

学部生のための「ミクロ・マクロ双対性」とその周辺の物理学講義：補講Q3：縮約密度行列

成清, 修
九州大学理学部物理学科

<https://hdl.handle.net/2324/7432639>

出版情報：2026-06-11
バージョン：
権利関係：



学部生のための 「ミクロ・マクロ双対性」 とその周辺の物理学講義

九州大学理学部物理学科 成清 修

補講 Q3：縮約密度行列

Feynman の議論

[Feynman] の §2.1 の冒頭では、密度行列を導入するにあたって、次のように述べられている：

When we solve a quantum-mechanical problem, what we really do is divide the universe into two parts – the system in which we are interested and the rest of the universe. We then usually act as if the system in which we are interested comprised the entire universe. To motivate the use of the density matrices, let us see what happens when we include the part of the universe outside the system.

この節では、[Feynman] の §2.1 に従って、部分系としての a system の記述を考える。

全体系を the universe とし、それを a system と the rest の 2 つの部分系に分けて記述する。全体系を記述するベクトル $|\Psi\rangle$ は

$$|\Psi\rangle = \sum_{ij} c_{ij} |\varphi_i\rangle \otimes |\theta_j\rangle$$

と表現される¹。ここに、 $|\varphi_i\rangle$ は a system を記述するベクトルであり、 $|\theta_j\rangle$ は the rest を記述するベクトルである。どちらも正規直交系を成すものとする。

A を a system のみに作用する演算子とする。 A は the rest には作用し

1

$$\langle\Psi| = \sum_{i'j'} c_{i'j'}^* \langle\varphi_{i'}| \otimes \langle\theta_{j'}|$$

ない。 $\{|\varphi_i\rangle\}$ に作用する A の表現行列を \hat{A} とする。 $\{|\theta_j\rangle\}$ に作用する単位行列を \hat{I} とする。このとき、the universe における A の期待値を $\langle A \rangle$ とすると

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | (\hat{A} \otimes \hat{I}) | \Psi \rangle$$

である²。 $|\Psi\rangle$ の展開形を用いて $\langle A \rangle$ を書くと、 $\langle \theta_{j'} | \theta_j \rangle = \delta_{j'j}$ より

$$\langle A \rangle = \sum_{ii'j} c_{i'j}^* \langle \varphi_{i'} | \hat{A} | \varphi_i \rangle c_{ij}$$

となる。ここで、 $w_{ii'} \equiv \sum_j c_{ij} c_{i'j}^*$ を導入すると

$$\langle A \rangle = \sum_{ii'} w_{ii'} \langle \varphi_{i'} | \hat{A} | \varphi_i \rangle$$

と書ける。混合状態の密度行列 $\hat{\rho}$ を $\langle \varphi_i | \hat{\rho} | \varphi_{i'} \rangle \equiv w_{ii'}$ によって導入すると

$$\hat{\rho} = \sum_{ii'} w_{ii'} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_{i'}|$$

であり

$$\langle A \rangle = \text{Tr}_{\text{sys}} \{ \hat{\rho} \hat{A} \}$$

と書ける³。

問題 $\hat{\rho} = \sum_k p_k |k\rangle \langle k|$ のように対角化できることを説明せよ。また、 p_k が確率たりうること ($p_k \geq 0$ および $\sum_k p_k = 1$) を示せ。

問題 $\hat{\rho} = \sum_k p_k |k\rangle \langle k|$ のとき、 $\langle A \rangle = \text{Tr}_{\text{sys}} \{ \hat{\rho} \hat{A} \} = \sum_k p_k \langle k | \hat{A} | k \rangle$ となることを確かめよ。

問題 定義より $w_{ii'} = \sum_k p_k \langle \varphi_i | k \rangle \langle k | \varphi_{i'} \rangle$ である。これをもとに $\sum_k p_k |k\rangle \langle k| = \sum_{ii'} w_{ii'} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_{i'}|$ を確かめよ。

混合状態における期待値は

$$\langle A \rangle = \sum_k p_k \langle k | \hat{A} | k \rangle$$

²[Feynman] の §2.1 の書き方では、 $\hat{A} \otimes \hat{I} = \sum_{ii'} A_{ii'} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_{i'}| \otimes \sum_j |\theta_j\rangle \langle \theta_j| = \sum_{ii'j} A_{ii'} (|\varphi_i\rangle \otimes |\theta_j\rangle) (\langle \varphi_{i'}| \otimes \langle \theta_j|)$ であり、 $|\theta_j\rangle$ は A によって変化はしない。

$$\text{Tr}_{\text{sys}} \{ \hat{\rho} \hat{A} \} = \sum_i \langle \varphi_i | \hat{\rho} \hat{A} | \varphi_i \rangle = \sum_{ii'} \langle \varphi_i | \hat{\rho} | \varphi_{i'} \rangle \langle \varphi_{i'} | \hat{A} | \varphi_i \rangle = \sum_{ii'} w_{ii'} \langle \varphi_{i'} | \hat{A} | \varphi_i \rangle$$

と書ける。ここに、 p_k は k -状態の出現確率であり、 $\langle k|\hat{A}|k\rangle$ は k -状態における A の期待値である。

The universe は純粋状態であって、その密度行列は

$$\hat{\rho}_{\text{uni}} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$$

である。 $|\Psi\rangle$ の展開形を用いて $\hat{\rho}_{\text{uni}}$ を書くと

$$\hat{\rho}_{\text{uni}} = \sum_{ij} \sum_{i'j'} c_{ij} c_{i'j'}^* |\varphi_i\rangle\langle\varphi_{i'}| \otimes |\theta_j\rangle\langle\theta_{j'}|$$

となる。これに縮約⁴を施すことによって得られるのが、上で考えた混合状態の密度行列 $\hat{\rho}$ である：

$$\hat{\rho} = \text{Tr}_{\text{res}}\{\hat{\rho}_{\text{uni}}\} = \sum_{ii'} w_{ii'} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_{i'}|$$

古典確率論

密度行列 $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ またはベクトル $|\Psi\rangle$ は同時確率 $p(i, j)$ を表現するためのツールである。事象 i と事象 j は異なるベクトル空間を用いて表現されるので、これらに対する同時確率⁵を考えることができ、周辺確率 $p(i)$ と $p(j)$ や条件つき確率 $p(i|j)$ との関係は古典確率論によるものと同じになる⁶

まず、a system のみを考える。ベクトル $|\psi\rangle$ に確率 $\{p(i)\}$ を埋め込み

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\varphi_i\rangle$$

とする。ここに、

$$p(i) = |c_i|^2$$

である⁷。 $|\psi\rangle$ から確率を取り出すには、射影演算子を $\hat{P}_i \equiv |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ として

$$p(i) = \langle\psi|\hat{P}_i|\psi\rangle$$

⁴ $\text{Tr}_{\text{res}}\{\hat{\rho}_{\text{uni}}\} = \sum_{j''} \langle\theta_{j''}|\hat{\rho}_{\text{uni}}|\theta_{j''}\rangle$

⁵ひとつのベクトル空間を用いて、演算子 A に関する事象 i と演算子 A' に関する事象 i' を考える場合、 A と A' が交換しないとき、同時確率 $p(i, i')$ は存在しない。

⁶[富田] の 4.1.3 節の議論である。

⁷物理量 (演算子) A の確率的期待値 $\langle A \rangle$ は $\langle A \rangle = \sum_i a_i p(i)$ の形に書ける。また、 $\langle A \rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ である。

とすればよい⁸。密度行列 $\hat{\rho}_0 \equiv |\psi\rangle\langle\psi|$ を用いて

$$p(i) = \text{Tr}_{\text{sys}}\{\hat{\rho}_0 \hat{P}_i\}$$

と書くこともできる⁹。

同じ議論を the universe について行くと

$$p(i, j) = |c_{ij}|^2$$

である。射影演算子 $\hat{P}_j \equiv |\theta_j\rangle\langle\theta_j|$ も導入すれば

$$p(i, j) = \langle\Psi|(\hat{P}_i \otimes \hat{P}_j)|\Psi\rangle$$

と書ける。密度行列を用いて

$$p(i, j) = \text{Tr}_{\text{uni}}\{\hat{\rho}_{\text{uni}}(\hat{P}_i \otimes \hat{P}_j)\}$$

と書くこともできる¹⁰。

$|\Psi\rangle$ に埋め込まれた確率情報から事象 j のみに注目した確率を取り出すには

$$p(j) = \langle\Psi|(\hat{I} \otimes \hat{P}_j)|\Psi\rangle$$

とすればよい。

問題 次の式を導け。

$$p(j) = \sum_i |c_{ij}|^2$$

この式は、同時確率と周辺確率の関係

$$p(j) = \sum_i p(i, j)$$

に他ならない。

⁸脚注7の設定のもと、行列 \hat{A} とベクトル $|a_i\rangle$ を $\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$ のように導入し、 $\hat{P}_i \equiv |a_i\rangle\langle a_i|$ とする。このとき、 $\sum_i a_i p(i) = \sum_i a_i \langle\psi|\hat{P}_i|\psi\rangle = \langle\psi|\sum_i a_i \hat{P}_i|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ となる。よって、 $\hat{A} = \sum_i a_i \hat{P}_i$ である。

$$\text{Tr}_{\text{sys}}\{\hat{\rho}_0 \hat{A}\} = \sum_k \langle k|\psi\rangle\langle\psi|\hat{A}|k\rangle = \sum_k \langle\psi|\hat{A}|k\rangle\langle k|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

¹⁰3種類のトレースが登場したが、相互の関係は $\text{Tr}_{\text{uni}} = \text{Tr}_{\text{sys}} \cdot \text{Tr}_{\text{res}}$ である。

次に、条件つき確率を用いて考える。The rest に対して射影測定¹¹を行って、 $|\theta_j\rangle$ を得たとする。このとき、a system に対しては何もしないので、測定後の the universe のベクトルは

$$\frac{1}{\sqrt{p(j)}}(\hat{I} \otimes \hat{P}_j)|\Psi\rangle$$

となる。

問題 このベクトルが

$$\frac{1}{\sqrt{p(j)}} \sum_i c_{ij} |\varphi_i\rangle \otimes |\theta_j\rangle$$

となることを示せ。

ここで、 $|\phi_j\rangle \equiv (1/\sqrt{p(j)}) \sum_i c_{ij} |\varphi_i\rangle$ とおくと、測定後のベクトルは $|\Psi_j\rangle \equiv |\phi_j\rangle \otimes |\theta_j\rangle$ であり、測定後の密度行列は

$$|\Psi_j\rangle\langle\Psi_j|$$

である。 $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ から、この密度行列が得られる確率が $p(j)$ なので

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_j p(j) |\Psi_j\rangle\langle\Psi_j|$$

と分解される。これを縮約して、a system の密度行列 $\hat{\rho}$ にすると

$$\hat{\rho} = \sum_j p(j) |\phi_j\rangle\langle\phi_j|$$

である¹²。ここに、 $|\phi_j\rangle\langle\phi_j|$ を the rest が $|\theta_j\rangle$ であるという条件のもとでの密度行列として $\hat{\rho}_j$ と書くことにすると

$$\hat{\rho} = \sum_j p(j) \hat{\rho}_j$$

¹¹測定については今後の補講で議論します。

¹²Feynman の議論の節で導入した、 $\hat{\rho} = \text{Tr}_{\text{res}}\{|\Psi\rangle\langle\Psi|\}$ から計算しても同じ式が得られる。このとき、

$$\hat{\rho} = \sum_j \left(\sum_i c_{ij} |\varphi_i\rangle \right) \left(\sum_{i'} c_{i'j}^* \langle\varphi_{i'}| \right)$$

である。

となり、この式から確率 $p(i) = \text{Tr}_{\text{sys}}\{\hat{P}_i\hat{\rho}\}$ を求めると

$$p(i) = \sum_j p(i|j)p(j)$$

となり、古典確率論の関係が得られる。ここに、 $p(i|j) = \text{Tr}_{\text{sys}}\{\hat{P}_i\hat{\rho}_j\}$ は条件つき確率である。

古典確率論においては

$$p(i, j) = p(i|j)p(j)$$

であるから、上記の、同時確率の考察と条件つき確率の考察は整合している。

まとめると、量子論では

$$\hat{\rho} = \text{Tr}_{\text{res}}\{\hat{\rho}_{\text{uni}}\} = \sum_j p(j)\hat{\rho}_j$$

であり、古典確率論では

$$p(i) = \sum_j p(i, j) = \sum_j p(i|j)p(j)$$

である。

Nielsen-Chuang の議論

[Nielsen-Chuang] の §2.4.3 は

Perhaps the deepest application of the density operator is as a descriptive tool for subsystems of a composite quantum system. Such a description is provided by the reduced density operator.

という文章で始まっている。この節では、[Nielsen-Chuang] の Box 2.6 から関連する議論を抜粋する。

A system を測定して事象 i を得る確率 $p(i)$ について考える。A system で閉じた記述をすれば

$$p(i) = \text{Tr}_{\text{sys}}\{\hat{P}_i\hat{\rho}\}$$

である。

他方、the universe において同じ測定を考えると

$$p(i) = \text{Tr}_{\text{uni}}\{(\hat{P}_i \otimes \hat{I})\hat{\rho}_{\text{uni}}\}$$

である¹³。

ここで

$$\text{Tr}_{\text{uni}}\{(\hat{P}_i \otimes \hat{I})\hat{\rho}_{\text{uni}}\} = \text{Tr}_{\text{sys}}\{\hat{P}_i \text{Tr}_{\text{res}}[\hat{\rho}_{\text{uni}}]\}$$

より

$$\hat{\rho} = \text{Tr}_{\text{res}}[\hat{\rho}_{\text{uni}}]$$

となる。

参考文献

[Feynman]

Feynman 「Statistical Mechanics」 (Benjamin, 1972).

[Nielsen-Chuang]

Nielsen, Chuang 「Quantum Computation and Quantum Information」 (Cambridge, 2000).

[富田]

富田 「量子情報工学」 (森北出版, 2017).

(2026-06-11)

¹³この式で、 $\hat{I} = \sum_j \hat{P}_j$ とすれば、 $p(i) = \sum_j p(i, j)$ となる。