2020年6月10日

量子情報数理特論
（第5回）スペクトル分解，量子系の状態と測定，純粋状態と混合状態

電気通信大学 大学院情報理工学研究科

小川朋宏

4　スペクトル分解，量子系の状態と測定，純粋状態と混合状態

(課題1) スペクトル分解
- (1) エルミート作用素のスペクトル分解を言葉で説明せよ
- (2) Hilbert-Schmidt 内積の定義を述べよ

(課題2) 量子系の状態と測定
- (1) 密度作用素の定義を述べよ
- (2) POVM の定義を述べよ

(課題3) 純粋状態と混合状態
- (1) 混合状態の定義を述べよ
- (2) 純粋状態の定義を述べよ
- (3) 純粋状態であることの必要十分条件を３つ述べよ

エルミート作用素 A について固有値分解を考える．

$$A = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \left| e_i \middle\rangle\middle\langle e_i \right|$$

ここで，$\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ は固有値で，
$\left| e_1 \right\rangle, \left| e_2 \right\rangle, \ldots, \left| e_n \right\rangle$ は固有ベクトルからなる正規直交基底である．相異なる固有値を $a_1, a_2, \ldots, a_m$ として添字を変更する．

$$\begin{aligned}
\lambda_{1,1} = \lambda_{1,2} = \cdots = \lambda_{1,j_1} &=: a_1 \\
\lambda_{2,1} = \lambda_{2,2} = \cdots = \lambda_{2,j_2} &=: a_2 \\
&\vdots \\
\lambda_{m,1} = \lambda_{m,2} = \cdots = \lambda_{m,j_m} &=: a_m
\end{aligned}$$

ただし，$j_1, j_2, \ldots, j_m$ は $a_1, a_2, \ldots, a_m$ の重複度である．

固有値分解を書き直すと，スペクトル分解が得られる．

$$\begin{aligned}
A &= \sum_{k=1}^{m} \sum_{i=1}^{j_k} \underbrace{\lambda_{k,i}}_{a_k} \left| e_{k,i} \middle\rangle\middle\langle e_{k,i} \right| \\
&= \sum_{k=1}^{m} a_k \underbrace{\sum_{i=1}^{j_k} \left| e_{k,i} \middle\rangle\middle\langle e_{k,i} \right|}_{=:E_k} \\
&= \sum_{k=1}^{m} a_k E_k
\end{aligned}$$

ここで，E_k は次式で定義される射影子（前回講義参照）であり，

$$E_k := \sum_{i=1}^{j_k} \left| e_{k,i} \middle\rangle\middle\langle e_{k,i} \right|$$

スペクトル射影(spectral projection)とよばれる．
次に見るとおり，E_k は固有値 a_k に対する固有空間への射影子である

ベクトル空間 V 上の作用素 A，固有値 λ $(\lambda \in \mathbb{C})$ について，固有ベクトルの集合を固有空間という．

$$V_\lambda := \{\, x \in V \mid Ax = \lambda x \,\}$$

固有空間は部分ベクトル空間である．実際，

$$x, y \in V_\lambda \implies x + y \in V_\lambda,$$
$$c \in \mathbb{C}, x \in V_\lambda \implies cx \in V_\lambda$$

Lemma 1. Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ におけるエルミート作用素 A について，固有値分解およびスペクトル分解を

$$A = \sum_{k=1}^{m} \sum_{i=1}^{j_k} a_k \left|e_{k,i}\right\rangle\!\left\langle e_{k,i}\right| = \sum_{k=1}^{m} a_k E_k$$

とすると，固有空間 V_{a_k} $(k = 1, 2, \ldots, m)$ はスペクトル射影 E_k の像 (image) に等しい

$$\mathcal{K}_k := \operatorname{Im} E_k = \mathrm{span}\{\left|e_{k,1}\right\rangle, \left|e_{k,2}\right\rangle, \ldots, \left|e_{k,j_k}\right\rangle\} \quad (k = 1, 2, \ldots, m)$$

（証明）$\mathcal{K}_k \subseteq V_{a_k}$ は明らか．$\{\left|e_{k,i}\right\rangle\}$ が固有ベクトルからなる正規直交基底であることから，

$$\mathcal{H} = \mathcal{K}_1 \oplus \mathcal{K}_2 \oplus \cdots \oplus \mathcal{K}_m \tag{1}$$

は直交直和分解を与える．固有値 a_k の固有ベクトルは，他の固有値 a_l $(l \neq k)$ の固有ベクトルと直交することから，

$$V_{a_k} \subseteq \left(\bigoplus_{l \neq k} \mathcal{K}_l \right)^{\perp} = \mathcal{K}_k$$

となる．よって，$\mathcal{K}_k = V_{a_k}$ でなければいけない．

Lemma 2 (スペクトル射影の性質)**.**

$$E_k E_l = \delta_{k,l} E_k, \quad \sum_{k=1}^{m} E_k = I$$

（証明）(1) 式を射影子の言葉で翻訳した式である (固有空間 $\mathcal{K}_k$ はそれぞれ直交し，すべてを直和すると全体 $\mathcal{H}$ になる)．

Lemma 3 (トレースの性質). (i) ∼ (iv) は再掲（第3回資料）

(i) （線形性）$\mathrm{Tr}(A+B)=\mathrm{Tr}\,A+\mathrm{Tr}\,B$, $\mathrm{Tr}(cA)=c\,\mathrm{Tr}\,A$ $(c\in\mathbb{C})$

(ii) （巡回性）$\mathrm{Tr}\,AB=\mathrm{Tr}\,BA$ (cyclic property)

(iii) $\mathrm{Tr}\,A^*=\overline{\mathrm{Tr}\,A}$

(iv) A がエルミート作用素のとき $\mathrm{Tr}\,A\in\mathbb{R}$

(v) $A\geq 0$ のとき $\mathrm{Tr}\,A\geq 0$（等号成立 $\Leftrightarrow A=0$）

(vi) $A\geq B$ のとき $\mathrm{Tr}\,A\geq\mathrm{Tr}\,B$（等号成立 $\Leftrightarrow A=B$）

（証明）(v) を示す．「$A\geq 0\Leftrightarrow A$ はエルミートかつ固有値がすべて非負」であるから，固有値分解

$$A=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\,|e_i\rangle\langle e_i|$$

を考えると，

$$\mathrm{Tr}\,A=\sum_{i=1}^{n}\langle e_i|\,A\,|e_i\rangle=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\geq 0 \quad \text{（等号成立 }\Leftrightarrow \lambda_i=0\ (i=1,2,\ldots,n)\Leftrightarrow A=0\text{）}$$

(vi) は移項して考えれば，(v) より明らか．

$$A\geq B\iff A-B\geq 0\implies \mathrm{Tr}(A-B)\geq 0\iff \mathrm{Tr}\,A\geq\mathrm{Tr}\,B \quad \text{（等号成立 }\Leftrightarrow A-B=0\text{）}$$

Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ 上の線形作用素の集合

$$\mathcal{L}(\mathcal{H}) := \{\, A : \mathcal{H} \to \mathcal{H} \mid A \text{ は線形} \,\}$$

は以下の演算によりベクトル空間になる．

- 加法：$(A+B)\,|x\rangle := A\,|x\rangle + B\,|x\rangle$
- スカラー倍：$(cA)\,|x\rangle := cA\,|x\rangle$
- ゼロベクトル：ゼロ作用素

ただし，$c \in \mathbb{C}$, $A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$.

Definition 1. 次式はベクトル空間 $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ における内積で Hilbert-Schmidt 内積とよばれる．

$$\langle\!\langle A, B \rangle\!\rangle := \operatorname{Tr} A^* B \quad (A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H}))$$

（内積になること）(i) 右引数での線形性は明らか．(ii) 複素共役をとると

$$\overline{\langle\!\langle A, B \rangle\!\rangle} = \overline{\operatorname{Tr} A^* B} = \operatorname{Tr}(A^*B)^* = \operatorname{Tr} B^* A = \langle\!\langle B, A \rangle\!\rangle$$

(iii) 正値性について，$\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, \ldots, |e_n\rangle\}$ を正規直交基底として，

$$\langle\!\langle A, A \rangle\!\rangle = \operatorname{Tr} A^* A = \sum_{i=1}^{n} \langle e_i|\, A^* A \,|e_i\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \langle Ae_i \,|\, Ae_i \rangle \geq 0$$

により成立し，等号成立条件は以下で確認できる．

$$\langle\!\langle A, A \rangle\!\rangle = 0 \;\Leftrightarrow\; \langle Ae_i \,|\, Ae_i \rangle = 0 \; (i = 1, 2, \ldots, n)$$
$$\Leftrightarrow\; A\,|e_i\rangle = 0 \; (i = 1, 2, \ldots, n) \;\Leftrightarrow\; A = 0$$

Hilbert-Schmidt 内積は表現行列 $A_{i,j}$, $B_{i,j}$ についての「いつもの内積」である．実際，$(A^*)_{i,j} = \overline{A_{j,i}}$ より，

$$(A^*B)_{i,j} = \sum_{k=1}^{n} (A^*)_{i,k} B_{k,j} = \sum_{k=1}^{n} \overline{A_{k,i}} B_{k,j}$$

であることから，

$$\langle\!\langle A, B \rangle\!\rangle = \operatorname{Tr} A^* B = \sum_{l=1}^{n} (A^*B)_{l,l}$$

$$= \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} \overline{A_{k,l}} B_{k,l}$$

Lemma 4. $A \geq 0$, $B \geq 0$ のとき，

$$\operatorname{Tr} AB \geq 0 \quad \text{（等号成立} \iff AB = 0\text{）}$$

（証明）

$$\begin{aligned} \operatorname{Tr} AB &= \operatorname{Tr}\bigl[\sqrt{A}\sqrt{A}\sqrt{B}\sqrt{B}\bigr] = \operatorname{Tr}\bigl[\sqrt{B}\sqrt{A}\sqrt{A}\sqrt{B}\bigr] \\ &= \operatorname{Tr}\bigl[(\sqrt{A}\sqrt{B})^*\sqrt{A}\sqrt{B}\bigr] = \Bigl\langle\!\Bigl\langle \sqrt{A}\sqrt{B}, \sqrt{A}\sqrt{B} \Bigr\rangle\!\Bigr\rangle \geq 0 \end{aligned}$$

上式で等号が成立するならば，Hilbert-Schmidt 内積の性質より，

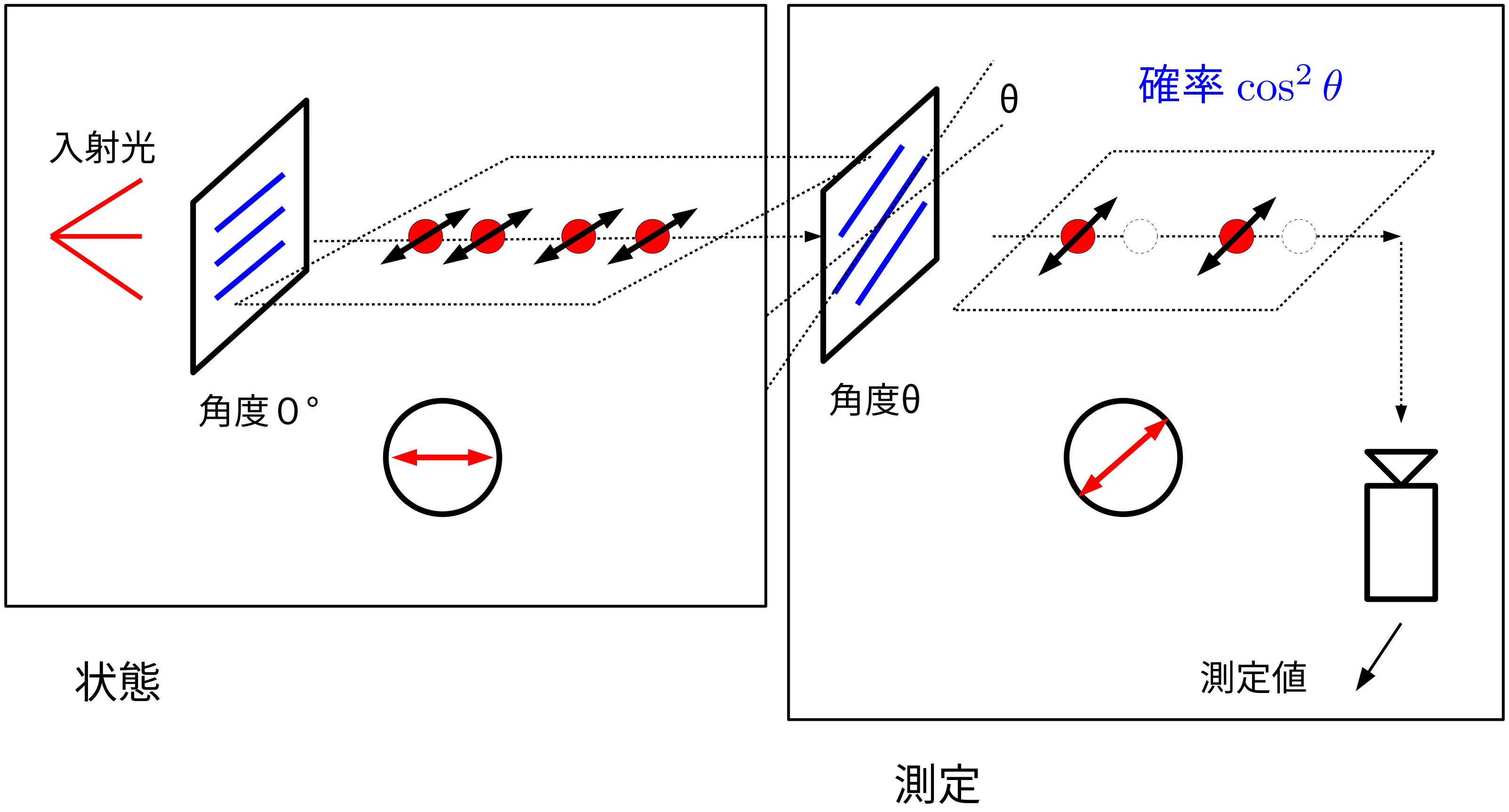
$$\sqrt{A}\sqrt{B} = 0$$

であり，両辺に左から $\sqrt{A}$，右から $\sqrt{B}$ をかけることで，$AB = 0$ が導かれる．
$AB = 0 \ \Rightarrow$ 等号成立 は明らかである．

4.6　量子系における状態と測定

量子系における状態と測定の概念

- 再現性：量子系において個々の実験結果の予想はできず，同一の状況で繰り返し実験を行った場合の結果の頻度を確実に予想できる．（→理論体系に確率論を内在している）
- 状態：実験のために物理系をセットアップした準備プロセスの総称
（準備者がコントロール出来ないパラメータがあるかも知れない）
- 測定：物理系に測定装置をつなげて測定値を得るプロセス



量子系の公理設定

(i) 系の状態(state)は半正定値でトレース1の密度作用素(density operator)で表される.

$$\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H}) := \{ \rho \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \mid \rho \geq 0, \mathrm{Tr}\,\rho = 1 \}$$

(ii) 測定値 $\mathcal{X} = \{1, 2, \ldots, a\}$ をもつ測定(measurement)は POVM (Positive Operator Valued Measure) とよばれる作用素の組により表される.

$$M = \{M(1), M(2), \ldots, M(a)\} \quad \underline{\left(M(x) \geq 0 \ (x \in \mathcal{X}),\ \sum_{x \in \mathcal{X}} M(x) = I \right)}$$

作用素値確率測度(Probability Operator Valued Measure)とよぶこともある.

(iii) 系の状態が $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ で，測定 $M = \{M(x)\}_{x \in \mathcal{X}}$ を行うと，
確率 $P_\rho^M(x) = \mathrm{Tr}\,\rho M(x)$ で測定値 $x \in \mathcal{X}$ が得られる.

（P_ρ^M が確率になること）正値性：$\rho \geq 0$, $M(x) \geq 0$ $(x \in \mathcal{X})$ と Lemma から $\mathrm{Tr}\,\rho M(x) \geq 0$
規格化条件：

$$\sum_{x \in \mathcal{X}} P_\rho^M(x) = \sum_{x \in \mathcal{X}} \mathrm{Tr}\,\rho M(x) = \mathrm{Tr}\left[\rho\left(\sum_{x \in \mathcal{X}} M(x)\right)\right] = \mathrm{Tr}\,\rho = 1$$

その他，測定後の状態変化（射影仮説），状態の時間発展がある（今はやらない）

Lemma 5. 密度作用素 $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ の固有値 $(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n)$ は確率ベクトルである．すなわち，密度作用素の半正定値性と規格化条件（トレースが1）より，

$$\lambda_i \geq 0 \quad (i = 1, \ldots, n), \quad \mathrm{Tr}\,\rho = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 1 \tag{2}$$

Definition 2.

- ρ が混合状態 (mixed state)

$$\overset{\text{def}}{\iff} \exists \sigma_1, \sigma_2\ (\sigma_1 \neq \sigma_2),\ 0 < \exists t < 1, \rho = t\sigma_1 + (1-t)\sigma_2$$ （ρ は他の異なる状態の凸結合で書ける）

- ρ が純粋状態 (pure state) $\overset{\text{def}}{\iff}$ ρ が混合状態ではない（ρ はどんな凸結合にも書けない）

Lemma 6. $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ について以下は同値である．

(i) ρ は純粋状態
(ii) 単位ベクトル $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ $(\|\psi\| = 1)$ が存在して $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ と書ける
(iii) ρ の固有値 $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ $(n = \dim \mathcal{H})$ について，ただひとつ1で他は0
(iv) $\mathrm{rank}\,\rho = 1$

（証明）最初に (ii) ⇔ (iii) ⇔ (iv) を示す：(ii) を仮定すると $|\psi\rangle$ が固有値1の固有ベクトルであり，(2) から他の固有値はゼロになる．すなわち (iii) が導かれる．(iii) を仮定すると，ρ の固有値分解

$$\rho = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i|$$

から (ii) の形になることは明らか．(iii) ⇔ (iv) を示す．半正定値作用素について一般的に

$$\operatorname{rank}\rho = \dim \operatorname{Im}\rho = \dim\left\{\rho\,|x\rangle \;\middle|\; |x\rangle \in \mathcal{H}\right\} = \text{（非ゼロ固有値の数）} \tag{3}$$

であることを確認しよう．$\rho\,|x\rangle$ の動く範囲を考える．固有値を大きい順に並べ直して $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_r > 0,\ \lambda_{r+1} = \cdots = \lambda_n = 0$ であるとする．このとき，

$$\rho\,|x\rangle = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i\,|e_i\rangle \langle e_i\,|\,x\rangle = \sum_{i=1}^{r} \underbrace{\lambda_i \langle e_i\,|\,x\rangle}_{\text{自由に動かせる}}\ |e_i\rangle$$

であり，$\langle e_i\,|\,x\rangle$ を自由に選ぶことで係数部分を自由に動かせるから

$$\operatorname{Im}\rho = \mathsf{span}\{|e_1\rangle\,, |e_2\rangle\,, \ldots, |e_r\rangle\}$$

これより (3) が示された．よって，(2) と合わせて (iii) ⇔ (iv) が示された．

(i) $\Rightarrow$ (iii)：対偶 ¬ (iii) $\Rightarrow$ ¬ (i) を示す．ρの非ゼロ固有値の数を$r \geq 2$として，$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_r > 0$ $\lambda_{r+1} = \cdots = \lambda_n = 0$であるとする．$\sum_{i=1}^{r} \lambda_i = 1$であることから$0 < \lambda_1 < 1$であり，固有値分解を考えると，

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \, |e_i\rangle\!\langle e_i| = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i \, |e_i\rangle\!\langle e_i| \\ &= \lambda_1 \underbrace{|e_1\rangle\!\langle e_1|}_{=:\sigma_1} + \underbrace{(1-\lambda_1) \sum_{i=2}^{r} \frac{\lambda_i}{(1-\lambda_1)} \, |e_i\rangle\!\langle e_i|}_{=:\sigma_2} \end{aligned} \tag{4}$$

上記σ_1, σ_2が密度作用素であることを示す．σ_1, $\sigma_2 \geq 0$, $\operatorname{Tr} \sigma_1 = 1$は明らかであろう．$\sigma_2$について$\sum_{i=2}^{r} \lambda_i = 1 - \lambda_1$であるから，

$$\operatorname{Tr} \sigma_2 = \sum_{i=2}^{r} \frac{\lambda_i}{(1-\lambda_1)} \underbrace{\operatorname{Tr} |e_i\rangle\!\langle e_i|}_{=1} = \frac{\sum_{i=2}^{r} \lambda_i}{(1-\lambda_1)} = 1$$

よって，(4) よりρが$\sigma_1 \neq \sigma_2$の凸結合で表される．すなわち，¬ (i) が示された．

(ii) $\Rightarrow$ (i)： (ii) を仮定すると，$\rho = |\psi\rangle\!\langle\psi|$ $(|\psi\rangle \in \mathcal{H}, \|\psi\| = 1)$と書ける．背理法により (i) を示すため，(i) が成立しないと仮定して矛盾を導く．¬ (i) と (ii) より，

$$\exists \sigma_1, \sigma_2 \ (\sigma_1 \neq \sigma_2), \, 0 < \exists t < 1, \rho = t\sigma_1 + (1-t)\sigma_2 \overset{\text{(ii)}}{=} |\psi\rangle\!\langle\psi| \tag{5}$$

$|\psi\rangle$から基底の延長定理により，次の正規直交基底をとる．

$$|\psi\rangle = |e_1\rangle \, , |e_2\rangle \, , \ldots , |e_n\rangle$$

この基底に関する表現行列を考える．

$$\underbrace{\langle e_k|\,\rho\,|e_k\rangle}_{\begin{cases}1 & (k=1)\\ 0 & (k\neq 1)\end{cases}} = t\underbrace{\langle e_k|\,\sigma_1\,|e_k\rangle}_{\geq 0} + \underbrace{(1-t)\,\langle e_k|\,\sigma_2\,|e_k\rangle}_{\geq 0}$$

$0 < t < 1$であるから，$k=1$以外では，

$$\langle e_k|\,\sigma_1\,|e_k\rangle = \langle e_k|\,\sigma_2\,|e_k\rangle = 0 \quad (k=2,3,\ldots,n)$$

が成立する．よって，σ_1について，

$$0 = \langle e_k|\,\sigma_1\,|e_k\rangle = \langle e_k|\,\sqrt{\sigma_1}\sqrt{\sigma_1}\,|e_k\rangle = \langle \sqrt{\sigma_1}e_k\,|\,\sqrt{\sigma_1}e_k\rangle \quad (k=2,3,\ldots,n)$$

により，$\sqrt{\sigma_1}\,|e_k\rangle = 0$が成り立つ．$\sigma_2$についても同様で，

$$\sqrt{\sigma_1}\,|e_k\rangle = 0, \quad \sqrt{\sigma_2}\,|e_k\rangle = 0 \quad (k=2,3,\ldots,n)$$

これより$(k,l)\neq(1,1)$について

$$\langle e_k|\,\sigma_1\,|e_l\rangle = \langle e_k|\,\sqrt{\sigma_1}\sqrt{\sigma_1}\,|e_l\rangle = \langle \sqrt{\sigma_1}e_k\,|\,\sqrt{\sigma_1}e_l\rangle = 0$$
$$\langle e_k|\,\sigma_2\,|e_l\rangle = \langle e_k|\,\sqrt{\sigma_2}\sqrt{\sigma_2}\,|e_l\rangle = \langle \sqrt{\sigma_2}e_k\,|\,\sqrt{\sigma_2}e_l\rangle = 0$$

であることが分かる．一方，$\mathrm{Tr}\,\sigma_1 = \mathrm{Tr}\,\sigma_2 = 1$より，

$$\langle e_1|\,\sigma_1\,|e_1\rangle = \langle e_1|\,\sigma_2\,|e_1\rangle = 1$$

これらから，表現行列が等しく$\sigma_1 = \sigma_2$となって(5)と矛盾．