Quantum Estimation Theory of Quantum Statistical Mechanics

大澤　進 (北海道大学大学院理学院)

1　量子推定理論の基礎

物理系を表すヒルベルト空間を $\mathcal{H}$ とし、$\mathcal{H}$ 上の線形作用素全体を $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ とおく。正則な密度作用素からなる n パラメーターモデル $\{\rho_\theta; \theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^n\}$ を扱う。真の状態は $\{\rho_\theta\}$ の中にあることがわかっているが、θ が未知であるという状況で、パラメーター推定問題を考える。

定義 1 状態 ρ における $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ 上の内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle_\rho$ を次のように定義する。

$$\langle A, B\rangle_\rho := \frac{1}{2}\mathrm{T}r\rho(BA^* + A^*B).$$

定義 *2* 対称対数微分 $L^s_{\theta,j}$, $(j = 1, \cdots, n)$ は次の式で定義される。

$$s - \frac{\partial \rho_\theta}{\partial \theta^j} = \frac{1}{2}(\rho_\theta L^s_{\theta,j} + L^s_{\theta,j}\rho_\theta), \quad L^s_{\theta,j} = L^{s*}_{\theta,j}, \quad \mathrm{T}r\rho_\theta L^s_{\theta,j} = 0.$$

定義 *3* *SLD-Fisher* 情報行列は以下の式で定義される。

$$J^s_\theta = [\langle L^s_{\theta,j}, L^s_{\theta,k}\rangle_{\rho_\theta}].$$

θ の推定と $\mathbb{R}^n$ 上に値をとる測定を同一視する。

定義 *4* $E_\theta[M]$ を期待値ベクトルとする。測定 M が以下の条件を特定の点 θ で満たすとき、M は θ で局所不偏であるという。

$$E_\theta[M] = \theta,$$

$$[\frac{\partial}{\partial \theta^k}E_\theta[M]]^j = \delta^j_k, \qquad (j, k = 1, \cdots, n).$$

定理 *1* *(*量子 *Cramér-Rao* 不等式*)* M を θ で局所不偏な測定とし、$V_\theta[M]$ を M の共分散行列とする。このとき以下の不等式が成り立つ。

$$V_\theta[M] \geq (J^s_\theta)^{-1}.$$

2　正準分布における外場の推定理論

正準分布している物理系の密度作用素は

$$\rho = (\mathrm{Tr}e^{-\beta H})^{-1}e^{-\beta H}$$

と表される。ここで、β は逆温度、H は系のハミルトニアンである。系に外場が加えられた場合を考える。系が平衡状態に至った場合、系のハミルトニアンと密度作用素は、

$$\tilde{H} = H + \sum_{j=1}^{n} h_j X_j, \qquad \tilde{\rho} = (\mathrm{Tr}e^{-\beta \tilde{H}})^{-1}e^{-\beta \tilde{H}}$$

となる。ここで、$X_j\ (j = 1, \cdots, n)$ は外場、$h_j\ (j = 1, \cdots, n)$ は結合定数である。ここでは結合定数の推定問題を考察する。

定義 *5* A をヒルベルト空間 K上の線形作用素とする。集合 $C^\infty(A) := \cap_{n=1}^{\infty} D(A^n)$ の元を A に対する C^∞ ベクトルという。

定義 *6* ベクトル $\psi \in C^\infty(A)$ について、ある $t > 0$ があって、

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\|A^n\psi\|}{n!} t^n < \infty \tag{1}$$

であるとき、ψ を A の解析ベクトルという。もし、すべての $t > 0$ に対して、*(1)* が成り立つならば、ψ は A の全解析ベクトルという。A の全解析ベクトル全体を $\mathfrak{E}(A)$ で表す。

補題 *1* A をヒルベルト空間 $\mathcal{K}$ 上の自己共役作用素とする。このとき $\mathfrak{E}(A)$ は稠密である。

定理 *2* 可分なヒルベルト空間 H の稠密な部分空間 $\mathcal{D}$ 上で $[\tilde{H}, X_j] = 0$ がすべての j に対して成り立ち、また以下の仮定 1 が成り立っているものとする。このとき $\mathcal{D}$ 上で $L^s_{h,j} = \frac{1}{2kT}\Delta X_j$ である。ここで k はボルツマン定数、T は温度である。対応する *SLD-Fisher* 情報行列要素は

$$J^s_{ij} = \frac{1}{(2kT)^2}\mathrm{Tr}\tilde{\rho}(\Delta X_i \Delta X_j + \Delta X_j \Delta X_i) = \frac{1}{(2kT)^2} \cdot \frac{1}{2}(\chi_{ij} + \chi_{ji})$$

である。ただし、χ_{ij} は

$$\chi_{ij} := \frac{\partial}{\partial h_j}\mathrm{Tr}\tilde{\rho}X_i$$

で定義される。

仮定 *1* *(i)* H, X_j, $\tilde{H}$, $\tilde{H}'_k := H - \sum_{j\neq k}^{n} h_j X_j\ (j, k = 1, \cdots, n)$ は $\mathcal{H}$ 上の自己共役作用素である。

(ii) $e^{-\beta\tilde{H}}$, $X_j e^{-\beta\tilde{H}}$, $X_j X_k e^{-\beta\tilde{H}}$ $(j,k=1,\cdots,n)$ は任意の $\beta>0$ に対してトレース・クラス作用素である。
(iii) $\mathcal{D}\subset\mathfrak{E}(\tilde{H})\cap_{j,k=1}^{n}D(X_jX_k)$ であり、 $\mathcal{D}$ は任意の $\beta>0$ について $e^{-\beta\tilde{H}}$ の不変部分空間である.
(iv)$I\subset R^2$ を任意のコンパクト集合とするとき、数列 $\{M_{j;k;I;m}\}_{m=1}^{\infty}$ が存在して以下の条件を満たす。

(iv-i)$M_{j;k;I;m}\geq 0$.

(iv-ii) $\sum_{m=1}^{\infty}M_{j;k;I;m}<\infty$.

(iv-iii) $\mathcal{D}$ の元からなる $\mathcal{H}$ の *C. O. N. S.* $\{e_m\}_{m=1}^{\infty}$ が存在して、 任意の $m\in\mathbb{N}$ と $(h_j,h_k)\in I$ に対して $|\langle e_m, X_jX_ke^{-\beta\tilde{H}}e_m\rangle|\leq M_{j;k;I;m}$ が成り立つ。

Example 1

$$H=\sum_{j=1}^{N}-\frac{\Delta_i}{2m},\qquad X_{jk}=V(|y_j-y_k|),\qquad \tilde{H}=H+\sum_{j<k}h_{jk}X_{jk}.$$

ここで、$\Delta_i:=\frac{\partial^2}{\partial x_{i1}^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_{i2}^2}+\frac{\partial^2}{\partial x_{i3}^2}$ であり、x_i は正準分布している系の粒子の座標、 y_j は熱浴の粒子の座標、V はポテンシャルを表す。

Example 2 *(Ising Model)*

$$H=-J\sum_{j=1}^{m-1}I_2\otimes\cdots\otimes I_2\otimes\sigma_j^3\otimes\sigma_{j+1}^3\otimes I_2\cdots\otimes I_2,\quad X=\sum_{j=1}^{m}I_2\otimes\cdots\otimes I_2\otimes\sigma_j^3\otimes I_2\otimes\cdots\otimes I_2,$$

$$\tilde{H}=H+hX.$$

ここで、

$$I_2=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\qquad \sigma_j^3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},\qquad (j=1,\cdots,m)$$

である。

定理 *3* $[\tilde{H},X_j]\neq 0$ であるが、$i[\tilde{H},X_j]$ $(j=1,\cdots,n)$ が $\tilde{H}$ と X_k $(k=1,\cdots,n)$ と強可換な自己共役作用素であるとき仮定 1 の *(ii)*、*(iv)* および仮定 2 のもとで 対称対数微分と対応する *SLD-Fisher* 情報行列は定理 2 と同じ形となる。

仮定 *2* *(v)*$\tilde{H}$, X_j, C_j、 $\tilde{H}+X_j$ $(j=1,\cdots,n)$ は $\mathcal{H}$ 上の自己共役作用素である。ただし $C_j:=-i[\tilde{H},X_j]$ である。.
$(vi)X_j+iC_j+\tilde{H}$ $(j=1,\cdots,n)$ は有界線形作用素である。
(vii) 稠密な部分空間 $\mathcal{D}\subset\mathfrak{E}(H)\cap_{j=1}^{n}\mathfrak{E}(X_j)\cap_{j=1}^{n}\mathfrak{E}(\tilde{H}+X_j)\cap_{j=1}^{n}\mathfrak{E}(C_j)\cap_{k,l=1}^{n}D(X_kX_l)$ が存在して、任意の実数 x, y に対して e^{xX_j}, $e^{y\tilde{H}}$, X_j, $e^{\pm\frac{i}{2}x^2C_j}$, $e^{y\tilde{H}'_j}$, $(j=1,\cdots,n)$ の不変部分空間である。

Remark 1 定理 *2, 3* において *1* パラメーターモデルの, 量子 *Cramér-Rao* 不等式は

$$\sqrt{\frac{V_h[M](\mathrm{T}r\Delta X)^2}{2}} \geq kT$$

となる。これは、測定の分散と外場の分散の積の下限がが典型的な平衡状態のエネルギー kT で表現されることを示している。

参考文献

[1] C. W. Helsorom , "Quantum Detection and Estimation Theory," Academic Press, 1976.

[2] A. Holevo, "Probabilistic and Statisical Aspects of Quantum Theory," North-Holland, 1982.