M_m^\dagger M_m|\psi_i>}}$$

観測でmが得られた後の、系の密度行列

密度行列 $\rho = \sum_i p_i|\psi_i >< \psi_i|$で表される系について、

観測演算子M_mを適用して結果mが観測されたとする。

結果 m を生み出す観測の後、それぞれが p(i|m)の確率を持つ状態$|\psi_i^m >$ のアンサンブルを持つことになる。

これに、対応する密度行列ρ_mは、次の形になる。

$$\rho_m = \sum_i p(i|m)\,|\psi_i^m >< \psi_i^m| = \sum_i \frac{p(m|i)p_i}{p(m)}|\psi_i^m >< \psi_i^m|$$

$$= \sum_i p_i\,|\psi_i^m >< \psi_i^m|$$

観測でmが得られた後の、系の密度行列

この式に、先の$|\psi_i^m >$, $< \psi_i^m|$を代入する。

$$\rho_m = \sum_i p_i |\psi_i^m >< \psi_i^m|$$

$$= \sum_i p_i \frac{M_m|\psi_i >< \psi_i|M_m^\dagger}{< \psi_i|M_m^\dagger M_m|\psi_i >}$$

$$= \sum_i p_i \frac{M_m|\psi_i >< \psi_i|M_m^\dagger}{tr(M_m^\dagger M_m|\psi_i >< \psi_i|)}$$

$$= \frac{M_m \rho M_m^\dagger}{tr(M_m^\dagger M_m \rho)}$$

観測でmが得られた後の、系の密度行列

$$\rho_m = \frac{M_m \rho M_m^\dagger}{tr(M_m^\dagger M_m \rho)}$$

密度行列の和として
密度行列を表現する

状態mが観測される確率 $p(m)$と観測後の密度行列 ρ_m

状態mが観測される確率 $p(m)$と観測後の密度行列 ρ_mは、次の式で与えられる。

$$p(m) = tr\left(M_m^\dagger M_m \rho\right)$$

$$\rho_m = \frac{M_m \rho M_m^\dagger}{tr(M_m^\dagger M_m \rho)}$$

密度行列の和としての密度行列

このとき、密度行列の重み付きの和として次の密度行列を考えることができる。

$$\rho = \sum_m p(m)\rho_m$$

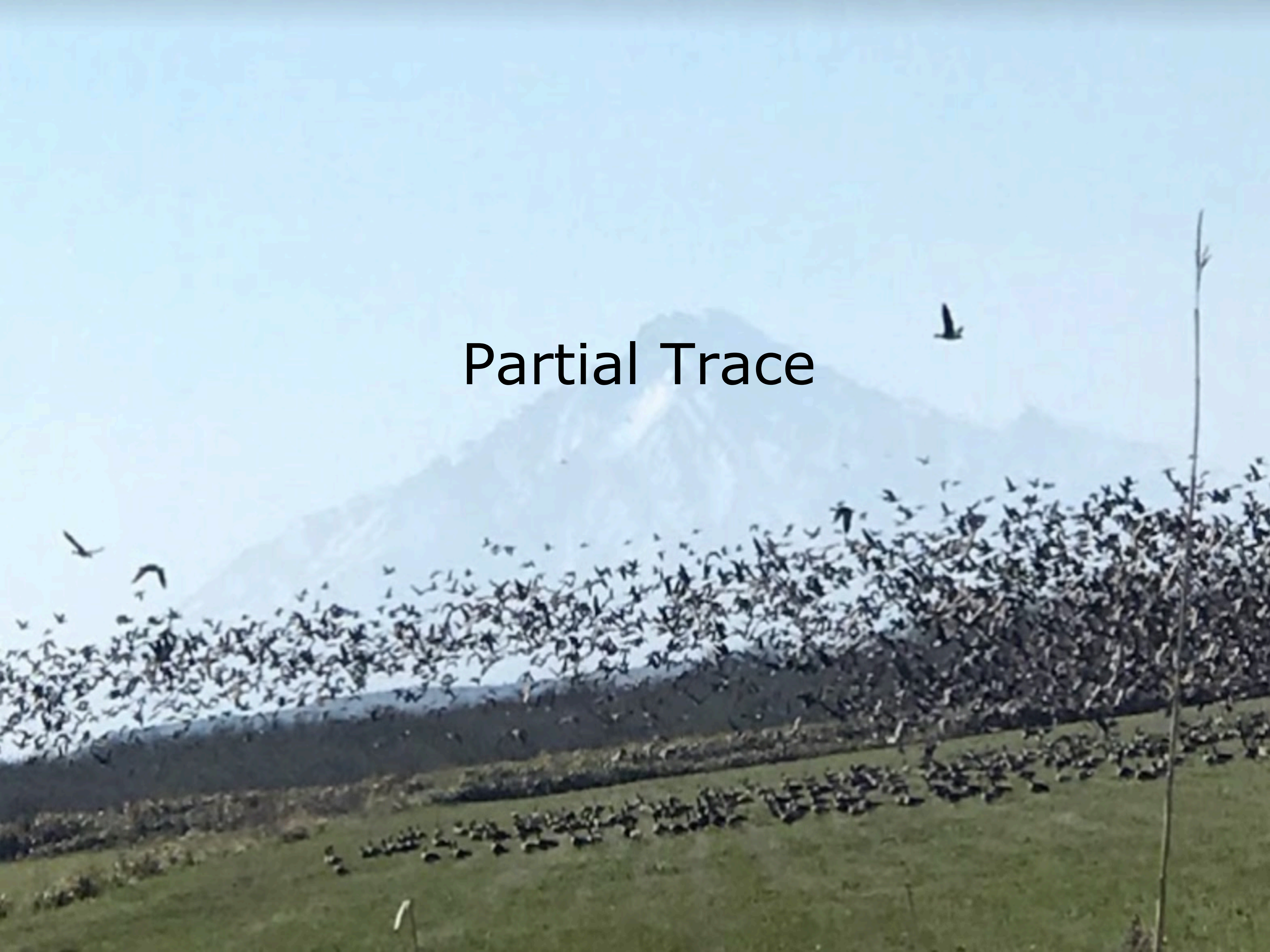
$$= \sum_m tr(M_m^\dagger M_m \rho) \frac{M_m \rho M_m^\dagger}{tr(M_m^\dagger M_m \rho)}$$

$$\boxed{= \sum_m M_m \rho M_m^\dagger}$$

第三部

Partial Trace

Partial Trace



還元された密度行列とpartial trace

還元された密度行列と partial trace

系A,Bの状態が、密度行列 ρ^{AB} で記述されているとする。
系Aについて還元された密度行列 ρ^{A} を 次の式で定義する。

$$\rho^{A} = tr_{B}(\,\rho^{AB})$$

tr_{B} は、系B上のpartial trace と呼ばれ、次の式で定義される。

$$tr_{B}(|a_1 >< a_2| \otimes |b_1 >< b_2|) = |a_1 >< a_2| tr(|b_1 >< b_2|)$$

ここに、$|a_1 >, |a_2 >$ は状態空間Aの任意の二つのベクトル

$|b_1 >, |b_2 >$ は状態空間Bの任意の二つのベクトル

還元された密度行列と partial trace

$tr_B(|a_1><a_2|\otimes|b_1><b_2|)=|a_1><a_2|tr(|b_1><b_2|)$

で、右辺の $tr(|b_1><b_2|)$ は、通常のtraceなので、
$tr(|b_1><b_2|)=<\mathrm{b}_2|\mathrm{b}_1>$ であるから。

$$tr_B(|a_1><a_2|\otimes|b_1><b_2|)=|a_1><a_2|<\mathrm{b}_2|\mathrm{b}_1>$$

である。

partial trace over B = Trace out B

$$tr_B(|a_1 >< a_2| \otimes |b_1 >< b_2|) = |a_1 >< a_2| < \mathrm{b}_2|\mathrm{b}_1 >$$

$|b_1 > = |b_2 >$ なら、 $< \mathrm{b}_2|\mathrm{b}_1 > = 1$。この時、

$$tr_B(|a_1 >< a_2| \otimes |b_1 >< b_1|) = |a_1 >< a_2|$$

こうした B上の partial trace をとる操作を、

「Bをtrace out する」という。

エンタングルメントとpartial trace

分離可能な状態のpartial trace

状態 ρ^{AB} が、二つの状態 ρとσのテンソル積で次のように表されたとする。

$$\rho^{AB} = \rho \otimes \sigma$$

このとき、ρ^{AB}のB上のpartial trace を取って、Aについて還元された密度行列 ρ^{A}を求めてみる。

$$\rho^{A} = tr_B(\rho^{AB}) = tr_B(\rho \otimes \sigma) = \rho tr(\sigma) = \rho$$

エンタングルしたEPRペアのpartial trace

エンタングルしたEPRペア $|\Psi^+ > = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00 > + |11 >)$の密度行列$\rho$は $\rho = |\Psi^+ >< \Psi^+|$である。

$$\rho = |\Psi^+ >< \Psi^+| = \frac{1}{2}(|00 > + |11 >)(< 00| + < 11|)$$
$$= \frac{1}{2}(|00 >< 00| + |00 >< 11| + |11 >< 00| + |11 >< 11|)$$

計算の準備

$|i_A j_B>$ は $|i_A> \otimes |j_B>$ の省略形である。

$$|i_A j_B >< k_A l_B| = (|i_A > \otimes |j_B >)(< k_A| \otimes < l_B|)$$
$$= (|i_A >< k_A|) \otimes (|j_B >< l_B|)$$

$$tr_B(|i_A j_B >< k_A l_B|) = tr_B((|i_A >< k_A|) \otimes (|j_B >< l_B|))$$
$$= |i_A >< k_A| tr(|j_B >< l_B|))$$
$$= |i_A >< k_A| < l_B|j_B >$$

エンタングルしたEPRペアのpartial trace

ρの2番目の$qubit$上の$partial\ trace$をとって、1番目の$qubit$について還元された密度行列ρ^1を求めてみよう。

$$\rho^1 = tr_2(\rho)$$

$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} tr_2(|00><00|) + tr_2(|00><11|) \\ +tr_2(|11><00|) + tr_2(|11><11|) \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} |0><0| < 0|0>) + |0><1| < 1|0> \\ + (|1><0| < 0|1> + |1><1| < 1|1> \end{pmatrix}$$

エンタングルしたEPRペアのpartial trace

ρの2番目の$qubit$上の$partial\ trace$をとって、1番目の$qubit$について還元された密度行列ρ^1を求めてみよう。

$$\rho^1 = tr_2(\rho)$$

$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} tr_2(|00><00|) + tr_2(|00><11|) \\ +tr_2(|11><00|) + tr_2(|11><11|) \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} |0><0|<0|0> +|0><1|<1|0> \\ + (|1><0|<0|1> + |1><1|<1|1> \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}|0><0| + \frac{1}{2}|1><1|$$

エンタングルしたEPRペアのpartial trace

エンタングルしたEPRペア $|\Psi^{+} > = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00 > +|11 >)$の密度行列 $\rho = |\Psi^{+} >< \Psi^{+}|$は、pureである。

しかし、そのpartial trace

$\rho^{1} = tr_{2}(\rho) = \frac{1}{2}|0 >< 0| + \frac{1}{2}|1 >< 1|$は、mixedである。

$$tr\left((\rho^{1})^{2}\right) = \left(\frac{1}{2}\right)^{2} = \frac{1}{4} < 1$$

第四部

密度行列で量子論の原理を定式化する

密度行列で量子論の原理を定式化する

状態ベクトル使って量子論の原理を記述すると、

- 観測がなされない場合の、量子の状態のユニタリ変換に従う「決定論」的で「可逆」な変化
- 観測がなされた場合の、重ね合わせが消失する「確率論」的で「不可逆」な変化

二つの変化の間には、深い断絶が残る。

この第四部では、世の中の量子論の本ではほとんど紹介されていない、密度行列の理論の拡張として、CP-mapの理論を紹介したいと思う。

そこでは、先に見たような量子の状態変化の二つのタイプの「断絶」は、解消される可能性がある。


密度行列で量子論の原理を定式化する

状態ベクトルを使った
量子論の原理の定式化

重ね合わせの原理

量子の状態$|\psi >$は、複素ベクトルの重ね合わせとして表現される。

n次元複素ベクトル空間の基底を |0>,|1>,|2>,...,|n-1>とすると、

$$|\psi > = \sum_i c_i |i >$$

と表現される。

ただし、

$$\sum_i |c_i|^2 = 1$$

である。

ユニタリ変換の原理

量子の状態$|\psi >$が、状態$|\psi' >$に変わる時、

$$|\psi' > = U|\psi >$$

という演算子Uが存在して、Uは、次のユニタリ性の条件を満たす。

$$U^{\dagger}U = UU^{\dagger} = I$$

ユニタリ演算子Uは内積を保存する。

ユニタリ演算子Uが、$|v>, |w>$に作用して、$U|v>$, $U|w>$が得られたとする。$U|v>$と$U|w>$の内積を考える。
$(U|v>, U|w>) = <v|U^{\dagger}U|w> = <v|w>$

観測の原理

量子の状態$|\psi>$が次のような状態ベクトルの重ね合わせで与えられているとしよう。

$$|\psi> = \sum_i c_i|i>$$

状態$|\psi>$を観測した時,重ねあわせの状態は消失し、観測後の状態は、いずれか一つの基底$|i>$に変化し、状態$|i>$が観測される。

状態$|i>$が観測される確率 p(i)は、次の式で与えられる。

$$p(i) = |c_i|^2$$

密度行列を使った
量子論の原理の定式化

密度行列での状態の表現

ある系で、状態$|\psi_i>$である確率がp_iで与えられる時、確率p_iと状態$|\psi_i>$のペア$\{p_i, |\psi_i>\}$の集まりを「アンサンブル」という。

密度行列ρは、このアンサンブルに対して、次のように定義される。

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i >< \psi_i|$$

ユニタリ変換の原理

密度行列ρが、ユニタリ演算子Uの作用を受けて、密度行列ρ'に変換されたとする。

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i >< \psi_i| \xrightarrow{\mathrm{U}} \sum_i p_i U |\psi_i >< \psi_i| U^\dagger = U\rho U^\dagger$$

$$\rho' = U\rho U^\dagger$$

ユニタリ変換は、密度行列のTraceを保存する

$tr(|\psi><\varphi|) = <\varphi|\psi>$で、ユニタリ変換は内積を保存するから。

観測の原理

密度行列 ρについて、$\sum_i M_m M_m^\dagger = I$ を満たすある観測演算子M_mを用いて、状態mを観測する確率 $p(m)$は、

$$p(m) = tr\left(M_m^\dagger M_m \rho\right)$$

観測でmが得られた後の、系の密度行列ρ_mは、

$$\rho_m = \frac{M_m \rho M_m^\dagger}{tr(M_m^\dagger M_m \rho)}$$

Complete Positive
という抽象化

Complete Positive map

演算子 $M_1, M_2, \ldots, M_k$が、次の完全性の条件を満たす時、これらを Complete Positive map (CP-map)という。

$$\sum_i M_i^\dagger M_i = I$$

先に見た、一般化された観測演算子 POVMは、CP-mapである。

CP-mapからユニタリ演算子を構成する

CP-map $M_1, M_2, \ldots, M_k$から、次のように演算子Uを定義する。

$$U|\psi> \otimes |0> = \sum_i M_i|\psi> \otimes |i>$$

この時、Uはユニタリであることが次のようにしてわかる。

Uが内積を保存することを示す。

Uは内積を保存する

$$\left(<\phi|\otimes<0|U^\dagger\right)(U|\psi>\otimes|0>)$$

$$=\sum_{ij}(<\phi\left|M_i^\dagger\otimes<i\right|)(M_j|\psi>\otimes|j>)$$

$$=\sum_{ij}<\phi\left|M_i^\dagger\otimes<i\right|M_j|\psi>\otimes|j>$$

$$=\sum_{ij}<\phi|M_i^\dagger M_j|\psi><i|j>$$

$$=\sum_i<\phi|M_i^\dagger M_i|\psi>=<\phi\left|\sum_i M_i^\dagger M_i\right|\psi>$$

$$=<\phi|I|\psi>$$

$$=<\phi|\psi>$$

Uは内積を保存する

$U|\phi>$と$U|\psi>$の内積 $\left(<\phi|\otimes<0|U^{\dagger}\right)(U|\psi>\otimes|0>)$

UのCP-mapを使った定義

$U|\psi>\otimes|0>$

$=\sum_i M_i|\psi>\otimes|i>$

$$=\sum_{ij}(<\phi\left|M_i^{\dagger}\otimes<i\right|)(M_j|\psi>\otimes|j>)$$

$$=\sum_{ij}<\phi\left|M_i^{\dagger}\otimes<i\right|M_j|\psi>\otimes|j>$$

$$=\sum_{ij}<\phi|M_i^{\dagger}M_j|\psi><i|j>$$

$$=\sum_i<\phi|M_i^{\dagger}M_i|\psi>=<\phi\left|\sum_i M_i^{\dagger}M_i\right|\psi>$$

完全性の条件から

$\sum_i M_i^{\dagger}M_i=I$

$$=<\phi|I|\psi>$$

$$=<\phi|\psi>$$

ユニタリ変換と観測による密度行列の変化

ユニタリ変換Uの作用

$$\rho \longrightarrow U\rho U^\dagger$$

$$U^\dagger U = I$$

観測演算子M_mの作用

$$\rho \longrightarrow \frac{M_m \rho M_m^\dagger}{tr(M_m^\dagger M_m \rho)}$$

$$\sum_i M_i^\dagger M_i = I$$

ユニタリ変換と観測による密度行列の変化

ユニタリ変換Uの作用

$$\rho \longrightarrow U\rho U^\dagger$$

$$U^\dagger U = I$$

観測演算子M_mの作用

$$\rho \longrightarrow \frac{M_m \rho M_m^\dagger}{tr(M_m^\dagger M_m \rho)}$$

$$\sum_i M_i^\dagger M_i = I$$

ユニタリ変換と観測による密度行列の変化

ユニタリ変換Uの作用

$$\rho \longrightarrow U\rho U^{\dagger}$$

$$U^{\dagger}U = I$$

観測演算子M_mの作用

$$\rho \longrightarrow \frac{M_m \rho M_m^{\dagger}}{tr(M_m^{\dagger} M_m \rho)}$$

$$\sum_i M_i^{\dagger} M_i = I$$