

量子局所不偏測定に対する 誤差の最小化

京都大学 理学研究科 林 正人 (Masahito Hayashi)

1 Introduction

量子力学においては、ある物理状態に対して、測定を行なったとき、その測定結果は一般には確率的にしか予言できない。特に、一般に互いに非可換な物理量は同時には測定不可能であるとされている。なかでも Heisenberg による不確定性原理はこの事実を位置と運動量に適用したものである。この有名な不確定性原理によると、位置の誤差 Δx と運動量の誤差 Δp に関しては、次の不等式が成立する。すなわち、

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar \quad (1.1)$$

である。誤差という表現を用いるとき普通何らかの測定が行われた上で、その測定に対する誤差を考えるべきである。しかし上記の不確定性が議論されるとき大抵の場合は、物理系に対する何らかの測定を行なった上で誤差を考えているわけではない。このように、量子力学における不確定性が、どの程度、実際に測定を行なったときの測定誤差に結び付くかということに関して今のところ十分に議論されているとは言い難い。

これらの問題に対して、量子系の測定を正確に定義し、さらにその上で測定の目的に応じて測定が満たすべき性質や、その際の誤差に関する研究が、60 年代後半から 70 年代にかけて、アメリカの Helstrom, Yuen, Kennedy, Lax, Personik や当時のソ連の Holevo により精力的に研究された。当初は光通信における受信過程の最適化と関連して始められ、主に工学的な要請から研究が行われていた。しかし、研究が進につれて、von Neumann [4] 以来の量子力学の観測問題と関連した研究との交流が促進された。特に、von Neumann 以来、量子系の測定は射影値測度で、表わされると考えられていたが、これらの研究を通じて、射影性を満たさない一般の Operator 値測度に対応する測定も存在することが明らかになった (定理 2.1)。

本文では、量子状態は密度演算子で表わされるとの立場に立ち、密度演算子に対する測定を定義し (§2) その測定の下で、もとの量子状態 (密度演算子) に対して統計的推測を行う場合について考える。但しこの際、被測定系となる量子状態はアприオリに密度演算子のある部分集合 $\{\rho(\theta) | \theta \in \Theta\}$ に含まれていると考えることにする。

いわゆる通常の統計的推測 (適当な推定量からもとの確率分布を推定する理論、今後量子系の統計的推測に対して古典系と呼ぶことにする。) における局所不偏性を、量子系において定式化することは容易であり (§3)、また、古典系の推定で基本となる分散や共分散行列を量子系で定式化することも容易である。

ところが、古典系において局所不偏推定量の中での測定精度の限界を指し示し、その範囲で最適な推定量を決定するために重要な役割を果たす Cramér-Rao 不等式に相当する概念を量子系において構成することになると少し事情が異なる。

現代までのところ、 $\{\rho(\theta) | \theta \in \Theta\}$ のパラメータの次元が 1 次元の場合については、古典系とほぼ同様の Cramér-Rao 不等式が成立することが知られている。(Holevo [1] Helstrom [8], 定理

5.1) さらに、パラメータが複数のときについては、後に定義する対称対数微分が互いに可換であるばいいについてのみに古典系とほぼ同様の Cramér-Rao 不等式が成立することが容易に示せる。

([1],[8] 定理 5.2) パラメータが複数で対称対数微分が互いに可換にならない場合については、一般的に解決する方法が全く見当たらず、現代までのところほとんど見通しが立っていないといっている。これまでのところわずかに成功した例が Yuen & Lax, Holevo による量子 Gauß 状態の推定問題 ([1][6]) と、長岡による Spin1/2 系混合状態 2 パラメータの場合だけであろう ([10])。

本文の目的は、これまで一般的手法がほとんど無かった、パラメータが複数の場合について、わずかではあるが一般的手法すなわち本文における主定理とも言うべき §6 における弱双対定理 (定理 6.1) と強双対定理 (定理 6.2) を提供した上で、その手法で解決できるいくつかの例 (§7 §8 §9) を紹介することにある。

以下では紙面の都合上、証明にかなりの紙数を要する定理に関しては証明を省略せざるを得なくなった。これらの定理の証明については、筆者の修士論文 [9] を参照していただきたい。また、この修士論文の内容については現代のところ投稿する予定である。

2 量子測定

まず最初に、今後必要になる記号について定義する。

- $\mathbf{K}$: 複素数体もしくは、実数体
- $\mathcal{H}$: $\mathbf{K}$ 上の可分 Hilbert 空間。対象となる量子系の表現空間
- $T_{sa}(\mathcal{H})$: $\mathcal{H}$ 上の self adjoint トレースクラスオペレータ全体
- $T_{sa}^{+,1}(\mathcal{H})$: $\mathcal{H}$ 上の密度作用素全体
- $B_{sa}(\mathcal{H})$: $\mathcal{H}$ 上の self adjoint かつ、有界線形作用素全体
- $B_{sa}^+(\mathcal{H})$: $B_{sa}(\mathcal{H})$ の元のうち正定値なものの全体

被測定系となる量子状態は $T_{sa}^{+,1}(\mathcal{H})$ 上の元で表わせる。

一方、表現空間を $\mathcal{H}$ として持つ量子系に対する測定は、測定値集合を Ω に持つとき、次の Ω 上のオペレータ値測度 ($\mathcal{M}(\Omega, \mathcal{F}(\Omega), \mathcal{H})$ の元) として表わされる。但し、 $\mathcal{F}(\Omega)$ は Ω 上の σ algebra。

$$M : \mathcal{F}(\Omega) \rightarrow B_{sa}^+(\mathcal{H}) \quad (2.1)$$

$$\circ M(\Omega) = I \quad (2.2)$$

$$\circ M(\cup_j B_j) = \sum_j M(B_j) \quad (2.3)$$

(弱収束)

(B_j は高々加算個で互いに disjoint な $\mathcal{F}(\Omega)$ の元の列。)

条件 (2.2) (2.3) を満たす (2.1) の集合を $\mathcal{M}(\Omega, \mathcal{F}(\Omega), \mathcal{H})$ と書く。この集合は convex set になっている。

状態 $\rho \in T_{sa}^{+,1}(\mathcal{H})$ に対して測定 $M \in \mathcal{M}(\Omega, \mathcal{F}(\Omega), \mathcal{H})$ を行ったときに得られる確率分布は、次のように与えられる。

$$\text{tr } M(dx) \rho \in \mathcal{M}(\Omega, \mathcal{F}(\Omega)) \quad (2.4)$$

さらに、次の条件 (2.5) (直交性) を満たす測定のことを単純測定と呼ぶ。

$$B_1, B_2 \in \mathcal{F}(\Omega), B_1 \cap B_2 = \emptyset \implies M(B_1)M(B_2) = 0 \quad (2.5)$$

単純測定の集合を $\mathcal{M}_s(\Omega, \mathcal{F}(\Omega), \mathcal{H})$ で表すことにする。さらに、 $\mathcal{M}(\Omega, \mathcal{F}(\Omega), \mathcal{H})$ の元で単純測定の一次結合で表わされる測定のことをランダム測定と呼ぶ。ランダム測定の集合を $\mathcal{M}_r(\Omega, \mathcal{F}(\Omega), \mathcal{H})$ で表すことにする。この集合は convex set になっている。

逆に、単純測定やランダム測定と区別して、 $\mathcal{M}(\Omega, \mathcal{F}(\Omega), \mathcal{H}) \setminus \mathcal{M}_r(\Omega, \mathcal{F}(\Omega), \mathcal{H})$ の元のことを一般化測定と呼ぶ。ここで、 Ω が topological space のときには $\mathcal{M}(\Omega, \mathcal{H})$ で $\mathcal{M}(\Omega, \mathcal{B}(\Omega), \mathcal{H})$ を表わすことにする。 $\mathcal{M}_s(\Omega, \mathcal{H})$, $\mathcal{M}_r(\Omega, \mathcal{H})$ についても同様のこととする。

このような説明では、測定とはどのようなものであるのかははっきりしない。そこで、いわゆる、von Neumann の測定理論について説明する。詳しくは、von Neumann [4] を参照のこと。一般にオブザーバブル $X \in \mathcal{B}_{sa}(\mathcal{H})$ の測定は von Neumann によると、次のように定式化されている。そのため準備として、

定義 2.1 $X \in \mathcal{B}_{sa}(\mathcal{H})$ に対して、 $M_X \in \mathcal{M}_s(\mathbb{R}, \mathcal{H})$ が X のスペクトル分解であるとは、

$$X = \int_{\mathbb{R}} x M_X(dx) \quad (2.6)$$

定義 2.2 オブザーバブル $X \in \mathcal{B}_{sa}(\mathcal{H})$ を 量子状態 $\rho \in \mathcal{T}_{sa}^{+,1}(\mathcal{H})$ に対して、測定したとき得られる確率分布は

$$\text{tr } M_X(dx) \rho \in \mathcal{M}(\Omega, \mathcal{F}(\Omega)) \quad (2.7)$$

このため、単純測定 $\mathcal{M}_s(\Omega, \mathcal{F}(\Omega), \mathcal{H})$ は比較的实现しやすい。

一方、ランダム測定は単純測定の一次結合で表わされるため、実現しやすい。例えば、ランダム測定 $M = \lambda M_1 + (1 - \lambda) M_2$, $1 > \lambda > 0$, $M_1, M_2 \in \mathcal{M}_s(\Omega, \mathcal{F}(\Omega), \mathcal{H})$ の場合、確率 λ で単純測定 M_1 を行い、確率 $1 - \lambda$ で単純測定 M_2 を行うとよい。このように単純測定 M_1, M_2 が実現できるなら、ランダム測定 M も実現できるはずである。しかし、ランダム測定にもならない $\mathcal{M}(\Omega, \mathcal{F}(\Omega), \mathcal{H})$ の元すなわち、一般化測定は多数存在する。これらの測定については、実現できるのであろうか。このことに対して、参考になるのが次の定理である。

定理 2.1 [Neumark 拡張]

任意の測定 $M \in \mathcal{M}(\Omega, \mathcal{F}(\Omega), \mathcal{H})$ に対して、適当な $\mathcal{H}$ を含む Hilbert 空間 $\mathcal{H}'$ と適当な Projection $P : \mathcal{H}' \rightarrow \mathcal{H}$ と適当な $\hat{M} \in \mathcal{M}_s(\Omega, \mathcal{F}(\Omega), \mathcal{H}')$ が存在して、次の式が成立する。

$$\forall B \in \mathcal{F}(\Omega) , \quad M(B) = P \hat{M}(B) \quad \text{on } \mathcal{H} \quad (2.8)$$

証明は、Neumark [5] を参照のこと。

この定理により、測定 $M \in \mathcal{M}(\Omega, \mathcal{F}(\Omega), \mathcal{H})$ を実現するには、 $\mathcal{H}$ を含む量子系 $\mathcal{H}'$ 上の測定を行えばよいことになる。このように、Neumark 拡張を用いて一般の Operator 値測度の実現可能性について言及したのは Neumark の弟子である Holevo である。また、現実の測定と $\mathcal{M}(\Omega, \mathcal{F}(\Omega), \mathcal{H})$ との関係については最近出版された [3] が詳しい。

3 パラメータ推定と局所不偏測定

$\Theta \subset \mathbb{R}^n$ が与えられて $\mathcal{T}_h^{+,1}(\mathcal{H})$ の部分集合にパラメータが埋めこまれている場合について考えよう。

$$\rho : \Theta \rightarrow \mathcal{T}_h(\mathcal{H}) \quad (3.1)$$

ρ は単射かつ連続で微分可能とする。

ここで、測定 $M \in \mathcal{M}(\mathbf{R}^n, \mathcal{B}(\mathbf{R}^n), \mathcal{H})$ を行って、状態 $\rho(\theta)$ のパラメータ θ を推定することにする。

このときの平均値は

$$E_{M,i}(\theta) := \int_{\mathbf{R}^n} x_i \operatorname{tr} M(dx) \rho(\theta) \quad (3.2)$$

測定値の平均値でもって状態 ρ のパラメータを推定するため、測定 $M \in \mathcal{M}(\mathbf{R}^n, \mathcal{B}(\mathbf{R}^n), \mathcal{H})$ に次の条件（不偏性）を課すことにする。

$$E_{M,i}(\theta) = \theta \quad \forall \theta \in \Theta \quad (3.3)$$

ここで、 Θ は十分小さくて、0 を含んでいると仮定すると、 $\theta = 0$ でテイラー展開できて、次の条件に書き換えられる。

$$E_{M,i}(0) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial E_{M,i}}{\partial \theta_j}(0) \theta_j + \dots = \theta_i \quad (3.4)$$

ここで、 θ の2次以上の高次の項を無視できるとすると、次のような条件に書き換えられる。

$$E_{M,i}(0) = 0 \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial E_{M,i}}{\partial \theta_j}(0) = \delta_i^j \quad (3.6)$$

ここで、2つめの式については微分と積分の順序交換を行うと。

$$\int_{\mathbf{R}^n} x_i \operatorname{tr} M(dx) \rho(0) = 0 \quad (3.7)$$

$$\int_{\mathbf{R}^n} x_i \operatorname{tr} M(dx) \frac{\partial \rho}{\partial \theta_j}(0) = 0 \quad (3.8)$$

となる。この条件 (3.7), (3.8) を満たす測定 $M \in \mathcal{M}(\mathbf{R}^n, \mathcal{B}(\mathbf{R}^n), \mathcal{H})$ を局所不偏測定と呼ぶ。

定義 3.1 $M \in \mathcal{M}(\mathbf{R}^n, \mathcal{B}(\mathbf{R}^n), \mathcal{H})$ が局所不偏測定であるとは

$$\int_{\mathbf{R}^n} x_i \operatorname{tr} M(dx) \rho = 0 \quad (3.9)$$

$$\int_{\mathbf{R}^n} x_i \operatorname{tr} M(dx) \frac{\partial \rho}{\partial \theta_j}(0) = \delta_i^j \quad (3.10)$$

しかし、この定式は少なくとも見かけ上は局所座標の取りかたによっている。出来ることなら、局所座標を用いない定式化を行いたい。(3.5), (3.6) で、2次以上の微分を無視したが、これは元の空間を一点での接空間と同一視することに他ならない。このため次の節で状態多様体の概念を導入しさらに、その次の節で $\rho(0)$ の接空間上で局所不偏測定を定義する。

4 局所不偏測定における、一般偏差（誤差, deviation）の最小化

任意の重み関数（weight function） W が与えられたとき、偏差（誤差, deviation） $\mathcal{D}_W^\rho(M)$ を最小化する方法を考察することにする。

定義 4.1 重み関数 (*weight function*) とは V から $\mathbf{R}^+$ への写像 W で以下の性質を満たすものとする。ただし、 $\mathbf{R}^+$ は非負の実数のなす集合。

$$\circ W \text{ は連続関数} \quad (4.1)$$

$$\circ \exists n_W \in \mathbf{N} \text{ s.t. } \forall c > 1, \forall x \in V \quad W(x) \leq W(c \cdot x) \leq c^{n_W} \cdot W(x) \quad (4.2)$$

$$(4.3)$$

定義 4.2 重み関数 W が与えられたとき、測定 $M \in \mathcal{M}(\mathbf{R}^n, \mathcal{B}(\mathbf{R}^n), \mathcal{H})$ を行ったときの ρ における偏差 (誤差, *deviation*) $\mathcal{D}_W^\rho(M)$ とは以下で与えられるものである。

$$\mathcal{D}_W^\rho(M) := \int_{\mathbf{R}^n} W(x) \operatorname{tr} M(dx) \rho \quad (4.4)$$

今後、局所不偏という条件の下で誤差 $\mathcal{D}_W^\rho$ を最小化する方法を考えることにする。

5 量子 Cramér-Rao 不等式

これまでの結果について解説する。まず最初に 1 次元の場合について考えることにする。

$$A \circ B := \frac{1}{2}(AB + BA)$$

を定義し、

$$L \circ \rho = D\rho$$

となるように、 $L \in \mathcal{B}_h(\mathcal{H})$ をとる。今後 L のことを対称対数微分と呼ぶことにする。このとき次の定理が成立。

定理 5.1 [1 次元量子 Cramér-Rao 不等式]

$$\inf_{M \in \mathcal{U}(d\rho)} \mathcal{D}_{x^2}^\rho(M) = \frac{1}{\operatorname{tr} L^2 \rho} \quad (5.1)$$

証明まず最初に $X, Y \in \mathcal{B}_h(\mathcal{H})$ に対して、 $\operatorname{tr}(X \circ Y)\rho$ は二次形式になっていることに注意する。この 2 次形式に対して Schwartz の不等式を用いると、

$$|\operatorname{tr}(X \circ Y)\rho|^2 \leq \operatorname{tr} X^2 \rho \cdot \operatorname{tr} Y^2 \rho \quad (5.2)$$

また、

$$\begin{aligned} \operatorname{tr}(X \circ Y)\rho &= \operatorname{tr} \frac{1}{2}(XY + YX)\rho \\ &= \frac{1}{2}(\operatorname{tr} XY\rho + \operatorname{tr} YX\rho) \\ &= \frac{1}{2}(\operatorname{tr} Y\rho X + \operatorname{tr} YX\rho) \\ &= \operatorname{tr} Y \frac{1}{2}(\rho X + X\rho) \\ &= \operatorname{tr} Y(X \circ \rho) \end{aligned}$$

ここで、

$$X_M := \int_{\mathbf{R}} x M(dx)$$

とおくと、

$$\begin{aligned} \int_{\mathbf{R}} x^2 \operatorname{tr} M(dx) \rho &= \operatorname{tr} \int_{\mathbf{R}} x^2 M(dx) \rho \\ &\geq \operatorname{tr} \left(\int_{\mathbf{R}} x M(dx) \right)^2 \rho \\ &= \operatorname{tr} X_M^2 \rho \end{aligned} \quad (5.3)$$

ここで、式 (5.2) に対して、 $X := X_M$, $Y := L$ を代入すると

$$(\operatorname{tr}(X_M \circ L) \rho)^2 \leq \operatorname{tr} X_M^2 \rho \cdot \operatorname{tr} L^2 \rho \quad (5.4)$$

局所不偏性より、

$$\begin{aligned} \operatorname{tr}(X_M \circ L) \rho &= \operatorname{tr} X_M (L \circ \rho) \\ &= \operatorname{tr} X_M D \rho = 1 \end{aligned} \quad (5.5)$$

これまでの結果をまとめると、(5.3)(5.4)(5.5) より局所不偏測定に対しては、

$$\int_{\mathbf{R}} x^2 \operatorname{tr} M(dx) \rho \geq \frac{1}{\operatorname{tr} L^2 \rho} \quad (5.6)$$

ここで、 M を L のスペクトラル分解で定義すると、 $X_M = L$ となり、式 (5.6) に於いて等号が成立する。よって1パラメータのときは

$$\inf_{M \in \mathcal{U}(d\rho)} \mathcal{D}_{x^2}^\rho(M) = \frac{1}{\operatorname{tr} L^2 \rho} \quad (5.7)$$

□

次に、パラメータが複数のときについて考えることにする。まず最初に $D^i \rho = L^i \circ \rho$ となるように、 $L^i \in \mathcal{B}_h(\mathcal{H})$ をとる。また、任意の $M \in \mathcal{U}(d\rho)$ に対して

$$X_{i,M} := \int_{\mathbf{R}^n} x_i M(dx) \quad (5.8)$$

とおく。また、任意の $(a^i), (b_i) \in \mathbf{R}^n$ をとる。ここで、式 (5.2) に対して、 $X := \sum_{i=1}^n a^i X_{i,M}$, $Y := \sum_{i=1}^n b_i L^i$ を代入すると

$$\begin{aligned} (\operatorname{tr}(\sum_{i=1}^n a^i X_{i,M} \circ \sum_{j=1}^n b_j L^j) \rho)^2 &\leq \operatorname{tr} \sum_{i=1}^n a^i X_{i,M} \rho \sum_{j=1}^n a^j X_{j,M} \cdot \operatorname{tr} \sum_{k=1}^n b_k L^k \rho \sum_{l=1}^n b_l L^l \\ (\sum_{i,j} a^i b_j \operatorname{tr} X_{i,M} \circ L^j \rho)^2 &\leq (\sum_{i,j} a^i a^j \operatorname{tr} X_{i,M} \rho X_{j,M}) \cdot (\sum_{k,l} b_k b_l \operatorname{tr} L^k \rho L^l) \end{aligned} \quad (5.9)$$

ここで、 $V_{i,j} := \operatorname{tr} X_{i,M} \rho X_{j,M}$, $J^{k,l} := \operatorname{tr} L^k \rho L^l$ と定義する。このとき $V_{i,j}$, $J^{k,l}$ はともに対称行列であることに注意。さらに、 $J_{k,l}$ で $J^{k,l}$ の逆行列を表わすことにする。ここで、 $b_k = \sum_{i=1}^n J_{k,i} a^i$ とおくことにする。このとき、 M が局所不偏測定であることから、 $\operatorname{tr} X_{i,M} \circ L^j \rho = \delta_i^j$ となることに注意して (5.9) に代入すると、

$$\sum_{i,j} a^i J_{i,j} a^j \leq \sum_{i,j} a^i V_{i,j} a^j \quad (5.10)$$

$(a_i) \in \mathbf{R}^n$ は任意であるから、これまでの結果をまとめると次の定理が成立する。

定理 5.2 [多次元版量子 Cramér-Rao 不等式]

$M \in \mathcal{U}(d\rho)$ を行なったときの ρ における共分散行列を $V_{i,j}(M)$ で表わすとする

$$(V_{i,j}(M)) \geq (J_{i,j}) \quad (5.11)$$

$L_1, \dots, L_n$ が互いに可換のとき (5.11) において等号を達成する局所不偏測定が存在する。

一般に (5.11) においては等号が成立しない。これは、量子力学特有のある種の非可換性が生じることと、対称行列全体に非負定値の意味で順序を定義した時その順序が全順序にはならないためである。このため、無理にでも最適な測定を決定するために、対称行列 $G^{i,j}$ を用いて $\sum_{i,j} V_{i,j} G^{i,j}$ を最小にする問題を考える。この問題を一般化したものが 定義 4.2 である。

6 Duality Theorem

定理 6.1 [弱双対定理] 次の不等式が成立。

$$\inf_{M \in \mathcal{U}(d\rho)} \mathcal{D}_W^\rho(M) \geq \sup_{(a,b,S) \in \mathcal{U}^*(W)} \left(\sum_i a_i^i + \text{tr } S \right) \quad (6.1)$$

ただし、

$$\mathcal{U}^*(W) \quad (6.2)$$

$$:= \{(a_j^i, b^i, S) | \forall x \in \mathbf{R}^n, W(x) \cdot \rho - S - \sum_{i,j} (a_j^i x_i D^j \rho) - \sum_{i=1}^n (b^i x_i \rho) \geq 0\} \quad (6.3)$$

$$\subset \mathbf{R}^{n \times n} \times \mathbf{R}^n \times \mathcal{T}_h(\mathcal{H}) \quad (6.4)$$

とおいた。今後、 $\sup_{(a,b,S) \in \mathcal{U}^*(W)} \left(\sum_{i=1}^n a_i^i + \text{tr } S \right)$ を求める問題を双対問題と呼ぶことにする。

系 6.1 [弱双対定理の利用法]

適当な $\mathcal{U}(d\rho)$ の元 M と適当な $\mathcal{U}^*(W)$ の元 (a, b, S) が存在して式 (6.6) を満たすとき、

$$\inf_{M \in \mathcal{U}(d\rho)} \mathcal{D}_W^\rho(M) = \sum_{i=1}^n a_i^i + \text{tr } S \quad (6.5)$$

となり (6.1) において等号が成立する。

$$\mathcal{R}_W^\rho(a, b, S; M) = 0 \quad (6.6)$$

ただし、

$$\mathcal{R}_W^\rho(M) := \text{tr} \int_{\mathbf{R}^n} \mathcal{R}_W^\rho(a, b, S; x) M(dx)$$

$$\mathcal{R}_W^\rho(a, b, S; x) := W(x) \cdot \rho - S - \sum_{i,j} (a_j^i x_i D^j \rho) - \sum_{i=1}^n (b^i x_i \rho)$$

定理 6.1 と 系 6.1 の証明

まず最初に $M \in \mathcal{U}(d\rho)$, $(a, b, S) \in \mathcal{U}^*(W)$ について考える。

$$\begin{aligned}
& \mathcal{R}_W^\rho(a, b, S; x) \\
&= \int_{\mathbf{R}^n} W(x) \operatorname{tr} M(dx) \rho - \operatorname{tr} S - \sum_{i,j} a_j^i \int_{\mathbf{R}^n} x_i \operatorname{tr} M(dx) D^j \rho - \sum_i \operatorname{tr} b^i \int_{\mathbf{R}^n} x_i \operatorname{tr} M(dx) \rho \\
&= \mathcal{D}_W^\rho(M) - \operatorname{tr} S - \sum_{i,j} a_j^i \delta_i^j - \sum_i b^i 0 \\
&= \mathcal{D}_W^\rho(M) - \operatorname{tr} S - \sum_{i,j} a_j^i
\end{aligned}$$

また、

$$\mathcal{R}_W^\rho(a, b, S; x) \geq 0 \quad (6.7)$$

よって、

$$\mathcal{D}_W^\rho(M) \geq \operatorname{tr} S - \sum_{i,j} a_j^i \quad (6.8)$$

よって、定理 6.1 は示された。また、この証明を読みなおすと、系 6.1 がわかる。

定理 6.2 [強双対定理] $\dim \mathcal{H} < \infty$ のとき、(6.1) において等号が成立する。

証明は 林 [9] を参照のこと。ちなみに、この節の弱双対定理、強双対定理は、無限次元線形計画法における双対定理を適用したものである。実際に、この定理をこの問題に適用するのは、 $\mathcal{U}(d\rho)$ を含む Vector 空間を正確に定義しないとイケないため、かなり面倒なことになる。このため、ここでは、具体的に、この定理を適用して、証明することをやめることにした。ここでの、弱双対定理、強双対定理と言う名称は線形計画法の双対定理の弱双対定理と強双対定理に対応する。

また、量子系の測定において、線形計画法の双対定理を用いる発想は以外と古く、1975 年の Yuen Kennedy Lax [2] において、量子 Bayes 問題の最適化においてすでに用いられている。また、無限次元線形計画法の双対定理については、Slyke & Wets [7] を参照のこと。

7 Spin1/2 系 混合状態 3 Parameter Model

この節では spin 1/2 系について考察する。このとき、よく用いられるのが、Pauli 行列である。Pauli 行列 $\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3$ を次のように定義する。

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$\rho, D^i \rho$ が次のように表わせるときについて考える。

$$\rho = \frac{1}{2}(Id + \alpha \sigma^3) \quad (7.1)$$

$$D^i \rho = \frac{\sigma^i}{2}, (i = 1, 2) \quad (7.2)$$

$$D^3 \rho = \frac{\sqrt{1 - \alpha^2}}{2} \sigma^3 \quad (7.3)$$

(座標変換によってこの条件を満たすようにできる。)

定理 7.1 重み関数 W が $\mathbf{R}^n$ 上の 2 次形式 G_j^i で与えられるとき、

$$G_j^i = \sum_{k=1}^n W_k^i W_j^k, \quad W_j^i = W_i^j$$

となる対称行列 W をとると、

$$\inf_{M \in \mathcal{U}(d\rho)} \mathcal{D}_W^\rho(M) = \left(\sum_{i=1}^n W_i^i \right)^2 \quad (7.4)$$

さらに最適測定は以下に構成するランダム測定で与えられる。

W の固有値と固有ベクトルをそれぞれ、 W_1, W_2, W_3 と z^1, z^2, z^3 で表わされるとしたとき、 $M_1, M_2, M_3 \in \mathcal{M}(\mathbf{R}^3, \mathcal{B}(\mathbf{R}^3), \mathbf{C}^2)$ を次のように定義する。

$$\begin{aligned} & M_i \left(\frac{r(z^i)}{W_i} z^i \right) \\ &:= \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{1-\alpha^2} (z_3^i)^2}} \left(\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{1-\alpha^2} (z_3^i)^2} Id + \frac{z_3^i}{\sqrt{1-\alpha^2}} \sigma^3 + \sum_{k=1}^2 z_k^i \sigma^k \right) \\ & M_i \left(\frac{r(-z^i)}{W_i} - z^i \right) \\ &:= \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{1-\alpha^2} (z_3^i)^2}} \left(\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{1-\alpha^2} (z_3^i)^2} Id - \frac{z_3^i}{\sqrt{1-\alpha^2}} \sigma^3 - \sum_{k=1}^2 z_k^i \sigma^k \right) \end{aligned}$$

ただし、

$$r(z) := -\frac{\sum_{i=1}^3 W_i^i \alpha z_3}{\sqrt{1-\alpha^2}} + \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^3 W_i^i \alpha^2 (z_3)^2}{1-\alpha^2} + \left(\sum_{i=1}^3 W_i^i \right)^2}$$

このとき、最適測定は M_1, M_2, M_3 の次のような一次結合で表わされる。

$$M := \sum_{i=1}^3 \frac{W_i}{\sum_{k=1}^3 W_k} M_i \quad (7.5)$$

証明は 林 [9] を参照のこと。

8 有限次元実 Vector 空間上の純粋状態 Model

対象となる物理系の表現空間を有限次元 Vector 空間 V で表わすことにする。 V の正規直交基底 $e^0, e^1, \dots, e^n$ が取れて次のようになるとする。 $\rho = |e^0\rangle\langle e^0|$ かつ $D^i \rho = \frac{1}{2}(|e^i\rangle\langle e^i| + |e^0\rangle\langle e^i|)$

定理 8.1 $D^j \rho$, ρ に関して上記の条件が満たされるとき、重み関数 W が 2 次形式 $G^{i,j}$ で与えられると、次の式が成立

$$\inf_{M \in \mathcal{U}(d\rho)} \mathcal{D}_W^\rho(M) = \text{tr } G^{i,j} \quad (8.1)$$

さらにこのとき、以下に構成する単純測定により最小値が達成される。このとき、 $\rho = |e^0\rangle\langle e^0|$, $D^i \rho = \frac{1}{2}(|e^i\rangle\langle e^i| + |e^0\rangle\langle e^i|)$ さらに、 $x = (x_i) \in \mathbf{R}^n$ に対して $\mathcal{R}(x) \in \mathcal{B}_h^+(V)$ を次のように定義する。

$$\mathcal{R}(x) := \frac{1}{1 + \sum_i x_i^2} |e^0 + \sum_j x_j e^j\rangle\langle e^0 + \sum_j x_j e^j| \quad (8.2)$$

ここで $\langle \alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n \rangle$ を $\mathbf{R}^n$ 上の正単体とする。このとき、次のように $M \in \mathcal{M}(\mathbf{R}^n, \mathcal{H})$ を定義する。

$$M(\{\alpha_i\}) := \mathcal{R}(\alpha_i) \quad (8.3)$$

この測定は単純測定になっていて、しかも上記の意味で局所不偏測定になっている。

証明は 林 [9] を参照のこと。

9 有限次元複素 Vector 空間上の純粋状態 Model

ここで、物理系の表現空間が有限次元複素 Vector 空間 V のときについて考える。このとき、 V の正規直交基底 $e^0, e^1, \dots, e^m$ が取れて、 $\rho = |e^0\rangle\langle e^0|$, $D^i\rho = 1/2(|e^i\rangle\langle e^0| + |e^0\rangle\langle e^i|)$, $D^{i+m}\rho = 1/2\sqrt{-1}(|e^i\rangle\langle e^0| - |e^0\rangle\langle e^i|)$ $1 \leq m$ とかけるとする。さらに、 W を $D^1\rho, \dots, D^{2m}\rho$ で張られる Vector 空間とする。また、 $J: W \rightarrow W$ を $J(D^i\rho) = D^{i+m}\rho$, $J(D^{i+m}\rho) = -D^i\rho$, $1 \leq i \leq m$ で定義される直交行列とする。

定理 9.1 $D^j\rho$, ρ が上記の条件を満たす時重み関数 W が 2 次形式 (非負定値行列) G^{ij} で与えられているとき、

$$G_j^i = \sum_{k=1}^n W_k^i W_j^k, \quad W_j^i = W_i^j$$

となる対称行列 W をとると、次の不等式が成立。

$$\inf_{M \in \mathcal{U}(d\rho)} \mathcal{D}_G^\rho(M) \geq \frac{1}{2} \text{tr}_W \mathcal{J}(W)^2 \quad (9.1)$$

但し、 $\mathcal{J}(W) := W - JWJ$ とおいた。また、 $[W, JWJ] = 0$ のとき (9.1) において等号が成立。

証明及び、 $[W, JWJ] = 0$ のとき (9.1) において等号を達成する測定については、林 [9] を参照のこと。

また、物理系の表現空間が無限次元であっても、 ρ が純粋状態であって、適当な座標変換によって、定理 8.1 定理 9.1 の $D^i\rho$, ρ に関する条件が満たされるとき、これらの定理が適用できる。さらに、ある有限次元 Vector 空間 V が存在して、 V 上で、 $D^1\rho, \dots, D^n\rho$ が定理 8.1 の条件を満たすとき、この問題にも定理 8.1 が適用できる。同様に、定理 9.1 の条件を満たすときについても定理 9.1 が適用できる。

また、定理 7.1 定理 8.1 定理 9.1 の証明には、Lagrange 未定乗数をうまく決定して、先の系 6.1 を用いる。

A 正単体

この節では正単体について考えることにする。

定義 A.1 V を n 次元ベクトル空間とし、 $n+1$ 個の V の元の対 $\langle \alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n \rangle$ が正単体であるとは次の条件を満たすものとする。 ($i, j = 1, \dots, n$)

$$\sum_{i=1}^n (\alpha_{\nu,i})^2 = n \quad (A.1)$$

$$\sum_{i=1}^n \alpha_{\nu,i} \alpha_{\mu,i} = -1 \quad (\nu \neq \mu) \quad (\text{A.2})$$

$$\sum_{\nu=0}^n \alpha_{\nu,i} = 0 \quad (\text{A.3})$$

$$\sum_{\nu=0}^n \alpha_{\nu,j} \alpha_{\nu,i} = (n+1) \delta_{i,j} \quad (\text{A.4})$$

Remark 1 性質 (A.3) (A.4) は直交群の作用に関して、不変。すなわち、 $\langle \alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n \rangle$ が正単体であるなら、 $A \in O(V)$ に対して、 $\langle A\alpha_0 A^{-1}, A\alpha_1 A^{-1}, \dots, A\alpha_n A^{-1} \rangle$ も正単体になっている。

補題 A.1 任意の有限次元ベクトル空間 V に対して正単体は存在する。

帰納法を用いると容易に示せる。詳しくは 林 [9] を参照のこと。

参考文献

- [1] A.S.Holevo. *Probabilistic and Statistical Aspects of Quantum Theory*. North-Holland Publishing Company, 1982. Originally published as “Veroiatnostnye i statisticheskie aspekty kvantovoi Teorii ” ,Nauka,Moscow,1980.
- [2] Robert S.Kennedy Horacce P.Yuen and Melvin Lax. Optimum testing of mutiple hypotheses in quantum detection theory. *IEEE transactions Information Theory*, Vol. IT-21, pp. 125–134, 1975.
- [3] Paul Busch & Marian Grabowski & Pekka J. Lahti. *Operational Quantum Physics*, volume 31 of *Lecture Note in Physics New Series m :Monographs*. Springer-Verlag, 1995.
- [4] J. Von Neumann. *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*. Princeton Univ.Press, 1955. 邦訳: 井上 広重 恒藤 訳, 量子力学の数学的基礎, みすず書房.
- [5] M.A. Neumark. On a representation of additive operator set functions. *Comptes Rendus (Doklady) de l'Académie des Science de l'URSS*, Vol. 41, No. 9, pp. 359–361, 1943.
- [6] Horance P.Yuen and Melvin Lax. Mutiple-parameter quantum estimation and measurement of nonselfadjoint obserbables. *IEEE transactions Information Theory*, Vol. IT-19, pp. 740–750, November 1973.
- [7] Richerd M.Van Slyke and Roger J.-B.Wets. A duality theory for abstract mathematical programs with applications to optimal control theory. *journal of mathematical analysis and applications*, Vol. 22, pp. 679–706, 1968.
- [8] Carl W.Helstrom. *Quantum Detection and Estimation Theory*, volume 123 of *Mathematics in Sience and Engineering*. Academic Press, 1976.
- [9] 林正人. 局所不偏測定における誤差の最小化. Master's thesis, 京都大学大学院 理学研究科数学・数理解析専攻 (数学系), 1996.
- [10] 長岡 浩司. エルミート行列の同時対角化のある一般化とその量子推定理論との関係について. 日本応用数理解学会論文誌, Vol. 1, No. 4, pp. 305–318, 1991.