

## Entanglement の周辺

ふじ い じゅん いち  
藤 井 淳 一

(大阪教育大学 理数情報部門)

(2023 年 3 月 11 日 受付)

概要：量子もつれは量子力学の典型的性質で、量子暗号・量子通信や、最近では量子コンピュータの新方式として注目されているが、実は量子情報という狭い分野の話であった。しかし、最近ブラックホールの重力理論で von Neumann エントロピーが活躍し始めて、一気に理論物理学の表舞台に躍り出た。現在注目中のこの話題を巡って、数学教育的に必要な重要と思われる知識を眺め、今後必要となるかもしれないテンソルネットワークの入り口として行列積状態の簡便な構成について提案したい。

検索語：量子もつれ (quantum entanglement), 行列積状態 (MPS), 量子情報・エントロピー

### はじめに

2022 年度ノーベル物理学賞は量子もつれに関する実証実験に与えられ、ようやく量子もつれが注目されだしたようである。そこまでに至る今回の話の歴史的背景を次頁に（私的に）年表化してあるが、量子もつれとそのエントロピーの話で、2 大天才（アインシュタイン・ホーキング）の予想・主張が間違っていたことに起因することは興味深い。しかしさすがに天才といわれる所以、間違い方が科学の発展に大いに寄与することになり、間違い方も天才的と言える。長年量子情報の卒研ゼミをやってきたが、アインシュタインの名前に負けて、所謂「隠れた変数理論」が正しいと思いこんでゼミでレポートしてきた熱心な学生がいたので、「よく読めばこれは違っているとテキストにあるでしょう?」と言って窘めたことを思い出す。

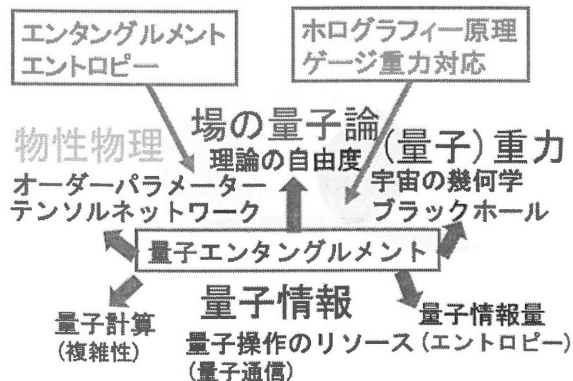
量子もつれ (quantum entanglement) については、量子情報ではよく使われているが、一般的には、アインシュタインの量子力学に対する攻撃として使われた **EPR 状態**、もしくはその問題部分の **EPR パラドクス** で知られている概念である (Einstein-Podolsky-Rosen)。情報伝達が光速を超える部分がパラドクスと言われる所以であるが、後にはパラドクスではなく量子力学の正しさが示され、誤解を生む用語であるが「量子テレポーテーション現象」として認められることになった。それは、波束収縮による量子相関が量子を遠くに離してもなくなるので、片方の測定後、瞬時にもう一方も収縮するコペンハーゲン解釈ベースの議論であった。皮肉にも、EPR 状態そのものが「量子もつれ状態」の典型であり、このような量子力学特有の現象を起こすものである。量子もつれは「量子暗号」などには応用されたが、一般にはあまり知られていなかった。最近、量子もつれの日本の第一人者 古澤明らによって、光の量子もつれを利用した「光量子コンピュータ」が提案され、俄然注目されることになった [10]。とはいえ、基本的に量子情報関連の話で、お話としての EPR パラドクスは知っていても、一般の物理学者の研究自体にかかわるものではなく、物理学の片隅の一分野に過ぎなかったと言える。

## — 年表 —

- 1872-1900 **Boltzmann-Max Planck** エントロピー  $S = -k \log W$  ( $k$ : Boltzmann 定数)  
統計熱力学の概念・エントロピーは減らない (熱力学第 3 法則)
- 1932 von Newmann “Mathematical Foundations of Quantum Mechanics”  
射影測定理論 (コペンハーゲン解釈)・von Newmann エントロピー
- 1935 **EPR パラドクス** EPR-state による「隠れた変数理論」での量子力学への疑問  
後の量子もつれ状態による「量子テレポーテーション」
- 1948 **Shannon** エントロピー=平均情報量・(古典) 情報理論  
in “Mathematical Theory of Communication”, one time pad 暗号の有効性も証明
- 1964 Bell による「隠れた変数理論」の理論的否定  
**Bell の不等式**  $\equiv$  **CHSH 不等式** はこの理論ベースだったが、成り立たない!  
Clauser-Horne-Shimony-Holt
- 1972 Clauser-Freedman による上記の実験確認成功 (CHSH の最初の C).
- 1972 Hawking-Bekenstein **ブラックホールエントロピー**=ホライゾンの面積  
「ブラックホール熱力学」で、情報喪失での量子力学の矛盾を指摘し論争となる.
- 1980 **Tsirelson 不等式** 量子力学で、CHSH 不等式の修正すべきもの
- 1991 量子暗号 **E91 Ekert**: Tsirelson's bound を利用した量子暗号
- 1994 Susskind-'t Hooft による超弦理論的な情報喪失予想の反論 **ホログラフィック原理**
- 2004 Hawking が上記情報喪失仮説の失敗を認め、情報パラドクスの解決に向かう.  
**AdS-CFT 対応** (ホログラフィック理論) による、情報保存が認められた.
- 2006 笠-高柳: 上記がちゃんと (ホログラフィック) エンタングルメントエントロピー= von Neumann エントロピーとして合致することを示す.
- 2022 **A.Aspect, J.Clauser, A.Zeilinger** ノーベル物理学賞 量子もつれ光子の実験

しかし、ホーキングも量子力学の攻撃として「ブラックホールの情報消失予想」を提示したが、これもまた否定的解決を迎え、彼自身が描いた**ブラックホールエントロピー**と、フォンノイマンが当初から導入していた「量子 (情報) エントロピー」(フォンノイマンエントロピーと呼ばれる) と AdS-CFT 対応でつながることがわかり、それは量子もつれの度合いを表していることで、**エンタングルメントエントロピー (EE)** と新たに命名された。エントロピーはもともと熱力学の概念であるが、シャノンが情報理論で「エントロピー」用語を (フォンノイマンに勧められ?) 使ったが、既に量子エントロピーはあったのである。しかし、今迄どちらかと言えば脇役の量子情報理論が、この局面で一気に主役に躍り出たと見るができる。実際、この発見にかかわった高柳匡氏のプレゼン資料の下図 [28] を見れば、当事者が一番そう感じているだろう:

## 「量子系のエンタングルメント」=「量子系の幾何学」



この現在ホットな話題について、専門的な研究や解説は、フォローできそうもないほど爆発的に増加しているし、この研究にかかわっているわけでもないの、ここでは一歩引いた形で、言わば量子情報科学から見たこの話題、および量子情報科学的にフィードバックしてきて今後必要になりそうな知識について、現時点でわかっていることをまとめてみたい。

## I. 量子もつれ状態と分離状態

一般に密度行列  $\rho$  は、 $\rho \geq 0$ ,  $\text{Tr}\rho = 1$  となるもののことを言い、特に状態（ベクトル） $x$ （単位ベクトル）で表される密度行列  $\rho = xx^*$ （階数 1 の射影行列）は純粋状態（行列）と呼ばれている（ベクトルの方も同様に呼ばれる）。しかし、これがテンソル積の分解にシンクロしているか否かで密度行列の性質が変わってくる。テンソル積空間上の作用素なので、 $\sum_j \lambda_j A_j \otimes B_j$  と分解可能だが、 $A_j, B_j$  非負定値行列とも限らないし  $\lambda_j$  も非負ですらない。この分解形の行列で下記のようにうまく編成し直して、下記のように密度行列  $A_j, B_j$  のテンソルの凸和にできるときは量子状態（再度密度行列）を表すので、厄介なことに区別が付きにくい。このように

$$\rho = \sum_j t_j A_j \otimes B_j$$

と書ける密度行列において  $A_j, B_j$  も密度行列で、 $t_j \geq 0$ ,  $\sum_j t_j = 1$ （即ち、各項が密度行列のテンソル積行列の凸和）になっているとき、分離状態 (separable state)（行列）と呼ばれ、そうでないときは量子もつれ状態 (entangled state)（行列）と言う。純粋状態、すなわちベクトルに対しても同様に呼ばれるが、簡単な例示をすると、 $x = x_1 \otimes x_2$ （すべて単位ベクトル）になっているときは

$$xx^* = x_1 x_1^* \otimes x_2 x_2^*$$

なので密度行列としても分離状態で、

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(e_1 \otimes e_2 \pm e_2 \otimes e_2), \quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(e_1 \otimes e_2 \pm e_2 \otimes e_1)$$

において  $x_1 = \frac{e_1 \pm e_2}{\sqrt{2}} \otimes e_2$  なので分離状態だが、 $x_2$  は後述のように量子もつれ状態である（マイナスの場合が EPR 状態  $\Psi$ ）。

これは元々は粒子間の量子相関を図る CHSH (Clauser-Horne-Shimony-Holt) 不等式（元は同等な Bell 不等式）では、分離状態主体に想定されていて、2022 年度のノーベル賞の受賞理由 (Clauser は受賞者の一人) となった不等式に収まらない量子もつれが存在したのであった。量子もつれも込めた修正版が Tsirelson 不等式であるが、理想的には「2 方向の相関」をもとめているものの設定が込み入っていて、判定も煩雑なので、先の論文 [6] でのデータの統計的な相関を盗聴基準としている E 91 暗号でもない限り、もはや判定条件として使われることはなくなったといえよう（この論文で参照した [25, 22, 18, 2, 3, 15] など大いに参考になる）。厳密に峻別できるかの証明もなされていないようでもあって、もう少し扱いやすい峻別規準が求められているのである。しかし見た目だけではどちらになっているかがすぐにはわからない場合が多いので、いろいろな判定条件が吟味されてきた。オープンアクセスの [7] に詳説してあるので、列挙にとどめるが、ほか

にもエントロピーと絡めた、次章で述べるエンタングル測度と呼ばれる様々な判定法がある：

### (1) Choi-Woronowicz-Horodecki 基準

線形写像  $\Lambda$  に対する Choi matrix ( $E_{ij}$  は行列単位)：

$$C_\Lambda = \sum_{i,j} E_{ij} \otimes \Lambda(E_{ij}),$$

は、もう少し一般的に Choi Map として、 $\rho = \sum_j A_j \otimes B_j$  について

$$C_\Lambda(\rho) = \sum_j A_j \otimes \Lambda(B_j)$$

に拡張されている [26]。これを使った判定法が知られている：

【Choi の判定条件】(Woronowicz-Horodecki criterion という表記もある)

任意の単位的正写像  $\Lambda$  について、Choi map  $C_\Lambda(\rho) = (I \otimes \Lambda)\rho$  が非負になることは  $\rho$  が分離状態の同値条件で、これが非負でない正写像  $\Lambda$  の存在が、 $\rho$  が量子もつれの同値条件である。

### (2) Entanglement Witness Theorem

Horoidecki 一族の結果として EWT と呼ばれる定理 [13, 14] があり、下記の判定用のエルミット行列  $H$  を Entanglement Witness と呼んでいる：

【EWT】 $\rho$  が量子もつれ状態の密度行列であるための同値条件は

$$\exists H = H^*; \operatorname{Tr} H \rho < 0, \operatorname{Tr} H \sigma \geq 0 \quad (\forall \text{分離密度行列 } \sigma).$$

これは、分離状態が凸集合であることで、Hahn-Banach の分離・拡張定理を使って得られる。

さて最も単純なエンタングル純粋状態は EPR 状態と呼ばれるもので、ここで Dirac 記法を導入しておこう ([20, 25])。本論で扱うのは  $n$ -qubit の状態に限るので、純粋状態の場合、 $\mathbb{C}^2$  の単位ベクトルが 1-qubit、 $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 = \mathbb{C}^{2^2}$  なら 2-qubit で、 $(\mathbb{C}^2)^{\otimes n} = \mathbb{C}^{2^n}$  の単位ベクトルが  $n$ -qubit を表す。通常正規直交基底を

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

としておく。これらはケットベクトルと呼ばれ、(たいいてい数値や状態自身の記号で) ラベル  $j, \Phi$  などを使って、 $|j\rangle, |\Phi\rangle$  のように表わす。対してこの転置共役をブラベクトルという：

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

上記のように基底のみの場合は複素係数がないので単なる転置になっているが。

この記号の利点は、テンソル積の記号を略してラベルの列記で表されることである：

$$|j\rangle \otimes |k\rangle \otimes |\ell\rangle = |j k \ell\rangle.$$

また、内積はブラ・ケットの積で  $\langle j||k\rangle = \langle j|k\rangle$  で表されるし、純粋状態ベクトル  $|j\rangle$  の密度行列は、(積でもテンソル積でもよく)

$$|j\rangle\langle j| = |j\rangle \otimes \langle j|$$

で書けるので便利である。

さて、それで EPR 状態など（前述の  $\rho_2$ ）を表してみよう。

$$|\Psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle \pm |10\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \pm 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

であった。この密度行列は、

$$\begin{aligned} |\Psi_{\pm}\rangle\langle\Psi_{\pm}| &= \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| \otimes |1\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 1| \otimes |0\rangle\langle 0| \pm (|0\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0| \otimes |1\rangle\langle 1|)) \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \pm \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \pm 1 & 0 \\ 0 & \pm 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

である。これが量子もつれ状態であることは一目では分らないが、この entanglement witness  $H$  は

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad H|\Psi_{\pm}\rangle\langle\Psi_{\pm}| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \mp 1 & 0 \\ 0 & \mp 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{トレース} - 1)$$

であるので、上記定理から判定できる。分離状態ではトレースが非負になる確認もしておこう。2つの非負行列のテンソル積

$$A \otimes B \equiv \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$$

に  $H$  をかけたトレースが非負であればよい。  $A, B$  が非負行列であるための条件は

$$a_{ii}, b_{ii} \geq 0, \quad \sqrt{a_{11}a_{22}} \geq |a_{12}| = |a_{21}|, \quad \sqrt{b_{11}b_{22}} \geq |b_{12}| = |b_{21}|$$

であるので、

$$\begin{aligned} \text{Tr}H(A \otimes B) &= a_{11}b_{11} - a_{21}b_{12} - a_{12}b_{21} + a_{22}b_{22} \geq a_{11}b_{11} - 2|a_{12}||b_{12}| + a_{22}b_{22} \\ &\geq a_{11}b_{11} - 2\sqrt{a_{11}a_{22}b_{11}b_{22}} + a_{22}b_{22} = \left(\sqrt{a_{11}b_{11}} - \sqrt{a_{22}b_{22}}\right)^2 \geq 0 \end{aligned}$$

となって、 $H$  の資格が確認できた。  $\square$

$$|\Phi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm |11\rangle)$$

で定められる状態も同様に、密度行列  $|\Phi_{\pm}\rangle\langle\Phi_{\pm}|$  の縮約状態は  $\frac{1}{2}I$  となり、併せて **Bell 状態** と呼ばれる。

さてこの章の残りでは、部分的に「測定する」「測定しない」の2事象について述べておこう。

コペンハーゲン解釈に基づく量子測定では、物理量（エルミット行列）を状態で測定することになり、測定値は物理量の固有値で、測定後はその固有ベクトルに収縮するのであった。そのために物理量は固有値分解しておくことが必要で、スペクトル射影は単位固有ベクトルの密度行列になる

(ここで量子情報での仮定として、測定値の峻別のため固有値の重複度はすべて1としておく):  $\lambda_i$  が固有値,  $x_i$  が対応する単位固有ベクトルなら、固有値 (スペクトル) 分解は

$$A = \sum_j \lambda_j x_j x_j^* = \sum_j \lambda_j |x_j\rangle \langle x_j|$$

であり、状態  $|\Phi\rangle$  の測定で測定値  $\lambda_j$  が出た瞬間に、 $|\Phi\rangle$  は  $|x_j\rangle$  に有無を言わず収縮し、その測定値が出る確率は  $\|(|x_j\rangle \langle x_j|)|\Phi\rangle\|^2$  であった。収縮は密度行列  $|x_j\rangle \langle x_j|$  をかけて長さを1に取り直してもよい (実際はこの長さで割るのだが、結果が出ているので確率は0でなく、この長さも0でないので安心して割り算できる)。アインシュタインはもともとこの解釈に不満だったのであるが、実験の裏付けもあって今のところ認められている枠組みである。

上記の  $|\Psi\rangle = |\Psi_-\rangle$  のようなテンソル積状態は複数 (上記では2つ) の粒子を表す。前の方の粒子のみ測定は物理量  $A \otimes I$  による測定である。簡単のため測定値を  $\pm 1$  にして

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = 1|0\rangle\langle 0| + (-1)|1\rangle\langle 1|$$

として1を測定したとすると、 $|0\rangle$  に収縮するため、 $|0\rangle\langle 0|$  がかかるとみると、 $|10\rangle$  では  $\langle 0|1\rangle = 0$  の内積が現れて消えるので、 $|\Psi\rangle$  は  $|01\rangle$  に収縮することになる:

$$(|0\rangle\langle 0| \otimes I)|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle\langle 0| \otimes I)(|01\rangle - |10\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle(\langle 0|0\rangle|1\rangle - \langle 0|1\rangle|0\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}|01\rangle \xrightarrow{\text{正規化}} |01\rangle.$$

そこで、別の人が同じ物理量で後者の方の測定を行うと、1が出る確率は

$$(I \otimes |0\rangle\langle 0|)|01\rangle = |0\rangle \otimes (|0\rangle\langle 0|1\rangle) = |0\rangle \otimes 0 = 0$$

なので0、すなわち必ず-1しか測定しない。前が-1の時、同様に1の測定になる。つまり前と後ろで真逆になるので、情報共有できるのである。しかもこの量子もつれは2つの粒子を原理的にいくらかでも離すことができるので、測定者が何億光年離れていてもこの事象は起こり、文字通り瞬時に情報共有できることになり量子テレポーテーションと呼ばれた。これは光速を超えた情報共有になるので、もともと量子力学の考え方に懐疑的なアインシュタインがかみついた「EPRパラドクス」として知られることになった。しかし、この情報共有は「片方が測定後」という条件があって、その確認は古典的な通信手段しかできないのでアインシュタイン原理には違反していない。

一方、「片方を測定しないでもう一方を見る」というのは部分トレースを取ることに対応する。つまり後者を測定しないというのは後者の空間でトレースを取ることであり、スカラーのテンソル積なので消える:

$$\rho \equiv |\Psi\rangle\langle\Psi| = \frac{1}{2} \left( |0\rangle\langle 0| \otimes |1\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 1| \otimes |0\rangle\langle 0| - (|0\rangle\langle 1| \otimes |1\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 0| \otimes |1\rangle\langle 1|) \right) \\ \xrightarrow{\text{部分トレース}} \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) = \frac{1}{2}I \quad (\text{前者 } A \text{ に縮約した状態と言って } \rho_A \text{ とかく}^{(\text{注1})}).$$

(注1) 量子情報の慣習であるが、前の方を送信側  $A$ 、後ろの方を受信側  $B$  と書く。それぞれ、送・受信者としては、頭文字から Alice, Bob と命名されている。因みにエラー  $E$  を起こす盗聴者は Eve である。

縮約状態は「トレースを行列代数の非可換積分と見れば、周辺分布」に当たっている。可換なケースで2事象が独立であれば周辺分布から元の分布を再構成できるが、非可換なら猶更無理であることは注意されたい。単にもう一方の分布を(測定せず)平等に無視したとみることができる。

さて、一般的な2-qubit 純粋状態ベクトル  $|x\rangle = \sum_{i,j} c_{ij} |ij\rangle$  について縮約状態をみておこう。密度行列は、係数行列  $C = (c_{ij})$  としておくと、下記で  $B$  部分では  $\ell \neq j$  は非対角しか値が出ずトレースで消えるので、 $\ell = j$  のみ残り、係数部分は行列の積になっていることがわかる：

$$\begin{aligned} \rho_A \equiv |x\rangle\langle x|_A &= \left( \sum_{i,j,k,\ell} c_{ij} \overline{c_{k\ell}} |ij\rangle\langle k\ell| \right)_A = \left( \sum_{i,j,k,\ell} c_{ij} \overline{c_{k\ell}} |i\rangle\langle k| \otimes |j\rangle\langle \ell| \right)_A \\ &= \sum_{i,j,k} c_{ij} \overline{c_{kj}} |i\rangle\langle k| = \sum_{i,k} \left( \sum_j c_{ij} \overline{c_{kj}} \right) |i\rangle\langle k| = CC^*. \end{aligned}$$

同様に  $\rho_B = C^*C$  が得られるので、これらの固有値は等しいことに注意しておこう。

もう一つ最後に注意をしておくが、純粋状態に対応する密度行列は階数1の射影行列なので、対角成分が1ひとつでは0の対角行列にユニタリ変換できる。この行列は必ず2つの階数1の射影のテンソルで書ける(分離状態形)が、元の状態が分離状態と言うわけではない。なぜならユニタリは全空間の変換で、必ずしもテンソル積と両立していないからである。つまり、テンソル積と両立したユニタリ  $U_1 \otimes U_2$  による変換を考えないといけない、即ち局所操作が重要になるのである。つい勘違いしそうになるのであえて記しておく。

## II. エンタングルメントエントロピーと、エンタングルメント測度

さて、上記のような(通常純粋状態の密度行列)  $\rho = \rho_{AB}$  の縮約状態  $\rho_A$  の von Neumann entropy

$$s(\rho_A) = \text{Tr} \eta(\rho_A) \quad \text{ただし} \quad \eta(x) = \begin{cases} -x \log x & (x > 0) \\ 0 & (x = 0) \end{cases}$$

のことを  $\rho$  のエンタングルメントエントロピー  $E(\rho)$  という<sup>(注2)</sup>。  $\rho$  が上記の Bell 状態のように、縮約状態が  $\frac{1}{2}I$  となるとき

$$E(\rho) = \text{Tr} \eta \left( \frac{1}{2}I \right) = -2 \times \frac{1}{2} \log \frac{1}{2} = -(-\log 2) = \log 2$$

となる。このように一般に  $n$ -qubit で縮約状態が  $\frac{1}{n}I$  となるものを最大エンタングル(メント)状態と呼び、実際エントロピーの最大値  $\log n$  になる。

前章の記号でいえば、EE は  $\rho_A = CC^*$  についてのみで定めているが、純粋状態なら  $\rho_B = C^*C$  となるので、固有値が等しく、結果  $s(\rho_A) = s(\rho_B)$  となって、どちらで定義しても良いことになる。

(注2)わざわざ関数  $\eta$  を使ったのは不定形を防止するためで、物理のテキスト・論文ではほとんど注意されず、このような学者の慣習は教育的ではないので、初学者には配慮すべきという配慮である。例えば、個別に計算してしまうと、

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ のとき } -P \log P = - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\infty \end{pmatrix}$$

となり、 $0 \times (-\infty) = 0$  としなければならぬからである。 $\eta(P)$  なら問題なく0行列になる(関数解析的处理)。

さて、これがなぜ重要なものになるかをざっと眺めておく（本格的には高柳さん自身の [24] であるが、日本語で読みやすいのは [30, 17] 辺りであろう）：ブラックホールに吸収されるか否かの境界をホライゾンというが、ホーキングらは温度を持った黒体＝熱力学的考察によって、その表面積  $S$  が熱力学的エントロピーに比例するとして、いわゆる **Beckenstein-Hawking entropy**  $s_{BH}$  との関係を与えた（単位系は簡略化）：

$$s_{BH} = \frac{S}{4G}.$$

ただ注意したい点として本来 3 次元のものが 2 次元に比例するという違和感があり、それは単に量子重力の特徴だともいえるが、「ブラックホールで熱力学的な情報が（ユニタリ変換的ではなく）消える」と Hawking の考え、所謂「情報喪失予想」を述べたものだから、受け入れたものもいるが、論争になった（量子情報にも詳しい Preskill との賭けの対象にもなった）。実はこれと似たような構図のものは多く目にする。個人的に興味を持っていた TQC の分野でも、例えば超電導で中身の 3 次元部分（バルク）で絶縁体なのに表面（エッジ）では抵抗 0 になるが、両者は密接に関連する所謂「バルク-エッジ対応」だとか、もっと一般的に超弦理論の有効性を支えた「AdS/CFT 対応」(Anti de Sitter/conformal field theory correspondence) と呼ばれる「負曲率の重力時空と、1 次元低い共形場理論との対応」などよく目にする。トホーフとサスキンドはそこに目をつけ、消失予想に反論した。あたかも 3 次元の物体が二次元から照射された光で「ホログラム的に投影」できるかのごとく「ホログラフィック原理」と呼ばれた。さらに笠-高柳は実際に共形場での von Neumann エントロピーで、 $S_{BJ}$  が求められることを示し、消失予想は完全に否定されたことになる。天才は間違った場合も科学の発展に寄与したのであり、量子情報が重力理論に入り込んだ切っ掛けを与えたのである（その描像がイントロの高柳氏の図である）。von Neumann エントロピーが有効な概念で、熱力学と情報理論のエントロピーは形のみでなく中身も大いに関連していることがわかった瞬間でもあった。

という事で使える量子情報の概念は多くあり、EE をめぐる議論が爆発的に展開され始めた。その重要な性質や他指標との関連性についてあまりにも多くの方向性がある、ここではメモ程度にとどめておくが、特に重要な「相対エントロピー関連」は次章で詳しく見ることにする。

特に下記の (A1) に関連するが、純粋分離状態の場合にはこのエントロピーは 0 になる。実際、このケースでは、階数 1 の射影行列なので、分離状態は階数 1 の射影のテンソル  $\rho = P \otimes Q$  であるので、

$$E(\rho) = \text{Tr} \eta(\rho_A) = \text{Tr} \eta(P) = 0$$

となる。逆にこれが 0 となる場合は固有値は 0, 1 のみなので階数 1 の射影にほかならず、これは分離純粋状態の一つの判定基準でもある。

一般の相関測度（ここでは 2-qubit についての指標）を  $E_{\#}(\rho_{AB})$  で表し、次の性質を満たすとき、(性質の良い) エンタングルメント測度 (entanglement measure) と呼ぶ ([30, 14]):

(A1) 非負の量であり、分離状態 に対してゼロ。

ただしゼロが分離状態の特徴づけになっているとき忠実という。

(A2) 純粋状態に対してエンタングルメントエントロピーと一致。



(A3) LOCC に対して平均的に単調減少.

**LOCC** (local operations and classical communications) とは, テンソル積に関する局所操作と, 量子通信との合成) のことでその写像を  $\Lambda$  で表す.

エンタングルメント測度に関連する性質としては,

- ・漸近的連続性 (asymptotic continuity) :  $\rho_n, \sigma_n$  を  $d_n$  次元の量子状態としたとき,

$$\|\rho_n - \sigma_n\|_1 \rightarrow 0 \Rightarrow \frac{E_{\#}(\rho_n) - E_{\#}(\sigma_n)}{\log d_n} \rightarrow 0 \quad (n \rightarrow \infty)$$

任意の量子状態に対して  $E_{\#}^{\infty} = \frac{E_{\#}(\rho_{AB}^{\otimes n})}{n}$  が定義できるとき,  $E_{\#}$  は **regularizable** であるという.

- ・  $d$  次元最大エンタングル状態の値が  $\log d$  になるとき, **normalizable** という.
- ・それぞれの不等式的性質

$$\text{convexity } E_{\#}((1-t)\rho + t\sigma) \leq (1-t)E_{\#}(\rho) + tE_{\#}(\sigma)$$

$$\text{subadditivity } E_{\#}(\rho_{A_1B_1} \otimes \sigma_{A_2B_2}) \leq E_{\#}(\rho_{A_1B_1}) + E_{\#}(\rho_{A_2B_2})$$

$$\text{superadditivity } E_{\#}(\rho_{A_1B_1} \otimes \sigma_{A_2B_2}) \geq E_{\#}(\rho_{A_1B_1}) + E_{\#}(\rho_{A_2B_2})$$

$$\text{strong superadditivity } E_{\#}(\rho_{A_1A_2B_1B_2}) \geq E_{\#}(\rho_{A_1B_1}) + E_{\#}(\rho_{A_2B_2})$$

$$\text{monogamy } E_{\#}(\rho_{AB_1B_2}) \leq E_{\#}(\rho_{AB_1}) + E_{\#}(\rho_{AB_2})$$

ここで,  $d$  次元最大エンタングル状態  $\Phi^+ = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum |jj\rangle$  としておき, いくつかのエンタングル測度を述べ, 満たす性質を括弧内に省略形で記す. 詳細は [30] 参照のこと:

$$\text{Distillable entanglement } E_D(\rho_{AB}) = \sup_r \left\{ r \mid \lim_{n \rightarrow \infty} \inf_{\Lambda \in \text{LOCC}} \|\Lambda(\rho_{AB}^{\otimes n}) - \Phi_{2^{rn}}\|_1 = 0 \right\}$$

(str.) entanglement concentration とも言い,  $\max\{S_A - S_{AB}, S_B - S_{AB}\}$  以上.  
hashing bound

$$\text{Entanglement cost } E_C(\rho_{AB}) = \inf_r \left\{ r \mid \lim_{n \rightarrow \infty} \inf_{\Lambda \in \text{LOCC}} \|\Lambda(\rho_{AB}^{\otimes n}) - \Phi_{2^{rn}}\|_1 = 0 \right\}$$

(faith., conv., sub.)

$$\text{Entanglement of formation } E_F(\rho_{AB}) = \inf_{\rho_{AB} = \sum p_j |\psi_j\rangle\langle\psi_j|_{AB}} \sum p_j S(\text{Tr}_B(|\psi_j\rangle\langle\psi_j|_{AB}))$$

$\left( E_C(\rho_{AB}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{E_F(\rho_{AB}^{\otimes n})}{n} \right)$  は entanglement of creation ともいう (faith., aym., conv., sub.).

$$\text{Squashed entanglement } E_{sq}(\rho_{AB}) = \frac{1}{2} \inf \rho_{AB} = \text{Tr}_C \rho_{ABC} S_{AC} + S_{BC} - S_C - S_{ABC}$$

$I(A:B|C)$

(assym., conv., add., mono., faith.)

更に Relative entropy of entanglement  $E_R$  があるが、これについては次章で詳しく述べる。上記のように一番いい性質を持つのは  $E_{sq}$  であるが、計算はかなり難しいらしい。これらの既知の関係は以下のとおり：

$$E_D \leq \left\{ \begin{array}{l} E_{sq} \leq E_C \\ E_R \end{array} \right\} \leq E_F \leq E_P, \quad E_D \leq E_R \leq E_P, \quad E_{sq} \leq \frac{I}{2} \leq E_P, \quad E_R \leq I.$$

ほかにも様々な測度が議論されている（相対部分での  $f$ -divergence 化, PPT バージョン, Rényi 化 等々）ので, [11, 12, 14] などでも参照されたい。

### III. 相対エンタングルメントエントロピー

下で述べるように、高柳氏自身 [24] も、積極的にこの測度概念を取り入れているし、数学的には最も素直な展開である。古典情報理論における Kullback-Leibler 情報量（ダイバージェンス, 相対エントロピー）は、統計理論の赤池情報量規準などにも採用された重要なもので、その非負性は Shannon の不等式と呼ばれるもののひとつであるが、その量子情報版として、東工大の情報科学創設に関わられた梅垣壽春先生<sup>(注3)</sup>の相対エントロピー [29]（我々周辺では敬意をこめて「梅垣相対エントロピー」と呼んでいる）

$$s(\rho|\sigma) = \text{Tr}(\rho(\log \rho - \log \sigma)) \quad (\text{支持射影の関係が } \text{supp} \rho \leq \text{supp} \sigma \text{ でないときは } \infty \text{ とする}).$$

これは古典ダイバージェンスの完全な拡張になっている。上記と同じように測度を定義すると、

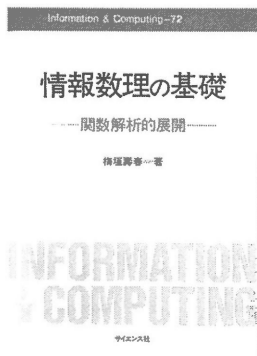
**Relative entropy of entanglement**

$$E_R(\rho_{AB}) = \min_{\sigma_{AB}:\text{sep.}} s(\rho_{AB}|\sigma_{AB})$$

(faith., aymm., conv, sub.)

von Neumann エントロピー が物理学で有効に使われて驚いていたと思ったら、梅垣エントロピーまで「エンタングルメント測度」として使われるようになって2度吃驚である。これは、しかも次に述べるようにエンタングルメントエントロピーとなって、その重要な性質が全て梅垣エントロピーの性質から出ることになるのである。

(注3) 先生に直接指導を受けたことはないが、学界発表時にはよくコメントをいただき、特に古田孝之先生の指導下で東京理科大での学位論文審査の発表の時も、聴きに来ておられ、学位を取得したときに著書を送っていただいた。恩師の中村正弘先生と親しいとはいえ、お世話になって再度この場でお礼を述べたい：



贈呈  
藤井 淳一 様  
雅正  
甲戌春 日 存念  
著者 梅垣 壽春

しかも, Witten[32]などは, もっと突っ込んで作用素環でも最も深い III 型で使われる梅垣エントロピーの荒木不二洋先生<sup>(注4)</sup>による拡張「荒木エントロピー」でこのことを拡張しようとしている. そのせいだと思われるが, このエントロピーの背景にある作用素環論の分野では有名な「富田竹崎理論」が, 一般の物理学者まで呪文のように唱えることになった (eg., [21]).

さて, 梅垣エントロピーの重要な性質が知られている (ここでは密度行列に限る):

$$\text{正值性: } s(\rho|\sigma) \geq 0; \quad s(\rho|\sigma) = 0 \iff \rho = \sigma.$$

$$\text{情報単調性: } s(\rho|\sigma) \geq s(\mathcal{E}(\rho)|\mathcal{E}(\sigma)) \quad (\mathcal{E}: \text{TPCP map}^{(\text{注5})})$$

$$\text{同時凸性: } s((1-t)\rho_1 + t\rho_2|(1-t)\sigma_1 + t\sigma_2) \leq (1-t)s(\rho_1|\sigma_1) + ts(\rho_2|\sigma_2).$$

ここで, [23, Theo.4.] の条件を使いやすく書き直しておく:

**定理.**  $\sigma = \sigma_{AB}$  が分離状態なら, 同空間の全ての密度行列  $\rho$  について, 相対エントロピー存在下で

$$s(\rho_A) - s(\rho) \leq s(\rho|\sigma) - s(\rho_A|\sigma_A), \quad s(\rho_B) - s(\rho) \leq s(\rho|\sigma) - s(\rho_B|\sigma_B).$$

**証明.** 作用素不等式  $\log(\sigma_A \otimes I) \geq \log \sigma$  が成り立つので, 任意の  $\rho$  について

$$-\text{Tr}(\rho_A \log \sigma_A) = -\text{Tr}(\text{Tr}_B \rho \log(\sigma_A \otimes I)) \leq -\text{Tr} \rho \log \sigma$$

となって,

$$s(\rho|\sigma) - s(\rho_A|\sigma_A) - s(\rho_A) + s(\rho) = \text{Tr}(\rho_A \log \sigma_A - \rho \log \sigma) \geq 0$$

が言える.  $B$  側も同様. □

**系.**  $E_R(\rho) \geq \max\{s(\rho_A) - s(\rho), s(\rho_B) - s(\rho)\}$ , 特に,  $\rho$  が純粋状態であれば,  $E_R(\rho) \geq E(\rho) \equiv s(\rho_A)$ .

**証明.** 最小値で定義されているので, attain する分離状態  $\hat{\sigma}$  を取ると, 定理より

$$s(\rho_A) - s(\rho) \leq s(\rho|\hat{\sigma}) - s(\rho_A|\hat{\sigma}_A) \leq s(\rho|\hat{\sigma}) = E_R(\rho)$$

となり ( $B$  も同様),  $\rho$  が純粋なら射影なので,  $s(\rho) = 0$  となる. □

それでは, 純粋状態の場合に  $E(\rho) = E_R(\rho)$  を示そう.

等式となる  $\sigma$  をを見つけるために, 局所ユニタリ変換で  $x = \sum_k \alpha_k |kk\rangle$  について  $\rho = xx^* = \sum_{k,\ell} \alpha_k \bar{\alpha}_\ell |kk\rangle\langle\ell\ell|$  としてよい. このとき,  $\rho_A = \sum_k |\alpha_k|^2 |k\rangle\langle k|$  なので,  $E(\rho) = \sum_k |\alpha_k|^2 \log |\alpha_k|^2$  になっているので, 対応する分離状態  $\sigma = \sum_k |\alpha_k|^2 |kk\rangle\langle kk|$  を考えれば,  $\ell = k$  のみ残って

$$\log \sigma = \sum_k (\log |\alpha_k|^2) |kk\rangle\langle kk|, \quad \rho \log \sigma = \sum_k (|\alpha_k|^2 \log |\alpha_k|^2) |kk\rangle\langle kk|$$

<sup>(注4)</sup> 昨年度末にお元気だった先生の訃報が届いた. この場を借りてお悔やみ申し上げます.

<sup>(注5)</sup> trace-preserving completely positive map 量子通信路を表す写像で, トレースを変えず, 行列として  $(\rho_{ij}) \geq 0 \Rightarrow (\mathcal{E}(\rho_{ij})) \geq 0$  を満たす写像 (局所性が加われば LOCC), 部分トレースは TPCP であり, 特にトレースのように可換な環に写す正写像は CP になる. cf. [26, 12].

なので、次の等式の逆向きが分かっているので等式になる。

$$E_R(\rho) \leq s(\rho|\sigma) = -s(\rho) - \text{Tr} \rho \log \sigma = 0 - \sum_k |\alpha_k|^2 \log |\alpha_k|^2 \text{Tr} |kk\rangle\langle kk| = E(\rho). \quad \square$$

この梅垣エントロピーを利用すれば、エンタングルメントエントロピーの性質が得られる：

**劣加法性.**  $s(\rho) \leq s(\rho_A) + s(\rho_B)$  for  $\rho = \rho_{AB}$ .

**証明.** 積はテンソル毎で片方  $I$  なので、部分トレースが取れて

$$\begin{aligned} 0 \leq s(\rho|\rho_A \otimes \rho_B) &= \text{Tr} \rho (\log(\rho) - \log(\rho_A \otimes \rho_B)) = -s(\rho) - \text{Tr} \rho (\log(\rho_A) \otimes I) - \text{Tr} \rho (I \otimes \log(\rho_B)) \\ &= -s(\rho) - \text{Tr} \rho_A \log \rho_A - \text{Tr} \rho_B \log \rho_B = -s(\rho) + s(\rho_A) + s(\rho_B). \quad \square \end{aligned}$$

上記に出てくる量は量子相互情報量

$$I_\rho(A; B) \equiv s(\rho|\rho_A \otimes \rho_B) = s(\rho_A) + s(\rho_B) - s(\rho)$$

と呼ばれている。また、劣加法性の上位として、重要視されているのが、次の性質である：

**強劣加法性.**  $s(\rho_{AB}) + s(\rho_{BC}) \leq s(\rho) + s(\rho_B)$ .

**証明.**  $\rho = \rho_{ABC}$  として部分トレースで情報単調性を使うと

$$s(\rho_A) + s(\rho_{BC}) - s(\rho) = s(\rho|\rho_A \otimes \rho_{BC}) \geq s(\rho_{AB}|\rho_A \otimes \rho_B) = s(\rho_A) + s(\rho_B) - s(\rho_{AB})$$

より  $s(\rho_A)$  を消去して求める不等式が得られる。  $\square$

またそのほかの性質もすぐに出てくる。非負性、凸性、情報単調性はそれぞれ  $E_R$  の性質よりわかるので、非常に重宝する存在である。実際 [24] ではこの証明のためではないが、ふんだんに使われている重要な測度と言えよう。その中で特に注意すべきは、凸性であろう。von Neumann エントロピーは凹関数  $\eta$  で定義されているので当然凹関数になっているからである。しかし EE になると、凸関数なのである。これは相対エントロピー  $s(\rho|\sigma)$  で  $\sigma$  が分離純粋状態であれば、前述のように  $s(\rho|\sigma) = -s(\rho)$  となって逆になることを見るという視点がないとわかりにくいであろう。

#### IV. MPS の構成についての提案

最後に、MPS (Matrix Product State) について、新しいと思われる構成法とその形について述べておこう。MPS 自体は量子もつれ状態の計算にいまや必須とされている「テンソルネットワーク」の最も基本的な 1 次元版であるが、それにもかかわらず MPS の解説論文を調べても（細かな間違いも多くあって）構成法が数学的に明確でなかった。本来は以下に示すように学部学生レベルで理解できることであるので、線形代数の知識さえあれば十分理解できる教育的なスタイルで述べることを示そう。

ただし、設定としてはサイト数  $L$  (状態空間  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^{2^L}$ ) とし、元になる純粋状態  $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}_1$  に対応する Schmidt 分解

$$|\Phi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} c_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle$$

に現れる正規直交系  $\{\sigma_j\}$  を、簡単のため標準基底

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

に採用しておくことにする： $|\sigma_j\rangle \in \{|0\rangle, |1\rangle\}$ . MPS の有効性についても、あまり明確に述べられていないのでいろんな論文から推察した素人考えであるが、まともにテンソル積で考えるならば、固有空間への射影を考え

$$|\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle = (|\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle\langle\sigma_1, \dots, \sigma_L|) |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle$$

と係数部分も含めたテンソルで考えるのが筋であろうが、この行列部分のサイズは、 $2^L \times 2^L = 2^{2L}$  と馬鹿でかくなり、まともに計算機に掛けるとすぐにオーバーフローして、「(量子) 繰りこみ」と呼ばれるような簡略化が必要になったという歴史があるようである。行列部分は

$$|\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle\langle\sigma_1, \dots, \sigma_L| = |\sigma_1\rangle\langle\sigma_1| \cdots |\sigma_L\rangle\langle\sigma_L|$$

というように各状態に対応した 2 次行列のテンソル積になっているが、次元が増大するテンソル積を避けて「行列の積」で表現し、かつ小さいサイズの対応する行列で表現しようというのが MPS の狙いである。

一般的に述べられている MPS は、トレースを使った境界巡回型と呼ばれる

$$|\Phi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \text{Tr}(A(1)_{\sigma_1} \cdots A(L)_{\sigma_L}) |\sigma_1 \cdots \sigma_L\rangle$$

で、各行列  $A(j)_{\sigma_j}$  は同サイズの小さい正方行列である。一方境界開放型と呼ばれるものは

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} A[1]_{\sigma_1} A[2]_{\sigma_2} \cdots A[L-1]_{\sigma_{L-1}} A[L]_{\sigma_L} |\sigma_1 \cdots \sigma_L\rangle$$

で各行列のサイズ (隣とつながっているので**ボンド次元**と呼ばれている) は積が定義できればラバラでもよく、特に両端の  $A[1]$  はブラベクトル (横ベクトル),  $A[L]$  はケットベクトル (縦ベクトル) で、全体としてスカラーになっている。簡単なもので例示して違いを述べると、EPS 状態  $|\Psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$  では、(スカラーはどこでも入り込めるので別にして、0 の項を除くと)

$$\begin{aligned} \sqrt{2}|\Psi^-\rangle &= \text{Tr} \left( \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right) |01\rangle + \text{Tr} \left( \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right) |10\rangle \quad (\text{巡回型}) \\ &= \langle 0||X|1\rangle|01\rangle + \langle 1|(-X)|0\rangle|10\rangle = (\langle 0|0\rangle)|01\rangle + (-\langle 1|1\rangle)|10\rangle \quad (\text{開放型}) \end{aligned}$$

すなわち、

$$\begin{cases} A(1)_0 = A(2)_0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, & -A(2)_1 = A(1)_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ (A[2]_0)^* = A[1]_0 = \langle 0|, & (-A[2]_1)^* = A[1]_1 = \langle 1| \end{cases}$$

であり、一般的に表示すると、ビット反転パウリ行列  $X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$  を使って、

$$\begin{cases} A(1)_\sigma = \langle X\sigma|\sigma\rangle, & A(2)_\sigma = (-1)^\sigma \langle \sigma|X\sigma\rangle \\ A[1]_\sigma = \langle \sigma|, & A[2]_\sigma = (-1)^{\sigma+1} |\sigma\rangle \end{cases}$$

と書ける。

さて、それでは提案する構成法について述べるが、使う原理はごく単純なもので、

$$|\sigma_1 \cdots \sigma_L\rangle = \langle \sigma_1 \cdots \sigma_L | \sigma_1 \cdots \sigma_L \rangle |\sigma_1 \cdots \sigma_L\rangle$$

という自明な式変形で、テンソル積の内積なので、個々の内積の積に分解できたり、結合法則で組み替えて行列を合成したりするだけ（明確なのになぜ書かれていないかは謎）である。表示上の注意として

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

なども使う。提案構成の形は

**境界開放型 MPS.** 両端は  $A[1]_{\sigma_1} = \langle \sigma_1|$ ,  $A[L]_{\sigma_L} = |\sigma_{L-1}\rangle$  で、他は下の 2 次行列で書ける：

$$A[j]_{\sigma_j} = \begin{pmatrix} \langle 0|\sigma_{j-1}\rangle\langle\sigma_j|0\rangle & \langle 0|\sigma_{j-1}\rangle\langle\sigma_j|1\rangle \\ \langle 1|\sigma_{j-1}\rangle\langle\sigma_j|0\rangle & \langle 1|\sigma_{j-1}\rangle\langle\sigma_j|1\rangle \end{pmatrix} \quad (2 \leq j \leq L-1).$$

というもので、実際  $c = c_{\sigma_1, \dots, \sigma_L}$  として

$$\begin{aligned} |\Phi\rangle &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} c_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} |\sigma_1 \cdots \sigma_L\rangle \\ &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} c \langle \sigma_1 \cdots \sigma_L | \sigma_1 \cdots \sigma_L \rangle |\sigma_1 \cdots \sigma_L\rangle \\ &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} c \langle \sigma_1 | \underbrace{|\sigma_1\rangle\langle\sigma_2|}_{\langle\sigma_1|\sigma_2\rangle} \underbrace{|\sigma_2\rangle\langle\sigma_3|}_{\langle\sigma_2|\sigma_3\rangle} \cdots \underbrace{|\sigma_{L-2}\rangle\langle\sigma_{L-1}|}_{\langle\sigma_{L-2}|\sigma_{L-1}\rangle} \underbrace{|\sigma_{L-1}\rangle\langle\sigma_L|}_{\langle\sigma_{L-1}|\sigma_L\rangle} | \sigma_1 \cdots \sigma_L \rangle \\ &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} c \langle \sigma_1 | \begin{pmatrix} \langle 0|\sigma_1\rangle\langle\sigma_2|0\rangle & \langle 0|\sigma_1\rangle\langle\sigma_2|1\rangle \\ \langle 1|\sigma_1\rangle\langle\sigma_2|0\rangle & \langle 1|\sigma_1\rangle\langle\sigma_2|1\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle 0|\sigma_2\rangle\langle\sigma_3|0\rangle & \langle 0|\sigma_2\rangle\langle\sigma_3|1\rangle \\ \langle 1|\sigma_2\rangle\langle\sigma_3|0\rangle & \langle 1|\sigma_2\rangle\langle\sigma_3|1\rangle \end{pmatrix} \cdots \\ &\quad \cdots \begin{pmatrix} \langle 0|\sigma_{L-2}\rangle\langle\sigma_{L-1}|0\rangle & \langle 0|\sigma_{L-2}\rangle\langle\sigma_{L-1}|1\rangle \\ \langle 1|\sigma_{L-2}\rangle\langle\sigma_{L-1}|0\rangle & \langle 1|\sigma_{L-2}\rangle\langle\sigma_{L-1}|1\rangle \end{pmatrix} | \sigma_{L-1} \rangle | \sigma_1 \cdots \sigma_L \rangle \end{aligned}$$

で MPS 分解完了である。 □

境界巡回型の場合にも同様に、形としてはほぼ同じで、すべて 2 次行列である：

**境界巡回型 MPS.** 次の行列で分解を与えることができる：

$$A(j) = |\sigma_{j-1}\rangle\langle\sigma_j| = \begin{pmatrix} \langle 0|\sigma_{j-1}\rangle\langle\sigma_j|0\rangle & \langle 0|\sigma_{j-1}\rangle\langle\sigma_j|1\rangle \\ \langle 1|\sigma_{j-1}\rangle\langle\sigma_j|0\rangle & \langle 1|\sigma_{j-1}\rangle\langle\sigma_j|1\rangle \end{pmatrix} \quad (\sigma_0 = \sigma_L \text{ とする})$$

となる．実際、 $\langle \sigma_L | \sigma_L \rangle (=1)$  を左に付け加えて、全体を平等にすればよい

$$\begin{aligned} |\Phi\rangle &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} c \langle \sigma_L | \sigma_L \rangle \langle \sigma_1 \cdots \sigma_L | \sigma_1 \cdots \sigma_L \rangle |\sigma_1 \cdots \sigma_L\rangle \\ &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} c \langle \sigma_L | \underbrace{|\sigma_L\rangle \langle \sigma_1|}_{\sigma_1} \underbrace{|\sigma_1\rangle \langle \sigma_2|}_{\sigma_2} \cdots \langle \sigma_{L-2} | \underbrace{|\sigma_{L-2}\rangle \langle \sigma_{L-1}|}_{\sigma_{L-1}} \underbrace{|\sigma_{L-1}\rangle \langle \sigma_L|}_{\sigma_L} | \sigma_1 \cdots \sigma_L \rangle \end{aligned}$$

ここで、両端の  $\sigma_L$  のブラ・ケットベクトルは  $|0\rangle, |1\rangle$  のいずれかなので、置き換えることができ、 $\sigma_L$  と異なる  $|0\rangle, |1\rangle$  の置き換えでは消滅してしまうので、両端は次のように書ける：

$$\begin{aligned} |\Phi\rangle &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \sum_{j=0}^1 c \langle j | \underbrace{|\sigma_L\rangle \langle \sigma_1|}_{\sigma_1} \underbrace{|\sigma_1\rangle \langle \sigma_2|}_{\sigma_2} \cdots \langle \sigma_{L-2} | \underbrace{|\sigma_{L-2}\rangle \langle \sigma_{L-1}|}_{\sigma_{L-1}} \underbrace{|\sigma_{L-1}\rangle \langle \sigma_L|}_{\sigma_L} | j \rangle |\sigma_1 \cdots \sigma_L\rangle \\ &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \text{Tr} \left( c \underbrace{|\sigma_L\rangle \langle \sigma_1|}_{\sigma_1} \underbrace{|\sigma_1\rangle \langle \sigma_2|}_{\sigma_2} \cdots \langle \sigma_{L-2} | \underbrace{|\sigma_{L-2}\rangle \langle \sigma_{L-1}|}_{\sigma_{L-1}} \underbrace{|\sigma_{L-1}\rangle \langle \sigma_L|}_{\sigma_L} \right) |\sigma_1 \cdots \sigma_L\rangle. \end{aligned}$$

したがって、MPS 分解完了である。□

因みに、分かりにくい説明で  $\sum_j A(j)A(j)^* = I$  と説明してあるものが見受けられるが、上記の設定では以下のような練習問題である：

$$\sum_j A(j)A(j)^* = \sum_j |\sigma_{j-1}\rangle \langle \sigma_j | (|\sigma_{j-1}\rangle \langle \sigma_j |)^* = \sum_j |\sigma_{j-1}\rangle \langle \sigma_j | \sigma_j \rangle \langle \sigma_{j-1}| = \sum_j |\sigma_{j-1}\rangle \langle \sigma_{j-1}| = I.$$

実際に上記で例示したものはこの構成で得られるが、この提案がオリジナルな構成である傍証を挙げておく．例としてよく挙げられている **W-状態** と呼ばれているもの

$$|W\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} (|10\cdots 0\rangle + |010\cdots 0\rangle + \cdots + |0\cdots 01\rangle)$$

があるが、 $n=3$  の時の  $A(x)$  は、係数  $\frac{1}{\sqrt{3}}$  を除いて次のように与えられることが知られている ([4])

$\begin{smallmatrix} x \\ j \end{smallmatrix}$	1	2	3
0	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
1	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

しかし、提案の方法では3次行列は出てこない．結果はわかっているが、実態を見るために一から上記の方針で求めてみる．

上記のように、W 状態で  $n=3$

$$W_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} (|100\rangle + |010\rangle + |001\rangle)$$

の場合には、面倒なので  $\sqrt{3}$  倍し、上記の方針で計算したのち、(各種成分が状態インデックスと対応し、数が等しくなるように) 整頓し、さらに少しダイエットすると

$$\begin{aligned}
 \sqrt{3}|W_3\rangle &= \sum_{j,k,\ell} \langle jk\ell | (|100\rangle + |010\rangle + |001\rangle) |jk\ell\rangle \\
 &= \sum_{j,k,\ell} \left( \langle j|(1|\langle k|)(|0\rangle\langle\ell|)|0\rangle + \langle j|(1|\langle k|)(|1\rangle\langle\ell|)|0\rangle + \langle j|(1|\langle k|)(|0\rangle\langle\ell|)|1\rangle \right) |jk\ell\rangle \\
 &= \sum_{j,k,\ell} \langle j| \left( \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \langle k|0\rangle & \langle k|1\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\ell|0\rangle & \langle\ell|1\rangle \\ 0 & 0 \end{pmatrix} |0\rangle + \begin{pmatrix} \langle k|0\rangle & \langle k|1\rangle \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \langle\ell|0\rangle & \langle\ell|1\rangle \end{pmatrix} |0\rangle + \begin{pmatrix} \langle k|0\rangle & \langle k|1\rangle \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\ell|0\rangle & \langle\ell|1\rangle \\ 0 & 0 \end{pmatrix} |1\rangle \right) |jk\ell\rangle \\
 &= \sum_{j,k,\ell} \langle j| \left( \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \langle k|0\rangle & \langle k|1\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\ell|0\rangle \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \langle k|0\rangle & \langle k|1\rangle \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \langle\ell|0\rangle \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \langle k|0\rangle & \langle k|1\rangle \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\ell|1\rangle \\ 0 \end{pmatrix} \right) |jk\ell\rangle \\
 &= \sum_{j,k,\ell} \langle j| \left( \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \langle k|0\rangle & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\ell|0\rangle \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \langle k|1\rangle \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \langle\ell|0\rangle \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \langle k|0\rangle & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\ell|1\rangle \\ 0 \end{pmatrix} \right) |jk\ell\rangle \\
 &= \sum_{j,k,\ell} \langle j| \left( \begin{pmatrix} 0 & \langle k|1\rangle \\ 0 & \langle k|0\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \langle\ell|0\rangle \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \langle k|0\rangle & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\ell|1\rangle \\ 0 \end{pmatrix} \right) |jk\ell\rangle = \sum_{j,k,\ell} \langle j| \begin{pmatrix} \langle k|0\rangle & \langle k|1\rangle \\ 0 & \langle k|0\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\ell|1\rangle \\ \langle\ell|0\rangle \end{pmatrix} |jk\ell\rangle
 \end{aligned}$$

で  $A[j]$  タイプのものが出るのが、両端以外は  $A(j)$  と同じで明らかに違うアプローチである。このように、実際の計算では、上記の公式以上に簡略化が可能になっているのである。

## V. おわりに

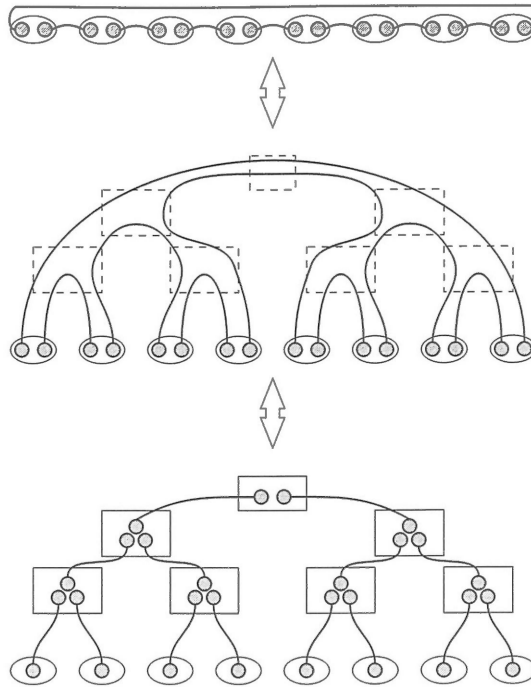
この原稿の最初の予定は、高柳さんもあちこちで指摘しているように「テンソルネットワーク」(しかも弦表現のように図示去れるもの)が今後重要になってくるという事だったので、TQCの時に試みたように、本格的に弦表現を論じようと思っていたのだが、統一性もあまりなくて思ったより解釈が難しく、入口のところの MPS で詰まってしまった。しかも図なしの説明がよくわからなかったもので、最終章の提案をさせていただいた。もう学部ゼミを持つこともないが、今までの感触だと学部ゼミで使えるレベルになっていると思う。実際は物理的な理由で「簡単に証明できること」より「使いやすい形になっていること」が重要なので、こちらの意図と違うものばかり出てきたのかもしれないが、そのあたりの専門家の事情はさすがに思い至らない。ただ、図示できなかったのが私的には心残りである。

そこで単なる引用に過ぎないが、弦表現的な図について、雰囲気味わっていただきたいと思う。

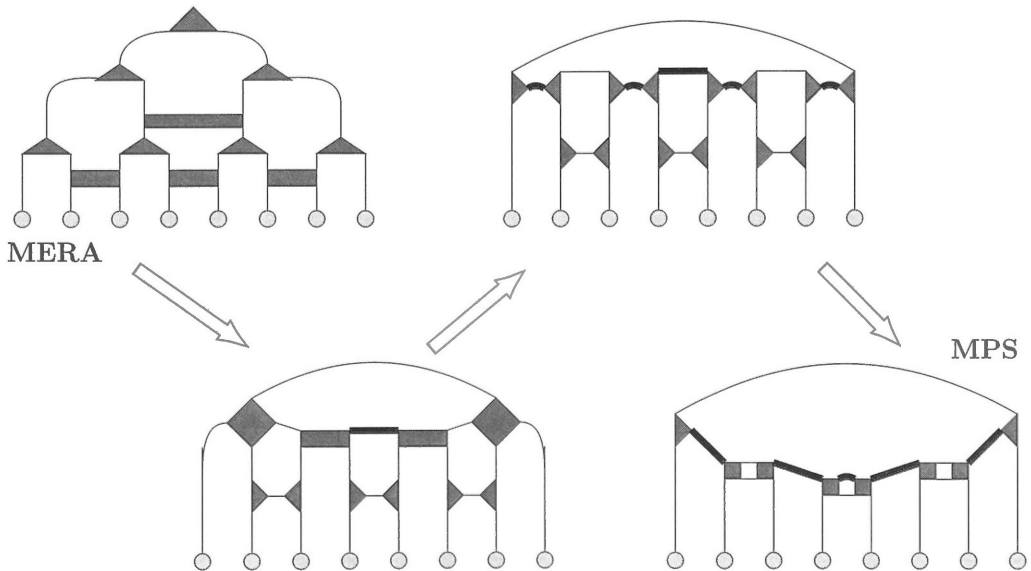
実際に EE でよく使われるのは緑黄色社会(?)のような **MERA**(multi-scale entanglement renormalization absatz)なのであるが、MPS の図から Tree に変形できる例示を引用する。Tree 形から、横のユニタリ (もしくは等長行列) でつなぐと MERA が出てくるそうなので、予告編として私的にキャッチーと感じた変形を挙げておこう：



境界周期型 MPS の図から tree net に変形 [31]:



繰り込み群 (renormalization group) を加味すれば更には **MERA** のテンソルネットワーク図示に至る ([31])。ここでは逆に、▲は isometry, ■は unitary で表して、[16] にある「MERA から MPS への変形」を挙げておく (太線部分が効率の悪化を示している) :



一方で、汎用量子コンピュータも IBM 型をまねて日本初のものが稼働し始めたが、光子の量子もつれを利用した古澤さんらの「光量子コンピュータ」は日本独自なものであるし、基本超低温環境がいらないので、大いに期待が持てる方式である。今後の発展を祈って稿を閉じることにする。

## 参考文献

- [1] H.Araki, Relative entropy of states of von Neumann algebras, Publ. RIMS, Kyoto Univ., **11** (1976), 809–833.
- [2] D. バウミースター・A. エカート・A. ツァイリンガー (西野哲朗・井元信之 訳), “量子情報の物理—量子暗号, 量子テレポーテーション, 量子計算—”, 共立出版, 2007.
- [3] G. ベネンティ・G. カザーティ・G. ストゥリーニ, “量子計算と量子情報の原理”, シュプリンガー・ジャパン, 2009.
- [4] A.S.Bhatia and A.Kumar, Quantifying matrix product state, Quantum Inf Process, **17**(3)(2018), id.41.
- [5] J.C.Bridgeman and C.T.Chubb, Hand-waving and Interpretive Dance: An Introductory Course on Tensor Networks, J. Phys. A: Math. Theor., **50**(2017), 223001.
- [6] 藤井淳一, 量子鍵交換 E91 をめぐって, 数学教育研究, **40**(2011), 97–108.
- [7] 藤井淳一, 量子もつれと分離状態, 国際数理科学協会会報, **123**(2023), 3–9.  
<https://www.jams.jp/kaiho/kaiho-123.pdf>
- [8] 福間 将文, AdS/CFT 対応とホログラフィー, 数理科学 **43**(4)(2005), 32–39.
- [9] 古澤 明, “量子光学と量子情報科学”, 数理工学社, 2005.
- [10] 古澤 明・武田俊太郎, “新版 量子光学と量子情報科学”, サイエンス社, 2020.
- [11] 日合文雄, 行列解析と量子情報, 数学, **65**(2)(2013), 133–159.
- [12] 日合文雄, “行列解析から学ぶ 量子情報の数理 (SGC ライブラリ 183)”, サイエンス社, 2023.
- [13] M.Horodecki, P.Horodecki and R.Horodecki, Separability of mixed states: necessary and sufficient conditions, Phys. Lett., **A 223**(1996), 1–8.
- [14] R.Horodecki, P. Horodecki, M.Horodecki and K.Horodecki, Quantum entanglement, Rev. Mod. Phys., **81** (2009), 865.
- [15] 小芦雅斗・小柴健史, “量子暗号理論の展開”, サイエンス社, 2008.
- [16] 松枝宏明, テンソルネットワークと 量子情報・可解性・重力の関わり, 物性研究電子版, **6**(9)(2017), 064204.
- [17] 松枝宏明, 量子系のエンタングルメントと幾何学, 2018 年度愛媛大理学部集中講義録,  
<http://nakamura-lab.phys.sci.ehime-u.ac.jp/matsueda2018.pdf>
- [18] N.D. マーミン (木村 元 訳), “量子コンピュータ科学の基礎”, 丸善, 2009.
- [19] 宮野健次郎・古澤明, “量子コンピュータ入門”, 日本評論社, 2008.
- [20] M.A. ニールセン・I.L. チャン, “量子コンピュータと量子通信 III—量子通信・情報処理と誤り訂正—”, オーム社, 2005.
- [21] 大栗博司, 量子重力の条件, 仁科記念講演会プレゼン資料, 2019.5  
[https://www.nishina-mf.or.jp/wp/wp-content/uploads/2020/08/2019Lecture\\_0830y.pdf](https://www.nishina-mf.or.jp/wp/wp-content/uploads/2020/08/2019Lecture_0830y.pdf)
- [22] 大矢雅則・渡辺昇, “量子暗号と量子テレポーテーション”, 共立出版, 2006.
- [23] M.B.Plenio, S.Virmanian and P.Papadopoulos, Letter to the editor: Operator monotones, the reduction criterion and the relative entropy, J. Phys. A: Math. Gen., **33**(2000), L193.
- [24] M.Rangamani and T.Takayanagi, “Holographic Entanglement Entropy”, Springer, 2017.
- [25] 佐川弘幸・吉田宣章, “量子情報理論 (第3版)”, シュプリンガー・ジャパン, 2019.

- [26] U.Schollwöck, The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states, *Annals of Physics*, **326**(2011), 96–192.
- [27] E.Størmer, “Positive Linear Maps of Operator Algebras”, Springer, 2013.
- [28] 高柳匡, 量子情報から創発する理論物理学, 第33回南部コロキウム (2022年5月) プレゼン資料.  
<http://www2.yukawa.kyoto-u.ac.jp/~tadashi.takayanagi/Nambu.pdf>
- [29] H.Umegaki, On information in operator algebras, *Proc. Japan Acad.*, **37**(1961), 459–461.
- [30] 梅本滉嗣, AdS/CFT 対応における Entanglement Entropy と Entanglement of Purification, 2018年度京都大学修士論文.
- [31] F.Verstraete, J.I.Cirac and V.Murga, Matrix product states, projected entangled pair states, and variational renormalization group methods for quantum spin systems, *Adv. Phys.* **57**(2)(2008), 143–224.
- [32] E.Witten, Monotonicity of Relative Entropy In Quantum Field Theory, 2018 (プレゼン資料) <https://member.ipmu.jp/yuji.tachikawa/stringsmirrors/2018/117.pdf>
- [33] W.K.Wootters, Entanglement of formation and concurrence, *Quantum Info. and Comp.*, **1**(2001), 27–44.
- [34] K.Życzkowski and I.Bengtsson, “Geometry of Quantum States, 2nd Edition”, Cambridge Univ. Press, 2017.