Multiple systems and reduced states

複数システムと縮約状態

2026/6/24

Kazumasa Umezawa

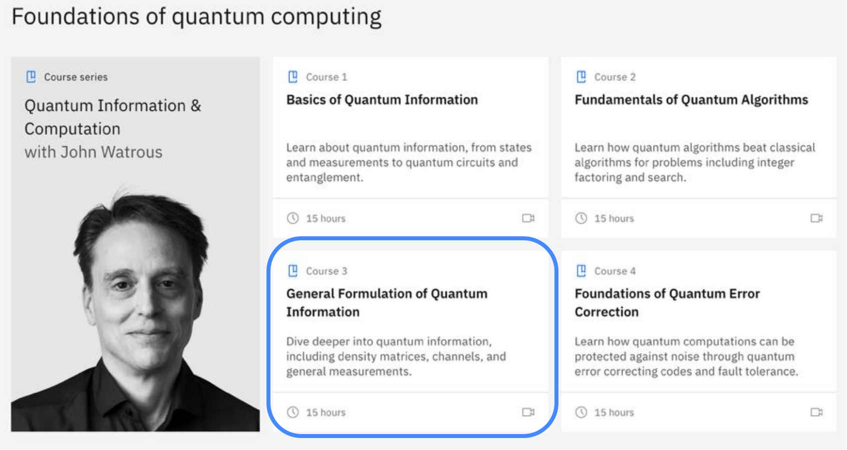
量子情報の一般的定式化
第4回 密度行列 - 複数システムと縮約状態

元の教材 IBM Quantum Learning:

https://quantum.cloud.ibm.com/learning/en/courses/general-formulation-of-quantum-information/density-matrices/multiple-systems

Quantum Tokyo の和訳:

https://quantum-tokyo.github.io/introduction/courses/general-formation-of-quantum-information/density-matrices/multiple-systems-ja.html



アジェンダ

本日の目標：複数系の密度行列を扱い、系全体の状態から部分系の状態（縮約状態）を取り出せるようにします。

アジェンダ

1. 復習
2. 複数系の密度行列
3. 積状態
4. 相関状態
5. 縮約状態
6. 部分トレース
7. 2量子ビットの例
8. まとめ

本日の到達点

- 複数量子系を密度行列で表現できます。
- 積状態・可分状態・エンタングル状態の違いを理解します。
- 部分トレースの意味を理解します。
- 縮約状態を求められるようになります。

復習

復習

第1回から第3回まで以下の内容を学んできました。

第1回「密度行列の基礎」

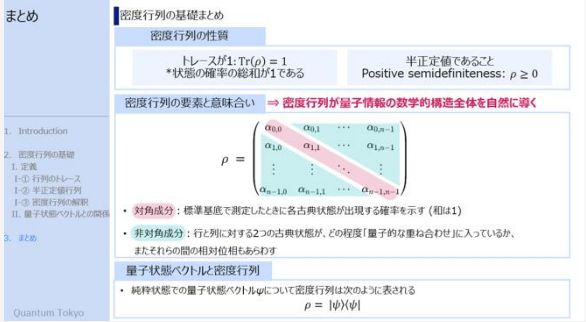
- ✓ 密度行列の性質
- ✓ 密度行列の要素と意味合い
- ✓ 量子状態ベクトルと密度行列

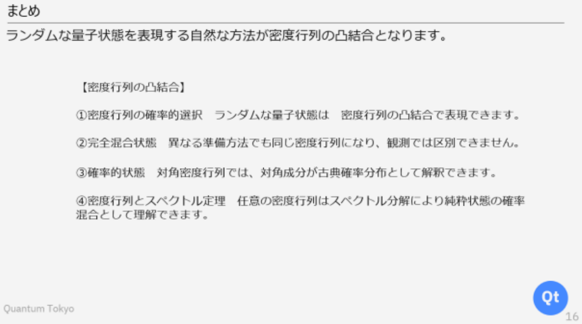
第2回「密度行列の凸結合」

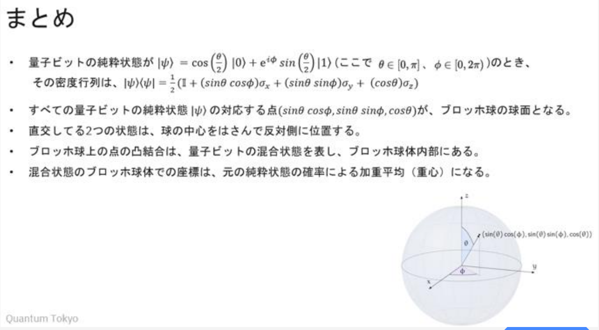
- ✓ 密度行列の確率的選択
- ✓ 完全混合状態
- ✓ 確率的状態
- ✓ 密度行列とスペクトル定理

第3回「ブロッホ球」

- ✓ 球面上の点としての量子ビット状態
- ✓ 6つの重要な例
- ✓ 点の凸結合







複数システム

複数システム

密度行列は、状態ベクトルと同じように複数の量子系を表現できます。

複数の系を1つの複合系として扱うという考え方は状態ベクトルの場合と同じであり、数学的には、複数系の密度行列の行番号・列番号は、各系の基底状態の組み合わせに対応しています。

【1量子ビット】

1量子ビットなら基底は|0>、|1>で、密度行列は以下のようになります。

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{00} & \rho_{01} \\ \rho_{10} & \rho_{11} \end{pmatrix}$$

行・列のラベルを書くと
1行目,1列目 → |0⟩
2行目,2列目 → |1⟩
に対応しています。

|0><0|

$$\begin{array}{c|cc} & |0\rangle & |1\rangle \\ \hline |0\rangle & \rho_{00} & \rho_{01} \\ |1\rangle & \rho_{10} & \rho_{11} \end{array}$$

|1><1|

【2量子ビット】

A,B の2量子ビットなら、
Aの状態集合は{0,1}、Bの状態集合は{0,1}
直積は{0,1}×{0,1} = {(0,0),(0,1),(1,0),(1,1)}となります。
量子力学ではこれを|00>,|01>,|10>,|11>と書きます。
密度行列は

|00><00|

$$\begin{array}{c|cccc} & 00 & 01 & 10 & 11 \\ \hline 00 & * & * & * & * \\ 01 & * & * & * & * \\ 10 & * & * & * & * \\ 11 & * & * & * & * \end{array}$$

|11><11|

行番号や列番号は00, 01, 10, 11に対応しています。

【ベル状態】

ベル状態の|Φ⁺>を例にみてみます。

$$|\phi^+\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$$

密度行列は以下のようになります。

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

行列にラベルを付けると以下のようになります。

$$\begin{array}{c|cccc} & 00 & 01 & 10 & 11 \\ \hline 00 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 01 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 10 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 11 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{array}$$

$\rho_{00,00}$ = 1/2 → |00⟩ が観測される確率
$\rho_{11,11}$ = 1/2 → |11⟩ が観測される確率
$\rho_{00,11}$ = 1/2 → |00⟩と|11⟩の量子的な重ね合わせを表す成分
$\rho_{11,00}$ = 1/2 → |00⟩と|11⟩の量子的な重ね合わせを表す成分

【ポイント】
密度行列を用いることで、相関のない状態からエンタングル状態まで、複数量子系を統一的に表現できます。

積状態

状態ベクトルの場合と同様に、密度行列のテンソル積は複数系の独立性を表します。

Xがρ、Yがσで独立に準備されたなら、複合系(X,Y)の状態は$\rho\otimes\sigma$で表されます。このような状態を積状態と呼びます。

状態ベクトル

例えば|0>と|1>が独立のときは以下のようになります。

$$|0\rangle \otimes |1\rangle$$

$$|0\rangle \otimes |1\rangle = |01\rangle$$

密度行列

例えば|0>と|1>が独立のときは以下のようになります。

$$(|0\rangle\langle 0|) \otimes (|1\rangle\langle 1|)$$

$$\rho = \rho_1 \otimes \rho_2$$

$$\rho_1 = |0\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\rho_2 = |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

全ての複合状態が積状態になるわけではありません。

【ポイント】
- ✓ 積状態：$\rho_{XY}=\rho_X\otimes\rho_Y$
- ✓ XとYは独立（相関なし）
- ✓ 全体状態は各系の状態のテンソル積で表せる

① 相関のある古典状態

相関はあるが、古典的なランダム選択で説明できる状態です。

例えば、AliceとBobがランダムなビットを共有している状況を考えます。
50%で00を50%で11

Aliceが0のときBobが0
Aliceが1のときBobが1
とAliceの値が分かると Bob の値も分かるため、2つの系には相関があります。

ただし00と11をランダムに選んでいるだけで量子的な重ね合わせではありません。

密度行列は

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

非対角成分がありません。量子的な重ね合わせではなく古典的なランダム選択を表しています。

【ポイント】
相関はありますが、その原因は「00か11かを事前に選んだ」という古典確率で説明できます。

② 量子状態のアンサンブル

「どの状態を準備したか」という古典情報も含めて記述できます。

例えばコインを投げて、表なら $|0\rangle$、裏なら $|+\rangle$ を準備するとします。確率は$p_0=p_1=1/2$です。このとき、確率付きの状態のリスト{(1/2,|0>),(1/2,|+>)}をアンサンブルと呼びます。アンサンブルでは、「どの状態を準備したか」という古典情報も含めて状態を記述します。
この場合、量子系Xだけをみると、密度行列は以下のようになります。

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

これだと、
ρ_X だけでは「今回は$|0\rangle$が準備されたのか、それとも$|+\rangle$が準備されたのか」を区別できません。その情報も一緒に記録したいと考えます。

そこで「今回はどの状態を準備したか」を記録する補助系Yを追加します。
Xが$|0>$のときに$|0>_Y$に記録、Xが$|+>$のときに$|1>_Y$に記録します。すると以下になります。

$$\frac{1}{2}|0\rangle\langle 0|_Y \otimes |0\rangle\langle 0|_X + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1|_Y \otimes |+\rangle\langle +|_X$$

この密度行列を見ると、「どの状態を準備したか」という古典情報(Y)と、対応する量子状態(X)を同時に表現していることが分かります。

Yは「どの状態を準備したか」を表す古典レジスタとして一般化するとテキストで提示されている式となります。

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

【ポイント】
アンサンブルとは、「どの量子状態を準備したか」という古典情報を含む確率付き状態のリストです。古典レジスタYを追加すると$\Sigma_k\, p_k\, |k\rangle\langle k| \otimes \rho_k$と表せます。Yには「どの状態を準備したか」が記録されており、Xには対応する量子状態が格納されています。
次に説明する可分状態は、この考え方を2つの量子系に拡張したものです。

③ 可分状態

「積状態を古典確率で混ぜた状態」であり、相関はあるがその相関は古典的なランダム選択で説明できる状態です。

2つの量子系に対して、古典的なランダム選択によって積状態を準備する状況を考えます。

各 k に対して、
確率 p_kで
左側の系は状態 ρ_k
右側の系は状態 σ_k

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

にあるとします。このような形で表せる状態を可分状態（separable state）と呼びます。
この概念は2系だけでなく、より多くの系にも拡張できます。

この式は確率 p_k で(ρ_k, σ_k)という積状態を選ぶと言っています。

【具体例1】
50%で|00>、50%で|11>という状態を作ります。
すると密度行列は

$$\rho = \frac{1}{2}|00\rangle\langle 00| + \frac{1}{2}|11\rangle\langle 11|$$

になります。
これは書き換えると以下のようになります。

$\rho_0 = |0\rangle\langle 0|$

$\sigma_0 = |0\rangle\langle 0|$

$\rho_1 = |1\rangle\langle 1|$

$\sigma_1 = |1\rangle\langle 1|$

$$\rho = \frac{1}{2}\rho_0 \otimes \sigma_0 + \frac{1}{2}\rho_1 \otimes \sigma_1$$

測定すると
片方=0 ⇒ もう片方=0
片方=1 ⇒ もう片方=1
つまり片方を見ればもう片方が分かる相関があります。
しかし、その相関は「最初に00か11を選んだ」という古典確率で説明できます。

【具体例2】
50%で|00>、50%で|++>という状態を作ります。
すると密度行列は

$$\rho = \frac{1}{2}|00\rangle\langle 00| + \frac{1}{2}|++\rangle\langle ++|$$

になります。
これは書き換えると以下のようになります。

$\rho_0 = |0\rangle\langle 0|$

$\sigma_0 = |0\rangle\langle 0|$

$\rho_1 = |+\rangle\langle +|$

$\sigma_1 = |+\rangle\langle +|$

$$\frac{1}{2}(\rho_0 \otimes \sigma_0) + \frac{1}{2}(\rho_1 \otimes \sigma_1)$$

【ポイント】
可分状態とは「積状態を古典確率で混ぜた状態」です。古典相関状態もその一例であり、重ね合わせ状態を含む場合でも可分状態になりえます。

④ エンタングル状態

可分状態として表せない状態をエンタングル状態と呼びます。

【復習】
「量子情報の基礎」のコースで学んだのは純粋状態における定義でした。
例えば|00>は|0>⊗|0>と書けます。これは積状態です。
一方、ベル状態は$|\psi_A>\otimes|\psi_B>$と書けません。なのでエンタングル状態です。

ここでは、混合状態があることを考慮します。
密度行列の世界では「積状態かどうか」ではなく「可分状態かどうか」で判定します。

【例】
これは
$$\frac{1}{2}|00\rangle\langle 00| + \frac{1}{2}|11\rangle\langle 11|$$
$\rho_A\otimes\rho_B$ の形では書けません。したがって積状態ではありません。
積状態ではないが可分状態です。
密度行列では「積状態でない」だけではエンタングル状態とは言えません。

ベル状態 $|\Phi^+\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$

密度行列を考えるとこれは、どんな p_k,ρ_k,σ_k を選んでも
$$\sum_k p_k \rho_k \otimes \sigma_k$$
の形にできません。
よって古典的なランダム選択では説明できず、エンタングル状態です。

【ポイント】
純粋状態では
「積状態でない」⇔ エンタングル状態

混合状態では
「可分状態でない」 ⇔ エンタングル状態

複数システムのセクションのまとめ

可分状態 = 古典確率で説明できる相関
エンタングル状態 = 古典確率で説明できない相関

④　エンタングル状態

$$\rho_{AB} \neq \sum_k p_k \rho_k \otimes \sigma_k$$

例）

|Φ⁺><Φ⁺|

古典確率で説明できない相関

可分状態

$$\rho_{AB} = \sum_k p_k \rho_k \otimes \sigma_k$$

積状態を確率的
に混ぜたもの

積状態

相関なし

$$\rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B$$

例）

|00⟩⟨00|

|+0><+0|

例）

①　相関のある古典状態

古典確率で説明できる相関

1/2|00><00| + 1/2|11><11|

②　量子状態のアンサンブル

選択結果と量子状態を同時に保持

1/2|0><0|⊗|0><0|

+1/2|1><1|⊗|+><+|

③　可分状態

積状態を古典確率で混合

1/2|++><++|

+1/2|1-><1-|

古典確率で説明できる相関

縮約状態と部分トレース

エンタングルした2量子ビットの片方だけを見たら、どんな状態になるのか？*

全体は純粋状態でも、部分系だけを見ると混合状態になります。

* 実際には観測者が系全体ではなく部分系にしかアクセスできないことが多いため、部分系の状態（縮約状態）を考えることは重要です。

2つの量子ビット(A,B)がベル状態

$$|\phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle$$

にあるとします。
Alice が量子ビット A を持ち、Bob が量子ビット B を持っていると考えます。

このとき「Alice の量子ビット A だけを記述したい」と考えます。

まず Bob が自分の量子ビットを計算基底で測定するという思考実験をします。
測定結果 0 が出る確率は

$$\|(I_A \otimes \langle 0|)|\phi^+\rangle\|^2 = \left\|\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle\right\|^2 = \frac{1}{2}$$

となり、この場合のAliceの量子ビットは|0>になります。
同様に測定結果1が出る確率は、

$$\|(I_A \otimes \langle 1|)|\phi^+\rangle\|^2 = \left\|\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle\right\|^2 = \frac{1}{2}$$

となり、この場合のAliceの量子ビットは|1>になります。
よって、Aliceの状態は以下の密度行列で表されます。（完全混合状態）

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

Bobが測定しない場合、全体の状態は

$$|\phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle$$

のままです。
Aliceは自分の量子ビットしか触れません。つまりAliceから見ると|0>なのか|1>なのか分かりません。
例えば、AliceがZ測定をするとP(0)=P(1)=1/2になります。
またAliceがX測定してもP(+)=P(-)=1/2になります。
（X基底でも結果は完全にランダム）

$$P(+) = \|(\langle +| \otimes I)|\phi^+\rangle\|^2 = \frac{1}{2}$$

$$P(-) = \|(\langle -| \otimes I)|\phi^+\rangle\|^2 = \frac{1}{2}$$

つまりAliceの手元だけで観測できる統計は完全混合状態$1/2I$となります。

これよりBobが測定したから混合状態になったわけではないことがわかります。
（混合状態になるのはAliceが全体状態の一部しか見ていないため）

【ポイント】
- エンタングル状態全体は純粋状態
- Aliceだけを見ると状態は $1/2I$
- Bobが測定してもしなくても Alice の局所状態は変わらない

一般の量子状態ベクトルの縮約状態

任意の純粋状態$|\psi\rangle$から、部分系Aだけの密度行列 ρ_Aを一般的に求める方法をみます。

ベル状態の例から、任意の2つの系 A と B に一般化します。
系 A の古典状態集合を Σ、系 B の古典状態集合を Γ とします。複合系 (A,B) の状態が$|\psi>$で与えられるとします。
このとき、密度行列は$|\psi><\psi|$となり、ここからAだけをみた状態ρ_Aを求めます。

状態ベクトル$|\psi>$は

$$|\psi\rangle = \sum_{b\in\Gamma} |\phi_b\rangle \otimes |b\rangle$$

と表せます。ここで$|\varphi_b>$(一般には正規化されていない)は、

$$|\phi_b\rangle = (I_A \otimes \langle b|)|\psi\rangle$$

です。

もしBを任意の正規直交基底 $\{|b\rangle\}$ で測定すると、結果bが $|||\varphi_b>||^2$の確率で得られます。
このときAの状態は

$$\frac{|\phi_b\rangle}{\||\phi_b\rangle\|}$$

になります。

したがって、Aの密度行列は

$$\rho_A = \sum_{b\in\Gamma} \||\phi_b\rangle\|^2 \frac{|\phi_b\rangle\langle\phi_b|}{\||\phi_b\rangle\|^2}$$

Bを測定した結果ごとの状態を確率平均したもの

となります。
これを整理して

$$\rho_A = \sum_{b\in\Gamma} |\phi_b\rangle\langle\phi_b| = \sum_{b\in\Gamma} (\mathbb{I}_A \otimes \langle b|)|\psi\rangle\langle\psi|(\mathbb{I}_A \otimes |b\rangle)$$

が得られます。
この操作は、純粋状態に限らず任意の密度行列にも拡張できます。この操作を部分トレースと呼びます。

BがbだったときのAの未正規化状態を抜き出す操作となります。

例）

$$|\psi\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$|\phi_0\rangle = (I \otimes \langle 0|)\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|0\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$|\phi_1\rangle = (I \otimes \langle 1|)\frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{|1\rangle}{\sqrt{2}}$$

Bを任意の正規直交基底 $\{|b\rangle\}$ で測定するということは、射影演算子
$P_b = I_A \otimes |b><b|$
で測定することです。ボルン則より、結果 b が得られる確率は
$p(b) = <\psi|P_b|\psi>$となります。

代入

$$|\psi\rangle = \sum_{c} |\phi_c\rangle \otimes |c\rangle$$

$$p(b) = \langle\psi|(I \otimes |b\rangle\langle b|)|\psi\rangle$$

$$p(b) = \sum_{c,d} ((\langle\phi_d| \otimes \langle d|)(I \otimes |b\rangle\langle b|)(|\phi_c\rangle \otimes |c\rangle))$$

$$= \sum_{c,d} \langle\phi_d|\phi_c\rangle\langle d|b\rangle\langle b|c\rangle$$

$$\langle d|b\rangle = \delta_{db}$$

$$\langle b|c\rangle = \delta_{bc}$$

$$p(b) = \langle\phi_b|\phi_b\rangle$$

$$p(b) = \| \, |\phi_b\rangle \, \|^2$$

部分トレース

部分トレースは、見ない系を数学的に消し、部分系だけの状態を求める操作です。

B系の自由度について和を取り、Aだけの状態を取り出す操作

$$\mathrm{Tr}_{\mathrm{B}}(\rho) = \sum_{b \in \Gamma} (\mathbb{I}_{\mathrm{A}} \otimes \langle b|)\rho(\mathbb{I}_{\mathrm{A}} \otimes |b\rangle)$$

A系の自由度について和を取り、Bだけの状態を取り出す操作

$$\mathrm{Tr}_{\mathrm{A}}(\rho) = \sum_{a \in \Sigma} (\langle a| \otimes \mathbb{I}_{\mathrm{B}})\rho(|a\rangle \otimes \mathbb{I}_{\mathrm{B}})$$

「a∊Σ」のΣは系 A の古典状態集合

まとめると、ρが全体状態ならば、
Aだけの状態は

$$\rho_{\mathrm{A}} = \mathrm{Tr}_{\mathrm{B}}(\rho)$$

Bだけの状態は

$$\rho_{\mathrm{B}} = \mathrm{Tr}_{\mathrm{A}}(\rho)$$

例）ベル状態で計算してみます。

$$|\Phi^+\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}}$$

密度行列は

$$\rho_{AB} = |\Phi^+\rangle\langle\Phi^+|$$
$$= \frac{1}{2}(|00\rangle\langle 00| + |00\rangle\langle 11| + |11\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|)$$

Bを部分トレースします。

$$\rho_A = \mathrm{Tr}_B(\rho_{AB}) = \sum_{b=0,1} (I \otimes \langle b|)\rho_{AB}(I \otimes |b\rangle)$$

【b=0】

$\langle 0|1\rangle = 0$
より交差項は消えます。

$$(I \otimes \langle 0|)\rho_{AB}(I \otimes |0\rangle) = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0|$$

【b=1】

$$(I \otimes \langle 1|)\rho_{AB}(I \otimes |1\rangle) = \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1|$$

合計すると

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

完全混合状態となっています。

部分トレースの別表現

部分トレースは、テンソル積ごとに「消す側のトレース」を計算すると簡単に求められます。

部分トレース写像 Tr_Aおよび Tr_B は、次の式を満たす唯一の線形写像として特徴づけることができます。

$$\mathrm{Tr}_A(M \otimes N) = \mathrm{Tr}(M)N$$

$$\mathrm{Tr}_B(M \otimes N) = \mathrm{Tr}(N)M$$

M：系Aに対応
N：系Bに対応

この特徴づけは数学的に重要であるだけでなく、部分トレースを素早く計算するのにも役立ちます。

【例1】
|0><0|⊗|1><1|

Tr_B(|0><0|⊗|1><1|)を計算します。

=Tr(|1><1|)|0><0|
=|0><0|

$$\mathrm{Tr}(|\psi\rangle\langle\psi|) = 1$$

【例2】
|1><1|⊗|+><+|

Tr_B(|1><1|⊗|+><+|)を計算します。

=Tr(|+><+|)|1><1|
=|1><1|

$$\mathrm{Tr}(|\psi\rangle\langle\psi|) = 1$$

【例3】
1/2|0><0|⊗|0><0| +1/2|1><1|⊗|+><+|

Tr_B(1/2|0><0|⊗|0><0| +1/2|1><1|⊗|+><+|)を計算します。

=1/2Tr_B(|0><0|⊗|0><0|) + 1/2Tr_B(|1><1|⊗|+><+|)
=1/2Tr(|0><0|)|0><0| + 1/2 Tr(|+><+|)|1><1|
=1/2|0><0| + 1/2|1><1|

部分トレースの線形性
$$\mathrm{Tr}_B(X+Y) = \mathrm{Tr}_B(X) + \mathrm{Tr}_B(Y)$$

前ページの定義

$$\rho_{\mathrm{A}} = \sum_{b \in \Gamma} (\mathbb{I}_{\mathrm{A}} \otimes \langle b|)\rho(\mathbb{I}_{\mathrm{A}} \otimes |b\rangle)$$

と完全に同値です。実際の計算ではこちらの形を使うと部分トレースを素早く求められます。

2量子ビットの場合の部分トレース

まずは行列要素で見て、部分トレースが何を足しているのか確認します。

部分トレースは行列表現でも明示的に書くことができます。ここでは2量子ビット A,B の場合を考えます。
2量子ビットの密度行列は

$$\rho = \begin{pmatrix} \alpha_{00} & \alpha_{01} & \alpha_{02} & \alpha_{03} \\ \alpha_{10} & \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{20} & \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{30} & \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix}$$

Aを残してBを捨てるρ_A = $\mathrm{Tr}_B(\rho)$は

$$\begin{pmatrix} \alpha_{00} + \alpha_{11} & \alpha_{02} + \alpha_{13} \\ \alpha_{20} + \alpha_{31} & \alpha_{22} + \alpha_{33} \end{pmatrix}$$

Bを残してAを捨てるρ_B = $\mathrm{Tr}_A(\rho)$は

$$\begin{pmatrix} \alpha_{00} + \alpha_{22} & \alpha_{01} + \alpha_{23} \\ \alpha_{10} + \alpha_{32} & \alpha_{11} + \alpha_{33} \end{pmatrix}$$

となります。

計算基底の並び|00>,|01>,|10>,|11>
から4×4密度行列は

	00	01	10	11
00				
01				
10				
11				

Bを捨てる場合

$$\rho_A = \mathrm{Tr}_B(\rho) = (I \otimes \langle 0|)\rho(I \otimes |0\rangle) + (I \otimes \langle 1|)\rho(I \otimes |1\rangle)$$

つまりB=0 の成分と B=1 の成分を足し合わせます。

B=0に対応する部分は

$$\begin{array}{c} \\ |0\underline{0}\rangle \\ |01\rangle \\ |1\underline{0}\rangle \\ |11\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} |0\underline{0}\rangle & |01\rangle & |1\underline{0}\rangle & |11\rangle \end{array} \\ \begin{pmatrix} \boxed{\alpha_{00}} & \alpha_{01} & \boxed{\alpha_{02}} & \alpha_{03} \\ \alpha_{10} & \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \boxed{\alpha_{20}} & \alpha_{21} & \boxed{\alpha_{22}} & \alpha_{23} \\ \alpha_{30} & \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix} \end{array}$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_{00} & \alpha_{02} \\ \alpha_{20} & \alpha_{22} \end{pmatrix}$$

B=1に対応する部分は

$$\begin{array}{c} \\ |00\rangle \\ |0\underline{1}\rangle \\ |10\rangle \\ |1\underline{1}\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} |00\rangle & |0\underline{1}\rangle & |10\rangle & |1\underline{1}\rangle \end{array} \\ \begin{pmatrix} \alpha_{00} & \alpha_{01} & \alpha_{02} & \alpha_{03} \\ \alpha_{10} & \boxed{\alpha_{11}} & \alpha_{12} & \boxed{\alpha_{13}} \\ \alpha_{20} & \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{30} & \boxed{\alpha_{31}} & \alpha_{32} & \boxed{\alpha_{33}} \end{pmatrix} \end{array}$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{13} \\ \alpha_{31} & \alpha_{33} \end{pmatrix}$$

Aを捨てる場合

$$\rho_B = \mathrm{Tr}_A(\rho) = (\langle 0| \otimes I)\rho(|0\rangle \otimes I) + (\langle 1| \otimes I)\rho(|1\rangle \otimes I)$$

つまりA=0 の成分と A=1 の成分を足し合わせます。

A=0に対応する部分は

$$\begin{array}{c} \\ |\underline{0}0\rangle \\ |\underline{0}1\rangle \\ |10\rangle \\ |11\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} |\underline{0}0\rangle & |\underline{0}1\rangle & |10\rangle & |11\rangle \end{array} \\ \begin{pmatrix} \boxed{\alpha_{00}} & \boxed{\alpha_{01}} & \alpha_{02} & \alpha_{03} \\ \boxed{\alpha_{10}} & \boxed{\alpha_{11}} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{20} & \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{30} & \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix} \end{array}$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_{00} & \alpha_{01} \\ \alpha_{10} & \alpha_{11} \end{pmatrix}$$

A=1に対応する部分は

$$\begin{array}{c} \\ |00\rangle \\ |01\rangle \\ |\underline{1}0\rangle \\ |\underline{1}1\rangle \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} |00\rangle & |01\rangle & |\underline{1}0\rangle & |\underline{1}1\rangle \end{array} \\ \begin{pmatrix} \alpha_{00} & \alpha_{01} & \alpha_{02} & \alpha_{03} \\ \alpha_{10} & \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{20} & \alpha_{21} & \boxed{\alpha_{22}} & \boxed{\alpha_{23}} \\ \alpha_{30} & \alpha_{31} & \boxed{\alpha_{32}} & \boxed{\alpha_{33}} \end{pmatrix} \end{array}$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix}$$

行列要素の足し算を、ブロック行列で見る

前ページの行列要素の足し算を、ブロック行列で見るとさらに簡単に計算できます。

ブロック行列で見てみます。

$$\rho = \begin{pmatrix} \alpha_{00} & \alpha_{01} & \alpha_{02} & \alpha_{03} \\ \alpha_{10} & \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{20} & \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{30} & \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix}$$

$$\rho = \begin{pmatrix} M_{00} & M_{01} \\ M_{10} & M_{11} \end{pmatrix}$$

$$M_{0,0} = \begin{pmatrix} \alpha_{00} & \alpha_{01} \\ \alpha_{10} & \alpha_{11} \end{pmatrix}, \quad M_{0,1} = \begin{pmatrix} \alpha_{02} & \alpha_{03} \\ \alpha_{12} & \alpha_{13} \end{pmatrix}, \quad M_{1,0} = \begin{pmatrix} \alpha_{20} & \alpha_{21} \\ \alpha_{30} & \alpha_{31} \end{pmatrix}, \quad M_{1,1} = \begin{pmatrix} \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix}$$

【Aを捨てる】

前ページではA=0の場合とA=1の場合を足し合わせました。

$$\rho_B = \mathrm{Tr}_A(\rho) = (\langle 0| \otimes I)\rho(|0\rangle \otimes I) + (\langle 1| \otimes I)\rho(|1\rangle \otimes I)$$

ブロック行列で見ると、対角ブロックを足すだけです。

$$\rho_B = M_{0,0} + M_{1,1}$$

【Bを捨てる】

前ページではB=0の場合とB=1の場合を足し合わせました。

$$\rho_A = \mathrm{Tr}_B(\rho) = (I \otimes \langle 0|)\rho(I \otimes |0\rangle) + (I \otimes \langle 1|)\rho(I \otimes |1\rangle)$$

ブロック行列で見ると、各ブロック内で B=0 と B=1 の成分を足すことになるため、各ブロックのトレースを取るだけです。

$$\rho_A = \begin{pmatrix} \mathrm{Tr}(M_{0,0}) & \mathrm{Tr}(M_{0,1}) \\ \mathrm{Tr}(M_{1,0}) & \mathrm{Tr}(M_{1,1}) \end{pmatrix}$$

【例】

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

行列表現

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

Aを捨てるとは、左上ブロックと右下ブロックを足すので

$$\rho_B = \begin{pmatrix} 3/4 & 1/4 \\ 1/4 & 1/4 \end{pmatrix}$$

完全混合状態ではありません、

Bを捨てるとは、各ブロックのトレースを取れば、

$$\rho_A = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

Aだけを見ると完全混合状態です。

まとめ

複数系の密度行列を扱い、系全体の状態から部分系の状態（縮約状態）を部分トレースで求められるようになりました。

- ✓ 密度行列は、状態ベクトルと同じように複数の量子系を表現できます。
- ✓ 積状態（$\rho_{AB}=\rho_A\otimes\rho_B$）は相関のない状態を表します。
- ✓ 可分状態は古典確率で説明できる相関、エンタングル状態は古典確率で説明できない相関です。
- ✓ 実際には観測者が系全体ではなく部分系にしかアクセスできないことが多いため、部分系の状態（縮約状態）を考えることは重要です。
- ✓ 縮約状態は部分トレース $\boxed{\rho_A=\mathrm{Tr}_B(\rho_{AB})、\rho_B=\mathrm{Tr}_A(\rho_{AB})}$ によって求められます。

END