

Convex combinations of density matrices

密度行列の凸結合

2026/05/28

Kazumasa Umezawa

アジェンダ

本日の目標：『ランダムな量子状態をどう表現するか？』という疑問から始めて、最後に『**密度行列の中身は何か？**』まで見ていきます。

1. 密度行列の復習

→ 前回の内容を復習します。

2. 密度行列の確率的選択

→ ランダムな量子状態を密度行列の凸結合で表現できることを理解します。

3. 完全混合状態

→ 異なる準備方法でも同じ密度行列になり、観測では区別できないことを理解します。

4. 確率的状態

→ 対角密度行列では、対角成分が古典確率分布として解釈できることを理解します。

5. 密度行列とスペクトル定理

→ 密度行列はスペクトル分解により、「どの純粋状態が、どの割合で混ざっているか」

Quantum Tokyo として理解できることを学びます。



密度行列の復習

【再掲】 密度行列の基礎まとめ

密度行列の基礎まとめ

密度行列の性質

トレースが1: $\text{Tr}(\rho) = 1$
*状態の確率の総和が1である

半正定値であること
Positive semidefiniteness: $\rho \geq 0$

密度行列の要素と意味合い ⇒ 密度行列が量子情報の数学的構造全体を自然に導く

$$\rho = \begin{pmatrix} \alpha_{0,0} & \alpha_{0,1} & \cdots & \alpha_{0,n-1} \\ \alpha_{1,0} & \alpha_{1,1} & \cdots & \alpha_{1,n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_{n-1,0} & \alpha_{n-1,1} & \cdots & \alpha_{n-1,n-1} \end{pmatrix}$$

- 対角成分：標準基底で測定したときに各古典状態が出現する確率を示す (和は1)
- 非対角成分：行と列に対する2つの古典状態が、どの程度「量子的な重ね合わせ」に入っているか、またそれらの間の相対位相もあらわす

量子状態ベクトルと密度行列

- 純粋状態での量子状態ベクトル ψ について密度行列は次のように表される

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

密度行列の確率的選択

量子状態を確率的に選ぶ

量子状態を確率的に選ぶ操作が、それに対応する密度行列の凸結合 (convex combination) で表されます。

2つの密度行列 ρ と σ があり、それぞれ確率 p 、 $1-p$ で状態を準備するとき、得られる状態は次の密度行列で表されます。

$$p\rho + (1-p)\sigma$$

一般化

密度行列 $\rho_0, \dots, \rho_{m-1}$ に対応する状態があり、それぞれ確率 p_k で選ぶとき、得られる状態は以下のように表されます。

$$\sum_{k=0}^{m-1} p_k \rho_k$$

状態ベクトル $|\psi_k\rangle$ を確率 p_k で選ぶ場合、対応する密度行列は以下となります。

$$\sum_{k=0}^{m-1} p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|$$

【凸結合のイメージ】

凸結合は「**ランダムさ**」を表す数学的道具になります。

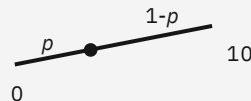
- 凸結合とは、確率を使った重み付き平均です。
- 結果は必ず「元の値の間」に入ります。
- 係数は非負で和が1となります。

$$\sum_k p_k x_k, \quad p_k \geq 0, \quad \sum_k p_k = 1$$

直観的には

「間をとる操作」です。
例えば0 と 10 の凸結合 \rightarrow 0~10の間の値になります。

$$p \cdot 0 + (1-p) \cdot 10$$



状態ベクトルで表現できないのでしょうか

量子ビット $|0\rangle$ を確率 $1/2$ 、 $|+\rangle$ を確率 $1/2$ で準備されるときを考えます。

状態ベクトルで表現すると・・・

$$\frac{1}{2}|0\rangle + \frac{1}{2}|+\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2+\sqrt{2}}{4} \\ \frac{\sqrt{2}}{4} \end{pmatrix}$$

ノルム（長さ）が1にならず、正しい量子状態ではないため、量子状態ベクトルをそのまま平均することはできません。

さらに同じ状態 $|\psi\rangle$ と $-|\psi\rangle$ を半々で平均すると、ゼロベクトルとなってしまいます。

$$\frac{1}{2}|\psi\rangle + \frac{1}{2}(-|\psi\rangle) = 0$$

密度行列で表現すると・・・

$$\frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|+\rangle\langle +| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

- 状態を確率重み付きで組み合わせられます。
- 状態ベクトルのように長さ1が崩れません。
- 複数の状態が混ざった状況を表現できます。

【ポイント】

Q：量子状態をランダムに選ぶとき、どう表現するとよいのでしょうか？

A：状態ベクトルではなく密度行列を利用します。ランダムな量子状態は、密度行列の凸結合で表されます。

Q：なぜ量子状態を確率的に選ぶ状況を考えるのでしょうか？

A：実際の量子系では、状態が完全に分かっているとは限らないためです。

例えば：

- ノイズの影響を受ける
- 状態準備が毎回少し異なる
- 系の一部しか観測できない

このような場合、状態は「どれか1つの状態」としてではなく、

のような確率的な混合として表現されます。このように複数の純粋状態を確率的に混合した状態を混合状態 (mixed state) と呼びます。

$$\rho = \sum_k p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$$

完全混合状態

完全混合状態を例に

違う方法で状態を準備して同じ密度行列になることもあります。

量子ビットの状態を、 $|0\rangle$ または $|1\rangle$ のどちらかを確率 $1/2$ でランダムに選ぶとします。

このときの密度行列は、

$$\frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}I$$

となり、これは「完全混合状態」と呼ばれる特別な状態です。

量子ビットの状態を、 $|0\rangle$ 、 $|1\rangle$ の代わりに $|+\rangle$ 、 $|-\rangle$ を確率 $1/2$ でランダムに選ぶとします。

このときの密度行列は、

$$\frac{1}{2}|+\rangle\langle +| + \frac{1}{2}|-\rangle\langle -| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}I$$

となり、結果は同じになります。

違う方法で状態を準備しても、同じ密度行列になることがあります。

密度行列が同じとは

2つの可能な状態セット $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ と $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ のいずれかからランダムに状態を選択した場合に、どのような情報が得られるかを考えてみます。

話を単純にするために、量子ビットにユニタリ演算 U を適用し、標準基底で測定すると仮定します。

例えば $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ セットから選択して出力が 0 になる確率は二つのケースがあります。

ケース①：最初に $|0\rangle$ を選ぶ

- 確率：1/2
- そのとき0が出る確率 $|\langle 0|U|0\rangle|^2$

ケース②：最初に $|1\rangle$ を選ぶ

- 確率：1/2
- そのとき0が出る確率 $|\langle 0|U|1\rangle|^2$

$$P(0) = \frac{1}{2}|\langle 0|U|0\rangle|^2 + \frac{1}{2}|\langle 0|U|1\rangle|^2$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}|\langle 0|U|0\rangle|^2 + \frac{1}{2}|\langle 0|U|1\rangle|^2 &= \frac{1}{2} \left(|\langle 0|U|0\rangle|^2 + |\langle 0|U|1\rangle|^2 \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(|\langle 0|U^\dagger|0\rangle|^2 + |\langle 1|U^\dagger|0\rangle|^2 \right) \\ &= \frac{1}{2} \|U^\dagger|0\rangle\|^2 \end{aligned}$$

同様に出力が1のとき、 $|+\rangle$ 、 $|-\rangle$ の場合でも結果は1/2 になり、観測結果は完全に一致します。

【ポイント】

観測結果の確率は密度行列だけで決まります。したがって、 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 、 $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ のように状態の準備方法が異なっても、同じ密度行列なら観測では区別できません。(補足 逆に、十分な種類の測定 (例：X・Y・Z方向の測定) に対する観測統計がすべて一致するから、密度行列も一致します。)

以下の定理を利用したいため、同じベクトルに揃えるために視点を変えています。

【定理】

正規直交基底 $\{|\psi_1\rangle, \dots, |\psi_n\rangle\}$ に対して、

$$|\langle \psi_1 | \phi \rangle|^2 + \dots + |\langle \psi_n | \phi \rangle|^2 = \|\phi\|^2$$

成分の二乗和 = ベクトルの長さの二乗を表しています。

ユニタリの性質から1になります。
(ユニタリはノルムを保存するため)

確率の状態

古典確率が密度行列の特殊ケース

対角成分だけを持つ密度行列は、古典確率分布として解釈できます。

系Xの各計算基底 $|a\rangle$ を古典値 a と対応付けると、密度行列

$$\rho = |a\rangle\langle a|$$

は「Xが確実に状態 a にある」ことを表します。

量子ビット

$$|0\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

一般に、対応する状態の位置に「1」がありそれ以外はすべて「0」の対角行列になります。

これらの密度行列の凸結合（重み付き平均）（確率付きで混ぜ合わせる）を取ることで、確率的な状態を表すことができます。計算基底 $|a\rangle$ を古典値 a と対応付けると、状態 a にいる確率が p_a のとき以下ようになります。

$$\rho = \sum_{a=0}^{n-1} p_a |a\rangle\langle a|$$

対角行列の密度行列は、その対角成分を読むだけで確率分布として解釈できます。

$$\rho = \begin{pmatrix} p_0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & p_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & p_{n-1} \end{pmatrix}$$

注意

対角密度行列は古典確率分布として解釈できます。ただし、その状態が実際に

$$|0\rangle, |1\rangle$$

をランダムに選んで準備したものとは限りません。異なる準備方法でも同じ密度行列になる場合があります。

【ポイント】

対角密度行列：

$$\rho = \begin{pmatrix} p_0 & 0 & \cdots \\ 0 & p_1 & \cdots \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix}$$

では、対角成分 p_i がそのまま確率になります。対角成分を読むだけで確率分布が分かります。

例：

$$\rho = \begin{pmatrix} 0.2 & 0 \\ 0 & 0.8 \end{pmatrix}$$

→ 0が20%、1が80%となります。

密度行列とスペクトル定理

密度行列のスペクトル分解

任意の密度行列をスペクトル分解することができます。

密度行列はエルミート (c正規行列) なので、スペクトル定理より、

$$\rho = \lambda_0 |\psi_0\rangle\langle\psi_0| + \cdots + \lambda_{n-1} |\psi_{n-1}\rangle\langle\psi_{n-1}|$$

となります。 λ_i は固有値になります。密度行列は半正定値なので固有値は0以上です。

さらにトレースの性質を使うと

$$\begin{aligned} 1 &= \text{Tr}(\rho) = \text{Tr}(\lambda_0 |\psi_0\rangle\langle\psi_0| + \cdots + \lambda_{n-1} |\psi_{n-1}\rangle\langle\psi_{n-1}|) \\ &= \lambda_0 \text{Tr}(|\psi_0\rangle\langle\psi_0|) + \cdots + \lambda_{n-1} \text{Tr}(|\psi_{n-1}\rangle\langle\psi_{n-1}|) = \lambda_0 + \cdots + \lambda_{n-1} \end{aligned}$$

固有値の和は1になっていることが分かります。

【スペクトル定理】

任意の正規行列 M は、直交規格化された基底 $|\phi_0\rangle, \dots, |\phi_{n-1}\rangle$ 固有値 $\lambda_0, \dots, \lambda_{n-1}$ を用いて

$$M = \lambda_0 |\phi_0\rangle\langle\phi_0| + \cdots + \lambda_{n-1} |\phi_{n-1}\rangle\langle\phi_{n-1}|$$

と書けます。

【トレースの性質】

$$\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$$

【補足】

密度行列のトレースは1なので、固有値の総和も1になります。また、密度行列は半正定値なので固有値は0以上です。したがって固有値は確率として解釈できます。

いろいろな分解の仕方の例

同じ密度行列でもいろいろな分解の仕方があります。

例①

この例はスペクトル分解ではありません。(直交していないため)

$$\rho = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|+\rangle\langle +|$$

$$\langle 0|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \neq 0$$

スペクトル分解で表現すると以下ようになります。

$$\rho = \cos^2(\pi/8)|\psi_{\pi/8}\rangle\langle\psi_{\pi/8}| + \sin^2(\pi/8)|\psi_{5\pi/8}\rangle\langle\psi_{5\pi/8}|$$

ただの凸結合とスペクトル分解は違うことが分かります。

スペクトル分解とは、「密度行列を直交する純粋状態の確率混合として表す方法」です。

直交する純粋状態は、適切な測定によって完全に識別可能です。そのため、スペクトル分解は状態の構造を自然に表しています。

【ポイント】

同じ ρ に対して、無限に分解方法があります。

その中でもスペクトル分解が一番シンプルで本質的な混ぜ方と言えます。(直交基底の利用、固有値がそのまま確率)

例②

$|\phi_0\rangle, \dots, |\phi_{99}\rangle$ は、任意に選択された単一の量子ビットの状態を表す量子状態ベクトルとし、これら 100 個の状態から一様にランダムに 1 つを選択して得られる状態を考えてみます。その際密度行列は以下のように記載できます。

$$\rho = \frac{1}{100} \sum_{k=0}^{99} |\phi_k\rangle\langle\phi_k|.$$

一方、量子ビットについて考えているので、密度行列 ρ は 2×2 です。したがって、スペクトル定理により、 $p \in [0, 1]$ の実数と、正規直交基底 $\{|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle\}$ を用いて、次のように書くこともできます。

$$\rho = p|\psi_0\rangle\langle\psi_0| + (1-p)|\psi_1\rangle\langle\psi_1|$$

ランダムな量子状態を表現する自然な方法が密度行列の凸結合となります。

【密度行列の凸結合】

- ①密度行列の確率的選択 ランダムな量子状態は 密度行列の凸結合で表現できます。
- ②完全混合状態 異なる準備方法でも同じ密度行列になり、観測では区別できません。
- ③確率的状態 対角密度行列では、対角成分が古典確率分布として解釈できます。
- ④密度行列とスペクトル定理 任意の密度行列はスペクトル分解により純粋状態の確率混合として理解できます。

END