数理解析研究所講究録
第2059巻 2017年 39-77

量子統計的決定理論に基いた射影測定の選択

大阪大学・基礎工学研究科　田中冬彦
Fuyuhiko Tanaka
Graduate School of Engineering Science
Osaka University

Abstract

最近, 著者は実際の実験と対応付けられる範囲に制限した量子統計的決定理論を提案した. そこでは, 実験で可能な範囲でベイズ決定 POVM やミニマックス決定 POVM が定義され, ミニマックス定理などの基本的な定理も成立する. 本発表では, この制限された枠組みで許容性を新たに定義し, 端点定理を用いて, 決定 POVM の端点と許容性との関係を明らかにした. また, 漸近リスク関数を定義し, 許容性の観点から射影測定の比較が可能であることを示した. 応用例として 2 次元パラメータモデルをとりあげ, 2 種類の直交する射影測定は 4 種類の射影測定に優越され, 非許容的になることを示した. このように, 制限した枠組みでの許容性は推定精度の向上に直接, 役立つ結果を与えることができる.

1　はじめに

最近, 量子コンピュータの実証実験などで量子系の精密測定のニーズが高まっている. 実験技術のさらなる発展も重要であるが, 統計学の視点からパラメータ推定に関する考察も重要である. これは, 量子系の統計学として取り扱うべき問題である. 本稿では特に射影測定の選択について量子統計的決定理論の観点から論じる. 以下, 量子系の統計推測, 量子系の統計学はやや長いので, **量子統計**と呼ぶことにし通常の統計学を**古典統計**と呼んで区別する.

今回, 数理統計の基本的な素養がある読者を対象として書くこととした. 具体的には, 二項分布や最尤推定量もしくは尤度関数, リスク関数と許容性といった概念に慣れていることを前提とした. これらについては数理統計学の成書, 例えば, Lehmann [17], Ferguson [5] などを参照せよ. また, 本質的な部分を二項分布で閉じた話にするため, 密度行列や POVM など量子統計の基礎的な概念の説明はかなり省略した. こちらは, 例えば,

田中& 山形 [29] やそこで引用している文献を参照せよ.

1.1 量子系における精密測定のニーズ

最近の量子計算機関連の物理実験では, ある特定の量子系を実現し, それを検証するために量子トモグラフィ (詳しくは例えば杉山による解説 [26]) を行う. そこで, ここでは量子計算機（ここでは万能型を指す）について, かなりざっくりとした説明をする. 量子計算機のすごさではなく, 量子統計のニーズを理解してもらうことが目的である.

まず, 量子計算機の動作のさせ方は, そろばんに近い. そろばんの一つの玉, もしくは隣り合う二つの玉に対して, 決まった操作を順番に行っていき, 最後に玉を読み取る. この読み取り操作は, そろばんの玉自体に強く影響を与えるため, 最後にのみ行う（ここでは量子誤り訂正は考えていない.）

量子計算機の基本素子は量子ビットや量子ゲートとよばれ, それぞれ, 複素数の行列で記述できる. ただし, これらの行列は実部・虚部をとるなどして実数パラメータでパラメトライズする. そのため, 各基本素子が, 指定したパラメータ (θ_{tar} と書く.) に十分近い状態になっているかすべて確認する必要がある. このとき, ミクロの基本素子を特徴づける真のパラメータ (我々にとって未知) を θ として, 例えば $\|\theta - \theta_{tar}\| < 10^{-4}$ といったことを検証したい.

ここで注意すべき点は,

(i) 「実験的に検証されているという意味で」正しいモデルと正しいパラメータの値がある　（と物理では考える）

(ii) 10^{-4} といった高精度は普通に要求する

(iii) 「行列」が出てくることからわかるように, 一般には数十〜数百, さらに多くのパラメータを同時に推定する

(iv) 「客観性」をできるだけ主張したい

ということである. 統計の常識としては, $\theta = \theta_{tar}$ vs $\theta \neq \theta_{tar}$ といった仮説検定を考えた

くなる所であるが状況が違っていることに注意する.

本稿では具体例として 2 次元パラメータの推定をとりあげるが, あくまで研究のスタート地点にすぎない. 上のような状況への適用がひとつの大きな目標である.

1.2 量子物理実験でのパラメータ推定の実際

さて, 量子統計では, パラメータ推定の際に測定を選ぶ自由度がある. 測定を選ぶ自由度について非常に簡単化したケースで説明する. 実際の物理実験で使われているもの [15, 19] を, 統計学の言葉で書き直して紹介する.

一番簡単な量子系のパラメータ推定は,

$$W \sim Bin(n, a \cdot \theta + b) \tag{1}$$

のような二項分布に従うデータから $\theta \in \Theta \subset \mathbf{R}^p$ を推定することであろう. ここで, $a \in \mathbf{R}^p$, $b \in \mathbf{R}$ はある程度, 実験において自由に選ぶことができ, 測定方法を指定する. (パラメータの動く範囲は 3 節で具体例を見る.) 説明の都合上, 測定方法を指定するパラメータ $(a, b) \in \mathbf{R}^p \times \mathbf{R}$ を測定と同一視し, n を**サンプルサイズ**とよぶことにする. n は実験にかかるコストに相当し少ない方が良い. なお, 本稿で例として挙げる測定は物理では**射影測定**と呼ばれる測定である.

実際の物理実験では何種類かの測定 (i.e., (a, b) の k 個の組) を設定する. そのとき,

$$E\left[\frac{W_j}{n}\right] = a_j \cdot \theta + b_j; \qquad j = 1, \ldots, k, \tag{2}$$

が成立するが, n が十分大きいため $W_j/n \simeq E[W_j/n]$ とみて上の式を逆に解いて θ を推定する. なお, この時, 合計のサンプルサイズは nk となる.

1.2.1 物理学者の視点

さて, ここで物理学者の量子力学的な確率, 特に期待値のとらえ方について補足しておく. 従来の量子系の実験では n が十分大きいことが大前提のため, 標本平均と期待値はほぼ同一視される. そのため, 物理学者にとって重要なのは式 (2) で θ がデータの

期待値から一意に定まることである．この時, 測定の組は情報完全 **(Informationally complete)** [22] とよばれ, これは量子情報でよく聞く言葉でもある．特に上のケースでは, 情報完全な測定はパラメータ θ の次元を p として $q(\geq p)$ 種類の測定でなければならない．

ただし, 情報完全であっても $q > p$ だと期待値と観測値を同一視する考え方ではうまくいかない．例えば, 式 (2) において

$$E\left[\frac{W_1}{n}\right] = \theta_1, \qquad E\left[\frac{W_2}{n}\right] = \theta_2, \qquad E\left[\frac{W_3}{n}\right] = \theta_1 + \theta_2 \tag{3}$$

とする．この場合, $W_1 + W_2 \neq W_3$ では θ を求めることができない．

こうした事情からか, p 次元のパラメータを推定したければ p 種類の測定を準備するというのが物理学者にとって暗黙の制約条件になっていたようである．なお, 測定の組を固定すれば, 後は推定方法のみであるから古典統計学の範疇になる．一部の物理学者はこのような観点から研究を進めている (例えば Paris と Řeháček [21]).

1.2.2 統計学者の視点

次に統計学者の視点で見てみる．その場合, 二項モデル (1) が与えられているから, 式 (3) のような条件であっても尤度関数を書き下して考えれば, 問題なく推定できる．つまり, p 個のパラメータを推定する際に $q(> p)$ 種類の測定を準備してもなんら問題はない．

それでは, 測定の種類を増やすことで推定精度が上がるだろうか．また, どのように比較検討すればよいだろうか．もちろん, 全体のサンプルサイズを測定の種類に応じて増やしてしまったら正当な比較にはならない．後で見るように, 全体のサンプルサイズ n を固定しておき, それを q 等分して, n/q のサンプルに対して, q 種類の測定をうまく選ぶということを考える．

こうした議論はモデルに依存するものの, 少なくとも数値的には大変, 面白い結果が得られている．ある 2 パラメータモデルについて, 上の議論に沿って物理学者の視点に立つと, 2 種類の測定を準備するのが「常識」である．一方で, 4 種類の測定をうまく組み合わ

せてみると後者の方が平均推定誤差が数 % から 10% 程度, 減少する [29]. この数値計算では両者とも推定方法はベイズ推定を用いている. (3 節で詳しく見る.)

1.3 実験と対応付け可能なクラスに測定を制限した量子統計的決定理論

前節でみたように量子系のパラメータ推定では我々はある程度, 測定を選ぶことができる. また, 推定方法に工夫はなくとも, 実験で可能な範囲で測定方法を工夫することで推定精度を上げられそうである. 本研究では, こうしたことを考えるフレームワークを詳細に検討したい.

数学的には, **量子統計的決定理論 (Quantum Statistical Decision theory; QSD)** [12, 13] の枠組で扱うことができる. ところが, 元々の QSD は, 原理的な推定誤差の限界や減衰レートが興味の主体であった [1, 2, 10, 11, 7, 8, 16, 30]. 工夫の余地を探求するのではなく, 原理的な下限を与えて, 数式の上でどのような測定なら達成可能かを議論するというかなり理論的な内容だった. しかし, 実際の実験での測定と, 数式で表現されたよい測定との間には大きなギャップがあり, 量子計算機の実現よりも難しいため本末転倒である. そこで, 著者はある程度, 測定のクラスを制限してその範囲で既存手法を改良する枠組みとして **implementable QSD (iQSD)** を提案した (Tanaka [28], 田中 & 山形 [29]).

本研究では iQSD の枠組で決定 POVM の許容性を導入し, 漸近リスク関数を用いた解析方法を提案する. 特に新しい結果として量子統計的決定理論における決定 POVM の許容性とそれに関する定理を示した. 本稿ではパラメータ推定のみを扱ったがそれ以外の問題にも適用できる. また, 漸近リスク関数を導入したことにより, 結果としてタイトルにあるように射影測定の組を選ぶ方法を議論することとなった.

ここで, 量子統計で許容性を論じる意義について説明しておこう. 例えば, 量子系の実際のパラメータ推定では, 自然なパラメータの動く範囲ではなく物理から来る制約がいろいろある. 数理統計ではよく知られていることであるが, パラメータに制約条件が入ると, 制約条件を踏まえた推定を行うことで, 一様に推定誤差 (リスク関数) を小さくできること

が多い (例えば van Eeden [32], p.1). これらは決定理論における許容性の話題である. 一方で, 量子統計的決定理論では, これまで許容性に関する議論はされていなかったように思う. こうしたことからも, 量子統計的決定理論の言葉で許容性をしっかり議論する意義が見て取れる.

なお, QSD とは無関係に, 測定を工夫して実験での推定精度を向上させる理論研究もある (例えば, Fujiwara [6], Sugiyama *et al.* [25]). これらは, 真値の近傍における局所的な推定誤差に注目するため許容性のような議論とは少し違う観点になる.

1.4 構成

2 節では量子統計的決定理論について簡潔に述べる. 特にこれまであまり触れられてこなかった決定 POVM の許容性と端点定理との関係について述べる. また, 漸近リスク関数を導入し関連研究にも触れる.

3 節では具体的かつ典型的な例として 2 パラメータの量子統計モデルを取り上げる. 漸近リスク関数を与え, 物理学的に重要な結果を示す. 用語は後で定義するが, 簡単に述べると, 2 種類の直交射影測定は 4 種類の射影測定に優越され, 非許容的である, という強い結果が得られる.

4 節では同じ統計モデルの下, 2 種類の射影測定の全体で許容性やミニマックス性について論じる. 物理学の常識的には直交測定と呼ばれる測定方法が自然であり望ましいとされるが, 直交測定以外の測定も許容性を満たすこと, さらに, パラメータの範囲が限定される場合, 直交測定が非許容的にもなりえることを示す. 許容性やミニマックスなどの議論は条件が細かくなるため, 3 節と 4 節の最後でそれぞれの結果についてまとめることとした.

最後の節では要点を簡単にまとめ, その他の補足事項について述べている. 計算部分の詳細は付録に与える.

2 量子統計的決定理論と許容性

本節では量子統計的決定理論の概略を前半で説明し，その後，許容性とそれに関連する諸定理を示す．また，実際の解析において便利な漸近リスク関数を導入する．

歴史的には Wald [33] によって統計的決定理論が構築され，統計推測の問題を統一的な観点からとらえることが可能になった．Holevo は統計的決定理論を量子系に拡張し [12, 13], 1980 年代にベイズ決定 POVM [13, 20] やミニマックス決定 POVM [3] に関する基礎的な結果が得られた．しかし，当時は理論的興味が強く，実験への応用を念頭においた定式化としては不十分だった．その後も，統計的決定理論の概念の多くが拡張されてきた (田中 & 山形 [29] とその中の文献も参照.) が，許容性は本稿以前ではあまり議論されてないようである．

2.1 量子統計的決定問題

まず，量子統計的決定問題の定式化をおさらいする (Tanaka [27, 28], 田中 & 山形 [29] などを参照.)．簡単のため，かつ，応用を意識して，あらかじめ物理系の表現空間 (ヒルベルト空間)$\mathcal{H}$ は有限次元 $\dim \mathcal{H} < \infty$ とし，適当な正規直交基底の下，$\mathcal{H} \simeq \mathbf{C}^d$ と考えて議論する．また，以下で出てくる決定空間 U，パラメータ空間 Θ はともに $\mathbf{R}^p$ 内のコンパクト部分集合，損失関数 $W(\theta, u)$ は $\Theta \times U$ 上連続関数とする．

Definition 1. 密度行列の有限次元パラメータ族 $\{\rho(\theta) \in \mathcal{S}(\mathbf{C}^k) : \ \theta \in \Theta \subset \mathbf{R}^p\}$ を量子統計モデルとよぶ．また，決定空間 U と損失関数 $W : \Theta \times U \to [0, \infty)$ [*1] と合わせて，3 つ組 $(\rho(\theta), U, W(\theta, u))$ を量子統計的決定問題 **(Quantum statistical decision problem; QSD problem)** とよぶ．

統計的決定理論 [33] と同様に，量子系の統計推測の諸問題は，少なくとも形式的には

[*1] Kullback-Leibler divergence のように $W = \infty$ を考えることもある．

QSD problem として記述できる．例えば，パラメータ推定は QSD problem の典型的な例であり，後で具体的なモデルで考察する．また，QSD problem に対して，我々は適当な測定を準備して，測定で得られたデータから推定などを行う．こうした一連の過程は決定空間 U 上の**正作用素値測度 (Positive Operator Valued Measure; POVM)** として必ず表すことができる [12, 14]．この POVM のことを**決定 POVM** とよぶ．決定 POVM の全体を $\mathcal{P}o(U)$ とあらわすことにする．

Definition 2. QSD problem $(\rho(\theta), U, W(\theta, u))$ を考える．決定 POVM $\mathbf{M} \in \mathcal{P}o(U)$ について，

$$R(\theta; \mathbf{M}) := \int_U W(\theta, u) \mathrm{Tr} \rho(\theta) M(\mathrm{d}u)$$

を θ の関数とみて，**リスク関数**とよぶ．二つの決定 POVM $\mathbf{M}, \mathbf{N} \in \mathcal{P}o(U)$ について，以下が成立するとき，$\mathbf{N}$ は $\mathbf{M}$ を**優越する**という．

$$\begin{aligned} R(\theta; \mathbf{M}) &\geq R(\theta; \mathbf{N}), \ \forall \theta \in \Theta, \\ R(\theta; \mathbf{M}) &> R(\theta; \mathbf{N}), \ \exists \theta \in \Theta. \end{aligned}$$

$\mathbf{N}$ が $\mathbf{M}$ を (漸近リスク関数の意味で) 優越するとき $\mathbf{N} \prec \mathbf{M}$ とあらわす．

Definition 3 (リスク同値)**.** QSD problem $(\rho(\theta), U, W(\theta, u))$ を考える．決定 POVM $\mathbf{M}, \mathbf{N} \in \mathcal{P}o(U)$ について，

$$R(\theta; \mathbf{M}) = R(\theta; \mathbf{N}), \ \forall \theta \in \Theta$$

が成り立つ時，$\mathbf{M} \cong \mathbf{N}$ と書き，$\mathbf{M}, \mathbf{N}$ は互いに**リスク同値**とよぶ．

リスク同値はその名の通り，決定 POVM の同値類 $[\mathbf{M}]$ を定める．

さて，決定 POVM のリスク許容性について定義したいが，ここで注意が必要である．統計的決定理論では，許容性はリスク関数を通じて決定関数（もしくはマルコフ核）の比較を行っており，決定関数を決定 POVM と読み替えることで形式的な定義は可能である．

しかしながら, 許容性に限らず, 数式だけをよみかえた形式的な拡張は, 本来もっていた統計学的な意味, 応用上の意義を失ってしまうことがある.

例えば, $(\rho(\theta)^{\otimes n}, \Theta, 1-F^2(\rho(\theta), \rho(u)))$ のようなパラメータ推定でベイズ決定 POVM（ベイズ決定 [33] の量子版）を定義するとどうなるか. (ここで, $F(\rho, \rho') := \mathrm{Tr}|\sqrt{\rho}\sqrt{\rho'}|$ は Fidelity [18] とよばれ, $1-F^2$ といった形でしばしば量子情報で使われる損失関数である.) ベイズ決定 POVM を導出すると, n-量子系すべてに精巧なやり方で量子相関をもたせたものになる (Bagan *et al.* [1]) ため, n が増えれば増えるほど実現が困難になっていく. 量子情報の観点から興味のあるサブクラス (e.g., separable measurement) に制限してベイズ決定 POVM を考える [2] ことも可能だが, 目的は推定誤差の達成可能な下限がサブクラスに制限したことでどう変化するかという部分に終始している.

Tanaka [28] で述べているように, 現段階で実験で実装可能な測定の族 (以下, **implementable class**) Γ から構成的に決定 POVM のサブクラス $\mathcal{P}_\Gamma$ をつくり, $\mathcal{P}_\Gamma$ に制限して議論を進める方が, 応用上, 有意義である.(**implementable QSD; iQSD**)

そこで, 本稿ではこの方針を採用し, 決定 POVM の任意の閉凸部分集合 $\mathcal{P} \subseteq \mathcal{P}o(U)$ を固定して許容性を定義する. (ベイズ決定 POVM やミニマックス決定 POVM は Tanaka [28] もしくは田中& 山形 [29] を参照.)

Definition 4. QSD problem $(\rho(\theta), U, W(\theta, u))$ を考える. 決定 POVM$\mathbf{M} \in \mathcal{P}$ について, $\mathbf{M}$ を優越する決定 POVM が $\mathcal{P}$ に存在しない時, 決定 POVM $\mathbf{M}$ は $\mathcal{P}$ において許容的という. 許容的でない場合を非許容的と呼ぶ.

決定 POVM の許容性は推定量の許容性と同様に弱い性質である. なお, 決定 POVM の任意の閉凸部分集合 $\mathcal{P}$ に対し, 完備類, 本質的完備類も同様に定義できる.

2.2 等分配による射影測定からなるクラス

さて, ここからは QSD としてパラメータ推定 $(\rho(\theta)^{\otimes n}, \Theta, W)$ の問題を考える. $U = \Theta \subseteq \mathbf{R}^p$ とする. この後の考察では, 量子系 $\rho(\theta)^{\otimes n}$ を等分配してそれぞれ射影測定を行

うタイプに制限して考える. サンプルサイズ $n = km$ とし測定の種類 k を任意に固定し implementable class を

$$\Gamma_{k,m} := \left\{ \left(\otimes_{j=1}^{k} \mathbf{E}_j \right)^{\otimes m} : \mathbf{E}_1, \ldots, \mathbf{E}_k; PVM \right\}$$

と定義する. ここで, $\mathbf{E}_1, \ldots, \mathbf{E}_k$ はそれぞれ, $\mathbf{C}^d$ 上のランク 1 の射影測定とする. つまり, 任意の正規直交基底 $|\phi_1\rangle, \ldots, |\phi_d\rangle$ を用いて, $|\phi_1\rangle\langle\phi_1|, \ldots, |\phi_d\rangle\langle\phi_d|$ なる射影の組を k 種類用意していることに相当する. ここで $|\phi\rangle \in \mathbf{C}^d$ は縦ベクトルを表し $\langle\phi| := (|\phi\rangle)^*$ は $|\phi\rangle$ の共役転置. ($\langle a|b\rangle$ は内積, $|a\rangle\langle b|$ は $d \times d$ の行列になる.) このとき $\Gamma_{k,m}$ から誘導される決定 POVM [28] の集合を $\mathcal{P}_{k,m}$ とかくことにする.

2.3 端点定理との関係

Krein-Milman [4] の端点定理から $\mathcal{P} = \overline{\mathrm{co}(ex(\mathcal{P}))}$ が成立していた [28]. 後で見るように許容性を直接の比較で調べる場合に, 端点との比較のみで考えれば十分なことが多い. 特に今, 端点 $ex(\mathcal{P}_{k,m})$ は (nonrandomized な) 射影測定から構成される決定 POVM(決定 PVM) で尽きている (Theorem 5 in Tanaka [28]).

本稿では, 有限次元ヒルベルト空間の仮定から, PVM は高々, 有限個の互いに直交する射影の組であり, そのおのおのにパラメータの推定値を割り振っている. 一般の元は, これらの凸結合とその極限で表現できる. つまり, 適当な $ex(\mathcal{P}_{k,m})$ 上の確率測度 $\omega(\mathrm{d}\mathbf{M})$ を用いて

$$\mathbf{N} = \int_{ex(\mathcal{P}_{k,m})} \mathbf{M}\, \omega(\mathrm{d}\mathbf{M}) \tag{4}$$

のように記述できる*2. この分解 (4) とベイズ決定と許容性の関係を用いて, 次の結果を得る.

Lemma 1. $\mathcal{P} \subseteq \mathcal{P}o(U)$ を決定 POVM の任意の閉凸集合とする. $\theta_0 \in \Theta$ について, リ

---

*2 厳密には積分の形でかけないものが $\mathcal{P}$ に含まれている可能性が残るが, $\mathbf{N}$ の任意の ϵ 近傍に有限個の凸結合がとれるため, 証明がややめんどうになるだけで, 結論は変わらない.

スク同値な決定 POVM を除いてただ一つの $\mathbf{M}_* \in ex(\mathcal{P})$ が存在し以下を満たすとせよ.

$$\min_{\mathbf{M}\in ex(\mathcal{P})} R(\theta_0;\mathbf{M}) = R(\theta_0;\mathbf{M}_*)$$

このとき, $\mathbf{M}_*$ とそのリスク同値な決定 POVM は, 実は $\mathcal{P}$ 全体で許容的.

Proof. 任意の $\mathbf{N} \in \mathcal{P}$ について分解 (4) を用いると

$$\begin{aligned} R(\theta_0;\mathbf{N}) - R(\theta_0;\mathbf{M}_*) &= \int_{ex(\mathcal{P})} \{R(\theta_0;\mathbf{M}_*) - R(\theta_0;\mathbf{M}_*)\}\omega(\mathrm{d}\mathbf{M}) \\ &\geq 0. \end{aligned}$$

ここで ω のサポートがリスク同値類 $[\mathbf{M}_*]$ 上にある場合は $\mathbf{N}$ 自身も $\mathbf{M}$ とリスク同値であり優越されない. そうでない場合は端点からリスク同値類を除いた集合について $ex\mathcal{P} \setminus [\mathbf{M}_*] \neq \emptyset$ となる. このとき, この集合上では

$$P_\omega(R(\theta_0;\mathbf{M}) - R(\theta_0;\mathbf{M}_*) > 0) > 0$$

が成立する. したがって, 上の不等式で等号は成立しない. つまり, $\mathcal{P}$ のすべての決定 POVM に対して $\theta = \theta_0$ では $\mathbf{M}_*$ は真に小さいリスクを与えており, 優越されることはない.

□

以上の結果は任意の Θ 上の確率測度 $\pi(\mathrm{d}\theta)$ の場合にも拡張できる.

Theorem 1 (ベイズ決定 POVM の許容性)**.** $\mathcal{P} \subseteq \mathcal{P}o(U)$ を決定 POVM の任意の閉凸集合とする. Θ 上のある確率測度 $\pi(\mathrm{d}\theta)$ について $\mathbf{M}_* \in \mathcal{P}$ はリスク同値を除いてただ一つ以下の inf を達成するとせよ.

$$\inf_{\mathbf{M}\in ex(\mathcal{P})} \int_\Theta R(\theta;\mathbf{M})\pi(\mathrm{d}\theta)$$

このとき, $\mathbf{M}_*$ とそのリスク同値類の元はすべて, $\mathcal{P}$ で許容的.

Proof.

$$R_\pi := \inf_{\mathbf{M}\in ex(\mathcal{P})} \int_\Theta R(\theta;\mathbf{M})\pi(\mathrm{d}\theta)$$

とおく．仮定から $\mathbf{M}_* \in ex(\mathcal{P})$ は右辺の inf を達成しており，かつ $\mathbf{M} \in ex(\mathcal{P}) \setminus [\mathbf{M}_*]$ なら

$$\int_\Theta R(\theta; \mathbf{M})\pi(\mathrm{d}\theta) > R_\pi \tag{5}$$

が成立．また，ベイズ決定 POVM の端点定理 [13, 28] により端点以外の全体に広げても値が不変であることに注意する．

$$R_\pi = \inf_{\mathbf{M}\in\mathcal{P}} \int_\Theta R(\theta; \mathbf{M})\pi(\mathrm{d}\theta)$$

今，端点以外の $\mathbf{N}$ によって $\mathbf{M}_*$ が優越されたと仮定しよう．このとき

$$\begin{aligned} R(\theta; \mathbf{M}_*) &\geq R(\theta; \mathbf{N}), \forall\theta \in \Theta, \\ R(\theta; \mathbf{M}_*) &> R(\theta; \mathbf{N}), \exists\theta \in \Theta \end{aligned}$$

であるから $\pi(\mathrm{d}\theta)$ で積分して

$$R_\pi = \int_\Theta R(\theta; \mathbf{M}_*)\pi(\mathrm{d}\theta) \geq \int_\Theta R(\theta; \mathbf{N})\pi(\mathrm{d}\theta) \tag{6}$$

(通常の議論では $\mathcal{P}$ 全体で (リスク同値をのぞいて) ベイズ決定が一意であることから (6) で $\geq$ であっても矛盾が示されて終わる．しかし，今の仮定はそれより弱い．$\mathbf{N}$ が $ex(\mathcal{P})$ に存在しないベイズ決定 POVM になっている可能性，つまり，(6) で等号の可能性があり，この段階では矛盾を導けないことに注意せよ．)

$\mathbf{N} \in \mathcal{P}$ について分解 (4) を用いると

$$\begin{aligned} \int_\Theta R(\theta; \mathbf{N})\pi(\mathrm{d}\theta) &= \int_\Theta \left\{ \int_{ex(\mathcal{P})} R(\theta; \mathbf{M})\omega(\mathrm{d}\mathbf{M}) \right\} \pi(\mathrm{d}\theta) \\ &= \int_{ex(\mathcal{P})} \left\{ \int_\Theta R(\theta; \mathbf{M})\pi(\mathrm{d}\theta) \right\} \omega(\mathrm{d}\mathbf{M}) \end{aligned}$$

ここで ω のサポートがリスク同値類 $[\mathbf{M}_*]$ 上にある場合は $\mathbf{N}$ 自身も $\mathbf{M}$ とリスク同値で

あり優越されない. 従って, $P_\omega(ex(\mathcal{P}) \setminus [\mathbf{M}_*]) > 0$ である. ところが, その時,

$$\begin{aligned}\int_\Theta R(\theta;\mathbf{N})\pi(\mathrm{d}\theta) - R_\pi &= \int_{ex(\mathcal{P})}\left\{\int_\Theta R(\theta;\mathbf{M})\pi(\mathrm{d}\theta)\right\}\omega(\mathrm{d}\mathbf{M}) - R_\pi \\ &= \int_{ex(\mathcal{P})\setminus[\mathbf{M}_*]}\left\{\int_\Theta R(\theta;\mathbf{M})\pi(\mathrm{d}\theta) - R_\pi\right\}\omega(\mathrm{d}\mathbf{M}) \\ &> 0 \qquad (\text{(5) による.})\end{aligned}$$

となるから (6) に反して矛盾.

従って, $\mathcal{P}$ 全体でも $\mathbf{M}_*$ とそのリスク同値類を優越する決定 POVM は存在しない.

□

以上より, 許容性を論じる上では $\mathcal{P}$ の端点となる決定 POVM のみで比較する議論が有効である.

2.4 漸近リスク関数の導入

さて, 本来は $\mathcal{P}_{k,m}$ で許容性を議論したいのだが, 実際には多項分布 (本稿で扱う例は二項分布) の部分族が出てくるため極めて扱いづらい. 古典の数理統計では, 特定の数学的に扱いやすいモデルと損失関数を用いることで精密な議論が可能になる (例えば Lehmann [17].) 量子統計の場合には, 残念ながら, そのような基礎的, かつ, 扱いやすいモデルがほぼ皆無である. 数式の上では作れなくもないが, 古典統計と違い物理的な意味合いも重要であるため, あまり自由には選びづらい.

そこで, サンプルサイズがある程度, 大きいと考えて, 統計の漸近理論 [31] を導入する. $\Gamma_{k,m}$ の射影測定において, k と $\mathbf{E}_{all} := \mathbf{E}_1 \otimes \cdots \otimes \mathbf{E}_k$ を固定し $m \to \infty$ を考えると, 通常は, 一次漸近有効な推定量（例えば MLE, ベイズ推定量）が存在する. このような推定量 $\hat{\theta}_{m,k}$ と射影測定の m 回ずつの繰り返しで構成される決定 POVM を $\mathbf{M}_n$ と書く. $\mathbf{M}_n \in ex(\mathcal{P}_{k,m})$ に注意する.

正則条件の下, 以下が成立する.

$$R_n(\theta;\mathbf{M}_n) = \frac{1}{m}\mathrm{Tr}H(\theta)J_k^{-1}(\theta;\mathbf{E}_{all}) + o(1/m) \tag{7}$$

ただし, $H(\theta)$ は損失関数 $W(\theta,u)$ の Hessian. $J_k(\theta)$ は $\mathbf{E}_{all}$ に対する (つまり $m=1$ の) Fisher 情報行列. 右辺からわかるように決定 POVM の違いで推定量の取り方の違いは m の高次の項にしか出てこない. 従って, 右辺の第一項のみに注目する場合, 端点の決定 POVM 同士の比較が射影測定 $\mathbf{E}_{all}\in\Gamma_{k,1}$ の比較に帰着する. (以下では $\Gamma_{k,1}$ は Γ_k と書くことにする.)

Definition 5. QSD problem $(\rho(\theta)^{\otimes km},\Theta,W(\theta,u))$ を考える.

$$C_k(\theta;\mathbf{E}_{all}):=k\cdot\mathrm{Tr}H(\theta)J_k^{-1}(\theta;\mathbf{E}_{all})$$

を漸近リスク関数とよぶ.

対応関係を図式的に表現すると以下のようになる.

$$\begin{array}{rcr} \mathbf{E}_{all}\in\Gamma_k & \longleftrightarrow & \mathbf{M}_n\in ex(\mathcal{P}_{k,m}), \\ C_k(\theta;\mathbf{E}_{all}) & \longleftrightarrow & R(\theta;\mathbf{M}_n) \end{array}$$

本来は右側で厳密に議論したいのだが, 難しいため, $m\to\infty$ と一次漸近有効な推定量 $\hat{\theta}_{m,k}$ を用いるという約束の下, 左側の集合で議論する. そのため, k 種類の射影測定のテンソル積からなる集合 Γ_k と ($\rho^{\otimes km}$ に Γ_k からなる射影測定を行って推定する) 決定 POVM の端点全体 $ex(\mathcal{P}_{k,m})$ は混同して用いる.

なお, 以降, $C_k(\theta)$ のように $\mathbf{E}_{all}$ はしばしば省略する.

上の図式により, 漸近リスク関数を用いた射影測定の選択を次のように行うことが提案される.

(a) Γ_k の中で $C_k(\theta)$ についての許容性などの基準でよい射影測定を見つける.

(b) (実験) 実験では (a) で見つけた射影測定の組を m 回ずつ行い, 発生するデータから最尤推定やベイズ推定などを行う. この時のリスク関数は (7) で与えられる.

(c) (理論) 理論上は (b) の一連の過程は必ず $ex(\mathcal{P}_{k,m})$ $(n=km)$ の決定 POVM として記述できる.

2.5 先行研究との関係

測定を固定した際の Fisher 情報行列 $J(\theta)$ を利用して, $\mathrm{Tr}H(\theta)J^{-1}(\theta)$ で測定を比較する話自体は既に提案されている. (例えば Hayashi による論文集 [10].) しかし, 推定誤差の原理的な下限やその達成可能性 (通常は, 量子相関を無限個の系にもたせる必要がある) など理論的な興味が目的であったように思う.

射影測定に限らず, よい測定を選ぶための方針として Fisher 情報行列に注目するものとしては, 他にも大偏差型評価が挙げられる (Sugiyama *et al.* [24], Hayashi [9]). 大偏差型評価では推定誤差の最悪評価において減少レートに出てくる $\left\|H(\theta)^{1/2}J^{-1}(\theta)H(\theta)^{1/2}\right\|_\infty$ を用いることが提案されている.

ただし, 著者の知る限り, 本稿で後から紹介するような k 種類の射影測定を組み合わせる議論はなかった. 実験的には可能であるにも関わらず考察されてなかったようである.

3 具体例: 2 パラメータモデル

3.1 2 次元密度行列の 2 パラメータモデル

数学的評価の指針を得たので具体的な例で漸近リスク関数を計算してみよう. 本稿では, これ以後, 次の QSD problem $(\rho(\theta)^{\otimes n}, \Theta_\eta, \|\theta - u\|^2)$ にフォーカスする. ここで量子状態モデルは

$$\rho(\theta) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \theta_1 - \mathrm{i}\theta_2 \\ \theta_1 + \mathrm{i}\theta_2 & 1 \end{pmatrix}$$

とし, $\Theta_\eta := \{\theta = (\theta_1, \theta_2) \in \mathbf{R}^2 : \ \|\theta\| := (\theta_1^2 + \theta_2^2)^{1/2} \leq 1 - \eta\}$ を考える. ただし, $\eta (> 0)$ は十分小さい正の定数とし正則化のために導入.

また, 後のために, 極座標 $\theta_1 = r\cos\varphi$, $\theta_2 = r\sin\varphi$ も導入する.

3.2 決定 POVM のクラス $\mathcal{P}_{k,m}$

注目するのは $\mathcal{P}_{k,m}$ なる決定 POVM のクラスであるが, 2 節の議論により端点に注目し, さらに, $m \to \infty$ での一次漸近有効な推定量を用いることにして k 種類の射影測定のテンソル積の全体 Γ_k で議論する. さらに, 今回の問題ではあらかじめ XY 平面内に制限した射影測定のみのクラス Γ'_k で考えてよい. (詳細は省くが今の損失関数の下ではこれらが完備類をなすことを示せる.) 2 次元単位ベクトル (本稿では**測定ベクトル**とよぶことにする.) $\omega = (\cos\alpha, \sin\alpha)^\top \in \mathbf{R}^2$ と二次元に制限した射影測定が $(\omega, -\omega$ を同一視する下で) 1 : 1 に対応するため, Γ'_k の任意の元は k 本の単位ベクトルの組み合わせと 1 : 1 に対応, 従って, $\alpha_1, \ldots, \alpha_k \in [0, \pi)$ として Γ'_k の測定を考えることにする.

測定ベクトル ω (もしくはパラメータ $\alpha \in [0, \pi)$) で指定される射影測定を m 回繰り返した場合のデータ n_+ の分布は二項分布であり

$$n_+ \sim Bin\left(m, \frac{1 + \omega \cdot \theta}{2}\right) \tag{8}$$

のようになる. 従って, この尤度関数を用いて Fisher 情報行列 $J(\theta)$ を計算できる. 導出は付録を参照.

以下では, 射影測定の組を明示したい場合に $J(\theta; \alpha_1, \ldots, \alpha_k)$, $C_k(\theta; \alpha_1, \ldots, \alpha_k)$ のように表記する.

3.2.1 補足：統計学者向けの表記上の注意

本論から外れるため, ここは読み飛ばして差し支えない.

量子力学のテキスト [23] や量子情報のテキスト [18] ではパラメータの推定に対して期待値ベースで考える. そのため, 実際には二項分布 (8) のような場合も $m = 1$ のベルヌーイ分布のような書き方をする. たとえば, 出力を $\{0, 1\}$ で与えるとテキストでは

$$p(0|\theta; \omega) = \frac{1 + \omega \cdot \theta}{2}, \qquad p(1|\theta; \omega) = \frac{1 - \omega \cdot \theta}{2}$$

のような表記がほとんどあろう. 著者の経験上, 統計学者が誤解しやすい所と思うので, 量子情報関連の書籍を読む場合は注意して欲しい.

なぜ, 表記に差が出るのか著者なりの意見を述べておく. 1 節でも述べたようにパラメータ数が少ない場合, 欲しい精度まで十分データ数を稼げるため $m \to \infty$ とみなしてよい. 言い換えると, 量子

物理 (主に理論) の世界では通常, 標本平均と期待値の差は, 古典ゆらぎや統計誤差などとよばれ, 存在しないか無視できるものである. そして, 量子情報に限らず, ほとんどの理論物理学者は古典ゆらぎの対処には興味がない. もし, 無視できないような差があると思われる場合は実験家の努力 (サンプルサイズ) が足りないのである. 量子物理学では通常, この観点に立って理論が展開される. そのため, 興味があるパラメータ θ と実験で出てくるデータの期待値 (例えば $E[n_+]$) とを結ぶ式が重要であり, それをサンプルサイズ $m=1$ の式で書き下すようである.

一方, 1 節で述べた精密測定のような状況だとパラメータ数も増えるため安易にサンプルサイズを増やすのも限界があり, 古典ゆらぎは無視できない. そして, ほとんどの統計学者は, こうした古典ゆらぎの対処のプロである. ルールを理解すれば尤度関数は陽に書き下せるため, 統計学者にとって大いに活躍の余地があると著者は考えている.

3.3 漸近リスク関数 C_2, C_4, C_∞

まず, $k=2$ の場合は直接計算により以下で与えられる.

Lemma 2.

$$C_2(r,\varphi;\alpha_1,\alpha_2) = 2\cdot\frac{2-r^2\cos^2(\varphi-\alpha_1)-r^2\cos^2(\varphi-\alpha_2)}{\sin^2(\alpha_1-\alpha_2)} \tag{9}$$

特に実際の物理実験では $|\alpha_1-\alpha_2|=\pi/2$ (本稿では**直交測定, 標準測定**とよぶ.) に相当する射影測定の組を用いるが,

$$C_2(r,\varphi;\mathbf{M}_{std}) := C_2(r,\varphi;\alpha_1,\alpha_1\pm\pi/2) = 2(2-r^2)$$

となる. (α_1,φ の依存性が消える.) 4 節で Γ_2' の各射影測定について詳細に比較する.

次に $k=4$, つまり 4 種類の射影測定を行う場合を考えてみる. 漸近リスク関数は $\alpha_1,\dots,\alpha_4$ と r,φ の関数になるが一般的な形は煩雑すぎる. そこで $\alpha_2-\alpha_1=\pi/2, \alpha_3-\alpha_1=\pi/4, \alpha_4-\alpha_1=3\pi/4$ にとる (本稿では **45 度ずらし測定**とよぶ.) と α_1,φ の項もすべて消えて

$$\begin{aligned}C_4(r,\varphi;\mathbf{M}_{4,\pi/4}) &:= C_4(r,\varphi;\alpha_1,\alpha_1+\pi/2,\alpha_1+\pi/4,\alpha_1+3\pi/4)\\ &= 2(2-r^2)\cdot\left\{\frac{16(1-r^2)+2r^4}{16(1-r^2)+3r^4}\right\}\end{aligned}$$

を得る．ここで例えば $\alpha_3 = \alpha_1 = \alpha_2 - \pi/2 = \alpha_4 - \pi/2$ とすれば，これは Γ'_2 の元であり，通常の射影測定に他ならないことに注意する．その意味で $\mathbf{M}_{std}$ も Γ'_4 の射影測定の特別な場合とみなして比較検討することが可能になる．

すると，明らかに $0 < r \leq 1$ では $C_4(r, \varphi; \mathbf{M}_{4,\pi/4})$ の方が $C_2(r, \varphi; \mathbf{M}_{std})$ より小さい．つまり，従来の物理実験で使われている測定方法は漸近リスク関数の意味で非許容的である．

なお，さらに測定の種類を増やすことも考えられる．ヒューリスティックな議論では，$\alpha \sim U(0, 2\pi)$ でランダムに射影測定を選ぶ測定 (本稿では**ランダム射影測定**とよぶ.) として Fisher 情報行列の期待値を用いて評価できる．

以上を定理の形にまとめておこう．

Theorem 2. QSD problem $(\rho(\theta)^{\otimes n}, \Theta_\eta, \|\theta - u\|^2)$ で射影測定の比較を考える．直交測定, 45 度ずらし測定, ランダム射影測定についてそれぞれ漸近リスク関数を計算すると以下のようになる．

$$C_2(\theta; \mathbf{M}_{std}) = 2(2 - r^2),$$
$$C_4(\theta; \mathbf{M}_{4,\pi/4}) = 2(2 - r^2) \left\{ \frac{16(1 - r^2) + 2r^4}{16(1 - r^2) + 3r^4} \right\},$$
$$C_\infty(\theta; \mathbf{M}_{rand}) = \left(1 + \sqrt{1 - r^2}\right)^2.$$

したがって, $\mathbf{M}_{rand} \prec \mathbf{M}_{4.\pi/4} \prec \mathbf{M}_{std}$.

Proof. $0 \leq r \leq 1$ において以下の不等式が成立することを示せばよい．

$$(1 + \sqrt{1 - r^2})^2 \leq 2(2 - r^2) \left\{ \frac{16(1 - r^2) + 2r^4}{16(1 - r^2) + 3r^4} \right\} \leq 2(2 - r^2)$$

($r = 1$ では明らかに等号不成立.)

2 番目の不等式は明らかなので 1 番目を単純計算で示す．まず

$$(1 + \sqrt{1 - r^2})^2 = 2(2 - r^2) \left\{ \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{1 - r^2}}{2 - r^2} \right\}$$

と変形.

$$B := \left\{ \frac{16(1-r^2)+2r^4}{16(1-r^2)+3r^4} \right\} - \left\{ \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{1-r^2}}{2-r^2} \right\} \geq 0$$

を示す. $u=\sqrt{1-r^2}$ とおくと $r^2 = 1-u^2$ であり,

$$\begin{aligned}
B &= \left\{ 1 - \frac{(1-u^2)^2}{16u^2+3(1-u^2)^2} \right\} - \left\{ \frac{1}{2} + \frac{u}{1+u^2} \right\} \\
&= \left\{ 1 - \frac{(1-u^2)^2}{16u^2+3(1-u^2)^2} \right\} - \left\{ 1 - \frac{(u-1)^2}{2(1+u^2)} \right\} \\
&= \frac{(u-1)^2}{2(1+u^2)} - \frac{(1-u^2)^2}{16u^2+3(1-u^2)^2} \\
&= (u-1)^2 \left\{ \frac{1}{2(1+u^2)} - \frac{(1+u)^2}{16u^2+3(1-u^2)^2} \right\} \\
&= \frac{(u-1)^2}{2(1+u^2)\{16u^2+3(1-u^2)^2\}} \{16u^2+3(1-u^2)^2-(1+u)^2\cdot 2(1+u^2)\}
\end{aligned}$$

ここで $16u^2+3(1-u^2)^2-(1+u)^2\cdot 2(1+u^2)=(u-1)^4\geq 0$ であるから,

$$B = \frac{(u-1)^2}{2(1+u^2)\{16u^2+3(1-u^2)^2\}}(u-1)^4 \geq 0$$

□

いくつか注意を述べておく. まず, 二乗損失の場合, かつ, この QSD problem の場合は, 直交測定と４５度回しにおいて $\theta=(r,\varphi)$ のうち φ に依存しない形になっている. これは二乗損失のリスク関数は $1/m$ のオーダーではパラメータ r のみに依存することを示しており自明ではない結果である. 実際, 今回は詳しく触れないが inFidelity とよばれる損失関数では直交測定を用いても $\varphi-\alpha_1$ のような項が残る. なお, $\varphi-\alpha_1, \alpha_1-\alpha_2$ のような項で入ってくることは回転対称性からただちにわかる.

また, ランダム射影測定を用いることによる改善の度合いは弱い. その良さは $r=1$ の近くだけである. 推定誤差の大きな改善はむしろ直交測定と 45 度回し測定の所, $r=1$ の近くで生じる.

統計理論からの提案

2 次元ヒルベルト空間での 2 パラメータの推定, 具体的には

$$\rho = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \theta_1 - \mathrm{i}\theta_2 \\ \theta_1 + \mathrm{i}\theta_2 & 1 \end{pmatrix}$$

のようなケースを考える. 通常,

$$\mathbf{E}_j = \left\{ \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_j} \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_j} & 1 \end{pmatrix}, \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha_j} \\ -\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_j} & 1 \end{pmatrix} \right\}, j = 1, 2; |\alpha_1 - \alpha_2| = \pi/2$$

(とくに $\alpha_1 = 0, \alpha_2 = \pi/2$) といった標準的な射影測定を行っているが, 統計的推定論の観点からは, 45 度回しの射影測定を用いて MLE やベイズ推定を行うべきである.

実際の物理実験では, 測定ベクトルが互いに直交する 2 種類の射影測定を $n/2$ 回ずつ行ってデータを取得しパラメータ推定を行ってきた (従来法). 量子力学の成立から約 90 年, 従来法は実験的にもっとも自然な測定方法であり異論を挟む余地はないように思われたが, 簡単な測定の工夫で推定精度を上げられる ことが示された.

4　2 本の射影測定を用いる場合の性能比較

本稿で考えている問題では, (4 種類に増やすと非許容的であるとはいえ) 2 種類の射影測定を用いる場合, 直交測定 ($|\alpha_1 - \alpha_2| = \pi/2$) がきわめて自然である. わざわざ射影測定で二つの測定ベクトルが互いに斜交する測定 ($|\alpha_1 - \alpha_2| \neq \pi/2$) (本稿では**斜交測定**とよぶ) を用いる理由はなさそうに見えるが, 漸近リスク関数の言葉でこうしたことを議論してみよう. また, 直交測定がどのような意味で優れているのかも明らかにしたい.

まず, 斜交測定をうまくとると局所的に直交測定より推定誤差が小さくなる. これは, 斜交測定の場合, 真のパラメータの角度方向 φ の依存性が残ってしまうため, 二つの測定が φ に近い所に来る場合, φ の近傍ではよく推定でき, そこから離れると推定精度が悪いということによる. より具体的には式 (9) を用いて

$$f(\alpha_1, \alpha_2; r, \varphi) := 2 \cdot \frac{2 - r^2\cos^2(\varphi - \alpha_1) - r^2\cos^2(\varphi - \alpha_2)}{\sin^2(\alpha_1 - \alpha_2)} - 2 \cdot (2 - r^2)$$

とおくと, $f<0$ となることがある. 実際, $r=1$, $\varphi-\alpha_1=\pi/4$, $\varphi-\alpha_2=-\pi/8$ とすればよい.

こうした事実も踏まえて以下, 詳細に検討してみよう.

4.1 互いに斜交する射影測定を用いた場合の推定性能の評価

まず, もう少し系統的に直交測定 ($|\alpha_1-\alpha_2|=\pi/2$) と比較するため変数をおきなおす. 式 (9) において $\psi:=\varphi-\alpha_1$, $\beta:=\alpha_1-\alpha_2$ として,

$$\begin{aligned}
C_2(r,\varphi;\alpha_1,\alpha_2) &= 2\cdot\frac{2-r^2\cos^2(\varphi-\alpha_1)-r^2\cos^2(\varphi-\alpha_2)}{\sin^2(\alpha_1-\alpha_2)}\\
&= 2\cdot\frac{2-r^2\cos^2(\psi)-r^2\cos^2(\psi+\beta)}{\sin^2(\beta)}\\
&= 2\cdot\frac{2-r^2\{1+\cos\beta\cos(2\psi+\beta)\}}{\sin^2(\beta)}.
\end{aligned}$$

従って, $\psi=-\frac{\beta}{2}\ (\bmod \pi)$ で最小, $\psi=-\frac{\beta}{2}+\frac{\pi}{2}(\bmod \pi)$ で最大. $\cos\beta\geq 0(-\pi/2\leq\beta\leq\pi/2)$ として

$$\begin{aligned}
\min_{\psi} C_2(r,\varphi;\alpha_1,\alpha_2) &= 2\cdot\frac{2-r^2(1+\cos\beta)}{\sin^2(\beta)},\\
\max_{\psi} C_2(r,\varphi;\alpha_1,\alpha_2) &= 2\cdot\frac{2-r^2(1-\cos\beta)}{\sin^2(\beta)}.
\end{aligned}$$

φ に戻してこの結果をまとめると以下のようになる.

Lemma 3. Γ_2' の射影測定の漸近リスク関数について $0\leq r<1$ の範囲で任意に r を固定, $\beta=\alpha_1-\alpha_2\neq 0$ とする. この時角度方向 φ で見て最大と最小は β のみで決まり,

$$\begin{aligned}
\min_{\varphi} C_2(r,\varphi;\alpha_1,\alpha_2) &= 2\cdot\frac{2-r^2(1+\cos\beta)}{\sin^2(\beta)},\quad \left(\varphi=\frac{1}{2}(\alpha_1+\alpha_2),\quad \bmod \pi\ \right)\\
\max_{\varphi} C_2(r,\varphi;\alpha_1,\alpha_2) &= 2\cdot\frac{2-r^2(1-\cos\beta)}{\sin^2(\beta)},\quad \left(\varphi=\frac{1}{2}(\alpha_1+\alpha_2+\pi),\quad \bmod \pi\ \right)
\end{aligned}$$

となる.

上の補題で形式的には $r=1$ として意味を持つが漸近リスク関数の元々の意味を失うため, はずしてある.

次に最小値が直交測定の漸近リスク $2(2-r^2)$ よりも真に小さくなるような範囲を調べる.

$$
\begin{aligned}
&2(2-r^2)-2\cdot\frac{2-r^2(1+\cos\beta)}{\sin^2(\beta)}>0\\
\Longleftrightarrow&(2-r^2)\sin^2\beta-2+r^2(1+\cos\beta)>0\\
\Longleftrightarrow&\cos\beta\{r^2(\cos\beta+1)-2\cos\beta\}>0
\end{aligned}
$$

$\cos\beta>0$ とすると,

$$
\begin{aligned}
&r^2(\cos\beta+1)-2\cos\beta>0,\\
\Longleftrightarrow\quad& r^2>\frac{2\cos\beta}{1+\cos\beta}
\end{aligned}
$$

右辺は $\cos\beta$ の単調増加関数であり, $0<|\beta|<\pi/2$ において 0 から 1 までを動く. とくに $|\beta|$ が $\pi/2$ に近い所で 0 に近くなる. 従って, 直交測定 $(\beta=\pi/2)$ より少し β を小さくすると, 改善の度合いは弱いものの, 十分小さい r についても, $\psi=-\frac{\beta}{2}(\mod\pi)$ の近傍で, 直交測定よりも推定誤差が小さくなる. また, 斜交測定で許容的なものが存在することが期待される.

次に斜交測定同士での比較を考える. C_2 の最小値について β を動かしてどこまで下げられるかを検討する.

Lemma 4. r を任意に固定した際, 斜交測定の範囲で測定を動かした漸近リスク関数の最小値は

$$
\min_{\beta\neq0}C_2=2-r^2+2\sqrt{1-r^2}
$$

この最小値は β が $\cos\beta=\dfrac{(2-r^2)-2\sqrt{1-r^2}}{r^2}$ の時, その時に限り達成する.

Proof. $u = \cos\beta$ とおくと,

$$r^2 > \frac{2\cos\beta}{1+\cos\beta} = \frac{2u}{1+u} \qquad \Longleftrightarrow \qquad u < \frac{r^2}{2-r^2}$$

により $0 < u < \frac{r^2}{2-r^2}$ として以下の最小問題を考える.

$$\min_{0<u<\frac{r^2}{2-r^2}} 2\cdot\frac{2-r^2(1+u)}{1-u^2} \tag{10}$$

ここで右辺は微分計算により $r^2u^2 - 2(2-r^2)u + r^2 = 0$ の解 u_+, u_- のうち小さい方 u_-, つまり,

$$u_- = \frac{(2-r^2) - 2\sqrt{1-r^2}}{r^2}$$

でただ一つの最小値をとることがわかる. (10) の式に代入して,

$$2\cdot\frac{2-r^2(1+u_-)}{1-u_-^2} = 2 - r^2 + 2\sqrt{1-r^2}$$

(右辺は解と係数の関係 $u_+u_- = 1$ により $u_+/r^2 = 1/(r^2u_-)$ とおいても検算できる.) □

以上を踏まえて許容性に関する結果が得られる.

まず, $\beta = 0$ では漸近リスクは発散する. これは 1 種類の測定のみを行うため 2×2 の Fisher 情報行列がランク落ちすることによる. 元々の損失関数の設定ではパラメータと決定空間の双方で有界だったため, これは漸近理論に持ち込む際に起きている. いずれにせよ $\beta = 0$ は非許容的であるとして考察からははずすことにする. 以下 $0 < |\beta| < \pi/2$ として考える.

Theorem 3. QSD problem $(\rho(\theta)^{\otimes n}, \Theta_\eta, \|\theta - u\|^2)$ を $\mathcal{P}_{2,n/2}$ で考える. 漸近リスク関数 C_2 を用いて, $\mathcal{P}_{2,n/2}$ の端点に相当する Γ'_2 の元のうち $0 < |\alpha_1 - \alpha_2| < \pi/2$ となる斜交測定の性能を評価する. $\beta := \alpha_1 - \alpha_2$ とおいて

(i) $(1-\eta)^2 \le \frac{2\cos\beta}{1+\cos\beta}$ のとき, 斜交測定は非許容的.

(ii) $(1-\eta)^2 > \frac{2\cos\beta}{1+\cos\beta}$ のとき, 斜交測定は許容的.

Proof. $(1-\eta)^2 \le \frac{2\cos\beta}{1+\cos\beta}$ のとき, 任意の $0 \le r \le 1-\eta$, $\varphi \in [0, 2\pi]$ を固定すると

$$\begin{aligned} C_2(r,\varphi;\alpha_1,\alpha_2) &\ge \min_{\varphi} C_2(r,\varphi;\alpha_1,\alpha_2) \\ &= 2\cdot\frac{2-r^2(1+\cos\beta)}{\sin^2(\beta)} \\ &\ge 2(2-r^2) \\ &= C_2(r,\varphi;\mathbf{M}_{std}) \end{aligned}$$

が成立する. $r=0$ では真に不等号が成立するため, 直交測定 $(\beta=\pi/2)$ に優越される.

逆に $(1-\eta)^2 > \frac{2\cos\beta}{1+\cos\beta}$ のとき, この斜交測定の最小値は直交測定よりも小さくなるので, 次に異なる斜交測定同士での比較を考える. ここで

$$\cos\beta = \frac{(2-r^2)-2\sqrt{1-r^2}}{r^2} = \frac{r^2}{(2-r^2)+2\sqrt{1-r^2}}$$

はただひとつの解 $r=r_\beta$ をもつことに注意する. (右辺は $0<r<1$ で狭義単調増加し 0 から 1 の間を動く.) $r=r_\beta$ における漸近リスク関数について, すべての斜交測定の中で最小値を調べる.

α_1', α_2' を $0 < |\alpha_1' - \alpha_2'| \le \pi/2$ で任意に固定した時

$$\begin{aligned} C_2(r_\beta,\varphi;\alpha_1',\alpha_2') &\ge \min_{\varphi} C_2(r_\beta,\varphi;\alpha_1',\alpha_2') \\ &= 2\cdot\frac{2-r_\beta^2(1+\cos\beta')}{1-\cos^2\beta'} \quad (\varphi = \frac{1}{2}(\alpha_1'+\alpha_2'), \quad \bmod \pi\ ) \\ &\ge 2-r_\beta^2+2\sqrt{1-r_\beta^2} \end{aligned}$$

最後の不等号は $\cos\beta \ne \cos\beta'$ では等号成立しない. また, $\beta' = -\beta$ の時, 最小値を与える φ が異なる点になる. 以上から α_2 を任意に固定, $\alpha_2+\beta, \alpha_2$ なる斜交測定をとると, これは, $\theta_\beta := (r_\beta, \alpha_2 + \frac{1}{2}\beta)$ なる点において, ただ一つ漸近リスク関数の最小値を達成する.

$$\min_{\alpha_1',\alpha_2'} C_2(\theta_\beta;\alpha_1',\alpha_2') = C_2(\theta_\beta;\alpha_2+\beta,\alpha_2)$$

従って, Lemma 1 により $\alpha_2+\beta, \alpha_2$ なる斜交測定は許容的である. ここで α_2 は任意だったので, $(1-\eta)^2 > \frac{2\cos\beta}{1+\cos\beta}$ を満たすように β を設定した斜交測定はすべて許容的となる. □

Theorem 4. QSD problem $(\rho(\theta)^{\otimes n}, \Theta_\eta, \|\theta - u\|^2)$ を $\mathcal{P}_{2,n/2}$ で考える. 漸近リスク関数 C_2 を用いて, $\mathcal{P}_{2,n/2}$ の端点に相当する Γ'_2 の元のうち直交測定は許容的.

Proof. まず, 任意の r を $0 \leq r \leq 1-\eta$ を満たすよう固定して考える.

直交測定が任意の斜交測定 $(\alpha_1, \alpha_2,\ \beta = \alpha_1 - \alpha_2 \neq 0)$ に優越されないことを示す. 実際, $\pi\,(\mathrm{d}\varphi) = \frac{\mathrm{d}\varphi}{2\pi}$ を角度方向の事前分布とみなすと

$$\int C_2(r, \varphi; \alpha_1, \alpha_2)\frac{d\varphi}{2\pi} = 2 \cdot \frac{2-r^2}{\sin^2\beta} > 2(2-r^2)$$

が成立する. つまり

$$\inf_{\alpha_1,\alpha_2} \int C_2(r, \varphi; \alpha_1, \alpha_2)\pi(\mathrm{d}\varphi)$$

の inf を達成している. 特に, すべての直交測定は互いに漸近リスク関数の意味でリスク同値であり, リスク同値を除いて唯一, inf を達成している. 従って, Theorem 1 により r を固定した下で, リスク許容的であることが示された. r は任意だったので, r, φ の両方をパラメータとして動かしてもやはり許容的である. □

2 種類の射影測定で考える場合, ミニマックス性と直交性は同値になる.

Theorem 5. QSD problem $(\rho(\theta)^{\otimes n}, \Theta_\eta, \|\theta - u\|^2)$ を $\mathcal{P}_{2,n/2}$ で考える. 漸近リスク関数 C_2 を用いて, $\mathcal{P}_{2,n/2}$ の端点に相当する Γ'_2 の元のうち直交測定とミニマックスであることは同値.

Proof. 端点の測定は直交測定・斜交測定ともに $r=0$ で最悪値をとる.

$$\sup_{r,\varphi} C_2 = \frac{4}{\sin^2\beta}$$

これより $\beta = \pi/2$ が端点の中ではミニマックスとなることは明らか. (また, 斜交測定はミニマックスにはならないことも明らか.) すべて同じ点 $\theta = 0$, その点でのみ最悪値をとることから, 端点の凸結合を用いても結論は変わらない. つまり, 直交測定は $\mathcal{P}_{2,n/2}$ 全体でみてミニマックス決定 POVM を与える. □

2 種類の直交測定 $\mathbf{E}_H, \mathbf{E}_T$ を用意し, コインをふって表なら $\mathbf{E}_H$ 裏なら $\mathbf{E}_T$ を行って, それぞれ, 例えば最尤推定でパラメータを推定する方式を考える. これはもはや射影測定ではなくなり, 決定 POVM を $\mathbf{M}_{HT}$ とあらわすと $\mathbf{M}_{HT} \in \mathcal{P}_{2,n/2}$ であるが端点集合には入らない $(\mathbf{M}_{HT} \notin ex(\mathcal{P}_{2,n/2}))$. しかし, 2 種類のどちらもリスク同値であり, ミニマックスであるため, $\mathbf{M}_{HT}$ はミニマックス決定 POVM になっている.

4.2 ランダム射影測定と斜交測定との比較

ややヒューリスティックな議論になるが, ランダム射影測定と斜交測定の比較も少し触れる. 3 節で見たように, ランダム射影測定 $\mathbf{M}_{rand}$ は 2 種類の直交測定や 4 5 度ずらし測定もすべて優越している. しかし, 斜交測定は局所的に性能が高いため非常にせまいパラメータの範囲で勝てると考えるかもしれない. この点をはっきりさせておきたい.

Theorem 6. QSD problem $(\rho(\theta)^{\otimes n}, \Theta_\eta, \|\theta - u\|^2)$ を考える. 漸近リスク関数 C_2, C_∞ で 2 種類の斜交測定（α_1, α_2）とランダム射影測定を比較すると後者は斜交測定をすべて優越する. (したがって, 2 種類の射影測定はランダム射影測定にすべて優越され非許容的となる.)

Proof. 直接比較を行う. $r = 0$ ではランダム射影測定の方が真に漸近リスク関数の値が小さい. $0 < r \leq 1$ として最小値がランダム射影測定の漸近リスク関数より小さくなるかどうかを見る. また $\beta := \alpha_1 - \alpha_2$ とし $\sin\beta \neq 0$ とする.

$u = \sqrt{1-r^2}$ とおくと

$$
\begin{aligned}
C_2 - C_\infty &\geq 2 \cdot \frac{2 - r^2(1+\cos\beta)}{\sin^2\beta} - \left(1 + \sqrt{1-r^2}\right)^2 \\
&= \frac{1}{\sin^2\beta}\left[\{4 - 2(1-u^2)(1+\cos\beta)\} - \sin^2\beta(1+u)^2\right] \\
&= \frac{1}{\sin^2\beta}\left[(-\sin^2\beta + 2 - 2\cos\beta)u^2 + 2\sin^2\beta u + \{-\sin^2\beta + 2 + 2\cos\beta\}\right] \\
&= \frac{1}{\sin^2\beta}\left\{(1-\cos\beta)^2u^2 - 2(\sin^2\beta)u + (1+\cos\beta)^2\right\} \\
&= \frac{1}{\sin^2\beta}\left\{(1-\cos\beta)u - (1+\cos\beta)\right\}^2 \\
&\geq 0
\end{aligned}
$$

□

なお, 半角の公式を用いると最後の式は

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{\sin^2\beta}\{(1-\cos\beta)u - (1+\cos\beta)\}^2 &= \frac{4\left\{\left(\sin^2\frac{\beta}{2}\right)u - \cos^2\frac{\beta}{2}\right\}^2}{4\sin^2\frac{\beta}{2}\cos^2\frac{\beta}{2}} \\
&= \frac{\left\{\left(\tan^2\frac{\beta}{2}\right)u - 1\right\}^2}{\tan^2\frac{\beta}{2}}
\end{aligned}
$$

となり $u = \sqrt{1-r^2} = (\tan(\beta/2))^{-2}$ でちょうど一致するため, 2 組の斜交測定で角度方向で一番, 推定性能のよい所でぎりぎり負けている.

4.3 本節のまとめ

許容性やミニマックスに関する叙述はやや細かいため改めてまとめておこう.

QSD problem $(\rho(\theta)^{\otimes n}, \Theta_\eta, \|\theta - u\|^2)$ を $\mathcal{P}_{2,n/2}$ で考える. 漸近リスク関数 C_2 を用いて, $\mathcal{P}_{2,n/2}$ の端点に相当する Γ_2' の元, つまり, 直交測定, 斜交測定の性能に注目する. まず, 漸近リスク関数は以下のようになる.

(i) 直交測定たちは, すべてリスク同値, $C_2(r,\varphi;\mathbf{M}_{std})=2(2-r^2)$. 特に C_2 は角度方向には依存しない [*3].

(ii) 斜交測定の場合は $\psi:=\varphi-\alpha_1$, $\beta:=\alpha_1-\alpha_2(\neq 0)$ とおくと

$$C_2(r,\varphi;\alpha_1,\alpha_2)=2\cdot\frac{2-r^2\{1+\cos\beta\cos(2\psi+\beta)\}}{\sin^2\beta}$$

また, 推定性能は以下のようになる. ただし, 漸近リスク関数を用いた評価である.

(i) 直交測定は 2 種類の射影測定のクラスの中ではミニマックスになる. また, 斜交測定はミニマックスにはならない.

(ii) 角度方向で「平均」をとると

$$2\cdot(2-r^2)<\int C_2(r,\varphi;\alpha_1,\alpha_2)\frac{d\varphi}{2\pi}=2\cdot\frac{2-r^2}{\sin^2\beta}$$

となるからこの意味でも, 直交測定が優れていることがわかる.

(iii) ミニマックスになっていることからわかるように, すべての直交測定は許容的. また, パラメータ空間 Θ_η で考えているため $\beta:=\alpha_1-\alpha_2$ とおいて

(a) $(1-\eta)^2\leq\frac{2\cos\beta}{1+\cos\beta}$ のとき, 斜交測定は非許容的.

(b) $(1-\eta)^2>\frac{2\cos\beta}{1+\cos\beta}$ のとき, 斜交測定は許容的.

(iv) Γ_2' のすべての測定は (直交, 斜交), ランダム射影測定によって優越される.

上の叙述で, 直交測定では漸近リスク関数が角度に依存しないというのは面白い結果である. 繰り返し測定を行う際に, 真値と同じ方向で測定していても, $\Delta\varphi$ だけ角度をずらした所で測定しても変わらないのである. n が小さい時の数値計算ではそうはならない. お

[*3] Fidelity では角度方向依存性が直交測定の場合にも残る.

そらく $1/n$ の次のオーダーを見ると, 真値とのずれ $\Delta\varphi$ によって推定精度に差が出てくると期待される [*4]

また, 斜交測定が Γ_2' の範囲では許容的になりえるというのは重要な事実である. パラメータ空間で角度方向に制限しない場合はあまり意味はない. しかしながら, パラメータ空間がかなり制限されているような場合, **斜交測定が直交測定をすべて優越, 直交測定が非許容的になるということも起こる**.

これは, 量子計算機の実証実験など, ある程度, $\theta = \theta_{tar}$ のような特定のパラメータ値の近くにいることを目指している場合, かなり重要になるかもしれない. ここでの議論は推定量では一次漸近有効推定量を用いることを前提にしており, ベイズ推定を使わず, 最尤推定量あるいは線形推定量を用いるにしても, 直交とは限らない射影測定の取り方が重要であることを示唆している. また, このような場合は等分配 ($n/2$ ずつで射影測定を行う方式) というクラスで考えること自体も再考の余地がある. 別の機会に詳細に論じることにしよう.

5 Concluding Remarks

本稿では iQSD の枠組み (Tanaka [28], 田中& 山形 [29]) で許容性と漸近リスク関数を導入した. よく知られているように許容性は損失関数にも依存する概念である. 本稿では二乗誤差での解析結果を与えるが, 量子情報でよく使われる inFidelity とよばれる損失関数を用いると少し結果が変わる部分もあり, これらの比較は別の機会に発表する.

また, 本稿では, わかりやすいように $\mathcal{P}_{k,m}$ なる決定 POVM のクラス, つまり, 等分配して射影測定を行って推定を行うクラスを取り扱ってきた. しかし, 本稿で述べている定式化の重要な点は, このクラスそのものではない. 重要なのは, 決定 POVM のクラスを明確にすることで, 実際のパラメータ推定における暗黙の制約条件を取り外す点である.

量子力学のテキスト [23] や量子情報のテキスト [18] ではパラメータの推定に対して, 期待値ベースで考えることがほとんどであり, 推定量は暗黙のうちに不偏推定量を前提に

[*4] inFidelilty の場合は $1/n$ のオーダーで出てくる.

することが多い．他にも 4 節で議論したように，直交測定が万能であるという盲信にも注意が必要である．

こうした考え方の背後には，サンプルサイズ n は実験ではいくらでも増やせ，期待値と標本平均は同一視してよいという見方があるように思う．しかし，現代の統計学ではサンプルサイズ n が有限であることが大前提であり，決定理論もまずは n 有限で厳密に構築する．その上で近似手法として $n \to \infty$ の漸近理論を用いる．

サンプルサイズが有限である場合に注意すべき点を挙げておく．

(i) パラメータの推定は期待値ではなく，まずは，尤度関数で考えるべきである．(尤度原理)

(ii) 推定誤差もしくはリスク関数の比較が本質的であり推定量の不偏性は必須ではない．

(iii) ベストな推定量はなく望ましいクラスの推定量があり，規準を与えないと互いに優劣がつかない．(完備類)

上記は現代の数理統計学を学んだ者にとっては常識的な事柄である．

最後になるが，量子統計の応用上の目的（ショートスパン）は，実際の実験で可能な測定と推定方法を工夫して推定精度を上げることであろう．そのためには，数理統計的な概念をしっかり理解した上で，物理学の常識にとらわれずに議論できる統計学者の参入が重要であると著者は考える．この原稿が，そのような統計学者の一助になれば幸いである．

謝辞

本研究は JSPS 科研費 JP16H04382, JP16K13775 の助成を受けた．また，著者は RIMS 研究集会での多くの有益な議論に感謝している．

付録 A　計算の詳細

本節では 3, 4 節で出てきた計算の導出と関連する公式を与えておく．基本的には定義に従って計算すればよい．平易な計算は導出過程を省略する．A.1 節では今考えている QSD problem (3.1 節) について k 種類の射影測定を行う場合の Fisher 情報行列の計算方法を示す．また, Hessian の式も与えておく．特に, $\mathrm{Tr}HJ^{-1}$ なる量はパラメータの取り方に依存しないため, ユークリッド座標系と極座標系の 2 種類で与えておく．A.2 節では, 漸近リスク関数 C_2, C_4, C_∞ の計算の詳細を示す．また, 今回は触れてないが inFidelity とよばれる量を損失関数にとる場合も参考として与えておく．

A.1　Fisher 情報行列と Hessian の計算

ここでは, 実ベクトルでタテ並び, ヨコ並びを強調したいとき以下のような表記をする．

$$|x\rangle = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \qquad \langle x| := (|x\rangle)^\top = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \end{pmatrix}$$

この表記法に従い, x, y の内積は $\langle x|y\rangle$ とあらわす．また, $|x\rangle\langle y|$ は今の場合, 2×2 のランク 1 の行列になる．以上は一般の $\mathbf{R}^d$ ベクトルでも同様である．

A.1.1　行列式の計算に関する補題

Fisher 情報行列の計算で逆行列を考える際に行列式の計算が必要となるので, それに関する補題を与えておく．

Lemma 5. 2 次元行列の場合, $|\omega_l\rangle = (\omega_l^1, \omega_l^2)^\top$ なるベクトルについて

$$\det\left(\sum_{l=1}^{k} |\omega_l\rangle\langle\omega_l|\right) = \sum_{1\le l<l'\le k} |\omega_l \times \omega_{l'}|^2$$

が成立．ここで $x \times y := x_1 y_2 - x_2 y_1$ とする．

一般の場合, d 次元ベクトルについて,

$$\det\left(\sum_{l=1}^{k}|\omega_l\rangle\langle\omega_l|\right)=\sum_{1\le l_1<l_2<\cdots<l_d\le k}\{\det[\omega_{l_1}\omega_{l_2}\ldots\omega_{l_d}]\}^2$$

が成立.

線形代数の初等的な方法で証明できるので, 証明は省略する.

A.1.2 Γ'_k の射影測定を用いた場合の尤度関数

2 次元ヒルベルト空間で k 種類の射影測定 ($\omega \in \mathbf{R}^2$, $\|\omega\|=1$ で指定) を用いる場合を考える. $j=1,\ldots,k$ の各測定を n 回ずつ繰り返し, データとして $n_+^1,\ldots,n_+^k$ が得られた場合, 尤度関数は以下のようにかける（3.2 節参照）.

$$\log p=\sum_{j=1}^{k}\log p^{(j)},$$
$$\log p^{(j)}=n_+^j\log\frac{1+\theta\cdot\omega_j}{2}+(n-n_+^j)\log\frac{1-\theta\cdot\omega_j}{2}.$$

以上の式を用いて, 漸近リスク関数の計算に必要な Fisher 情報行列 J, 特に $\mathrm{Tr}J$, $\det J$ を求めておく. また, Hessian も記載する. 座標系に依存しない量なので, ユークリッド座標系と極座標系で求める. ここでの考察に使うのは極座標系の表示である.

A.1.3 ユークリッド座標系の場合

$\theta=(x,y)^\top$, $\omega_j=(\cos\alpha_j,\sin\alpha_j)^\top$ として Fisher 情報行列を求めると

$$J_{xx}=\sum_{j=1}^{k}\frac{\cos^2\alpha_j}{1-(x\cos\alpha_j+y\sin\alpha_j)^2},$$
$$J_{xy}=\sum_{j=1}^{k}\frac{\cos\alpha_j\sin\alpha_j}{1-(x\cos\alpha_j+y\sin\alpha_j)^2},$$
$$J_{yy}=\sum_{j=1}^{k}\frac{\sin^2\alpha_j}{1-(x\cos\alpha_j+y\sin\alpha_j)^2},$$

二次元のベクトルを

$$|\eta_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{1-(x\cos\alpha_j + y\sin\alpha_j)^2}}\begin{pmatrix}\cos\alpha_j \\ \sin\alpha_j\end{pmatrix}$$

とおけば $J = \sum_{j=1}^{k} |\eta_j\rangle\langle\eta_j|$ となるから, Lemma 5 を用いて

$$\begin{aligned}\det J &= \sum_{1\le l<s\le k} |\eta_l \times \eta_s|^2 \\ &= \sum_{1\le l<s\le k} \frac{\sin^2(\alpha_l - \alpha_s)}{\{1-(x\cos\alpha_l + y\sin\alpha_l)^2\}\{1-(x\cos\alpha_s + y\sin\alpha_s)^2\}}\end{aligned}$$

また,

$$\mathrm{Tr} J = \sum_{l=1}^{k} \frac{1}{1-(x\cos\alpha_l + y\sin\alpha_l)^2}$$

となる. なお, 二乗誤差の Hessian は単位行列 I である.

J と可換な Hessian H を用いた誤差（例えば二乗誤差はユークリッド座標系だと $H=I$）の場合は, J と同時対角化できるので, $\mathrm{Tr} HJ^{-1}$ は J の固有値 λ_1, λ_2 のみに依存する. 従って, 二次元の場合は $\mathrm{Tr}J$, $\det J$ のみで求められる. 一般の場合でも二次元だと具体的に書き下すことができて,

$$\mathrm{Tr} H(\theta)J(\theta)^{-1} = \frac{1}{\det J}\{H_{xx}J_{yy} + H_{yy}J_{xx} - 2H_{xy}J_{xy}\} \tag{11}$$

のようになる. （上の式で $x \to r$, $y \to \varphi$ と読み替えて極座標系で求めても同じ.）

A.1.4 極座標系の場合

同様に極座標で Fisher 情報行列を求めると

$$\begin{aligned}J_{rr} &= \sum_{j=1}^{k} \frac{\cos^2(\varphi-\alpha_j)}{1-r^2\cos^2(\varphi-\alpha_j)}, \\ J_{r\varphi} &= \sum_{j=1}^{k} \frac{-r\cos(\varphi-\alpha_j)\sin(\varphi-\alpha_j)}{1-r^2\cos^2(\varphi-\alpha_j)}, \\ J_{\varphi\varphi} &= \sum_{j=1}^{k} \frac{r^2\sin^2(\varphi-\alpha_j)}{1-r^2\cos^2(\varphi-\alpha_j)},\end{aligned}$$

となる．$\det J, \mathrm{Tr}J$ はそれぞれ

$$\det J = r^2 \sum_{1\le l<s\le k} \frac{\sin^2(\alpha_l - \alpha_s)}{\{1 - r^2\cos^2(\varphi - \alpha_l)\}\{1 - r^2\cos^2(\varphi - \alpha_s)\}} \tag{12}$$

$$\mathrm{Tr}J = \sum_{j=1}^{k} \frac{\cos^2(\varphi - \alpha_j) + r^2\sin^2(\varphi - \alpha_j)}{1 - r^2\cos^2(\varphi - \alpha_j)} \tag{13}$$

のようになる．Hessian は

$$H = \begin{pmatrix} H_{rr} & H_{r\varphi} \\ H_{\varphi r} & H_{\varphi\varphi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & r^2 \end{pmatrix}$$

A.2　漸近リスク関数の導出

まず，Γ_2' の場合について計算する．参考のため inFidelity の場合も計算する．Γ_4' は一般の測定のパラメータ $\alpha_1, \ldots, \alpha_4$ を入れるのは煩雑なため省略する．Γ_∞' は測定パラメータ α に関する期待値を用いて考える．

Theorem 7. α_1, α_2 を測定ベクトルを指定する角度パラメータとする．この 2 種類の測定（直交するとは限らない）を行った際の二乗誤差 $W(\theta, u) = \|\theta - u\|^2$, inFidelity $1 - F^2(\rho(\theta), \rho(u))$ での漸近リスク関数はそれぞれ以下のようになる．(inFidelity, もしくは Fidelity F^2 の式と Hessian は例えば, Bagan *et al.* [1] を参照せよ.)

損失関数ごとの漸近リスク関数

$$\begin{aligned} C_{2,sq} &= 2 \cdot \mathrm{Tr}H_{sq}^{(Pol)}(J^{(Pol)})^{-1} \\ &= 2 \cdot \frac{2 - r^2\cos^2(\varphi - \alpha_1) - r^2\cos^2(\varphi - \alpha_2)}{\sin^2(\alpha_1 - \alpha_2)} \\ C_{2,Fid} &= 2 \cdot \mathrm{Tr}H_{Fid}^{(Pol)}(J^{(Pol)})^{-1} \\ &= \frac{1}{1 - r^2} \frac{\{1 - r^2\cos^2(\varphi - \alpha_1)\}\{1 - r^2\cos^2(\varphi - \alpha_2)\}}{\sin^2(\alpha_1 - \alpha_2)} \end{aligned}$$

Proof. $k=2$ として極座標では

$$\det J^{(Pol)} = r^2 \frac{\sin^2(\alpha_1-\alpha_2)}{\{1-r^2\cos^2(\varphi-\alpha_1)\}\{1-r^2\cos^2(\varphi-\alpha_2)\}}$$

また, 二乗損失の場合,

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}_w J^{(Pol)} &:= H_{rr} J^{(Pol)}\varphi\varphi + H_{\varphi\varphi} J^{(Pol)}_{rr} - 2H_{r\varphi} J^{(Pol)}_{r\varphi} \\
&= 1 \cdot J^{(Pol)}_{\varphi\varphi} + r^2 J^{(Pol)} rr \\
&= \sum_{j=1}^{2} \frac{r^2\sin^2(\varphi-\alpha_j) + r^2\cos^2(\varphi-\alpha_j)}{1-r^2\cos^2(\varphi-\alpha_j)} \\
&= r^2 \frac{2-r^2\cos^2(\varphi-\alpha_1)-r^2\cos^2(\varphi-\alpha_2)}{\{1-r^2\cos^2(\varphi-\alpha_1)\}\{1-r^2\cos^2(\varphi-\alpha_2)\}}
\end{aligned}$$

となるから (11) により

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr} H^{(Pol)}_{sq} (J^{(Pol)})^{-1} &= \frac{\mathrm{Tr}_w J^{(Pol)}}{\det J^{(Pol)}} \\
&= \frac{2-r^2\cos^2(\varphi-\alpha_1)-r^2\cos^2(\varphi-\alpha_2)}{\sin^2(\alpha_1-\alpha_2)}.
\end{aligned}$$

同様にして, inFidelity の場合は,

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}_w J^{(Pol)} &:= H_{rr} J^{(Pol)}_{\varphi\varphi} + H_{\varphi\varphi} J^{(Pol)} rr - 2H_{r\varphi} J^{(Pol)}_{r\varphi} \\
&= \frac{1}{4}\frac{1}{1-r^2} \cdot J^{(Pol)}_{\varphi\varphi} + \frac{1}{4} r^2 J^{(Pol)}_{rr} \\
&= \frac{1}{2}\frac{r^2}{1-r^2}
\end{aligned}$$

となるから

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr} H^{(Pol)}_{Fid} (J^{(Pol)})^{-1} &= \frac{\mathrm{Tr}_w J^{(Pol)}}{\det J^{(Pol)}} \\
&= \frac{1}{2}\frac{1}{1-r^2} \frac{\{1-r^2\cos^2(\varphi-\alpha_1)\}\{1-r^2\cos^2(\varphi-\alpha_2)\}}{\sin^2(\alpha_1-\alpha_2)}
\end{aligned}$$

を得る. □

なお, Γ'_4 も同様であるため計算は省略する. Γ'_∞ の場合は, $k \to \infty$ であり一様に選ぶものと考える. この場合,

$$\frac{1}{k}\sum_{j=1}^{k} J(\alpha_j;\varphi,r)$$

において $k \to \infty$ と考えて α に関して期待値をとる.

Lemma 6. $\alpha \sim U(0, 2\pi)$ なる一様分布でランダムに測定ベクトル $(\cos\alpha, \sin\alpha)^\top$ を選んだ場合, 平均化した Fisher 情報行列は極座標表示で

$$\bar{J} = \begin{pmatrix} \bar{J}_{rr} & \bar{J}_{r\varphi} \\ \bar{J}_{\varphi r} & \bar{J}_{\varphi\varphi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sqrt{1-r^2}} - 1\right) & 0 \\ 0 & 1-\sqrt{1-r^2} \end{pmatrix}$$

で与えられる.

Proof. $\alpha \sim U(0, 2\pi)$ なる一様分布を考えて直接計算による.

$$\bar{J}_{rr} = \int_0^{2\pi} \frac{d\alpha}{2\pi} \frac{\cos^2(\varphi-\alpha)}{1-r^2\cos^2(\varphi-\alpha)} = \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sqrt{1-r^2}} - 1\right),$$

$$\bar{J}_{r\varphi} = \int_0^{2\pi} \frac{d\alpha}{2\pi} \frac{-r\cos(\varphi-\alpha)\sin(\varphi-\alpha)}{1-r^2\cos^2(\varphi-\alpha)} = 0,$$

$$\bar{J}_{\varphi\varphi} = \int_0^{2\pi} \frac{d\alpha}{2\pi} \frac{r^2\sin^2(\varphi-\alpha)}{1-r^2\cos^2(\varphi-\alpha)} = 1-\sqrt{1-r^2}.$$

□

以上の結果を利用して次の漸近リスク関数を得る.

ランダム射影測定の漸近リスク関数

Theorem 8. 二乗誤差, inFidelity での漸近リスク関数はそれぞれ以下で与えられる.

$$C_\infty^{sq} = \left(1+\sqrt{1-r^2}\right)^2,$$

$$C_\infty^{F} = \frac{1}{4}\frac{1}{\sqrt{1-r^2}}\left(1+\sqrt{1-r^2}\right)^2$$

ランダム射影測定の場合, 回転に関する不変性から Fisher 情報行列は真の状態 (r, φ で定まる) のうち r のみに依存する.

また, inFidelity は $1/\sqrt{1-r^2}$ により $r \to 1$ で特異な振る舞いをすることに注意. 上の量は座標変換で不変な量であり KL divergence と同様. 逆に二乗損失は, 単にパラメータ空間の端だから特異な振る舞いは生じない. ただし, いずれにしろ, この特異性は

inFidelity が $r=1$ で微分不可（したがって解析接続不可）であることに起因するだけであり, inFidelity 自体は KL divergence と違って有界な損失関数なので問題はない. 漸近展開自体が $r=1$ では破たんするというだけである.

REFERENCES

[1] E. Bagan, M. A. Ballester, R. D. Gill, A. Monras, and R. Muñoz-Tapia: Optimal full estimation of qubit mixed states. *Phys. Rev. A*, **73** (2006), 032301.

[2] E. Bagan, M. A. Ballester, R. D. Gill, R. Muñoz-Tapia, and O. Romero-Isart: Separable Measurement Estimation of Density Matrices and its Fidelity Gap with Collective Protocols. *Phys. Rev. Lett.*, **97** (2006), 130501.

[3] N. A. Bogomolov: Minimax measurements in a general statistical decision theory. *Theor. Prob. Appl.*, **26** (1982), 787–795.

[4] N. Dunford and J. T. Schwartz: *Linear Operators Part* I: *General Theory.* John Wiley and Sons, New York, 1988, Chap. V.

[5] T. Ferguson: *Mathematical Statistics: A Decision Theoretic Approach.* Academic Press, New York, 1967, Chap.2.

[6] A. Fujiwara: Strong consistency and asymptotic efficiency for adaptive quantum estimation problems. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **39** (2006), 12489–12504.

[7] M. Guţă and J. Kahn: Local asymptotic normality for qubit states. *Phys. Rev. A*, **73** (2006), 052108.

[8] M. Guţă and A. Jençová: Local asymptotic normality in quantum statistics. *Commun. Math. Phys.*, **276** (2007), 341–379.

[9] M. Hayashi: Two quantum analogues of Fisher information from a large deviation viewpoint of quantum estimation. *J. Phys. A:Math. and Gen.*, **35** (2002), 7689–7727.

[10] M. Hayashi (ed): *Asymptotic Theory of Quantum Statistical Inference.* World

Scientific, Singapore, 2005.

[11] M. Hayashi and K. Matsumoto: Asymptotic performance of optimal state estimation in qubit system. *J. Math. Phys.*, **49** (2008), 102101.

[12] A. S. Holevo: Statistical Decision Theory for Quantum Systems. *J. Multivariate Anal.*, **3** (1973), 337–394.

[13] A. S. Holevo: Investigations in the general theory of statistical decisions. *Proc. Steklov Inst. Math.* **35**, **124** (1976) (In Russian), AMS Transl. (1978).

[14] A. S. Holevo: *Probabilistic and Statistical Aspects of Quantum Theory.* North-Holland, Amsterdam, 1982.

[15] D. F. V. James, P. G. Kwiat, W. J. Munro, and A. G. White: Measurement of qubits. *Phys. Rev. A*, **64** (2001), 052312.

[16] J. Kahn and M. Guţă: Local asymptotic normality for finite dimensional quantum systems. *Commun. Math. Phys.*, **289** (2009), 597–652.

[17] E. L. Lehmann: *Theory of point estimation.* Wiley, New York, 1983.

[18] M. A. Nielsen and I. L. Chuang: *Quantum Computation and Quantum Information.* Cambridge University Press, Cambridge, 2000.

[19] 岡本 亮, 光子を用いた量子測定実験, 数理解析研究所講究録, 1834 (2013), 124–135.

[20] M. Ozawa: Optimal measurements for general quantum systems. *Rep. Math. Phys.*, **18** (1980), 11–28.

[21] M. Paris and J. Řeháček (ed): *Quantum State Estimation*, Springer, Berlin, 2004.

[22] E. Prugovecki: Information-theoretical aspects of quantum measurement. *Int. J. Theor. Phys.*, **16**(1977), 321–331.

[23] J. J. Sakurai 著, San Fu Tuan 編 ; 桜井明夫訳: 現代の量子力学, 吉岡書店, 京都, 1989.

[24] T. Sugiyama, P. S. Turner, and M. Murao: Error probability analysis in quan-

tum tomography: A tool for evaluating experiments. *Phys. Rev. A*, **83** (2011), 012105.

[25] T. Sugiyama, P. S. Turner, and M. Murao: Adaptive experimental design for one-qubit state estimation with finite data based on a statistical update criterion. *Phys. Rev. A*, **85** (2012), 052107.

[26] 杉山 太香典: 大規模量子計算機の実用化における統計的課題. RIMS 講究録 2018 量子統計モデリングのための基盤構築, 2017 年, 1–17.

[27] F. Tanaka: Quantum Minimax Theorem, arXiv: `quant-ph/1410.3639`.

[28] F. Tanaka: Quantum statistical decision theory with a restricted class of measurements. RIMS workshop Building foundations for quantum statistical modeling, 2017, 45–69.

[29] 田中 冬彦, 山形 浩一: 量子統計的決定理論の最近の進展, 応用数理, to appear.

[30] K. Yamagata, A. Fujiwara, and R. D. Gill: Quantum local asymptotic normality based on a new quantum likelihood ratio. *Ann. Statist.*, **41** (2013), 2197–2217.

[31] A. W. van der Vaart: *Asymptotic statistics.* Cambridge University Press, Cambridge, 1998.

[32] C. van-Eeden: *Restricted Parameter Space Estimation Problems.* Springer, New York, 2006.

[33] A. Wald: *Statistical Decision Functions.* John Wiley & Sons, New York, 1950.