2021年5月19日

# 量子情報数理特論

# （第6回）混合状態，二準位系，射影測定，オブザーバブル，同時測定可能性

電気通信大学 大学院情報理工学研究科

小川朋宏

# 5　混合状態，二準位系，射影測定，オブザーバブル，同時測定可能性

(課題1) 混合状態，二準位系

(1) 密度作用素を用いる意義について簡単に説明せよ

(2) Bloch 球表示について簡単に説明せよ

(3) Bloch 球表示において純粋状態であるための必要十分条件について述べよ

(課題2) 射影測定，オブザーバブル，同時測定可能性

(1) 射影測定の定義を述べよ

(2) エルミート作用素の関数の定義を述べよ

(3) オブザーバブルと射影測定の関係を述べよ

(4) 二つのオブザーバブル $A$, $B$ が両立するための条件について述べよ

## 5.1　混合状態と密度作用素の意義

- 混合状態は固有値分解により $\rho = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i| \quad (r \geq 2)$ と書けた．
  これは純粋状態 $\rho_i = |e_i\rangle\langle e_i|$ が確率 $\lambda_i$ で発生する状態とも見なせる（←メリットもデメリットある）．
- 純粋状態 $\rho_i = |e_i\rangle\langle e_i|$ であるとき，POVM $M = \{M_x\}_{x\in\mathcal{X}}$ で測定した場合の確率は，

$$P(x|i) := \mathrm{Tr}\,\rho_i M_x = \mathrm{Tr}(|e_i\rangle\langle e_i|)M_x = \langle e_i| M_x |e_i\rangle$$

- 発生する状態 $i$ と，測定値 $x$ の同時確率は，

$$P(i,x) := P(i)P(x|i) = \lambda_i \,\mathrm{Tr}(|e_i\rangle\langle e_i|)M_x$$

- どの状態が発生したか知りえない観測者にとって，測定値 $x$ の確率は，周辺分布をとることで，

$$P(x) = \sum_{i=1}^{r} P(i,x) = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i \,\mathrm{Tr}(|e_i\rangle\langle e_i|)M_x = \mathrm{Tr}\left(\sum_{i=1}^{r} \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i|\right)M_x = \mathrm{Tr}\,\rho M_x$$

  密度作用素は測定値 $x$ の確率 $P(x)$ を上記の形で「一意的に」与える作用素である．
- 純粋状態の確率混合による記述は一意的ではない！

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\underbrace{\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}}_{0\text{度偏光}} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\underbrace{\begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix}}_{90\text{度偏光}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\underbrace{\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}}_{45\text{度偏光}} + \frac{1}{2}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\underbrace{\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}}_{135\text{度偏光}}$$

どの状態が発生したか知りえない観測者にとっては仮想的な状態記述であり，冗長である．

## 5.2　二準位系のBloch球表示

- $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$における密度作用素を扱う．

$$\rho = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad (a, b, c, d \in \mathbb{C})$$

- エルミート条件より，

$$\rho = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \overline{a} & \overline{c} \\ \overline{b} & \overline{d} \end{pmatrix} = \rho^*$$

これより，$a, d \in \mathbb{R}, \quad b = \overline{c}$ であり（実数パラメータ4自由度），$\mathrm{Tr}\,\rho = 1$より，$a + d = 1$（実数パラメータ$4 - 1 = 3$自由度）．

- 次の実数パラメータを導入（Stokesパラメータ）．

$$a = \frac{1+z}{2}, \quad d = \frac{1-z}{2}, \quad b = \frac{x-iy}{2}, \quad c = \frac{x+iy}{2}$$

このとき，

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+z & x-iy \\ x+iy & 1-z \end{pmatrix}$$

- $\rho$の半正定値性を保証するためには$(x, y, z)$に条件が必要．

$$\rho \geq 0 \iff \rho\text{はエルミートかつ固有値}\lambda_1, \lambda_2 \geq 0$$

固有値を求めると（計算省略），

$$\lambda_1 = \frac{1 + \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{2}, \quad \lambda_2 = \frac{1 - \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}{2}$$

$\lambda_1 \geq \lambda_2$ であるから次の条件が得られる．

$$\rho \geq 0 \iff x^2 + y^2 + z^2 \leq 1$$

**Lemma 1** (Stokes パラメータ，Bloch 球表示)．

（Bloch 球） $$S := \left\{ \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3 \;\middle|\; x^2 + y^2 + z^2 \leq 1 \right\}$$ （半径 1 の球の表面＋内部）

とおくと，

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \in S \mapsto \rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+z & x-iy \\ x+iy & 1-z \end{pmatrix} \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$$

は全単射（1 対 1）かつ affine（凸結合を保存する）写像である．

（注意）$\rho$ が純粋状態 $\iff x^2 + y^2 + z^2 = 1 \iff (x, y, z)$ は Bloch 球表面にある

## 5.3 射影測定 (PVM, Projection Valued Measurement)

POVM（復習）: 測定値$\mathcal{X} = \{1, 2, \dots, a\}$をもつ測定は，

$$M_x \geq 0 \ (x \in \mathcal{X}), \quad \sum_{x \in \mathcal{X}} M_x = I$$

を満たす作用素の組により表される．

$$M = \{M_1, M_2, \dots, M_a\} = \{M_x\}_{x \in \mathcal{X}}$$

**Definition 1.** POVMの特別な場合として，すべての$x \in \mathcal{X}$について$M_x$が射影子であるとき，射影測定とよぶ．

**Lemma 2.** $\{M_x\}_{x \in \mathcal{X}}$がPVMのとき次式が成立．

$$M_x M_y = \delta_{x,y} M_x$$

すなわち，$\{M_x\}_{x \in \mathcal{X}}$は互いに直交する部分空間への射影子の集合である（直交直和）．

（証明）$x = y$のとき，$M_x M_x = M_x$は射影子の性質から自明である．$x \neq y$のとき，$M_x M_y = 0$を示す．

$$I - M_x = \underbrace{\sum_{x' \neq x} M_{x'}}_{M_y\text{が含まれる}} \geq M_y \geq 0$$

であるから，以下の系と補題により，

$$\underbrace{\mathrm{Tr}\, M_x(I - M_x)}_{=\mathrm{Tr}(M_x - M_x^2)=0} \underbrace{\geq}_{\text{系}} \mathrm{Tr}\, M_x M_y \underbrace{\geq}_{\text{補題}} 0$$

であり，不等式の等号が成立．よって，補題の等号成立条件より$M_x M_y = 0$.

**Lemma 3** (復習). $A \geq 0$, $B \geq 0$のとき，

$$\mathrm{Tr}\, AB \geq 0 \quad （等号成立 \Leftrightarrow AB = 0）$$

（系） $A \geq 0$, $B \geq C$のとき，

$$\mathrm{Tr}\, AB \geq \mathrm{Tr}\, AC \quad （等号成立 \Leftrightarrow A(B - C) = 0）$$

**Lemma 4.** エルミート作用素 $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ と，実数値 $(a_1, a_2, \ldots, a_m)$ を測定値にもつ PVM $E = \{E_k\}_{k=1}^m$ は1対1に対応する．

$$A = \sum_{k=1}^m a_k E_k \text{（スペクトル分解）} \overset{1\text{対}1}{\longleftrightarrow} \text{PVM } E = \{E_k\}_{k=1}^m \text{ と測定値 } (a_1, a_2, \ldots, a_m)$$

**Definition 2.** エルミート作用素 $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ をオブザーバブル（観測可能量, observable）という．

**Lemma 5.** 状態 $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ におけるオブザーバブル $A$ の期待値は次式で与えられる．

$$E_\rho[A] = \mathrm{Tr}\, \rho A$$

（証明）確率 $P_\rho^E(k) = \mathrm{Tr}\, \rho E_k$ で測定値 $a_k$ が得られるから，トレースの線形性により期待値は次式で計算される．

$$\sum_{k=1}^m a_k P_\rho^E(k) = \sum_{k=1}^m a_k \,\mathrm{Tr}\, \rho E_k = \mathrm{Tr}\, \rho \left( \sum_{k=1}^m a_k E_k \right) = \mathrm{Tr}\, \rho A$$

（注意）密度作用素 $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ は期待値線形汎関数のリースベクトルである．

$$A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \longmapsto E_\rho[A] = \mathrm{Tr}\, \rho A = \langle\!\langle \rho, A \rangle\!\rangle$$

（期待値計算ルールの非可換化）

**Definition 3.** $A$ をエルミート作用素，$f : x \in \mathbb{R} \longmapsto f(x) \in \mathbb{R}$ を実数値関数とするとき，スペクトル分解 $A = \displaystyle\sum_{k=1}^{m} a_k E_k$ を用いて，$f(A)$ を次式で定義する．

$$f(A) := \sum_{k=1}^{m} f(a_k) E_k$$

（ただし，固有値は $f$ の定義域に入っているとする）

（定義の妥当性, well-defined かどうか？）

- $f(x) = x^2$ のとき（普通に $A^2$ を計算する場合と，上記定義が一致して欲しい！）

$$A^2 = \left(\sum_{k=1}^{m} a_k E_k\right)\left(\sum_{\ell=1}^{m} a_\ell E_\ell\right) = \sum_{k=1}^{m}\sum_{\ell=1}^{m} a_k a_\ell \underbrace{E_k E_\ell}_{\delta_{k,l} E_k} = \sum_{k=1}^{m} a_k^2 E_k = \sum_{k=1}^{m} f(a_k) E_k = f(A)$$

- $f(x) = x^n$ のとき同様にして，$f(A) = A^n \ (n \in \mathbb{N}) \longrightarrow$ $f(x)$ が多項式の場合 well-defined
- $f(x)$ がテーラー展開 $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n$ を持つとき，

$$f(A) = \sum_{k=1}^{m} f(a_k) E_k = \sum_{k=1}^{m}\left(\sum_{n=0}^{\infty} c_n a_k^n\right) E_k = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \underbrace{\sum_{k=1}^{m} a_k^n E_k}_{A^n} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n A^n$$

テーラー展開の式で $x$ を $A$ に置き換えた作用素に等しい！（本当は無限和の順序交換の議論が必要）

## 5.6 スペクトル射影は作用素 $A$ の多項式で書ける

**Lemma 6.** エルミート作用素 $A$ のスペクトル分解を $A = \sum_{k=1}^{m} a_k E_k$ とすると，$k = 1, 2, \ldots, m$ について関数 $f_k(x)$ が存在して，

$$f_k(A) = E_k \quad \text{（スペクトル射影は } A \text{ の関数で書ける）}$$

（証明）

$$f_k(A) = \sum_{\ell=1}^{m} \underbrace{f_k(a_\ell)}_{\delta_{k,\ell}} E_\ell = E_k \quad (k = 1, 2, \ldots, m)$$

となる関数があればよい．実際，

$$f_k(x) := \frac{\prod_{\ell \neq k}(x - a_\ell)}{\prod_{\ell \neq k}(a_k - a_\ell)}$$

とおけば，$f_k(a_k) = 1$，$f_k(a_\ell) = 0 \ (\ell \neq k)$ である（Lagrange 補間）．

ポイント

- エルミート作用素 $A$ はスペクトル射影で書ける（スペクトル分解定理）
- 逆に，スペクトル射影はエルミート作用素 $A$ で書ける

**Theorem 1** (同時測定可能性)**.** $A$, $B$ をオブザーバブル（エルミート作用素）とし，

$$A = \sum_k a_k E_k, \quad B = \sum_\ell b_\ell F_\ell, \qquad (1)$$

をスペクトル分解とする．このとき，以下は同値である．

(i) $A$, $B$ は可換 $(AB = BA)$
(ii) すべての $k$, $\ell$ について $E_k$, $F_\ell$ は可換
(iii) あるPVM $\{G_{k,\ell}\}$ が存在して，

$$E_k = \sum_\ell G_{k,\ell}, \quad F_\ell = \sum_k G_{k,\ell}$$

（証明）(i) $\Rightarrow$ (ii): Lemma 6 より $E_k$, $F_\ell$ は

$$E_k = \sum_i \alpha_{k,i} A^i, \quad F_\ell = \sum_j \beta_{\ell,j} B^j$$

のように $A$, $B$ の多項式で書ける．このことから (i) を仮定すると (ii) が成立．

(ii) $\Rightarrow$ (iii): (ii) を仮定する．$G_{k,\ell} := E_k F_\ell$ がPVMになることを確認する．
１）射影子であること（代数的特徴付け）の確認：

$$G_{k,\ell}^* = (E_k F_\ell)^* = F_\ell^* E_k^* = F_\ell E_k = E_k F_\ell = G_{k,\ell}$$
$$G_{k,\ell}^2 = (E_k F_\ell)^2 = E_k F_\ell E_k F_\ell = E_k^2 F_\ell^2 = E_k F_\ell = G_{k,\ell}$$

２）和が恒等作用素になることの確認：

$$\sum_k \sum_\ell G_{k,\ell} = \sum_k \sum_\ell E_k F_\ell = \sum_k E_k \sum_\ell F_\ell = I$$

これらより，$G_{k,\ell} = E_k F_\ell$ はPVMであり，

$$\sum_\ell G_{k,\ell} = E_k \left( \sum_\ell F_\ell \right) = E_k$$
$$\sum_k G_{k,\ell} = \left( \sum_k E_k \right) F_\ell = F_\ell$$

となって (iii) が成り立つ．
(iii) $\Rightarrow$ (i): PVM $\{G_{k,\ell}\}$ は可換であり，(iii) を仮定すると，スペクトル分解 (1) より，$A$, $B$ は $\{G_{k,\ell}\}$ で書かれるから可換である．

準備：任意の状態について期待値が同じなら，同一のオブザーバブルである

**Lemma 7.** $A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ について以下は同値である．

(i) $A = B$
(ii) 任意の状態 $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ について $\operatorname{Tr}\rho A = \operatorname{Tr}\rho B$
(iii) 任意の純粋状態 $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ について $\operatorname{Tr}\rho A = \operatorname{Tr}\rho B$

（証明）(i) ⇒ (ii) ⇒ (iii) は自明．(iii) ⇒ (i) を示す．(iii) を仮定すると，任意の単位ベクトル $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ($\|\psi\| = 1$) について，$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ として，

$$0 = \operatorname{Tr}\rho A - \operatorname{Tr}\rho B = \operatorname{Tr}|\psi\rangle\langle\psi|(A - B) = \langle\psi|(A - B)|\psi\rangle$$

よって，任意の $|x\rangle \in \mathcal{H}$ について，規格化されたベクトルを $|x'\rangle = \frac{1}{\|x\|}|x\rangle$ とおけば，

$$\langle x|(A - B)|x\rangle = \|x\|^2 \langle x'|(A - B)|x'\rangle = 0$$

が導かれる．よって，以下の補題より $A - B = 0$ である．

**Lemma 8** (復習，第 4 回 3.3 節)．以下の条件は同値である．

(i) $A = 0$
(ii) $\forall x, y \in \mathcal{H},\ \langle x, Ay\rangle = 0$
(iii) $\forall x \in \mathcal{H},\ \langle x, Ax\rangle = 0$

## 同時測定可能性の意味

PVM $E=\{E_k\}$, $F=\{F_\ell\}$, $G=\{G_{k,\ell}\}$ と状態 $\rho\in\mathcal{S}(\mathcal{H})$ について,

$$P_\rho^E(k):=\mathrm{Tr}\,\rho E_k,\quad P_\rho^F(\ell):=\mathrm{Tr}\,\rho F_\ell,\quad P_\rho^G(k,\ell):=\mathrm{Tr}\,\rho G_{k,\ell}$$

とおく．Theorem 1 の同時測定可能性 (iii) を仮定すると,

$$P_\rho^E(k)=\sum_\ell P_\rho^G(k,\ell),\quad P_\rho^F(\ell)=\sum_k P_\rho^G(k,\ell)$$

が成り立つ．逆に，任意の状態 $\rho\in\mathcal{S}(\mathcal{H})$ について上式がなりたつならば，Lemma 7 より，同時測定可能性 (iii) が成り立つ．このことから,

- オブザーバブル $A$, $B$ が可換
  $\Longleftrightarrow$ 「任意の状態について $A$, $B$ の測定値の同時分布を与える PVM $G=\{G_{k,\ell}\}$」が存在する
  （オブザーバブル $A$ と $B$ の測定が両立する）
- オブザーバブル $A$, $B$ が非可換
  $\Longleftrightarrow$ 「任意の状態について $A$, $B$ の測定値の同時分布を与える PVM」は存在しない．
  （オブザーバブル $A$ と $B$ の測定は両立しない）