量子情報入門から Single-Shot の量子熱力学まで

森

2025 年 2 月 25 日

目次

第 1 章　量子情報の枠組みミニマム

まず量子情報分野の基本的なルールについて，以降の章で使うものについて簡単な説明をする．基本的に有限次元の量子力学が舞台になっている．主に [1], [2] を参考にした．怪しげなことを書いていたら教えて欲しいです． あと「演算子」，「オペレータ」は適宜「行列」にでも読み替えてもらって大丈夫です．

1.1　状態

まず量子状態を線型代数の言葉を使って表すことから始める．量子システムは Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ で記述される[1)]．$\mathcal{H}$ に作用する演算子の集合を $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ と書く．d を $\mathcal{H}$ の次元とする．

一般の量子状態は以下で定める**密度演算子**によって表される．

定義 1.1.1 (量子状態)**.** 系の量子状態は $\mathcal{H}$ に作用する $\mathrm{tr}[\rho] = 1$ かつ半正定値な演算子 $\rho \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ によって表され，ρ を密度演算子と呼ぶ．

ここで半正定値とは任意のベクトル $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ について $\langle\psi|\,\rho\,|\psi\rangle \geq 0$ が成立することを意味し，これを $\rho \geq 0$ と表す．

$\mathcal{H}$ 上の量子状態の集合を $\mathcal{S}(\rho)$ と表すことにする．これは凸集合になっている．

命題 1.1.2. $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ は凸集合．

証明　$p \in [0,1]$, $\rho, \sigma \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ とする．トレースの線形性から $\mathrm{tr}[p\rho+(1-p)\sigma] = p\,\mathrm{tr}[\rho]+(1-p)\,\mathrm{tr}[\sigma] = 1$．また，内積の線型性から $\langle\psi|\,(p\rho + (1-p)\sigma)\,|\psi\rangle = p\,\langle\psi|\,\rho\,|\psi\rangle + (1-p)\,\langle\psi|\,\sigma\,|\psi\rangle \geq 0$． □

結局，状態を表す密度演算子の確率混合もちゃんと状態になるようになっている．

次に以下のように純粋状態と混合状態という概念を導入する．

定義 1.1.3 (純粋状態，混合状態)**.** $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ の端点を純粋状態，そうでない元を混合状態と呼ぶ．ここで $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ が端点であるとは，これが $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ の他の元の非自明な凸結合で表せないことをいう．

この定義の意味に触れる前に，密度演算子がスペクトル分解できることに触れる．

1)　内積の入った複素数上の線型空間と思ってもらって大丈夫だと思う...

命題 1.1.4 (スペクトル分解)**.** 密度演算子 $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ は $\mathcal{H}$ を張る正規直交系 $\{|\phi\rangle_i\}$ で以下のように対角化できる.

$$\rho = \sum_{i=1}^{d} p_i |\phi_i\rangle \langle\phi_i|$$

ここで $p_i \geq 0$ で, $|\phi_i\rangle \langle\phi_i|$ は射影演算子である.

証明　[1] の 2 章を参照. □

この命題から, 純粋状態はあるベクトル $|\phi\rangle$ で貼られる 1 次元部分空間への射影演算子だとわかる. また, 1 次元部分空間への射影演算子は $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ の非自明な凸結合で書けないので, 結局純粋状態は適当な $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ で指定できる. トレースが 1 である条件も加味して純粋状態を $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ と規格化されたベクトル $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ で表すことも多い[2)].

また, 混合状態はある純粋状態の集まりを古典確率混合したものだと捉えることができる. 測定の話をした後に簡単な例を紹介する.

1.2　合成系

次に量子系の合成系の記述方法を与える.

定義 1.2.1 (合成系)**.** 量子系 $\mathcal{H}_a$, $\mathcal{H}_b$ の合成系は Hilbert 空間のテンソル積 $\mathcal{H}_a \otimes \mathcal{H}_b$ で与えられる.

定義 1.1.1 より, この合成系の状態は $\mathcal{S}(\mathcal{H}_a \otimes \mathcal{H}_b)$ の元で与えられる.
ついでに**積状態**, **セパラブル状態**, **エンタングル状態**を定義する.

定義 1.2.2. $\mathcal{S}(\mathcal{H}_a \otimes \mathcal{H}_b)$ の元 ρ_{AB} のうち, $\rho_a \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_a)$, $\rho_b \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_b)$ があって $\rho_{AB} = \rho_a \otimes \rho_b$ と記述できるものを積状態という. また, 確率分布 $\{r_i\}$ と $\rho_a^{(i)} \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_a)$, $\rho_b^{(i)} \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_b)$ があって $\rho_{AB} = \sum_i r_i \rho_a^{(i)} \otimes \rho_b^{(i)}$ と記述できるものをセパラブル状態という. ρ_{AB} がセパラブル状態でないとき, これをエンタングル状態という.

部分トレースもここで定義しておく.

定義 1.2.3 (部分トレース)**.** 部分系 B を潰す部分トレースは $\mathrm{tr}_B : \mathcal{L}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B) \to \mathcal{L}(\mathcal{H}_A)$ の線型写像で $|a_1\rangle, |a_2\rangle \in \mathcal{H}_A$, $|b_1\rangle, |b_2\rangle \in \mathcal{H}_B$ について

$$\mathrm{tr}_B(|a_1\rangle \langle a_2| \otimes |b_1\rangle \langle b_2|) := |a_1\rangle \langle a_2| \mathrm{tr}(|b_1\rangle \langle b_2|)$$

2)　というか量子力学というとほぼこのベクトルで表される状態を扱っている.

と定義される.

これは物理的には合成系 AB の状態 ρ_{AB} から部分系 A についての情報のみを取り出す操作に対応している.

1.3　量子操作

物理的に実現可能な量子操作は次の写像で表現されると考える.

定義 1.3.1 (CP 写像)**.** $\mathcal{E} : \mathcal{L}(\mathcal{H}) \to \mathcal{L}(\mathcal{H}')$ は線型写像とする．$\mathcal{E}$ が以下の 3 つを満たすとき, これを CP 写像と呼ぶ（Complete-Positive）.

1. X, Y を演算子とする．このとき, $X \geq 0$ ならば $\mathcal{E}(X) \geq 0$．この条件を満たせば, その写像は Positive であるという.
2. n 次元 Hilbert 空間を $\mathcal{H}_n$ として, $\mathcal{I}_n$ を $\mathcal{L}(\mathcal{H}_n)$ 上の恒等演算子とする．このとき, $\mathcal{E} \otimes \mathcal{I}_n$ が Positive となる．これを n-positive と呼ぶ.
3. 任意の $n \in \mathbb{N}$ について, $\mathcal{E}$ は n-positive.

参考のために, Positive だが CP ではない写像の例を挙げる.

例 1 (Positive but not CP)**.** 簡単のために qubit 空間 $\mathcal{H}_2$ 上で考える．いつも通り $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ を正規直交基底とする．$\mathcal{E}_T : \mathcal{L}(\mathcal{H}_2) \to \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$ を $\mathcal{E}_T : |i\rangle\langle j| \mapsto |j\rangle\langle i|$ な線型写像とする．これは Positive である[3]．次に, $I \otimes \mathcal{E}_T$ を例えば $|\psi\rangle = |00\rangle + |11\rangle$（規格化は無視）に作用させることを考える.

$$\rho_\psi = |0\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| \otimes |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0| \otimes |1\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 1|$$

とかけることに注意すれば,

$$I \otimes \mathcal{E}_T(\rho_\psi) = |0\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 1| \doteq \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 0 & 1 & \\ & 1 & 0 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

となる．この行列の固有値は $1, 1, 1, -1$ なので, 確かにこれは CP ではない.

次に TP（Trace Preserving）を定義する.

定義 1.3.2 (TP 写像)**.** 線型写像 $\mathcal{E}$ が任意の演算子 X について

$$\mathrm{tr}(\mathcal{E}(X)) = \mathrm{tr}(X)$$

3)　$\begin{pmatrix} \alpha^* & \beta^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \geq 0$ であるとき両辺転置を取れば $\begin{pmatrix} \alpha & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha^* \\ \beta^* \end{pmatrix} \geq 0$

を満たすとき，これを TP という．また，任意の $X \geq 0$ について $\mathrm{tr}(\mathcal{E}(X)) \leq \mathrm{tr}(X)$ のとき，$\mathcal{E}$ は trace-nonincreasing という．

CP かつ TP な写像のことを CPTP 写像と呼ぶ． CPTP 写像には，理解が深まる同値な表現がある．

定理 1.3.3 (CPTP 写像の同値な表現)**.** 線型写像 $\mathcal{E}$ について，以下は同値：

(a). $\mathcal{E}$ は CPTP 写像.

(b). $\mathcal{E}$ は $\sum_k M_k^\dagger M_k = I$ を満たす Kraus 演算子で $\mathcal{E}(\rho) = \sum_k M_k \rho M_k^\dagger$ とかける.

(c). 環境系を表す量子状態 $\sigma \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_e)$ が存在して，ある Unitary 演算子 $U : \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_e \to \mathcal{H}' \otimes \mathcal{H}'_e$ を使って $\mathcal{E}(\rho) = \mathrm{tr}_{e'}(U\rho \otimes \sigma U^\dagger)$ とかける．これを Stinespring 表現という.

証明　Appendix にかけたら書く．□

(b) は使い勝手の良い性質で，写像が Kraus 演算子を使ってかけていたらそれは量子操作を記述する CPTP 写像になっているとわかる． (c) は物理的な意味をより明確にしてくれていて，結局視野を環境系にまで広げれば知っているようにユニタリ時間発展をしていて，CPTP 写像は環境系をトレースアウトした着目系の間の時間発展の記述をしているとわかる．

1.4　測定

次に測定という操作を定義する．

定義 1.4.1 (測定)**.** 量子測定は $\mathcal{H}$ 上のオペレータの集合 $\{M_m\}$ のうち，$\sum_m M_m^\dagger M_m = I$ を満たすものにより記述される． ここで m は測定結果を指定するラベルとする． 量子状態 $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ について $\{M_m\}$ で記述される測定を行うとき，結果 m が得られる確率 $p(m)$ は

$$p(m) = \mathrm{tr}[M_m^\dagger M_m \rho]$$

で与えられ，測定後の状態 ρ_m は

$$\rho_m = \frac{M_m \rho M_m^\dagger}{\mathrm{tr}[M_m^\dagger M_m \rho]}$$

となる．

測定と混合状態の例を紹介する．

例 2 (Stern-Gerlach 実験)**.** 2 次元の状態空間 $\mathcal{H}_2$ で記述される量子系を考える[4)]． $\{|0\rangle, |1\rangle\}$

4)　これを qubit の系といったりする

は $\mathscr{H}_2$ を張る正規直交基底とする．始状態として $|0\rangle$ を用意する．また，$|\uparrow\rangle := (|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$, $|\downarrow\rangle := (|0\rangle - |1\rangle)/\sqrt{2}$ として，$\{|\uparrow\rangle\langle\uparrow|, |\downarrow\rangle\langle\downarrow|\}$ で記述される測定をこの系に行う．計算すると（計算しなくともこの実験を知っている人ならわかることだが），1/2 の確率でそれぞれ $\uparrow, \downarrow$ が測定され，測定後の状態はそれぞれ $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ になっている．そのアンサンブル平均状態 ρ は

$$\begin{aligned}
\rho &= 1/2\,|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + 1/2\,|\downarrow\rangle\langle\downarrow| \\
&= \mathrm{tr}[(|\uparrow\rangle\langle\uparrow|)\,|0\rangle\langle 0|]\frac{(|\uparrow\rangle\langle\uparrow|)\,|0\rangle\langle 0|\,(|\uparrow\rangle\langle\uparrow|)}{\mathrm{tr}[(|\uparrow\rangle\langle\uparrow|)\,|0\rangle\langle 0|]} + \mathrm{tr}[(|\downarrow\rangle\langle\downarrow|)\,|0\rangle\langle 0|]\frac{(|\downarrow\rangle\langle\downarrow|)\,|0\rangle\langle 0|\,(|\downarrow\rangle\langle\downarrow|)}{\mathrm{tr}[(|\downarrow\rangle\langle\downarrow|)\,|0\rangle\langle 0|]} \\
&= (|\uparrow\rangle\langle\uparrow|)\,|0\rangle\langle 0|\,(|\uparrow\rangle\langle\uparrow|) + (|\downarrow\rangle\langle\downarrow|)\,|0\rangle\langle 0|\,(|\downarrow\rangle\langle\downarrow|)
\end{aligned}$$

と記述でき，これは Kraus 表示になっているため，測定のアンサンブル状態[5)]は測定演算子を Kraus 演算子とする CPTP 写像で与えられるとわかる．ちなみに Stern-Gerlach 実験はこの後特に $\uparrow$ が測定された状態のみを抽出し，$\{|0\rangle\langle 0|, |1\rangle\langle 1|\}$ で記述される測定を行う．同様に考えれば，1/2 の確率でそれぞれ 0, 1 が測定されると分かる[6)]．

1.5　量子状態間の尺度

1.5.1　トレース距離

1.5.2　忠実度

1.5.3　応用例：クローン不可能定理

1.6　色々なエントロピー

この節では後の章で登場する色々なエントロピーを定義する．情報理論では情報源の持つ平均情報量を定量化する Shannon エントロピーが本質的に重要で，そこから相対エントロピー（KL ダイバージェンス）等の概念が生まれたが，以下のエントロピーはそれらを量子論に拡張したものになっている．

定義 1.6.1 (von Neumann エントロピー)**.** 次元 d の von Neumann エントロピー $S_1(\rho)$ は次のように定義される．

$$S_1(\rho) := -\,\mathrm{tr}(\rho \ln \rho)$$

5）　とか，測定はされたが結果を知らない状態とか

6）　量子論黎明期にこのような実験が実際に行われ結果が論理的に考察されたおかげで今展開しているような量子論の枠組みがある．

定義 1.6.2 (量子 KL ダイバージェンス). 次元 d の量子 KL ダイバージェンス $S_1(\rho||\sigma)$ は次のように定義される.

$$S_1(\rho||\sigma) \coloneqq \mathrm{tr}(\rho \ln \rho - \rho \ln \sigma)$$

ここで ρ の台は σ のそれに包含されていると考える. すなわち, $\mathrm{Ker}\,\sigma \subset \mathrm{Ker}\,\rho$ とする.

1.6.1　von Neumann エントロピー

1.6.2　量子相対エントロピー

1.6.3　Rényi- α ダイバージェンス

1.6.4　平滑化 Rényi- α ダイバージェンス

第 2 章　量子仮説検定

2.1　状況設定

2.2　量子 Neyman-Pearson 検定

2.3　漸近論と量子相対エントロピー

第 3 章　Single-Shot の量子熱力学

3.1　状況設定

3.2　Exact Case

3.3　Approximate Case

3.4　Asymptotic Case

付録 A　CPTP 写像の 3 つの表現の同値性の証明

付録 B　i.i.d. での量子 Stein の補題の証明

参考文献

[1] Michael A Nielsen and Isaac L Chuang. *Quantum computation and quantum information.* Cambridge university press, 2010.

[2] Takahiro Sagawa. *Entropy, Divergence, and Majorization in Classical and Quantum Thermodynamics.* Springer Singapore, 2022.