量子系における統計的推測の最近の発展

林 正人[†]　理化学研究所[‡] 脳科学総合研究センター 脳数理研究チーム
松本 啓史[§]　科学技術振興事業団 今井量子計算機構プロジェクト[¶]

1　はじめに

量子力学は誕生以来，多様な現象の説明に次々と成功し，その応用範囲は今なお拡大し続けている．この状況を考えると，量子力学がある程度の真理を含んでいることは間違いなさそうに思われる．そして，その世界観が日常の直感と著しく反することは広く喧伝されている通りである．特に，その系の状態の記述と測定の枠組みは，古典力学的な概念と全く両立しない．一方，例えば通信理論，統計学，計算量理論，アリゴリズム論，制御理論，などの分野（以後，仮に情報科学と総称する）では，通常，陰に陽に日常的直感によりかかって理論が構成されている．もし，系の状態の記述や測定の概念を量子力学的なそれに置き換えたら，情報科学はどのように変更されるだろうか．この問いは，情報科学の裾野を広げる上でも，また量子力学の基礎の理解を深める上でも，極めて重要であると思われる．この様な問題を扱う一連の研究を，今仮に量子情報科学と総称するこにする．

量子情報科学は 1960 年代の創始以来，細々と研究が続けられてきたが，最近，急激に幅広い関心を集めるようになった，その理由の第一は，多項式時間での素因数分解，盗聴を確実に検出する暗号通信などの応用的にも興味深い成果が現れたからである．本稿では，量子情報科学の一部分である，量子統計学，すなわち量子系の統計的推測の理論を，その基礎から始めて最先端の成果に至るまで，分かりやすく紹介する．

統計的推測とは，確率論に基づいたデータ解析の手法の総称であり，その体系的研究が統計学である．ところで，量子力学ではたとえ外乱がなくとも，データの予測は確率的にしか行えなえない．ということは，理想的な状況でも実データと理論の照合は統計的推測になってしまうわけで，その精度の限界は興味深い話題である．これは量子統計学の重要なテーマであるが，また同時に，量子力学の基礎の理解にとっても無視できない問題であると筆者らは考えている．

また，前述の量子情報科学的な新しい技術の実用化においても，量子系の統計学は重要であると思われる．なぜなら，これらの技術の難点は極端に熱雑音に弱いことで，その対策として，低雑音の装置の研究が行われている．しかし，それと同時に雑音の影響下でより多くの情報を引き出す技術，すなわち統計的推測を組み合わせて用いることも重要であろう．これらの技術では，本質的に量子的な系を扱うので，量子力学の測定の理論に基づいた，新しい統計学が必要になるであろう．

ところで，統計的推測では一般に，サンプルの数が増大すると誤差は減少するが， その減少率に着目する理論を（一次）漸近理論といい，通常の確率分布の統計学の理論の中で，最も美

[†]e-mail address: masahito@brain.riken.go.jp
[‡]〒 351-0198 埼玉県和光市広沢 2-1
[§]e-mail address: keiji@qci.jst.go.jp
[¶]〒 113-0033 文京区本郷 5-28-3 第二本郷ホワイトビル 302 号

しい一般論の導出に 成功している分野である．この方面の理論の量子版は，1980 年代末に長岡 [27] によりはじめられ，以来，日本の研究者グループの活躍で， 近年著しく進歩した．本稿では，こういった最近の研究の紹介を最終目標に据える．

その為に必要な前提知識である（通常の）統計学と量子力学の測定の理論も，必要な範囲にしぼって解説する．通俗的には，量子力学の「観測問題」は過度に神秘化されがちだが，実験データの予測に必要な計算方法の体系は，すでに完成しており，すべて量子情報科学の必須の土台である．にもかかわらず，通常の量子力学の教程では測定の理論はあまり扱われず，[35] 以外には手頃な解説も少ない．このような状況をふまえて，系の状態の記述と測定の理論についても，事項は限定するが，丁寧に説明する．

従来，この分野では主に物理的，数学的視点に立脚した研究が多かったが, 今後の発展のためには，情報科学や工学の常識や深い知識が必須であることは言うまでもない．今後，本稿をきっかけに，量子情報科学に興味を持たれる情報科学的，工学的視点を持った研究者が一人でも増えることを筆者らは切に願っている．

以下に本稿の構成を述べる．量子系の統計的推測の基礎となった古典的な確率分布の統計的推測の基礎的事項については §2 で要約する．次の §3 では量子系の統計的推測のために, 適切な形で量子力学の定式化を述べる. 以上の前提知識の解説の後，§4 で量子系の統計的推測の問題設定，枠組みについて述べ，§5 では研究史の紹介と，近年の研究の中からわかりやすいものをかいつまんで紹介し，最後に §6 ではまとめと将来の展望について述べる．

2　古典統計学

本稿では，量子的でない，従来の統計的推測の理論のことを「量子」と対応させる意味で「古典」統計学とよぶ. 古典統計学では，データがある（一般的には）未知の確率分布に従っていると考え，その確率分布についての推論を行うことを目的とする．本稿では簡単のため，複数個のデータがすべて独立で同一の分布に従う場合 (i.i.d.) のみを扱う．以下の内容の詳細については, 例えば文献 [32][38] を参照のこと.

2.1　推定

未知の確率分布を，そこから得られたデータを元に推測することを推定とよぶ. 応用上，事前にその確率分布の形について何らかの情報が得られている場合はしばしばある．ここでは特に，もっとも簡単な場合として，未知の確率分布が有限次元のパラメータを持つ確率分布族

$$\{p_\theta | \theta = (\theta_1, \ldots, \theta_d) \in \Theta \subset \mathbb{R}^d\} \tag{1}$$

の中に入っていることを，事前に仮定してよい場合を扱う．例えば，コインの表がでる確率の推定の場合，データの背後にある確率分布は $\theta \in [0,1]$ として，$p_\theta(\text{裏}) = \theta, p_\theta(\text{表}) = 1-\theta$ と書ける．この例では，(1) の d は 1 で $\Theta = [0,1]$ である（一般に, 未知パラメータは $\mathbb{R}^d$ 全体ではなくその部分集合 Θ の中だけを動く.）この問題設定では分布の形の推定は未知のパラメータ θ の値の推定と同値になる.

推定方式を一つ固定すると，データに対してパラメータの推定値は一つに決まる．言い換えると，パラメータの推定値はデータの関数であり，この関数を定めることと推定方式を定めることは同値である．データから推定値への関数を推定量 という．今，データが集合 Ω の要素であるとして，n 個のデータが与えられたとき，推定量はデータの組 $(\omega_1, \dots, \omega_n) \in \Omega^n$ からパラメータの推定値を与える関数 $T_n = (T_n^1, \dots, T_n^d)$ である．種々の推定量の真値からのずれ (誤差) の比較や最適な (誤差最小の) 推定量の導出は統計学の重要な問題である．

次で定義される最尤推定量 は，標準的に多用される推定量である．データ $(\omega_1, \dots, \omega_n) \in \Omega^n$ が確定すると，$\prod_{i=1}^n p_\theta(\omega_i)$ はパラメータ θ の関数であるが，この関数を最大にする θ が最尤推定量 $\hat{\theta}_n$ である．

誤差の尺度の中で最もポピュラーなものが, 以下に定義する平均 2 乗誤差行列 $V_\theta(T_n) = \{V_\theta^{i,j}(T_n)\}$ である．

$$V_\theta^{i,j}(T_n) := \int \cdots \int (T_n^i(\omega_1, \dots, \omega_n) - \theta^i)(T_n^j(\omega_1, \dots, \omega_n) - \theta^j) p_\theta(\omega_1) \dots p_\theta(\omega_n)\, d\omega_1 \dots\, d\omega_n$$

以下では，データ数 n が十分大きなときの平均 2 乗誤差行列 $V_\theta(T_n)$ の漸近的挙動に注目する．すなわち，推定量 T_n の無限列 $T = \{T_n\}$ を適切に選ぶと, その平均 2 乗誤差行列 $V_\theta(T_n)$ は (最悪でも) $\frac{1}{n}$ のオーダーで 0 に近づくことが知られているおり，その係数に着目する．このような議論を一次漸近理論とよぶ．

適当な正則性条件の下，以下の漸近的 **Cramér-Rao** 不等式が成立する (正則性条件の詳しい解説は [38] の pp.89-91 などを参照のこと .)

補題 **1** $V_\theta(T_n) \to 0 (n \to \infty)$ なる推定量の無限列 $T = \{T_n\}$ に対して以下の不等式が成立する.

$$\lim_{n\to\infty} nV_\theta(T_n) \geq J_\theta^{-1} \quad \left(V_\theta(T_n) \geq \frac{1}{n} J_\theta^{-1} + o\left(\frac{1}{n}\right) \right) \tag{2}$$

ここで行列についての不等式は (左辺)−(右辺) が半正定値 (エルミートかつ固有値が 0 または正) となることを意味する. $J_\theta = \{J_{i,j;\theta}\}$ は **Fisher** 情報行列とよばれ， 以下に定義される．

$$J_{i,j;\theta} := \int l_{i;\theta}(\omega) l_{j;\theta}(\omega) p_\theta(\omega)\, d\omega, \quad l_{i;\theta}(\omega) := \frac{\partial}{\partial \theta^i} \log p_\theta(\omega)$$

補題 1 が重要なのは，(2) の等号が達成可能だからである．等号達成の為には，推定量 T_n として最尤推定量 $\hat{\theta}_n$ を用いればよい．つまり，一次漸近論の意味で最尤推定量は最適で，Fisher 情報行列の逆数がその限界を表している．

2.2 仮説検定

仮説検定では検定の対象となる仮説のことを帰無仮説とよび, 帰無仮説が誤っているときに成立すると考えられる仮説のことを対立仮説とよぶ. 本稿では最も単純な，次のような場合を

考える．すなわち，帰無仮説を「データは確率分布 p_0 に従っている」とし，対立仮説を「データは確率分布 p_1 に従っている」とする．

今，n 個のデータ $(\omega_1, \ldots, \omega_n) \in \Omega^n$ が Ω^n のある部分集合 $A_n \subset \Omega^n$ に入っていれば帰無仮説を正しいと判断 (受容) し，A_n に入っていなければ誤りと判断 (棄却) することにする. この様に，Ω^n の部分集合 A_n を決めると検定の方法が 1 つ決まるが，この部分集合 A_n を受容域とよぶ.

検定には，次の 2 種の誤りが考えられる.

1 帰無仮説が正しいにも拘らず, 棄却してしまう誤り

2 帰無仮説が誤っているにも拘らず，受容してしまう誤り

1 の誤りが起る確率を第 1 種の誤り確率 $\alpha_n(p_0\|p_1; A_n)$, **2** の誤りが起る確率を第 2 種の誤り確率 $\beta_n(p_0\|p_1; A_n)$ とよび, これらはそれぞれ

$$\alpha_n(p_0\|p_1; A_n) = p_0(A_n^c) = 1 - p_0(A_n), \tag{3}$$

$$\beta_n(p_0\|p_1; A_n) = p_1(A_n) \tag{4}$$

と計算される．第 1 種の誤り確率を小さくするためには, 受容域 A_n を広く取ると良いわけであるが, 受容域 A_n を広く取りすぎると，逆に第 2 種の誤り確率が大きくなる. したがって両者を同時に最小化することはできず, ある種の trade-off を扱うことになる. 通常の問題設定では，第 1 種の誤り確率が $\epsilon(>0)$ 以下との条件の下での第 2 種の誤り確率を最小化する．

この問題設定の下で最適な検定を以下に構成する．以下に定義する $S_n(a)$ に基づいた検定 (尤度比検定) を考える．

$$S_n(a) := \{(\omega_1, \ldots, \omega_n) \in \Omega^n | p_0(\omega_1, \ldots, \omega_n) \geq e^{na} p_1(\omega_1, \ldots, \omega_n)\}.$$

尤度比検定で，第一種誤り確率が ϵ に等しくなる様に a を調節すると，それが最適な検定になる．このことは，以下の不等式 (**Neymann-Pearson** の補題) で保証される．

補題 **2** 任意の受容域 A_n に対して,

$$\alpha_n(p_0\|p_1; A_n) + e^{na}\beta_n(p_0\|p_1; A_n) \geq \alpha_n(p_0\|p_1; S_n(a)) + e^{na}\beta_n(p_0\|p_1; S_n(a))$$

が成り立つ.

さらに最適な検定の効率について，次の **Stein** の補題が知られている．

補題 **3** 第 1 種の誤り確率が $\epsilon(>0)$ 以下との条件の下での第 2 種の誤り確率の最小値を $\beta_n^\epsilon(p_0\|p_1)$ とすると，以下の式が成り立つ.

$$\lim_{n\to\infty} \frac{-1}{n} \log \beta_n^\epsilon(p_0\|p_1) = D(p_0\|p_1) \quad (\beta_n^\epsilon(p_0\|p_1) \cong e^{-nD(p_0\|p_1)}).$$

$D(p_0\|p_1)$ は相対エントロピー (または **Kullback-Leibler** の **divergence**) とよばれ以下で定義される.

$$D(p_0\|p_1) := \int (\log p_0(\omega) - \log p_1(\omega))\, p_0(\omega)\, d\omega.$$

3　量子力学，特に状態と測定について

量子力学は系の時間発展と系に対する測定の 2 つの部分からなる. 前者については多くの教科書で詳しく正確に記述されており，またここではそれほど問題にしないので，全くふれない．測定の理論はさらに，測定値の確率分布の導出と，測定後の系の変化の理論との二つの部分に分けられる．ここでは，統計的推測に必要な前者のみを解説する．測定による状態の変化まで含めた記述については小澤 [35] を参考のこと. ([35] を読めば，測定の理論は，実験を説明する計算式の導出の枠組みとしては，すでに完成していることが了解されるだろう.)

ここでは，まず測定値の確率分布を与える式と，その記述に必要な用語，記号を天下り的に述べ，その後で，個々の概念についての説明を続く小節で述べる．

以下では，Hilbert 空間を扱うことになる. 本来, Hilbert 空間は無限次元の内積付きのベクトル空間を表すが, 量子力学では有限次元の内積付きのベクトル空間も含めた意味で使うことが多い. なおここで言う内積とは標準的な内積すなわちエルミート内積を指す. 本論文では, 関数解析に慣れていない読者を想定し, 一般性を多少犠牲にして線形代数でなじみのある (すなわち有限次元の場合の) 用語を用いることにする. 具体例では無限次元の場合も扱うが,「作用素」を「行列」のアナロジーで十分理解できると思われる範囲の議論のみ行うこととする. 数学的に厳密な議論については，例えば Holevo [21] に詳述されている．

物理の慣習にならって ,縦ベクトルを $|u\rangle = (u_1\, u_2\, \cdots)^T$,その複素共役転置を $\langle u| = (u_1^*\, u_2^*\, \cdots)$ で表わす．積 $\langle u|v\rangle$ は $\sum_i u_i^* v_i$，すなわち，標準的な内積に等しい．特に，$\langle u|u\rangle = \|u\|^2$ である．また，積 $|u\rangle\langle u|$ は

$$|u\rangle\langle u| = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^* & u_2^* & \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1u_1^* & u_1u_2^* & \cdots \\ u_2u_1^* & u_2u_2^* & \ddots \\ \vdots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

となる．この行列の rank が 1 で，かつ非負定値エルミートであることは，すぐに確かめられる．その固有ベクトルは $|u\rangle$，固有値は $\langle u|u\rangle = \|u\|^2$ であり，とくに $\langle u|u\rangle = \|u\|^2 = 1$ ならば，$|u\rangle$ 方向への (一次元) 射影になる．

電子や陽子それに光の粒子である光子などの議論の対象となる範囲のことを系，又は量子系とよぶことにする．今，ある量子系に測定を行うと，得られるデータの従う確率分布は，系がどんな様子であるか，すなわち，その状態と測定の両方に依存する．

系の状態と測定は表現空間とよばれる Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ の上で定義された行列で数学的に記述される．行列 ρ は

$$\rho = \rho^*, \quad \mathrm{Tr}\,\rho = 1, \quad \rho \geq 0 \tag{5}$$

を充たす時に，密度行列 (密度作用素) という．ここで $*$ は複素共役転置 (adjoint) をあらわす．また，行列の組 $M := \{M_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ は

$$M_\omega = M_\omega^*, \quad M_\omega \geq 0, \quad \sum_{\omega\in\Omega} M_\omega = \mathrm{I} \tag{6}$$

を充たす時に，**POVM (Positive Operator Valued Measure,** 正作用素値測度) とよばれる (標準的な量子力学の教科書を読まれた方は，ここで M_ω が射影に限られない点を留意していただきたい .) ここで I は単位行列である．また，ω は連続値をとることを許し，そのときは $\sum$ は積分をあらわす．また，測定値 ω の集合 Ω は混乱の生じないときは明示しない．

上に定義した密度行列，POVM は各々，系の状態，測定の数学的表現である．具体的な意味付けとしては，ρ に対応する状態に $M = \{M_\omega\}_{\omega\in\Omega}$ に対応する測定を行うと，データ ω が得られる確率 $\mathrm{P}_\rho^M(\omega)$ は

$$\mathrm{P}_\rho^M(\omega) := \mathrm{Tr}\,\rho M_\omega \tag{7}$$

で与えられる．この定式化では，状態と測定の双方に再現性が暗に仮定されている (そうでなければ，式 (7) を実験的に検証することはほぼ不可能であろう)．今後，簡単のため，系 $\mathcal{H}$，状態 ρ，測定 M などという言い方をする．

3.1 密度行列

以下密度行列の集合を $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ で表し, その構造について述べる. もし，系が確率 λ で状態 ρ_1，確率 $1-\lambda$ で状態 ρ_2 にあるとすると，そのとき，ある測定 $M = \{M_\omega\}$ を系に施したときに測定値 ω が得られる確率は

$$\lambda\,\mathrm{Tr}\,\rho_1 M_\omega + (1-\lambda))\,\mathrm{Tr}\,\rho_2 M_\omega = \mathrm{Tr}\{(\lambda\rho_1 + (1-\lambda))\rho_2)M_\omega\} \tag{8}$$

で与えられる．この場合，系の状態が $\rho' = \lambda\rho_1 + (1-\lambda)\rho_2$ で与えられると考え，(7) に従ってデータの確率分布を計算しても，理論的に可能なすべての実験との整合に問題はない．よって，この場合，系の状態は ρ' にあると考えることができる．これは確率的重ね合わせ ($\mathrm{incoherent}$ な重ね合わせ) とよばれ, 後に述べる量子的重ね合わせと区別される.

ここで，ρ' が条件 (5) を充たしているか気になるが，それはすぐに確かめることが出来る (つまり，$\mathcal{S}(\mathcal{H})$ は凸集合である)．

対応する密度行列の rank が 1 となる状態は純粋状態とよばれる. 純粋状態の密度行列は長さが 1 のベクトル $|\phi\rangle$ を用いて $|\phi\rangle\langle\phi|$ と表され，この $|\phi\rangle$ をこの純粋状態に対応する状態ベクトルという．量子力学の入門的教科書で状態がベクトルで表わされる，と書いてあるのは，純粋状態に限定した場合の話である．また，状態ベクトル同士の重みつき和 $z|\phi\rangle + w|\phi'\rangle$ のことを量子的重ね合わせ $(\mathrm{coherent}$ な重ねあわせ$)$ というが，このときの係数 z，w は，確率的重ね合わせの場合と違い，確率と解釈することはできない．

3.2 表現空間

系の表現空間は個々の例において，物理的な考察から決められている．

例えば，電子などの Spin-$\frac{1}{2}$ の粒子は，軌道運動の他に内部的な「回転」に対応する自由度を持つと考えられている．この自由度に対応する表現空間は $\mathbb{C}^2$ である．また ,「内部的な自由度

がない」一粒子系の表現空間は，$\mathbb{R}^3$ から $\mathbb{C}$ への，2 乗可積分な関数全体であり，状態ベクトルは絶対値の 2 乗の積分が 1 に等しい関数，すなわち波動関数である．

ある振動数 f の光子からなる系では，$|n\rangle \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$ を正規直交基底としてもつ無限次元の Hilbert 空間 $L^2(\mathbb{N})$ がしばしば表現空間として用いられる．ここで，ベクトルについているラベル n は，物理的には光子数に対応する．

3.3 POVM の例

3.3.1 PVM

POVM $M = \{M_\omega\}$ の M_ω が射影であり，かつ，異なる ω, ω' について $M_\omega M_{\omega'} = 0$ となるとき，その POVM は **PVM（Projection Valued Measure, 射影値測度）**とよばれる．しばしば，エルミート行列のことを観測可能量，または物理量というがそれは以下の理由による．

エルミート行列 X の固有値 x に対応する長さ 1 の固有ベクトルを $|\phi_x\rangle$ と書くことにすると，$\sum_x |\phi_x\rangle\langle\phi_x| = \mathrm{I}$ となり，$E_X = \{|\phi_x\rangle\langle\phi_x|\}$ は PVM になる. PVM E_X を状態 ρ に対して行ったとき，その期待値及び分散を (7) を用いて計算すると，それぞれ $\mathrm{Tr}\,\rho X, \mathrm{Tr}\,\rho X^2 - (\mathrm{Tr}\,\rho X)^2$ となり，X と ρ のみを用いて簡潔に表現される．このことから，エルミート行列 X を PVM E_X の「表現」とみなし，上述のような言い方をする（ここで各固有値 x の固有ベクトルが単一であることを仮定した.）

3.3.2 Spin-$\frac{1}{2}$ 系の物理量

例えば Spin-$\frac{1}{2}$ 系の場合エルミート行列 $S_x = \dfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ で記述される物理量の測定は PVM $E(S_x) = \{E_{\frac{1}{2}}, E_{-\frac{1}{2}}\}$ で与えられる．ここで

$$E_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad E_{-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \tag{9}$$

である．ここで，ヒルベルト空間 $\mathbb{C}^2$ の上の密度行列全体 $\mathcal{S}(\mathbb{C}^2)$ は

$$\mathcal{S}(\mathbb{C}^2) = \left\{ \rho_{x,y,z} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+x & y+iz \\ y-iz & 1-x \end{pmatrix} \middle| \, 1 \geq x^2+y^2+z^2 \geq 0 \right\} \tag{10}$$

と書けるが，状態の密度行列が $\rho_{x,y,z}$ である時に測定値 $\frac{1}{2}$ が得られる確率 $\mathrm{P}^{E(S_x)}_{\rho_{x,y,z}}(\frac{1}{2})$ は $\mathrm{Tr}\,\rho E_{\frac{1}{2}} = \dfrac{1+y}{2}$ となる. 同様に, 測定値 $-\frac{1}{2}$ が得られる確率 $\mathrm{P}^{E(S_x)}_{\rho_{x,y,z}}(-\frac{1}{2})$ は $\dfrac{1-y}{2}$ となる.

3.3.3 ヘテロダイン測定

量子力学の入門的教科書の多くはPVMのみを扱っている．しかし，PVMでないPOVM M が有効となることはしばしばある. 以下で紹介するヘテロダイン測定はその顕著な例である. 例えば§5.2で扱う量子ガウス状態族の推定では, ヘテロダイン測定が最適となり, 他のどのPVMよりもその問題に関しては優れている.

ヘテロダイン測定は，振動数 f の光子からなる量子系における測定であり，そのPOVMは以下の様に定義される. 最初に，コヒーレントベクトル $|\alpha\rangle_a$ を§3.2で導入した $|n\rangle$ を用いて $|\alpha\rangle_a := e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \alpha^n |n\rangle (\alpha \in \mathbb{C})$ で定義する．すると，ヘテロダイン測定のPOVMは $\{\frac{1}{\pi}|\alpha\rangle_a\ {}_a\langle\alpha|\}_{\alpha\in\mathbb{C}}$ で与えられる．これが確かにPOVMになることは，量子光学で良く知られた式 $\mathrm{I} = \frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}} |\alpha\rangle_a\ {}_a\langle\alpha|\, d^2\alpha$ から確かめられる. 状態 ρ に対してヘテロダイン測定を行うと，測定値は確率密度関数 $\mathrm{Tr}\,\rho\frac{1}{\pi}|\alpha\rangle_a\ {}_a\langle\alpha| = \frac{1}{\pi}\ {}_a\langle\alpha|\rho|\alpha\rangle_a$ に従う.

なお，異なる $\alpha, \alpha' \in \mathbb{C}$ について ${}_a\langle\alpha|\alpha'\rangle_a = \exp(\alpha^*\alpha' - \frac{1}{2}|\alpha|^2 - \frac{1}{2}|\alpha'|^2) \neq 0$ となるので，ヘテロダイン測定はPVMにはならない.

3.3.4 個数測定

もう一つ振動数 f の光子のなす量子系で重要な測定として, 個数測定がある. それは物理量と見なせる個数作用素 $\hat{N} := \sum_{n=0}^{\infty} n|n\rangle\langle n|$ の測定として定義される. そのPOVMは $\{|0\rangle\langle 0|, |1\rangle\langle 1|, \ldots, |n\rangle\langle n|, \ldots\}$ である. ここで，$\{|n\rangle\}$ は§3.2で導入した正規直交基底である．

3.4 合成系

ヒルベルト空間 $\mathcal{H}_1,\ \mathcal{H}_2$ の正規直交基底系を $\{|\phi_i^1\rangle\}$，$\{|\phi_j^2\rangle\}$ とする．そして，形式的な積 $|\phi_i^1 \otimes \phi_j^2\rangle$ を考え，正規直交基底系が $\{|\phi_i^1\rangle \otimes |\phi_j^2\rangle\}$ となる空間を $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ のテンソル積空間といい，$\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ と書く．有限次元の場合は，$\dim(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2) = \dim \mathcal{H}_1 \times \dim \mathcal{H}_2$ である．

表現空間が $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ となる2つの系をまとめて一つの系とみるとき，これを合成系といい，その表現空間は，テンソル積空間 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ である．もし，二つの系が一度も過去に相互作用したことがなければ，その合成系の状態は，$\rho_1 \otimes \rho_2 (= \sum_{i,j} w_i^1 w_j^2 |\phi_i^1 \otimes \phi_j^2\rangle\langle\phi_i^1 \otimes \phi_j^2|)$ と書ける．ここで $\rho_1 (= \sum_i w_i^1 |\phi_i^1\rangle\langle\phi_i^1|), \rho_2 (= \sum_j w_j^2 |\phi_j^2\rangle\langle\phi_j^2|)$ は各々 $\mathcal{H}_1$，$\mathcal{H}_2$ の上の密度行列である．しかし，二つの系が相互作用したことがあれば，一般には合成系の状態はこの様には書けない．

今，系 $\mathcal{H}_1$ と系 $\mathcal{H}_2$ に各々独立に測定 $\{M_\omega^1\}$ と $\{M_\xi^2\}$ を行ったとする．このとき，これらから得られる測定値の組 (ω, ξ) の同時分布は，次の様に計算される．すなわち，系 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ の上の状態に測定 $\{M_\omega^1 \otimes M_\xi^2\}_{\omega,\xi}$ に施したときに測定値 (ω, ξ) が得られる確率を (7) を用いて計算すると，それが求めるものである．

一般には，$\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ の上のPOVMは必ずしも $\{M_\omega^1 \otimes M_\xi^2\}_{\omega,\xi}$ という形には書けない．そういうものを実現するには，単に独立に二つの系を測定するのではなく，両者の相互作用を利用するなどの工夫が必要である．

Remark 1 テンソル積空間 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ は直和空間 $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ と異なることに注意されたい. 直和

空間 $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ は正規直交基底系が $\{|\phi_i^1\rangle\} \cup \{|\phi_j^2\rangle\}$ となる空間で, その次元は $\dim \mathcal{H}_1 + \dim \mathcal{H}_2$ である.

4　量子系における統計的推測の問題設定

今までにない粒子発生装置から生成された系や, 本来あるべき情報の一部が欠ているとき，状態に対応する密度行列は先験的には完全には決定できないであろう．このような状況では，適切に設計した実験のデータから密度行列についての推論を行うことになる．

例えば，密度行列を推定するときは，それを量子推定とよぶ. また，未知の密度行列に対して与えられた仮説の真偽を検定することを量子仮説検定とよぶ.

4.1　密度行列族，量子推定，測定の最適化

古典系でしばしば行われる様に事前情報を基に未知の密度行列がある密度行列族 $\mathcal{S} = \{\rho_\theta \in \mathcal{S}(\mathcal{H}) | \theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d\}$ に含まれていることを仮定する．この場合, 未知パラメータを測定値から推定することと, 密度行列の形を推定することは同値である.

例えば Spin-$\frac{1}{2}$ 系で，特に事前知識がなければ，密度行列全体 $\mathcal{S} = \mathcal{S}(\mathbb{C}^2) = \{\rho_{x,y,z} | 1 \geq x^2+y^2+z^2 \geq 0\}$ がモデルになり ($\rho_{x,y,z}$ は (10) で定義した)，3 次元パラメータ (x, y, z) の推定を考えることになる. 同じ系で，§3.3.2 で考えた物理量 S_z の測定を行ったときの期待値が 0 であることが既知である (と見なせる)場合, 未知の密度行列は密度行列族 $\mathcal{S}_{z=0} := \{\rho_{x,y,0} | 1 \geq x^2+y^2 \geq 0\}$ に含まれていると仮定できる. このような時には，測定値から未知パラメータ (x, y) を推定すればよい.

後に詳述する量子ガウス状態は振動数 f の光子のなす系の状態で，次の様に定義される．光子の系で比較的安定な状態としてコヒーレント状態が知られており, その密度作用素は §3.3.3 で定義したコヒーレントベクトルを用いて，$|\alpha\rangle_a\ {}_a\langle\alpha| (\alpha \in \mathbb{C})$ と書ける．コヒーレント状態は熱ノイズを受けると量子ガウス状態

$$\rho_{\zeta,N} := \frac{1}{\pi N} \int_{\mathbb{C}} e^{-\frac{|\alpha-\zeta|^2}{N}} |\alpha\rangle_a\ {}_a\langle\alpha|\, d\alpha \tag{11}$$

で記述できると考えられている. N はそのときの熱ノイズの大きさによって決まる. N が既知であれば密度作用素族 $\mathcal{S}_N^g := \{\rho_{\zeta,N} | \zeta (= \zeta_1 + \zeta_2 i) \in \mathbb{C}\}$ の 2 次元パラメータ (ζ_1, ζ_2) の推定が問題になり, N が未知であれば, 密度作用素族 $\mathcal{S}^g := \{\rho_{\zeta,N} | \zeta \in \mathbb{C}, N > 0\}$ の 3 次元パラメータ (ζ_1, ζ_2, N) の推定が問題になる.

古典推定においては，データから推定値への関数 T_n の最適化が問題になった．量子推定では，それに加えて測定の最適化も考察することにする．簡単のため，表現空間 $\mathcal{H}$ 上の任意の POVM に対応する測定が実行可能との仮定の下で議論を進めることとする.

Remark 2 全ての実行可能な測定は (7) の意味で POVM で記述されることは，広く認められた事実である．しかし，逆に任意の POVM について，それに対応する測定が実現可能かどうかについては，疑問視する声もある．

そのことを承知した上で，本稿では全ての POVM に対応する測定の実現可能性を仮定して，種々の最適化問題を扱う．これは簡単の為の仮定であるが，もし最適解の POVM が実行可能であれば, この問題設定は十分意味を持つ. 実際，後の §5.2§5.3 で述べるように，ある具体例では，最適解が簡単な実験系で実現できる．また，本稿では述べないが，Spin-$\frac{1}{2}$ 系の「量子相関を用いない推定 (この用語の定義は §4.2)」でも，最適解は簡単に実現できる．

4.2 量子 i.i.d. 条件，量子相関，推定

§2 で紹介した，古典統計学での一次漸近論の成功をふまえれば，量子系でもまず一次漸近論から手をつけることは，一つの妥当な方針だと思われる．

ところで，漸近論の展開のためには，同一の未知の状態にある系が複数存在しなければならない. 対応する具体的な状況としては，ある粒子発生装置を同じ条件で繰り返し用いて，複数の粒子が準備されている場合などが考えられる．こうして得られた粒子の状態は，すべて同一と考えて大きな支障はないであろう．

今，未知の状態 ρ_θ にある系を n 個与えられていて，それらは独立に生成され，今まで相互作用をしたことがなかったとする．この時，§3.4 に述べた様に，n 個の系の合成系の表現空間は $\mathcal{H}^{\otimes n} := \underbrace{\mathcal{H} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}}_{n}$ になり，生成された n 個の系からなる合成系の状態は $\mathcal{H}^{\otimes n}$ の上の密度行列 $\rho_\theta^{\otimes n} := \underbrace{\rho_\theta \otimes \cdots \otimes \rho_\theta}_{n}$ で表わされる (量子 **i.i.d.** 条件) . 以下, 量子 i.i.d. 条件の下で推定論として次の二つの問題設定を考える.

第一の問題設定では，n 個の系を全く相互作用させずに順次測定する．ただし，$k-1$ 番目までの測定値 $(\omega_1, \ldots, \omega_{k-1}) \in \Omega^{k-1}$ に依存させて, k 番目に行う測定 $M^{(k)}_{\omega_1,\ldots,\omega_{k-1}}$ を選ぶことが可能とする. 言い換えると，前回までの測定で得られた情報を使って次の測定の選択に役立てることを許すのである．こうして構成される推定を「量子相関を用いない推定」とよぶが，これは古典的な適応的な実験計画に通じる問題設定である (図 1) [15] . ここで，Remark 2 で述べたように，$M^{(k)}_{\omega_1,\ldots,\omega_{k-1}}$ としては全ての $\mathcal{H}$ 上の POVM を許すことにする．

第二の問題設定では，n 個の系を互いに相互作用させたのちに測定する．この手続きによる推定を「量子相関を用いた推定」とよび，古典論ではこれに対応する問題設定は，原理的にあり得ない．この時，§3.4 に述べた様に，相互作用を利用すると，(13) の形に限らない，$\mathcal{H}^{\otimes n}$ の上の POVM を実現できる (図 2) (ここでいう相互作用の利用については，§5.2 で具体例を挙げる .) ここでも Remark 2 との整合を考慮して，$\mathcal{H}^{\otimes n}$ の上のすべての POVM M^n の使用をゆるすことにする．

これら二つの問題設定は，数学的に，次のように定式化できる．まず，量子相関を用いる推定では，すでに述べたように $\mathcal{H}^{\otimes n}$ の上のすべての POVM M^n の使用を許す．一方，量子相関を用いない推定の問題設定は，$\mathcal{H}^{\otimes n}$ の上の POVM M^n のうち，以下の形のものだけの使用を

許すことと同値であることが知られている．

$$M^n = \left\{ M^{(1)}_{\omega_1} \otimes M^{(2)}_{\omega_1,\omega_2} \otimes M^{(3)}_{\omega_1,\omega_2,\omega_3} \otimes \cdots \otimes M^{(n)}_{\omega_1,\dots,\omega_n} \right\}_{(\omega_1,\dots,\omega_n)\in\Omega^n}, \tag{12}$$

$$M^{(k)}_{\omega_1,\dots,\omega_k} = (M^{(k)}_{\omega_1,\dots,\omega_k})^* \geq 0, \quad \sum_{\omega_k\in\Omega} M^{(k)}_{\omega_1,\dots,\omega_k} = \mathrm{I} \quad (k = 1,\dots,n) \tag{13}$$

量子相関は，古典的な世界には存在しない概念で，それが推定問題に与える効果は量子推定論の重要な問題である．これまでの議論を図にまとめると以下の様になる.

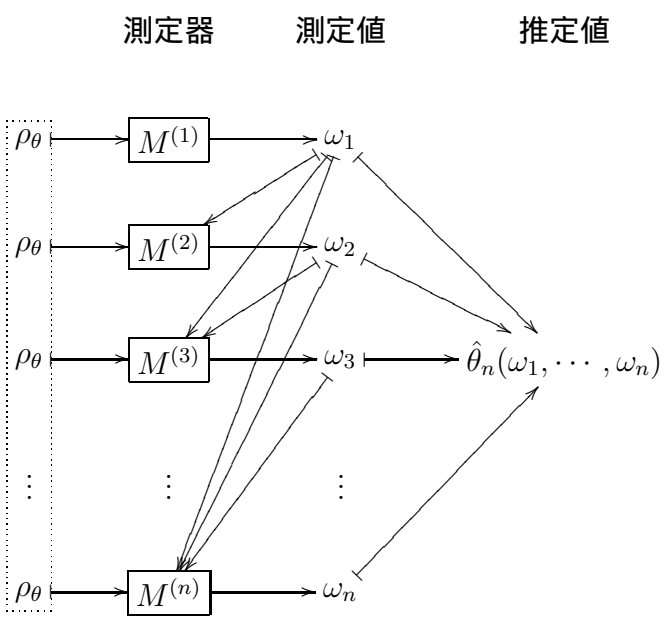

図 1

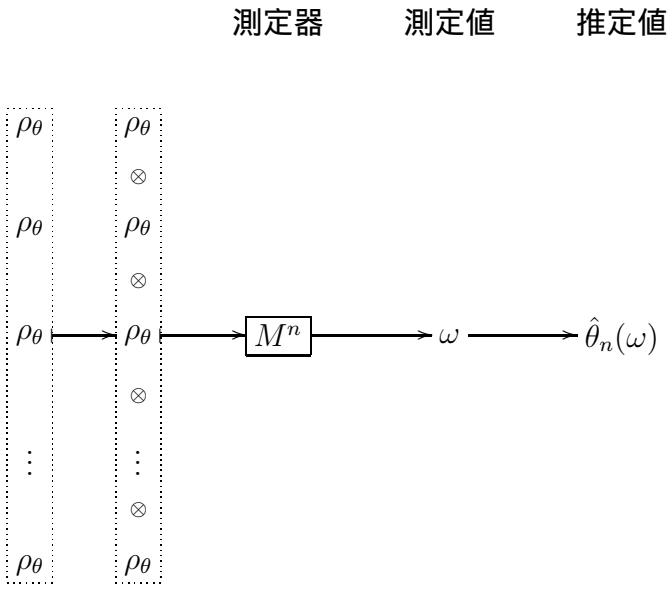

図 2

4.3 量子 Cramér-Rao 型の下限

本小節では，古典推定論の Cramér-Rao 不等式の量子版，すなわち，推定の誤差の下限の定義を述べる．n 個の系が与えられたとき，行う測定を M^n，データからパラメータの推定値への関数を T_n とし，組 (M^n, T_n) の最適化を考える．誤差の基準は平均 2 乗誤差行列

$$V_\theta^{i,j}(M^n, T_n) := \sum_{\omega\in\Omega} \left(T_n^i(\omega) - \theta^i\right)\left(T_n^j(\omega) - \theta^j\right) \operatorname{Tr} \rho_\theta^{\otimes n} M_\omega^n$$

を用いる．(量子相関を用いない場合は Ω^n を改めて Ω と置き, (13) で与えられる POVM M^n に注目する.) そして，極限 $\lim_{n\to\infty} nV_\theta^{i,j}(M^n, T_n)$ を考察する．

量子系の場合，非可換性のため, 一般にはあるパラメータの平均 2 乗誤差を小さくすると, 他のパラメータのそれが大きくなってしまう. いいかえると, これらの trade-off を扱わざるを得なくなり, 単純にこの下限を考えることができない. (そもそも，行列の間の大小関係は全順序でないことを考えれば，最小値や下界が存在しなくても不思議はない .) そのため，問題設定を工夫しなければならないが，今は平均 2 乗誤差の和の極限 $\lim_{n\to\infty} n\sum_i V_\theta^{i,i}(M^n, T_n)$ の最小化を考えることにする ($\lim_{n\to\infty} n\sum_i V_\theta^{i,i}(M^n, T_n)$ はスカラーだから，普通に最小値や下界を定義できる .) ただし，古典の場合の補題 1 と同様，$\{(M^n, T_n)\}$ に $\lim_{n\to\infty} V_\theta(M^n, T_n) = 0\,(\forall\theta\in\Theta)$ という条件を課しておく．

量子相関を用いない場合，その最小値を C_θ^{NQ} (Q は Quantum Correlation の略) と書き，量子相関を用いない **Cramér-Rao** 型の下限とよぶ．また，量子相関を用いる場合，この最小値を C_θ^Q と書いて量子相関を用いた **Cramér-Rao** 型の下限とよぶ . (これらの値は未知パラメー

タ θ に依存する.) 両者の定義より $C_\theta^{NQ} \geq C_\theta^Q$ が成り立つが, 等号が成立するか否かで量子相関を用いることの効果の有無を見ることができる.

4.4 量子仮説検定

本稿では最も単純な場合, すなわち，帰無仮説が「状態は ρ_0 である」，対立仮説が「状態は ρ_1 である」である場合を考える．古典統計学の場合と同様に第 1 種の誤り確率, 及び第 2 種の誤り確率を定義し，それらの trade-off を扱う．また，受容域の最適化だけでなく，測定も最適化も行い，推定の場合に倣って，「量子相関を用いない検定」及び「量子相関を用いる検定」を考察する．

古典の場合と同様に，第 1 種の誤り確率を $\epsilon > 0$ 以下に押さえたとき，第 2 種の誤り確率の最小値を，量子相関を用いない場合は $\beta_n^{NQ,\epsilon}(\rho_0\|\rho_1)$ で表わす．量子相関を用いる場合は，この最小値を $\beta_n^{Q,\epsilon}(\rho_0\|\rho_1)$ で表わす．

まず，「量子相関を用いない検定」については，以下の補題を示すことができる.

補題 4 $\beta_n^{NQ,\epsilon}(\rho_0\|\rho_1)$ で表す. $\mathcal{H}$ の次元が有限であるとき

$$\lim_{n\to\infty} \frac{-1}{n} \log \beta_n^{NQ,\epsilon}(\rho_0\|\rho_1) = \max_{M:\text{POVM on } \mathcal{H}} D(\mathrm{P}_{\rho_0}^M \| \mathrm{P}_{\rho_1}^M)$$

が成り立つ. また $\mathcal{H}$ の次元が無限となるときは, $\epsilon_n \to 0$ となる数列 $\{\epsilon_n\}_{n=1}^\infty$ について

$$\lim_{n\to\infty} \frac{-1}{n} \log \beta_n^{NQ,\epsilon_n}(\rho_0\|\rho_1) = \max_{M:\text{POVM on } \mathcal{H}} D(\mathrm{P}_{\rho_0}^M \| \mathrm{P}_{\rho_1}^M)$$

が成り立つ.

したがって $D(\mathrm{P}_{\rho_0}^M \| \mathrm{P}_{\rho_1}^M)$ を最大化する $\mathrm{POVM}\ M$ の選択が問題となる.

ここで相対エントロピーの量子的対応物として量子相対エントロピーを

$$D(\rho_0\|\rho_1) := \mathrm{Tr}\, \rho_0(\log \rho_0 - \log \rho_1) \tag{14}$$

で定義する．これは，古典的相対エントロピーの確率分布を密度行列に，また，積分をトレースに形式的におきかえたものである．すると，

$$D(\rho_0\|\rho_1) \geq D(\mathrm{P}_{\rho_0}^M \| \mathrm{P}_{\rho_1}^M) \tag{15}$$

が成り立ち， $D(\mathrm{P}_{\rho_0}^M \| \mathrm{P}_{\rho_1}^M)$ は量子相対エントロピー $D(\rho_0\|\rho_1)$ を越えられない．しかも，$\mathcal{H}$ の次元が有限で, $\rho_1 > 0$ であるときは, (15) で等号を達成する $\mathrm{POVM}\ M$ が存在することと, ρ_0 と ρ_1 が互いに可換であることは同値である [37]. つまり，ほとんどの場合，(15) の等号は達成されない．このことから，量子相対エントロピーは古典的な相対エントロピーの形式的拡張にすぎず，操作的意味付けはできないのではないか，と考えられていた時期があった（が，後に述べる様に現在は状況が異なる）.

次に「量子相関を用いた検定」について論じる. この場合も検定はテンソル空間 $\mathcal{H}^{\otimes n}$ 上の POVM M^n と受容域 A_n で与えられる. そして第 1 種の誤り確率及び第 2 種の誤り確率はそれぞれ

$$\sum_{\omega\in A_n^c} \mathrm{Tr}\,\rho_0^{\otimes n} M_\omega^n = \mathrm{Tr}\,\rho_0^{\otimes n}\left(\mathrm{I} - \sum_{\omega\in A_n} M_\omega^n\right), \quad \sum_{\omega\in A_n} \mathrm{Tr}\,\rho_1^{\otimes n} M_\omega^n = \mathrm{Tr}\,\rho_1^{\otimes n} \sum_{\omega\in A_n} M_\omega^n$$

で与えられる. ここで, エルミート行列 T_n をで $T_n := \sum_{\omega\in A_n} M_\omega^n$ 定義すると, 第 1 種の誤り確率及び第 2 種の誤り確率は, 以下の様に M^n を使わずに T_n のみで表わせる.

$$\mathrm{Tr}\,\rho_0^{\otimes n}(\mathrm{I} - T_n), \quad \mathrm{Tr}\,\rho_1^{\otimes n} T_n. \tag{16}$$

ここで, 行列 T_n は $\mathrm{I} \geq T_n \geq 0$ をみたすことが容易に確かめられ, ゆえに $\{M_0 = T_n, M_1 = \mathrm{I} - T_n\}$ は POVM である. 逆に $\mathrm{I} \geq T_n \geq 0$ となるエルミート行列 T_n に対して POVM $\{M_0 = T_n, M_1 = \mathrm{I} - T_n\}$ を考え, 測定値が 0 のとき受容し, 1 のとき棄却することにすると, それで検定が一つ定まる. したがって量子系での仮説検定は $\mathrm{I} \geq T_n \geq 0$ となるエルミート行列 T_n で与えられ, その 2 種の誤り確率は (16) で与えらる. 以下ではこれらを $\alpha_n(\rho_0\|\rho_1; T_n), \beta_n(\rho_0\|\rho_1; T_n)$ と記すことにする. この行列 T_n は, 受容域を量子化したものと考えることもできる.

古典統計学の場合のアナロジーをとって, 形式的に尤度比 a の尤度比検定 $S_n(a)$ を以下で定義する.

$$S_n(a) := \{\rho_0^{\otimes n} - e^{na}\rho_1^{\otimes n} \geq 0\}.$$

ここでエルミート行列 $X = \sum_k x_k |\phi_k\rangle\langle\phi_k|$ に対して, 射影行列 $\{X \geq 0\}$ を $\{X \geq 0\} := \sum_{k:x_k\geq 0} |\phi_k\rangle\langle\phi_k|$ で定義した. (ここでは異なる i, j に対して $x_i = x_j$ となることも有り得る.) なお ρ_0 と ρ_1 が非可換の場合, 一般には尤度比検定 $S_n(a)$ は「量子相関を用いない検定」では行うことはできない.

この量子版の尤度比検定 $S_n(a)$ に対しては, 以下に述べる量子版 **Neymann-Pearson** の補題が成立し, その最適性が古典の場合と同様, 保証される.

補題 5 任意の検定 T_n に対して,

$$\alpha_n(\rho_0\|\rho_1; T_n) + e^{na}\beta_n(\rho_0\|\rho_1; T_n) \geq \alpha_n(\rho_0\|\rho_1; S_n(a)) + e^{na}\beta_n(\rho_0\|\rho_1; S_n(a))$$

が成り立つ.

この補題ははじめ, Helstrom[19] により非漸近的状況で示されたが, 近年, その漸近論における重要性が長岡により指摘されるに至った.

5 量子系の統計的推測の近年の成果

5.1 研究史

本小節では, 最近の研究成果を中心に, 量子系の統計学の研究史をまとめる.

量子系の統計的推測の理論は，当初の目的は，光通信の受信過程の解析の基礎として，1960年代の後半に Helstrom[18] によってはじめられた．その後の 1970 年代を通じて，Helstrom による SLD (Symmetric Logarithmic Derivative，対称対数微分）を用いた量子推定理論 [18][19], Yuen, Lax の thermal state model の理論 [41]，Holevo の群共変的なモデルおよび量子ガウス状態族の研究 [21] などの推定論上の重要な仕事がなされた．また，検定の理論についても，Helstrom[19] の Neymann-Pearson の補題の量子版の提案といった基礎的な仕事がなされた．

しかし，量子統計学における漸近論の展開は意外に遅く 1980 年代末からのことである．

まず，仮説検定の漸近論について述べる．本稿のような簡単な問題設定の下では，量子相関を用いない仮説検定は，補題 4 の様に直感的には自明な結論が導かれる．量子相関を用いた仮説検定については，近年，以下に述べる量子版 **Stein** の補題がついに完全に証明されたばかりである．

補題 6 §4.4 の始めに定義した $\beta_n^{Q,\epsilon}(\rho_0\|\rho_1)$ について以下の式が成り立つ.

$$\lim_{n\to\infty} \frac{-1}{n} \log \beta_n^{Q,\epsilon}(\rho_0\|\rho_1) = D(\rho_0\|\rho_1) \tag{17}$$

まず，順定理である (17) の $\geq$ の部分は長岡，Petz の予想に基づき，Hiai-Petz[20] が証明した．その後，Hayashi により，群の表現論的視点から別証明及び限界を達成する測定の構成法について考察がなされた [8]. 一方, 逆定理とも言える (17) の $\leq$ の部分は Ogawa-Nagaoka[33] により示され，補題 6 の証明が完成した．これにより，量子相対エントロピーが操作的な意味を持つ概念であることが初めて明らかにされたのである．文献 [33] で，小川，長岡はさらに一歩進んで，補題 6 の強逆性も証明している．

本稿の議論では，すべて量子 i.i.d. 条件を仮定しているが，長岡は韓-Verdu の情報スペクトル [6] を量子系に拡張することで，より一般的な量子仮説検定の理論を展開した [31]. これら小川，長岡の一連の研究では，量子 Neymann-Pearson の補題が極めて重要な役割を果たしている．

次に推定について述べる．量子推定の漸近理論は長岡 [27] により初めて手がつけれられた．[27] では，$\rho_\theta > 0$ かつ，パラメータの次元が一次元の場合が扱われている．この場合，量子相関を用いても用いなくても Cramér-Rao 型の下限は同じ値になる．

$\rho_\theta > 0$ でなく，固有値 0 を持つときは，特別な扱いが必要で，それを指摘し，適切な処方を示したのが藤原，長岡 [4][5] の研究である．それを受けて，松本は純粋状態からなるモデルの Cramér-Rao 型の下限を一般的な形を求めた [22][24][26]．この場合も，$C^{NQ} = C^Q$ である．

$C^{NQ} \neq C^Q$ であることが確認されたはじめての例は，表現空間が $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ すなわち Spin-$\frac{1}{2}$ である場合である．まず，長岡 [28]，林 [9][10] によって C^{NQ} が，その後，林，松本により C^Q が求められ，両者の比較の結果，$C^{NQ} \neq C^Q$ であることがわかった．林，松本の研究では二次元一般線形群 $\mathrm{GL}(2)$ の表現論が重要な道具として用いられている．

この表現論の手法は，松本により任意次元 k の一般線形群 $\mathrm{GL}(k)$ に拡張され，その結果，任意有限次元 Hilbert 空間を表現空間に持つ場合の C^Q が求まり，また多くの場合，$C^{NQ} \neq C^Q$ が成立することが分かった．

こうして概観してみると，量子統計学の漸近理論では，一般線形群の表現論が重要な役割をはたしていることがわかる．たとえば §5.2 で紹介する，林 [13] による量子ガウス状態族の 3 次元パラメータの推定の理論の背後には表現論的対称性が隠れている．

さて，古典統計学の漸近理論では，甘利らの情報幾何学 [1] が知られているが，その量子版の考察から，長岡は有効推定量をもつモデルの特徴付けに成功した [27][29] [30][2] . 一方，Berry's phase （$U(1)$-bundle の曲率） [36] が Cramér-Rao 型の下限の中のに現れ，「非可換性の強さ」と解釈できることが松本により指摘された [24][25][26] . この状況を受けて，藤原，松本によって，Berry's phase 及びその拡張である Uhlmann's parallelism [39][40] と長岡の量子情報幾何との間の内的な関連が探求された [3][23][24][26].

本稿で紹介する推定論では，専ら平均二乗誤差を扱っているが，大偏差型の評価（Bahadur 型の有効性）の量子版も考察されている [17] . 興味深いことに，推定量の一致性の定義の強弱に応じて 2 種類の違った限界が得られる . パラメータが一次元ならば，前者は Helstrom に導入された SLD Fisher 情報量に等しくなり，後者は Kubo-Mori 型の Fisher 情報量に等しい .(後者は量子相対エントロピーの極限として得られる .) 両者はともに古典的な Fisher 情報量の数学的アナロジーであるが，ほとんどの場合は非可換性のため異なる値をもつ .

5.2 量子ガウス状態族の推定

以下，最近の量子推定の成果のわかりやすい例として，量子ガウス状態族の推定理論を述べる . この例では，量子相関を用いた場合の下限 C^Q を達成する推定スキームが，至ってシンプルな実験系で実現でき，量子相関の利用についての直感的イメージを掴むには格好の題材であると思われる . また，C^Q が陽にかけており，量子相関の効果を明瞭に知ることができる .

まず，ノイズの大きさである N が既知であるとする . すると，§4.1 で与えた密度作用素族 $\mathcal{S}_N^g := \{\rho_{\zeta,N} | \zeta (= \zeta_1 + i\zeta_2) \in \mathbb{C}\}$ の複素パラメータ $\zeta \in \mathbb{C}$ を推定することになる . このときには,

$$C_\zeta^{NQ} = C_\zeta^Q = 2(N+1) \tag{18}$$

となり, 量子相関を用いることの効果は無い. この下限を与える推定量は，各系に対して §3.3.3 で定義したヘテロダイン測定を行い，得られたデータのサンプル平均を取ることで構成できる [21].

ζ のみではなく N まで推定するのであればどうであろうか. これは, §4.1 で与えたもう 1 つの密度作用素族 $\mathcal{S}^g := \{\rho_{\zeta,N} | \zeta \in \mathbb{C}, \quad N > 0\}$ の 3 次元パラメータ (η_1, η_2, N) の推定問題であって，

$$C_{\zeta,N}^{NQ} \neq C_{\zeta,N}^Q = (N+2)(N+1) = 2(N+1) + N(N+1)$$

となることが示せ [7], 量子相関を用いることの効果が現れる. 残念ながら $C_{\zeta,N}^{NQ}$ の値は具体的には求まっていない. 実は，量子相関を用いる最適な推定は

$$V_{\zeta,N}^{1,1}(M^n, T_n) + V_{\zeta,N}^{2,2}(M^n, T_n) = \frac{2(N+1)}{n} + o\left(\frac{1}{n}\right), \quad \forall \zeta \in \mathbb{C}, N > 0 \tag{19}$$

$$V_{\zeta,N}^{3,3}(M^n, T_n) = \frac{N(N+1)}{n} + o\left(\frac{1}{n}\right), \quad \forall \zeta \in \mathbb{C}, N > 0 \tag{20}$$

となるものに限られ, 以下の手順で構成できることが分かっている. まず $\rho_{\zeta,N}^{\otimes n}$ に各系同士をうまく相互作用させて, 以下の様に時間発展させる.

$$\rho_{\zeta,N}^{\otimes n} \mapsto \rho_{\sqrt{n}\zeta,N} \otimes \rho_{0,N}^{\otimes n-1}.$$

そして, 1 番目の系に対してはヘテロダイン測定を行い, その測定値をそのまま ζ の推定値とし, 残りの $n-1$ 個の系に対しては §3.3.4 で与えた個数測定を行い, サンプル平均を N の推定値とする. 例えば $n=4$ のときについては次の図 3 の様にビームスプリッター (ハーフミラー) を組み合わせた測定を行うことにより実現できる.

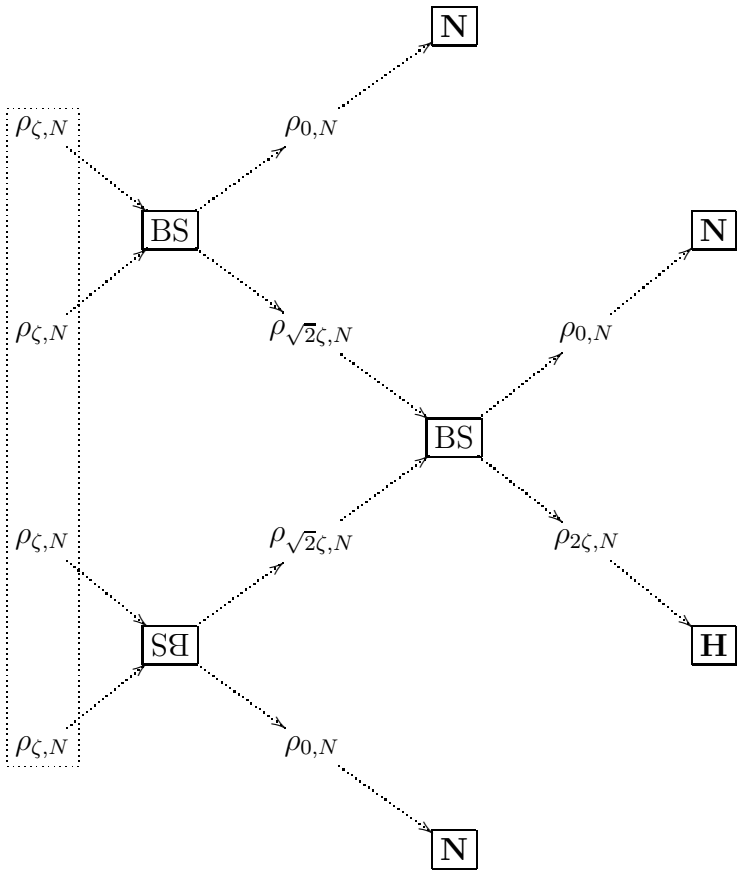

図 3

上記の図では個数測定, ヘテロダイン測定をそれぞれ $\boxed{\mathbf{N}}$, $\boxed{\mathbf{H}}$ で表し, ビームスプリッターを $\boxed{\mathrm{BS}}$, で表した. ビームスプリッターとは平面版状のもので上からの入射光と下からの入射光の双方に対して反射及び屈折が起こるよう構成させたものである . ただし , 上からの入射光の反射光は反射の際に位相が反転する (固定端反射) のに対し下からの入射光に対しては反射の際に位相がずれない (自由端反射) . ビームスプリッター $\boxed{\mathrm{BS}}$ の上下を逆にしたものを $\boxed{\mathrm{SB}}$ で表した .

次に, $C_{\zeta,N}^{NQ} \neq C_{\zeta,N}^{Q}$ の証明の概略を述べる . 問題は , (19),(20) で与えられる精度が量子相関を用いずに達成できるかである . そこで , 複素パラメータ $\zeta(=\zeta_1+\zeta_2 i)$ の推定誤差については量

子相関を用いたときと同じ (19) を要求し，その制限の下，N の推定誤差をどれだけ下げれるかを考える．いいかえると，(19) と $\lim_{n\to\infty} V_{\zeta,N}(M^n, T_n) = 0$ の制限の下，$\lim_{n\to\infty} nV^{3,3}_{\zeta,N}(M^n, T_n)$ を最小化する. すると，この最小値は $(N+1)^2$ になってしまって，(20) に全く及ばない．よって，量子相関を用いずに $C^Q_{\zeta,N}$ を達成することはできない[‖]．この最小化問題での最適な推定は，具体的に次のように与えられる．すなわち，各系に対するヘテロダイン測定の測定値 $\tilde{\zeta}$ のサンプル平均を ζ の推定値とし, $|\tilde{\zeta}|^2$ のサンプル平均を N の推定値とするのである．そうすると (19) を満たし, $\lim_{n\to\infty} nV^{3,3}_{\zeta,N}(M^n, T_n) = (N+1)^2$ となる.

Remark 3 上述した様に，量子ガウス状態族の量子相関を用いない推定では，毎回同じ測定を繰り返せばよかった．しかし，一般的には前回までの測定結果を用いて，次に行う測定を選択しなければ，最適な精度は得られない．例えば, Spin-$\frac{1}{2}$ 系の場合には, 量子相関を用いない推定で最適な測定を行うためには, 適応的に測定を変えることが必要である [15].

5.3 量子ガウス状態の仮説検定

この小節では，帰無仮説及び対立仮説が量子ガウス状態 $\rho_{\zeta_0,N}$, $\rho_{\zeta_1,N}$ となる検定を考察する．この場合は最適な測定は推定の場合と全く異なり, 2 つの問題設定の相違を理解する上で有効である. ただ残念なことに量子相関を用いない検定については実はあまり詳しい計算ができていない. 量子相関を用た検定についてはかなり詳しく分かっているので以下では量子相関を用た検定についてのみ述べる.

例えば，第 1 種誤り確率に対する定数拘束の下での第 2 種誤り確率の指数は，補題 6 (量子版 Stein の補題) より $D(\rho_{\zeta_0,N}\|\rho_{\zeta_1,N}) = \|\zeta_0 - \zeta_1\|^2 \log\frac{N+1}{N}$ となる. この限界を達成する測定は，途中までは推定のときと同様の操作を行う．すなわち，まず，状態が $\rho^{\otimes n}_{\zeta,N}$ にある合成系に, 各系同士をうまく相互作用させて, 以下の様に時間発展させる．

$$\rho^{\otimes n}_{\zeta,N} \mapsto \rho^{\otimes n}_{\zeta-\zeta_1,N} \mapsto \rho_{\sqrt{n}(\zeta-\zeta_1),N} \otimes \rho^{\otimes n-1}_{0,N}.$$

ここまでは推定とまったく同じである．しかし，ここから先が全く異なる．推定の場合は，1 番目の系にはヘテロダイン測定を行ったが，検定の場合は §3.3.4 で与えた個数測定を行う．そして，適切な尤度をもちいて，古典的な意味での尤度比検定を行う [11]. 例えば $n = 4$ かつ $\zeta_1 = 0$ のときについては先の図 3 の様にビームスプリッターを組み合わせ, ヘテロダイン測定を行うところを個数測定に取り替えると，最適な検定を与える実験系が構成できる. (他の系については測定しなくてもよい.)

この様に, 推定と検定は量子系では問題の構造が異なっており, 問題設定に応じて測定を選択する必要がある.

[‖]これだけの議論では，$C^Q_{\zeta,N}$ にいくらも近い値の誤差をもつ測定が量子相関を用いずに構成できる可能性が否定できていない．この点を含めた詳しい証明は別の機会に論じる [16]．

6　結び，将来の展望

以上，量子系の統計的推測の，特に一次漸近論に付いて，その初歩から最近の研究にいたるまでを概観した．

量子統計推測の漸近論は，まだ始まったばかりである．今のところ解かれている問題は，どれも初等的な命題ばかりであり，多少とも込み入った問題は全く手がついていない．未解決な問題としては，仮説検定の（漸近）一様最強力検定の有無，Chernoff 型の限界などが上げられる．高次漸近論に至っては，具体例の計算が多少あるのみである [14]．

また，量子統計学全体として，現状を見る限り, その内容の豊かさでは古典統計学の足下にも及ばない．例えば，十分統計量，モデル選択，回帰，縮小推定などの概念の量子版は，今のところ，ほとんど手がついていない．こういった状況を変えるためには，古典統計の手法に通じた研究者の参入が待たれる．

一方で, これらの研究から得られた知見を実際の物理系で実装することも重要である. 例えば，量子ガウス状態の場合は最適かつ物理的に実現できる実験系を提案できたが，これは今のところ，例外中の例外である．しかし，状態の操作や測定の設計の技術が急速に発達しつつある現状を考えると [42]，もっと多くの系で，最適に近い測定が実現可能になることが期待できる. また，実現できる範囲の測定の中での最適化や，頑健性の考察なども重要なテーマになるであろう．このような物理的実装の研究には，統計学的視点と物理的視点の双方が必要であることは，言うまでもない．

参考文献

[1] Amari, S., *Differential-Geometrical Methods in Statistics*, Lecture Notes in Statistics, Vol. 28 Springer, Berlin, 1985.

[2] Amari, S., and Nagaoka, H., Methods of Information Geometry, AMS/OUP, 2000.

[3] Fujiwara, A., A Geometrical Study in Quantum Information Systems, doctoral thesis (1995).

[4] Fujiwara, A., and Nagaoka, H., Quantum Fisher metric and estimation for pure state models, Physics Letters **201A**, (1995), 119-124.

[5] Fujiwara, A., and Nagaoka, H., An estimation theoretical characterization of coherent states, Journal of Mathematical Physics **40**, (1999), 4227-4239.

[6] 韓太舜，情報理論における情報スペクトル的方法，培風館, 東京, 1998.

[7] 林正人, 非可換物理量の同時測定について, 数理解析研究所講究録「無限次元非可換解析学の展開」No.1099, (1999), 96-118.

[8] Hayashi, M., Asymptotics of Quantum Relative Entropy From Representation Theoretical Viewpoint, E-print http://xxx.lanl.gov/abs/quant-ph/quant-ph/9704040 (1997).

[9] Hayashi, M., A Linear Programming Approach to Attainable Cramer-Rao type bound and Randomness Conditions, E-print http://xxx.lanl.gov/abs/quant-ph/9704044.

[10] Hayashi, M., A Linear Programming Approach to Attainable Cramer-Rao type bound, Quantum Communication, Computing, and Measurement, (edited by Hirota, O., Holevo, A. S., and Caves, C. A.), Plenum, New York, 1997, 99-108.

[11] 林正人, 量子推定理論における漸近的大偏差型評価について, 科研費シンポジウム「統計的推測理論とその情報論的側面」予稿集, 1998, 53-82.

[12] 林正人, サンプル間の量子相関を用いた状態推定, 第 7 回「非平衡系の統計物理」シンポジウム報告集, 物性研究 Vol. 73 No. 4, (2000), 680-703.

[13] Hayashi, M., Asymptotic quantum theory for the thermal states family, Quantum Communication, Computing, and Measurement 2, (edited by Kumar, P., D'ariano, G. M., and Hirota, O.), Plenum, New York, 2000, 99-104.

[14] Hayashi, M., Asymptotic estimation theory for a finite-dimensional pure state model, Journal of Physics A: Math. and Gen. **31**, (1998), 4633-4655.

[15] 林正人, 松本啓史, 測定自由度をもつ統計モデルと量子力学, 数理解析研究所講究録 **1055**, (1998), 96-110.

[16] Hayashi, M., and Matsumoto, K., in preparation.

[17] Hayashi, M., and Nagaoka, H., in preparation.

[18] Helstrom, C. W., Minimum Mean-Square Error Estimation in Quantum Statistics, Physics Letters **25A**, (1967), 101-102.

[19] Helstrom, C. W., Quantum Detection and Estimation Theory, Academic Press, New York, 1976.

[20] Hiai, F., and Petz, D., Communnications in Mathmatical Physics **143**, (1991), 99-114.

[21] Holevo, A. S., Probabilistic and Statistical Aspects of Quantum Theory, North_Holland, Amsterdam, 1982.

[22] Matsumoto, K., A new approach to the Cramer-Rao type bound of the pure state model, E-print http://xxx.lanl.gov/abs/quant-ph/quant-ph/9704044 (1997).

[23] Matsumoto, K., Uhlmann's parallelism in quantum estimation theory, E-print http://xxx.lanl.gov/abs/quant-ph/quant-ph/9711027 (1997).

[24] Matsumoto, K., The asymptotic efficiency of the consistent esitmator, Berry-Uhlmann's curvature, and quantum information geometry, Quantum Communication, Computing, and Measurement 2, (edited by Kumar, P., D'ariano, G. M., and Hirota, O.), Plenum, New York, 2000, 105-110.

[25] Matsumoto, K., Berry's phase in view of quantum estimation theory, and its intrinsic relation with the complex structure, E-print http://xxx.lanl.gov/abs/quant-ph/quant-ph/0006076 (2000).

[26] Matsumoto, K., A geometrical approach to quantum estimation theory, doctoral thesis, Graduate School of Mathematical Sciences, University of Tokyo (1997).

[27] Nagaoka, H., On the Parameter Estimation Problem for Quantum Statistical Models, **第１２回情報理論とその応用シンポジウム予稿集**, (1989), 577-582.

[28] **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**, **日本応用数理学会論文誌**, vol. 1, No. 4, (1991), 305-318.

[29] **長岡浩司**, **量子状態推定の微分幾何**, **数理科学** No.366 (**特集・情報空間**), (1993.12), 46-52.

[30] Nagaoka, H., Differential Geometrical Aspects of Quantum State Estimation and Relative Entropy, Quantum Communications and Measurement, (edited by Belavkin, V. P., Hirota, O., and Hudson, R. L.), Plenum, New York, 1995, 449-452.

[31] 長岡浩司, 量子仮説検定の情報スペクトル理論, 第２２回情報理論とその応用学会シンポジウム予稿集, (1999), 245-247.

[32] 野田一雄, 宮岡悦良, 数理統計学の基礎, 共立出版 1992；竹村彰通，数理統計学の基礎，創文社 1991；竹内 啓，数理統計学，東洋経済新報社 1963.

[33] Ogawa, T. and Nagaoka, H., Strong Converse and Stein's Lemma in Quantum Hypothesis Testing, IEEE Trans. **IT**, to appear; LANL e-print quant-ph/9906090, (1999).

[34] 小川 朋宏, 量子力学系における仮説検定と通信路符号化の漸近特性に関する研究, 電気通信大学大学院情報システム学研究科 学位申請論文, (2000).

[35] 小澤正直, 観測理論の数理, 数理物理への誘い３ (江沢洋編), 遊星社, 2000, 163-189.

[36] Shapere, A., and Wilczek, F., GEOMETRIC PHASES IN PHYSICS, Advanced Series in Mathematical Physics, vol. 5, World Scientific (1989).

[37] Petz, D., Properties of quantum entoropy, Quantum Probability and Applications II, (Lecture Notes in Mathematics), vol. 1136, (edited by Accardi, L., and von Waldenfels, W.), Springer, Berlin, 1985, 428-441.

[38] 竹内啓 他編, 統計学辞典 (東洋経済, 1989).

[39] Uhlmann, A., Parallel transport and 'Quantum holonomy' along density operators, Reports on Mathematical Physics, **24**, (1986), 229-240.

[40] Uhlmann, A., Density operators as an arena for differential geometry, Reports on Mathematical Physics, **33**, (1993), 253-263.

[41] Yuen, H. P., and Lax, M., Multiple-Parameter Quantum Estimation and Measurement of Nonselfadjoint Observables, IEEE Trans. **IT-19**, (1973), 740-750.

[42] Special Issue on Quantum State Preparation and Measurement, Journal of Modern Optics, Vol. 44, 11/12, (1997); Belavkin, V. P., Hirota, O., and Hudson, R. L., Quantum Communications and Measurement, Plenum, New York, 1995; Hirota, O., Holevo, A. S., and Caves, C. A., Quantum Communication, Computing, and Measurement, Plenum, New York, 1997; Kumar, P., D'ariano, G. M., and Hirota, O., Quantum Communication, Computing, and Measurement 2, Plenum, New York, 2000.