

量子系における最適制御：最適状態保護と最速制御

2020 年度

若村 浩明

学位論文 博士（理学）

量子系における最適制御：最適状態保護と最速制御

2020 年度

慶應義塾大学大学院理工学研究科

若村 浩明

目次

第 1 章	序論	1
1.1	導入	1
1.2	量子系を外乱から保護する制御：状態保護	2
1.3	量子系の状態を素早く遷移させる制御：時間最適制御	6
1.4	本論文の構成	9
第 2 章	量子制御の基礎理論	11
2.1	量子力学の公理的取り扱い	12
2.1.1	数学的基礎	12
2.1.2	量子力学の要請	15
2.1.3	状態の混合	17
2.1.4	ユニタリ発展と位相因子	19
2.2	条件付きでない状態変化の一般的記述	20
2.2.1	合成系上のユニタリ発展	20
2.2.2	TPCP 写像	21
2.3	条件付きの状態変化の一般的記述	22
2.3.1	間接測定モデル	22
2.3.2	正演算子測度 (POVM)	24
2.3.3	CP インストルメント	25
2.3.4	POVM と CP インストルメントの対応関係	26
2.4	TPCP 写像と CP インストルメントの関係についての注意	27
第 3 章	2 準位系の幾何学的表示	29
3.1	Bloch 表現	29
3.1.1	Pauli 行列と Bloch 表示	30
3.1.2	ユニタリ変換	31
3.2	TPCP 写像の Bloch 表現	32
3.2.1	トレース保存写像とアフィン変換	32
3.2.2	アフィン変換の分解	33

	3.2.3 完全正值性の必要条件	35
3.3	$d(\geq 3)$ 次元 Hilbert 空間	36
第 4 章	事後制御による最適な状態保護	37
4.1	導入	37
4.2	2 状態保護問題	39
	4.2.1 問題設定	39
	4.2.2 結果	41
	4.2.3 最適制御における量子測定	42
4.3	全状態保護問題	43
	4.3.1 問題設定	44
	4.3.2 結果	45
	4.3.3 事後制御による状態保護の不可能性	46
第 5 章	事前事後制御による最適な全状態保護	47
5.1	状態保護の一般モデル：事前事後制御	47
	5.1.1 一般的定式化	47
	5.1.2 全状態保護問題	49
5.2	一般の量子系での特定ノイズの抑制：depolarizing 型ノイズ	50
	5.2.1 Depolarizing 型ノイズ	51
	5.2.2 Depolarizing 型ノイズに対する最適制御	51
5.3	2 準位系での広いクラスのノイズの抑制：単位的ノイズ	53
	5.3.1 単位的ノイズ	54
	5.3.2 単位的ノイズに対する最適制御	56
5.4	古典的なノイズへの最適制御とノイズの持つ凸性	57
	5.4.1 一般量子系での depolarizing 型ノイズに対する最適性の証明	59
	5.4.2 2 準位系の単位的ノイズに対する最適性の証明	59
5.5	非単位的ノイズに対する効果的な量子的制御の存在	61
5.6	関連研究との比較	64
第 6 章	量子系における時間最適制御の一般論	66
6.1	量子系における時間最適制御問題	66
6.2	量子最速降下曲線	68
	6.2.1 QB の定式化	68
	6.2.2 結果	69
	6.2.3 QB の導出	70
	6.2.4 直接的結果	71

6.2.5	数値的手法についての注意	74
6.3	量子系の時間最適制御への Pontryagin の最大値原理の適用	74
6.3.1	MP-QB の定式化	75
6.3.2	QB と MP-QB の関係	76
6.3.3	MP-QB の導出	77
第 7 章	量子系の時間最適制御の適用と特異制御の最適性	80
7.1	ドリフト場と不等式条件	80
7.1.1	ドリフトと制御ハミルトニアン	81
7.1.2	ロリポップ型制約条件下における不等式条件の等式条件への帰着	82
7.1.3	蓮の葉型制約条件と等式帰着の十分条件	83
7.2	特異制御と一般化 GLC 条件	85
7.2.1	特異制御	85
7.2.2	一般化 Legendre-Clebsch 条件	87
7.2.3	特異的制御の物理的意味	89
7.3	適用例	89
7.3.1	例 1: Landau-Zener 模型	90
7.3.2	例 2: 2 状態系	90
7.3.3	例 3: 対称な 2 つの 2 準位系	91
第 8 章	結論	94
謝辞		98
付録		99
A	Gell-Mann 行列の定義	99
B	アフィン写像の線形写像への拡張	99
C	最適な 2 状態保護制御の詳細	102
D	Dephasing 型ノイズの物理的意味	102
E	$SU(d)$ の対称既約表現	103
F	不変積分	104
G	未知状態の最適推定	105
H	平均忠実度の Tr_{HS} による表示	106
I	Amplitude damping 型ノイズの物理的対応	107
J	テントの構成とその凸性	108
K	Pontryagin の最大値原理	109
K-1	最適制御問題	109
K-2	Pontryagin の最大値原理	110

	K-3	限定された場合における Pontryagin の最大値原理の極値性の証明	111
L		Lagrange の未定定数の厳密な適用	112
M		GLC 条件の導出	114
	M-1	評価関数の 2 次変分の書き換え	115
	M-2	部分積分による 2 次変分の書き換え	118
N		座標変換の下での GLC 条件の不変性	122
O		行列 $Q^{(m)}$ の漸化式	123
P		例 3 に現れる演算子	124
Q		例 3 での境界に属する特異制御への GLC 条件の適用	124
		参考文献	127

第1章

序論

1.1 導入

量子情報科学は物理学と情報科学の融合分野である。そしてその目指すべきところは理学と工学の双方に存在する。量子情報科学の工学としての目的は、量子計算や量子通信といった量子情報処理を実現させることである。これらは高速な計算や秘匿な通信を可能にすると期待されており、公的な研究機関だけでなく民間企業によっても活発に研究が行われるほどに多大な注目を集めている。一方で量子情報科学の理学としての目的は、物理学を情報科学や応用工学の観点から捉え直し理解することである。例えば、情報処理における不可逆過程を熱力学的な観点から捉え直した R. Landauer は（古典）計算を物理過程と捉え、

“We particularly stress the fact that not only does physics determine what computers can do, but what computers can do, in turn, will define the ultimate nature of the laws of physics.”

と述べている [1]。すなわち、計算機が物理法則に従っているだけでなく、計算機が行えることのすべてが逆に物理法則を特徴づけていることを強調した。計算や通信などの情報処理を物理的過程と捉える上では、上記を量子計算や量子通信と置き換えても同様である。量子計算に代表される量子情報処理を研究する理学的意義は、自然現象を情報処理過程とみなしたときの能力を調べることで、逆に自然現象そのものを理解できるという点にある。量子複製不可能定理 [2–4] とそれに付随する不完全複製の研究 [5,6] や、状態識別 [7–10]、誤差と擾乱の不確定性関係 [11–14] の研究などはまさにこの目的に沿った研究であろう。

量子系の制御（量子制御）、特に最適な量子制御は量子情報科学の根本的な話題である。なぜなら全ての量子情報処理は、詰まるところ量子系を制御することによって実現されるためである。ここで制御とは、系を欲している状態に保つあるいは変化させることを指す。何らかの基準に即して可能な限り良い情報処理を実現するためには、最適な制御が何かを明らかにする必要がある。また最適制御の解明は、量子力学の一種の限界の解明に等しい。量子系の最適制御は実用上必要であるだけでなく、系に対して可能な制御の限界を表してもい

るからである。特に古典制御との比較によって量子力学の特性まで浮き彫りにされる。以上より、量子系における最適制御の研究は基礎と応用の両面にとって重要であり価値がある。

一口に最適制御といっても、当然その目的は様々である。例えばある人は精確な通信を行いたいかもしれないし、他のある人は素早く計算を行いたいかもしれない。つまり何を「良い」とみなすかによって考えるべき制御は大きく異なる。しかし今触れた2つ、精確な制御と素早い制御は多くの状況で有用だと考えられる。したがって本論文では、量子系を外乱から保護する制御と、量子系の状態を素早く遷移させる制御を主題として議論する。

1.2 量子系を外乱から保護する制御：状態保護

現実の多くの物理系は、何らかの外部系と相互作用している。意図しない外界との相互作用（ノイズ）は量子状態を乱し、情報処理に誤りを引き起こしてしまう。例えば量子計算であれば計算結果の間違い、量子通信であれば通信効率の低下が引き起こされる。現実的な系で外界との相互作用を完全に消し去ることは難しいので、不可避的に存在するノイズから量子状態を保護するような制御が必要となる。

古典系ではフィードバック制御が系を安定化させるための強力な手法の1つである。フィードバック制御は系の測定とその測定結果に応じた適切な操作によって構成される。例として1次元質点系に対して、任意の力を作用できるとする。粒子の状態は位置と運動量によって完全に指定されるので、これらを精確に測定できれば、どのような外乱に対しても我々は粒子の状態を元に戻せる。このように古典系では、フィードバック制御による完璧な状態保護が原理的には可能である。これは古典系の測定が精密に反作用なく行えるという性質に依拠している。

一方で量子論では、測定能力に制限がある。単一の標本への1回の測定のみでは量子状態を一意には識別できず、測定された量子状態も壊れて元の情報を失ってしまう（波束の収縮）。このような量子論における測定能力の制限はフィードバック制御にも大きな影響を与える。古典系のフィードバック制御では測定によって系の情報を抽出することが重要であったが、量子系では完全な情報を得られず、さらに情報を得れば得るほどに系の状態を乱してしまうからである。測定によって得られる情報と与えてしまう擾乱の間のトレードオフ関係の下で、最適な状態保護がどのように定まるのかは興味深い話題である。

本論文前半では以上を踏まえ、フィードバック制御による量子状態の保護を議論する。量子状態はどの程度保護できるのか、そして最適制御の中で量子測定がどのような役割を果たすのかを議論する。

量子系に対するフィードバック制御は、Belavkinによって初めて定式化された（例えば文献 [15] を参照）。量子フィードバック制御の研究では多くの場合時間連続的にノイズが存在する場合を対象とし、連続的に量子系を測定してその結果に応じた操作をするモデルを用いている [16, 17]。しかし時間連続的な量子フィードバック制御は確率微分方程式を用いた定式化が必要であり、量子測定の役割を調べるためにはむしろ時間離散的な量子フィード

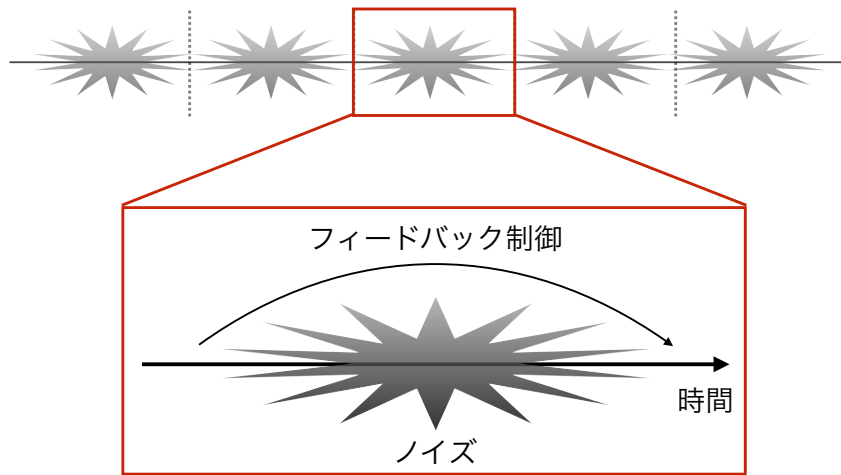


図 1.1 時間連続的に作用するノイズを離散化して得られる 1 ステップのフィードバック制御の概念図.

バック制御の定式化を用いるべきである。特に、その内の 1 ステップの量子フィードバック制御を考えるだけで十分である。1 ステップのフィードバック制御とはノイズ過程を適当な時間区間で切り取り、その前後に量子系に対して何らかの操作や測定を行う制御である (図 1.1)。これにより問題は遥かに単純化されるので、より詳細に状態保護制御の最適性や量子測定の役割を議論できる。図 1.1 のような 1 ステップのフィードバック制御は本論文において事前事後制御と呼ばれ、後に詳細に定義する。ここで事前制御はノイズ過程以前に行う測定を表し、事後制御はノイズ過程以後に行う外場の印加などの操作を表している。

以下では、この事前事後制御という枠組みに沿って先行研究を概説する。まず、初期状態が既知の量子状態である場合は自明な問題である (第 4 章)。この場合は守るべき量子状態 $|\psi\rangle$ についてその素性が完全に分かっているので、測定を行う必要がない。ノイズによってどのように状態が乱されても、再び元の状態 $|\psi\rangle$ を生成する操作を行えば良い。非自明な問題が現れるのは、未知の量子状態を保護する必要があるときである。その中でも初期状態の候補が 2 つという最も単純な場合は詳しく調べられている [18, 19]。これを 2 状態保護問題と呼ぶことにする。2 状態保護問題では 2 つの量子状態の組が初めに指定され、確率的にどちらかの状態が用意されてノイズを受ける。我々の目的はどちらの状態が用意されたかを知らずに、いずれの場合も元に近い状態へ戻す制御を見つけることである。このように未知の量子状態が 2 つ用意される状況は例えば量子鍵配送の B92 プロトコル [20]^{*1} で考えられる。B92 プロトコルは、2 つの非直交量子状態の送信と受信者側での測定、および公開され

^{*1} 量子鍵配送のプロトコルとして最も有名なものは BB84 [21] だが、B92 プロトコルはこれを改良したものである。

た古典通信路を通した返信によって安全に秘密鍵を共有する方法である*2。

Brańczyk *et al.* [18] は 2 状態保護問題を初めて詳しく議論し、2 準位系の状態を dephasing 型ノイズから保護する問題を取り扱った。ここで dephasing 型ノイズとは、量子的な重ね合わせ状態を古典的な確率混合へと変化させるようなノイズである。この研究では事前制御は行わず、事後制御のみによる制御の中で最適性を論じている。また、Mendonça *et al.* [19] はこの研究を拡張し、2 準位系の任意のノイズモデルに対して最適制御を構成するための手続きを与えた。これらの 2 状態保護の研究では、最適な量子制御には「弱い測定」が必要になることが明らかにされている。弱い測定とは系の状態を大きく乱さない代わりに得る情報も少ない測定であり、量子測定の情報と擾乱のトレードオフ関係を非自明に満たしている。

ここで、弱い測定の例を有名な Stern-Gerlach の実験を用いて説明しておくことにする。これは銀粒子の持つスピンの向きを測定するための実験である。銀粒子は中性のスピン $1/2$ 粒子なので磁気モーメントを持ち、したがって不均一な磁場を印加して磁場勾配を与えると、銀粒子はその磁気モーメントの向きに応じて力を受ける*3。Stern-Gerlach の実験ではこの性質を利用し、垂直方向に印加された不均一磁場に対して水平に銀粒子を入射する(図 1.2)。すると粒子はその磁気モーメントに応じて軌道が変化し、スクリーンに到達した位置を測定すれば粒子の持つスピンの向きを間接的に測定できる。ここでスピンの位置を精確に測りたければ、上向きスピンの波動関数と下向きスピンの波動関数が重ならないようにすれば良い。これは例えば、磁場勾配を十分強くすることで達成できる。一方で磁場勾配を弱くした場合には、上向きスピンと下向きスピンの波動関数は重なりを持ったままスクリーンに達する。したがってスピンの向きを精確に測定できず、間違える可能性が高くなる。しかしその代わりに、測定後もスピンの重ね合わせ状態は完全には壊れないという特性を持っている。これが弱い測定の例である*4。

2 状態保護問題では初期状態（保護すべき量子状態）の候補は 2 つだけであるため、比較的初期状態に関する知識が豊富な場合を取り扱っている。一方で保護すべき状態の候補が 3 つ以上に増えたとき、初期状態への知識が状態保護にどれだけ影響するかは非自明である。

*2 秘密鍵とは暗号を生成する際に受信者と送信者の間に共有されるビット列 (0 と 1 の連なり) を指し、共通鍵とも呼ばれる。例えば Alice と Bob が暗号鍵 “1” を共有しており、Alice が Bob に情報 “0” を送信したいとする。このとき「本当に送りたい情報に秘密鍵を (2 進法で) 足して送信する」という約束事を共有しておくことで、盗聴不可能な通信が可能となる。なぜなら第三者は送られた情報 “1” を得ることができても、暗号鍵 “1” を知らない限り本当の情報が “0” か “1” か分からないからである。量子暗号とは基本的にこの秘密鍵を共有するための方法であり、専門的には量子鍵配送 (quantum key distribution; QKD) と呼ばれる。量子鍵配送は秘密鍵を共有するための手段なので、盗聴を後から検知できれば十分である。B92 プロトコルは量子鍵配送の有名な手法の 1 つであり、秘密鍵を 2 つの非直交量子状態の送信によって共有する方法である。非直交な状態は 1 回の測定で間違いなく識別できないので、盗聴者は送信された量子状態を複製できない。そればかりか盗聴 (測定) を行うと量子状態は壊れてしまい、そのまま受信者の元に届くのである。これにより盗聴が行われると受信者側の測定結果の統計的な性質が変わる。したがって盗聴が検出されるといいう仕組みである。

*3 垂直方向に均一に磁場を印加すると磁気モーメントの正極と負極の受ける力が打ち消し合うため、磁気モーメント自体は力を受けないことに注意されたい。

*4 ただし、正確にはこの場合は粒子はスクリーンに吸収されてしまう。

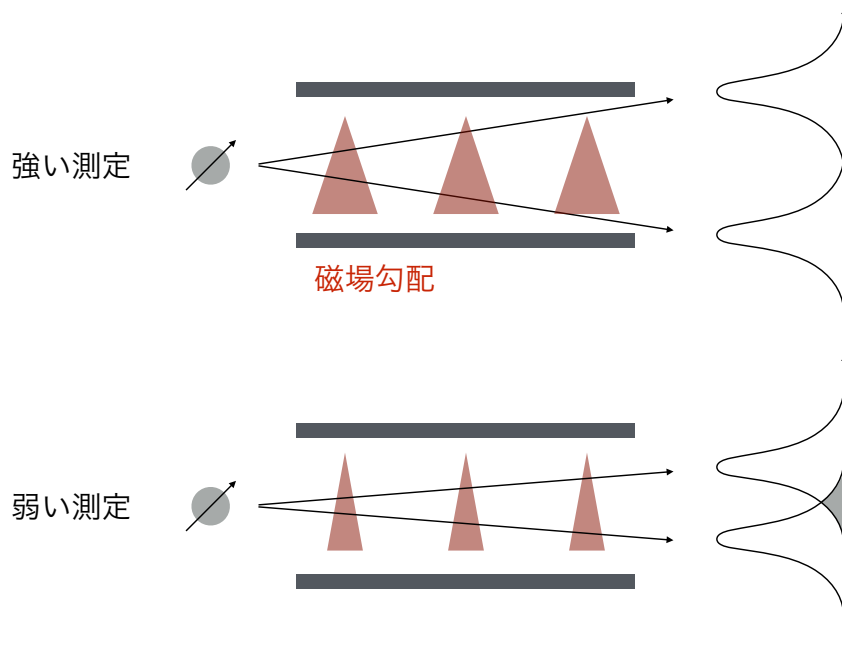


図 1.2 Stern-Gerlach の実験の概略図. (a) 不均一磁場を印加することでスピンの上下に応じて位置の波動関数を分離し、位置を測ることでスピンを測定する. (b) 磁場勾配を弱くすると位置の波動関数が完全には分離せず、スピンの測定が精確でなくなる.

一般の $n \in \mathbb{N}$ に対して n 状態保護問題を考えることも一考の余地はあるが、まずは初期状態が全く何か分からない場合について調べるべきである。これを 2 状態保護問題と対比して全状態保護問題と呼ぶことにする。この場合には我々は初期状態への知識を制御に利用できないので、明らかに状態保護はより困難となる。実際、Zhang *et al.* [22] は一般量子系の depolarizing 型ノイズに対して、事後制御のみによる状態保護は全く不可能であると示している。ここで depolarizing 型ノイズとは、量子状態を古典的に完全なランダム状態へと変化させるノイズである。一方で Korotkov and Keane [23] は事後制御だけでなく事前制御も行うことによって、2 準位系の amplitude damping 型ノイズから確率的な状態保護が可能であることを示した^{*5}。ここで amplitude damping 型ノイズとはエネルギー緩和過程を表すノイズである。Wang *et al.* [24] はこの制御を改良し、より良く状態を保護できる制御を提案した。

またこれらの理論的提案に対してその実験的実現もなされており、量子系に対する制御は十分に実験的実現が可能な段階まで来ているといえる。Brańczyk *et al.* [18] の与えた制御法は Gillett *et al.* [25] によって光学系で実現され、Korotkov, Keane [23] の与えた制御法も Jong-Chan Lee *et al.* [26] によって光学系で実現されている。

これらの先行研究を踏まえ、本論文では量子制御による全状態保護問題を議論する

^{*5} Korotkov and Keane [23] で提案された手法は、事後選択 (postselection) を含んでいる。すなわち彼らの制御法では制御の成功あるいは失敗を表す指標が存在し、失敗のときにはその結果は捨ててしまう。制御の成功および失敗は確率的事象であるため、此处ではこれを確率的な状態保護と呼んだ。

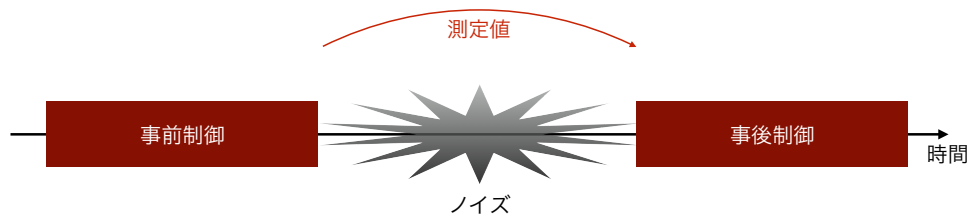


図 1.3 状態保護のための量子制御の概念図. ノイズ過程の前に行う測定・操作を事前制御, ノイズ過程の後に行う測定・操作を事後制御と呼ぶ.

(図 1.3). まず事後制御のみの場合を考えると, 2 準位系においては, どのようなノイズに対しても全状態を等しく保護するのは本質的に不可能であると示される. これは 2 状態保護問題とは異なる結果であり, 全状態保護の難しさおよび事前制御の必要性を示唆している. 次に, 事前事後制御による全状態保護問題をある 2 つの場合について議論する. 1 つは一般の量子系における depolarizing 型ノイズであり, もう 1 つは 2 準位系の単位的という性質を満たすノイズである. いずれのノイズも量子的な重ね合わせ状態を単なる古典的な確率混合へと変化させるようなノイズであり, 特に単位的ノイズは非常に広いクラスのノイズである. 我々はこれらの 2 つの場合に対して最適制御を導き, いずれも古典的な測定に基づいていることを示す. また 2 準位系における非単位的ノイズを取り扱っている先行研究と対比することで, ノイズの単位性が最適制御に与える影響を議論する.

1.3 量子系の状態を素早く遷移させる制御：時間最適制御

物理系の時間発展をなるべく短い時間で実現する制御は, 時間を最小化 (=最適化) するという意味で時間最適制御と呼ばれる. 時間最適制御の中で最も有名な最速降下曲線の問題 (the brachistochrone problem) は 1697 年に Johann Bernoulli によって提唱された (例えば文献 [27]). これは重力場中の質点が, 2 点間を可能な限り短い時間で移動するためにはどのような曲線上を移動すれば良いかという問題であった (図 1.4). 本論文で扱うのはこのような問題の量子的対応物と呼ぶべきもので, 所望のユニタリ発展を可能な限り短い時間で実現するためにはどのようにハミルトニアンを設計すれば良いかという問題である.

量子系での時間最適制御は基礎的な興味の対象でもあるが, 応用上も有用である. 時間最適制御は単純に時間的資源を節約するだけでなく, 短いデコヒーレンス時間以内での情報処理も可能にするからである. すなわち, 先に述べた状態保護制御とは違うアプローチで精確な制御を実現する 1 つの手段とも見なせる. これらの有用性から, 時間効率的な量子ゲートやサブルーチン [28, 29] 量子誤り訂正 [30], 量子系の冷却 [31, 32] の設計に関する研究が行われている. また, 時間最適制御はユニタリ発展に必要な時間の最小値を与えるものでもある. 量子計算の文脈ではこれは計算に必要な物理的な時間そのものを指しており, 計算の複

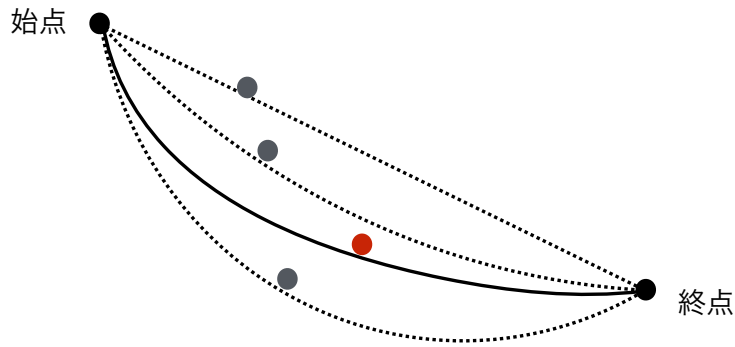


図 1.4 最速降下曲線の問題. 一様な重力場の下で粒子が始点から終点まで最短時間で移動できるような曲線を探す問題である.

雑性を表す指標として用いられている [33–35]*6. したがって量子系における時間最適制御の研究は量子計算の設計に役立ち, さらに量子計算の速さの根源を理解するための手段にもなると期待される.

本論文の後半では以上を踏まえ, 量子系の時間最適制御を議論する. そのために量子系での一般的な定式化を導出し, 特に自然な状況で現れる特異制御という制御法について詳しく議論する.

量子系での時間最適制御, あるいは時間効率的な制御については多くの研究が存在する. 孤立量子系の時間発展はその系のハミルトニアン $H(t)$ によって完全に規定されるので, 制御はこの時間依存ハミルトニアンの詳細を決めることによってなされる. Khaneja *et al.* [36, 37] および Zhang *et al.* [38] は Lie 群的手法に基づいて時間最適制御を議論した. 彼らは特定の操作が一瞬で実行できることを仮定していた. これは例えばスピン系において, スピン間相互作用が単一スピンへの磁場よりも十分小さい場合などである. これに対して量子最速降下曲線 (quantum brachistochrone; QB) [39–41] は量子系における時間最適制御を一般的に取り扱える理論である. QB は変分法に基づく定式化であり, 系のハミルトニアンが等式制約条件の下で自由に動かせる任意の状況に適用できる. 例えば, 磁場の大きさが固定されてその方向のみを操作できる場合である. Russell and Stepney [42, 44] および Brody and Meier [43] はハミルトニアンにドリフト場が存在する場合に着目し, 最も簡単な場合について幾何学的方法によって時間最適制御を導いた. ここでドリフト場とは, 固定された操作不可能な場を表している. その他にも, 2 準位系でのユニタリ変換のみに着目した研究はその応用の広さから多く存在する [45–50].

以上のように量子系での時間最適制御は多くの方法で研究がなされている. 特に QB はその一般性により多くの問題に適用可能であり, 量子系の時間最適制御の一般的特徴を抽出す

*6 量子計算の研究では, あるアルゴリズムの速さはその回路の深さによって表される. ここで深さとは, 予め定めた基本ゲートを 1 ステップとしたときに, 計算結果を得るまでに必要なステップ数を表している. これらの文献では, あるユニタリ変換を実現するのに必要な物理的な時間とそのユニタリ変換を近似する量子回路の深さとの間の関係が示されている. したがって量子系の時間最適制御は量子計算の速さを見積もる上で有用な道具となる可能性を秘めている.

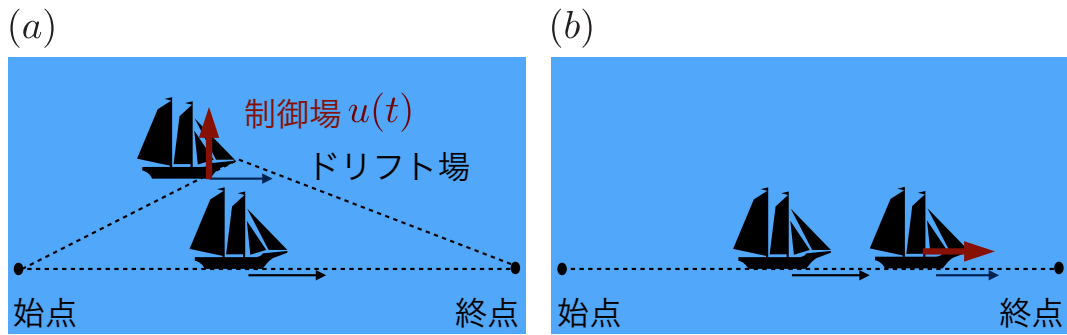


図 1.5 古典的な系におけるドリフト場の例. 水面上に浮かぶヨットは風（ドリフト場）によって図の黒い矢印の方向（図の右方向）に一定速度で進んでいるとする. ここでヨットは風による推進力とは別に, モーターなどによる推進力を持っていることを考える. このモーターによる推進力（制御場）はヨットを速度 $u(t)$ （ただし適当な正数 Ω に対して $|u(t)| \leq \Omega$ ）で (a) 垂直方向のみに, あるいは (b) 水平方向のみに駆動できるとする. ヨットが始点から終点までなるべく短い時間で到達するためにはそれぞれ (a) $u(t) = 0$, (b) $u(t) = \Omega$ とすべきである. ここで (b) の最適制御は制約条件 $|u(t)| \leq \Omega$ の等号を達成しており, (a) は達成していない. (b) の場合にはドリフト場と制御場が同じ方向に向いており, (a) の場合には違う方向を向いている. したがってこの例では, ドリフト場と制御場が同じ方向を向いているか否かによって不等式条件を等式条件に帰着して良いか否かが決定される.

るのに便利だと考えられる. この証左として, 例えば Brody and Meier [43] の結果は QB によって簡単に示せる (節 6.2.4 参照). また 2 準位系などの低次元系では, 具体的な問題に対する解析解も既に見つけられている [39,40]. さらに QB に基づく数値的手法 [51] や, 実験的な実現 [52] も行われ始めている.

しかしながら, QB は系のハミルトニアンに対する制約条件として不等式条件を扱えないという弱点を有している. 現実の物理系では実験装置の出力に上限が存在する場合など, 不等式制約条件は自然に考えられる. 出力する磁場の大きさが固定で, それより弱めてはいけないという QB の状況は明らかに不自然である. それでも特定の状況では, 制約条件が不等式で書かれていても最適制御はその等号を達成する, すなわち等式条件に置き換えてから時間最適制御を探しても問題はないことが知られている [51]. しかし, 特にハミルトニアンにドリフト場（操作不可能な場）が含まれているときには不等式条件をそのまま扱う必要がある. 図 1.5 では, そのような例を古典系で示した. 量子系でも, 文献 [53] は最適制御が不等式条件の等号を達成しない場合を示している. QB はそのような状況にそのまま適用できないので, 不等式条件を含むより一般的な時間最適制御理論を構築する必要がある.

本論文では, 不等式条件にも適用可能な一般の時間最適制御理論を定式化する. ただし QB の定式化を直接拡張するのではなく, QB を含む結果を得られる別の方法を取ることにする. それは Pontryagin の最大値原理 (maximum principle; MP) に基づく方法である. これは Euler による古典的な変分法とは異なり等式条件にも不等式条件にも適用可能な最適制御理論である. 実際, 最大値原理は量子系の時間最適制御の多くの研究に適用されてい

る [45, 46, 48–50, 53–56]. しかしながら, そこでは個々の量子制御の問題を古典系の実変数の制御問題へ変換してから最大値原理を適用する方法が取られている. 一方で我々は, 最大値原理を量子系の時間最適制御に対してそのまま適用することを考える. これにより時間最適量子制御の一般的な構造を議論でき, 個々の問題についてもそれをより直接的に解くための定式化が得られる.

ドリフト場が存在する量子系に対しては, 最大値原理による最適性の必要条件を自明に満たしてしまう特別なクラスの解が立ち現れる. これらは MP だけでは最適であるかを判定できず, 特異制御 (singular control) [50, 54] と呼ばれる. 我々は特異制御が最適となるための必要条件を得るために, 一般化 Legendre-Clebsch 条件 (Generalized Legendre-Clebsch 条件; GLC 条件) [57] を量子系へ適用する. そこで得られる条件は実際に特異制御を導く際に有用であるだけでなく, 技術的に定義された特異制御に対して, 物理的解釈を与える. それによると, 最適な特異制御は制御場を操作せずにドリフト場に身を任せるような制御となる傾向がある. また最後には, いくつかの例に我々の定式化を適用し, GLC 条件がどのように特異制御を決める, あるいは少なくともその形を制限するかを明らかにする.

1.4 本論文の構成

先に述べたように, 我々は量子系における 2 つの最適制御, 最適な状態保護と時間最適制御を取り扱う. 以下では本論文の構成を簡単に述べる.

第 2 章では, 既存研究に沿って量子力学の枠組みを再確認し, 量子系で原理的に起こりうる状態発展はどのようなものがあるか解説する. この章の役目は我々が用いる量子制御の道具を明らかにすることである. 特に孤立量子系の状態発展がユニタリ演算子で書けることは広く知られているが, 開放量子系の状態発展を一般に記述する方法や, 測定による量子状態の変化を一般に記述する方法はあまり知られていない. 我々は測定を伴わない状態変化 (量子操作) と測定を伴う状態変化 (量子測定) を区別し, それぞれを記述するための数学的道具を与える. これらはそれぞれ TPCP 写像と CP インストルメントという数学的対象によって記述される. これらがどのように物理的な状態変化に対応するかを解説し, 状態保護のための量子制御を取り扱う準備を整える.

第 3 章では, スピン $1/2$ 粒子や光子の偏光状態に代表される 2 準位系について, Bloch 表現という量子状態の幾何学的な表示を導入する. この章の目的は量子系のユニタリ変換や TPCP 写像という抽象的な概念を幾何学的に理解することである. 2 準位系の量子状態は Bloch 球と呼ばれる 3 次元球に対応し, ユニタリ変換はその回転に, TPCP 写像はその球の変形を表すことが示される.

第 4 章では事後制御 (ノイズ過程の後に行う制御) による 2 状態保護問題と全状態保護問題を議論する. まず重要な先行研究の 1 つである 2 準位系での 2 状態保護問題 [18, 19] を解説する. そこでは非自明な量子制御の最適性が示されるが, 一方の全状態保護問題では本質的に, どのような制御を用いても全量子状態を保護できない [58] ことが示される. そこで

第5章では、事前事後制御による全状態保護問題を取り扱う。事前事後制御の詳細な定式化の後、一般の量子系における depolarizing 型ノイズ、および2準位系の単位的という性質を満たすノイズに対して全状態保護問題をそれぞれ考える。そしてそれぞれのノイズに対して最適な事前事後制御を明らかにし [59]、結果として、最適制御における測定は量子的というよりもむしろ古典的なものであることを示す。これらの結果の証明に用いた一般的事実について解説した後に、先行研究との比較によってノイズの持つ単位性と最適制御との関係性について議論する。また最後に、状態保護についての他の研究との比較を簡潔に述べる。

第6章では、量子系での時間最適制御の一般論を議論する [60]。等式制約条件のみを扱える量子最速降下曲線 [39–41] について詳しく述べた後に、不等式条件にも適用可能な時間最適制御の一般論を定式化する。第7章ではこの定式化を用いて、量子系の時間最適制御の一般的構造を議論する。まず我々は、どのような場合に不等式条件が等式条件に帰着できるかを議論する。その中で、特異制御という特別なクラスの制御を考える必要が生じてくる。この制御は第6章で得られる最適性の必要条件を自明に満たしてしまう。ゆえに我々はその最適性を判別するために、一般化 Legendre-Clebsch 条件を導入する。最後に、具体例を通してそれらの条件がどのように働くかを確認する。

第8章では、本博士論文のまとめと結論を述べる。

第 2 章

量子制御の基礎理論

量子系の制御を目指すにあたっては、そもそも外場の印加や測定などに対して量子系がどのように変化するか理解しなくてはならない。孤立量子系のみを考察の対象とするのであれば、その時間発展が一般に Schrödinger 方程式によって記述されることは周知の事実であろう。しかし外界と相互作用する開放量子系の時間発展や、量子測定による状態変化の一般的記述については、広く知られているとは言い難い。本章ではそれらの記述を明確に与え、量子制御の基礎について概説する。なお本章の内容は量子情報理論の基礎として既に知られた事実である（例えば文献 [61–63] 参照）。

量子系の一般の状態変化を考察するにあたって、まずは Hilbert 空間を用いた量子力学の記述を確認することから始めるのが自然である。言うまでもなくこれは J. v. Neumann の教科書 [64] に端を発するものであり、量子力学の研究者にとって最も標準的な枠組である。この枠組は物理的対象を数学的対象に置き換える役割を担い、量子力学という理論の謂わば「公理」を与えることになる。我々はこの公理を出発点とし、量子力学の枠組みの下で起こり得る状態変化を明らかにする。本章の目的は原理的に可能な状態変化を数学的に特徴付けることに他ならないため、記述は少々数学的な性格を有する。

定式化の後には、量子系の一般の状態変化について議論する。量子系の状態変化は大きく 2 種類に分けられる。1 つは条件付きの状態変化で、もう 1 つは条件付きでない状態変化である。条件付きの状態変化は、量子系に対して測定（量子測定）を行う場合に自然に現れる。量子測定を行えば、我々は測定値とそのときの測定後状態を得る。測定後状態は測定値によって異なり、量子測定による状態変化は測定値によって条件付けられる。一方で、測定を行わなければ事情は異なる。また測定を行ったとしても観測者がその測定値の情報を捨てた場合には、その状態変化は条件付けられていないと見なすべきである。ここで測定値の情報を捨てるとは、具体的には測定値を忘れることや、測定結果を見ないことに対応する。

まず、我々は条件付きでない状態変化について議論する。これは典型的には孤立量子系の Schrödinger 方程式による時間発展や外界と相互作用する開放量子系の時間発展などを表す。これらの条件付きでない状態変化は、TPCP 写像（trace preserving completely

positive map [65] というクラスの写像によって記述される。TPCP 写像は抽象的な対象だが、実は外界と相互作用する開放量子系上のユニタリ発展と同一視できることが知られている。TPCP 写像は、明示的に外部の系を考慮することなく一般の物理系の時間発展を表す数学的道具である。

次に、条件付きの状態変化について議論する。これは典型的には量子測定を表す。条件付きの状態変化は、一般に CP インストルメント [66,67] と呼ばれる写像族によって記述される。これは、和が TPCP 写像となるような CP 写像 (completely positive map) の族 (集まり) である。CP インストルメントもやはり抽象的な対象だが、TPCP 写像と同様に物理的な測定モデル (間接測定モデル) との対応を持っている。間接測定モデルは注目系を測定器系なる外部系と相互作用させた後に、測定器系に対して射影測定を行うというモデルである。CP インストルメントは明示的に外部の測定器系を考慮することなく一般の測定過程を表すための数学的道具である。

2.1 量子力学の公理的取り扱い

本節では、Hilbert 空間を用いた非相対論的量子力学の数学的記述を与える。まず初めに Hilbert 空間についての基礎的な数学を確認し、Hilbert 空間上で量子力学を記述するための公理とも言える要請を述べる。そして後に重要な概念となる状態の混合について説明し、孤立量子系の時間発展であるユニタリ発展の書き方についても説明する。初めの小節 2.1.1 は重要な数学的道具をまとめたものであり、後に必要となったときに参照すればよい。

2.1.1 数学的基礎

後に述べるように、量子力学によって記述される 1 つの物理系は 1 つの Hilbert 空間に対応する。このとき Hilbert 空間の次元はその物理系の自由度に他ならない。本論文で取り扱うのはスピンや光子の偏光状態といった有限自由度の物理系であるので、断りの無い限り有限次元の Hilbert 空間を考える。なお一般に N 次元 Hilbert 空間は \mathbb{C}^N と同型であるため、我々は断りなくこれらを同一視する。

\mathcal{H} を $N (< \infty)$ 次元 Hilbert 空間とする。Hilbert 空間 \mathcal{H} の元は物理の慣例に従いケット記法 $|\psi\rangle$ により記し、2 つの元 $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ の内積は $\langle\phi|\psi\rangle$ と記す。 \mathcal{H} の完全正規直交基底 $\{|\phi_i\rangle\}_i$ とは、 \mathcal{H} 上のベクトルの族であって完全性条件 $\sum_i |\phi_i\rangle\langle e_i| = 1^{*1}$ 、および直交性条件 $\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}$ 、規格化条件 $\|\phi_i\| = 1$ を満たすものである。 \mathcal{H} 上の線形演算子全体を $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ とする。 $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ は $A = A^\dagger$ を満たすとき Hermite 演算子と呼び、 $AA^\dagger = A^\dagger A = 1$ を満たすときユニタリ演算子と呼び、 $A^2 = A$ を満たす Hermite 演算子を特に射影演算子と呼ぶ。Hermite 演算子 A は任意の $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ に対して $\langle\psi|A|\psi\rangle \geq 0$ を満たすとき A

*1 この式における 1 は単位演算子であり恒等写像 $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ を表す線形演算子である。本論文では実数の 1 も単位演算子もどちらも 1 により書き表す。

を正演算子といい、 $A \geq 0$ と記す。また、 $A - B \geq 0$ を $A \geq B$ と略記する。線形写像 $A : \mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ は、任意の $A \geq 0$ に対して $A(A) \geq 0$ を満たすとき正値性を持つといい、 A を正値写像と呼ぶ。

任意の Hermite 演算子 A はスペクトル分解が可能である。つまり、 A には固有値 $\{a_i\}_i$ と対応する固有空間への射影演算子 $\{E_i\}_i$ が存在して

$$A = \sum_i a_i E_i \quad (2.1)$$

と書ける。

\mathcal{H} の完全正規直交基底 $\{|\phi_i\rangle\}_i$ を 1 つとって $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ 上の \mathbb{C} への線形汎関数 Tr を

$$\text{Tr } A := \sum_i \langle \phi_i | A | \phi_i \rangle \quad (2.2)$$

と定義し、これを A のトレースと呼ぶ。ここでトレースが基底の取り方に依存しないことは、任意の基底が満たす完全性条件によって保証される。

線形演算子 A, B に対して Hilbert-Schmidt 内積を

$$\langle A, B \rangle_{\text{HS}} := \text{Tr} \{A^\dagger B\} \quad (2.3)$$

で定義する。線形演算子の集合 $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ はこの内積によってまた内積空間、さらに言えば Hilbert 空間を成し、線形写像 $A : \mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ はこの Hilbert 空間に作用する線形演算子であるとみなせる。つまり $A \in \mathcal{L}(\mathcal{L}(\mathcal{H}))$ である。その随伴 A^* は ($\mathcal{L}(\mathcal{H})$ 上の \dagger と同様に) 任意の $X, Y \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ について

$$\langle \mathcal{A}(X), Y \rangle_{\text{HS}} = \langle X, \mathcal{A}^*(Y) \rangle_{\text{HS}} \quad (2.4)$$

を満たすものとして定義される。また Hilbert-Schmidt 内積についてのトレースも、

$$\text{Tr}_{\text{HS}} \mathcal{A} := \sum_i \langle V_i, \mathcal{A}(V_i) \rangle_{\text{HS}} \quad (2.5)$$

と定義される。ただし V_i は $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ の完全正規直交基底である。例えば $\dim \mathcal{H} = 2$ のとき $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$ として良いので、 $\sigma^0 := 1$ (2 行 2 列単位行列) をおよび Pauli 行列

$$\sigma^1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

は $\{\sigma^\mu / \sqrt{2}\}_{\mu=0}^3$ とすれば $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ の正規直交基底を成す。したがってこのとき式 (2.5) は次のように書ける：すなわち、

$$\text{Tr}_{\text{HS}} \mathcal{A} = \frac{1}{2} \sum_{\mu=0}^3 \text{Tr} [\sigma^\mu \mathcal{A}(\sigma^\mu)] \quad (2.7)$$

である。また、 $\dim \mathcal{H} = 3$ のときには付録 A にて定義する Gell-Mann 行列 $\{\lambda_i\}_{i=1}^8$ と $\lambda_0 := 1$ (3 行 3 列単位行列) によって $\{\sigma^i/\sqrt{2}\}_{i=0}^8$ が $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ の正規直交基底をなす。

2 つの Hilbert 空間 \mathcal{H}, \mathcal{K} の完全正規直交基底をそれぞれ $\{|\psi_i\rangle\}_i, \{|\phi_i\rangle\}_i$ とするとき、テンソル積空間 $\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$ は $(\dim \mathcal{H}) \times (\dim \mathcal{K})$ 次元を持つ線形空間で、テンソル積 $\otimes : \mathcal{H} \times \mathcal{K} \rightarrow \mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$ は $\{|\phi_i\rangle \otimes |\xi_j\rangle\}_{i,j}$ が $\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$ の完全正規直交基底となるような双線形写像*2である。したがって任意の $|f\rangle = \sum_i f_i |\psi_i\rangle \in \mathcal{H}, |g\rangle = \sum_j g_j |\phi_j\rangle \in \mathcal{K}$ に対して

$$|f\rangle \otimes |g\rangle = \sum_{ij} f_i g_j |\psi_i\rangle \otimes |\phi_j\rangle \quad (2.8)$$

となる。このテンソル積の定義は見かけ上基底の取り方に依存しているが、本質的に一意に定まることが知られている (テンソル積の普遍性 [68])。以下では、明示する必要がない場合には $|\phi\rangle \otimes |\xi\rangle$ の \otimes を略記して単に $|\phi\rangle |\xi\rangle$ と書く。線形演算子 $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}), B \in \mathcal{L}(\mathcal{K})$ に対するテンソル積 $A \otimes B \in \mathcal{L}(\mathcal{H} \otimes \mathcal{K})$ は、任意の $|\psi\rangle \in \mathcal{H}, |\phi\rangle \in \mathcal{K}$ に対して

$$(A \otimes B)(|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle) = (A|\psi\rangle) \otimes (B|\phi\rangle) \quad (2.9)$$

を満たすものとして定義される。

交換演算子 S とは $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$ 上の線形演算子で、任意の $|\psi\rangle, |\phi\rangle$ に対して

$$S|\psi\rangle |\phi\rangle = |\phi\rangle |\psi\rangle \quad (2.10)$$

なる作用を持つことによって定義される。また S は \mathcal{H} 上の任意の完全正規直交基底 $\{|\phi_i\rangle\}_i$ を用いて $S = \sum_{i,j} |\phi_i\rangle \langle \phi_j| \otimes |\phi_j\rangle \langle \phi_i|$ と書き表せる。これを用いれば、任意の $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_1), B \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_2)$ に対して、

$$\text{Tr}[(A \otimes B)S] = \sum_{i,j} \langle \phi_i \phi_j | (A \otimes B) | \phi_j \phi_i \rangle = \sum_{i,j} \langle \phi_i | A | \phi_j \rangle \langle \phi_j | B | \phi_i \rangle = \text{Tr}[AB] \quad (2.11)$$

が成り立つ。

任意の $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H} \otimes \mathcal{K})$ と $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ に対して

$$\text{Tr}[A(B \otimes 1)] = \text{Tr}[(\text{Tr}_{\mathcal{K}} A)B] \quad (2.12)$$

を満たすものとして \mathcal{K} についての部分トレース $\text{Tr}_{\mathcal{K}} : \mathcal{L}(\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ を定義する。これは \mathcal{K} の完全正規直交基底 $\{|\phi_i\rangle\}_i$ を 1 つ取れば、明示的に

$$\text{Tr}_{\mathcal{K}} A = \sum_i (1 \otimes \langle \phi_i |) A (1 \otimes |\phi_i \rangle) \quad (2.13)$$

*2 ここで $f : \mathcal{H} \times \mathcal{K} \rightarrow \mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$ が双線形写像であるとは、 f が \mathcal{H}, \mathcal{K} の引数それぞれに対して線形であるということである。つまり任意の $|\psi\rangle, |\psi'\rangle \in \mathcal{H}, |\phi\rangle, |\phi'\rangle \in \mathcal{K}$ と $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ に対して、

$$f(\alpha|\psi\rangle + \beta|\psi'\rangle, |\phi\rangle) = \alpha f(|\psi\rangle, |\phi\rangle) + \beta f(|\psi'\rangle, |\phi\rangle),$$

$$f(|\psi\rangle, \alpha|\phi\rangle + \beta|\phi'\rangle) = \alpha f(|\psi\rangle, |\phi\rangle) + \beta f(|\psi\rangle, |\phi'\rangle)$$

である。

とも書ける. 式 (2.13) の左辺は \mathcal{H} 上の線形演算子であることに注意されたい.

2.1.2 量子力学の要請

数学を用いて物理学を記述する際には, 物理的概念を数学的対象に対応させる規則が必要である. 量子力学の記述に最低限必要な物理的概念とは, 物理量, 状態, 時間発展, 測定, 合成系である. Hilbert 空間上でこれらの規則を明確な形で述べたものが, 以下の 4 つの要請*3となる.

要請 1 (状態と物理量). 量子系 S にはある Hilbert 空間 \mathcal{H}_S が付随する. 系の状態は \mathcal{H}_S 上の密度演算子 (Hermitic 演算子 ρ で $\text{Tr } \rho = 1$, $\rho \geq 0$ をみたすもの) によって表され, 系の物理量は \mathcal{H}_S 上の Hermitic 演算子 O によって表される.

要請 2 (Born の確率規則). 原理的には理想測定と呼ばれる測定が行える. 物理量 O に対する理想測定とは, O のスペクトル分解を $O = \sum_i \lambda_i E_i$ としたとき, 測定値が $\{\lambda_i\}_i$ のいずれかであり, λ_i を得る確率 $\text{Pr}\{O = \lambda_i | \rho\}$ が

$$\text{Pr}\{O = \lambda_i | \rho\} = \text{Tr}[\rho E_i] \quad (2.14)$$

で表されるような測定である. このとき物理量 O の測定値の期待値は

$$\langle O \rangle = \text{Tr}[\rho O] \quad (2.15)$$

となる.

要請 3 (Schrödinger 発展). 量子系 \mathcal{H} が時間 $[t_1, t_2]$ の間孤立していたとする. このときあるユニタリ演算子 U が存在して, 系の状態 ρ の時間発展は

$$\rho \longmapsto U\rho U^\dagger \quad (2.16)$$

と記述される. ここで U は時間 $t := t_2 - t_1$ には依存しても ρ には依存しない. 系のハミルトニアン H が与えられたときには, このユニタリ演算子 U は $U(0) = 1$ の下で次の Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = HU(t) \quad (2.17)$$

によって与えられる. ただし \hbar は換算 Planck 定数 $\hbar := 1.054571817 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ であり, 以下では $\hbar = 1$ とする自然単位系を取る. すなわち Schrödinger 方程式としては

$$i \frac{\partial}{\partial t} U(t) = HU(t) \quad (2.18)$$

を考える.

*3 これは初めに von Neumann [64] によって定式化されたものである. 例えば小澤 [67] によって公理としてまとめられたのが分かりやすい.

要請 4 (合成系). 2つの独立な自由度を持った量子系 S, S' を同時に取り扱うとき, これらを合わせて1つの系と考えられる. これを合成系 $S + S'$ といい, それぞれの対応する Hilbert 空間を $\mathcal{H}_S, \mathcal{H}_{S'}$ としたときそのテンソル積空間 $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_{S'}$ によって表される. S 系の物理量 A と S' 系の物理量 B はそれぞれ $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_{S'}$ 上の演算子 $A \otimes 1, 1 \otimes B$ と同一視される.

要請 1 は状態と物理量と呼ばれる概念がそれぞれ Hilbert 空間上の何者に対応するかを述べている. ここで状態とは古典論に於いては特別に扱われなかった概念である. 古典系では系の同一性は測定される物理量の値によって規定されていた. すなわち, いかなる物理量に関しても同じ値が観測される様な2つの系は同一の系とみなされ, 逆に異なるものがあれば違う系とみなされる. これは物理量の測定が理想的には誤差なく確定的に行われるという古典論の特性によるものである. しかし一方で量子論の場合, 物理量の測定値は確率的な性格を有している. 同一の系に対して何度も測定を繰り返したとしても得られる値にはばらつきがあり, 確定しているのは物理量の値の確率分布のみである. したがって系の同一性は物理量の測定値の組ではなく, その測定値が従う確率分布の組によって規定される. 標準的な Hilbert 空間を用いた量子力学の定式化では, 物理量の測定値が従う確率分布そのものを考える代わりに, 密度演算子と呼ばれる演算子によって系の状態を同定する. この密度演算子と物理量の測定値, およびその確率分布を結びつけるのが, 次の要請 2 である. これら2つの要請によって, ある時刻における1つの量子系を数学的に記述できるようになる. そして要請 3 は系の時間発展が従うべき法則を記述したものであり, これにより初めて量子系の時間的な推移を記述できるようになる. 要請 4 は2つの独立な自由度を持った系をまとめて取り扱うための方法を与えるものである. これは一見地味な要請ではあるが, 例えばスピンを持った粒子の空間的自由度とスピンの自由度をまとめて取り扱うこと, 2粒子のスピンをまとめて取り扱うことなどはこの要請によって初めて可能となる.

$\mathcal{L}(\mathcal{H})$ の部分集合 $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ を密度演算子全ての集合とする. 状態 ρ は, \mathcal{H} 上の単位ベクトル $|\psi\rangle$ を用いて $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ と書けるとき純粋状態という. このとき我々は密度演算子 ρ の代わりに $|\psi\rangle$ によって状態を表現することができ, これを状態ベクトルという. 一方で純粋でない状態 ρ は混合状態という. 純粋状態と混合状態の物理的な意味については, 次の小節で詳しく議論する. 任意の $\varphi \in \mathbb{R}$ に対してベクトル $|\psi\rangle$ と $e^{i\varphi}|\psi\rangle$ は同じ状態 $|\psi\rangle\langle\psi|$ を与えるので, 状態ベクトルにかかる絶対値1の複素係数は位相因子と呼ばれ無視する. 実際, 異なる位相因子を持つ状態は同一の密度演算子を与える.

合成系 $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_{S'}$ の状態が Ω であるときの系 \mathcal{H}_S の状態は, 系 $\mathcal{H}_{S'}$ について部分トレースを取った縮約状態

$$\rho_S = \text{Tr}_{S'} \Omega \quad (2.19)$$

によって記述される. これは部分系 \mathcal{H}_S 上の任意の物理量 O の測定に対して, Ω と ρ_S が同じ確率分布を与えることによって保証されている. 実際, 部分系 \mathcal{H}_S の任意の演算子 A に

対して

$$\langle A \rangle = \text{Tr} [\Omega(A \otimes 1)] = \text{Tr} [\text{Tr}_{S'} [\Omega] A] = \text{Tr} [\rho_S A] \quad (2.20)$$

が成り立つ。

2.1.3 状態の混合

ここでは一般の状態変化を議論する際に非常に重要となる、状態の混合という概念について解説する。

状態を表す密度演算子 ρ は定義より Hermite 演算子である。ゆえにスペクトル分解が可能であり、Hilbert 空間 \mathcal{H} の適当な正規直交基底 $\{|\phi_i\rangle\}_i$ と適当な確率 p_i ($p_i \geq 0, \sum_i p_i = 1$ を満たすとする) を用いて

$$\rho = \sum_i p_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \quad (2.21)$$

と書ける。非零の p_i がただ 1 つである場合には ρ は純粋状態であり、そうでない場合には ρ は混合状態である。 ρ が混合状態である場合でも各 $|\phi_i\rangle\langle\phi_i|$ はそれぞれ純粋状態を表しているので、式 (2.21) は混合状態を純粋状態の凸結合として表現したものとみなせる。この様な「状態の凸結合」に対して物理的意味を与えるのが、次の混合法則である。

混合法則 有限個の密度演算子の組 $\{\rho_i\}_{i=1}^M$ 、および確率分布 $\{p_i\}_{i=1}^M$ ($\sum_i p_i = 1, p_i \geq 0$) に対して、各 ρ_i が確率 p_i で注目系の状態として生起するような状況を考える。このとき、系の状態は (どの ρ_i が実際の系の状態と知らない観測者にとって) $\{(p_i, \rho_i)\}_i$ の確率混合であるといい、 $\rho = \sum_i p_i \rho_i$ なる密度演算子によって記述される。

この混合法則が成り立っていることを確認する。系の状態が $\{(p_i, \rho_i)\}_i$ の確率混合であるときの物理量 O の期待値は、各状態 ρ_i に対する物理量 O の期待値 $\langle O \rangle_i$ を確率 p_i で平均することによって得られる。すなわち

$$\langle O \rangle = \sum_i p_i \langle O \rangle_i = \sum_i p_i \text{Tr} [\rho_i O] \quad (2.22)$$

である。一方で系の状態が $\rho = \sum_i p_i \rho_i$ であると考えたときの物理量 O の期待値は、

$$\langle O \rangle = \text{Tr} \left[\left(\sum_i p_i \rho_i \right) O \right] \quad (2.23)$$

である。Tr の線形性より、式 (2.22) と (2.23) は等しい。以上より $\{(p_i, \rho_i)\}_i$ の確率混合によって表現される状態と、密度演算子 $\rho = \sum_i p_i \rho_i$ によって表現される状態は同一である。両者はどのような物理量の測定によっても区別できない。混合法則を踏まえて式 (2.21) を見直せば、混合状態は常に純粋状態の確率混合によって表現されるとみなせる。したがって混合状態は、どの状態が用意されているかが正確にわからないという観測者の知識の欠如を表現しており、古典的な不確定さを含んでいる。ここで古典的な不確定さとは、量子論で不

可避的に現れる不確定さではないという意味である。例えば統計力学のカノニカル分布を表す Gibbs 状態は、系の状態がどのエネルギー固有状態にあるかを確率的に表現している。実際 Gibbs 状態は系の温度が T のとき、

$$\rho_G = \sum_i \frac{e^{-E_i/k_\beta T}}{Z} |E_i\rangle\langle E_i| \quad (2.24)$$

と書かれる。ただし $E_i, |E_i\rangle$ は系のエネルギー固有値およびその固有状態、 Z は分配関数、 k_β はボルツマン因子である。Gibbs 状態は、各エネルギー固有状態 $|E_i\rangle$ を確率 $e^{-E_i/k_\beta T}/Z$ で混合した状態である。

最後に注意として、混合状態の確率混合による表現は一意的でないことを述べておく。最も簡単な例はスピン 1/2 粒子の状態 $\rho = 1/2$ である。これは σ^3 の固有状態 $|0\rangle, |1\rangle$ と σ^1 の固有状態 $|+\rangle, |-\rangle$ (詳しくは節 3.1 参照) を用いて

$$\frac{1}{2} = \frac{1}{2}(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|) = \frac{1}{2}(|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -|) \quad (2.25)$$

と分解できる*4。これは「 z スピン ± 1 の状態が等確率で用意されている」と解釈することも、「 x スピン ± 1 の状態が等確率で用意されている」と解釈することも可能である。この種の不定性は、一般には次のように特徴付けられる。

定理 (例えば文献 [61], p103, Theorem 2.6 を参照)。2 つの状態ベクトルの組 $\{|\psi_i\rangle\}_i, \{|\varphi_j\rangle\}_j$ と確率分布 $\{p_i\}_i, \{q_j\}_j$ について、 $(p_i, |\psi_i\rangle)$ の確率混合と $(q_j, |\varphi_j\rangle)$ の確率混合が同一の状態を与える、つまり

$$\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \sum_j q_j |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j| \quad (2.26)$$

と書けるための必要十分条件は、あるユニタリ行列 u_{ij} が存在して

$$|\tilde{\psi}_i\rangle = \sum_j u_{ij} |\tilde{\varphi}_j\rangle \quad (2.27)$$

を満たすことである。ただし、 $|\tilde{\psi}_i\rangle := \sqrt{p_i} |\psi_i\rangle, |\tilde{\varphi}_i\rangle := \sqrt{q_i} |\varphi_i\rangle$ である。

*4 さらに言えば、 $1/2$ は任意の正規直交基底 $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^2$ に対して同じように $1/2 = \frac{1}{2}(|\phi_1\rangle\langle\phi_1| + |\phi_2\rangle\langle\phi_2|)$ と書ける。

この完全な証明は省略するが、十分性は

$$\begin{aligned}
\sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| &= \sum_i |\tilde{\psi}_i\rangle\langle\tilde{\psi}_i| \\
&= \sum_i \left(\sum_j u_{ij} |\tilde{\varphi}_j\rangle \right) \left(\sum_k u_{ik}^* \langle\tilde{\varphi}_k| \right) \\
&= \sum_{ijk} u_{ij} u_{ik}^* |\tilde{\varphi}_j\rangle\langle\tilde{\varphi}_k| \\
&= \sum_j |\tilde{\varphi}_j\rangle\langle\tilde{\varphi}_j| \quad \left(\because \sum_i u_{ij} u_{ik}^* = \delta_{jk} \right) \\
&= \sum_j q_j |\varphi_j\rangle\langle\varphi_j| \tag{2.28}
\end{aligned}$$

と確かめられる

2.1.4 ユニタリ発展と位相因子

要請 3 で述べたように、孤立量子系の時間発展はユニタリ変換によって書き表される。\$N\$ 次元 Hilbert 空間は (適当に基底を定めて) \$\mathbb{C}^N\$ と同一視できるので、その上のユニタリ演算子も結局ユニタリ群 \$U(N)\$ と同一視できる。ここでユニタリ群 \$U(N)\$ とは \$N\$ 行 \$N\$ 列のユニタリ行列全体の群である。

しかし量子状態の時間発展を表す上ではユニタリ群 \$U(N)\$ 全体を考える必要はなく、特殊ユニタリ群 \$SU(N)\$ を考えるだけでも十分である。ただし特殊ユニタリ群 \$SU(N)\$ とは、\$\det U = 1\$ を満たす \$N\$ 行 \$N\$ 列のユニタリ行列 \$U\$ 全体の集合であり、ユニタリ群 \$U(N)\$ の部分群を成している。既に述べたように量子状態 \$|\psi\rangle\$ とそれに適当な位相因子 \$e^{i\theta}\$ (ここで \$\theta \in [0, 2\pi)\$) をかけた状態 \$e^{i\theta} |\psi\rangle\$ とは同じ物理的状態を表しているので、同様にあるユニタリ変換 \$U\$ とそれに適当な位相因子を掛けた \$e^{i\theta} U\$ とは同じ物理的な時間発展を表している。特殊ユニタリ群 \$SU(N)\$ はそのような冗長性がある程度取り除かれており、\$U \in SU(N)\$ に対して \$e^{i\theta} U \in SU(N)\$ となるためには \$\theta = n\pi/N\$ (\$n = 0, 1, \dots, N-1\$) である必要がある。

時間発展として \$SU(N)\$ のみを考えるのは、ハミルトニアンとしてトレース 0 の Hermite 演算子を考えることと同じである。なぜなら Schrödinger 方程式の下でユニタリ変換が \$SU(N)\$ に入り続けるためには、\$\text{Tr } H = 0\$ が必要だからである。実際、時刻 \$t\$ から \$t + \delta t\$ までの時間変化 \$U(\delta t)\$ は \$\delta t\$ の 1 次までの近似の下で、

$$U(\delta t) = e^{-i\delta t H(t)} \tag{2.29}$$

と書けるが、ここで

$$\det [U(\delta t)] = e^{-i\delta t \text{Tr } [H(t)]} \tag{2.30}$$

であるからである。\$\det [U(\delta t)] = 1\$ であるためには \$\text{Tr } [H(t)] = 0\$ である必要がある。

特殊ユニタリ群 $SU(n)$ のリー代数 $\mathfrak{su}(N)$ を

$$SU(n) = \exp(-i\mathfrak{su}(N)) \quad (2.31)$$

と定義する^{*5} と、 $\mathfrak{su}(N)$ は N 行 N 列のトレース 0 のエルミート行列全体の集合となる。したがってハミルトニアンを $\mathfrak{su}(N)$ の元とみなすことで、系の時間発展は $SU(N)$ で記述できる。

2.2 条件付きでない状態変化の一般的記述

本節では量子系の、条件付きでない状態変化について概説する。これは典型的には量子系の自然な時間発展である。

2.2.1 合成系上のユニタリ発展

要請 3 で述べたように、孤立量子系の状態変化は一般にユニタリ発展である。それでは孤立していない量子系、すなわち開放量子系の時間発展はどのように書けるだろうか。これを考えるには注目系、及びそれと相互作用している全系（環境系）から成る合成系（要請 4）が孤立系しているとみなせばよい。このとき合成系の状態発展は要請 3 によってユニタリ発展で書けるので、間接的に注目系の時間発展を記述できる。

今述べたことをより精密に書き下そう。注目系を \mathcal{H}_S 、環境系 \mathcal{H}_E とし、その合成系 $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$ は孤立しているとする。初め系 $\mathcal{H}_S, \mathcal{H}_E$ がそれぞれ孤立しているとすれば、系 $\mathcal{H}_S, \mathcal{H}_E$ の初期状態はそれぞれ単独の密度演算子 ρ, σ で書ける。したがって合成系上の時間発展は適当なユニタリ演算子 $U \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E)$ によって

$$\rho \otimes \sigma \longrightarrow U(\rho \otimes \sigma)U^\dagger \quad (2.32)$$

と書ける。注目系の状態は合成系の状態に対して部分トレースを取ることによって与えられるので、注目系の状態変化は

$$\rho \longrightarrow \text{Tr}_E [U(\rho \otimes \sigma)U^\dagger] \quad (2.33)$$

である。これは明らかに、 \mathcal{H}_S 上のユニタリ発展では書けない。

こうして我々は孤立量子系の時間発展であるユニタリ発展 (2.16) の他に、開放量子系の時間発展 (2.33) を書く方法を心得た。実は量子系での条件付きでない状態変化はこれらで尽くされている。しかし注目系の時間発展だけに興味があるのに常に適当な外部系を取らなければならないという点で、式 (2.33) による記述には不満が残る。またこの記述がどれだけの一般性をもっているのかは、以上の議論だけでは分かりにくい。したがって以下では環境系を明示的に考えずに、注目系の一般の時間発展を議論する。

^{*5} 数学の文脈では通常 $-i$ までを含めた歪エルミート行列の集合をリー代数とみなすが、ここでは物理の慣習にならって、また簡便のためにこのような定義を取ることにする。

2.2.2 TPCP 写像

系 \mathcal{H} 上の状態変化を写像 $\mathcal{E} : \mathcal{S}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{S}(\mathcal{H})$ を用いて表し、この \mathcal{E} が満たすべき性質を議論する。例えばユニタリ発展 (2.16) の場合には、 \mathcal{E} による状態変化は状態 ρ を用いて $\mathcal{E}(\rho) = U\rho U^\dagger$ と書ける。

まず物理的な要請から \mathcal{E} は状態の混合法則と無矛盾でなければならないため、 \mathcal{E} はアフィン性を持つべきである。すなわち、任意の状態 ρ, σ に対して

$$\mathcal{E}(p\rho + (1-p)\sigma) = p\mathcal{E}(\rho) + (1-p)\mathcal{E}(\sigma), \quad \forall p \in [0, 1] \quad (2.34)$$

である。これは次の図式に於ける 2 つの経路が等価であることを意味している：

$$\begin{array}{ccc} & & p\rho + (1-p)\sigma \xrightarrow{\text{状態発展}} \mathcal{E}(p\rho + (1-p)\sigma) \\ \left. \begin{array}{l} \{\rho, \sigma\} \\ \text{確率混合} \end{array} \right\} & \xrightarrow{\quad} & \\ & & \{\mathcal{E}(\rho), \mathcal{E}(\sigma)\} \xrightarrow{\text{確率混合}} p\mathcal{E}(\rho) + (1-p)\mathcal{E}(\sigma). \\ & \text{状態発展} & \end{array}$$

上の経路は状態 ρ, σ をそれぞれ確率 $p, 1-p$ で混合してから状態発展 \mathcal{E} を作用させることを表しており、下の経路は状態 ρ, σ にそれぞれ状態発展 \mathcal{E} を作用させてから確率 $p, 1-p$ で混合することを表している。

ここで、 $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ 上のアフィン写像は $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ 上の線形写像へと一意的に定義域を拡大できる (付録 B 参照)。これにより、以下では \mathcal{E} を $\mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ なる線形写像として議論を進めることとする。

物理的な要請から、当然 \mathcal{E} は状態を状態に写さなければならない。さらに適当な合成系上への自明な拡大 $\mathcal{E} \otimes \text{id}_n$ も状態を状態に写さなければならない。ただし id_n は n 次元 Hilbert 空間 $\mathcal{L}(\mathbb{C}^n)$ 上の恒等写像である。これは、 $\mathcal{E} \otimes \text{id}_n$ の正值性と \mathcal{E} のトレース保存性 ($\text{Tr } O = \text{Tr } \mathcal{E}(O)$) を要求すれば十分である。ここで $\mathcal{E} \otimes \text{id}_n$ が正であれば \mathcal{E} も正だが、その逆は一般に正しくない。独立な系の合成が常に矛盾なく可能であることを保証するためには、 $\mathcal{E} \otimes \text{id}_n$ の正值性が必要となる。

以上をまとめると、物理的な時間発展は全て TPCP 写像 (trace preserving completely positive map) によって記述されることが分かる。TPCP 写像とは、写像 $\mathcal{E} : \mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ で次の 3 つの性質を満たすものである。

- (i) 線形性：任意の $A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ と $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ に対して、 $\mathcal{E}(\alpha A + \beta B) = \alpha\mathcal{E}(A) + \beta\mathcal{E}(B)$.
- (ii) 完全正值性：任意の自然数 n に対して、 $\mathcal{E} \otimes \text{id}_n$ が正值性を持つ。
- (iii) トレース保存性：任意の $O \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ に対して、 $\text{Tr } O = \text{Tr } \mathcal{E}(O)$.

さらに既に述べたように、TPCP 写像で記述される状態変化は実際に原理的には実現できることが知られている。これはすなわち、任意の TPCP 写像 \mathcal{E} に対して適当な外部系 \mathcal{K} ,

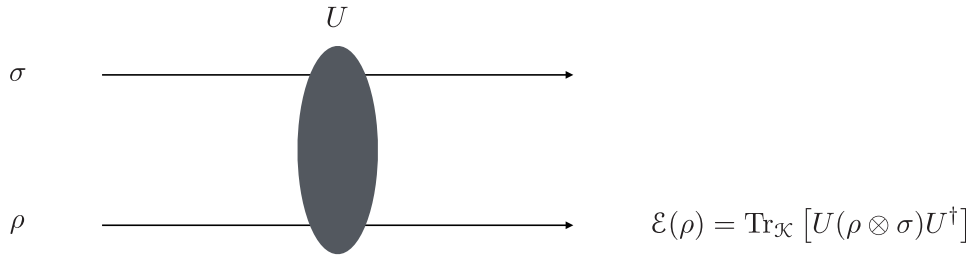


図 2.1 TPCP 写像 \mathcal{E} による時間発展の合成系上でのユニタリ発展と射影測定による表現. 上段の矢印は測定器系を, 下段の矢印は注目系を表している. ユニタリ発展後に注目系だけを見ることで $\mathcal{E}(\rho)$ を得る.

その上の状態 σ , $\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$ 上のユニタリ演算子 U が存在して,

$$\mathcal{E}(\rho) = \text{Tr}_{\mathcal{K}} [U(\rho \otimes \sigma)U^\dagger] \quad (2.35)$$

と書けることが知られている (図 2.1 参照). これを TPCP 写像 \mathcal{E} の Stinespring 表現 [69] という. 式 (2.35) は, 任意の TPCP 写像が適当な外部系との相互作用によって実現できるということの意味している.

2.3 条件付きの状態変化の一般的記述

本節では量子系の, 条件付きの状態変化について概説する. これは典型的には量子測定である.

2.3.1 間接測定モデル

要請 2 で述べたように, 少なくとも実行可能な量子測定は物理量の理想測定である. 理想測定の 1 例で, 測定後状態の記述まで可能である測定としては射影測定が良く知られている. スペクトル分解が $O = \sum_i \lambda_i E_i$ と書かれるような物理量 O に対する射影測定は射影演算子の組 $\{E_\lambda\}_\lambda$ によって指定される測定である. 状態 ρ に対して測定値 λ_i を得る確率とその測定後状態はそれぞれ

$$\Pr \{O = \lambda_i | \rho\} = \text{Tr} [\rho E_i], \quad \rho \mapsto \frac{E_i \rho E_i}{\text{Tr} [\rho E_i]} \quad (2.36)$$

で与えられる. 状態 ρ が純粋状態 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ であるときには特に,

$$\Pr \{O = \lambda_i | |\psi\rangle\} = \langle\psi| E_i |\psi\rangle, \quad |\psi\rangle \mapsto \frac{E_i |\psi\rangle}{\|E_i |\psi\rangle\|} \quad (2.37)$$

と書ける.

既に述べたように, 射影測定は理想測定というクラスの測定の中ですら一般の記述法ではない. 例えば光検出器を用いた光子数 $N = \sum_n |n\rangle\langle n|$ の測定では, 光子を吸収してそのエ

エネルギーから光子数を決定する。したがってこの測定に於ける状態変化は、 $|n\rangle$ を n 光子数状態としたとき常に

$$|n\rangle \mapsto |0\rangle \quad (2.38)$$

となり、射影測定と異なる。またそもそも理想測定というクラスの測定は、誤差を全く含まないという意味で一般の測定とは言えない。

一般の量子測定を考えるにあたっては、前節と同じように（射影測定で記述できないような）量子測定が物理的にどのような手続きを踏んで実行されるかを考えるべきである。例として、たった今取り上げた光子数測定を取り上げる。特に一般的な光電子増倍管を用いた光子数測定を考える。その大枠の原理は光電効果を用いて光子を電子へと変換し、それを増幅した後に電流量を測定することによって間接的に光子数を測定するというものである。したがってこの測定では、被測定系である電磁場を外部系である電子と相互作用させ、電子を測定することで間接的に電磁場の測定を行っていることになる。

今述べたような測定法を一般に、精密に書き下そう。注目系を \mathcal{H}_S 、外部系である測定器系を \mathcal{H}_M とし、その合成系 $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_M$ は孤立しているとする。初め系 \mathcal{H}_S , \mathcal{H}_M が孤立しているとすれば、系 \mathcal{H}_S , \mathcal{H}_M の初期状態はそれぞれ単独の密度演算子 ρ , σ で書ける。合成系のユニタリ発展の後に、測定器系に対して物理量 $O = \sum_i \lambda_i E_i$ の射影測定を行う。時間発展を適当なユニタリ演算子 $U \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_M)$ を用いて表すとき、測定値として λ_i が得られる確率は

$$\Pr \{O = \lambda_i | \rho\} = \text{Tr} [U(\rho \otimes \sigma)U^\dagger(1 \otimes E_i)] \quad (2.39)$$

であり、そのときの状態変化は

$$\rho \otimes \sigma \longrightarrow \frac{(1 \otimes E_i)U(\rho \otimes \sigma)U^\dagger(1 \otimes E_i)}{\text{Tr} [U(\rho \otimes \sigma)U^\dagger(1 \otimes E_i)]} \quad (2.40)$$

で与えられる。特に注目系の状態変化は

$$\rho \longrightarrow \frac{\text{Tr}_M [(1 \otimes E_i)U(\rho \otimes \sigma)U^\dagger(1 \otimes E_i)]}{\text{Tr} [U(\rho \otimes \sigma)U^\dagger(1 \otimes E_i)]} \quad (2.41)$$

である。このような測定モデルを、（射影測定を用いた）間接測定モデルと呼ぶことにする。これは射影測定が実行可能であると仮定すれば、原理的には実現可能な測定である。

こうして我々は射影測定 (2.36) と、射影測定を用いた間接測定 (2.39), (2.41) を得た。実は一般の量子測定は、後に述べるように間接測定モデルによって書けることが知られている。しかし前節と同じように、測定値の情報や注目系の状態変化のみに興味があるのに、常に適切な測定器系を取らなければならないという点で間接測定モデルによる記述 (2.39), (2.41) には不満が残る。また、この記述の一般性も以上の議論だけからでは分からない。したがって以下では、測定器系を明示的に考えずに注目系の一般の量子測定を議論する。なお本節ではその出力値が物理量の値とは限らない、一般の抽象的測定を考える。しかし測定値の集合はやはり有限集合であるとし、 Ω と記すことにする。

2.3.2 正演算子測度 (POVM)

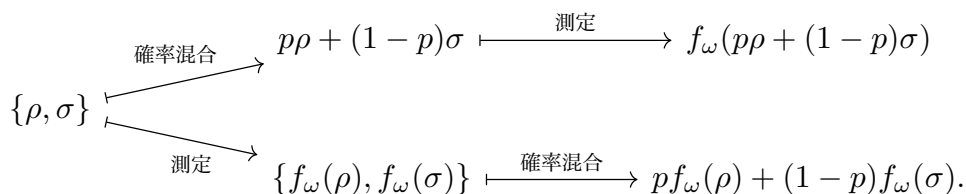
我々の目的は量子測定の2つの出力、すなわち測定値の確率分布と測定後の量子状態の完全な記述である。そのための準備として、まずは測定値の確率分布のみを記述することを考える。

被測定系 \mathcal{H} の状態 ρ に対して、その値を Ω に持つ確率変数 x の測定を考える。測定値として $\omega \in \Omega$ が得られる確率を $f_\omega(\rho) := \Pr\{x = \omega | \rho\}$ と書き、この写像 $f_\omega : \mathcal{S}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathbb{R}$ が満たすべき数学的性質を議論する。

まず物理的な要請から、 f_ω は状態の混合法則と無矛盾でなければならないため、 f_ω はアフィン性を持つべきである。すなわち、任意の状態 ρ, σ に対して

$$f_\omega(p\rho + (1-p)\sigma) = pf_\omega(\rho) + (1-p)f_\omega(\sigma), \quad \forall p \in [0, 1] \quad (2.42)$$

である。これは次の図式に於ける2つの経路が等価であることを意味している：



上の経路は状態 ρ, σ をそれぞれ確率 $p, 1-p$ で混合してから測定することを表しており、下の経路は状態 ρ, σ に対してまず測定を行って、その結果得られる確率分布を確率 $p, 1-p$ で混ぜ合わせることを表している。

既に述べたように $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ 上のアフィン写像は $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ 上の線形写像へと一意的に定義域を拡大できる (付録 B 参照)。したがって f_ω は $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ 上の線形実汎関数であるとして良い。Riesz の定理によれば内積空間の上で定義された任意の線形汎関数は適当な元との内積によって表示できることが知られているので、ある $M_\omega \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ を用いて

$$f_\omega(\rho) = \text{Tr}[\rho M_\omega] \quad (2.43)$$

と書ける。次に f_ω が満たすべき条件は、 f_ω の像が確率となるということである。したがって $f_\omega(\rho)$ はすべて正であり $f_\omega(\rho)$ の ω に関する和が1となる。

以上より、 f_ω は POVM (positive operator valued measure) $\{M_\omega\}_{\omega \in \Omega}$ によって式 (2.43) のように記述できる。POVM とは、演算子の組 $\{M_\omega\}_{\omega \in \Omega}$ で、次の性質を満たすものである。

- (i) 正值性：任意の $\omega \in \Omega$ に対して $M_\omega \geq 0$.
- (ii) 規格化性： $\sum_{\omega \in \Omega} M_\omega = 1$.

特に M_ω が全て射影演算子であるときには、PVM (projection valued measure) と呼ばれる。PVM は射影測定 (2.36) の出力分布を与える。

2.3.3 CP インストゥルメント

以上の議論によって測定値の確率分布は POVM によって記述できることを示したので、次に測定後状態を記述する方法を議論する。

被測定系 \mathcal{H} の状態 ρ に対して、その値を Ω に持つ確率変数 x の測定を考える。測定値 $\omega \in \Omega$ が得られたときの測定後状態を ρ_ω として、写像 $\mathcal{J}_\omega(\rho) := \Pr\{x = \omega|\rho\} \rho_\omega$ を定義する。したがって $\mathcal{J}_\omega(\rho)$ は（規格化されていない）測定後状態を表す。

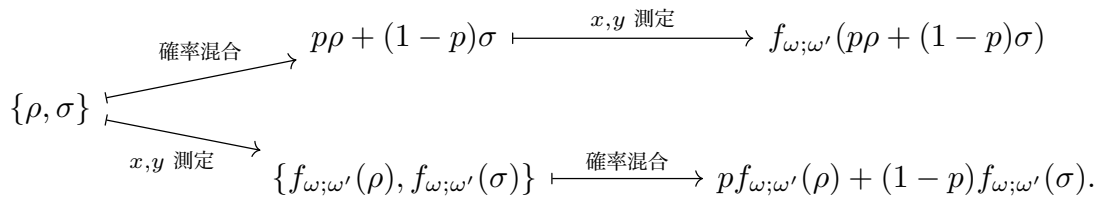
まず物理的な要請から \mathcal{J}_ω は状態の混合法則と無矛盾でなければならぬため、 \mathcal{J}_ω はアフィン性を持つべきである。すなわち任意の状態 ρ, σ に対して

$$\mathcal{J}_\omega(p\rho + (1-p)\sigma) = p\mathcal{J}_\omega(\rho) + (1-p)\mathcal{J}_\omega(\sigma), \quad \forall p \in [0, 1] \quad (2.44)$$

である。これは、測定を連続で行って得られる結合確率分布（同時確率分布）にアフィン性を要求することと等価である。この事情を説明するため、状態 ρ に対して $\{\mathcal{J}_\omega\}_{\omega \in \Omega}$ で記述される測定を行った後に POVM $\{M_{\omega'}\}_{\omega' \in \Omega'}$ で記述される測定（この測定値を確率変数 y で表す）を行うことを考える。測定値として $x = \omega, y = \omega'$ が得られる結合確率分布を $f_{\omega, \omega'}(\rho)$ と書くことにすると、トレースの線形性により

$$\begin{aligned} f_{\omega, \omega'}(\rho) &= \Pr\{y = \omega'|\rho_\omega\} \Pr\{x = \omega|\rho\} \\ &= \text{Tr}[\rho_\omega M_{\omega'}] \Pr\{x = \omega|\rho\} \\ &= \text{Tr}[\mathcal{J}_\omega(\rho) M_{\omega'}] \end{aligned} \quad (2.45)$$

である。したがって式 (2.44) は結合確率分布 $f_{\omega, \omega'}(\rho)$ に対してアフィン性を要求する式と分かる。この意味で、(2.44) は次の図式に於ける 2 つの経路が等価であることを意味している：



上の経路は状態 ρ, σ をそれぞれ確率 $p, 1-p$ で混合してから x, y の連続した測定を行うことを表しており、下の経路は状態 ρ, σ に対してまず x, y の測定を連続で行って、その結果得られる確率分布を確率 $p, 1-p$ で混ぜ合わせることを表している。

既に述べたように $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ 上のアフィン写像は $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ 上の線形写像へと一意的に定義域を拡大できる（付録 B 参照）ので、 \mathcal{J}_ω の定義域を拡張して $\mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ とする。

写像 \mathcal{J}_ω を用いると出力分布と測定後状態はそれぞれ

$$\Pr\{x = \omega|\rho\} = \text{Tr} \mathcal{J}_\omega(\rho), \quad \rho \mapsto \frac{\mathcal{J}_\omega(\rho)}{\text{Tr} \mathcal{J}_\omega(\rho)} \quad (2.46)$$

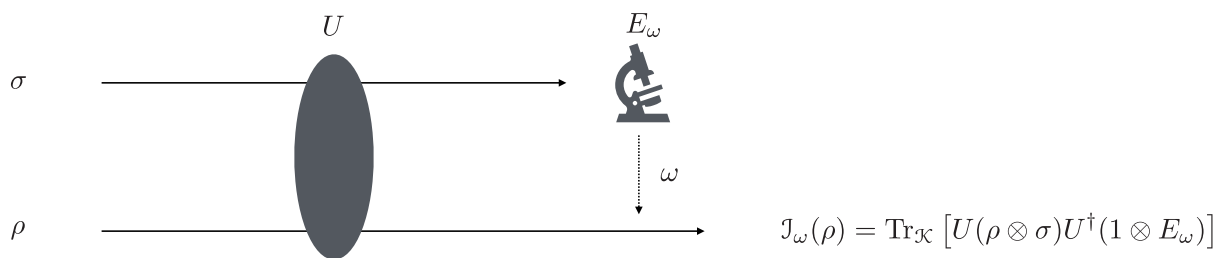


図 2.2 CP インストゥルメント J_ω による測定過程の，合成系上でのユニタリ発展と射影測定による表現. 上段の矢印は測定器系を，下段の矢印は注目系を表している. ユニタリ発展後に測定器系を射影測定してその結果を知ることで $J_\omega(\rho)$ を得る.

と書けるので，物理的な要請から J_ω が満たすべき残りの条件は $\text{Tr } J_\omega(\rho)$ が測定値 ω を伴う確率となること，および拡大された $J_\omega \otimes \text{id}_n$ が状態を（規格化されていない）状態に写すことである. したがって， $\sum_\omega J_\omega$ がトレースを保存し， $J_\omega \otimes \text{id}_n$ が正值性を持つことが要求される.

以上より，物理的な測定は全て CP インストゥルメント (completely positive instrument) によって記述される. CP インストゥルメントとは，写像 $\mathcal{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ の組 $\{J_\omega\}_\omega$ で次の 3 つの性質を満たすものである.

- (i) 線形性：任意の $A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ と $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, $\omega \in \Omega$ に対して， $J_\omega(\alpha A + \beta B) = \alpha J_\omega(A) + \beta J_\omega(B)$ である.
- (ii) 完全正值性：任意の自然数 n と $\omega \in \Omega$ に対して， $J_\omega \otimes \text{id}_n$ が正值性を持つ.
- (iii) トレース保存性：任意の $O \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ に対して， $\text{Tr } O = \text{Tr } \sum_\omega J_\omega(O)$ である.

さらに CP インストゥルメントで記述される測定過程は，測定器への射影測定によって実現可能であることが知られている. これはすなわち，任意の CP インストゥルメント $\{J_\omega\}_{\omega \in \Omega}$ に対して適当な外部系 \mathcal{K} ，その上の状態 σ ， $\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$ 上のユニタリ演算子 U ， \mathcal{K} 上の射影演算子 E_ω が存在して，

$$J_\omega(\rho) = \text{Tr}_{\mathcal{K}} [U(\rho \otimes \sigma)U^\dagger(1 \otimes E_\omega)], \quad \forall \rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H}) \quad (2.47)$$

と書けることが知られている (図 2.2 参照). 式 (2.47) は任意の CP インストゥルメントが外部系との相互作用およびその外部系への射影測定によって実現できることを表している. この外部系 \mathcal{K} は \mathcal{H} を測定するための測定器とみなせるため，測定器系と呼ばれる.

以上により，原理的に実現可能な条件付きの状態変化は CP インストゥルメントと完全に対応することが示された.

2.3.4 POVM と CP インストゥルメントの対応関係

最後に，CP インストゥルメントと POVM の関係について解説する.

測定の完全な記述を与える数学的道具は CP インストゥルメントであるので，ある測定の

CP インストルメントが与えられれば，対応する POVM は当然一意に定まる．実際 CP インストルメント $\{\mathcal{J}_\omega\}_\omega$ によって記述される測定で測定値 ω を得る確率は

$$\mathrm{Tr} \mathcal{J}_\omega(\rho) = \mathrm{Tr} [\mathcal{J}_\omega^*(1)\rho] \quad (2.48)$$

と書ける．ただし 1 は恒等演算子であり， $\{\mathcal{J}_\omega^*(1)\}_\omega$ が POVM の定義を満たす演算子族であることは容易に示される．

一方で POVM は出力分布についての情報しか与えないから，ある測定の POVM が与えられても対応する CP インストルメントは一意に定まらない．この不定性を特徴づけているのが次の定理である．

定理 (Hayashi [62, 定理 7.2]). POVM $\{M_\omega\}_\omega$ で記述される測定の CP インストルメント $\{\mathcal{J}_\omega\}_\omega$ は，ある TPCP 写像の組 $\{\mathcal{K}_\omega\}$ を用いて

$$\mathcal{J}_\omega(\rho) = \mathcal{K}_\omega\left(\sqrt{M_\omega}\rho\sqrt{M_\omega}\right), \quad \forall \rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H}) \quad (2.49)$$

と書ける．

この定理の主張は直感的には，

CP インストルメントの測定過程 = POVM の測定 + TPCP 写像の時間発展

ということである．実際，式 (2.49) は \mathcal{J}_ω が写像 $\mathcal{M}_\omega(\rho) := \sqrt{M_\omega}\rho\sqrt{M_\omega}$ と TPCP 写像 \mathcal{K}_ω の合成写像であることを示している．ここで $\{\mathcal{M}_\omega\}$ は CP インストルメントの定義を満たしており，POVM M_ω を用いた最も単純な CP インストルメントの構成である．

2.4 TPCP 写像と CP インストルメントの関係についての注意

これまで TPCP 写像は典型的にはユニタリ発展などの自然な時間発展を表し，CP インストルメントは典型的には測定による状態変化を表すとしてきた*6．しかし，これらの本質的な違いは条件付きの状態変化であるか否かであった．したがってここでは誤解を避けるために，

- (i) 量子測定を含まない条件付きの状態変化 (CP インストルメント)
- (ii) 量子測定を含むが条件付きでない状態変化 (TPCP 写像)

の例を確認しておく．

まず，(i) について：量子測定を行っていないなくても状態変化が条件付きであればそれは CP インストルメントによって記述される．例えば量子状態 ρ に対して，コインを投げて表なら

*6 なお，厳密に言えば TPCP 写像は CP インストルメントの一部だとみなせる．TPCP 写像 \mathcal{E} は 1 つの写像からなる写像族 $\{\mathcal{E}\}$ とみなせるからである．

ユニタリ変換を作用させ、裏なら何もしないという状況を考える。コインが表、裏だったときの量子状態をそれぞれ ρ_H, ρ_T と区別すると、それらへの状態変化 $\rho \mapsto \rho_H$ と $\rho \mapsto \rho_T$ は CP インストルメントによって記述される。これは条件付きの状態変化だが、明らかに量子測定を記述しているわけではない。このように CP インストルメントの全てが意味のある量子測定を表しているわけではない。

次に (ii) について：量子測定を行っていてもその測定結果を見なかった場合、その平均の量子状態は TPCP 写像によって記述される。例えば初めに用意された量子状態 ρ に対して、CP インストルメント $\{J_1, J_2\}$ によって記述されるような量子測定を行うことを考える。このとき最終的には、確率 $\text{Tr}[J_1(\rho)]$ で $J_1(\rho)$ が、確率 $\text{Tr}[J_2(\rho)]$ で $J_2(\rho)$ が得られる。測定値 1, 2 によって得られる状態を区別している場合にはこれらの条件付きの状態変化は CP インストルメントによって記述されるが、測定値による条件付けをしない場合には得られる状態は $J_1(\rho), J_2(\rho)$ の確率混合

$$\mathcal{C}_1 \circ J_1(\rho) + \mathcal{C}_2 \circ J_2(\rho) \tag{2.50}$$

となる。このように、量子測定を含む状態変化が必ず CP インストルメントによって記述できるというわけではない。

以上により TPCP 写像も量子測定を含みうるし、CP インストルメントも必ずしも量子測定を含むわけではないことが分かる。これらが量子測定を含むか否かの判断は、その具体的な表現を確かめることによって初めて可能となる（例えば節 4.2 参照）。

第 3 章

2 準位系の幾何学的表示

スピン 1/2 粒子や光子の偏光は、いずれも 2 つの状態（上向きスピンと下向きスピン、縦偏光と横偏光）から構成されている。したがってその一般の状態は 2 次元 Hilbert 空間によって記述される。このような物理系を 2 準位系と呼ぶ^{*1}。量子情報処理では 2 準位系の状態は qubit と呼ばれ、情報処理の単位として広く用いられている。なお qubit という名称は、古典情報の最小単位 bit に由来している。2 準位系は最も単純な量子系であるため、量子力学の主要概念を理解する絶好の舞台である。

我々は 2 準位系について、ノイズや量子制御による状態変化を幾何学的に解説する。2 準位系の量子状態は Bloch 球と呼ばれる 3 次元球上の点によって表現できるので、量子状態およびその変化（量子操作、量子測定）を幾何学的に表示できる。この幾何的な表示により量子状態の変化という抽象的な概念を直感的に解説できるようになるだけでなく、実行列に対する線形代数の知識を借用することで計算に役立つ公式も得られる。

3.1 Bloch 表現

2 準位系はスピンや光子の偏光など様々な存在するが、我々は物理系の詳細によらない性質を調べたい。そこで qubit の表記法にならって、2 つの準位を 0 状態と 1 状態 ($|0\rangle, |1\rangle$) と呼称する。状態 $|0\rangle$ ($|1\rangle$) はスピンの上向き（下向き）状態でも良いし、光子の水平偏光（垂直偏光）状態でも良い。この取扱いにより、具体的な物理系によらずに議論を進められる。ただし、必要があればその都度具体例を示す。2 準位系の状態は 2 次元複素ベクトルで表されるので、行列やベクトルを表記する際には

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{3.1}$$

のように基底ベクトルを設定する。

^{*1} 本来であれば「準位」とはエネルギー準位のことを指し示すが、ここでは実際にエネルギー準位であるかとは無関係に、2 つの独立した状態からなる量子系を 2 準位系と呼ぶことにする。

3.1.1 Pauli 行列と Bloch 表示

Pauli 行列 $\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3$ の定義は

$$\sigma^1 := \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^2 := \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^3 := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

であった。これらはそれぞれ固有値 ± 1 を持ち、特に σ^3 は $|0\rangle, |1\rangle$ に対して対角的となっている。 σ^1, σ^2 の固有状態を固有値 ± 1 に対応して $|\pm\rangle, |\pm i\rangle$ と書くことにすると、これは

$$|\pm\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}, \quad |\pm i\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm i|1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

と書ける。

演算子 σ^0 を単位行列とすると、これと Pauli 演算子をまとめた族 $\{\sigma^\mu/\sqrt{2}\}_{0 \leq \mu \leq 3}$ は 2×2 Hermite 行列全体の集合の完全正規直交基底となっている。これはすなわち、任意の 2×2 Hermite 行列 R を $\{\sigma^\mu/\sqrt{2}\}_{0 \leq \mu \leq 3}$ によって一意に展開できるということである。実数ベクトル (x^0, x^1, x^2, x^3) を用いれば、

$$R = \frac{1}{2} \sum_{\mu=0}^3 x^\mu \sigma^\mu = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} x^0 + x^3 & x^1 - ix^2 \\ x^1 + ix^2 & x^0 - x^3 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

と書ける。

式 (3.4) の表現を 2 準位系の量子状態 ρ に適用しよう。まず密度演算子は $\text{Tr } \rho = 1$ を満たすので、 $x^0 = 1$ を得る。次に $\rho \geq 0$ なので、

$$\rho \geq 0 \iff \left(\text{Tr } \rho = 1 \geq 0 \wedge \det \rho = \frac{1}{4}(1 - |\mathbf{x}|^2) \geq 0 \right) \iff (1 - |\mathbf{x}|^2) \geq 0 \quad (3.5)$$

より $|\mathbf{x}| \leq 1$ を得る*2。ただしここで $\mathbf{x} = (x^1, x^2, x^3)$ である。したがって量子状態 ρ は

$$\rho = \frac{1}{2} \left(1 + \sum_{\mu=0}^3 x^\mu \sigma^\mu \right) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + x^3 & x^1 - ix^2 \\ x^1 + ix^2 & 1 - x^3 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

と書ける。ただし $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ は長さ 1 以下のベクトルである。この \mathbf{x} は Bloch ベクトルと呼ばれ、それが属する 3 次元空間中の単位球を Bloch 球と呼ぶ。Bloch ベクトルを用いた量子状態の記述が Bloch 表現 (図 3.1 参照) である。

ρ が純粋状態となるための必要十分条件は $\text{Tr } \rho^2 = 1$ であった (式 (2.21) 参照)。 ρ の Bloch 表現 (3.6) を用いると $\text{Tr } \rho^2 = (1 + \mathbf{x}^2)/2$ なので、 $\text{Tr } \rho^2 = 1 \iff \mathbf{x}^2 = 1$ である。し

*2 なおこの式は、次のようにして示される。一般に 2×2 Hermite 行列 A の固有値を λ_1, λ_2 としたとき、 $\det A = \lambda_1 \lambda_2$, $\text{Tr } A = \lambda_1 + \lambda_2$ である。 $A \geq 0$ であるための必要十分条件は $\lambda_1, \lambda_2 \geq 0$ であるから、この必要十分条件は $\lambda_1 + \lambda_2 \geq 0$ かつ $\lambda_1 \lambda_2 \geq 0$ である。

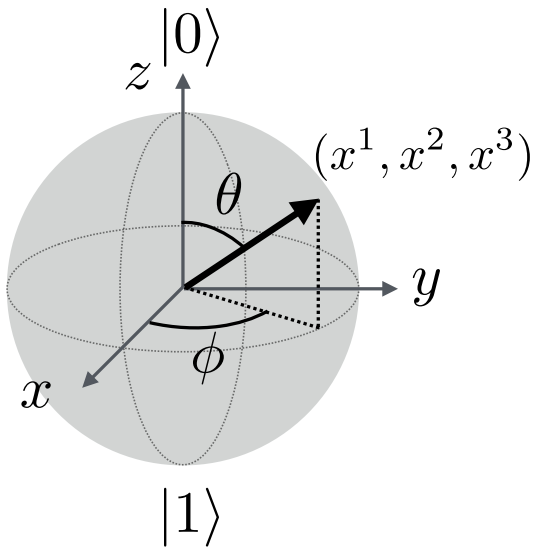


図 3.1 状態の幾何学的対応. 2 準位系の任意の状態は単位球の表面または内部の点 (x^1, x^2, x^3) に対応する. 特に純粋状態については (3.7) のように (θ, ϕ) によって表される.

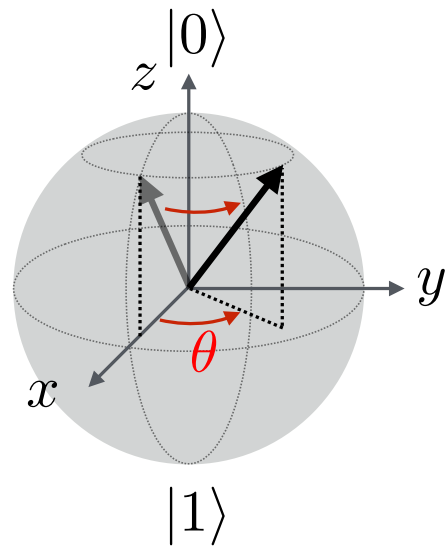


図 3.2 ユニタリ変換の幾何学的対応. ユニタリ演算子 $Z_\theta = e^{i\frac{\theta}{2}\sigma^3}$ を用いた $\rho \mapsto Z_\theta \rho Z_\theta$ なるユニタリ変換は, Bloch ベクトルに対しては z 軸回りの θ 回転となる.

たがって Bloch 球の表面の点は純粋状態, 内部の点は混合状態にそれぞれ対応する. 表面上の任意の点 (x^1, x^2, x^3) に対応する純粋状態 $|\psi\rangle$ は,

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &= \frac{1+z}{2} |0\rangle + \left(\frac{x}{\sqrt{1-z^2}} + i \frac{y}{\sqrt{1-z^2}} \right) \frac{1-z}{2} |1\rangle \\
 &= \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

と記述できる. ただし $(x^1, x^2, x^3) = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ は極座標表示であり, $\theta \in [0, \pi]$, $\phi \in [0, 2\pi]$ である.

なお, Bloch ベクトルの第 j 成分は物理量 σ^j の期待値となっている*3. すなわち,

$$\langle \sigma^j \rangle = \text{Tr} [\rho \sigma^j] = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 x^i \text{Tr} [\sigma^i \sigma^j] = \frac{1}{2} \sum_i 2x^i \delta_{ij} = x^j \tag{3.8}$$

である. ゆえに Bloch ベクトル \mathbf{x} は, 2 準位系の状態をスピンの状態とみなしたときにそのスピンのどの方向を向いているかを表している.

3.1.2 ユニタリ変換

状態 ρ に対する任意のユニタリ変換 $\rho \mapsto U\rho U^\dagger$ は, Bloch ベクトルに対しては回転 $\mathbf{r} \mapsto R\mathbf{r}$ で表現される. 逆に Bloch ベクトルへの任意の回転 R も, 状態へのユニタリ変

*3 本来ならばスピンを表す $S_j := \hbar\sigma^j/2$ を物理量と呼ぶ方が自然だが, ここでは係数は本質的に重要でないために省いている.

換によって表される。数学的には、これは SU(2) (2次元特殊ユニタリ群) の随伴表現が SO(3) (3次元特殊直交群) に全射準同型だというよく知られた事実に他ならない。これは $\rho' = U\rho U^\dagger$, ρ の Bloch ベクトルを \mathbf{r} , ρ' の Bloch ベクトルを \mathbf{r}' としたときに $\rho \mapsto \rho'$ の変換が線形であって $\|\rho\| = \|\rho'\|$ を満たすことから確認できる。例えば次の3つのユニタリ演算子

$$X_\theta := e^{i\frac{\theta}{2}\sigma^1}, \quad Y_\theta := e^{i\frac{\theta}{2}\sigma^2}, \quad Z_\theta := e^{i\frac{\theta}{2}\sigma^3} \quad (3.9)$$

に対しては、それぞれ x, y, z 軸回りの θ 回転を表す直交行列 R_x, R_y, R_z が対応する (図 3.2 参照)。

例として Z_θ の微小変換を考えてみると、 σ^j は

$$\sigma^j \mapsto (1 + i\delta\theta\sigma^3/2)\sigma^j(1 - i\delta\theta\sigma^3/2) = \sigma^j + i\frac{\delta\theta}{2}[\sigma^3, \sigma^j] = \sigma^j - \delta\theta\varepsilon_{3jk}\sigma^k \quad (3.10)$$

と変換される。したがって Bloch ベクトルによる ρ の表現 (3.6) は

$$\begin{pmatrix} x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} x^1 - \delta\theta x^2 \\ x^2 + \delta\theta x^1 \\ x^3 \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

と写されることが分かる。これは明らかに z 軸回りの $\delta\theta$ ($\ll 1$) 回転である。

任意の SO(3) の元は3軸の回転の組み合わせで表せるので、任意の SU(2) の元 U も適当な $\alpha, \beta, \gamma \in [0, 2\pi)$ を用いて

$$U = X_\alpha Y_\beta Z_\gamma \quad (3.12)$$

と表せる。ここで α, β, γ は Euler 角に対応するものである。

3.2 TPCP 写像の Bloch 表現

本節では2準位系に於ける TPCP 写像の幾何学的対応を解説する。TPCP 写像とは測定を伴わない量子状態の変化を一般に表す数学的道具であった。すなわち時間的に量子状態が $\rho \mapsto \rho'$ と変化するとき $\rho' = \mathcal{E}(\rho)$ と書けるような \mathcal{E} が TPCP 写像であった。ユニタリ変換は Bloch ベクトルへの回転によって表現されたが、TPCP 写像は Bloch ベクトルへのアフィン変換に対応する。

3.2.1 トレース保存写像とアフィン変換

まずは TPCP 性を忘れて、量子状態間の線形写像を一般に考える。 \mathcal{A} は演算子を演算子に写す線形写像で、Hermiticity を保つとする。任意の 2×2 Hermiticity 行列は Pauli 行列を用いれば式 (3.4) のように実数 x^μ ($0 \leq \mu \leq 3$) によって表現できるので、 \mathcal{A} による変換も

$$\mathcal{A}\left(\sum_{\mu=0}^3 x^\mu \sigma^\mu\right) = \sum_{\mu=0}^3 x'^\mu \sigma^\mu \quad (3.13)$$

によって4次元ベクトルの線形変換 ($x^\mu \mapsto x'^\mu$) として書ける。したがって A による変換は、 4×4 行列 A を用いて

$$\begin{pmatrix} x'^0 \\ \mathbf{x}' \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} x^0 \\ \mathbf{x} \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

と表せる。ただし、 $\mathbf{x} := (x^1, x^2, x^3)$, $\mathbf{x}' := (x'^1, x'^2, x'^3)$ である。行列の作用によって書けることから、この写像 $A \mapsto A$ が準同型であることも容易に確かめられる。

ここで、 A に対して TP 性 ($\text{Tr } A(R) = \text{Tr } R$) を課す。TP 性は $x^0 = x'^0$ なので、これを満たす A は一般に

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \mathbf{s} & E \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

と書ける。ただし \mathbf{s} は3次元ベクトル $\mathbf{s} := (s_1, s_2, s_3)$, E は 3×3 行列であり、 A を用いると

$$s_k = \frac{1}{2} \text{Tr} [\sigma^k A(\sigma^0)], \quad E_{ij} = \frac{1}{2} \text{Tr} [\sigma^i A(\sigma^j)] \quad (3.16)$$

である。以上より、トレースを保つ線形写像 (TP 写像) A は組 (\mathbf{s}, E) と一対一対応する。TP 写像 A の Bloch ベクトルに対する作用は

$$\begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{x}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \mathbf{s} & E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{x} \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

なので、書き換えれば

$$\mathbf{x}' = E\mathbf{x} + \mathbf{s} \quad (3.18)$$

である。これは Bloch ベクトル \mathbf{x} に対するアフィン変換^{*4}を表している。

3.2.2 アフィン変換の分解

アフィン変換は一般に回転、拡大縮小、せん断、平行移動、あるいはそれらの組み合わせによって生じる変換を表している。実際、一般のアフィン変換はこれらの基本的変換の合成写像として表せる。以下ではこれについて見る。行列 A で表されるアフィン変換をそのように分解するためには、その部分行列 E に対して特異値分解 [70] を適用すればよい。特異値分解を用いると、行列 E は適当な 3×3 特殊直交行列 R, \tilde{R} および対角行列 $D := \text{diag}(d_1, d_2, d_3)$ を用いて

$$E = R D \tilde{R} \quad (3.19)$$

^{*4} アフィン変換とは、線形変換と平行移動の組み合わせによって表される変換である。 E が線形変換を表し、 \mathbf{s} が平行移動を表している。

と書ける*5. 新しくベクトル $\mathbf{t} = (t_1, t_2, t_3) := R^T \mathbf{s}$ を定義すれば, (\mathbf{s}, E) による変換 (3.17) は

$$\begin{pmatrix} 1 \\ x'^1 \\ x'^2 \\ x'^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ R \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \end{pmatrix} & & & \\ & R \begin{pmatrix} d_1 & & \\ & d_2 & \\ & & d_3 \end{pmatrix} & & \\ & & \tilde{R} & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

と表示できる. これは 3 次元ベクトルで表現すれば

$$\mathbf{x}' = R(D\tilde{R}\mathbf{x} + \mathbf{t}) \quad (3.21)$$

なので, 変換 $\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x}'$ は次の 3 つの変換を順番に作用させたものとみなせる:

- (i) 回転行列 \tilde{R} による回転
- (ii) 対角行列 D による拡大・縮小・せん断変換と \mathbf{t} による平行移動
- (iii) 回転行列 R による回転

したがって, 元の TPCP 写像 A も (i)~(iii) の各変換 (に対応する変換) の結合として書ける. すなわち,

$$A(\rho) = U\tilde{A}(\tilde{U}\rho\tilde{U}^\dagger)U^\dagger \quad (3.22)$$

である. ただし U, \tilde{U} はユニタリ変換, \tilde{A} は TPCP 写像である. ユニタリ変換 \tilde{U}, U は上の (i), (iii) に, TPCP 写像 \tilde{A} は (ii) にそれぞれ対応するものであり,

$$\tilde{A} : \begin{pmatrix} x^0 \\ \mathbf{x} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} x'^0 \\ \mathbf{x}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \mathbf{t} & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^0 \\ \mathbf{x} \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

$$U - U^\dagger : \begin{pmatrix} x^0 \\ \mathbf{x} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} x'^0 \\ \mathbf{x}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^0 \\ \mathbf{x} \end{pmatrix}, \quad (3.24)$$

$$\tilde{U} - \tilde{U}^\dagger : \begin{pmatrix} x^0 \\ \mathbf{x} \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} x'^0 \\ \mathbf{x}' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \tilde{R} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^0 \\ \mathbf{x} \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

である. ここで, (3.23) のように対角行列によって表現される状態の写像 \tilde{A} を簡単のために対角的と呼ぶことにする. A を分解して得られる対角的な写像 \tilde{A} が恒等写像であるときには, A 全体がユニタリ変換となる. 一般に \tilde{A} は恒等写像ではなく, ユニタリ変換からの「ずれ」を表している部分と解釈できる. なお, 対角的な TP 写像 \tilde{A} の表現 (3.23) に現れる \mathbf{t}, D は

$$\tilde{A}(1) = 1 + \sum_j t_j \sigma^j, \quad \tilde{A}(\sigma^i) = d_i \sigma^i \quad (3.26)$$

によって表される.

*5 ここで, $|d_1|, |d_2|, |d_3|$ は行列 E の特異値と呼ばれる. 特異値は Hermite 行列 $\sqrt{E^\dagger E}$ の固有値である. R, \tilde{R} の \det として -1 を許すならば, d_i は常に正に限定できる. 本論文では R, \tilde{R} は特殊直交行列 ($\det R = \det \tilde{R} = 1$) とする.

3.2.3 完全正值性の必要条件

以下では TP 写像 A が CP 性を持つとして、その条件について調べる。これは上述の分解により得られる \tilde{A} に CP 性を課すことと同値なので、 (d_i, t_i) , $(i = 1, 2, 3)$ が満たすべき条件を調べればよい。 A が CP 性を持つための必要十分条件は文献 [71] によって与えられているが、複雑な表式であり本論文に必要ではないためここで詳しくは述べない。ここでは、 A が CP であるための主な必要条件についてのみ述べる。

TP 写像 A は Bloch ベクトルを式 (3.17) のように写すので、写された先のベクトルは

$$\begin{pmatrix} \sum_j E_{1j}x^j + s_1 \\ \sum_j E_{2j}x^j + s_2 \\ \sum_j E_{3j}x^j + s_3 \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

である。量子状態が正值性を保つためには対応する Bloch ベクトル (x^1, x^2, x^3) のノルムが 1 以下となる必要があることを思い出すと、TP 写像 A が正值性を持つためには常にベクトル (3.27) のノルムが 1 以下である必要がある*⁶。書き直すと、これは任意の $|\boldsymbol{x}| \leq 1$ を満たす \boldsymbol{x} に対して、

$$\sum_i \left| \sum_j E_{ij}x^j + s_i \right|^2 \leq 1 \quad (3.28)$$

である。したがって

$$|E_{ij}| \leq 1, \quad |s_i| \leq 1 \quad (3.29)$$

である。さらに対角的な TPCP 写像 \tilde{A} について同じ議論を適用すれば、

$$|d_i| \leq 1, \quad |t_i| \leq 1 \quad (3.30)$$

を得る。これは対応する A への条件 (3.29) よりも強い条件である。

以上より、TPCP 写像 \mathcal{E} は少なくとも Bloch 球 (単位球) を Bloch 球内部の楕円体へ変換するアフィン写像であることが分かる (後に現れる図 4.3, 5.2, 5.4 を参照のこと)。しかし、この逆は必ずしも成り立たない [72]。すなわち、単位球をその内部の楕円体を写すようなアフィン写像は必ずしも CP 性を満たすとは限らないということである。CP 性という概念は量子系の合成という自然な仮定から得られる性質だが、その特徴付けは 2 準位系ですら複雑である。

*⁶ これは一般の TP 写像 A が正值性を持つための必要十分条件である。

3.3 $d (\geq 3)$ 次元 Hilbert 空間

以上では 2 次元 Hilbert 空間に限って、その幾何学的表現について説明した。一方で $d (\geq 3)$ 次元 Hilbert 空間においては事情が大きく異なり、2 次元に於ける様な簡潔な形での幾何学的対応は得られない [73].

この事情について簡単に説明する。まず、 d 次元 Hilbert 空間上の演算子の組 $\{\lambda_\mu\}_{\mu=0}^{d^2-1}$ を、

$$\lambda_0 = 1, \quad \lambda_i = \lambda_i^\dagger, \quad \text{Tr } \lambda_i = 0, \quad \text{Tr } [\lambda_i \lambda_j] = 2\delta_{ij}, \quad (i = 1, \dots, d^2 - 1) \quad (3.31)$$

を満たすように取る。これは $SU(d)$ の生成子となっている。 $\{\lambda_\mu\}_{\mu=0}^{d^2-1}$ は (非正規) 完全直交基底であるので、一般に状態 ρ は

$$\rho = \frac{1}{d}\lambda_0 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{d^2-1} x^i \lambda_i \quad (3.32)$$

のように展開できる。ここで $\text{Tr } \rho = 1$ は自明に満たされており、 $\rho \geq 0$ の必要条件として $\|\mathbf{x}\| \leq \sqrt{\frac{2(d-1)}{d}}$ を満たしている。この \mathbf{x} は d 準位系での Bloch ベクトルに対応するものである。Bloch ベクトル \mathbf{x} は一般に球 $B_d = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{d^2-1}; \|\mathbf{x}\| \leq \sqrt{\frac{2(d-1)}{d}} \right\}$ に属している。

2 準位系と同様に表面の点 ($\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\frac{2(d-1)}{d}}$ を満たす点) は純粋状態に対応する。

しかし $d \geq 3$ においては、任意の $\mathbf{x} \in B_d$ に対して式 (3.32) を通して表現した ρ は必ずしも正值性を満たさない。したがって $\mathbf{x} \in B_d$ は、状態を表すための必要条件であっても十分条件ではない。これを理解するために、3 準位系の純粋状態を例に取る。適当に取った純粋状態 $|\psi\rangle$ を起点にすると、全ての純粋状態の集合は $SU(3)|\psi\rangle$ と書き表せる。したがって純粋状態の Bloch ベクトル全体の集合は、 $|\psi\rangle$ に対応する点を $SU(3)$ (の実空間上への表現) 全体で回すことによって構成される。しかし B_3 は 8 次元実空間中の球を表しているので、 $SU(3)$ による回転だけでは球の表面を全て覆うことはできない*7。したがって、実際に量子状態を表す部分は B_3 の内でもごくわずかである。このような事情から、 B_3 を用いた自然な Bloch ベクトルの表現は 2 準位系におけるそれ程の成功を収めない。状態空間は実空間の球 B_d に真に含まれる非自明な集合となる [74, 75].

また $d (\geq 3)$ 次元 Hilbert 空間では、式 (3.22) のような TPCP 写像の分解などもできない。これは対応する $d^2 - 1$ 次元実空間上の特異値分解までは行えても、そこで得られる回転行列 (これは $SO(d^2 - 1)$ 上の元) を表現できる $SU(d)$ の元が一般に存在するとは限らないからである。したがって TPCP 写像を取り扱う際には、2 準位系とそれ以上の次元の系とでは問題の難しさが大きく異なる。

*7 $SU(3)$ の自由度は 8 次元だが、 $SO(8)$ の自由度は 28 次元もある。一般に d 次元特殊ユニタリ群 $SU(d)$ の次元は $d^2 - 1$ であり、 $d^2 - 1$ 次元特殊直交群 $SO(d^2 - 1)$ の次元は $(d^2 - 1)(d^2 - 2)/2$ である。 $d \geq 3$ では常に $SO(d^2 - 1)$ の方が高次元である。

第 4 章

事後制御による最適な状態保護

本論文の 1 つ目の主題は、状態保護のための最適な量子制御であった。本章では、ノイズ過程の後のフィードバック制御によって量子状態を保護可能であるかという問題を取り扱う。第 1 章で述べたように、我々は精密な解析を行うために離散的なノイズモデルを採用する。これにより 1 ステップのフィードバック制御を精密に議論できるのであった。本章では、ひとまずノイズ過程の前後にわたるフィードバック制御ではなく、ノイズ過程の後のみ制御を行うことを考える。これは第 5 章にて詳しく定義される事前事後制御の枠組みの言葉を借りれば、事後制御のみによる状態保護ということになる。この下で、我々は 2 状態保護問題と全状態保護問題を対比する。これらの問題の大きな違いは、保護すべき量子状態が何であるかについて我々がどの程度知っているかという点である。2 状態保護問題では我々は始状態、すなわち保護対象となる量子状態の候補が 2 つまで絞られている場合を考える。これは我々が保護すべき量子状態について相当「知っている」場合である。一方全状態保護問題では、我々は始状態が何であるか全くわからない場合を考える。言うなれば始状態の候補は全ての量子状態である。我々はこれら 2 つの極限的な場合を取り扱うことで、始状態に関する知識が最適制御に与える影響を調べる。

4.1 導入

量子系がノイズの影響を受けているとき、その状態変化は適当な TPCP 写像 \mathcal{N} によって

$$|\psi\rangle\langle\psi| \longmapsto \mathcal{N}(|\psi\rangle\langle\psi|) \quad (4.1)$$

と書ける (第 2 章参照)。ただしここで $|\psi\rangle\langle\psi|$ は量子系の始状態を表している。一般に終状態 $\mathcal{N}(|\psi\rangle\langle\psi|)$ と始状態 $|\psi\rangle\langle\psi|$ とは異なる状態であるので、 $|\psi\rangle\langle\psi|$ を量子情報処理に用いたい場合にはこのような状態変化を防がなくてはならない。したがって最終的に得られる状態が始状態 $|\psi\rangle\langle\psi|$ に近い状態になるように、我々は何らかの測定や操作を行う必要がある。既に第 1 章で述べたように、我々は連続的にノイズが量子系に作用するモデルの代わりに、この離散的なノイズモデルを採用する。ゆえに我々が行えるのは、一般にノイズ過程の前後

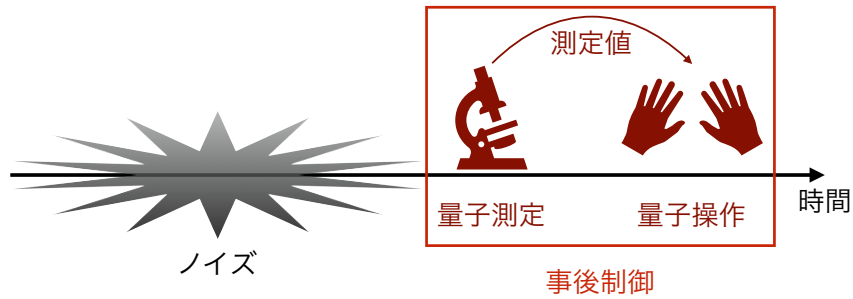


図 4.1 ノイズ過程の後に行う量子測定と量子操作は 1 つの TPCP 写像によって記述され、これを事後制御と呼ぶ。

の量子測定および量子操作である。そして本章では、ノイズ過程の後にのみ量子制御を行う場合を考える (図 4.1)。ここで量子制御とは物理的には何らかの測定や操作によって実現されるが、数学的には適当な TPCP 写像 \mathcal{C} によって表現される。なお節 2.4 で述べたように、TPCP 写像は測定を含まない状態変化だけでなく測定過程も含みうることに注意されたい。特に TPCP 写像 \mathcal{C} は、測定を行ってその測定結果に応じた操作を施すような一般の量子フィードバック制御を記述できる。

最も簡単な例は、始状態 $|\psi\rangle\langle\psi|$ が完全に既知な場合である。これは例えば 2 準位系において、始状態 $|\psi\rangle$ の一般の展開式

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (4.2)$$

における係数 α, β が何かを我々が知っている状況である。このようなとき、我々は任意のノイズ N に対して完全な状態保護を実現できる。そのときの制御 \mathcal{C} は、例えば任意の演算子 A に対して

$$\mathcal{C}(A) = (\text{Tr } A) |\psi\rangle\langle\psi| \quad (4.3)$$

となるように取れば良い。制御 \mathcal{C} は任意の入力状態に対して $|\psi\rangle\langle\psi|$ を出力する写像となる。これが実際に TPCP 性を満たすことは簡単に確かめられる^{*1}。このような写像 \mathcal{C} は一般に射影測定とユニタリ変換によって簡単に実現できる。簡単のため、2 準位系で $|\psi\rangle = |0\rangle$ であるときを例にして説明する。我々はまず量子状態が $|0\rangle, |1\rangle$ のどちらであるかを判定する射影測定 $\{|0\rangle\langle 0|, |1\rangle\langle 1|\}$ を行う。測定結果が 0 であれば測定後状態は既に $|0\rangle$ であるから何もせず、1 であればユニタリ演算子 σ^1 を作用させる。結果として測定結果の如何に関わらず、量子状態は確率 1 で $|0\rangle\langle 0|$ に変化する。これはまさに上で述べた \mathcal{C} の具体的な構成方法である。以上により、既知の量子状態は原理的には完璧に保護可能である。これは既知の量子状態がいくらでも複製できることから明らかである。

^{*1} 証明は以下の通りである。TP 性: $\text{Tr}[\mathcal{C}(A)] = \text{Tr}[A] \text{Tr}[\rho] = \text{Tr } A$ なる計算によって示される。CP 性: 今考えている系を S とする。 S と適当な外部系 E から成る合成系上の任意の正演算子を Ω とすると、 $[\text{id} \otimes \mathcal{C}](\Omega) = \text{Tr}_S[\Omega] \otimes \rho \geq 0$ 。ただしここで Tr_S は系 S の自由度を消す部分トレースである。

一方で、未知の量子状態を保護する問題は一般に非自明となる。その中で最も単純な問題は、始状態が既知の2つの純粋状態の内どちらかである2状態保護問題である。すなわち始状態の候補が2つまで絞られているが、その内どちらが始状態として用意されるかは分からないという状況における状態保護問題である。2状態保護問題は Brańczyk *et al.* [18] および Mendonça *et al.* [19] によって完全に解かれており、最適な量子制御が明らかにされている。興味深いことに、最適制御は弱い測定を含むものであった。弱い測定とは系の情報を完全には引き出せない代わりに、与える外乱も少ないような測定である。この意味で、弱い測定は情報と擾乱のトレードオフを非自明に満たしている。このような結果が一般に成り立っているかどうかは本章の主題である。2状態保護問題では始状態の候補が2つしかないため、保護すべき対象がより分からない場合には問題は難しくなる。この極限として、始状態が何であるか全く分からない場合を考える。すなわち、始状態の候補は全ての量子状態である。これを全状態保護問題と呼ぶ。全状態保護問題についてはその難しさが指摘されつつも、最適な量子制御が如何なるものであるかは殆ど分かっていなかった [22]。本章で取り扱うのはこの全状態保護問題である。

4.2 2状態保護問題

ここでは、Brańczyk *et al.* [18] で考えられた2状態保護問題について簡潔にまとめる。なおこれは Mendonça *et al.* [19] によって与えられた一般的な結果の具体例の1つである。

4.2.1 問題設定

2状態保護問題は、与えられた2状態を与えられたノイズから保護する問題である。Brańczyk *et al.* [18] では、2準位系で dephasing 型のノイズが考えられている。ここでは、これについて解説する。

Dephasing 型のノイズとは、TPCP 写像

$$\mathcal{N}_p^{\text{dephasing}}(\rho) := p(\sigma^3 \rho \sigma^3) + (1-p)\rho \quad (4.4)$$

によって記述されるノイズである。ここで p は $0 \leq p \leq 1/2$ を満たすパラメータである。Dephasing 型ノイズは、入力状態 ρ と $\sigma^3 \rho \sigma^3$ とを確率 p で混ぜ合わせた状態を出力しているとみなせる。ここで Bloch 表現で $\sigma^3 \rho \sigma^3$ は、 ρ を z 軸回りに π だけ回転したものである。したがって dephasing 型ノイズは Bloch ベクトルの x, y 方向成分を確率的に反転させる作用を持っており、図 4.3 のような状態変化を表す*2。

ここで“dephasing”という言葉の由来は、このノイズが量子状態の“phase”（位相）の情報を失わせるからに他ならない。位相とは量子状態の相対位相を指しており、例えば純粋状

*2 節 3.2 で述べたように、一般にノイズ（TPCP 写像）による状態変化は Bloch 球の圧縮によって表現される。

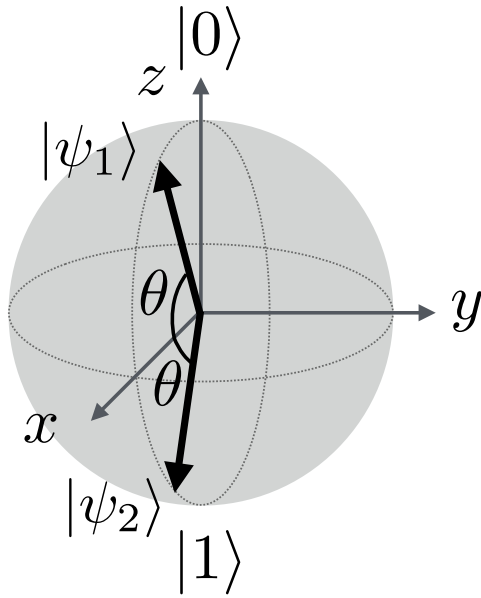


図 4.2 始状態 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ に対応する Bloch ベクトル

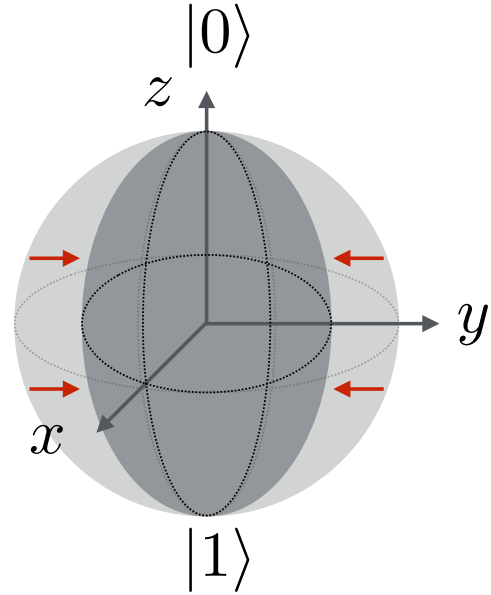


図 4.3 Dephasing 型ノイズによる Bloch 球の像. 全ての点は z 軸に近づくように推移する.

態を

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + e^{-i\theta}|1\rangle) \quad (4.5)$$

と書けば, θ のことである. 式 (3.7) を見ると分かるように, 相対位相は Bloch ベクトルが xy 平面上でどの向きを示しているかを表している. 実際, 図 4.3 は量子状態が xy 平面上での方向の情報を失う様子を表している (より詳しくは付録 D 参照).

Brańczyk *et al.* [18] では, 上で定義された dephasing 型ノイズに対して 2 つの量子状態

$$\begin{cases} |\psi_1\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle \\ |\psi_2\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle - \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle \end{cases} \quad (4.6)$$

を保護することを考えていた. ただし, θ は $0 \leq \theta \leq \pi$ を満たす既知のパラメータである. 2 つの量子状態 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ は Bloch 表現で共に xz 平面上に存在し, どちらも x 軸と角度 θ を成している (図 4.2 参照). 2 状態 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ は均等な確率 $1/2$ で用意されるが, 各試行においてどちらの状態が現れるかは分からないとする.

ここで重要なことは, 2 つの量子状態 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ が一般に非直交だということである. もし 2 状態 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ が直交する状態であれば, その 2 つの状態は 1 回の測定によって完全な識別が可能である. この場合には古典的な情報を保護する問題と変わらない. 一方で非直交な状態であれば, 誤りなく 2 状態を識別することは不可能である. したがって非直交な 2 状態を考えて初めて, 量子制御の問題として意味があるものとなる.

制御の性能は、最終的に得られる量子状態がどれだけ元の状態 $|\psi_i\rangle$ と近いかによって決まるべきである。量子状態の近さを測る指標の取り方には任意性があるが、ここでは忠実度 [61] を用いる。2つの状態 $\rho, |\psi\rangle\langle\psi|$ の忠実度は

$$F(\rho, |\psi\rangle\langle\psi|) := \langle\psi|\rho|\psi\rangle = \text{Tr}[\rho|\psi\rangle\langle\psi|] \quad (4.7)$$

と書かれる。これは厳密に数学的な距離ではないが、直感的に量子状態の近さを表す量である*3。実際、 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ の場合に限りその忠実度は1となり、 ρ と $|\psi\rangle\langle\psi|$ が直交するときに限り0となる。また物理的には、状態 ρ に対して $\{|\psi\rangle\langle\psi|, 1 - |\psi\rangle\langle\psi|\}$ による射影測定を行った結果 $|\psi\rangle\langle\psi|$ が観測される確率を表している。我々は確率 1/2 で用意される $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ を等しく制御する必要があるので、2つの状態に対して平均的な性能を測るために Brańczyk *et al.* [18] では平均忠実度

$$\bar{F} = \sum_{i=1}^2 \frac{1}{2} \langle\psi_i|\mathcal{C} \circ \mathcal{N}_p^{\text{dephasing}}(|\psi_i\rangle\langle\psi_i|)|\psi_i\rangle \quad (4.9)$$

を評価量としていた。ただし、 \mathcal{C} は制御を表す TPCP 写像である。

4.2.2 結果

Brańczyk *et al.* [18] は、可能なあらゆる TPCP 写像の中で平均忠実度 (4.9) を最大化する制御 \mathcal{C} を導いた。ここでは証明を省略するが、それは

$$\mathcal{C}(\rho) = (Z_{-\eta}A_x^{+1})\rho(Z_{-\eta}A_x^{+1})^\dagger + (Z_{\eta}A_x^{-1})\rho(Z_{\eta}A_x^{-1})^\dagger \quad (4.10)$$

である。ここで $Z_\eta = e^{-i\frac{\eta}{2}\sigma^3}$ であり、 $\{A_x^{+1}, A_x^{-1}\}$ は CP インストルメント $\{\mathcal{A}_x^{+1}, \mathcal{A}_x^{-1}\}$ を

$$\mathcal{A}_x^\omega(\rho) = A_x^\omega\rho A_x^{\omega\dagger} \quad (\omega = +1, -1) \quad (4.11)$$

によって記述する演算子であり、

$$\begin{cases} A_x^{+1} := \cos \frac{\chi}{2} |+\rangle\langle+| + \sin \frac{\chi}{2} |-\rangle\langle-| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \frac{\chi}{2} + \sin \frac{\chi}{2} & -i(\cos \frac{\chi}{2} - \sin \frac{\chi}{2}) \\ i(\cos \frac{\chi}{2} - \sin \frac{\chi}{2}) & \cos \frac{\chi}{2} + \sin \frac{\chi}{2} \end{pmatrix} \\ A_x^{-1} := \sin \frac{\chi}{2} |+\rangle\langle+| + \cos \frac{\chi}{2} |-\rangle\langle-| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \frac{\chi}{2} + \sin \frac{\chi}{2} & i(\cos \frac{\chi}{2} - \sin \frac{\chi}{2}) \\ -i(\cos \frac{\chi}{2} - \sin \frac{\chi}{2}) & \cos \frac{\chi}{2} + \sin \frac{\chi}{2} \end{pmatrix} \end{cases} \quad (4.12)$$

*3 なお、忠実度を用いて定義される

$$B(\rho, |\psi\rangle\langle\psi|) := \sqrt{2(1 - \sqrt{F(\rho, |\psi\rangle\langle\psi|)})} \quad (4.8)$$

は Bures 距離と呼ばれる数学的な距離である。

によって定義される。なお $\eta, \chi \in [0, 2\pi]$ は、 \mathcal{C} が最適となるために一意に決まるパラメータである。その詳細は付録 C にて述べる。

\mathcal{C} の表式 (4.10) は、最適制御 \mathcal{C} が CP インストルメント $\{A_\chi^{+1}, A_\chi^{-1}\}$ による測定とその結果に応じたユニタリ変換 $Z_{\pm\eta}$ から構成されることを表している。ユニタリ変換 $Z_{\pm\eta}$ は Bloch ベクトルに対する z 軸まわりの回転を表していることが直ちに分かる。以下では CP インストルメント $\{A_\chi^{+1}, A_\chi^{-1}\}$ がどのような測定を表しているのかを議論する。

4.2.3 最適制御における量子測定

CP インストルメント $\{A_\chi^{+1}, A_\chi^{-1}\}$ で記述される測定過程では、測定値 $\omega = +1, -1$ を得る確率およびそのときの測定後状態は次のように書かれる：

$$\begin{array}{ccc} & \begin{pmatrix} x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} & \\ \swarrow \omega=+1 & & \searrow \omega=-1 \\ \frac{1}{1+x^2 \cos \chi} \begin{pmatrix} \sin \chi x^1 \\ x^2 + \cos \chi \\ \sin \chi x^3 \end{pmatrix} & & \frac{1}{1-x^2 \cos \chi} \begin{pmatrix} \sin \chi x^1 \\ x^2 - \cos \chi \\ \sin \chi x^3 \end{pmatrix} \end{array} \quad (4.13)$$

$$\Pr \{\omega = +1\} = \frac{1 + x^2 \cos \chi}{2}$$

$$\Pr \{\omega = -1\} = \frac{1 - x^2 \cos \chi}{2}$$

始状態が xz 平面上にある場合、その状態変化は図 4.4 のように図示される。

CP インストルメント $\{A_\chi^{+1}, A_\chi^{-1}\}$ による測定は、 $\chi = 0$ のときに物理量 σ^2 の理想測定と一致する*4。さらにいえば、これは射影演算子 $|\pm i\rangle\langle \pm i|$ を用いた射影測定である。一方で $\chi = \pi/2$ のときには、CP インストルメント $\{A_\chi^{+1}, A_\chi^{-1}\}$ は意味のある測定を表さない*5。つまり、CP インストルメント $\{A_\chi^{+1}, A_\chi^{-1}\}$ による測定は $\chi = 0$ では σ^2 に関する理想的な測定を表し、 $\chi = \pi/2$ では何も行わない操作を表している。一般の $0 < \chi < \pi/2$ に対しては、これらの中間的な「弱い測定」を表す (図 4.4 参照)。感覚的な表現を借りれば、弱い測定とは物理量 σ^2 を「やんわりと測る」ことである。これを見るために、弱い測定 ($0 < \chi < \pi/2$) と「しっかりと測る」射影測定 ($\chi = 0$) とを比較する。図式 (4.13) より、被測定状態の Bloch ベクトルを (x^1, x^2, x^3) とすれば、弱い測定 ($0 < \chi < \pi/2$) で測定値 $+1$ が得られる確率は $(1 + x^2 \cos \chi)/2$ である。すなわち、たとえ被測定状態が σ^2 の固有状態 $|+i\rangle$ であったとしても必ずしも測定値 $+1$ は得られない。射影測定 ($\chi = 0$) では必ず測定値 $+1$ が得られるので、弱い測定は σ^2 の不精確な測定であり、量子状態の持つ情

*4 抽象的に定めた測定値 $\omega = \pm 1$ はそれぞれそのまま物理量 σ^2 の値 ± 1 に対応する。

*5 このとき $A_\chi^{+1} = A_\chi^{-1} = 1/\sqrt{2}$ であり、 A_χ^{+1}, A_χ^{-1} はただ量子状態に $1/2$ を掛けるだけの写像となる。これは量子状態とは無関係に確率 $1/2$ で測定値 ± 1 を得るだけの操作であり、何の状態変化も起きない。

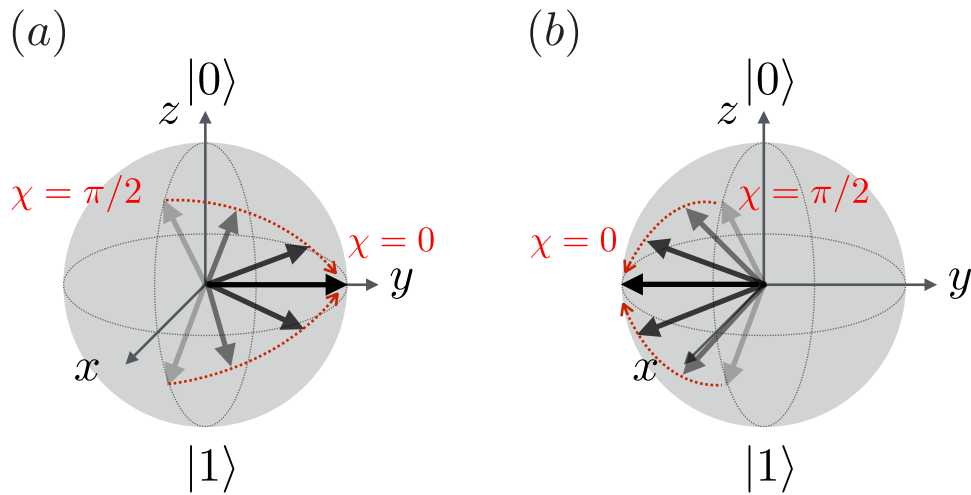


図 4.4 2 状態 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ に対して測定 $\{A_\chi^{+1}, A_\chi^{-1}\}$ を行い, (a) 測定値 $\omega = +1$ が得られたときの状態変化と (b) 測定値 $\omega = -1$ が得られたときの状態変化を Bloch 表現によって図示したもの. $\chi = \pi/2$ では状態は変化せず $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ に留まり, $\chi = 0$ では σ^2 に対する射影測定と同じように状態は $|\pm i\rangle$ (Bloch 表現で $(0, \pm 1, 0)$) に写される. そしてその中間的領域 $0 < \chi < \pi/2$ では状態は初期状態と $|\pm i\rangle$ の中間的な点に写される.

報を取り出しきっていない. しかし一方で, 測定後状態は元の Bloch ベクトル (x^1, x^2, x^3) に依存している. 射影測定では測定後状態は $|+i\rangle, |-i\rangle$ のどちらかであり初期状態依存性は殆どないため, この意味で弱い測定は測定後も比較的状态を保っており状態を乱しきっていない. 以上より, $0 < \chi < \pi/2$ によって表現される測定は取り出せる情報が少ない代わりに与える擾乱も少ない測定であると理解できる.

ここまでで, 最適制御 \mathcal{C} (4.10) がどのような制御かを理解するための準備が整った. 最適制御 \mathcal{C} (4.10) では, まず量子状態を y 軸方向に弱く測定する. そしてその測定結果が $+1$ であれば z 軸周りに $-\eta$ だけの回転を, 測定結果が -1 であれば z 軸周りに $+\eta$ だけの回転を施す^{*6}. この回転は測定によって動いた Bloch ベクトルを元に戻すような役割を持っている. 以上が式 (4.10) で与えられる最適制御 \mathcal{C} である. ここで興味深いことは, 最適制御における量子測定が非自明な量子測定を含むことである. これは量子測定の情報と擾乱のトレードオフを強く反映した結果であると言える.

4.3 全状態保護問題

2 状態保護問題では, 状態保護における最適制御が弱い量子測定を含んでいるという結果が得られた. より始状態への知識が少ないときに対して, この結果が成り立っているかは興味深い話題である. なぜなら保護すべき量子状態の候補を 2 つまで絞られている状況は, 相当に始状態を知っていると言えるからである. 一方で, 始状態への知識が少ない極限的な状況

^{*6} η, χ のとり方によって最終的に得られる状態の Bloch ベクトルは xy 平面に属するようになる (付録 C 参照).

は始状態の候補が無数ある場合である。すなわち、始状態を全く知らない場合である。以下では、我々はこのような全ての状態を保護する問題、全状態保護問題を考える [58]。これにより、始状態への知識の多寡が最適制御にどのような影響を与えるかを見られる。

4.3.1 問題設定

全状態保護を考えるには、系の全ての純粋状態が等確率で生起する状況を考える必要がある。これには、 $SU(N)$ の Haar 測度を用いて状態を記述すればよい。例えば Zhang *et al.* [22] も、一般の量子系での depolarizing 型ノイズに対する状態保護を考える際にこの方法を採用している。一般の系でも同様に可能だが、以下では 2 準位系へ限定して議論を進める。

まず系の適当な純粋状態を 1 つ取り、一般性を失わず $|0\rangle$ とする。これに対して、任意の $U \in SU(2)$ によって

$$|\psi_U\rangle := U|0\rangle \quad (4.14)$$

と定義すると、明らかにこの $|\psi_U\rangle$ は 2 準位系の任意の量子状態を表せる。したがってユニタリ U を $SU(2)$ 内で等確率に選べば、2 準位系の全ての純粋状態 $|\psi_U\rangle$ を等確率で用意できる*7。

我々は、2 準位系で現れるありとあらゆるノイズを考察の対象とする。したがってノイズは任意の TPCP 写像 \mathcal{N} によって表され、制御を行わなければ量子状態は

$$|\psi_U\rangle\langle\psi_U| \longrightarrow \mathcal{N}(|\psi_U\rangle\langle\psi_U|) \quad (4.16)$$

と変化する。ノイズ過程の後に、我々は量子制御を行う。原理的に最適な量子制御を見つけるために、我々はこれを任意の TPCP 写像 \mathcal{C} によって書くことにする。最終的に制御まで含めた量子状態の変化は

$$|\psi_U\rangle\langle\psi_U| \longrightarrow \mathcal{C} \circ \mathcal{N}(|\psi_U\rangle\langle\psi_U|) \quad (4.17)$$

となる。制御 \mathcal{C} の性能は、最終的に得られる状態 $\mathcal{C} \circ \mathcal{N}(|\psi_U\rangle\langle\psi_U|)$ が元の状態 $|\psi_U\rangle$ にどれだけ近いかによって評価されるべきであるので、次の平均忠実度を評価量とする：

$$\bar{F} = \int_{U \in SU(2)} dU \langle\psi_U| \mathcal{C} \circ \mathcal{N}(|\psi_U\rangle\langle\psi_U|) |\psi_U\rangle. \quad (4.18)$$

*7 なお、 $U, V \in SU(2)$ については $|\psi_U\rangle = |\psi_V\rangle$ であれば $U = V$ となる。すなわち、2 準位系ではユニタリ U と $|\psi_U\rangle$ は一対一に対応する。これを見るには、ユニタリ演算子はある完全正規直交基底を他の完全正規直交基底へ写すことを思い出せば良い。ユニタリ演算子 $U^\dagger V$ は $|0\rangle$ を $|0\rangle$ に写すので、残された自由度は

$$U^\dagger V = |0\rangle\langle 0| + e^{-i\theta} |1\rangle\langle 1| \quad (4.15)$$

で表される位相 θ だけである。しかし、 U, V は \det が 1 なので、 $\theta = 0$ のみが許される。したがって $V = U$ である。以上の事情は 2 準位系に特有である。一般の量子系については節 5.1 で述べる。

ここで dU はユニタリ演算子 U が $U \sim U + dU$ に入っている確率を表す測度であり、我々は $\int_{U \in \text{SU}(2)} dU = 1$ によって規格化された $\text{SU}(2)$ の Haar 測度を採用した。Haar 測度とは付録 F で詳しく述べるが、 U に関して一様な値となる測度である。

以上より考えるべき問題は、与えられたノイズ \mathcal{N} に対して平均忠実度 (4.18) を最大化する制御 \mathcal{C} を見つけることへ帰着された。

4.3.2 結果

2 準位系では、任意のノイズ \mathcal{N} に対してそれぞれ最適制御 \mathcal{C} が得られる。任意のノイズ \mathcal{N} に対する最適制御は、 \mathcal{N} を対角的なノイズとそれ以外へ分解 (3.22) したときに得られるユニタリ変換となる。すなわち \mathcal{N} が $\mathcal{N}(\rho) = U\tilde{\mathcal{N}}(V\rho V^\dagger)U^\dagger$ と書けるとき、最適制御 \mathcal{C} は

$$\mathcal{C}(\rho) = V^\dagger U^\dagger \rho UV \quad (4.19)$$

である。ただしここで $U, V \in \text{SU}(2)$ は適当なユニタリ演算子、 $\tilde{\mathcal{N}}$ は対角的であるとする。

以下ではこれを証明する。まず平均忠実度 (4.18) は付録 H によれば、

$$\bar{F} = \frac{2 + \text{Tr}_{\text{HS}}[\mathcal{C} \circ \mathcal{N}]}{6} \quad (4.20)$$

と書ける。これは文献 [59] で与えられたものであり、証明において重要な公式である。この公式によれば、平均忠実度を最大化するには $\text{Tr}_{\text{HS}}[\mathcal{C} \circ \mathcal{N}]$ を最大化すれば良いことを示している。ここで \mathcal{C} に対して \mathcal{N} の分解に現れる U, V を用いて

$$\tilde{\mathcal{C}}(\rho) := V\mathcal{C}(U\rho U^\dagger)V^\dagger \quad (4.21)$$

を定義すると、

$$\text{Tr}_{\text{HS}}[\mathcal{C} \circ \mathcal{N}] = \text{Tr}_{\text{HS}}[\tilde{\mathcal{C}} \circ \tilde{\mathcal{N}}] \quad (4.22)$$

と書ける。 \mathcal{C} を任意に動かすことは $\tilde{\mathcal{C}}$ を任意に動かすことと同値なので、以下では $\tilde{\mathcal{C}}$ について $\text{Tr}_{\text{HS}}[\tilde{\mathcal{C}} \circ \tilde{\mathcal{N}}]$ を最大化すれば良い。この書き換えによって、ノイズ \mathcal{N} に含まれる可逆なユニタリ変換を無視できるようになった。後は直接的な計算によって

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{\text{HS}}[\tilde{\mathcal{C}} \circ \tilde{\mathcal{N}}] &= \frac{1}{2} \sum_{\mu=0}^3 \text{Tr}[\sigma^\mu \tilde{\mathcal{C}} \circ \tilde{\mathcal{N}}(\sigma^\mu)] \\ &= 1 + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 \text{Tr}[\sigma^j \tilde{\mathcal{C}} \circ \tilde{\mathcal{N}}(\sigma^j)] \\ &= 1 + \frac{1}{4} \sum_{j=1}^3 \text{Tr}[\sigma^j \tilde{\mathcal{N}}(\sigma^j)] \text{Tr}[\sigma^j \tilde{\mathcal{C}}(\sigma^j)] \end{aligned} \quad (4.23)$$

となる。ただし 3 つ目の等号において $\tilde{\mathcal{C}}, \tilde{\mathcal{N}}$ がトレース保存性を持つこと、4 つ目の等号において $\tilde{\mathcal{N}}$ が対角的であることを用いた。

$\tilde{\mathcal{C}}$ を式 (3.17) のようにアフィン変換 (\mathbf{s}, E) で表すとき、 $\text{Tr} [\sigma^j \tilde{\mathcal{C}}(\sigma^j)] = 2E_{jj}$ である。行列 E はノルム 1 以下のベクトルをノルム 1 以下のベクトルに写す変換を表すため、 $E_{jj} \leq 1$ でなければならない (節 3.2 参照)。したがって、

$$\text{Tr}_{\text{HS}} \mathcal{C} \circ \mathcal{N} \leq 1 + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 \text{Tr} [\sigma^j \tilde{\mathcal{N}}(\sigma^j)] \quad (4.24)$$

が成り立つ。上式で等号条件が満たされるのは $j = 1, 2, 3$ に対して $E_{jj} = 1$ のとき、すなわち E の対角成分が全て 1 のときのみである。一方でこのとき、式 (3.28) より行列 E の非対角成分および \mathbf{s} は 0 でなければならない。したがって $\tilde{\mathcal{C}} = \text{id}$ であり、 \mathcal{C} は $\mathcal{C}(\rho) = V^\dagger U^\dagger \rho UV$ となる。以上より最適制御 \mathcal{C} は、ノイズ \mathcal{N} を対角的なノイズへ変換する際に必要なユニタリ変換の逆変換となる。

なお、最適制御によって達成される平均忠実度 \bar{F} は、式 (H-1) より

$$\frac{6 + \sum_j \text{Tr} \sigma^j \tilde{\mathcal{N}}(\sigma^j)}{12} \quad (4.25)$$

である。

4.3.3 事後制御による状態保護の不可能性

直観的には、この結果は事後制御のみによって全ての状態を保護することが本質的に不可能だということを示している。なぜならば最適な事後制御 \mathcal{C} はノイズ \mathcal{N} の内ユニタリ変換によって構成される可逆な変換のみについて逆変換を作用させているのであり、不可逆な部分 (証明中の $\tilde{\mathcal{N}}$) については全く何もできていないからである。一方節 4.2 で述べたように、2 状態を保護する場合にはある程度ノイズの効果を抑制できていた [18, 19]。これらの結果から、事後制御が状態保護に有用であるかどうかは、始状態の知識に大きく依存することが分かる。これは自然な結果で、我々は始状態が何であるか知らない限り、どんな状態に戻せば良いかが分からないのである。したがって全状態を保護するためには、ノイズ過程の前に始状態がどのような状態であるかを知る必要がある。

制御によって得られる状態と元の状態の平均忠実度は $(6 + \sum_j \text{Tr} \sigma^j \tilde{\mathcal{N}}(\sigma^j))/12$ であり、ノイズ \mathcal{N} の非可逆性は $(1/2) \sum_j \text{Tr} [\sigma^j \tilde{\mathcal{N}}(\sigma^j)]$ によって特徴づけられていることが分かる。節 3.2 で述べたように一般に TPCP 写像は Bloch 球 (単位球) を楕円体へ写すが、その楕円体の 3 径の長さを表しているのが $(1/2) \text{Tr} [\sigma^j \tilde{\mathcal{N}}(\sigma^j)]$ である。したがって対角的なノイズ \mathcal{N} の非可逆性は、 \mathcal{N} が Bloch 球をどれだけ圧搾するかという幾何学的な量で表されるということが分かる。

第 5 章

事前事後制御による最適な全状態保護

本章では、ノイズ過程前後の制御による量子状態の保護を考える。これを事前事後制御による状態保護と呼ぶ。前章で述べたように、ノイズ過程以後のみの制御では 2 つの量子状態を保護できても、全ての量子状態を保護することはできなかった。これは初期状態に関する知識が全くないことに起因している。この問題を克服する 1 つの方策は、ノイズ過程以前に系へ測定を行い、始状態が何であるか推定することである。しかし、ここでもやはり測定の情報と擾乱のトレードオフが問題となる。始状態が何であるか識別しようとするほど、保護すべき量子状態がより乱されてしまう。その様なトレードオフの下での最適制御を解明することが本章の目的である。

5.1 状態保護の一般モデル：事前事後制御

我々は量子状態をノイズから保護する一般的な枠組みとして、ノイズ過程 (4.1) の前後に量子測定および量子操作を行う事前事後制御モデルを定義する。

5.1.1 一般的定式化

まず、代表的な 2 準位系であるスピン $1/2$ 系を例にして事前事後制御の流れを解説する：

- (i) 我々は初めにスピン $1/2$ 粒子を与えられるとする。このときスピンのどの向きを向いているかは分からないが、スピンの向いている方向の確率分布は知っているとする。
- (ii) 与えられた粒子に対して何らかの測定を行う。例えば x, y, z 軸に沿ったスピンの測定である。
- (iii) スピンの量子状態が何らかのノイズによって乱される。例えば揺らいだ磁場が存在している場合には、スピンの状態は確率的に位相が変化してしまう。

(iv) 粒子に対して何らかの操作を行う。例えば、 x, y, z 軸に沿った磁場を印加するなどである。ただし、この操作はノイズ過程以前の測定結果に依存して行っても良い。例えばノイズ過程以前にスピンを z 軸に関して測定し、スピスが z 軸正の向きであった場合には x 軸正の方向に磁場を印加し、スピスが z 軸負の向きであった場合には x 軸負の方向に磁場を印加するといった操作が挙げられる。

制御の目的は、(ii) および (iv) の制御を行うことによって最終的に得られる状態を最初の状態になるべく「近い」状態にすることである。

一般の量子系に対する事前事後制御モデルも、上記と本質的に同じである。ただし、手順 (ii) および (iv) でのスピン $1/2$ 系に固有の測定や操作は第 2 章で導入された抽象的な量子測定や量子操作へ置き換わる。

したがって一連の制御の流れを一般の量子系に即して書くと、次のようになる：

(i) 「状態準備」 (“initial state preparation”)

未知の量子状態 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ が確率密度 p_ψ に従って準備される。

(ii) 「事前制御」 (“ex-ante control”)

CP インストルメント $\{\mathcal{J}_\omega\}_{\omega \in \{1, \dots, M\}}$ によって記述される測定を行う。これを事前制御と呼ぶ。ただし $\omega \in 1, \dots, M$ は測定値を表し、 $M \in \mathbb{R}$ は測定値の総数を表す。

(iii) 「ノイズ」 (“noise process”)

量子状態が、TPCP 写像 \mathcal{N} によって記述されるノイズを被る。

(iv) 「事後制御」 (“ex-post control”)

事前制御によって得られた測定値 ω に対応して、TPCP 写像 C_ω によって記述される操作を行う。これは事後制御と呼ばれる。

事前制御における測定で測定値 ω が得られたとすると、最終状態は

$$\rho_{\psi, \omega} = \frac{1}{\text{Tr}[\mathcal{J}_\omega(|\psi\rangle\langle\psi|)]} \mathcal{C}_\omega \circ \mathcal{N} \circ \mathcal{J}_\omega(|\psi\rangle\langle\psi|) \quad (5.1)$$

と書ける。そして測定値 ω が得られる確率は $\text{Tr}[\mathcal{J}_\omega(|\psi\rangle\langle\psi|)]$ である。

上の手順のように、我々はノイズ過程以前に行う $\{\mathcal{J}_\omega\}_{\omega \in \{1, \dots, M\}}$ を事前制御 (ex-ante control)、後に行う C_ω を事後制御 (ex-post control) と呼称する。事前事後制御において重要な点は、事前制御で得られた測定値 ω が事後制御に役立てられるという点である。この意味で事前制御は量子測定を表し、事後制御はその測定に対応するフィードバック操作であると解釈できる。ただし事前制御および事後制御はそれぞれ CP インストルメントおよび TPCP 写像によって記述されるので、一般には事前制御の中にフィードバック操作を含んでいても良いし、事後制御の中に量子測定を含んでいても良い (図 5.1 参照)。

我々の目的は量子状態をなるべく良く保護できる制御を見つけることであった。ここで「良い」ということを決めるには、何を以て良いか悪いかを定める尺度となる評価量を定義

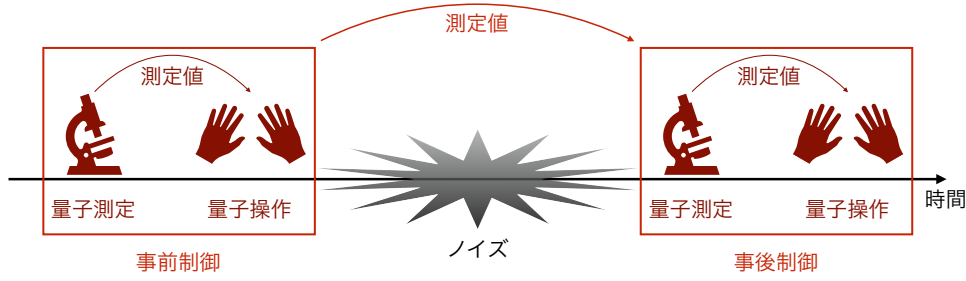


図 5.1 図 1.3 をより詳細に書いた事前事後制御の概念図. ノイズの前に行う測定・操作を事前制御, ノイズの後に行う測定・操作を事後制御と呼ぶ.

する必要がある. それには, 始状態 $|\psi\rangle$ とそれに対する終状態 $\rho_{\psi,\omega}$ の近さを定量的に測る量を取るのが自然である. これを $h(|\psi\rangle\langle\psi|, \rho_{\psi,\omega})$ とする. このとき制御が平均的にどれだけ有用であったかは, $h(|\psi\rangle\langle\psi|, \rho_{\psi,\omega})$ を $|\psi\rangle, \omega$ を得る確率を用いて平均化した

$$\begin{aligned} \bar{h} &= \int_{\| |\psi\rangle \| = 1} d\psi \text{ 生起確率密度} \times \left(\sum_{\text{測定値}\omega} \text{評価関数}(\text{始状態}, \text{終状態}) \times \omega \text{を得る確率} \right) \\ &= \int_{\| |\psi\rangle \| = 1} d\psi p_{\psi} \left(\sum_{\omega=1}^M h(|\psi\rangle\langle\psi|, \rho_{\psi}) \times \text{Tr} [J_{\omega}(|\psi\rangle\langle\psi|)] \right) \end{aligned} \quad (5.2)$$

によって評価すれば良い. ここで $d\psi p_{\psi}$ は生起する量子状態 $|\psi\rangle$ が微小区間 $|\psi\rangle \sim |\psi + d\psi\rangle$ に属している確率を表している. 積分 $\int_{\| |\psi\rangle \| = 1} d\psi$ は \mathcal{H} 上の単位ベクトル, すなわち全ての純粋状態を均等に足し上げる積分であり, $\int_{\| |\psi\rangle \| = 1} d\psi = 1$ によって規格化されているとする.

5.1.2 全状態保護問題

量子状態の近さを表す h の選び方には任意性があるが, 我々はやはり性質の良い忠実度 (4.7) を用いる. 忠実度 h は $h(|\psi\rangle\langle\psi|, \rho_{\psi,\omega}) = \langle\psi|\rho_{\psi,\omega}|\psi\rangle$ と書き表されるように引数に対して線形であるという良い性質を持っている. したがって平均忠実度 (5.2) は

$$\bar{F} = \int_{\| |\psi\rangle \| = 1} d\psi p_{\psi} \langle\psi|\mathcal{E}(|\psi\rangle\langle\psi|)|\psi\rangle \quad (5.3)$$

と書ける. ただしここで,

$$\mathcal{E} := \sum_{\omega=1}^M \mathcal{C}_{\omega} \circ \mathcal{N} \circ J_{\omega} \quad (5.4)$$

である (ここで \circ は写像の合成を表す). 以上より, 平均忠実度 (5.3) の中で量子制御を表す部分はこの \mathcal{E} に集約された.

状態 $|\psi\rangle$ の生起確率として, 我々は一様分布 ($p_{\psi} = 1$) を考える. この場合には, 平均忠実度の積分 $\int_{\| |\psi\rangle \| = 1} d\psi$ はやはり $SU(N)$ 上の Haar 測度による積分に置き換えてしまって

良い。すなわち節 4.3 と同様に，平均忠実度 (5.3) で $p_\psi = 1$ としたものを

$$\bar{F} = \int_{U \in \text{SU}(N)} dU \langle \psi_U | \mathcal{E}(|\psi_U\rangle\langle\psi_U|) | \psi_U \rangle \quad (5.5)$$

と書き換える。ただし適当に固定した量子状態 $|\psi_0\rangle$ に対して $|\psi_U\rangle := U|\psi_0\rangle$ であり， dU は Haar 測度による積分を表している*1。Haar 測度による表現を用いれば，平均忠実度 (5.3) は付録 F より

$$\bar{F} = \frac{d + \text{Tr}_{\text{HS}}[\mathcal{C}_\omega \circ \mathcal{N} \circ \mathcal{J}_\omega]}{d(d+1)} \quad (5.7)$$

と書ける。

最後に，前章で扱った様な事後制御のみによる制御についての注意を述べる。事後制御のみの制御を考えるには，例えば事前制御を自明な恒等写像に制限すればよい。すなわち $\mathcal{J}_\omega \propto \text{id}$ とすれば良い。しかし，実は事前制御で条件付けを行わない場合 ($M = 1$) も，事後制御のみの制御と数学的に等価になる。条件付けを行わない場合には事前制御は TPCP 写像によって記述されるので，それを \mathcal{J} とすれば式 (5.4) は $\mathcal{E} = \mathcal{C} \circ \mathcal{N} \circ \mathcal{J}$ となる。したがって付録 H で与えたように平均忠実度を Tr_{HS} を用いて表現すれば， Tr の巡回性によって

$$\bar{F} = \frac{d + \text{Tr}_{\text{HS}}[\mathcal{J} \circ \mathcal{C} \circ \mathcal{N}]}{d(d+1)} \quad (5.8)$$

と表示できる。ここで $\tilde{\mathcal{C}} := \mathcal{J} \circ \mathcal{C}$ とすればこれは TPCP 写像で，問題は事前制御 $\mathcal{J} = \text{id}$ とした事後制御 $\tilde{\mathcal{C}}$ による状態保護問題に帰着される*2。

5.2 一般の量子系での特定ノイズの抑制：depolarizing 型ノイズ

ここでは我々の結果の 1 つとして，一般の量子系での全状態保護問題を depolarizing 型ノイズに対して解いた例を解説する。

*1 ここで一般の N に対して U と $|\psi_U\rangle$ は一対一に対応せず， $|\psi_U\rangle = |\psi_V\rangle$ なるユニタリ $V \neq U$ が存在する。このような V の自由度は $\text{SU}(N-1)$ の自由度と等しい。実際 $U^\dagger V$ はある $W \in \text{SU}(N-1)$ を用いて

$$U^\dagger V = |\psi_0\rangle\langle\psi_0| \oplus W \quad (5.6)$$

と書き表せる。ただし \oplus は直和であり， W は $|\psi_0\rangle$ に平行な 1 次元 Hilbert 空間の直交補空間上のユニタリ演算子である。 $\det[U^\dagger V] = 1$ より $W \in \text{SU}(N-1)$ である。すなわち， $|\psi_U\rangle = |\psi_V\rangle$ なる V は $\text{SU}(N-1)$ の自由度の分だけ存在する。しかしこの V の自由度は状態 $|\psi_U\rangle$ に依存していないので，ユニタリ $U \in \text{SU}(N)$ を等確率に取ることで状態 $|\psi_U\rangle \in \mathcal{H}$ も等確率に生起するようになる。

*2 なお事前制御での条件付けを行う場合に同様の式変形を行ってもこの様な帰着は不可能である。その場合には $\tilde{\mathcal{C}}$ に対応する写像として $\sum_\omega \mathcal{J}_\omega \circ \mathcal{C}_\omega$ が得られるが，これは一般に TP 性を満たさず物理的な状態変化ではない。実際これは CP インストルメント \mathcal{J}_ω が作用する前に \mathcal{C}_ω を作用させており，測定結果 ω をその測定の前に知っていなければ実現不可能である。

5.2.1 Depolarizing 型ノイズ

系を記述する量子系は d 次元 Hilbert 空間であるとして、

$$\mathcal{D}_\varepsilon(\rho) := (1 - \varepsilon)\rho + \varepsilon \frac{1}{d} \text{Tr} \rho, \quad 0 \leq \varepsilon \leq 1 \quad (5.9)$$

で定義される depolarizing 型ノイズを考える。ここで $1/d$ は d 次元 Hilbert 空間での最大混合状態であり、古典的に完全なランダム状態を表している。 ε はノイズの強さを表すパラメータであり、 $\varepsilon = 0$ は何もしない恒等写像を、 $\varepsilon = 1$ は量子状態を完全に壊して $1/d$ を出力するようなノイズとなっている。

この depolarizing 型ノイズはユニタリ変換に対して共変的である。すなわち、任意のユニタリ変換 U に対して

$$\mathcal{D}_\varepsilon(U\rho U^\dagger) = (1 - \varepsilon)U\rho U^\dagger + \varepsilon \frac{1}{d} \text{Tr} U\rho U^\dagger = U^\dagger \mathcal{D}_\varepsilon(\rho) U^\dagger \quad (5.10)$$

となる。したがって状態空間に対して一様な作用を持っているとみなせる。実際 2 準位系では depolarizing 型ノイズの状態変化は図 5.2 のように描かれ、Bloch 球を一様に圧搾している。

特に 2 準位系の場合、式 (5.9) は

$$\mathcal{D}_\varepsilon(\rho) = (1 - \varepsilon)\rho + \varepsilon \frac{1}{2} \text{Tr} \rho, \quad 0 \leq \varepsilon \leq 1 \quad (5.11)$$

と書かれる。Bloch 表現では $1/2$ は Bloch 球の中心に対応するので、図 5.2 のように \mathcal{D}_ε によって量子状態は Bloch 球の中心に向かっていく。また \mathcal{D}_ε は別の表現として

$$\mathcal{D}_\varepsilon(\rho) = \left(1 - \frac{3\varepsilon}{4}\right)\rho + \frac{\varepsilon}{4}(\sigma^1\rho\sigma^1 + \sigma^2\rho\sigma^2 + \sigma^3\rho\sigma^3) \quad (5.12)$$

とも書ける。この表現では、ノイズ \mathcal{D}_ε は確率的にいずれかの軸に関してスピン反転を起こすようなノイズであると解釈できる。これは“depolarizing,” すなわち分極 (“polarization”) を失う (“de”) 様子を良く表している。ランダムなスピン反転によって、スピンの方向に関する情報が失われてしまう。実際図 5.2 では、Bloch ベクトルの向き情報がノイズにより失われている。

5.2.2 Depolarizing 型ノイズに対する最適制御

Depolarizing 型ノイズ \mathcal{D}_ε に対する最適な事前事後制御 $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega)\}_{1 \leq \omega \leq d}$ は以下のように与えられる。

- (i) ノイズが弱いとき ($\varepsilon \leq d/(d+1)$), 最適制御は「何もしない法」 $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega)\}_{\omega=1}$ である。ただし $\mathcal{J}_1, \mathcal{C}_1$ は

$$(\mathcal{J}_1, \mathcal{C}_1) = (\text{id}, \text{id}) \quad (5.13)$$

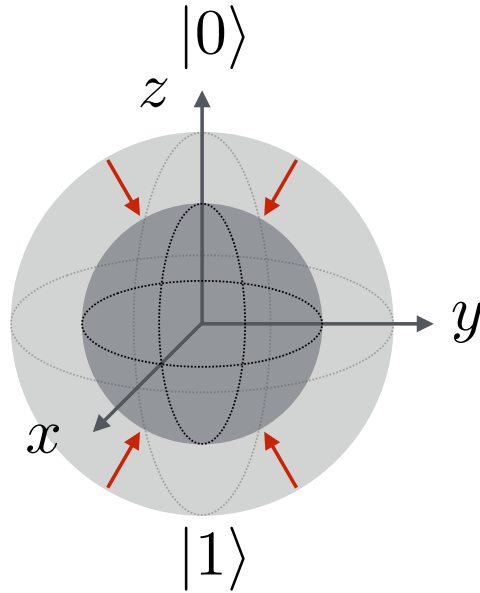


図 5.2 Depolarizing 型ノイズによる Bloch 球の像. 全ての点は中心に近づくように推移する.

によって与えられる. また達成される平均忠実度は $\bar{F}_{\text{DN}} = 1 - \varepsilon(d-1)/d$ である.

(ii) ノイズが強いつき ($\varepsilon \geq d/(d+1)$), 最適制御は「識別・再準備法」 $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega)\}_{1 \leq \omega \leq d}$ である. ただし $\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega$ は

$$\mathcal{J}_\omega(\rho) = |\phi_\omega\rangle\langle\phi_\omega| \rho |\phi_\omega\rangle\langle\phi_\omega|, \quad (5.14)$$

$$\mathcal{C}_\omega(\rho) = |\phi_\omega\rangle\langle\phi_\omega| \text{Tr} \rho \quad (5.15)$$

によって与えられる. $\{|\phi_\omega\rangle\}_{1 \leq \omega \leq d}$ は \mathcal{H} の任意の正規直交基底である. また達成される平均忠実度は

$$\bar{F}_{\text{DR}} = \frac{2}{d+1} \quad (5.16)$$

である.

この結果の証明は節 5.4 において与えることにして, ここではその意味について詳しく議論する.

まず, 上に登場する「何もしない法」, 「識別・再準備法」について解説する. 「何もしない法」とは文字通り何もせず, 量子状態がただノイズを受けるようにする方法である. したがって平均忠実度 \bar{F}_{DN} は $\mathcal{E} = \mathcal{D}_\varepsilon$ を式 (5.3) に代入することで

$$\bar{F}_{\text{DN}} = \int_{\|\psi\rangle\|=1} \left((1-\varepsilon) \langle\psi|\psi\rangle \langle\psi|\psi\rangle + \varepsilon \frac{1}{d} \langle\psi|\psi\rangle \right) = 1 - \varepsilon \frac{d-1}{d} \quad (5.17)$$

と計算できる. 一方で「識別・再準備法」とは, 量子状態を始めに強く測定し, 得られた測定値から量子状態を推定し, それを再び準備する方法である. 具体的には始状態に対して d 個の状態 $|\phi_1\rangle, \dots, |\phi_d\rangle$ の内どれであるかを識別しようとする射影測定を行い, ノイズ過程

以後に測定された状態 $|\phi_i\rangle$ を用意するという制御法である。このときの平均忠実度 \bar{F}_{DR} の値は次の計算によって得られる。まず明らかに、この過程において最終的に得られる状態はノイズ \mathcal{N} に依存しない。したがって $\mathcal{C}_\omega \circ \mathcal{D}_\varepsilon \circ \mathcal{J}_\omega = \mathcal{C}_\omega \circ \mathcal{J}_\omega$ である。さらに式 (2.5) より任意の $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ の完全正規直交基底 $\{V_\mu\}_{0 \leq \mu \leq d^2-1}$ を用いて

$$\text{Tr}_{\text{HS}}[\mathcal{C}_\omega \circ \mathcal{J}_\omega] = \sum_{\mu} \text{Tr}[V_\mu^\dagger \mathcal{C}_\omega \circ \mathcal{J}_\omega(V_\mu)] = \text{Tr}[|\phi_\omega\rangle\langle\phi_\omega| |\phi_\omega\rangle\langle\phi_\omega|] = 1 \quad (5.18)$$

と書ける。ただしここで2つ目の等式では $\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega$ の定義および $\{V_\mu\}_\mu$ の完全性を用いた。これにより、補題1で $\mathcal{E} = \sum_{\omega} \mathcal{C}_\omega \circ \mathcal{J}_\omega$ とすれば、

$$\bar{F}_{\text{DR}} = \frac{2}{d+1} \quad (5.19)$$

を得る。なお、この測定は完全に未知の量子状態に対して最適な識別を実現することが知られている（付録G参照）。

以下では、我々の結果の意味するところについて議論する。まずノイズが非常に弱く $\varepsilon \sim 0$ であるときには状態は殆ど変化しないため、余計な操作をしない「何もしない法」が最適なのは自然である。またノイズが非常に強く $\varepsilon \sim 1$ であるときには状態は完全に壊されてしまうため、壊れる前に情報を取り出しておける「識別・再準備法」が最適なのも自然である。我々の結果は、それらの中間的な領域である $\varepsilon \neq 0, 1$ においても、これらの制御が最適であることを示している。最適だった「何もしない法」と「識別・再準備法」はいずれも古典的な系でも考えうる制御であり、量子測定の情報と擾乱のトレードオフ関係を極端な形で満たしている。「何もしない法」は何の量子的な測定も操作も行っておらず、「識別・再準備法」は事前制御において得られた古典的な情報のみを利用している。つまりこれらは情報を全く引き出さないか、情報を可能な限り引き出すかのいずれかである。一方で2状態保護問題の最適制御（節4.2）は「弱い測定」を含んでいたもので、この点で大きく異なる制御である。最適制御「何もしない法」と「識別・再準備法」は量子的というよりもむしろ古典的な制御であると理解できる。量子系において、これらの古典的な制御が他のあらゆる量子的な制御よりも良い結果を実現するという事は非自明であり、興味深い結果である。

以上により、事前制御を利用してもノイズの抑制が古典以上に不可能であるという事実は、量子系の可操作性の限界を制御理論の立場から明らかにしたものと理解できる。

5.3 2準位系での広いクラスのノイズの抑制：単位的ノイズ

ここでは次に、2準位系での全状態保護問題を単位的という性質を満たす広いクラスのノイズに対して解いた例を解説する。前節は一般の量子系を対象としていたが、ここでは量子系を2準位系に限定する代わりに depolarizing 型のノイズよりも広い単位的というクラスのノイズを考察の対象とする。

5.3.1 単位的ノイズ

単位的ノイズとは例えば、前節で扱った depolarizing 型のノイズや、2 状態保護問題で扱った dephasing 型のノイズ、また古典情報伝送路でのエラーを量子系に拡張した bit-flip 型のノイズのことである。特に dephasing 型ノイズはエネルギー固有状態のデコヒーレンス、T2 緩和を表すもので、実際の物理系でも重要な対象となりうる。

d 次元 Hilbert 空間によって記述される一般の量子系を考える。TPCP 写像 \mathcal{E} は性質

$$\mathcal{E}(1) = 1 \quad (5.20)$$

を満たすとき、単位的であるという。ただし上式の 1 は恒等演算子を表している。また同様に、単位的 TPCP 写像によって記述されるノイズを単位的ノイズと呼ぶことにする。単位的という性質は物理的には、完全混合状態 $1/d$ を保つ性質だと言える。単位的な TPCP 写像の持つ重要な性質は、その変換の下で von Neumann エントロピーが非減少である、すなわち

$$S(\mathcal{E}(\rho)) \geq S(\rho) \quad (5.21)$$

という性質である。したがって単位的なノイズは常に量子状態の乱雑さを増大させると解釈できる。上記の不等式はよく知られた相対エントロピーの非増加性から示される。相対エントロピーは $S(\rho||\sigma) := \text{Tr}[\rho \ln \rho - \rho \ln \sigma]$ であり、これは任意の TPCP 写像 \mathcal{E} の下で非増加、すなわち $S(\mathcal{E}(\rho)||\mathcal{E}(\sigma)) \leq S(\rho||\sigma)$ であることが知られている。ここで $\sigma = 1/d$ とすると、上の式は

$$S(\mathcal{E}(\rho)) - \text{Tr} \left[\mathcal{E}(\rho) \ln \mathcal{E} \left(\frac{1}{d} \right) \right] \leq S(\rho) - \text{Tr} \left[\rho \ln \frac{1}{d} \right] \quad (5.22)$$

となる。 \mathcal{E} が単位的であれば各辺の第 2 項は等しくなるため、求めたい式が得られる。

以下では、2 準位系での単位的な TPCP 写像の幾何学的な特徴付けを解説する。全状態保護問題を解く際にこの特徴付けは必要不可欠なものである。

まず、単位的な TPCP 写像は凸集合を成している^{*3}。すなわち任意の 2 つの単位的な TPCP 写像 $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2$ に対して、 $p\mathcal{E}_1 + (1-p)\mathcal{E}_2$ もまた単位的な TPCP 写像である。ユニタリ発展は単位的なので、単位演算子 $\sigma^0 = 1$ および Pauli 演算子 σ^i によるユニタリ発展を凸結合した TPCP 写像

$$\mathcal{N}(\rho) := \sum_{\mu=0}^3 \alpha^\mu \sigma^\mu \rho \sigma^\mu, \quad \sum_{\mu} \alpha^\mu = 1 \quad (5.23)$$

は単位的な TPCP 写像である。さらにこれにユニタリ演算子 U, V を作用させた

$$\mathcal{N}'(\rho) := V \mathcal{N}(U \rho U^\dagger) V^\dagger \quad (5.24)$$

^{*3} この事実は 2 準位系に限らず成立することを注意しておく。

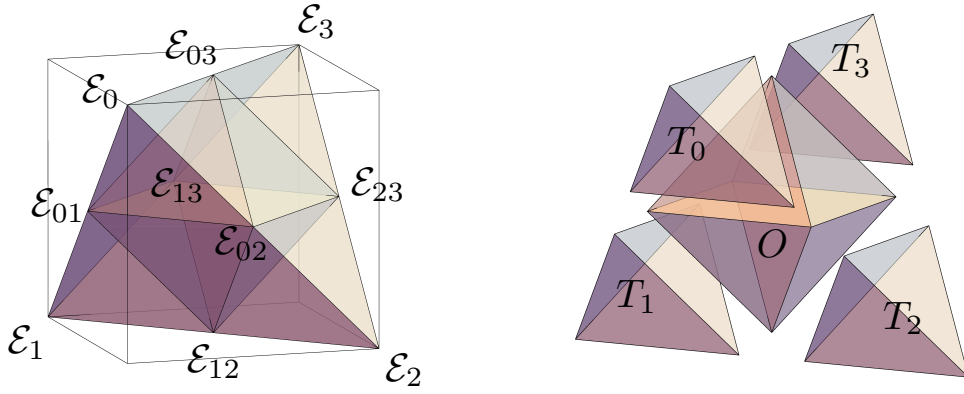


図 5.3 単位的ノイズのなす空間 [59]. 四面体 T は頂点として $\varepsilon_0(1, 1, 1), \varepsilon_1(1, -1, -1), \varepsilon_2(-1, 1, -1), \varepsilon_3(-1, -1, 1)$ を持つ. これらは全てユニタリ変換であり, 単位的ノイズは全てその凸結合で書かれる. また, 四面体 T は中心の 8 面体 O とその周りの 4 つの四面体 T_μ ($\mu = 0, 1, 2, 3$) に分解できる. 八面体 O の 6 頂点 $\varepsilon_{\mu\nu}$ ($\mu \neq \nu$) は T の各辺の中点 $(\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1)$ である. この分解は最適制御を示す際に重要となる. Reprinted figure from [59, DOI: 10.1103/PhysRevA.96.022325]. Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2017 by H. Wakamura, R. Kawakubo, and T. Koike.

も単位的な TPCP 写像となる. 逆に, 任意の TPCP 写像は適当な α^μ, U, V を設定することによって式 (5.24) のように表現できることが知られている [76]. したがってあらゆる単位的な TPCP 写像は, ユニタリ演算子 U, V の自由度を除けば, 式 (5.23) を通して 4 次元ベクトル $(\alpha^0, \alpha^1, \alpha^2, \alpha^3)$ によって記述されることになる. さらに条件 $\sum_\mu \alpha^\mu = 1$ を用いれば, 4 次元ベクトル $(\alpha^0, \alpha^1, \alpha^2, \alpha^3)$ は 3 次元ベクトル (d^1, d^2, d^3) によって

$$\begin{bmatrix} d^1 \\ d^2 \\ d^3 \end{bmatrix} = \alpha^0 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \alpha^1 \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix} + \alpha^2 \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix} + \alpha^3 \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (5.25)$$

と書ける. ここで \mathcal{N} は d^1, d^2, d^3 によって

$$\mathcal{N}(\sigma^i) = d^i \sigma^i \quad (5.26)$$

と表示できる (i について和は取っていない). 3 次元空間上で, ベクトル (d^1, d^2, d^3) は四面体 T を構成する (図 5.3 参照). したがって, 式 (5.23) によって表示される TPCP 写像は式 (5.26) を通して四面体 T 上の 1 点によって表現されることになる.

以下では後の便宜のため, 四面体 T の点および内部領域に名前を付けておく. この四面体の 4 つの頂点 $(1, 1, 1), (1, -1, -1), (-1, 1, -1), (-1, -1, 1)$ をそれぞれ $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ とし, $\varepsilon_{\mu\nu}$ ($\mu \neq \nu$) を ε_μ と ε_ν の中点であるとする. また 6 つの中点 $\varepsilon_{\mu\nu}$ を頂点とする 8 面体を O とすると, O を取り除いた T は 4 つの小さな四面体となる. これらの内 ε_μ を含む四面体を T_μ と名付けることによって, $T = O \cup T_0 \cup T_1 \cup T_2 \cup T_3$ と書ける.

なお実際には, 式 (5.23) の表示を持つ TPCP 写像は四面体 T 上の複数の点へ対応することに注意されたい. なぜなら適当なユニタリ演算子 (U, V) を用いて式 (5.24) のように

関連付く 2 つの TPCP 写像 $\mathcal{N}, \mathcal{N}'$ は四面体 T の同一の点を表すからである。したがって (U, V) を適当に選べば四面体 T からそれ自身への非自明な自己同型写像を構成できる。実際 $(U, V) = (1, \sigma^3)$ とすれば、 $(d^1, d^2, d^3) \mapsto (-d^1, -d^2, d^3)$ と変換される。これは d^3 軸回りの π 回転であり、頂点を $(\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3) \mapsto (\varepsilon_3, \varepsilon_2, \varepsilon_1, \varepsilon_0)$ とする変換である。また $(U, V) = (e^{i\pi\sigma^i/4}, e^{-i\pi\sigma^i/4})$ とすれば、 $(d^1, d^2, d^3) \mapsto (d^2, d^1, d^3)$ と変換される。これは $\varepsilon_0, \varepsilon_3, \varepsilon_{12}$ を通る面についての反転であり、頂点を $(\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3) \mapsto (\varepsilon_0, \varepsilon_2, \varepsilon_1, \varepsilon_3)$ とする変換である。このように $1 \leq i \leq 3$ について $(U, V) = (1, \sigma^i), (e^{i\pi\sigma^i/4}, e^{-i\pi\sigma^i/4})$ とした変換およびこの組み合わせによって 4! 通りの T_μ をそれぞれ入れ替える変換が得られる。以上より T は通常の正四面体の持つ対称性を同様に持ち、各 T_μ は本質的に同等である。

5.3.2 単位的ノイズに対する最適制御

さて、2 準位系における単位的ノイズに対する最適な事前事後制御を与える。これにはノイズ \mathcal{N} を式 (5.23) の形で表されるもの、すなわち四面体 T 上の点によって表されるものに限定すれば充分である。一般の単位的ノイズ \mathcal{N}' はユニタリ演算子 U, V を用いて式 (5.24) のように表示されるが、その \mathcal{N}' に対して最適な事前事後制御 $\{(\mathcal{J}'_\omega, \mathcal{C}'_\omega)\}_\omega$ は、 \mathcal{N} に対して最適な事前事後制御 $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega)\}_\omega$ を用いて

$$\mathcal{J}'_\omega(\rho) = U^\dagger \mathcal{J}_\omega(\rho) U,$$

$$\mathcal{C}'_\omega(\rho) = \mathcal{C}_\omega(V^\dagger \rho V)$$

と書ける。したがって、この限定によって一般性は失われない。

考える Hilbert 空間を 2 次元であるとして、ノイズ \mathcal{N} を四面体 T 上の一点で表される単位的ノイズとする。このとき最適な事前事後制御 $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega)\}_{1 \leq \omega \leq d}$ は次のように与えられる。

- (i) $\mathcal{N} \in T_\mu (\mu = 0, 1, 2, 3)$ のとき、最適制御は「無測定法」 $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega)\}_{\omega=1}$ である。ただし $\mathcal{J}_1, \mathcal{C}_1$ は

$$\mathcal{J}_1 = \text{id}, \tag{5.27}$$

$$\mathcal{C}_1(\rho) = U \rho U^\dagger \tag{5.28}$$

によって与えられる。また達成される平均忠実度は

$$\bar{F}_{\text{NM}} = \frac{1}{2} + \frac{|d^1| + |d^2| + |d^3|}{6} \tag{5.29}$$

である。

- (ii) $\mathcal{N} \in O$ のとき、最適制御は「識別・再準備法」 $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega)\}_{1 \leq \omega \leq d}$ である。ただし $\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega$ は式 (5.14), (5.15) で定義されたものと同じである。また達成される平均忠実度は $\bar{F}_{\text{DR}} = 2/3$ である。

この定理の証明は節 5.4 で与えることにして、ここではその意味について解説することにする。

結果に現れる「無測定法」は文字通り測定を含まずに、ノイズの可逆な部分の逆変換（ユニタリ変換）のみを作用させる制御である。これは前節の結果に現れた「何もしない法」を拡張した制御法であると言える。実際 $\mu = 0$ の場合これは完全に「何もしない法」と同じであり、平均忠実度 $\bar{F}_{\text{DN}} = \bar{F}_{\text{NM}}$ は

$$\bar{F}_{\text{DN}} = \int \frac{dS}{4\pi} \text{Tr} \left[\frac{1 + \sum_i x^i \sigma^i}{2} \frac{1 + \sum_i d^i x^i \sigma^i}{2} \right] = \frac{1}{2} + \frac{\sum_i d^i}{6} \quad (5.30)$$

と計算できる。ただしここで \boldsymbol{x} は入力状態を表す Bloch ベクトルで、 dS は 2 次元球面の単位体積要素である。一般の \bar{F}_{NM} も同様に計算可能である。「識別・再準備法」は前節の結果にも現れたものであり、式 (5.19) で $d = 2$ とすれば $\bar{F}_{\text{DR}} = 2/3$ を得る。

ノイズ \mathcal{N} が T_μ に属している場合と O に属している場合の大きな違いは、ノイズの強さにあると理解できる。実際四面体の各頂点 ε_μ に対応するのはユニタリ変換である一方、四面体の中心に対応するのは全ての入力状態を完全混合状態に写す写像である。各頂点は状態を全く壊さないのに対して、中心は状態を完全に壊してしまう。したがって $\mathcal{N} \in T_\mu$ はノイズが弱いことを、 $\mathcal{N} \in O$ はノイズが強いことをそれぞれ表していると考えられる。

この理解の下では、上の定理は前節の定理と本質的に同じ結果であると理解できる。2 準位系に限定はしたものの、dephasing 型ノイズのような応用上重要なノイズも含む広いクラスのノイズに対して常に古典的な制御が最適になると示せた。

5.4 古典的なノイズへの最適制御とノイズの持つ凸性

ここでは先に紹介した結果を証明する際に鍵となる、全状態保護問題の 2 つの一般的性質について述べる。それは端的に述べるならば (a) 1 つの制御法によって最適に制御されるノイズが凸性を持つことと、(b) QCQ ノイズと呼ばれるクラスのノイズが既に述べた「識別・再準備法」によって最適に制御されることである。

まず (a) を精確に述べるならば、次のようになる：

性質 (a) 単一の事前事後制御 $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega)\}_{\omega \in \Omega}$ によって最適に抑制される全てのノイズ \mathcal{N} は 1 つの凸空間を成す。

これを証明するために、2 つの一般に異なるノイズ $\mathcal{N}_1, \mathcal{N}_2$ に対して全状態を保護する最適制御が $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega)\}_{\omega \in \Omega}$ であるとする。性質 (a) を示すには、2 つのノイズの凸結合 $\mathcal{N} = p\mathcal{N}_1 + (1-p)\mathcal{N}_2$ (ただし $0 \leq p \leq 1$) に対する最適制御がまた $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega)\}_{\omega \in \Omega}$ であ

ることを示せば良い。任意の事前事後制御 $\{(\mathcal{J}'_\omega, \mathcal{C}'_\omega)\}_{\omega \in \Omega}$ に対して、

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{\text{HS}} [\mathcal{J}'_\omega \circ \mathcal{N} \circ \mathcal{C}'_\omega] &= p \text{Tr}_{\text{HS}} [\mathcal{J}'_\omega \circ \mathcal{N}_1 \circ \mathcal{C}'_\omega] + (1-p) \text{Tr}_{\text{HS}} [\mathcal{J}'_\omega \circ \mathcal{N}_2 \circ \mathcal{C}'_\omega] \\ &\leq p \text{Tr}_{\text{HS}} [\mathcal{J}_\omega \circ \mathcal{N}_1 \circ \mathcal{C}_\omega] + (1-p) \text{Tr}_{\text{HS}} [\mathcal{J}_\omega \circ \mathcal{N}_2 \circ \mathcal{C}_\omega] \\ &= \text{Tr}_{\text{HS}} [\mathcal{J}_\omega \circ \mathcal{N} \circ \mathcal{C}_\omega] \end{aligned} \quad (5.31)$$

であるので、事前事後制御 $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega)\}_{\omega \in \Omega}$ は任意の $\{(\mathcal{J}'_\omega, \mathcal{C}'_\omega)\}_{\omega \in \Omega}$ よりも良い性能を示す。したがってこれが最適制御である。

性質 (b) について述べる前に、QCQ ノイズを定義する。 d 次元 Hilbert 空間における TPCP 写像 \mathcal{F} を適当な量子状態の族 $\{\rho_k\}$ と POVM $\{M_k\}$ によって

$$\mathcal{F}(\rho) = \sum_k \rho_k \text{Tr}[\rho M_k] \quad (5.32)$$

と定義する。これは物理的には、入力状態 ρ を POVM $\{M_k\}$ によって測定し、その測定結果 k に応じた状態 ρ_k を用意するという操作を表している。このように書ける TPCP 写像を、QCQ チャンネル (quantum-classical-quantum channel) と呼ぶ。同様に、QCQ であるノイズ \mathcal{N} を QCQ ノイズと呼ぶ。

さて、(b) を精確に述べるならば、次のようになる：

性質 (b) 任意の QCQ ノイズに対して全状態を最適に保護する制御は「識別・再準備法」(5.14), (5.15) である。

以下ではこれを示す。まずノイズ \mathcal{N} が QCQ のとき、任意の事前事後制御 $\{\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega\}_\omega$ に対して式 (5.4) で定義される TPCP 写像 $\mathcal{E} = \sum_\omega \mathcal{C}_\omega \circ \mathcal{N} \circ \mathcal{J}_\omega$ もまた QCQ であることを確認する。 \mathcal{N} が式 (5.32) の形で書けるとすると、 \mathcal{E} は

$$\mathcal{E}(\rho) = \sum_{\omega, k} \mathcal{C}_\omega(\rho_k) \text{Tr}[\rho \mathcal{J}_\omega^*(M_k)] \quad (5.33)$$

となる。ただし \mathcal{J}_ω^* は CP 写像 \mathcal{J}_ω の随伴 (2.4) である。ここで $\{\mathcal{J}_\omega^*(M_k)\}_{\omega, k}$ は POVM であり、 $\mathcal{C}_\omega(\rho_k)$ は量子状態であるから、 \mathcal{E} は式 (5.32) のように書けている。したがって QCQ チャンネルである。 QCQ チャンネル \mathcal{E} に対しての平均忠実度 \bar{F} (5.5) の最大の値は既に知られており、

$$\bar{F} = \frac{2}{d+1} \quad (5.34)$$

である [77]。これは実際に「識別・再準備法」によって達成できる値であるから、「識別・再準備法」は最適制御の 1 つである。

以上により、我々は 2 つの重要な性質を得た。そして節 5.2, 5.3 の結果の証明に際して、性質 (a) および (b) は非常に強力である。いずれの結果に対しても、我々は性質 (a) によって考えるノイズ全体をそれに対する最適制御によって分割し、性質 (b) によってその最適制御を見つけないという流れで証明を行う。以下では、実際に証明を行う。

5.4.1 一般量子系での depolarizing 型ノイズに対する最適性の証明

Depolarizing 型ノイズ \mathcal{D}_ε に対する最適制御は (i) $\varepsilon \leq d/(d+1)$ の場合「何もしない法」であり、(ii) $\varepsilon \geq d/(d+1)$ の場合「識別・再準備法」であった。

まず、(ii) の場合について考える。性質 (b) を用いるために、まずノイズ \mathcal{D}_ε が QCQ であることを示す。一般に TPCP 写像 \mathcal{E} が QCQ 性であることは、任意の合成系上への自明な拡大 $\text{id} \otimes \mathcal{E}$ が完全量子もつれ状態 $|\Psi\rangle := (1/\sqrt{d}) \sum_i |ii\rangle$ を分離可能な (separable) 状態*4 へと写すことと同値である。今の場合、この像は

$$(\text{id} \otimes \mathcal{D}_\varepsilon)(|\Psi\rangle\langle\Psi|) = (1 - \varepsilon)|\Psi\rangle\langle\Psi| + \varepsilon \frac{1}{d^2} \quad (5.36)$$

と書ける。右辺の量子状態は、 $\varepsilon \geq d/(d+1)$ のときにのみ分離可能であることが知られている (文献 [78] の式 (41) を見よ)。したがって \mathcal{D}_ε は $\varepsilon \geq d/(d+1)$ の領域でのみ QCQ であり、性質 (b) により「識別・再準備法」が最適制御となる。

次に (i) について。「何もしない法」によれば平均忠実度は

$$\bar{F}_{\text{DN}} = 1 - \varepsilon + \frac{\varepsilon}{d} \quad (5.37)$$

である。まず、 $\varepsilon = 0$ のときには明らかに $\bar{F}_{\text{DN}} = 1$ なので「何もしない法」が最適である。そして $\varepsilon = d/(d+1)$ のときには、 $\bar{F}_{\text{DN}} = 2/(d+1)$ である。一方で (ii) の結果より、 $\varepsilon = d/(d+1)$ で最適な「識別・再準備法」による平均忠実度は $\bar{F}_{\text{max}} = 2/(d+1)$ である。よって $\bar{F}_{\text{DN}} = \bar{F}_{\text{max}}$ より、「何もしない法」も $\varepsilon = d/(d+1)$ での最適制御であることが分かる。したがって $\varepsilon = 0, d/(d+1)$ の 2 点で「何もしない法」が最適となる。一般の $\varepsilon \leq d/(d+1)$ に対する depolarizing 型ノイズ \mathcal{D}_ε は、 $\mathcal{D}_0, \mathcal{D}_{d/(d+1)}$ の凸結合によって与えられるので、性質 (a) より「何もしない法」が常に最適制御となる。

以上より、一般の量子系の depolarizing 型ノイズに対する最適制御が「何もしない法」と「識別・再準備法」であることが示された。

5.4.2 2 準位系の単位的ノイズに対する最適性の証明

続いて、図 5.3 で表される四面体の一点に対応する単位的ノイズ \mathcal{N} を考える。この \mathcal{N} に対する最適制御は、(i) $\mathcal{N} \in T_\mu (\mu = 0, 1, 2, 3)$ の場合「無測定法」であり、(ii) $\mathcal{N} \in O$ の場合「識別・再準備法」であった。

*4 ここで、ある量子状態 Ω が分離可能であるとは、適当な量子状態 ρ_i, σ_i および確率 p_i を用いて

$$\Omega = \sum_i p_i \rho_i \otimes \sigma_i \quad (5.35)$$

と書けるような状態を指している。これは物理的には、量子もつれを持たないような量子状態である。

まず、四面体の各辺の中点 \mathcal{E}_{ij} に対する最適制御を考える。初めに $\mathcal{N} = \mathcal{E}_{03}$ を取ると、これは dephasing 型ノイズ

$$\mathcal{N}(\rho) = \frac{1}{2}(\rho + \sigma^3 \rho \sigma^3) \quad (5.38)$$

である。まずこれが QCQ であること、すなわち、ノイズ \mathcal{N} は測定を表す POVM $\{M_k\}_k$ と量子状態 ρ_k によって式 (5.32) のように書けることを示す。そのために σ^3 の固有値 $+1, -1$ に対応する固有空間への射影演算子 $P_0 := P_1$ を定義する。これらを用いれば、 $1 = P_0 + P_1$ および $\sigma^3 = P_0 - P_1$ となる。これを式 (5.38) に代入すれば、

$$\mathcal{N}(\rho) = \frac{1}{2}[(P_0 + P_1)\rho(P_0 + P_1) + (P_0 - P_1)\rho(P_0 - P_1)] \quad (5.39)$$

$$= P_0 \rho P_0 + P_1 \rho P_1 \quad (5.40)$$

を得る。したがってこれは式 (5.32) に $M_k := P_k$, $\rho_k = P_k$ ($k = 0, 1$) を代入した式に他ならない。 \mathcal{N} は CQC ノイズなので「識別・再準備法」が最適制御であり、その平均忠実度は $2/3$ である。一方、この平均忠実度は「何もしない法」によっても達成できる*⁵。以上により、 \mathcal{E}_{03} に対応するノイズは「識別・再準備法」と「何もしない法」の両方が最適制御となる。これは $\mathcal{E}_{01}, \mathcal{E}_{02}$ についても同様に示せる。 \mathcal{E}_{ij} ($i \neq j$) については

$$\mathcal{E}_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma^i \rho \sigma^i + \sigma^j \rho \sigma^j) \quad (5.42)$$

と書けるので、 $\mathcal{A}_i(\rho) := \sigma^i \rho \sigma^i$ を用いて $\mathcal{E}_{ij} = \sum_k |\varepsilon_{ijk}| \mathcal{A}_i \circ \mathcal{E}_{0k}$ と表せる。ただし \circ は写像の合成を表す。我々はノイズ \mathcal{E}_{0k} に対する最適制御 $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega)\}_\omega$ が「識別・再準備法」および「何もしない法」ということを知っているので、 \mathcal{E}_{ij} に対する最適制御は事後制御の前に \mathcal{A}_i を挟んだ $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega \circ \mathcal{A}_i)\}_\omega$ であることが分かる。したがって、四面体の各辺の中点 \mathcal{E}_{ij} ($i \neq j$) に対して最適制御は「識別・再準備法」および「無測定法」となる*⁶。

さて、上記を踏まえて節 5.3 の結果を証明する。まず (i) の $\mathcal{N} \in T_0$ の場合について考える。 $\mathcal{E}_0 = \text{id}$ であるので、 \mathcal{E}_0 に対して最適なのは明らかに「何もしない法」 $\{(\text{id}, \text{id})\}$ であり、そのときの平均忠実度は $\bar{F} = 1$ である。そして既に示したように、「何もしない法」は \mathcal{E}_{0i} ($i = 1, 2, 3$) に対しても最適である。したがって性質 (a) により、「何もしない法」 $\{(\text{id}, \text{id})\}$ は 4 つの頂点 $\mathcal{E}_0, \mathcal{E}_{01}, \mathcal{E}_{02}, \mathcal{E}_{03}$ の凸包 T_0 中の任意のノイズに対して最適となる。 $\mathcal{N} \in T_i$ についても同様である。 \mathcal{E}_i と \mathcal{E}_{ij} ($j \neq i$) に対する最適制御は「無測定法」 $\{(\text{id}, \mathcal{A}_i)\}$

*⁵ これは、平均忠実度の式 (5.3) に $\text{Tr}_{\text{HS}} \mathcal{N}$ の計算結果

$$\text{Tr}_{\text{HS}} \mathcal{N} = \frac{1}{2} \sum_{\mu} \text{Tr} [\sigma^{\mu} \mathcal{N}(\sigma^{\mu})] = \frac{1}{2}(2 + 2) = 2 \quad (5.41)$$

を代入すれば良い。

*⁶ 元の制御 $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega)\}_\omega$ が「識別・再準備法」である場合には制御 $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega \circ \mathcal{A}_i)\}_\omega$ も「識別・再準備法」である。元の制御 $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega)\}_\omega$ が「何もしない法」である場合には制御 $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega \circ \mathcal{A}_i)\}_\omega$ は $\{(\text{id}, \mathcal{A}_i)\}$ となり、「無測定法」である。

であり、性質 (a) を用いることによって任意の $N \in T_i$ に対して「無測定法」 $\{(\text{id}, \mathcal{A}_i)\}$ が最適制御となることが示される。

次に (ii) $N \in O$ の場合には、我々は既に 6 つの頂点 $\mathcal{E}_{\mu\nu}$ ($\mu \neq \nu$) に対して「識別・再準備法」 $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega)\}_\omega$ が最適となることを示している。したがって性質 (a) により、「識別・再準備法」 $\{(\mathcal{J}_\omega, \mathcal{C}_\omega)\}_\omega$ は、6 頂点 $\mathcal{E}_{\mu\nu}$ ($\mu \neq \nu$) の凸包 O 中の任意のノイズに対して最適となる。

以上より、2 準位系の単位的ノイズに対する最適制御は「無測定法」と「識別・再準備法」であることが示された。

5.5 非単位的ノイズに対する効果的な量子的制御の存在

これまでに我々は、一般の量子系での depolarizing 型ノイズと 2 準位系での単位的ノイズを対象として最適制御を導いた。ここで、depolarizing 型ノイズもまた単位的ノイズである。したがって我々の扱ったノイズは全て単位的であり、それらに対して古典的な制御が最適なことを示している。一方で単位的でないノイズ、すなわち非単位的ノイズに対しては何も述べていない。以下では重要な非単位的ノイズの 1 つである amplitude damping 型ノイズを扱った先行研究 [24] を取り上げ、そこで提案された制御と古典的な制御の性能を比較する。これらを通して、ノイズの持つ単位的という性質と最適制御の量子性の関連を見る。

まず、amplitude damping 型ノイズについて説明する。これは、次のような TPCP 写像で記述されるノイズ

$$\mathcal{N}_r^{\text{amp}}(\rho) := E_1 \rho E_1^\dagger + E_2 \rho E_2^\dagger \quad (5.43)$$

である。ただし E_1, E_2 は、 $0 \leq r \leq 1$ を用いて

$$E_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-r} \end{pmatrix}, \quad E_2 = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{r} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.44)$$

と定義される行列である。行列 E_1, E_2 を量子状態 $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ に作用させると、

$$E_1 |\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta\sqrt{1-r}|1\rangle, \quad (5.45)$$

$$E_2 |\psi\rangle = \beta\sqrt{r}|0\rangle \quad (5.46)$$

であるから、行列 E_1, E_2 は $|1\rangle$ の成分を散逸させて $|0\rangle$ へと変化させるような作用を持っていることが分かる (図 5.4 参照)。実際に amplitude damping 型ノイズは、自然放出によって励起状態 $|1\rangle$ が基底状態 $|0\rangle$ へ緩和する過程を表している (付録 I 参照)。

Wang *et al.* の全状態保護の研究 [24] では、この amplitude damping 型ノイズを対象としていた。ただし、彼らは主に事後選択 (postselection) を許した事前事後制御モデルを扱っていたことに注意されたい。すなわち我々の事前事後制御モデルにおける事後制御として 2 値測定を行い、その片方の測定値が得られたときのみを考えるということである。もう

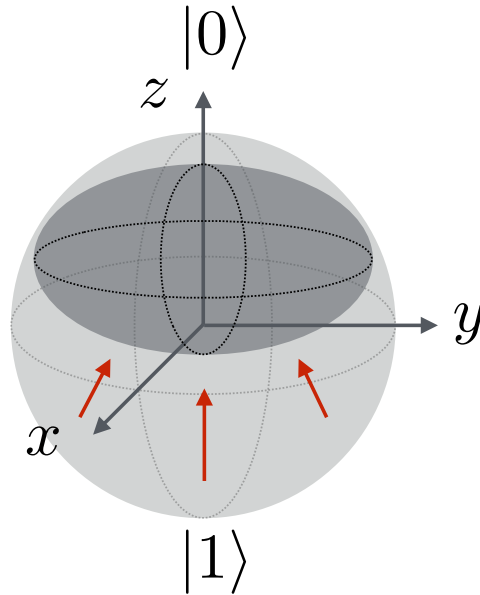


図 5.4 Amplitude damping 型ノイズによる Bloch 球の像. 全ての点は北極 (状態ベクトル $|0\rangle$) に近づくように推移する.

片方の測定値が得られたときには、その制御は無かったことにして捨てるのである。これは我々の目指すべき全状態保護ではない^{*7}が、文献に示された数値計算結果の一部には、事後選択がない場合も含まれている。その中で、「識別・再準備法」および「無測定法」で得られる平均忠実度よりも大きな平均忠実度を実現する制御の存在が示されている^{*8}。以下では Wang *et al.* [24] で提案された制御法を、事後選択をしない場合に限って紹介する。まず演算子 M_1, M_2 を $p \in [0, \frac{1}{2}]$ に対して

$$M_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{p} & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p} \end{pmatrix}, \quad M_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{p} & 0 \\ 0 & \sqrt{1-p} \end{pmatrix} \quad (5.47)$$

と定め、これを用いて事前制御 $\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2$ を

$$\mathcal{J}_1(\rho) := M_1 \rho M_1^\dagger, \quad (5.48)$$

$$\mathcal{J}_2(\rho) := \sigma^x M_2 \rho M_2^\dagger \sigma^x \quad (5.49)$$

と定義する。また、事後制御 $\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2$ をそれぞれ

$$\mathcal{C}_1(\rho) := \rho, \quad (5.50)$$

$$\mathcal{C}_2(\rho) := \sigma^x \rho \sigma^x \quad (5.51)$$

と定める。これらによって定められた事前事後制御を amplitude damping 型ノイズ (5.43) の前後に作用して状態保護を行うのが、Wang *et al.* [24] による制御法である。この制御法

^{*7} このような制御は、2 準位系の全量子状態の中で保護しやすい量子状態と保護しにくい量子状態がある場合に、その保護しやすい量子状態のみを取ることによって平均忠実度をかさ増しできてしまう。ノイズから守りやすい状態だけを保護するというのは、そもそもの全状態保護の動機から外れたものになってしまう。

^{*8} なお、これは文献 [24] の図 4 から読み取れる。

は、弱い測定を用いた量子的な制御法であると言える。行列 M_1, M_2 は $p = 0$ のときにそれぞれ射影演算子 $|0\rangle\langle 0|, |1\rangle\langle 1|$ となり、 $p = 1/2$ のときにはどちらも単位行列に比例する。したがって CP インストルメント $\{J_i\}_{i=1}^2$ は、 $p = 0$ で $|0\rangle, |1\rangle$ を識別せんとする射影測定を、 $p = 1/2$ で何も測定を行わない状態変化を表している。そして一般の $0 < p < 1/2$ に対しては、その中間的な弱い測定による状態変化を表している。Wang *et al.* [24] による制御法を用いた結果として得られる平均忠実度は、その表式 (5.7) を用いることで

$$\bar{F}_{\text{WM}} = \frac{4 + 4\sqrt{1-r}\sqrt{p}\sqrt{1-p} - 2r(1-p)}{6} \quad (5.52)$$

と計算できる。ここで $p = 3/4$ とすれば、 $\bar{F}_{\text{WM}} = (4 + \sqrt{3}\sqrt{1-r} - r/2)/6$ である。図 5.5 を見ると分かるように、この平均忠実度はある領域で「何もしない法」および「識別・再準備法」による平均忠実度を上回っている。さらに、 $p = 3/4$ としたときの事前制御 (5.49) は弱い測定を表しているので、この領域では古典的な制御が最適ではないことが分かる。以上より、非単位的ノイズの代表である 2 準位系の amplitude damping 型ノイズに対しては少なくとも、古典的制御が最適でない領域が存在することが分かる。

我々の結果と Wang *et al.* [24] の結果を照らし合わせると、非自明な量子的制御が最適となるかならないかは、ノイズが単位的であるか非単位的であるかによって決定されることが分かる。ここでノイズが非単位的であるということは、ノイズにある種の「偏り」が存在することを意味している。実際 amplitude damping 型ノイズの像は図 5.4 のように北極側に偏っており、Wang *et al.* [24] の制御法はその偏りを利用することで状態保護を実現している*9。一方で dephasing 型ノイズ (図 4.3) や depolarizing 型ノイズ (図 5.2) に代表される単位的ノイズではそのような偏りは存在しない。そして我々が示したように、少なくとも 2 準位系ではどのような単位的ノイズに対してもそれを古典的な制御以上に保護する量子的な制御は存在しない。さらに一般の量子系においても、単位的ノイズを代表する depolarizing 型ノイズについて同様の事実が示されている。以上から我々の結果は、古典的な制御以上に状態を保護可能であるかという問に対して、それを決めるのはノイズの持つ単位性であるという答えを提供するものである。

*9 図 5.4 を見ると分かるように、amplitude damping 型ノイズによる状態変化では Bloch 球の南半球の状態は大きく変化し、一方で北半球の状態はあまり変化しない。Wang *et al.* [24] の制御法は、まず事前制御 (5.48), (5.49) によって量子状態が ($|0\rangle$ に近い) 北半球と ($|1\rangle$ に近い) 南半球のどちらに存在するのかを弱く測定する。量子状態が北半球にある場合にはそのまま放っておき、南半球にある場合にはノイズ過程以前の回転 (σ^x によるユニタリ変換) によってよりノイズの影響が小さい北半球に持っていく。前者の場合にはノイズ過程以後も放っておき、後者の場合にはノイズ過程以後に再び回転 (σ^x によるユニタリ変換) によって量子状態を元の北半球に戻しておく。以上より、この制御法は量子状態をよりノイズの弱い領域へと逃しておくことで、古典的な制御法よりも上手く状態を保護できていることが分かる。

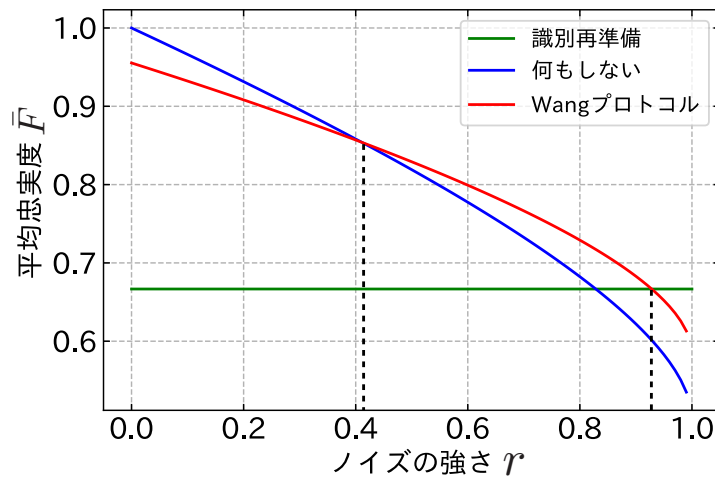


図 5.5 Wang *et al.* [24] による事前事後制御法および「何もしない法」, 「識別・再準備法」によって達成される平均忠実度のグラフ. 横軸が amplitude damping 型ノイズの強さであり, 縦軸が平均忠実度の値である. 図を見ると分かるように, $r = 0.4$ 付近から $r = 0.9$ 付近までの間は「何もしない法」, 「識別・再準備法」よりも Wang *et al.* による制御法の方が良い性能を示す.

5.6 関連研究との比較

これまで, 我々は量子状態を保護するための制御を事前事後制御 (節 5.1) という単純な枠組みの中で, 特に量子系の全状態を保護するという問題について議論してきた. この枠組み自体は非常に一般的なものであり, ノイズ抑制の手段として有力な量子誤り訂正 [79, 80] などもこの枠組みの中で議論できる. 量子誤り訂正は, 例えば 1 つの 2 準位系の状態を 3 つの 2 準位系 (8 次元系) からなる合成系の 2 次元部分空間に埋め込むことによって状態保護を実現する方法である. これは事前事後制御の枠組みの中では, 8 次元 Hilbert 空間の中の 2 次元部分空間を一様に保護する問題として定式化すればよい^{*10}. これに対して我々は, 量子状態の一部ではなく全体を保護するような制御を考察してきた. 量子系全体を完全に保護できないのは明らかであるが, それでも全状態保護がどの程度まで可能なのかということは興味の対象である. これは例えば, 量子複製不可能定理 [2-4] から不完全複製の研究 [5, 6] が派生したのと同じことである^{*11}. したがって我々の研究は, 量子誤り訂正のような状態保護の応用研究の基礎を再確認し, 掘り下げる研究であると位置付けられる. 原理的に可能なあらゆる制御の中から最適なものを見出すことによって, 量子状態を一様に保護すること

^{*10} 量子誤り訂正では, 高次元系への埋め込み (符号化; encode) と元の 2 準位系へ戻す操作 (復号; decode) はどちらも TPCP 写像によって書き表される. したがって事前事後制御における事前制御は測定を含まないものを用いればよい. なお, この枠組みの中で最適な符号化と復号を見つけようという研究も例えば文献 [81, 82] によってなされている.

^{*11} 量子複製不可能定理は未知の量子状態の複製が不可能であることを述べているが, それがどの程度までは可能なのかということについては述べていない. それを明らかにしたのが不完全複製の研究である.

がどこまで可能なのかという限界を明らかにしている。

他にもノイズ抑制を目指した応用的研究は多様に存在するが、状況設定や目的の違いから比較することは難しい*12。また我々の研究の意義はノイズ抑制という応用研究を基礎的な観点から見つめ直すという点にあるので、応用研究とその性能について比較するのもあまり意味をなさないと考えられる。一方で量子測定の情報と擾乱のトレードオフ関係について取り上げた基礎研究との比較は意味がある。その基礎研究の代表的な例は、有名な Heisenberg の思考実験に倣った誤差と擾乱の不確定性関係の研究 [11–14] である。これは測定によって得られる情報を被測定物理量の値の誤差によって、与える擾乱をその共役な物理量の値の変化によって、それぞれ評価した研究である。情報と擾乱をどのように評価するかについては任意性があるので、この他にも様々な尺度による情報と擾乱のトレードオフ関係式が様々な存在する (例えば [86–89] 参照)。これらの研究とは違い、我々の研究は情報と擾乱それ自体の関係式を与えるものではない。むしろトレードオフ関係が存在することを前提として、その下で何ができるのかを模索するような研究である。状態保護という目的設定の下では、情報と擾乱の間にジレンマが生じる。つまり測定が強すぎれば状態は壊れてしまい、測定が弱すぎれば状態を守るための情報を得られないということである。このために、最適な状態保護において量子測定がどのような役割を果たすのか議論することは意味がある。本論文では情報と擾乱のトレードオフ関係を非自明に満たす、真に量子的な制御が最適となる例を示すことはしなかったが、代わりに幅広いクラスのノイズに対してそのような制御が最適とはなり得ないことを厳密に示せた。特に、その鍵となる特徴がノイズの単位性という性質にあることを突き止めている。すなわち、我々の結果はその対偶として、真に量子的な制御が状態保護に有用となり得るのは非単位的ノイズに対してのみであることを示している。したがって、状態保護制御の中での量子測定の役割がどのように決まるかが明らかにされた。

*12 状態保護を目指した研究としては、デコヒーレンスのない部分空間 (decoherence-free subspace) [83] やダイナミカルデカップリング (dynamical decoupling) [84] などがよく知られている。また近年では、特に量子計算の文脈においてエラーミティゲーション (error mitigation) [85] と呼ばれる手法も注目を集めている。デコヒーレンスのない部分空間とはノイズの影響を全く受けない部分空間を指しており、その部分空間に量子状態を埋め込むことで状態保護が実現できる。これは量子誤り訂正と同じく、量子系の一部のみを保護する手法である。ダイナミカルデカップリングはノイズ源である環境系を含めた全系が孤立量子系として扱えるときの手法であり、状況設定が我々とは異なっている。エラーミティゲーションは量子誤り訂正のような符号化を行わないという意味では我々と同じ立場を取っている手法ではあるが、量子状態そのものを保護するための手法というよりはむしろ、ノイズを含む現実の量子回路の出力結果を用いて理想的なノイズを含まない量子回路の出力結果を推定するための手法である。ここで量子回路の出力結果とはある物理量 A の期待値を指しており、我々の定式化とは状況設定も目的も異なっている。

第 6 章

量子系における時間最適制御の一般論

本論文の 2 つめの主題は、量子系の状態を可能な限り早く遷移させる制御、時間最適制御である。本章では、量子系での時間最適制御の一般論を構築する。量子系のユニタリ発展を可能な限り短い時間で実現するための理論は、基礎的に興味深いだけでなく応用上も有用である。まず量子系の時間最適制御を見つける問題を、目的とするユニタリ発展と実現可能なハミルトニアン組によって定式化する。そして先行研究である量子最速降下曲線を紹介する。これは実現可能なハミルトニアンが等式条件によって制約されている場合に適用可能な、Euler の古典的変分法に基づく理論である。その導出と有用性について議論した後、より一般的な時間最適制御理論を Pontryagin の最大値原理に基づいて定式化する。この理論は、ハミルトニアンが等式条件だけでなく不等式条件によっても制約されているような状況にも適用可能である。その導出について確認した後、量子最速降下曲線との関連性についても議論する。

6.1 量子系における時間最適制御問題

我々は量子系において、望ましいユニタリ発展を可能な限り短い時間で実現する制御を求める問題を考える。これは時間最適制御 (time-optimal control) と呼ばれる。一般にハミルトニアンの時間依存性を決めれば、1 つのユニタリ発展が Schrödinger 方程式を通して生成される。したがってこの時間依存ハミルトニアン自体、あるいはハミルトニアンの時間依存性の取り方 1 つが、1 つの制御法に対応している。よって量子系に対してどのような操作が可能であるかは、その量子系で実現可能なハミルトニアンによって説明される。系のハミルトニアンは当然、何らかの実験的および理論的な設定によって制約されている。我々はそのようなハミルトニアンへの制約を数学的に書き表すことによって、時間最適制御問題を定式化する。

N 次元 Hilbert 空間 \mathcal{H} 中の量子状態の発展は、適切な \mathcal{H} の基底を設定することで N 次

元ユニタリ群 $U(N)$ の元によって表せる (節 2.1.4 参照). しかし物理的にはユニタリ演算子の位相は意味を持たないので, その部分群 $SU(N)$ のみを考えればよい (節 2.1.4 参照). したがって以下では, $H \in \mathfrak{su}(N)$ とする*¹. ただし $\mathfrak{su}(N)$ は $SU(N)$ に付随する Lie 代数であり, N 次元 Hilbert 空間上の Hermite 演算子でトレースが 0 の演算子全体と等しい.

考えている系の設定の下で実際に実現可能なハミルトニアンを利用可能ハミルトニアンと呼び, その全体の集合を $\mathcal{A} \subset \mathfrak{su}(N)$ と書く. \mathcal{A} は考える系や問題によって決まり, 実験的あるいは理論的な設定を反映する. ただし, \mathcal{A} は時間に依存しないことを仮定する. これはハミルトニアンが時間依存しないことを仮定するのではなく, ハミルトニアンへの制約自体が時間依存しないということを述べているだけである. これは実験的状況が時間に依りて変化しないという自然な仮定に基づいており, 理論的な取り扱いを簡略にする意味もある. なお利用可能ハミルトニアンの集合 \mathcal{A} は, 一般に H に対する等式条件と不等式条件の組み合わせによって書ける.

我々が考える問題は以下の通りである:

問題 目的ユニタリ演算子 $U_f \in SU(N)$ と利用可能ハミルトニアンの集合 $\mathcal{A} \subset \mathfrak{su}(N)$ の組 (U_f, \mathcal{A}) が与えられているとする. 時間依存ハミルトニアン $H(t) \in \mathcal{A}$ の中で, Schrödinger 方程式によって生成されるユニタリ演算子 $U(t)$ が U_f を実現する時刻 $T \geq 0$ を最小化するような $H(t)$ を見つけよ*². ただし $U(0) = 1$ である.

このように, 時間最適制御問題は目的ユニタリ U_f と利用可能ハミルトニアンの集合 \mathcal{A} の組 (U_f, \mathcal{A}) によって完全に指定される.

最後に, 2 準位系における時間最適制御問題の簡単な例を提示する. 実験的状況として z 軸方向の磁場を固定し, 最大振幅 $\Omega > 0$ までの磁場を xy 平面の自由な方向に印加できるとする. これは例えば z 軸方向の磁場によってスピン 1/2 粒子の準位を Zeeman 効果によって分離させてそのエネルギー差を固定しておき, xy 平面方向へ独立に磁場を印加する実験的状況を表している. ここで振幅の上限 Ω は実験機器の最大出力を表している. このときハミルトニアンは

$$H(t) = \omega_0 \sigma^z + u^x(t) \sigma^x + u^y(t) \sigma^y, \quad (u^x)^2 + (u^y)^2 \leq \Omega^2 \quad (6.1)$$

と書ける. ただし ω_0 は 2 準位間のエネルギー差を表す実定数であり, u^x, u^y は実の制御変数である. 我々は u^x, u^y を適切に操作することで任意の $SU(2)$ の元を生成できるので, 任

*¹ 実際にハミルトニアン H が付随する特定の物理系を考えるときには, 例えば $H(t) = \text{Tr}[H(t)] + H'(t)$ と変形し, トレース 0 の演算子 H' のみを考察の対象とするということである. 項 $\text{Tr}[H]$ は定数なので, H と H' によって生成されるユニタリ演算子は位相因子しか異ならない. そして H' によって生成されるユニタリ演算子は $\mathfrak{su}(N)$ の元である.

*² ただし, 本論文では目的ユニタリ U_f が利用可能ハミルトニアン $H(t) \in \mathcal{A}$ によって生成できない場合は考えない. $H(t) \in \mathcal{A}$ が Schrödinger 方程式 (2.18) を通して実現できるユニタリ演算子の集合は, \mathcal{A} から生成される Lie 代数を \mathcal{L} としたときに $e^{-i\mathcal{L}}$ である [90]. 実際, 本論文で扱う例はそのような場合のみである.

意の $U_f \in \text{SU}(2)$ に対する時間最適制御を考えられる。この場合、利用可能ハミルトニアン
の集合 \mathcal{A} は

$$\mathcal{A} = \left\{ \omega_0 \sigma^z + H_c \mid \text{Tr}[H_c(t)\sigma^z] = 0, \frac{1}{2} \text{Tr}[H_c(t)^2] \leq \Omega^2 \right\} \quad (6.2)$$

と書ける。このように、ハミルトニアンの取りうる形の情報は \mathcal{A} に集約される。

6.2 量子最速降下曲線

量子最速降下曲線 (Quantum brachistochrone; QB) [39–41] は制約条件が等式で書かれる
ときの、量子系の時間最適制御の一般論である。本節では、QB の定式化および導出を既
存研究に基づいて概説する。ただし QB と後に述べる最大値原理に基づく定式化 (MP-QB)
との対応が明瞭になるように、既存研究では導かれていなかった結果も一緒に導く (具体的
には、式 (6.10) である)。また QB の有用性を示す例として、2 つの一般的な結果を示す。
いずれも知られた結果ではあるが、QB を用いた量子 Zermelo 運航問題へのアプローチは
我々によって初めて示されたものである。最後に、より一般の問題を解く際に数値的手法を
どのように用いればよいかについて説明する。

6.2.1 QB の定式化

まず、利用可能ハミルトニアンの集合 \mathcal{A} が

$$\mathcal{A} = \{ H \in \mathfrak{su}(N) \mid f^j(H) = 0, j = 1, \dots, p \} \quad (6.3)$$

と書かれることを仮定する。ただしここで f^j は実関数であり、制約条件を表している。任
意の $U_f \in \text{SU}(N)$ と (6.3) を満たす \mathcal{A} によって規定される時間最適制御問題 (節 6.1) を
考える。この問題は、制約条件 $f^j(H) = 0$ と Schrödinger 方程式 (2.18) の下でハミルトニ
アン $H(t)$ とユニタリ演算子 $U(t)$ によって (間接的に) 定まる汎関数 $\int_0^T dt 1$ を境界条件
 $U(0) = 1, U(T) = U_f$ の下で最小化することによって解ける。QB ではこれを解くために、
Lagrange の未定乗数法を利用する。そのためにまず、作用

$$S := \int_0^T dt (1 + L_S + L_C) \quad (6.4)$$

を定義する。ただしここで

$$L_S := \text{Tr} \left[F(t) (i\dot{U}U^\dagger - H(t)) \right], \quad (6.5)$$

$$L_C := \sum_j \lambda_j(t) f^j(H) \quad (6.6)$$

であり, $F \in \mathfrak{su}(N)$ と $\lambda_j \in \mathbb{R} (j = 0, 1, \dots, p)$ は Lagrange 乗数を表している*³. 作用 S の積分中の初項は単純に制御に必要な時間 $T = \int_0^T dt 1$ を表している*⁴. また L_S は, $U(t)$ と $H(t)$ が Schrödinger 方程式によって結びつくことを要求するための項である. この項を作用に加えることで, $H(t), U(t)$ の変分を独立に行える. そして L_C は, 系に課された等式条件 $f^j(H) = 0$ を要求するための項である.

Lagrange の未定乗数法により, 我々は $H(t), U(t), F(t), \lambda_j(t), T$ について変分をとり, $\delta S = 0$ となることを要求すれば良い. これにより, 時間最適制御が満たすべき必要条件を得る. なお最終時刻 T に関する変分を取る際には, $U(t)$ に関しても適切に変分を取って最終時刻での境界条件を満たすようにしなければならない. すなわち, 変分を取る前の最終時刻のユニタリ $U(T)$ と変分を取った後の最終時刻のユニタリ $U(T + \delta T) + \delta U(T + \delta T)$ が等しくなるために, $\delta T, \delta U$ の 1 次までで

$$\delta U(T) + \dot{U}\delta T = 0 \quad (6.7)$$

を要求する. ただしここで $U(T + \delta T) = U(T) + \dot{U}(T)\delta T$ を用いた.

6.2.2 結果

ここでは, 実際に作用 S の変分を取って得られる結果を書き下す. ただし導出は次の小節に譲る.

ハミルトニアン $H(t)$ が時間最適であるとき, $j = 0, 1, \dots, p$ に対してある $\lambda_j(t) \in \mathbb{R}$ が存在して,

$$F(t) = \sum_j \lambda_j(t) \frac{\partial f^j(H)}{\partial H} \quad (6.8)$$

によって定まる $F(t) \in \mathfrak{su}(N)$ が QB 方程式

$$i\dot{F}(t) = [H(t), F(t)] \quad (6.9)$$

と代数的条件

$$\text{Tr} [H(t)F(t)] = 1 \quad (6.10)$$

を満たす必要がある. したがって, (U_f, \mathcal{A}) によって規定される問題に対する時間最適制御 $H(t)$ は式 (6.8), (6.9), (6.10) を境界条件 $U(0) = 1, U(T) = U_f$ の下で解くことによって得られる.

*³ ここで Hermite 演算子 F を Lagrange 乗数と呼ぶのは, F を正規直交基底 $\{\tau_j\}$ を用いて $F = \sum_j f^j \tau_j$ と展開して f^j を Lagrange 乗数とするのと全く同じことである.

*⁴ なお, 先行研究 [39–41] では, 制御に必要な時間はユニタリ演算子 $U(t)$ を用いて間接的に表示されていたことに注意されたい. これは微分幾何や一般相対性理論における弧長の表示方法と類似した方法である.

上記の結果は先行研究 [40] のそれと基本的に同一だが、式 (6.10) は我々によって初めて示された [60]. ここで $\text{Tr}[H(t)F(t)]$ は QB 方程式 (6.9) の下で定数なので、この条件 (6.10) は本質的には初期時刻の $H(t)$, $F(t)$ への条件であることに注意されたい. また条件 (6.8), (6.9) は $F(t)$ を任意定数倍しても成り立つので、条件 (6.10) は本質的に $\text{Tr}[H(0)F(0)] \neq 0$ を述べているに過ぎず、さらにそのときの F を規格化しているだけである.

式 (6.10) は後の最大値原理に基づく定式化でも同様に得られるので、その役割について詳しくは節 6.3 で議論する. ここでは、式 (6.10) が先行研究 [39–41] の文脈でどのように解釈されるか説明する. 先行研究での具体例に倣い、 $\text{Tr}[H_c^2] = \Omega^2$ ($\Omega > 0$) という制約条件の下で $H(t) = H_d + H_c(t)$ なるハミルトニアンを考える. ただしここで $\mathfrak{su}(N)$ の部分空間 \mathcal{C} を用いて $H_c \in \mathcal{C}$ であるとする. すると、式 (6.8) により $F(t)$ は適当な $F'(t) \in \mathcal{C}^\perp$ (ただし、 \mathcal{C}^\perp は \mathcal{C} の直交補空間である) を用いて $F(t) = \lambda(t)H_c(t) + F'(t)$ と書き表される. $H_d = 0$ のときには条件 (6.10) は $\lambda(t) \neq 0$ と等価であり、これは先行研究で暗黙に仮定されていたものである. 一方で $H_d \neq 0$ の場合には条件 (6.10) を用いても $\lambda = 0$ の可能性が残る. これは節 7.2 で登場する特異制御に他ならず、先行研究では取り扱えていなかったものである. 以上より式 (6.10) は、先行研究での暗黙の仮定がどのようなときに正当化されるかを明確化したという意義がある.

また最後に、状態変化の時間最適制御 [39] についても結果だけ述べておく. これはすなわち、指定した 2 状態間を最も速く遷移する量子状態の時間変化 $|\psi(t)\rangle$ を誘起するハミルトニアンを見つける問題である. この問題に対しても量子最速降下曲線は同じ条件 (6.8), (6.9), (6.10) を導き、さらに F について $F = FP + PF$ なる条件が課される. ただしここで $P(t) := |\psi\rangle\langle\psi|$ は密度演算子である.

6.2.3 QB の導出

ここでは作用 S (6.4) の変分を取って Euler-Lagrange 方程式を導くことによって、前小節での結果の証明を行う.

まず $F(t)$ についての変分は Schrödinger 方程式 (2.18) を導き、 $\lambda_j(t)$ についての変分は式 (6.3) と等価な $f^j(H) = 0$, $j = 0, 1, \dots, p$ を導く. $H(t)$ について変分を取ると、

$$\delta S = \int_0^T dt \text{Tr} \left[\left(-F(t) + \sum_j \lambda_j(t) \frac{\partial f^j(H)}{\partial H} \right) \delta H(t) \right] \quad (6.11)$$

となる. ただしここで $\partial f^j(H)/\partial H$ は任意の Hermite 演算子 A に対して

$$\text{Tr} \left[\frac{\partial f^j(H)}{\partial H} A \right] = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{f^j(H + \varepsilon A) - f^j(H)}{\varepsilon} \quad (6.12)$$

を満たすように定義されている. 変分 $\delta H(t)$ は任意のトレース 0 の Hermite 演算子であ

る*5)ので、 δS が 0 となるためには丸括弧内が恒等的に 0 となる必要がある。したがって F を与える式 (6.8) を得る。

次に $U(t)$ と T についての変分を取ると、

$$\delta S = \int_0^T dt \operatorname{Tr} \left[iF(t)\dot{U}\delta U^\dagger - i\dot{F}(t)\delta U U^\dagger - iF(t)\delta U \dot{U}^\dagger \right] + i \operatorname{Tr} [F(T)\delta U(T)U(T)^\dagger] + \delta T \quad (6.13)$$

となる。ここでまず δU に関する変分は、 $\delta(dU/dt) = d(\delta U)/dt$ であること、および部分積分

$$\int_0^T dt \left(F \frac{d}{dt} (\delta U) U^\dagger \right) = [F \delta U U^\dagger]_0^T - \int_0^T dt \left(\dot{F} \delta U U^\dagger + F \delta U \dot{U}^\dagger \right) \quad (6.14)$$

と境界条件 $\delta U(0) = 0$ を用いることによって得られる。そして δT の変分は

$$\delta S = (1 + L_S(T) + L_C(T))\delta T \quad (6.15)$$

に $L_S(T) = L_C(T) = 0$ を適用すれば良い。これらは Schrödinger 方程式 (2.18) と制約条件 (6.3) によって保証される。さらに式 (6.13) に対して Schrödinger 方程式 (2.18) と $\delta U^\dagger = -U^\dagger \delta U U^\dagger$ *6) を用いることによって、積分の中身は

$$\operatorname{Tr} \left[\left(-FH - i\dot{F} + HF \right) \delta U U^\dagger \right] \quad (6.16)$$

となる。ここで δU を任意に取ることは任意の反 Hermite 演算子 $\delta U U^\dagger$ を取ることと同義なので、 $\delta S = 0$ によって QB 方程式 (6.9) が得られる。また式 (6.13) 中の表面項、すなわち積分の外の項は

$$(-\operatorname{Tr} [H(T)F(T)] + 1)\delta T \quad (6.17)$$

と書ける。ただし $t = T$ で、Schrödinger 方程式 (2.18) と式 (6.7) によって $\delta U = iHU\delta T$ であることを用いた。 $\delta S = 0$ が成り立つためにはこの項が恒等的に 0 である必要があるので、式 (6.10) が得られる。 $\operatorname{Tr} [HF]$ が式 (6.9) の下で定数であることは明らかである。

以上により、我々は前小節で書き下した量子最速降下曲線の結果を全て導出した。

6.2.4 直接的結果

量子最速降下曲線は、等式条件に対して適用可能な時間最適制御の一般理論である。ここではそこから帰結される 2 つの重要な結果について述べる。これらは既に知られている結果であることに注意しておく。

*5) Hermite 演算子 H が変分の下でトレース 0 及び Hermite 性を保つための条件は $(H + \delta H)^\dagger = H + \delta H$ と $\operatorname{Tr} [H + \delta H] = 0$ なので、 $\delta H^\dagger = \delta H$ と $\operatorname{Tr} \delta H = 0$ が得られる。

*6) これは δU が U のユニタリ性を保つように変分を取ることから得られる。すなわち、 $1 = UU^\dagger$ より $0 = \delta UU^\dagger + U\delta U^\dagger$ が得られるからである。また、この式から δUU^\dagger が反エルミートであることも分かる。逆に言えば、 δUU^\dagger が反エルミートになるような δU は全て U の変分として許される。

1つ目の帰結は、系のハミルトニアンへの制約条件がその大きさに対するもののみである場合には、時間最適ハミルトニアンが時間に無依存となる [39, 40]、ということである。これはすなわち、 $H(t)$ への制約条件が

$$0 = f^0(H) := \frac{1}{2} \text{Tr} [H^2] - \Omega^2 \quad (6.18)$$

のみである場合である ($\Omega > 0$)。このとき $H(t)$ は $\text{Tr} [H(t)^2] = \Omega^2$ を満たす任意のトレース 0 の Hermite 演算子である*7。 F の定義 (6.8) と QB 方程式 (6.9) はそれぞれ、

$$F(t) = \lambda_0(t)H(t), \quad i\dot{F}(t) = [H(t), F(t)] \quad (6.19)$$

と書かれる。第 2 式から $\text{Tr} [F^2]$ が定数であることが分かるので、第 1 式と制約条件 $\text{Tr} [H^2] = \Omega^2$ によって $\lambda_0(t)$ も定数であることが分かる。この結果を適用すれば、第 2 式は $H(t)$ に関する微分方程式

$$\lambda_0 \dot{H}(t) = \lambda_0 [H(t), H(t)] = 0 \quad (6.20)$$

を導く。したがって、 $H(t)$ は時間に依存しないことが分かる。これは目的のユニタリ演算子 U_f を最速で実現するには、 $H(t)$ を $H(t) \propto i \ln U_f$ となるように取ればよいという自然な結果を表している。

2つ目の帰結は、単純な量子 Zermelo 運航問題 [42–44] が本質的に上述の問題に帰結され、単純に解けるということである。

まず量子 Zermelo 運航問題とは古典的な Zermelo 運航問題の類似物であり、ハミルトニアンにドリフト場が存在する場合の時間最適制御問題を指している。すなわち系のハミルトニアン $H(t)$ が固定されたドリフト場の部分 H_d と制御場の部分 $H_c(t)$ に分かれて

$$H(t) = H_d + H_c(t) \quad (6.21)$$

と書かれており、我々は H_c のみを操作できるような問題である。文献 [42–44] での量子 Zermelo 運航問題は特に H_c に対する制約条件が

$$0 = \tilde{f}^0(H_c) := \frac{1}{2} \text{Tr} [H_c^2] - \Omega^2 \quad (6.22)$$

のみである場合を取り扱っている。実はこの問題は、量子最速降下曲線に相互作用描像を適用することで簡単に解ける。Schrödinger 描像の物理量 $A(t)$ に対して相互作用描像 $A_I(t)$ を $A_I(t) := e^{iH_d t} A(t) e^{-iH_d t}$ によって定義し、時間発展演算子 $U(t)$ に対しては $U_I(t) := e^{iH_d t} U(t)$ によって定義する。この移行の下では明らかに、 $\tilde{f}^0(H_{c,I}) = \tilde{f}^0(H_c)$ である。ここで $f^0(H) := \tilde{f}^0(H - H_d)$ とすれば、式 (6.8) より $F(t) = \lambda_0(t)H_c(t)$ を得る。したがって式 (2.18), (6.8), (6.9) は

$$i\dot{U}_I = H_{c,I}U_I, \quad F_I = \lambda_0 H_{c,I}, \quad i\dot{F}_I = [H_{c,I}, F_I] \quad (6.23)$$

*7 既に節 6.1 で述べたように、ハミルトニアン $H(t)$ は一般性を失わずにトレース 0 とできる。

と同値である。これは式 (2.18) および (6.19) における $H(t)$, $F(t)$, $U(t)$ を $H_{c,I}(t)$, $F_I(t)$, $U_I(t)$ に置き換えたものと全く同一である。したがって直ちに $H_{c,I}(t) = H_{c,I}(0) = H_c(0)$ を得る。これはすなわち $H_{c,I}(t)$ が時間に依存しないということである。また、時間発展演算子は式 (6.23) より $U_I(t) = e^{-iH_c(0)t}$ となる。以上より時間最適ハミルトニアン $H(t)$ とそのときのユニタリ演算子 $U(t)$ は Schrödinger 描像では

$$H(t) = H_d + e^{-iH_d t} H_c(0) e^{iH_d t}, \quad U(t) = e^{-iH_d t} e^{-iH_c(0)t} \quad (6.24)$$

と書ける。これは文献 [43, 44] と同じ結果であるが、導出はより単純かつ直感的なものとなっている。証明は本質的に、相互作用描像への移行の下での条件 $\tilde{f}^0(H_c) = 0$ の不変性を利用しているだけである。

また上記を一般化すれば、次のようなことも言える：ハミルトニアン $H(t)$ がドリフト場 $H_d(t)$ と制御場 $H_c(t)$ の和によって書き表され、制約条件 $\tilde{f}^j(H_c) = 0$ が H_d を自由ハミルトニアンとみなした相互作用描像への移行の下で不変である場合には、QB 方程式 (6.9) はドリフト場のない場合のものに帰着できる。これは次のようにして示される。制約条件が相互作用描像への移行の下で不変である、すなわち $\tilde{f}^j(H_c) = \tilde{f}^j(H_{c,I})$ であるとすると、作用 S もやはり相互作用表示への移行の下で不変となる、これは

$$S[H_d + H_c, U, F, \{\lambda^j\}; f^j] = S[H_{c,I}, U_I, F_I, \{\lambda^j\}; \tilde{f}^j] \quad (6.25)$$

ということである。ここで左辺 $S[H, U, F, \{\lambda^j\}; f^j]$ は式 (6.4), (6.5) (6.6) によって定義される作用で、右辺はドリフトのないハミルトニアン $H_{c,I}(T)$ に対して同様に定義される作用である。こうして、元の問題に対する F の定義 (6.8) および QB 方程式 (6.9) はドリフトのないハミルトニアン $H_{c,I}$ に対して

$$\tilde{f}^j(H_{c,I}) = 0 \quad (6.26)$$

なる制約条件を課した問題のそれと同じになる。元の問題に対するハミルトニアンとユニタリ演算子は

$$H(t) = H_d + e^{-iH_d t} H_{c,I}(t) e^{iH_d t}, \quad U(t) = e^{-iH_d t} \mathcal{T} e^{-i \int_0^t ds H_{c,I}(s)} \quad (6.27)$$

によって求められる。ただしここで \mathcal{T} は時間順序積を表している。以上の事実は、解析力学の言葉に焼き直すと、作用が同じであれば同じ運動方程式に従うということを述べているに過ぎない。しかし、今考えている問題は境界条件については異なるので、境界条件となる代数方程式 (6.10) は元の条件式をそのまま使用しなければならない。式 (6.10) は時間に依存しない U_f に対して得られた式であり、変換後の問題における目的ユニタリ演算子は時間的に変化する $e^{-iH_d t} U_f$ だからである*8。

*8 先に述べた単純な量子 Zermelo 運航問題では、制約条件が単純であるおかげでこの条件も不変となっていたことに注意されたい。

6.2.5 数値的手法についての注意

前小節で得られた結論は非常に単純なものだが、量子最速降下曲線による定式化が時間最適制御の一般的な性質を議論する際に非常に役立つものであることを示している。そして実際の具体的な問題を考える際にも、量子最速降下曲線は有用なものである。以下では一般の問題に対して時間最適制御を導くための、数値的な手法について述べる。

量子最速降下曲線で我々がやるべきことは、QB 方程式 (6.9) と Schrödinger 方程式 (2.18) を境界条件 $U(0) = 1$ および $U(T) = U_f$ の下で解くことである。これはすなわち境界値問題 (boundary value problem; BVP) である。いくつかの状況ではこれは実際に解け、解析的な解が得られている [39–41]。しかしながら一般には解析解が得られず数値計算を用いる必要がある場合も少なくない。BVP に対する数値計算手法としては狙い撃ち法や有限差分法、変分法などが知られている [91]。これらの手法は全て BVP を連立した非線形方程式の根を求める問題へと帰着し、それを Newton 法や準 Newton 法などの数値探索手法を通して解くという流れに立脚したものである。数値探索における初期値を上手く見つける手法としては、例えば幾何学的な手法に基礎を置くアルゴリズム [51] が提案されている。これはホモトピー法 [91] と似た精神に基づき、制約条件によって禁じられたハミルトニアン成分へ徐々にペナルティを課していくことで上手く数値探索の初期値を得る手法である。

時間最適制御は忠実度最適問題を繰り返し解くことによって得られる。ここで忠実度最適問題とは、ある固定された時間 T までに目的とするユニタリ演算子 U_f に最も近い $U(T)$ を得るための制御 $H(t)$ を見つける問題である。ただしユニタリ演算子の近さはユニタリ演算子に対する忠実度 $\text{Tr} [U_f^\dagger U(T)] / N$ によって測られる。忠実度が 1 となるのは $U(T) = U_f$ となる場合に限られるので、最も短い時間 T で忠実度 1 を達成する制御を見つけて、時間最適制御が得られる (例えば文献 [92])。忠実度最適制御に対しては数値的な手法が多く提案されており、Krotov 法 [93, 94], gradient ascent pulse engineering 法 (GRAPE 法) [95], chopped random basis 法 (CRAB 法) [96] などを用いられる。量子最速効果曲線も同様に忠実度最適制御問題へと書き換えられ、疑似 Krotov 法によって解ける [35]。ここでは QB 方程式 (6.9) および F の定義式 (6.8) と同じ式が、今とは異なる境界条件の下で解かれている。

6.3 量子系の時間最適制御への Pontryagin の最大値原理の適用

Pontryagin の最大値原理 (maximum principle; MP) は、不等式制約条件に対しても適用可能な最適制御理論の枠組みである (例えば文献 [97, 98] を見よ)。量子系の時間最適制御においても多くの研究が MP に基づいて時間最適制御を求めている [45, 46, 49, 50, 53–56]。ここでは量子系における個別の制御問題が実変数で書かれた制御系へと変換され、その後

通常の MP を適用することによって問題が解かれている。ここで系を記述する実変数とは、例えば量子状態を表す Bloch ベクトルや、ユニタリ演算子を表す Euler 角などである（第 3 章参照）。そのような書き換えは個々の問題を直接的に解けるようにするが、考えている物理系や制御の設定などに大きく依存してしまう。これに対して我々は、QB のように一般的な形で MP を量子系に持ち込む。これは前節で述べたような時間最適制御の一般的議論だけでなく、実際の応用でも系統的な MP の適用を可能にする。また、この定式化は後に続く節での議論の基礎となる。以後では我々の MP に基づく理論を便宜上、最大値原理に基づく量子最速降下曲線（maximum-principle-based QB; MP-QB）と呼ぶことにする。

6.3.1 MP-QB の定式化

まず我々は MP-QB の結果を述べ、節 6.3.3 にその証明を譲ることとする。

節 6.1 で定式化した問題を考える。ハミルトニアン $H(t)$, $0 \leq t \leq T$ を与えられた (\mathcal{A}, U_f) によって規定される問題に対する時間最適制御であるとする。ただし \mathcal{A} は利用可能ハミルトニアン全体の集合、 U_f は目的ユニタリ演算子であった。すなわち、 $H(t) \in \mathcal{A}$ は Schrödinger 方程式を通してユニタリ演算子を $U(0) = 1$ から $U(T) = U_f$ まで最小の時間 T で駆動するということである。このとき、ある Hermite 演算子 $F(t) \in \mathfrak{su}(N)$ が存在して、任意の $K \in \mathcal{A}$ と各時刻 $t \in [0, T]$ に対して最大化条件

$$\mathrm{Tr}[KF(t)] \leq \mathrm{Tr}[H(t)F(t)] \quad (6.28)$$

および微分方程式

$$i\dot{F}(t) = [H(t), F(t)] \quad (6.29)$$

と代数方程式

$$\mathrm{Tr}[H(t)F(t)] = -p_0 \quad (6.30)$$

を満たす。ただし、 $p_0 \leq 0$ である。ここで $p_0 < 0$ である制御は正常 (normal)、 $p_0 = 0$ である制御は異常 (abnormal) と呼ばれる（詳細は例えば文献 [99] 参照）。本論文では正常な制御のみを考え、異常な制御は今後の課題とする*⁹。したがって、式 (6.30) は F を適当に定数倍することによって*¹⁰

$$\mathrm{Tr}[H(t)F(t)] = 1 \quad (6.31)$$

に帰着される。なお、式 (6.29) より $\mathrm{Tr}[H(t)F(t)]$ は時間に依存しない。まとめると、時間最適制御問題は条件 (6.28) および (6.29), (6.31) を満足する 1 組の $(H, F) \in (\mathcal{A}, \mathfrak{su}(N))$ を見つける問題へと帰着された。

*⁹ 付録 L で述べるように、異常な制御は Lagrange の未定定数法においても現れる。異常な制御についての系統的な理解を得るのは難しく、本論文では詳しく述べることはしない。

*¹⁰ 式 (6.28), (6.29) は F を任意定数倍しても成り立つものであるので、 F の「大きさ」は式 (6.30) のみによって規定されていることが分かる。

最大値原理の文脈では、 $H_{\text{MP}}(H(t), F(t)) := -1 + \text{Tr}[H(t)F(t)]$ は Pontryagin ハミルトニアンと呼ばれる*¹¹。したがって、式 (6.28) は最適なハミルトニアン $H(t)$ が各時刻 t で Pontryagin ハミルトニアンを最大化することを表している。

6.3.2 QB と MP-QB の関係

Pontryagin の最大値原理が Euler の変分法の拡張とみなせる (付録 K 参照) ように、MP-QB もまた QB の拡張とみなせる。このような拡張は Karush-Kuhn-Tucker 条件 (例えば文献 [100] 参照) の様な他の手法によっても可能だと考えられるが、ここで最大値原理を採用するのは次のような利点があるからである：

- (i) MP は Lie 群上の最適化問題に対して既に定式化されている (例えば文献 [101] 参照)。
- (ii) 後に扱う特異制御について多くの研究が存在する。

後者については節 7.2 で扱う。

MP-QB における微分方程式 (6.29) と代数方程式 (6.31) は QB における QB 方程式 (6.9) および代数方程式 (6.10) と同じである。ただし、Hermite 演算子 F の定義は両者の間で異なっている。QB において F の形は式 (6.8) によって与えられているが、MP-QB では F は最大化条件 (6.28) によって間接的に定義されている。したがって両者は一見異なる理論のように見えるが、等式条件の下では MP-QB の最大化条件 (6.28) が式 (6.8) に帰着されることが示される。これを見るために、利用可能ハミルトニアンの集合 \mathcal{A} が式 (6.3) で与えられていると仮定する。このとき式 (6.28) から、時間最適ハミルトニアン $H(t)$ は等式制約条件 $f^j(H) = 0$ を満たしながら Pontryagin ハミルトニアン $-1 + \text{Tr}[H(t)F(t)]$ を各時刻 t で最大化する必要がある。したがって Lagrange の未定乗数法により、 $H(t)$ に関する関数

$$H'_{\text{MP}} = -1 + \text{Tr}[H(t)F(t)] - \sum_j \lambda_j f^j(H) \quad (6.32)$$

が各時刻で極値を取れば良いことが分かる。任意時刻で H に関して変分を取れば、

$$\delta H'_{\text{MP}} = \text{Tr}[\delta H(t)F(t)] - \sum_j \text{Tr} \left[\lambda_j \frac{\partial f^j(H)}{\partial H} \delta H \right] \quad (6.33)$$

となるので、 $\delta H'_{\text{MP}} = 0$ より $F = \sum_j \lambda_j \frac{\partial f^j(H)}{\partial H}$ を得る。これは、QB における F の定義式 (6.8) に他ならない。こうして MP-QB は、系の制約条件が等式条件のみによって書かれる特殊な場合に QB を含んでいることが分かる。

*¹¹ ここで Pontryagin ハミルトニアンという名称は紛らわしいが、物理的なハミルトニアン (例えばここでは $H(t)$ を指す) を表しているわけではないことに注意されたい。この名称は最適化問題における評価関数の被積分関数をラグランジアンと称し、それを Legendre 変換することで得られる量をハミルトニアンと呼ぶことに由来している。

最後に、QB と MP-QB では得られる代数条件 (式 (6.10) と (6.31)) が異なっていることについての注意しておく。実は Lagrange の未定乗数法を厳密に適用すればやはり (6.31) が得られ (例えば, [102] および [103, 定理 74.1]), 異常な制御も現れうる (詳細は付録 L)。

6.3.3 MP-QB の導出

我々は、節 6.3.1 における MP-QB の結果の導出をここで述べる。これは単に Pontryagin の MP (例えば文献 [97] 参照) を、特に Lie 群上の制御系で (例えば文献 [101] 参照)、時間最適制御に対して適用しているだけである。しかしその導出を詳しく述べることは、MP-QB あるいは最大値原理と QB あるいは古典的な変分法との違いを明確にする上で有用である。また導出中では、演算子 $F(t)$ がどのように得られるのかも明らかにする。

我々は $SU(N)$ 上の制御理論を考えていたが、ここでは増補系 $\mathcal{M} := \mathbb{R} \times SU(N)$ を考える (図 6.1 参照)。 \mathcal{M} 上の軌跡 $(t, U(t))$ はユニタリ演算子 $U(t)$ とそのときの時刻 t をまとめて表している。制御ハミルトニアンが $H(t)$ であるとき、 \mathcal{M} 上の軌跡 $(t, U(t))$ は微分方程式

$$\dot{t} = 1, \tag{6.34}$$

$$\dot{U}(t) = -iH(t)U(t) \tag{6.35}$$

によって定められる。ただし $t = 0$ で $U(0) = 1$ である。

増補系における到達可能領域 \mathcal{R} を

$$\mathcal{R} := \bigcup_{t \in [0, \infty]} \mathcal{R}_t, \tag{6.36}$$

$$\mathcal{R}_t := \{(t, U(t)) | H(t) \in \mathcal{A}\} \tag{6.37}$$

と定義する。ただしここで \mathcal{R}_t は時刻 t において到達可能なユニタリ演算子 $U(t)$ 全ての集合を増補系で表したものであり、したがって \mathcal{R} は時刻 0 から ∞ までにユニタリ演算子 $U(t)$ が到達可能な全ての領域とそれにかかる時間をまとめて \mathcal{M} 中の領域として表している。

最終時刻 T とハミルトニアン $H(t)$ がある (U_f, \mathcal{A}) に対して時間最適であるとする。このとき $U(T) = U_f$ であり、軌道 $(t, U(t))$ の終着点 $(T, U(T))$ は \mathcal{R} の境界に存在する必要がある。なぜなら $(t, U(t))$ が最適であるときには、少なくとも全ての $T' < T$ なる時刻 T' に対して点 (T', U_f) は領域 \mathcal{R} に入り得ないからである。以下で説明するように、Pontryagin の最大値原理は到達可能領域 \mathcal{R} を微小変分の 1 次で近似して、上記の必要条件を述べるものである。

我々は、制御 $H(t)$ と最終時刻 T を変化させたときの終着点 $(T, U(T))$ の変化を考える。 $H(t)$ は針変分 (needle variation) という変分をとる。この変分は、 $H(t)$ が変化するのは微小な時間区間においてだけだが、その代わりにその区間においては $H(t)$ の有限の変化を許すものである。これは最適制御に有限な飛びがある場合や、 $H(t) \in \mathcal{A}$ の変化が 1 方向にしか許されていない場合、すなわち $H(t)$ が \mathcal{A} の境界上にあるときなどに特に役に立つ。 $H(t)$

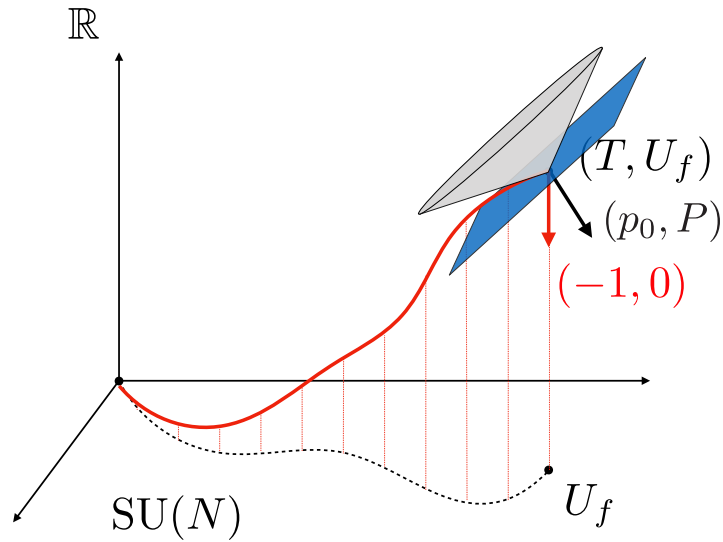


図 6.1 増補系 $\mathcal{M} := \mathbb{R} \times \text{SU}(N)$ と、最適制御による軌跡. 図の xy 平面は $\text{SU}(N)$ の空間を表し, 新たに追加された z 軸は時間 t を表している. 黒い破線はユニタリ演算子 $U(t)$ の軌跡を表し, 赤い太線は増補系での対応する軌跡 (6.35) を表している. 灰色の円錐はテント $\tilde{\mathcal{R}}_{(T, U(T))}$ を, 青い平面は点 $(T, U(T))$ における超平面を表している. この超平面は, 点 $(T, U(T))$ における接空間をテントを含む接空間とベクトル $(-1, 0)$ を含む接空間の 2 つに分割している. ベクトル (p_0, P) はこの超平面に垂直なベクトルである. Reprinted figure from [60, DOI: 10.1088/1367-2630/ab8ab3]. Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2020 by H. Wakamura and T. Koike.

が \mathcal{A} の境界上にある場合には, $H(t) \rightarrow H(t) + \delta H(t)$ は可能でも $H(t) \rightarrow H(t) - \delta H(t)$ は可能でないような場合が存在する. Euler の変分法ではそれらの場合分けをする必要があるが, 針変分ではその必要がない. 以下で見るように針変分では微小変分 $\delta H(t)$ それ自体を決めるのではなく, 変分によって変化する先 $H(t) \rightarrow K$ を決めるからである. $H(t)$ がその時刻で連続であるような時刻 $t = \tau \in (0, T)$ での単純な針変分 $M(\tau; \delta\tau; K) : H(t) \rightarrow H'(t)$ を,

$$H'(t) = \begin{cases} K, & \tau - \delta\tau < t \leq \tau, \\ H(t), & 0 \leq t \leq \tau - \delta\tau \text{ および } \tau < t \leq T \end{cases} \quad (6.38)$$

と定義する. ここで $\delta\tau \geq 0$ は微小であり, $K \in \mathcal{A}$ とする. 変分に対して適切に和と非負のスカラー倍を定義すると, 変分はそれらの演算に対して閉じた 1 つの空間を成す. ただし, 和は非可換である (例えば節 J を見よ).

T に関する変分 $H(t) \mapsto H'(t)$ は, 次のように定義される. もし $\delta T \leq 0$ である場合には, $H'(t)$ は単純に $H(t)$ をより短い時間区間 $[0, T + \delta T]$ へ制限することによって得られる. すなわち $0 \leq t \leq T - \delta T$ で $H'(t) = H(t)$ である. もし $\delta T > 0$ である場合には, $H'(t)$ は $t = T$ での値を拡張することによって得られる. すなわち $0 \leq t \leq T$ で $H'(t) = H(t)$ であり, $t > T$ でも $H'(t) = H(T)$ である. 以上で定義した 2 種の変分 ($H(t)$ の針変分と最

終時刻 T の変分) の組み合わせもまた、和と非負のスカラー倍に関して閉じた空間を構成する。さらにここでの「和」は非可換であるが、これらは最終的に $U(T)$ に生じる 1 次変分 $\delta[U(T)]$ を見る限りにおいては可換である (付録 J 参照)。こうして、1 次変分 $\delta[U(T)]$ は接平面 $T_{(T,U(T))}\mathcal{M}$ 中の凸錐を構成する。以下ではこの錐のことを \mathcal{R} 中での点 $(T, U(T))$ におけるテント (tent) $\tilde{\mathcal{R}}_{(T,U(T))}$ と呼ぶ。

もしテント $\tilde{\mathcal{R}}_{(T,U(T))}$ が z 軸下向きのベクトル $(-1, 0)$ をその内部に含んでいれば、制御 $(H(t), F(t))$ は最適にはなりえない。内部に存在する場合には、変分による点 $(T, U(T))$ の変位が (一次だけでなく) 高次の変分まで考慮したときに構成する M 中の歪んだ錐と、線分 $[0, T] \times \{U_f\}$ とが交わってしまうからである。

こうして制御 $(H(t), F(t))$ が時間最適であるときには、終着点における接平面 $T_{(T,U_f)}\mathcal{M}$ 全体を、テントを含む閉半空間とベクトル $(-1, 0)$ を含む閉半空間とに分割する $T_{(T,U_f)}\mathcal{M}$ 中の超平面が存在する。その超平面に直交するベクトルとして、非零の接空間中のベクトル $(p_0, P) \in T_{(T,U(T))}\mathcal{M}$ で

$$\langle (p_0, P), (-1, 0) \rangle \geq 0 \geq \langle (p_0, P), (\delta T, i\delta[U(T)]U(T)^\dagger) \rangle \quad (6.39)$$

を満たすものが存在する*¹²。ただし、 $\delta[U(T)]$ は $H(t)$ および U の変分による 1 次の変分であり、角括弧は内積 $\langle (q_0, Q), (r_0, R) \rangle := q_0 r_0 + \text{Tr}[QR]$ を表している。式 (6.39) の 1 つ目の不等式から直ちに $p_0 \leq 0$ を得る。

式 (6.38) で定義された変分 $M(\tau; \delta\tau; K)$ は、 $U(T)$ の 1 次の変分

$$\delta U(T) = U(T, \tau)(-i\delta\tau[K - H(\tau)])U(\tau) \quad (6.40)$$

を導く。ここで $U(t, \tau)$ は初期条件 $U(\tau, \tau) = 1$ の下で Schrödinger 方程式を満たす時間発展演算子である。Hermite 演算子 $F(t) := U(t)PU(T, t)$ を定義すれば、 F が QB 方程式 (6.29) に従うことは直ちに示される。また式 (6.39), (6.40) より、

$$\text{Tr}[KF(\tau)] \leq \text{Tr}[H(\tau)F(\tau)] \quad (6.41)$$

を得る。 τ は任意なので、これは最大化条件 (6.28) に他ならない。

T についての $U(T)$ の一次の変分は、

$$\delta[U(T)] = (-i\delta T)H(T)U(T) \quad (6.42)$$

で与えられる。式 (6.39) と (6.42), および変分 δT が正負両方の値を取りうることから、

$$\text{Tr}[H(T)F(T)] = -p_0 \geq 0 \quad (6.43)$$

となる。これは代数的条件 (6.31) に他ならない

*¹² なお、ここで P は U の接ベクトルを表すエルミート演算子である。

第 7 章

量子系の時間最適制御の適用と特異制御の最適性

本章では、前章で定式化した最大値原理に基づく量子最速降下曲線を用いて、量子系の時間最適制御理論の一般的な構造を議論する。まず系のハミルトニアンが不等式条件によって制約されている一般の状況について、その不等式条件を考えなくても良い、すなわち等式条件に帰着できる場合について議論する。そこでは、不等式条件が等式条件に帰着できない場合として特異制御という特殊なクラスの制御が現れる。特異制御は MP-QB による最適性の必要条件を自明に満たしてしまう制御であり、前章で構築した理論だけではその最適性については何も言えない。したがってその最適性を判別するための条件として一般化 Legendre-Clebsch 条件を導入する。最後に、特異制御の取り扱いについて具体的な例を用いて解説する。

7.1 ドリフト場と不等式条件

MP-QB は節 6.1 で定式化された $H(t) \in \mathcal{A}$ に対する時間最適制御問題に対して一般の \mathcal{A} に適用可能な理論であった。我々は今まで一般の \mathcal{A} を具体的に制限して来なかったが、 \mathcal{A} の基本的構造について述べることは実際の時間最適制御問題を考察する上で当然重要である。特に不等式条件を考える必要がある場合に、それを等式条件で置き換えてよいための条件を明らかにする。これは不等式条件を扱えなかった QB では考察できず、MP-QB によって初めて可能となる。本小節の内容は、節 7.1.2 の式 (7.8) に係る結果 [51] を除いて我々によって初めて示されたものである [60]。

7.1.1 ドリフトと制御ハミルトニアン

$\mathcal{A} \subset \mathfrak{su}(N)$ を一般の利用可能ハミルトニアンの集合とする. \mathcal{A} を含む最小の超平面を考え, これを制御超平面 (control hyperplane)^{*1} と呼ぶ. ここでハミルトニアン $H_d \in \mathcal{A}$ を任意に取れば, 制御超平面はベクトル H_d で平行移動した線型部分空間 \mathcal{C} とみなせる ($\mathcal{A} = H_d + \mathcal{C}$). このとき, $H(t) \in \mathcal{A}$ は

$$H(t) = H_d + H_c(t), \quad H_c(t) \in \mathcal{A} - H_d (\subset \mathcal{C}) \quad (7.1)$$

と書ける^{*2}. ただし, H_d は固定したハミルトニアン (時間に無依存) であるとする. この \mathcal{C} を制御部分空間 (control subspace) と呼び, 制約条件 $H_c(t) \in \mathcal{C}$ を部分空間制約 (subspace constraint) と呼ぶことにする. そして, H_d と $H_c(t)$ はそれぞれドリフトハミルトニアンおよび制御ハミルトニアンと呼ぶことにする. 物理的にはドリフトハミルトニアン H_d は系に固有な場を表しており, 例えば結合定数の固定された粒子間相互作用や固定された磁場などを表している. 一方で制御ハミルトニアン $H_c(t)$ は我々が制御できる場を表しており, 一連の電磁波パルスの連なりや, 調整可能な磁場による制御を表している.

部分空間制約は一般に, 次のように等式条件のみによって表せる. まず $\mathfrak{su}(N)$ は制御部分空間 \mathcal{C} とその直交補空間 \mathcal{C}^\perp ^{*3} を用いて,

$$\mathfrak{su}(N) = \mathcal{C} \oplus \mathcal{C}^\perp \quad (7.2)$$

と書き表せる. したがって部分空間制約 $H_c(t) \in \mathcal{C}$ は

$$\mathrm{Tr}[H_c(t)\tau_j] = 0, \quad j = \dim \mathcal{C} + 1, \dots, N^2 - 1 \quad (7.3)$$

と書ける. ただしここで $\{\tau_j\}_{j=1}^{N^2-1}$ は $\mathfrak{su}(N)$ の正規完全直交基底で, $\tau_1, \dots, \tau_{\dim \mathcal{C}} \in \mathcal{C}$ および $\tau_{\dim \mathcal{C}+1}, \dots, \tau_{N^2-1} \in \mathcal{C}^\perp$ を満たすように選んでいる. 以上より, 全ハミルトニアンは適当な実係数 $u^j(t)$ を用いて

$$H(t) = H_d + \sum_{j=1}^l u^j(t)\tau_j \quad (7.4)$$

と書ける.

我々は理論的な取り扱いが容易で, かつ実用上でもありふれたクラスの制約条件を以下で定義する. まず \mathcal{A} が平面的 (planar) であるとは, \mathcal{A} が $H_d + \mathcal{C}$ の閉領域でかつ $\dim \mathcal{A} = \dim \mathcal{C}$ を満たすものであると定義する. より精確には, これは超平面 $H_d + \mathcal{C}$ の位相で

$$\mathcal{A} = \mathrm{closure}(\mathrm{interior}(\mathcal{A})) \quad (7.5)$$

*1 数学的に厳密に定義するには, \mathcal{A} を含む任意次元の全ての超平面の共通集合とすれば良い.

*2 ここでは一般の \mathcal{A} から出発したが, 現実の問題ではもちろん, 先に具体的な $H(t)$ の表式が与えられる.

*3 なおこのとき $\mathfrak{su}(N)$ は内積 $\langle A, B \rangle := (1/2) \mathrm{Tr}[AB]$ による内積空間とみなしている.

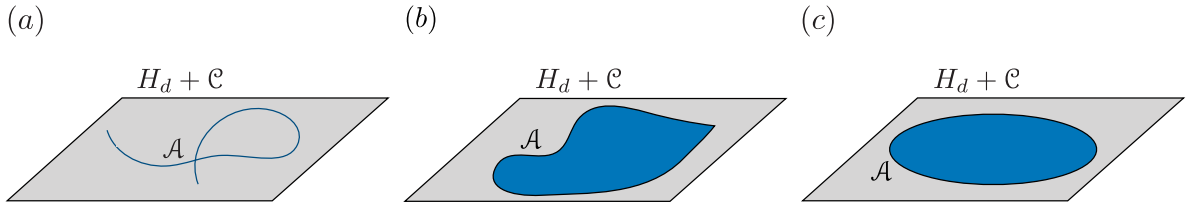


図 7.1 (a) 一般の, (b) 平面的な, (c) 典型的な制約条件の概念図. それぞれの灰色の平面は制御超平面 $H_d + \mathcal{C}$ を表し, 青い領域は利用可能ハミルトニアン全体の集合 \mathcal{A} を表している. Reprinted figure from [60, DOI: 10.1088/1367-2630/ab8ab3]. Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2020 by H. Wakamura and T. Koike.

が成り立つことである (図 7.1 参照). また \mathcal{A} が典型的 (typical) であるとは, \mathcal{A} が部分空間制約 $H_c(t) \in \mathcal{C}$ の他に 1 つの単純な不等式

$$\frac{1}{2} \text{Tr} [H_c(t)^2] \leq \Omega^2 \quad (7.6)$$

のみによって規定されていることによって定義する ($\Omega > 0$). この制約条件 (7.6) は有限エネルギー制約 (finite energy constraint) と呼び, 数学的には制御ハミルトニアンの (Hilbert-Schmidt 内積による) ノルムが上限 $\Omega (> 0)$ を持っているということであり, 物理的には系のエネルギー幅が有限の値で制約されていることを示している. 典型的な制約条件の下では, \mathcal{A} は

$$\mathcal{A} = \left\{ H_d + H_c \left| \text{Tr} [H_c \tau_j] = 0, j > \dim \mathcal{C}, \frac{1}{2} \text{Tr} [H_c^2] \leq \Omega^2 \right. \right\} \quad (7.7)$$

によって書かれ, 全ハミルトニアンは式 (7.4) における $w^j(t)$ に $\sum_j (w^j)^2 \leq \Omega^2$ を課すことで得られる (図 7.1 参照).

7.1.2 ロリポップ型制約条件下における不等式条件の等式条件への帰着

我々はまず, 必ずしも平面的や典型的でない一般の制約条件を, ドリフト H_d が制御部分空間 \mathcal{C} に属するかどうかによって 2 種類に分類する. もし $H_d \in \mathcal{C}$ であればその制約条件 (あるいは \mathcal{A} 自体) をロリポップ型 (lollipop type) と呼び, もし $H_d \notin \mathcal{C}$ であれば蓮の葉型 (lotus leaf type) と呼ぶことにする (図 7.2 参照). なお $H_d = 0$ の場合は定義よりロリポップ型に含める. 以下では議論を分かりやすく進めるために, まず典型的な制約条件 \mathcal{A} を対象とし, その後同様な結果が平面的な制約条件についても成り立つことを見る.

もし \mathcal{A} が典型的でかつロリポップ型である場合には, 不等式条件 (7.6) は等式条件

$$\frac{1}{2} \text{Tr} [H_c(t)^2] = \Omega^2 \quad (7.8)$$

に帰着されることが以下のように示される. まず一般に, ある時刻 t で $H(t) \in \mathcal{A}$ を $a > 1$ によって $aH(t) \in \mathcal{A}$ と伸長できれば, 同じユニタリ演算子 U_f をより速く実現する制御が

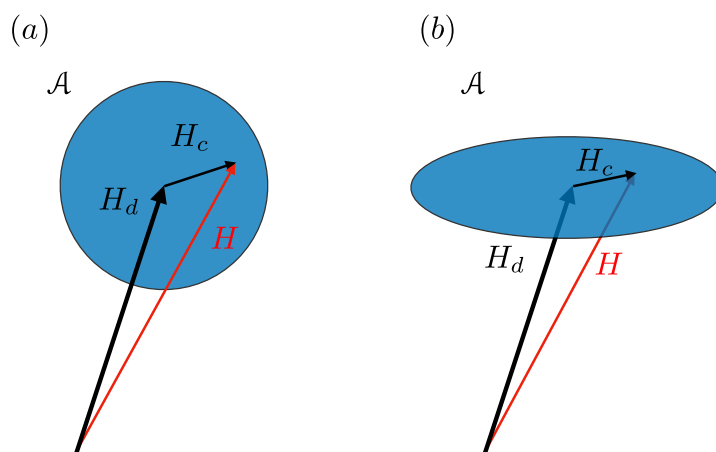


図 7.2 (a) ロリポップ型の制約条件 A の例. これはドリフト H_d と利用可能 \mathcal{C} を用いて $H_d \in \mathcal{C}$ によって特徴づけられる. この場合には全ハミルトニアン H を, その方向を保ったまま A の境界にまで伸長できる. (b) 蓮の葉型の制約条件 A の例. これは $H_d \notin \mathcal{C}$ によって特徴づけられる. 付けられる. この場合には全ハミルトニアン $H(t)$ を, その方向を変えずには伸長できない. Reprinted figure from [60, DOI: 10.1088/1367-2630/ab8ab3]. Creative Commons Attribution 4.0 International license. Copyright 2020 by H. Wakamura and T. Koike.

得られる*⁴. したがって, 時間最適制御はそのような $a > 1$ による引き伸ばしが不可能でなければならない. しかし図 7.2 に示されるように, ロリポップ型の A に対しては A の内部のあらゆる $H(t)$ はそのような引き伸ばしができる. 故に時間最適制御は A の境界に属していなければならない, したがって等式条件 (7.8) を任意の時刻 t において満たす. 以上の事実は文献 [51] の付録において示されたことである. そしてこれは平面的な制約条件についても拡張できる. 平面的でロリポップ型の制約条件についても, 時間最適制御ハミルトニアン $H(t)$ は同様に A の $H_d + \mathcal{C}$ の部分集合としての境界に属する必要がある. したがって, 平面的な制約条件に課される (1 つとは限らない) 不等式条件の内の少なくとも 1 つの不等式は等式条件へと帰着されることになる. ただし勿論, どの等式が達成されるかは分からない. なお平面的でない制約条件では $\dim A < \dim \mathcal{C}$ であるために, 制御超平面 $H_d + \mathcal{C}$ の中では $H(t)$ が常に境界に属しているとみなされる. したがって上記のような議論は何も新しい条件を生み出さないことに注意しておく.

7.1.3 蓮の葉型制約条件と等式帰着の十分条件

前小節で述べたように, 一般の制約条件 A は $H_d \notin \mathcal{C}$ のときに蓮の葉型であるという. この様な制約条件に対しては, ロリポップ型の場合とは少し事情が異なる. また, 既存研究では議論されてこなかった.

*⁴ 微小時間 δt 間の $H(t)$ による時間発展は $U(\delta t) = 1 - i\delta t H(t) + \mathcal{O}(\delta t^2)$ とかける. これは $aH(t)$ を用いれば時間 $\delta t/a$ で実現できる時間発展である.

不等式条件の等式条件への帰着は、一般的には不可能である。これは $a > 1$ による $aH(t)$ なる伸長が一般に不可能であるということに依っている。したがって我々は一般には、より詳細に不等式条件 (7.6) を考察しなければならない。例えば、ハミルトニアンが

$$H(t) = \omega_0 \sigma^z + u(t) \sigma^x \quad (7.9)$$

で与えられる 2 準位系を考える。ここで ω_0 は準位間のエネルギー差であり、 $u(t)$ は $|u(t)| \leq \Omega$ を満たす制御変数である [53]。このとき、制御部分空間は $\mathcal{C} = \mathbb{R}\sigma^x$ であり、明らかに蓮の葉型であると言える。目的ユニタリが $U_f = e^{-i(\pi/4)\sigma^z}$ であるときには、時間最適制御は明らかに $H(t) = \omega_0 \sigma^z$ 、すなわち $u(t) = 0$ である。したがってこの問題は $|u(t)| = \Omega$ のような等式条件に帰着してはならない。このように、蓮の葉型制約条件の下では不等式条件が本質的な役割を果たしうる。

しかしながら蓮の葉型制約条件 \mathcal{A} に対しても、もし追加的な条件が成り立っているときには、MP-QB から不等式条件 (7.6) は等式条件 (7.8) に帰着される。やはりここでも簡単のために典型的な \mathcal{A} から始めることにして、後ほど平面的な制約条件について述べることにする。 \mathcal{A} を典型的な制約条件とする。まず MP-QB により、QB 方程式を満たす Hermite 演算子 F が存在する。この F について、我々は部分空間 \mathcal{C} への F の射影が非零であることを仮定する。すなわち $\mathcal{P}_{\mathcal{C}}$ を \mathcal{C} への直交射影としたときに $\mathcal{P}_{\mathcal{C}}(F) \neq 0$ である (図 7.3 参照)。MP-QB は Pontryagin ハミルトニアン $-1 + \text{Tr}[H_d F] + \text{Tr}[H_c F]$ の最大化を要求するので、時間最適ハミルトニアン $H(t)$ は内積 $(1/2) \text{Tr}[H_c F]$ を最大化する。Cauchy-Schwartz の不等式によれば、

$$\text{Tr}[H_c F] \leq \sqrt{\text{Tr}[H_c^2] \text{Tr}[\mathcal{P}_{\mathcal{C}}(F)^2]} \leq \Omega \sqrt{2 \text{Tr}[\mathcal{P}_{\mathcal{C}}(F)^2]} \quad (7.10)$$

である。ここで等式は H_c が $\mathcal{P}_{\mathcal{C}}(F)$ に比例するときのみ達成され、そのとき H_c のノルムは最大値 Ω である (図 7.3 参照)。したがって、時間最適ハミルトニアン H は等式の制約条件 (7.8) を満たすことになる。以上の証明では $\mathcal{P}_{\mathcal{C}}(F) \neq 0$ という仮定が重要であり、これがなければ H が最大のノルムを達成することは得られない。

平面的な \mathcal{A} についても、同じ仮定 $\mathcal{P}_{\mathcal{C}}(F) \neq 0$ の下で時間最適ハミルトニアン H が $H_d + \mathcal{C}$ の部分集合として \mathcal{A} の境界に属することを同様に示せる。制御ハミルトニアン H_c が領域 $\mathcal{A} - H_d (\subset \mathcal{C})$ の内部にあるとき、常に非ゼロの変分 δH_c で $\text{tr}[\delta H_c F] > 0$ なる変分を行える。このとき、我々は H_c を $H_c + \delta H_c$ へ変化させることで $\text{Tr}[H_c F]$ を大きくできる。ここで、仮定 $\mathcal{P}_{\mathcal{C}}(F) \neq 0$ により、 $\text{Tr}[\delta H_c F]$ が厳密に正であることが保証される。ここで $\mathcal{P}_{\mathcal{C}}(F) \neq 0$ を満たす (H, F) を次節で定義されるように正則な制御と呼べば、以上の結果は次のように述べられる：「もし \mathcal{A} が平面的であれば、全ての正則な制御は \mathcal{A} の境界に属する。」

以上で、我々は MP-QB によりロリポップ型の制約条件の下では不等式条件が等式条件に帰着されることを示し、蓮の葉型でも技術的な仮定 $\mathcal{P}_{\mathcal{C}}(F) \neq 0$ が成り立てば同様の事実が成り立つことを示した。しかし逆に言えば、この仮定が成り立たないときには上記の証明中

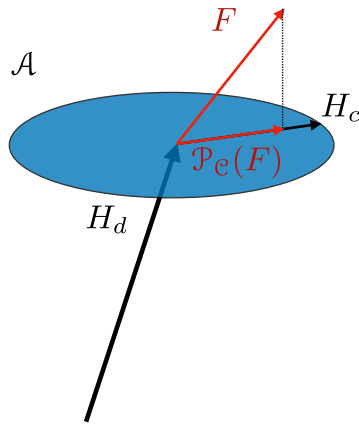


図 7.3 蓮の葉型制約条件における時間最適ハミルトニアン H . \mathcal{P}_c を部分空間 \mathcal{C} への直交射影としてもし $\mathcal{P}_c(F) \neq 0$ であれば, H_c が $\mathcal{P}_c(F)$ に比例するとき内積 $(1/2) \text{Tr}[FH_c]$ は最大のノルムを達成する.

で $(1/2) \text{Tr}[H_c F]$ があらゆる H_c に対して 0 となり, 最大化条件 (6.28) は自明に満たされて何の情報ももたらさなくなってしまう. これは次節で議論する特異制御である.

7.2 特異制御と一般化 GLC 条件

この節では, 我々は特異制御を議論する. 既に述べたように, 特異制御では不等式条件を等式条件に帰着することはできない. また, MP は特異制御に対して十分な最適性の条件を与えない. したがって特異制御を制限する, あるいは除外するような条件が必要とされる. 我々はまず特異制御の正確な定義を与えてから, MP の域を超えて最適な特異制御が満たすべき条件を書き下す. 最後には特異制御の物理的意味についても述べる. これまでと同様に, 問題や定式化は節 6.1 および 6.3.1 に基づいている.

7.2.1 特異制御

\mathcal{A} を一般の制約条件とする. 制御 $(H(t), F(t))$ が時刻 t で特異的 (singular) であるとは, 最大化条件 (6.28) が任意の $H(t) \in \mathcal{A}$ について自明に満たされてしまう, すなわち任意の演算子 $K \in \mathcal{A}$ に対して $\text{Tr}[KF(t)]$ が 1 であり依存しないということである*⁵. 以下では特異的な制御を特異制御と呼ぶ.

節 7.1.1 において \mathcal{A} から定義される \mathcal{C} および H_d を用いると, 特異性条件は

$$\text{Tr}[\mathcal{C}F(t)] = 0 \tag{7.11}$$

すなわち $F(t) \perp \mathcal{C}$ と書かれる (図 7.3 参照). 時刻 t での特異的でない制御 $(H(t), F(t))$ を正則 (regular) な制御, あるいは正則制御と呼ぶ. もし最適制御 $(H(t), F(t))$ が t を含む有

*⁵ 特異性の定義は文献によっては少し異なることがある. これについては本小節最後の注意を参照されたい.

限の時間区間で特異的であるならば、特異性条件 (7.11) の任意階数の時間微分も零になる必要がある。すなわち、

$$\frac{d^n}{dt^n} \text{Tr} [\mathcal{C}F(t)] = 0 \quad (7.12)$$

である。ただしここで $n = 1, 2, \dots$ である。この内 $n = 1$ については

$$\text{Tr} [[\mathcal{C}, H_d]F(t)] = 0 \quad (7.13)$$

である。MP-QB の代数的条件 (6.31) と特異性条件 (7.11) から、任意の最適な特異制御 $(H(t), F(t))$ は

$$\text{Tr} [H_d F(t)] = 1 \quad (7.14)$$

を満たすことが従う。特にこれは、もし一般の \mathcal{A} がロリポップ型の制約条件であるときには特異制御は時間最適とはなりえない、ということを演繹する。なぜなら式 (7.11), (7.14) を同時に満たすには $H_d \notin \mathcal{C}$ である必要があるからである。

特異制御が存在するときには、時間最適制御を見つけるのは次の2つの理由から困難である。まず第一には、MP-QB は各時刻での最適性についての条件なので、全体の制御としては各時刻での正則解と特異解の任意の組み合わせ（連なり）が最適制御の候補となってしまうということである。そのせいで、正則解と特異解をどのように組み合わせれば実際に時間最適な制御が得られるのかが分からないという問題が存在する。第二には、MP-QB だけでは特異制御を同定できないということである。なぜなら特異制御ではもはや H_{MP} が制御ハミルトニアン $H_c(t)$ に依存しておらず、したがって最大化条件 (6.28) は何の情報も与えないからである。しかし、第二の問題については節 7.2.2 で特異制御が最適となるための追加的条件を導くことによって部分的に解決される。

最後に、特異制御の定義について少し注意を述べる。一般の最適制御理論の文脈では、特異制御は時に次のように定義されている。利用可能ハミルトニアン $H \in \mathcal{A}$ を記述する制御変数を $\mathbf{u} \in \mathcal{U}$ とする。ただしここで \mathcal{U} は適切な次元の実空間の部分集合である。このとき $\mathbf{u}(t)$ で定まる制御が特異的であるとは、ある微小変分 $\delta \mathbf{u}$ に対して Pontryagin ハミルトニアンの変分 δH_{MP} が2次まで0となることによって定義される。（例えば文献 [57]）一方で本論文では、Pontryagin ハミルトニアンが \mathcal{A} 上で定数となることによって特異性を定義している。この定義は、次の2点において上記の定義よりも狭いものである。1つは Pontryagin ハミルトニアンの変分 δH_{MP} が無限次まで0となること、もう1つは変分 δH_{MP} が \mathbf{u} についてのあらゆる方向への変分 $\delta \mathbf{u}$ で0となることである。この内本質的な違いは前者である。後者については、もし一般の定義の意味で特異的な制御変数が一部に存在した場合でも、特異的でない制御変数については最大化条件 (6.28) を用いて決めてしまい、 \mathcal{A} を再定義すればよい。これにより、残った制御変数の自由度は全て特異的となる*6。

*6 この「再定義」は文献 [57] でも示されたアイデアである。

7.2.2 一般化 Legendre-Clebsch 条件

ここでは、時間最適制御に関する 3 つ目の結果として、特異制御が最適となるための条件を導く。この条件は MP-QB では最適性が判定しきれなかった特異制御のいくつかの最適性を判定して、最適制御を決定するのに役に立つ条件である。

$H(t)$ は実制御変数 $u^j(t)$, $1 \leq j \leq l$ によって記述されているとする。ただし u^j は ($H(t) \in \mathcal{A}$ となるように) 適当な部分集合 $\mathcal{U} \subset \mathbb{R}^l$ に制限されているとし、全ての u^j は \mathcal{U} の内部で独立に動かせるものとする*7。以下では、我々は u^j が領域 \mathcal{U} の内部にあるものと仮定する。これにより、 u^j について時刻 t で任意の微小変分 $u^j(t) \rightarrow u^j(t) + \delta u^j(t)$ を常に取れる。なお u^j が \mathcal{U} の境界に存在する場合には、 \mathcal{U} の境界の内部にあるとみなしてやればよい。実際に陰関数定理を用いればより低次元の制御変数 u^j を用いて問題を書き下せ、以下の議論も $u^j(t)$ を $u^{j'}(t)$ に、 l を $u^{j'}$ の次元にそれぞれ置き換えてやれば同様に成り立つ。また、そのような場合の計算例は節 7.3 の 3 つ目の例で現れる (具体的な計算は付録 Q を参照)。

一般化 Legendre-Clebsch 条件 (generalized Legendre-Clebsch condition) [57] を導入する。この条件は、評価関数 T の 2 次変分の半正定値性から得られる (詳細は付録 M 参照) ものであり、MP が自明になってしまう特異制御の最適性を判定する際に有用な条件である。まず、 $l \times l$ 行列 $Q^{(m)}$, $m = 0, 1, 2, \dots$ を、その (i, j) 成分

$$Q_{ij}^{(m)} := \frac{\partial}{\partial u^i} \left[\left(\frac{d}{dt} \right)^m \left(\frac{\partial}{\partial u^j} H_{\text{MP}}(H(t), F(t)) \right) \right] \quad (7.15)$$

と与えることによって定義する。 $Q^{(m)}$ が少なくとも 1 つの非零成分を持つ、すなわち行列として $Q^{(m)} \neq 0$ となる最小の m を M と書く。そのような M が存在するとき、任意の最適制御は次の 2 つの条件を満たす*8:

- (i) 整数 M は偶数である。
- (ii) $M = 2k$ のとき、 $(-1)^k Q^{(2k)}$ は半負定値となる。

なおこれは、 $M = 0$ であるときには $Q_{ij}^{(0)} \leq 0$ を意味している。これは MP における最大化条件を 2 次までみたときの条件に他ならない。特異制御においては定義より $Q_{ij}^{(0)} = 0$ なので、 $M > 0$ となる。また、行列 $Q^{(m)}$ は m が偶数であれば対称であり、 m が奇数であれば反対称であることも示される [57] (付録 M)。なお GLC 条件は $H(t)$ の制御変数 $u^j(t)$ による表現に依らないことを注意しておく。すなわち、 $Q^{(m)}$ 自体は表現が変わっても条件 $Q^{(M)} = 0$, $Q^{(M)} \geq 0$, および $Q^{(M)} \leq 0$ は $H(t)$ の制御変数 $u^j(t)$ の書き方に依らない。

*7 もし u^j 間に等式の制約条件が存在する場合にはそれらを全て適用して独立な制御変数の問題へと帰着すれば良い。

*8 既に述べたように我々の特異性の定義は文献 [57] のそれよりも強いものであるから、当然一般化 Legendre-Clebsch 条件も同様に成り立つ。

証明は付録 N を参照されたい。

以下では、特異制御に対しての $Q_{ij}^{(m)}$ の表現を与える（導出は付録 O にまとめた）。この表現は GLC 条件を実際の系に適用する際特に役立つ。まず特異性条件の定義から、

$$Q_{ij}^{(0)} = \frac{\partial^2}{\partial u^i \partial u^j} \text{Tr} [HF] = 0 \quad (7.16)$$

である。もしある $m > 0$ と $k = 0, 1, \dots, m-1$ について $Q^{(k)} = 0$ であれば、 $Q_{ij}^{(m)}$ は

$$Q_{ij}^{(m)} = -i \text{Tr} \left[[h_i, F] R_j^{(m-1)} \right] \quad (7.17)$$

によって与えられる。ただし $h_i := \partial H / \partial u^i$ であり、 $R_j^{(m)}$ は

$$R_j^{(m)} = \frac{d}{dt} R_j^{(m-1)} - i [R_j^{(m-1)}, H], \quad R_j^{(0)} = h_j \quad (7.18)$$

なる漸化式によって与えられる。なおここで $R_j^{(m)}$ は H_{MP} を通して $R_j^{(m)} := \frac{\partial}{\partial F} \left(\frac{d}{dt} \right)^m \frac{\partial}{\partial u^j} H_{\text{MP}}$ によって定義される量である。

これらを用いれば、時間最適制御における GLC 条件の適用は次のフローチャートに沿って行える。

- (o) $m = 0$ とする。このとき、 $Q^{(m)} = 0$ である。
- (i) m を 1 つ増加させ、式 (7.17), (7.18) により $Q^{(m)}$ を計算する。
- (ii) もしこれまでで得られている条件を用いて $Q^{(m)}$ が恒等的に 0 となれば、(i) へ戻る。
- (iii) 奇数の m については、新たに条件 $Q^{(m)} = 0$ を課して (i) へ戻る。
- (iv) 条件 $(-1)^k Q^{(2k)} \geq 0$ を課し、終了する。

\mathcal{A} が平面的であるような特殊な場合には、ハミルトニアン $H(t)$ を独立な制御変数 $\{u^j\} \in \mathcal{U}$ によって

$$H(t) = H_d + H_c(t) = H_d + \sum_{j=1}^l u^j(t) h_j \quad (7.19)$$

と書ける。このとき式 (7.17) および (7.18) における h_j は時間に依存しない演算子であり、制御部分空間 \mathcal{C} を張る。この場合には初めの幾つかの m について $Q_{ij}^{(m)}$ の単純な具体形を

$$\begin{aligned} Q_{ij}^{(1)} &= -i \text{Tr} [[h_j, h_i] F], \\ Q_{ij}^{(2)} &= \text{Tr} [[[H, h_j], h_i] F], \\ Q_{ij}^{(3)} &= i \text{Tr} [[[H, [H, h_j]], h_i] F] + \text{Tr} \left[\left[\left[\frac{dH}{dt}, h_j \right], h_i \right] F \right] \end{aligned} \quad (7.20)$$

と書き下せる。例えば $m = 1$ についての GLC 条件は $1 \leq i, j \leq l$ について $\text{Tr} [[h_i, h_j] F] = 0$ を導く。これはすなわち

$$\text{Tr} [[\mathcal{C}, \mathcal{C}] F] = 0 \quad (7.21)$$

ということである。この条件により、時間最適な特異的制御は $H_d \notin [\mathcal{C}, \mathcal{C}]$ であるときのみ存在することが従う。そうでない場合には式 (7.21) が $\text{Tr}[H_d F] = 0$ を演繹するが、これは明らかに式 (7.14) と矛盾してしまう。

7.2.3 特異的制御の物理的意味

我々はこれまでに得た条件から、制御の特異性について次のような単純な期待ができる。それは正則制御が制御ハミルトニアン H_c を上手く活用するような制御であるのに対して、特異制御がドリフトハミルトニアン H_d に身を任せるような制御であるということである。この単純な期待は、平面的あるいは典型的な \mathcal{A} を考えたときに成り立つ次の2つの性質によって支持される。1つは典型的な \mathcal{A} について、正則制御が制御ハミルトニアンのノルムを常に最大化する必要があることである。平面的な \mathcal{A} についても、正則制御は \mathcal{A} の境界を達するので、不等式制約が何らかの意味で H_c の大きさを制限している場合には同様である。もう1つは平面的な \mathcal{A} について、最適な特異的制御が存在するためにはドリフトハミルトニアン H_d が $H_d \notin \mathcal{C}$ および $H_d \notin [\mathcal{C}, \mathcal{C}]$ を満たさなければならないということである。前者の条件 $H_d \notin \mathcal{C}$ は単にドリフト H_d が制御ハミルトニアンとは異なるものであるということを示している。後者の条件 $H_d \notin [\mathcal{C}, \mathcal{C}]$ は制御ハミルトニアン $H_c(t)$ が少なくとも微小時間 δt の2次までで $e^{-i\alpha H_d}$ のようなユニタリ演算子を生成するのに役に立たないということを示している。これは摂動論、あるいは有名な Baker-Campbell-Hausdorff の公式によって示せる。例として $t \in [0, \delta t]$ で $H(t) = H_d + K_1$, $t \in [\delta t, 2\delta t]$ で $H(t) = H_d + K_2$ であるようなハミルトニアンを考える。このとき、時間 $[0, 2\delta t]$ で得られるユニタリ演算子 $U(2\delta t)$ は

$$\begin{aligned} U(2\delta t) &= e^{-i\delta t(H_d+K_2)} e^{-i\delta t(H_d+K_1)} \\ &= \exp \left[-2i\delta t H_d + \delta t(K_1 + K_2) + \frac{\delta t^2}{2} [H_d + K_2, H_d + K_1] + \mathcal{O}(\delta t^3) \right] \end{aligned} \quad (7.22)$$

である。ここで $K_1, K_2 \in \mathcal{C}$ とすると、条件 $H_d \notin \mathcal{C}, [\mathcal{C}, \mathcal{C}]$ により上式の指数関数の肩の中の第2項と第3項が H_d に比例する項を生成しないことが分かる。

7.3 適用例

ここでは、特異制御が存在するような制御系の例を3つ見ることで、我々の定式化した MP-QB, および GLC 条件がどのように機能するかをみることにする。初めの2つの例は先行研究で既に解析されている2準位系の単純な例を見直したものである。初めの例では特異制御が実際に最適となり、2つ目の例では特異制御が存在はするがそれが最適ではないということが GLC 条件によって示されるという例である。そして3つ目の例はこれまで特異制御が詳細に議論されたことがない3次元系の例である。この例では、GLC 条件によって

いくつかの特異制御が最適制御から除外されるが、幾つかの制御は最適となりうるということが示される。ただし、実際にはこの例では1つの特異制御のみを考えるので十分であることも示される。

7.3.1 例 1: Landau-Zener 模型

まず、Landau-Zener 模型での時間最適制御を考える。文献 [53] と同じように、系のハミルトニアンは

$$H(t) = \omega_0 \sigma^z + u(t) \sigma^x \quad (7.23)$$

であるとする。ただしここで $\omega_0 > 0$ は定数パラメータであり、 $u(t)$ は $|u(t)| \leq \Omega$ を満たす制御変数である。この系のドリフトは $H_d = \omega_0 \sigma^z$ 、制御部分空間は $\mathcal{C} = \text{Span}\{\sigma^x\}$ であり、利用可能ハミルトニアン全体の集合 \mathcal{A} は典型的で蓮の葉型である。ここで特異性条件 (7.11) より、

$$\text{Tr}[\sigma^x F] = 0 \quad (7.24)$$

であるときにその制御は特異的である。この条件が有限の時間区間で成り立つとき、この時間微分

$$\frac{d}{dt} \text{Tr}[\sigma^x F] = -i \text{Tr}[\sigma^x [H, F]] = -2\omega_0 \text{Tr}[\sigma^y F] = 0, \quad (7.25)$$

$$\frac{d^2}{dt^2} \text{Tr}[\sigma^x F] = 2i\omega_0 \text{Tr}[\sigma^y [H, F]] = 4\omega_0 u(t) \text{Tr}[\sigma^z F] = 0 \quad (7.26)$$

が成り立つ。特異制御が時間最適であるときには、条件 (7.14) から

$$\text{Tr}[H_d F] = \omega_0 \text{Tr}[\sigma^z F] = 1 \quad (7.27)$$

である。式 (7.26) と (7.27) から、 $u(t) = 0$ が従う。これこそ、時間最適となりうる唯一の制御である。式 (7.20) を計算することで分かるように、GLC 条件を用いてもこの制御の可能性は排除されない*⁹。文献 [53] は実際にこの制御 ($u(t) = 0$) を最適制御として扱っている。ここでは「バンオフバン」 (“bang-off-bang”) 制御が最適であり、正則な「バン」制御 $u(t) = \pm\Omega$ と特異的な「オフ」制御 $u(t) = 0$ によって構成されている*¹⁰。

7.3.2 例 2: 2 状態系

次に、節 6.1 でも例として取り上げた1つの2準位系を議論する。ハミルトニアンは

$$H(t) = \omega_0 \sigma^z + u^x(t) \sigma^x + u^y(t) \sigma^y$$

*⁹ まず $m = 1$ のときは明らかに $Q^{(1)} = 0$ である。次に $m = 1$ では、 $Q^{(2)} = 4\omega_0 \text{Tr}[\sigma^z F]$ である。GLC 条件により $Q^{(2)} \geq 0$ なので、 $\text{Tr}[\sigma^z F] \geq 0$ を得る。これは式 (7.27) 以上のことは述べておらず、またそのような F は何の矛盾もなく存在しうる。

*¹⁰ ある時刻を境にして制御変数がある上限と下限で切り替わるような制御はバンバン (“bang-bang”) 制御と呼ばれ [98] しており、この名称の由来となっている。

であり, ただし $\omega_0 > 0$ はまた適当な係数である. そして $u^x(t)$ および $u^y(t)$ は $(u^x)^2 + (u^y)^2 \leq \Omega^2$ を満たす制御変数である. この系でドリフトは $H_d = \omega_0 \sigma^z$ であり, 制御部分空間は $\mathcal{C} = \text{Span}\{\sigma^x, \sigma^y\}$ である. 制約条件 \mathcal{A} は典型的で蓮の葉型である.

$(H(t), F(t))$ に対する特異性条件は $\text{Tr}[\mathcal{C}F] = 0$, すなわち

$$\text{Tr}[\sigma^x F] = \text{Tr}[\sigma^y F] = 0 \quad (7.28)$$

によって与えられる. またこのとき特異制御が時間最適となるためには, 式 (7.14) から

$$\omega_0 \text{Tr}[\sigma^z F] = 1 \quad (7.29)$$

となる必要がある. 先程の例と同様に式 (7.28) の時間微分と式 (7.29) により, $u^x = u^y = 0$ となることが示される. このように MP-QB からは特異制御が最適制御の候補として残るが, GLC 条件よりこれらは最適となりえないことが示される. 式 (7.20) で $h_1 = \sigma^x$ および $h_2 = \sigma^y$ とすれば, 行列 $Q^{(1)}$ の (1, 2) 成分を

$$Q_{12}^{(1)} = -i \text{Tr}[[\sigma^x, \sigma^y]F] = 2 \text{Tr}[\sigma^z F] \quad (7.30)$$

のように得る. GLC 条件よりこれは 0 となる必要があるが, これは明らかに式 (7.29) と矛盾する. したがって, 特異制御 ($u^x = u^y = 0$) は時間最適とはなりえない. なおこの主張自体は既に文献 [50] で示されているが, 証明は GLC 条件によって簡素となっている.

7.3.3 例 3: 対称な 2 つの 2 準位系

最後に, 3次元 Hilbert 空間での量子制御問題を考える. 物理的な対応をより分かりやすくするために, 2つのスピン (2準位系) による表現を利用する. ハミルトニアン

$$H_2(t) = \omega_0 \sigma_1^x \sigma_2^x + J(t) \sigma_1^z \sigma_2^z + \sum_{i=1}^3 \frac{b^i(t)}{2} (\sigma_1^i + \sigma_2^i) \quad (7.31)$$

を考える. ここで $\omega_0 > 0$ は定数であり, $(J, b^1, b^2, b^3) \in \mathcal{U} \subset \mathbb{R}^4$ は制御変数である. \mathcal{U} は $J^2 + (b^1)^2 + (b^2)^2 + (b^3)^2 \leq \Omega^2$ によって規定されているとする. 我々は制御ハミルトニアンがドリフトハミルトニアンよりもノルムの意味で大きいこと, すなわち $\omega_0 < \Omega$ を仮定する. このハミルトニアンは 2 スピンの入れ替えについて対称であり, したがって 3 重項によって構成される全 Hilbert 空間の対称な部分空間 $\mathcal{H}_{\text{sym}} \subset \mathcal{H}$ は任意の時間発展 $U(t)$ の下で不変である. この 3 重項の制御のみを考える場合には, 我々は 1 重項を無視して \mathcal{H}_{sym} のみを考えれば良い. すなわち $\text{SU}(3)$ 上の制御問題である. 元のハミルトニアン H_2 を \mathcal{H}_{sym} 上に制限して書き直せば,

$$H(t) = \omega_0 \tilde{\Sigma}^x + J(t) \tilde{\Sigma}^z + \sum_i b^i(t) S^i \quad (7.32)$$

となる。ただし $\Sigma^x, \Sigma^z, S^1, S^2$ および S^3 はそれぞれ $\sigma_1^x \sigma_2^x, \sigma_1^z \sigma_2^z, (\sigma_1^x + \sigma_2^x)/2, (\sigma_1^y + \sigma_2^y)/2$ および $(\sigma_1^z + \sigma_2^z)/2$ の \mathcal{H}_{sym} 上への制限である。そしてチルダは \mathcal{H}_{sym} 上でトレースが 0 となるように定数を加えたことを意味している。精確な定義は付録 P で述べる。

ハミルトニアン (7.32) をドリフトハミルトニアンと制御ハミルトニアンに分けると、

$$H_d = \omega_0 \tilde{\Sigma}^x, \quad H_c(t) = J(t) \tilde{\Sigma}^z + \sum_i b^i(t) S^i, \quad (7.33)$$

$$\mathcal{C} = \text{Span} \{ \tilde{\Sigma}^z, S^1, S^2, S^3 \} = \text{Span} \{ \lambda_1 + \lambda_6, \lambda_2 + \lambda_7, \lambda_3, \lambda_8 \} \quad (7.34)$$

のようになる。ただしここで $\{\lambda_i\}_{i=1}^8$ は Gell-Mann 行列である。(付録 P)。制約条件 \mathcal{A} は平面的で蓮の葉型である。ここで今考えている制御問題は 2 つの 2 準位系として見れば典型的であったが、1 つの 3 準位系として見たときにはそうではなく、平面的であることまでしか言えないことを注意しておく*11。

$(H(t), F(t))$ を特異制御であるとする。 F を Gell-Mann 行列 $\{\lambda_i\}_{i=1}^8$ を用いて $F = \sum_{i=1}^8 f^i \lambda_i$ と展開すると、特異性条件 (7.11) およびその微分 (7.13) から

$$f^1 + f^6 = f^2 + f^7 = f^3 = f^8 = f^5 = 0 \quad (7.35)$$

を示せる。これらの条件の下で代数的条件 (6.31) を用いれば、

$$f^4 \neq 0 \quad (7.36)$$

を得る。

以下では、GLC 条件を適用する。 (J, b^1, b^2, b^3) が許された領域 \mathcal{U} の内部に存在していると仮定し、 \mathcal{U} の境界については最適とならないことを付録 Q で示す。式 (7.20) で $j = 1, 2, 3$ について $h_j = S^j$ とし、 $h_4 = \tilde{\Sigma}^z$ として行列 $Q^{(1)}$ を計算する。唯一の非自明な項は

$$Q_{41}^{(1)} = -Q_{14}^{(1)} = i4\sqrt{2}f^2, \quad (7.37)$$

$$Q_{42}^{(1)} = -Q_{24}^{(1)} = -i4\sqrt{2}f^1 \quad (7.38)$$

である。GLC 条件から $Q^{(1)} = 0$ なので、 $f^1 = f^2 = 0$ を得る。したがって、全ての $i \neq 4$ について $f^i = 0$ が示される。そしてさらに $i \neq 4$ についての条件 $df^i/dt = -i \text{Tr} [\lambda_i [H, F]] = 0$ から、

$$b^i = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad (7.39)$$

を得る。したがって以上より、最適な特異制御では f^4 と J 以外の全ての変数は零になるこ

*11 なおこれは単に、 \mathcal{H} と \mathcal{H}_{sym} でのノルムの定義の違いによるものである。以下の議論では主に内点を扱っているためこの違いは影響を及ぼさない。付録 Q では境界上の制御を扱っているため J, b^1, b^2, b^3 の定義は少し変わりうるが、議論は変わらないことに注意しておく。

とが示された。次に $Q^{(2)}$ を計算すると、

$$Q^{(2)} = 4 \begin{pmatrix} Jf^4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & (\omega_0 - J)f^4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2f^4\omega_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (7.40)$$

を得る。GLC 条件から、 (H, F) が最適となるためには $Q^{(2)}$ は正定値となる必要がある。これはすなわち、

$$0 \leq f^4, \quad 0 \leq J \leq \omega_0 \quad (7.41)$$

である。以上より結果として、特異的な時間最適ハミルトニアンは

$$H(t) = \omega_0 \tilde{\Sigma}^x + J(t) \tilde{\Sigma}^z \quad (7.42)$$

となる必要がある。ただし $0 \leq J(t) \leq \omega_0$ である。

GLC 条件の適用は以上で終わりだが、簡単な考察から最適な特異制御をさらに

$$H(t) = H_d = \omega_0 \tilde{\Sigma}^x \quad (7.43)$$

のみに絞り込める。なぜなら、特異制御 (7.42) による時間発展は特異制御 (7.43) と正則制御の組み合わせによっても実現できるからである。これについて見るために、時間区間 $[t_1, t_2]$ での時間最適制御 $H(t)$ がハミルトニアン (7.42) であるとする。このとき、当該時間 $[t_1, t_2]$ のユニタリ演算子は

$$U_{\text{sing}}(t_2, t_1) = e^{-i\omega_0(t_2-t_1)\tilde{\Sigma}^x} e^{-i(\int_{t_1}^{t_2} dt J(t))\tilde{\Sigma}^z} \quad (7.44)$$

によって書ける。ただし $\tilde{\Sigma}^z$ と $\tilde{\Sigma}^x$ が可換であることに注意されたい^{*12}。ここで $J < \Omega$ より、時刻 $t_3 \in [t_1, t_2]$ で

$$\int_{t_1}^{t_2} dt J(t) = (t_3 - t_1)\Omega \quad (7.45)$$

を満たすものが存在する。したがって、ユニタリ演算子 (7.44) は時間 $[t_1, t_3]$ で $J(t) = \Omega$ として $[t_3, t_2]$ で $J(t) = 0$ とすることでも実現できる。しかし $J = \Omega$ は式 (7.41) に示されているように特異制御として最適制御とはなれないので、これは正則な制御である。したがって以上より、任意の時間最適な特異制御 (7.42) は $J = \Omega$ なる正則な制御と特異制御 (7.43) の連なりによって書けることが分かる。以上より特異制御としては本質的に $H(t) = H_d$ のみを考えればよく、最適制御は MP-QB によって定まる正則な制御と $H = H_d$ なる特異制御の組み合わせによって書かれることとなる。実際に目的ユニタリ演算子 U_f が

$$U_f = e^{-i\alpha\tilde{\Sigma}^x} \quad (7.46)$$

のときには $H_c = 0$ とした特異制御が最適になると期待され^{*13}、時間は $T = \alpha/\omega_0$ である。

*12 この可換性は 2 スピン系では $\sigma^z \otimes \sigma^z$ と $\sigma^x \otimes \sigma^x$ の可換性と等価である。

*13 これは厳密には証明されていない。

第 8 章

結論

本博士論文では、最適な状態保護制御と時間最適制御という、量子系における 2 つの最適制御について議論した。以下では本論文の構成を顧みて各章の内容について簡潔に要約する。

第 2 章では量子力学の定式化から初めて、量子系で起こりうる状態変化の一般的な記述を与えた。量子系の状態変化は 2 種類に大別され、条件付きでない状態変化は TPCP 写像によって、条件付きの状態変化は CP インストルメントによって記述されることが示された。物理的には TPCP 写像は適当な外部系との相互作用によって記述される状態変化であり、CP インストルメントは測定器系との相互作用の後に測定器系への測定を行う間接測定モデルによって記述される状態変化である。これらは外場の印加や物理量の測定といった具体的な操作を明示することなく抽象的に物理系への操作を記述できるため、量子系への制御を記述するための重要な数学的道具となる。

第 3 章では、最も単純な量子系である 2 準位系の幾何学的表現を与えた。ここでは、後に続く章で 2 準位系の量子制御を取り扱うために必要な知識を確認している。2 準位系のユニタリ発展や抽象的な概念である TPCP 写像を幾何学的に理解することが本章の目的であった。

以上を踏まえ第 4, 5 章では、1 ステップの量子フィードバック制御を記述する事前事後制御の枠組み (図 5.1) の中で量子状態保護問題を一般に議論した。ここで事前制御とはノイズ過程の前に行う制御を、事後制御とはノイズ過程の後に行う制御を指している。事前制御は CP インストルメント $\{J_\omega\}_\omega$ 、事後制御は TPCP 写像 $\{C_\omega\}_\omega$ によってそれぞれ指定される。まず第 4 章で、我々は事後制御のみによる状態保護問題を考えた。先行研究 [18, 19] では、2 準位系での 2 状態保護問題が詳しく調べられていた。これは保護すべき量子状態の候補が 2 つであるような問題である。そこでは最適な制御が、量子的な弱い測定を含むという興味深い結果が得られていた。弱い測定とは測定によって得られる情報が少ない代わりに与える擾乱も少ないような測定であり、量子測定における情報と擾乱のトレードオフ関係を非自明に満たす。我々はこの結果が一般的であるかを明らかにすべく、全状態保護問題を議

論した。これは保護すべき量子状態の候補が全ての量子状態であるような問題であり、我々は保護すべき量子状態が何であるか全く分からない。この場合には2準位系のあらゆるノイズについて、量子状態を保護することは本質的に不可能であると示された。これらの結果は、状態保護を行うためには始状態への知識が必要であることを示唆している。これを踏まえて第5章では、事後制御だけでなく事前制御も含めて状態保護問題を考えた。一般の量子系で任意のノイズモデルに対して最適な制御を示すことは非常に困難であるため、我々は次の2つの状況を取り扱った。1つは一般の量子系を対象とする代わりにノイズモデルをdepolarizing型に制限した場合であり、もう1つは2準位系に制限する代わりに単位的という広いクラスのノイズを扱う場合である。我々はこのいずれの場合に対しても、最適な制御が古典的な測定に基づいていることを示した。ここで古典的な測定とは、量子系から最大限に情報を引き出す測定あるいは全く引き出さない測定を指している。これは量子測定における情報と擾乱のトレードオフ関係を自明に満たす測定である。そして非単位的ノイズに関する結果 [24] との比較によってノイズの持つ単位的という性質が最適制御の量子性を特徴付けていることを見た。

第6, 7章では、Pontryaginの最大値原理に基づく量子系での時間最適制御理論を定式化し、特異制御の最適性について議論した。一般に、時間最適制御問題は目的とするユニタリ変換 U_f と、理論的あるいは実験的な系への制約条件を反映した利用可能なハミルトニアン $A \subset \mathfrak{su}(N)$ の組 (A, U_f) によって指定される。この下で、 U_f を可能な限り短い時間で実現するハミルトニアン $H(t)$ を見つけることが目的である。既に似たような定式化として量子最速降下曲線 (quantum brachistochrone; QB) [39,40] という理論が存在するが、これは A が等式のみによって表されている場合にしか適用できないという欠点がある。不等式条件も同様に扱うために、我々は1つ目の結果として、現代的な制御理論である Pontryagin の最大値原理を用いて QB の拡張を行った。この新しい定式化を簡単のために MP-QB と呼ぶ。MP-QB では最適性の必要条件として、Pontryagin ハミルトニアンという量を制御ハミルトニアンについて各時刻で最大化することが求められる。第7章では、2つ目の結果として特異制御とドリフト場、および不等式条件の関連性について議論した。ここで特異制御とは Pontryagin ハミルトニアンが制御ハミルトニアンへの依存性を失い、したがって MP-QB からは最適な制御が定まらないような制御である。この問題を克服するため、我々は3つ目の結果として追加的な最適性の必要条件、一般化 Legendre-Clebsch 条件 (GLC 条件) を導入した。すなわち、GLC 条件を量子系の時間最適制御に相応しい形に書き直した。これにより、特異制御に対しても最適な制御として許される形をある程度制限できるようになる。これらは具体例の中で実際に適用される。まとめると、我々は量子系における一般的な時間最適制御理論を構築し、不等式制約条件がどのような状況で必要となるのかを議論し、さらに不等式条件が必要となる特異制御について最適性の必要条件を追加的に与えた。

本論文で示された事後制御のみによる全状態保護の不可能性に関する結果は文献 [58] で示されたものであり、事前事後制御に関する2つの結果は文献 [59] で示されたものである。

特に後者の結果は文献 [58] でも部分的に証明されている。それは 2 準位系の depolarizing 型ノイズに限定した場合であり、証明は事前事後制御を実パラメータで記述して実関数の最適化問題に帰着するという素朴な方法に基づいていた。一方で文献 [59] および本論文はそれに比べて大変一般的な方法に基づいている。その方法は、ノイズとそれに対する最適制御との関係についての 2 つの重要な性質に基づいていた。証明は 2 つ以上の制御法が同時に最適となるノイズを見つけ、それによりある制御が最適となる領域（凸空間）を決定するという流れであった。1 つの制御法によって最適に制御されるノイズを水の流れに例えると、本論文の証明はまず複数の制御が最適となる「分水嶺」を見つけ、その分水嶺を頼りに流れを分類している。この手法では分水嶺のみに対して最適な制御を示せば良かったので、広いクラスのノイズに対して最適な制御を示せた。

状態保護に関する我々の結果は、単位的ノイズに対しては古典的な制御以上に状態を保護できないことを示している。一方で、Wang *et al.* [24] の数値計算結果からは非単位的ノイズに対して古典的な制御が最適とならないことが読み取れる。これらの結果より、真に量子的な制御はノイズの持つ「偏り」を利用することによって状態保護を実現するということが示唆される。したがって我々の結果は、ノイズの持つ単位的あるいは非単位的という性質に対して制御理論の立場から特徴付けを与えるものとなる。

なお本論文では、2 準位系での非単位的ノイズに対する状態保護や一般の量子系での depolarizing 型ノイズ以外のノイズに対する状態保護については十分に議論できなかった。その意味で、前述したようなノイズの偏りと量子的な制御との関係性は予想としてしか述べられない。これらを追求することは、今後の課題であると言える。

本論文で示された時間最適制御に関する結果は、すべて文献 [60] で与えられたものである。MP-QB の構築は単なる一般化ではなく、ドリフト場と不等式条件の等式条件への帰着、そして特異制御の 3 つが深く関連していることを明らかにする意義がある。そのために我々は一般の制約条件 A を、ドリフト H_d が制御部分空間 \mathcal{C} に含まれるか否かによってロリポップ型と蓮の葉型の 2 種類に分類した。そして、現実的なほとんどの状況に適用可能であると思われる平面的な制約条件というクラスを定義した。これらにより、次のことが言える。

- (i) もし制約条件 A がロリポップ型であれば、時間最適な特異的制御は存在しない（節 7.2.1）。
- (ii) もし A が平面的であれば全ての最適な正則制御は A の（制御超平面 $H_d + \mathcal{C}$ の中の）境界上に存在する。すなわち、不等式条件の内少なくとも 1 つがその等号を達成する。（節 7.1.2 および節 7.1.3）。

この (i), (ii) から、もし A が平面的でロリポップ型であれば全ての最適制御は正則であり、不等式条件の等号を達成する。他方で、もし A が蓮の葉型であればそのような帰着は場合による（節 7.3）。

本論文で与えた不等式条件によって制約された系で時間最適制御を見つける方法をまとめておく。簡単のために不等式条件は1つだけであるとする。まず、系の制約条件がロリポップ型であるか蓮の葉型であるかを確認する。もしロリポップ型であれば最適制御は正則であり、そうでなければ最適な制御は一般に正則な制御と特異制御の連なりによって書かれる。さらに正則な制御は不等式条件の等号を達成するので、不等式条件が1つであったならQBの研究 [40] と同様にQB方程式を解くことによって最適な制御を求められる。最適な特異的制御は最大値原理のみによっては定まらないので、GLC条件を用いる必要がある。以上より時間最適制御は、ロリポップ型の制約条件に対してはQB方程式の解（正則な制御）によって、蓮の葉型に対してはQB方程式の解（正則な制御）とGLC条件を満たす特異制御のある連なりによって構成される。

MP-QBとGLC条件から、正則な制御と特異制御の違いについて次のような直感的理解を得られる。それは正則な制御は制御ハミルトニアン H_c を活用する傾向にあり、一方で特異制御はドリフトハミルトニアン H_d に身を任せる傾向にあるということである。これは典型的な制約条件を考察することで理解できる。典型的な制約条件の下では最適な正則な制御は制御ハミルトニアンの最大のノルムを達成する。一方で最適な特異制御では、ドリフトハミルトニアン H_d が \mathcal{C} にも $[\mathcal{C}, \mathcal{C}]$ にも入っていないために制御ハミルトニアン H_c によって $e^{-i\alpha H_d}$ のようなユニタリ変換を（2次までの近似で）生成できない。このために、特異制御では H_d に身を任せる必要が生じる。実際に節 7.3 の最後の例においては、 $H_c = 0$ なる特異制御が最適となっている。このような事情から、上記のような直感的理解が支持される。ただしこれらの議論は摂動論の2次までの範囲でしか述べられていないので、より一般的な状況でもこのような理解が成り立っているかは今後の課題である。

以上のように、本論文では量子系での最適な状態保護と時間最適制御について議論してきた。前者では特定のノイズに対して具体的に最適な制御を導くことで、ノイズに対して量子状態を保護できる限界、および最適な制御の中での量子測定の役割について議論した。後者では Pontryagin の最大値原理に基づいて、時間最適量子制御の一般論を構築した。量子論におけるあらゆる時間最適制御はこの理論によって取り扱え、実際に 2,3 準位系の最適制御を例示した。

謝辞

本博士論文は、著者が慶應義塾大学理工学研究科基礎理工学専攻の修士課程および後期博士課程において、古池達彦先生の下で行った研究の一部をまとめたものです。古池達彦先生の温かいご指導のお陰で、5年間に渡る研究生活は私自身にとって非常に有意義なものになったと感じています。研究そのものに対する指導だけでなく、研究に対する心構えや考え方などについても教わる所ばかりでした。また研究の他にも、公私に渡り大変にお世話になりました。心より感謝申し上げます。

慶應義塾大学理工学部の藤谷洋平教授、山本直樹教授、長谷川太郎専任講師には、本論文の審査を引き受けて頂きました。論文には至らない点が多くあったにも関わらず、精読していただき、その上で貴重な助言を頂きました。また論文審査の手続きに関してもご心配いただき、大変に感謝しております。ありがとうございます。

研究グループの先輩である川久保龍一郎さん、遠藤傑さんには研究に関しての色々な助言を頂き、分からないことを多岐にわたって丁寧に教えていただきました。川久保さんには、私が学部4年生の時から4年にもわたってお世話になりました。研究を進める上で川久保さんに影響を受けた部分は多かったと感じています。公私ともに大変お世話になりました。さらに卒業されてからも助言を頂くことがあり、感謝しております。遠藤さんは私が大学院に進学すると同時にNTTに研究生という形で通うようになり、大学でお会いする機会は減りましたが、それにも関わらず公私ともに大変にお世話になったと感じております。海外に進学されてからも気にかけて頂くことが多く、感謝しております。

研究グループ以外にも、理論研究室の構成員の方々にも大変お世話になりました。セミナーでは多様な話題について紹介して頂き、また私の研究に対しても様々な角度から議論して頂きました。また研究とは直接関わりのないようなことでも皆さんから助けを借りることは多く、非常に感謝しております。ありがとうございます。

そして最後になりますが、研究生活を支えてくださった父と母、および親族に感謝致します。父と母は私の大学院への進学を快く受け入れ、応援してくださいました。研究活動について理解を持ち、時に背中を押してくれる両親を持てたことは私にとって本当にありがたいことです。この両親の存在がなければ、今の私はなかったと思います。心から感謝しています。

付録

A Gell-Mann 行列の定義

Gell-Mann 行列の定義は,

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \lambda_4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_5 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_6 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \lambda_7 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, & \lambda_8 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{A-1}$$

である. これらは $\mathfrak{su}(3)$ の (非正規) 完全直交基底をなしている*¹.

B アフィン写像の線形写像への拡張

まず \mathcal{H} 上の密度演算子全体の集合を $\mathcal{S}(\mathcal{H})$, 正演算子全体の集合を $\mathcal{L}(\mathcal{H})_+$, Hermite 演算子全体の集合を $\mathcal{L}(\mathcal{H})_h$ とし, 次の補題を証明する.

補題 (線形演算子の分解). 任意の $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ は非負の実数 p_0, p_1, p_2, p_3 と $\rho_0, \rho_1, \rho_2, \rho_3$ によって

$$A = \sum_{\mu=0}^3 i^\mu p_\mu \rho_\mu\tag{B-2}$$

と展開できる.

ただし上式において i は虚数単位であり, その肩の μ はべき乗を表す.

*¹ ここで規格化は $\text{Tr}[\lambda_i \lambda_j] = 2\delta_{ij}$ によってなされている. なので, 例えば $\{\lambda_i/\sqrt{2}\}_i$ などとすれば直ちに正規完全直交基底を得られる.

証明. 任意の $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ は $B = (A + A^\dagger)/2, C = (A - A^\dagger)/(2i) \in \mathcal{L}(\mathcal{H})_h$ を用いて $A = B + iC$ とできる. そして任意の $B, C \in \mathcal{L}(\mathcal{H})_h$ は, 適当な $D, D', E, E' \in \mathcal{L}(\mathcal{H})_+$ を用いれば

$$B = D - E, \quad C = D' - E' \quad (\text{B-3})$$

と書ける*2. ここで

$$p_0 = \text{Tr } D, \quad p_1 = \text{Tr } D', \quad p_2 = \text{Tr } E, \quad p_3 = \text{Tr } E' \quad (\in [0, \infty]), \quad (\text{B-4})$$

$$\rho_0 = \frac{D}{\text{Tr } D}, \quad \rho_1 = \frac{D'}{\text{Tr } D'}, \quad \rho_2 = \frac{E}{\text{Tr } E}, \quad \rho_3 = \frac{E'}{\text{Tr } E'} \quad (\in \mathcal{S}(\mathcal{H})) \quad (\text{B-5})$$

とすれば式 (B-2) が示される. □

これまでに示した補題を用いることで次の定理を証明する.

定理 (線形拡張). $\mathcal{S}(\mathcal{H})$ から線形空間 V へのアフィン写像 f は, $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ 上の線形写像へと一意的に拡張できる.

証明. 以下では f の定義域を, $\mathcal{L}(\mathcal{H})_+, \mathcal{L}(\mathcal{H})_h, \mathcal{L}(\mathcal{H})$ の順に拡張していく.

(i) まず任意の $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})_+$ を取ると, これは常に

$$A = \text{Tr } A \frac{A}{\text{Tr } A}, \quad \frac{A}{\text{Tr } A} \in \mathcal{S}(\mathcal{H}) \quad (\text{B-6})$$

と一意的に表示できるから,

$$f'(A) := \text{Tr } A f\left(\frac{A}{\text{Tr } A}\right) \quad (\text{B-7})$$

とすれば f' は一意に定まって $f'|_{\mathcal{S}(\mathcal{H})} = f$ を満たし, $A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})_+, \alpha, \beta \geq 0$ に対

*2 例えば B の固有値分解を $B = \sum_j b_j |j\rangle\langle j|$ としたとき, $B = \sum_{j; b_j \geq 0} b_j |j\rangle\langle j| - \sum_{j; b_j < 0} b_j |j\rangle\langle j|$ とすればいい.

して

$$\begin{aligned}
f'(\alpha A + \beta B) &= \text{Tr}(\alpha A + \beta B) f\left(\frac{\alpha A + \beta B}{\text{Tr}(\alpha A + \beta B)}\right) \\
&= \text{Tr}(\alpha A + \beta B) f\left(\frac{\alpha \text{Tr} A}{\text{Tr}(\alpha A + \beta B)} \frac{A}{\text{Tr} A} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\beta \text{Tr} B}{\text{Tr}(\alpha A + \beta B)} \frac{B}{\text{Tr} B}\right) \\
&= \text{Tr}(\alpha A + \beta B) \left[\frac{\alpha \text{Tr} A}{\text{Tr}(\alpha A + \beta B)} f\left(\frac{A}{\text{Tr} A}\right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\beta \text{Tr} B}{\text{Tr}(\alpha A + \beta B)} f\left(\frac{B}{\text{Tr} B}\right) \right] \\
&= \alpha \text{Tr} A f\left(\frac{A}{\text{Tr} A}\right) + \beta \text{Tr} B f\left(\frac{B}{\text{Tr} B}\right) \\
&= \alpha f'(A) + \beta f'(B)
\end{aligned} \tag{B-8}$$

となる.

(ii) 次に任意の $B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})_h$ を取ると, これは常に

$$B = C - D, \quad C, D \in \mathcal{L}(\mathcal{H})_+ \tag{B-9}$$

と表示できる. ただしこの分解は一意的でない. これを用いて

$$f''(B) := f'(C) - f'(D) \tag{B-10}$$

と定義すると, f'' は $f''|_{\mathcal{L}(\mathcal{H})_+} = f'$ を満たす. 次に一意性を示す. B の分解が複数あるときには $C - D = E - F$ となるが, このとき $C + F = D + E \in \mathcal{L}(\mathcal{H})_+$ なので (B-8) を用いて

$$f'(C + F) = f'(D + E), \tag{B-11}$$

$$f'(C) + f'(F) = f'(D) + f'(E), \tag{B-12}$$

$$f'(C) - f'(D) = f'(E) - f'(F) \tag{B-13}$$

となる. したがって $f''(B)$ は B の分解に依らない.

(iii) 次に任意の $G \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ を取ると, これは常に

$$G = H + iI, \quad H, I \in \mathcal{L}(\mathcal{H})_h \tag{B-14}$$

と一意的に分解できる. したがって

$$\tilde{f}(G) := f''(H) + if'(I) \tag{B-15}$$

とすれば \tilde{f} は一意的に定まって $\tilde{f}|_{\mathcal{L}(\mathcal{H})_h} = f''$ を満たす. これは f' の線形性によって明らかに線形であるから, f の定義域を $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ に拡張した線形写像であることが分かる.

□

C 最適な 2 状態保護制御の詳細

まず、式 (4.10) に現れる η および χ の具体的表式は、

$$\tan \eta = \frac{1}{(1 - 2p) \cos \theta \tan \chi}, \quad (\text{C-1})$$

$$\sin \chi = \sqrt{\frac{\sin^4 \theta}{(1 - r_x^2)^2 \cos^2 \theta + (1 - r_x^2) \sin^4 \theta}} \quad (\text{C-2})$$

である。ただし、ここで $r_x := (1 - 2p) \cos \theta$ とした。

次に、図式 (4.13) の導出を行う。これは $\rho = \frac{1}{2}(1 + \mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\sigma})$, ($\mathbf{x} = (x^1, x^2, x^3)$) としたとき

$$\begin{aligned} A_\chi^{+1} \rho A_\chi^{+1\dagger} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \frac{\chi}{2} + \sin \frac{\chi}{2} & -i(\cos \frac{\chi}{2} - \sin \frac{\chi}{2}) \\ i(\cos \frac{\chi}{2} - \sin \frac{\chi}{2}) & \cos \frac{\chi}{2} + \sin \frac{\chi}{2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + x^3 & x^1 - ix^2 \\ x^1 + ix^2 & 1 - x^3 \end{pmatrix} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \frac{\chi}{2} + \sin \frac{\chi}{2} & -i(\cos \frac{\chi}{2} - \sin \frac{\chi}{2}) \\ i(\cos \frac{\chi}{2} - \sin \frac{\chi}{2}) & \cos \frac{\chi}{2} + \sin \frac{\chi}{2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} (1 + x^2 \cos \chi) + \sin \chi x^3 & \sin \chi x^1 - i(x^2 + \cos \chi) \\ \sin \chi x^1 + i(x^2 + \cos \chi) & (1 + x^2 \cos \chi) - \sin \chi x^3 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{C-3})$$

より

$$\frac{A_\chi^{+1} \rho A_\chi^{+1\dagger}}{\text{Tr } A_\chi^{+1} \rho A_\chi^{+1\dagger}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\sin \chi x^3}{1 + x^2 \cos \chi} & \frac{\sin \chi x^1}{1 + x^2 \cos \chi} - i \frac{x^2 + \cos \chi}{1 + x^2 \cos \chi} \\ \frac{\sin \chi x^1}{1 + x^2 \cos \chi} + i \frac{x^2 + \cos \chi}{1 + x^2 \cos \chi} & 1 + \frac{\sin \chi x^3}{1 + x^2 \cos \chi} \end{pmatrix} \quad (\text{C-4})$$

となることから確かめられる ($\omega = -1$ の場合は上式に於いて $\chi \mapsto \pi - \chi$ とすれば良い)。

D Dephasing 型ノイズの物理的意味

Dephasing 型ノイズが量子状態の相対位相の情報を失わせていることは式 (4.4) からはわかりにくいので、式 (4.4) を

$$\mathcal{N}_p^{\text{dephasing}}(\rho) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\lambda}} \int_{-\infty}^{\infty} d\theta Z_\theta \rho Z_\theta^\dagger e^{-\theta^2/4\lambda} \quad (\text{D-1})$$

のように書き直す*3. ここで $Z_\theta = e^{i\frac{\theta}{2}}$ は Bloch ベクトルを角度 θ だけ z 軸回りに回転させるユニタリ演算子である (節 3.1 参照). すなわち, Z_θ は量子状態の相対位相を変調させる作用を持つ. 式 (D-1) は, $N_p^{\text{dephasing}}$ が状態 ρ に対して確率的に θ の位相変調を行っているとして解釈できる. 位相変調の角度は平均 0, 分散 2λ の正規分布に従う. ただし $\lambda = \log(1-2p)$. 確かにこの過程は “dephasing” であることが理解できる.

E $SU(d)$ の対称既約表現

同一の d 次元 Hilbert 空間を \mathcal{H} を M 個用意する. このとき, 系全体はそのテンソル積 $\mathcal{H}^{\otimes M}$ で記述される. $\mathcal{H}^{\otimes M}$ の \mathcal{H} の完全対称部分空間を $\mathcal{H}_+^{\otimes M}$ とし, $\mathcal{H}_+^{\otimes M}$ への射影演算子を Π_{sym}^M とする. すなわち Π_{sym}^M は任意の $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_M\rangle \in \mathcal{H}^{\otimes M}$ に対して

$$\Pi_{\text{sym}}^M \left(|\psi_1\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_M\rangle \right) = \frac{1}{M!} \sum_{\sigma \in S_M} |\psi_{\sigma(1)}\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_{\sigma(M)}\rangle \quad (\text{E-1})$$

のようにテンソル積の要素の交換に対して対称な形に変形する作用によって定義される. \mathcal{H} の正規直交基底を $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^d$ とするとき, $\mathcal{H}_{\text{sym}}^M$ の正規直交基底は

$$\sqrt{\frac{M!}{n_1!n_2!\cdots n_d!}} \Pi_{\text{sym}}^M \left(|\phi_1\rangle^{\otimes n_1} \otimes |\phi_2\rangle^{\otimes n_2} \otimes \cdots \otimes |\phi_d\rangle^{\otimes n_d} \right) \quad (\text{E-2})$$

と書ける. ただし n_i は $n_1 + n_2 + \cdots + n_d = M$ を満たす非負の整数とした.

定理. d 次元特殊ユニタリ群 $SU(d)$ の $\mathcal{L}(\mathcal{H}_{\text{sym}}^M)$ への表現 $U \mapsto U^{\otimes M}$ は既約である.

*3 これは以下のように示される. まず $Z_\theta - Z_\theta^\dagger$ の $\rho = \frac{1}{2}(1 + \mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\sigma})$, ($\mathbf{x} = (x^1, x^2, x^3)$) への作用を確認すると

$$\begin{aligned} Z_\theta \rho Z_\theta^\dagger &= \frac{1}{2} Z_\theta \begin{pmatrix} 1+x^3 & x^1-ix^2 \\ x^1+ix^2 & 1-x^3 \end{pmatrix} Z_\theta^\dagger \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+x^3 & (\cos\theta + \sin\theta)x^1 - i(\cos\theta - \sin\theta)x^2 \\ (\cos\theta + \sin\theta)x^1 + i(\cos\theta - \sin\theta)x^2 & 1-x^3 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{D-2})$$

である. $\sin\theta$ は奇関数だから $\cos\theta$ の積分のみ確認すれば

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\theta \cos\theta e^{-\theta^2/4\lambda} = \int_{-\infty}^{\infty} d\theta e^{i\theta} e^{-\theta^2/4\lambda} = \int_{-\infty}^{\infty} d\theta e^{-(\theta-i2\lambda)^2/4\lambda} e^{-\lambda} = \sqrt{4\pi\lambda} e^{-\lambda} \quad (\text{D-3})$$

であり, これを用いて

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{4\pi\lambda}} \int_{-\infty}^{\infty} d\theta Z_\theta \rho Z_\theta^\dagger e^{-\theta^2/4\lambda} &= \frac{1}{2\sqrt{4\pi\lambda}} \int_{-\infty}^{\infty} d\theta \begin{pmatrix} 1+x^3 & \cos\theta(x^1-ix^2) \\ \cos\theta(x^1+ix^2) & 1-x^3 \end{pmatrix} e^{-\theta^2/4\lambda} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} p1+x^3 & e^{-\lambda}(x^1-ix^2) \\ e^{-\lambda}(x^1+ix^2) & 1-x^3 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{D-4})$$

を得る. 一方で

$$p(\sigma_3 \rho \sigma_3) + (1-p)\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1+x^3 & (1-2p)(x^1-ix^2) \\ (1-2p)(x^1+ix^2) & 1-x^3 \end{pmatrix} \quad (\text{D-5})$$

だから, $\lambda = \log(1-2p)$ とすれば良い.

証明. まず $\Pi_{\text{sym}}^M U^{\otimes M} = U^{\otimes M} \Pi_{\text{sym}}^M$ であるから, 任意の $U \in \text{SU}(d)$ に対して $\mathcal{H}_{\text{sym}}^M$ は $U^{\otimes M}$ の不変部分空間である. 以下では, $\mathcal{K} \subset \mathcal{H}_{\text{sym}}^M$ が $U^{\otimes M}$ の不変部分空間であれば $\mathcal{H}_{\text{sym}}^M \subset \mathcal{K}$ となることを示す. 仮定より, \mathcal{K} は Lie 代数 $\mathfrak{su}(d)$ の任意の元 ($\mathcal{H}_{\text{sym}}^M$ 上の表現) に対して不変である必要がある. $\mathfrak{su}(d)$ はトレースが 0 の歪 Hermite $d \times d$ 行列全体であり, $X \in \mathfrak{su}(d)$ は $\mathcal{H}_{\text{sym}}^M$ 上に

$$\pi(X) = X_1 + X_2 + \cdots + X_M \quad (\text{E-3})$$

と表現される. ただし, X_i は i 番目の Hilbert 空間のみに X が作用する演算子である. 任意の $X \in \mathfrak{su}(d)$ に対して $\pi(X)$ が \mathcal{K} を不変に保つことと $1 (= 1_1 + \cdots + 1_M)$ が \mathcal{K} を不変に保つことから, 任意の $d \times d$ 行列 Y に対して $\pi(Y)$ が \mathcal{K} を不変に保つことが従う. したがって \mathcal{H} の基底 $\{|\phi_i\rangle\}_{i=1}^d$ を取れば

$$E_{ij} := |\phi_i\rangle \langle \phi_j|_1 + \cdots + |\phi_i\rangle \langle \phi_j|_M \quad (\text{E-4})$$

が任意の $i, j \in \{1, \dots, d\}$ に対して \mathcal{K} を不変に保つことが分かる. 特に $\{E_{ii}\}_i$ たちは可換であり同時対角化可能であり, その固有ベクトルは

$$\Pi_{\text{sym}}^M \left(|\phi_1\rangle^{\otimes n_1} \otimes |\phi_2\rangle^{\otimes n_2} \otimes \cdots \otimes |\phi_d\rangle^{\otimes n_d} \right) \quad (\text{E-5})$$

と書ける. ただし n_1, n_2, \dots, n_d は $n_1 + n_2 + \cdots + n_d = M$ を満たす非負の整数の組である. 重要なことは, このベクトルが \mathcal{K} に属することである. n_1, n_2, \dots, n_d が任意であるときにベクトル (E-5) は $\mathcal{H}_{\text{sym}}^M$ の (非正規) 直交基底を成しているので, $\mathcal{H}_{\text{sym}}^M \subset \mathcal{K}$ が従う. \square

F 不変積分

適当な $d \in \mathbb{R}$ に対して特殊ユニタリ群 $\text{SU}(d)$ を考える. $\text{SU}(d)$ 上の有限値を取る測度 μ で次の性質を持つものを左 Haar 測度と呼ぶ.

$$\mu(VU) = \mu(U), \quad \forall V \in \text{SU}(d) \quad (\text{F-1})$$

これは任意の左作用 (ユニタリ V の左からの演算) に対して測度が不変であることを示している. この測度を用いて積分

$$\int_{U \in \text{SU}(d)} d\mu(U) f(U) \quad (\text{F-2})$$

を定義する. ただし, 測度は $\int_{U \in \text{SU}(d)} d\mu(U) = 1$ で規格化されているとする.

この左 Haar 測度 μ に対して, 一般に

$$\int_{U \in \text{SU}(d)} d\mu(U) U^{\otimes M} |\psi_0\rangle \langle \psi_0|^{\otimes M} U^{\otimes M \dagger} = \frac{1}{d_{\text{sym}}^{(M)}} \Pi_{\text{sym}}^M, \quad d_{\text{sym}}^{(M)} = \binom{d + M - 1}{M} \quad (\text{F-3})$$

が成り立つ. ただし $|\psi_0\rangle$ は任意の d 次元 Hilbert 空間の量子状態である.

証明. $I_M = \int_{U \in \text{SU}(d)} d\mu(U) U^{\otimes M} |\psi_0\rangle\langle\psi_0|^{\otimes M} U^{\otimes M\dagger}$ とする. まず I_M は明らかに $\Pi_{\text{sym}}^M I_M \Pi_{\text{sym}}^M = I_M$ を満たすから, $I_M \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_{\text{sym}}^M)$ である. 次にユニタリ不変性より, 任意の $U \in \text{SU}(d)$ に対して

$$\begin{aligned} U^{\otimes M} I_M &= U^{\otimes M} \left(\int_{\|\psi\|=1} d\psi |\psi\rangle\langle\psi|^{\otimes M} \right) \\ &= \int_{\|\psi\|=1} d\psi \left(U |\psi\rangle\langle\psi| U^\dagger \right)^{\otimes M} U^{\otimes M} \\ &= \left(\int_{\|\phi\|=1} d\phi |\phi\rangle\langle\phi|^{\otimes M} \right) U^{\otimes M} \quad (|\phi\rangle := U |\psi\rangle) \\ &= I_M U^{\otimes M} \end{aligned} \tag{F-4}$$

となる. したがって Schur の補題を適用すれば, 定数 α を用いて

$$I_M = \alpha \Pi_{\text{sym}}^M \tag{F-5}$$

と書ける.

$$\begin{aligned} \text{Tr } I_M &= \int_{\|\psi\|=1} d\psi = 1, \\ \text{Tr } \Pi_{\text{sym}}^M &= d_{\text{sym}}^{(+)} \end{aligned} \tag{F-6}$$

であるから, $\alpha = 1/d_{\text{sym}}^{(+)}$ である. ただし $d_{\text{sym}}^{(+)}$ は $\mathcal{H}_{\text{sym}}^M$ の次元であり,

$$d_{\text{sym}}^{(+)} = \binom{d+M-1}{M} = \frac{(d+M-1)!}{M!(d-1)!} \tag{F-7}$$

□

である.

G 未知状態の最適推定

未知の量子状態が有限個用意されたときに, それを測定することによってどのような状態が用意されたのか推定することを考える [104].

Hilbert 空間 \mathcal{H} の次元を d とし, その未知の状態 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ が M 個用意されることを考える. 状態 $|\psi\rangle^{\otimes M}$ は $\mathcal{H}^{\otimes M}$ の完全対称部分空間 $\mathcal{H}_{\text{sym}}^{\otimes M} \subset \mathcal{H}^{\otimes M}$ の元であるから, 測定としては $\mathcal{H}_{\text{sym}}^{\otimes M}$ 上の POVM $\{M_i\}_i$ を考えれば十分である. 測定結果 i に対応して状態 ρ_i を推定することを考える. そしてこの推定の評価関数を, 与えられた状態 $|\psi\rangle$ と推定した状態 ρ_i の忠実度 (4.7) の平均

$$\bar{F} = \int_{\|\psi\|=1} d\psi \sum_i \text{Tr} [M_i |\psi^{\otimes M}\rangle\langle\psi^{\otimes M}|] \langle\psi|\rho_i|\psi\rangle \tag{G-1}$$

とする。ただし、状態 $|\psi\rangle$ は一様確率で準備されるとした。

\bar{F} の上限は

$$\begin{aligned}
\bar{F} &= \int_{\|\psi\|=1} d\psi \sum_i \text{Tr} \left[\left(M_i \otimes \rho_i \right) \left(|\psi^{\otimes M}\rangle\langle\psi^{\otimes M}| \otimes |\psi\rangle\langle\psi| \right) \right] \\
&= \sum_i \text{Tr} \left[\left(M_i \otimes \rho_i \right) \frac{\Pi_{\text{sym}}^{M+1}}{d_+^{M+1}} \right] \\
&\leq \frac{1}{d_+^{M+1}} \sum_i \text{Tr} [M_i \otimes \rho_i] \quad (\because \Pi_{\text{sym}} \leq 1) \\
&= \frac{1}{d_+^{M+1}} \text{Tr} \left[\sum_i M_i \right] \quad \left(\because \sum_i M_i = \Pi_{\text{sym}}^M \right) \\
&= \frac{d_+^M}{d_+^{M+1}} \tag{G-2}
\end{aligned}$$

と与えられる。ただし、1つ目の等式で (F-3) を用いた。

H 平均忠実度の Tr_{HS} による表示

ここでは、Haar 測度によって記述される平均忠実度が Hilbert-Schmidt 内積によるトレースで容易に計算できることを示す。

平均忠実度の表式 (5.3) は状態 $|\psi\rangle$ に関する積分を含んでおり、これを写像 \mathcal{E} に対して一々計算するのは困難である。そこで $\int d\psi$ が満たすべき性質を用いて、式 (5.3) をより計算に有用な形へ変形しておく。それが次の補題である。

補題 1. 式 (5.3) によって与えられる平均忠実度 \bar{F} は

$$\bar{F} = \frac{d + \text{Tr}_{\text{HS}} \mathcal{E}}{d(d+1)} \tag{H-1}$$

と書き表せる。ただし \mathcal{E} は式 (5.4)、 Tr_{HS} は式 (2.5) によって定義される Hilbert-Schmidt 内積に関するトレースであり、 d は注目系を表す Hilbert 空間の次元 $\dim \mathcal{H}$ である。

証明. 平均忠実度は、(2.10) で定義される交換演算子 S を用いると (2.11) により

$$\bar{F} = \text{Tr} [S\{\text{id} \otimes \mathcal{E}\}(Q)] \tag{H-2}$$

と書ける。ただし $Q = \int d\psi |\psi\rangle\langle\psi| \otimes |\psi\rangle\langle\psi|$ とした。

まず、式 (H-1) は次の2式、

$$Q = \frac{1 + S}{d(d+1)}, \tag{H-3}$$

$$\text{Tr} [S\{\text{id} \otimes \mathcal{E}\}(S)] = \text{Tr}_{\text{HS}} \mathcal{E} \tag{H-4}$$

から証明できる。実際、 \mathcal{E} のトレース保存性を用いれば

$$\begin{aligned}
(d(d+1))\bar{F} &= \text{Tr}[S\{\text{id} \otimes \mathcal{E}\}(1)] + \text{Tr}[S\{\text{id} \otimes \mathcal{E}\}(S)] \\
&= \text{Tr} \mathcal{E}(1) + \text{Tr}_{\text{HS}} \mathcal{E} \\
&= d + \text{Tr}_{\text{HS}} \mathcal{E}
\end{aligned} \tag{H-5}$$

となる。したがって、(H-3), (H-4) の証明を与えれば良い。まず (H-3) は、付録 E の式 (F-3) に於いて $M = 1$ とすれば良い。また (H-4) は次の直接計算によって

$$\text{Tr}[S\{\text{id} \otimes \mathcal{E}\}(S)] = \sum_{i,j,k,l} \langle ij | (|k\rangle\langle l| \mathcal{E}(|l\rangle\langle k|)) |ji\rangle = \sum_{i,j} \langle j | \mathcal{E}(|i\rangle\langle j|) |i\rangle = \text{Tr}_{\text{HS}} \mathcal{E} \tag{H-6}$$

と示される。 □

平均忠実度の定義式 (5.3) を直接計算する際には写像 \mathcal{E} のあらゆる状態 $|\psi\rangle\langle\psi|$ への作用を利用することになるが、変形した式 (H-1) では Tr_{HS} を計算するだけで良いことが直ちに分かる形式となっている。したがって $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ の基底に対する作用のみを知っていればよい。^{*4} これにより計算は非常に簡便となり、実際我々の示す結果において広く活用されている。

I Amplitude damping 型ノイズの物理的対応

ここでは 2 準位原子系と電磁場の相互作用を考え、それが amplitude damping 型ノイズによって記述されることを説明する。この対応は、(2.35) における対応と同じ意味である。

簡単のため、2 準位原子と同じ共鳴周波数を持つモードの電磁場のみを考える。このとき相互作用無しの自由ハミルトニアンを

$$H_0 = \omega\sigma^{(+)}\sigma^{(-)} + \omega a^\dagger a \tag{I-1}$$

となる。

ただしここで a^\dagger, a は $[a, a^\dagger] = 1$ を満たす生成消滅演算子、 $\sigma^{(+)}, \sigma^{(-)}$ は昇降演算子であり

$$\sigma^{(\pm)} = \frac{1}{2}(\sigma_1 \pm i\sigma_2) \tag{I-2}$$

と定義される。 H_0 の固有状態として、2 準位原子系の基底状態を $|g\rangle$ 、励起状態を $|e\rangle$ とし、光子数状態を $|n\rangle$ とする。なお、このとき $\sigma^{(+)}|g\rangle = |e\rangle, \sigma^{(+)}|e\rangle = 0, \sigma^{(-)}|e\rangle = |g\rangle, \sigma^{(-)}|g\rangle = 0$ を満たす。

^{*4} もちろん写像 \mathcal{E} は線形であるから、 $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ の基底に対する作用さえ決まれば \mathcal{E} のあらゆる状態 $|\psi\rangle\langle\psi|$ に対する作用は決まる。式 (H-1) が重要なのは、基底に対する作用のみで計算が可能であること明示的に表している点である。

原子と量子化された電磁場の相互作用は Jaynes-Cummings 型ハミルトニアン

$$H_{\text{JC}} = ig a \sigma^{(+)} - ig a^\dagger \sigma^{(-)} \quad (\text{I-3})$$

によって記述される。ただし、 g は実数の結合定数であるとした [105]。 (I-3) は光子を吸収して原子を基底状態から励起させる過程と、原子を励起状態から基底状態に落として光子を放出する過程を表すハミルトニアンである。

原子の初期状態を $|e\rangle$ 、電磁場の初期状態を $|0\rangle$ とする。今 $\sigma^{(+)}\sigma^{(-)} + a^\dagger a$ は保存するから時刻 t のときの状態を $|\psi(t)\rangle = \alpha(t)e^{-i\omega t}|g\rangle + \beta(t)e^{-i\omega t}|e\rangle$ とできて、Schrödinger 方程式は

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = (H_0 + H_{\text{JC}}) |\psi(t)\rangle \quad (\text{I-4})$$

となる。

したがって、時間 t の状態変化は

$$\begin{aligned} \alpha |g\rangle |0\rangle + \beta |e\rangle |0\rangle &\mapsto \alpha |g\rangle |0\rangle + \beta (\cos(gt) |e\rangle |0\rangle + \sin(gt) |g\rangle |1\rangle) \\ &= (\alpha |g\rangle + \beta \cos(gt) |e\rangle) |0\rangle + \beta \sin(gt) |g\rangle |1\rangle \end{aligned} \quad (\text{I-5})$$

となる。(I-5) の右辺を密度演算子の形式で記述して電磁場の系を部分トレースすれば、原子の系のみに着目した状態変化が得られる。これは $|\psi_0\rangle = \alpha |g\rangle + \beta |e\rangle$ とすると

$$\begin{aligned} |\psi_0\rangle\langle\psi_0| &\mapsto \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cos(gt) \end{pmatrix} |\psi_0\rangle\langle\psi_0| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \cos(gt) \end{pmatrix} \\ &\quad + \begin{pmatrix} 0 & \sin(gt) \\ 0 & 0 \end{pmatrix} |\psi_0\rangle\langle\psi_0| \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \sin(gt) & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{I-6})$$

と書ける。ただし、 $|g\rangle = {}^t(1, 0)$ 、 $|e\rangle = {}^t(0, 1)$ を用いて行列表示した。 $|\psi_0\rangle$ は 2 準位原子系の任意の純粋状態を表しているので、結果的にあらゆる量子状態 ρ このハミルトニアンに対する時間 t の発展は

$$\rho \mapsto E_1 \rho E_1^\dagger + E_2 \rho E_2^\dagger \quad (\text{I-7})$$

と書けることが分かる。ここで $r := \sin^2(gt)$ である。

J テントの構成とその凸性

ここでは、節 6.3.3 で導入した \mathcal{R} の点 $(T, U(T)) \in \mathcal{M}$ でのテント $\tilde{\mathcal{R}}_{(T, U(T))}$ を実際に構成し、それが凸であることを述べる。

まず、針変分が和と非負の定数倍に対して閉じた 1 つの空間をなすことを示す。これらの演算は、単純にはその変分を行う時間区間に対して行われると理解できる。単純な針変分 $M(\tau; \delta\tau; K)$ は式 (6.38) によって定義される。そしてその和 $M(\tau_1; \delta\tau_1; K_1) +$

$M(\tau_2; \delta\tau_2; K_2)$ は、もし $\tau_1 \neq \tau_2$ であるときには単に 2 つを独立に行う変分として定義し、もし $\tau_1 = \tau_2 =: \tau$ であればその和は 2 つの変分を「順に並べる」ことによって定義される。すなわち、変分後のハミルトニアン $H'(t)$ を

$$H'(t) = \begin{cases} K_1, & \tau - \delta\tau_1 - \delta\tau_2 < t \leq \tau - \delta\tau_2, \\ K_2, & \tau - \delta\tau_2 < t \leq \tau, \\ H(t), & \text{otherwise} \end{cases} \quad (\text{J-8})$$

によって与えるということである。3 個以上の針変分の和も同様にして定義される。これにより、針変分の空間はこの非可換な和について閉じた空間を構成する。さらに非負係数による定数倍は、単にその時間区間に対する演算として定義される。例えば $\lambda(M(\tau_1; \delta\tau_1; K_1) + M(\tau_2; \delta\tau_2; K_2)) = M(\tau_1; \lambda\delta\tau_1; K_1) + M(\tau_2; \lambda\delta\tau_2; K_2)$ である。これらの演算の下で針変分の空間は閉じる。節 6.3.3 で定義した δT も組み合わせて考えた全ての変分の集合もやはり積と非負のスカラー倍について閉じるように構成できる。

次に、 $H(t)$ の針変分の和が非可換であっても結果として得られる終着点のユニタリ演算子 $U(T)$ の変分はそれぞれによって得られる変分の可換な和によって構成される。実際、変分の和 $M(\tau; \delta\tau_1; K_1) + M(\tau; \delta\tau_2; K_2)$ によって得られる終着点のユニタリ演算子の和

$$\delta U(T) = -iU(T, \tau)[\delta\tau_1(K_1 - H(\tau)) + \delta\tau_2(K_2 - H(\tau))]U(\tau) \quad (\text{J-9})$$

は可換である。こうしてこの可換性により、針変分と最終時刻の変分による 1 次の変分 $\delta[U(T)]$ は凸錐を構成することが分かる。これがテント $\tilde{R}_{(T, U(T))}$ である。

K Pontryagin の最大値原理

本論文では Pontryagin 最大値原理を量子力学の時間最適制御に適用してきたが、ここでは標準的な、 \mathbb{R}^N 上の制御系に対する一般の Pontryagin の最大値原理を述べることにする。この証明は例えば文献 [98] を見れば良い。勿論、本論文での議論を実空間に適用すれば良い。

K-1 最適制御問題

まず、これを説明するため、まず最適制御問題を標準的な形式に書き直す。以下では記号を次のように定義する：

$\{x^i\}_{i=1, \dots, N}$	系を記述するパラメータ。
$\{u^i\}_{i=1, \dots, M}$	系を制御するパラメータ。
N, M	適当な自然数で、 \mathbf{x}, \mathbf{u} が属す空間の次元。
$U(\subset \mathbb{R}^M)$	制御パラメータ \mathbf{u} が所属する閉領域。制約条件を表す。
$\{f^i\}_{i=1, \dots, N}$	系の時間発展を $\dot{x}^i = f^i(\mathbf{x}; \mathbf{u})$ によって表す関数系。
$0, T$	制御を行う初期時刻と終時刻。

時刻 $0, T$ で境界条件 $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0, \mathbf{x}(T) = \mathbf{x}_1$ を満たすあらゆる軌道 $\mathbf{x}(t)$ の中で、評価関数

$$J = \int_0^T dt f^0(x^1, \dots, x^N; u^1, \dots, u^M) \quad (\text{K-10})$$

を最小化する軌道を最適なもののみなし、これを実現する制御 $\mathbf{u}(t)$ を求める問題を考える。ただしここで初期時刻 0 は固定しておくが、終時刻 T は自由に動かして良いとする。したがって例えば時間最適制御の場合には、 $f^0(\dots) = 1$ とすればよい。

K-2 Pontryagin の最大値原理

上で定式化した標準形に対する Pontryagin の最大値原理を書き下す。まず、 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$ に x^0 を付け加えた \mathbb{R}^{N+1} 上のベクトル $\tilde{\mathbf{x}} = (x^0, x^1, \dots, x^N)$ を考える (ただし $x^0(0) = 0$ とする)。これを本文と対応させて増補系と呼ぶ。さらに増補系上の補助ベクトル $\tilde{\mathbf{p}} = (p_0, p_1, \dots, p_N)$ を導入し、補助関数 $H_{\text{MP}}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{p}}, \mathbf{u})$ を

$$H_{\text{MP}}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{p}}, \mathbf{u}) = \sum_{a=0}^N p_a f^a(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (\text{K-11})$$

と定義する。

上の関数を用いて、次の方程式系

$$\dot{x}^\mu = \frac{\partial H_{\text{MP}}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{p}}, \mathbf{u})}{\partial p_\mu}, \quad (\text{K-12})$$

$$\dot{p}_\mu = -\frac{\partial H_{\text{MP}}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{p}}, \mathbf{u})}{\partial x^\mu} \quad (\text{K-13})$$

を定義する。ただし $\mu = 0, 1, \dots, N$ とする。これは $2(N+1)$ 個の微分方程式であり、 $2(N+1)$ 個の未知関数 $\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{p}}$ を決める。この微分方程式は全ての制御変数 $\mathbf{u}(t)$ の時間依存性と境界条件を $2(N+1)$ 個与えることによって定まる。しかし与えられている境界条件は $(x^0(0), \mathbf{x}(0)) = (0, \mathbf{x}_0)$ および $\mathbf{x}(T) = \mathbf{x}_1$ の $2N+1$ 個である。すなわち 1 つ境界条件が足りないが、これは $\tilde{\mathbf{p}}$ について任意定数倍の自由度があるからである。実際、 H_{MP} の定義 (K-11) より、 $\tilde{\mathbf{p}}$ の任意の定数倍の下で式 (K-12) および (K-13)、さらに後に導く (K-15) は全て不変である。なお $x^0(T)$ は

$$x^0(T) = \int_0^T dt f^0(x^1, \dots, x^N; u^1, \dots, u^M) = J \quad (\text{K-14})$$

なので、評価関数を表している。Pontryagin の最大値原理では、これが極小となるための必要条件として、任意の $\mathbf{v} \in \mathcal{U}$ に対して

$$H_{\text{MP}}(\tilde{\mathbf{x}}(t), \tilde{\mathbf{p}}(t), \mathbf{u}(t)) \geq H_{\text{MP}}(\tilde{\mathbf{x}}(t), \tilde{\mathbf{p}}(t), \mathbf{v}) \quad (\text{K-15})$$

であることを要求する。 H_{MP} を Pontryagin ハミルトニアンと呼べば、これは Pontryagin ハミルトニアンの最大化を要求しているのである。

以上をまとめると、制御 $\mathbf{u}(t)$ が与えられた汎関数 J を最小化するための必要条件は、適当な増補系上の関数系 $\tilde{\mathbf{p}}(t)$ および $x^0(t)$ で式 (K-12), (K-13), (K-15) を満たすものが存在する、というものである。なお Pontryagin ハミルトニアン $H_{MP}(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{p}}, \mathbf{u})$ はその定義 (K-11) より明らかに x^0 に依存せず、したがって $p_0 = \text{const.}$ となる。さらにこの定数の符号は非正、すなわち $p_0 = \text{const.} \leq 0$ である。

また、最適な制御に対して次のような事項も示される。まず、Pontryagin ハミルトニアンは時間的に変化しない定数である。これは H_{MP} を微分し、微分方程式 (K-12), (K-13) を用いれば直ちに示される。本論文での設定のように終時刻を自由に取れるとしているときには、さらに $H_{MP} = 0$ となることも分かる。これは終時刻 T についての変分を取ることによって得られる。

K-3 限定された場合における Pontryagin の最大値原理の極値性の証明

Pontryagin の最大値原理は最適性の必要条件を与える一般の理論であるが、ここでは最大値原理をより直感的に理解するために、よく知られている古典的な変分法と同様な設定の中で最大値原理を議論する。したがって制御変数 $u^j(t)$ は \mathbb{R}^M 中で自由に取れるような状況、すなわち $\mathcal{U} = \mathbb{R}^M$ とする。

簡単のために系を記述する変数と制御変数はそれぞれ単一であるとする。すなわち $N = 1$ および $M = 1$ である。系の変数および制御変数を簡単のために x, u と記し、時間発展は $\dot{x} = f(x, u)$ によって決まるとする。時刻 $0, T^{*5}$ で $x(0) = x_0, x(T) = x_1$ となるあらゆる軌道 $x(t)$ の中で汎関数

$$J = \int_0^T dt g(x(t), u(t)) \quad (\text{K-16})$$

を最小化する軌道を最適なものとみなし、これを実現する $u(t)$ を求めることを考える。微分方程式 $\dot{x} = f(x, u)$ を制約条件とみなして Lagrange の未定乗数法を用いると、問題は次の汎関数

$$J' = \int_0^T dt \left[g(x, u) + p(t)(\dot{x} - f(x, u)) \right] \quad (\text{K-17})$$

の極値を求めることと等価である。ただし、 $p(t)$ は Lagrange の未定乗数である。ここで、

*5 ただし T は当初の設定通りに任意であるとする。

$H_{\text{MP}}(x, p, u) = -g(x, u) + p(t)f(x, u)$ とすると,

$$\begin{aligned} J' &= \int_0^T dt \left[-H_{\text{MP}}(x, p, u) + p(t)\dot{x}(t) \right] \\ &= \int_0^T dt \left[-H_{\text{MP}}(x, p, u) - \dot{p}(t)x(t) \right] + \left[p(T)x(T) - p(0)x(0) \right] \end{aligned} \quad (\text{K-18})$$

である. この J' に対して実際に変分を取る. 制御変数の経路を $u(t)$ から $u(t) + \delta u(t)$ へと, 変数の軌道を $x(t)$ から $x(t) + \delta x(t)$ へと, 補助関数の軌道を $p(t)$ から $p(t) + \delta p(t)$ へとそれぞれ独立に変化させる*6と, J' の変分 $\delta J'$ は

$$\begin{aligned} \delta J' &= - \int_0^T dt \left[\frac{\partial H_{\text{MP}}(x, p, u)}{\partial x} \delta x + \dot{p}(t) \delta x(t) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial H_{\text{MP}}(x, p, u)}{\partial u} \delta u(t) + \left(\frac{\partial H_{\text{MP}}(x, p, u)}{\partial p} - \dot{x} \right) \delta p(t) \right] \\ &= - \int_0^T dt \left[\left(\frac{\partial H_{\text{MP}}(x, p, u)}{\partial x} + \dot{p}(t) \right) \delta x(t) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial H_{\text{MP}}(x, p, u)}{\partial u} \delta u(t) + \left(\frac{\partial H_{\text{MP}}(x, p, u)}{\partial p} - \dot{x} \right) \delta p(t) \right] \end{aligned} \quad (\text{K-19})$$

となる. したがって J' が極値を持つための必要条件は,

$$\dot{p}(t) = - \frac{\partial H_{\text{MP}}(x, p, u)}{\partial x}, \quad (\text{K-20})$$

$$\dot{x}(t) = \frac{\partial H_{\text{MP}}(x, p, u)}{\partial p}, \quad (\text{K-21})$$

$$0 = \frac{\partial H_{\text{MP}}(x, p, u)}{\partial u} \quad (\text{K-22})$$

である. これは式 (K-12), (K-13) と最大化条件 (K-15) の 1 次と等しい. これは Pontryagin の最大値原理に含まれる結果を述べている.

L Lagrange の未定定数の厳密な適用

以下では \mathbb{R}^N 上の関数 $f^0(\mathbf{x})$ の最小値を制約条件 $f^i(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, (i = 1, \dots, M)$ の下で求めることを考え, Lagrange の未定乗数法の一般的な定式化を述べる. これについて例えば [102] を参照されたい. また, 量子最速降下曲線のように汎関数の最小化を行う文脈での定式化については [103, 定理 74.1] を参照されたい.

パラメータ $\lambda_i (i = 1, \dots, m) \in \mathbb{R}^M$ を用いて新たに関数

$$F(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) := f^0(\mathbf{x}) + \sum_i \lambda_i f^i(\mathbf{x}) \quad (\text{L-23})$$

*6 ただし, ここで $\delta x(0) = \delta x(T) = 0$ とする.

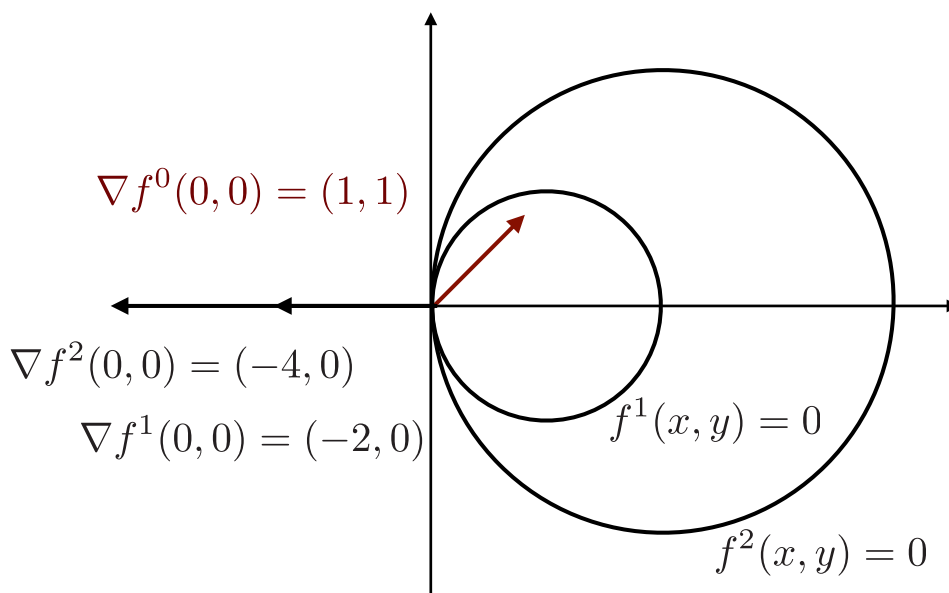


図 L-1 制約条件の勾配 $\{\nabla f^i\}_i$ が線形従属となる例. 考える系は \mathbb{R}^2 であり, 最小化したい関数は $f^0(x, y) = x + y$, 制約条件を表す関数は $f^1(x, y) = (x - 1)^2 + y^2 - 1$, $f^2(x, y) = (x - 2)^2 + y^2 - 4$ とする. このとき, 許される解は $(x, y) = (0, 0)$ のみなので, これが最適な解となる. しかし, このとき $(x, y) = (0, 0)$ において $\nabla f^0 = (1, 1)$, $\nabla f^1 = (-2, 0)$, $\nabla f^2 = (-4, 0)$ なので, 式 (L-27) を満たすのは $\lambda_0 = 0$ とした場合のみである. したがってこれは異常な解の例となっている.

を定義する. Lagrange の未定定数法は, 制約条件 $f^i(\mathbf{x}) = 0$ の下で \mathbf{x} が f^0 を極小化するための必要条件は

$$\nabla F(\mathbf{x}) = 0, \quad \exists \lambda \tag{L-24}$$

であると述べている. ただしここで ∇ はベクトル \mathbf{x} についての勾配を表している. しかし, ここでは ∇f^i が 1 次独立であると仮定されている. これは, そもそも式 (L-24) がどのように導かれたかを考えれば理解できる. 式 (L-24) を書き下すと,

$$\nabla f^0(\mathbf{x}) + \sum_i \lambda_i \nabla f^i(\mathbf{x}), \quad \exists \lambda \tag{L-25}$$

となる. この式は, 関数 f^0 の勾配が制約条件 f^i の勾配の線形結合で書けるという条件であり, したがって f^0 の変化できる方向が, 1 次までの近似で制約条件を破る方向であるということを表している. ここで $\{\nabla f^i\}_{i=1}^M$ が 1 次従属の場合, ベクトル $\{\nabla f^i\}_{i=1}^M$ が張る空間はその次元が $m - 1$ 以下となってしまう, 2 次以上の近似では制約条件を破るような方向を制約条件を破らない方向として表してしまう可能性がある (図 L-1 参照).

ベクトル $\{\nabla f^i\}_{i=1}^M$ が線形従属の場合も考慮に入れるには, 関数 F の代わりに

$$F'(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) := \lambda_0 f^0(\mathbf{x}) + \sum_i \lambda_i f^i(\mathbf{x}) \tag{L-26}$$

と定義し、最適性の必要条件を

$$\nabla F'(\mathbf{x}) = 0, \quad \exists(\lambda_0, \boldsymbol{\lambda}) \neq (0, \mathbf{0}) \quad (\text{L-27})$$

と書けば良い。もし $\{\nabla f^i\}_{i=1}^M$ が線形独立であれば

$$\sum_i \lambda_i \nabla f^i(\mathbf{x}) = 0 \quad (\text{L-28})$$

となるような $\boldsymbol{\lambda}$ は存在しないので、 $\lambda_0 \neq 0$ である。もし $\{\nabla f^i\}_{i=1}^M$ が線形従属であったとしても λ_0 として $0 = \sum_i \lambda_i \nabla f^i(\mathbf{x})$ となる $\boldsymbol{\lambda}$ を取れば条件は満たされる。したがって、式 (L-27) は任意の制約条件に対して適用可能な条件となっている*7。

式 (L-27) を $\lambda_0 = 0$ で満たす解は本文で述べたように異常な解と呼ばれ、これを議論するためにはより高次の変分を考える他ない。

M GLC 条件の導出

ここでは、節 7.2.2 で述べた GLC 条件を導出する。これは文献 [57] で既に示されたことである。なお、完全な証明は与えられていないが式変形などに関しては文献 [106] が読みやすい。以下では \mathbb{R}^N 上の制御理論の定式化の下で考える。標準的な Pontryagin の最大値原理 (付録 K) の定式化の中で GLC 条件を示す。本文での議論も基本的には \mathbb{R}^N 上の議論に落としているのでそのまま適用できる。

Pontryagin の最大値原理では、Pontryagin ハミルトニアン (K-11) の最大化を要求する。これは制御変数の 1 次の変分によって導かれるが、この最大化自体は 1 次だけの条件、すなわち

$$\frac{\partial H_{\text{MP}}}{\partial u^i} = 0 \quad (\text{M-29})$$

のような条件ではない。したがって例えば

$$\frac{\partial^2 H_{\text{MP}}}{\partial u^i \partial u^j} \leq 0 \quad (\text{M-30})$$

なども当然内包されている。これは最大値原理の強力さを物語っているが、特異制御では H_{MP} がそもそも制御変数 u^i に依存しないため式 (M-30) も、より高次の正值性の判定条件も自明に満たされてしまう*8。これは一重に、最大値原理が 1 つの時刻についての最大化条件しか述べていないからである。そのため GLC 条件では元の評価汎関数に立ち戻り、積分

*7 ただし、この処方箋は単に $\{\nabla f^i\}_{i=1}^m$ が線形従属である場合にも Lagrange の未定乗数法を適用可能なように書き直しただけである。 $\lambda_0 = 0$ の場合には関数 F' から評価関数 f^0 の情報は抜け落ちてしまうので、その様な場合に対して有用な条件を述べているわけではない。

*8 なお、ここでは制御変数が u の内点であることを仮定している。制御変数が u の境界に存在する場合、境界上を新たに領域 u とみなしてやればよい (節 7.2.2 参照)。

形のまま最適性を評価する。これは感覚的な言葉を借りれば、時間的広がりを持って最適性の判定を行うということである。

以下では、実際に GLC 条件の導出を行う。記号は全て付録 K と同様であるとする。考える $\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{p}}, \mathbf{u}$ は Pontryagin の最大値原理を満たす、すなわち式 (K-12), (K-13), (K-15) を満たしていると仮定する。Pontryagin ハミルトニアン H_{MP} の $\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{p}}, \mathbf{u}$ についての微分を多用するので、 $\partial H_{\text{MP}}/\partial x^i$ を H_{x^i} と略記する。他の変数についての微分や 2 階微分も同様にして定義する。また、Einstein の縮約記法に倣って特に断りの無い限り重複する添字は和を取ることとする。例えば $p_i f^i = \sum_{i=1}^N p_i f^i$ である。

M-1 評価関数の 2 次変分の書き換え

まず、評価関数 (K-10) の 2 次変分を書き直す。ここでは制御変数 \mathbf{u} として内点を仮定しているため、その変分は ε を微小パラメータとして $\delta \mathbf{u}$ が各時刻で $\mathcal{O}(\varepsilon)$ であるようにとる。なお、以下の議論では変分は \mathbf{u} についてのみ取る。系の変数 $\delta \mathbf{x}$ 、およびその共役変数 $\delta \mathbf{p}$ は自由に取れず、式 (K-12), (K-13) によって決まる*⁹。したがって変分 $\delta \mathbf{x}, \delta \mathbf{p}$ は

$$\delta \dot{x}^i = H_{p_i x^j} \delta x^j + H_{p_i u^j} \delta u^j, \quad (\text{M-31})$$

$$\delta \dot{p}_i = -H_{x^i x^j} \delta x^j - H_{x^i u^j} \delta u^j - H_{x^i p_j} \delta p_j \quad (\text{M-32})$$

を満たす必要がある。

評価関数 J は \mathbf{u} および \mathbf{x} の関数であるから、これらの微小変分について展開できる。2 次までの展開は

$$\delta J = \int_0^T dt \delta f^0, \quad (\text{M-33})$$

$$\delta f^0 = (f_{\mathbf{x}}^0 \quad f_{\mathbf{u}}^0) \begin{pmatrix} \delta \mathbf{x} \\ \delta \mathbf{u} \end{pmatrix} + \frac{1}{2} (\delta \mathbf{x} \quad \delta \mathbf{u}) \begin{pmatrix} f_{\mathbf{x}\mathbf{x}}^0 & f_{\mathbf{x}\mathbf{u}}^0 \\ f_{\mathbf{u}\mathbf{x}}^0 & f_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \mathbf{x} \\ \delta \mathbf{u} \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \quad (\text{M-34})$$

である。そして時間発展方程式は

$$\delta f^i = (f_{\mathbf{x}}^i \quad f_{\mathbf{u}}^i) \begin{pmatrix} \delta \mathbf{x} \\ \delta \mathbf{u} \end{pmatrix} + \frac{1}{2} (\delta \mathbf{x} \quad \delta \mathbf{u}) \begin{pmatrix} f_{\mathbf{x}\mathbf{x}}^i & f_{\mathbf{x}\mathbf{u}}^i \\ f_{\mathbf{u}\mathbf{x}}^i & f_{\mathbf{u}\mathbf{u}}^i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \mathbf{x} \\ \delta \mathbf{u} \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \quad (\text{M-35})$$

である。ただし f^i, f^0 の下付き添字は微分を表しており、 $f_{\mathbf{x}}^0$ は \mathbf{x} の各成分による微分を各成分としたベクトル量であることを表している。ここで式 (M-35) に対して最大値原理の共役変数 p_i をかけて i について和を取れば、 $H_{\text{MP}} = -f^0 + \sum_i p_i f^i$ であることと p_i が x^i, u^i と独立であることから

$$-\delta f^0 + p_i \delta f^i = (H_{\mathbf{x}} \quad H_{\mathbf{u}}) \begin{pmatrix} \delta \mathbf{x} \\ \delta \mathbf{u} \end{pmatrix} + \frac{1}{2} (\delta \mathbf{x} \quad \delta \mathbf{u}) \begin{pmatrix} H_{\mathbf{x}\mathbf{x}} & H_{\mathbf{x}\mathbf{u}} \\ H_{\mathbf{u}\mathbf{x}} & H_{\mathbf{u}\mathbf{u}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \mathbf{x} \\ \delta \mathbf{u} \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \quad (\text{M-36})$$

*⁹ Lagrange の未定乗数法を用いる場合にはそれぞれを独立に変分できたが、その場合には 2 次変分の条件については何も述べられない。

を得る. ここで (\mathbf{x}, \mathbf{u}) について式 (K-13) より $H_{\mathbf{x}}\delta\mathbf{x} = -\dot{\mathbf{p}}\delta\mathbf{x}$ なので,

$$-\delta f^0 = H_{\mathbf{u}} \cdot \delta\mathbf{u} + \frac{1}{2} (\delta\mathbf{x} \quad \delta\mathbf{u}) \begin{pmatrix} H_{\mathbf{x}\mathbf{x}} & H_{\mathbf{x}\mathbf{u}} \\ H_{\mathbf{u}\mathbf{x}} & H_{\mathbf{u}\mathbf{u}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\mathbf{x} \\ \delta\mathbf{u} \end{pmatrix} - (\dot{p}_i \delta x^i + p_i \delta f^i) + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \quad (\text{M-37})$$

である. したがって, $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ であることを用いて

$$\begin{aligned} -\delta J &= -\int_0^T dt \delta f^0 \\ &= \int_0^T dt \left[H_{\mathbf{u}} \cdot \delta\mathbf{u} + \frac{1}{2} (\delta\mathbf{x} \quad \delta\mathbf{u}) \begin{pmatrix} H_{\mathbf{x}\mathbf{x}} & H_{\mathbf{x}\mathbf{u}} \\ H_{\mathbf{u}\mathbf{x}} & H_{\mathbf{u}\mathbf{u}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\mathbf{x} \\ \delta\mathbf{u} \end{pmatrix} \right] \\ &\quad - \int_0^T dt (\dot{p}_i \delta x^i + p_i \delta f^i) + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \\ &= \int_0^T dt \left[H_{\mathbf{u}} \cdot \delta\mathbf{u} + \frac{1}{2} (\delta\mathbf{x} \quad \delta\mathbf{u}) \begin{pmatrix} H_{\mathbf{x}\mathbf{x}} & H_{\mathbf{x}\mathbf{u}} \\ H_{\mathbf{u}\mathbf{x}} & H_{\mathbf{u}\mathbf{u}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\mathbf{x} \\ \delta\mathbf{u} \end{pmatrix} \right] - [p_i \delta x^i]_0^T + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \end{aligned} \quad (\text{M-38})$$

となる. ここで積分内の初項に着目すれば式 (K-22) と同じ条件が得られ, 表面項 $(p_i \delta x^i)$ は条件 $\delta\mathbf{x}(0) = \delta\mathbf{x}(T) = 0$ によって消える. 以下では, δJ の二次の変分を $\delta_2 J$ と書いて, これに着目する. すなわち

$$-\delta_2 J := \int_0^T dt \frac{1}{2} (\delta\mathbf{x} \quad \delta\mathbf{u}) \begin{pmatrix} H_{\mathbf{x}\mathbf{x}} & H_{\mathbf{x}\mathbf{u}} \\ H_{\mathbf{u}\mathbf{x}} & H_{\mathbf{u}\mathbf{u}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\mathbf{x} \\ \delta\mathbf{u} \end{pmatrix} \quad (\text{M-39})$$

である. これはちょうど H_{MP} の \mathbf{x}, \mathbf{u} に関する二次の変分になっていることが分かる. 以上より, 評価関数の 2 次変分を Pontryagin ハミルトニアン の 2 次変分に焼き直せた. しかし, 既に述べたように変分は制御変数 \mathbf{u} について取るために, なるべく $\delta\mathbf{u}$ に比例する項を用いてこの式を書き直したい. 以下ではこれを行う.

式 (M-32) に $\frac{1}{2}\delta x^i$ をかけて i について和を取り両辺 0 から T まで積分すれば,

$$\frac{1}{2} \int_0^T dt \delta x^i \delta \dot{p}_i = -\frac{1}{2} \int_0^T dt [H_{x^i x^j} \delta x^i \delta x^j + H_{x^i u^j} \delta x^i \delta u^j + H_{x^i p_j} \delta x^i \delta p_j] \quad (\text{M-40})$$

を得る. 左辺について部分積分を取って $\delta x(0) = \delta x(T) = 0$ を課せば,

$$0 = \frac{1}{2} \int_0^T dt [-\delta \dot{x}^i \delta p_i + H_{x^i x^j} \delta x^i \delta x^j + H_{x^i u^j} \delta x^i \delta u^j + H_{x^i p_j} \delta x^i \delta p_j] \quad (\text{M-41})$$

となる. ここに式 (M-31) を適用すれば $H_{x^i p_j} \delta x^i \delta p_j$ が打ち消し合って

$$0 = \frac{1}{2} \int_0^T dt [-H_{p_i u^j} \delta u^j \delta p_i + H_{x^i x^j} \delta x^i \delta x^j + H_{x^i u^j} \delta x^i \delta u^j] \quad (\text{M-42})$$

となる. この式を (M-39) から引き去れば,

$$-\delta_2 J = \frac{1}{2} \int_0^T dt [H_{x^i u^j} \delta x^i + H_{p_i u^j} \delta p_i + H_{u^i u^j} \delta u^i] \delta u^j \quad (\text{M-43})$$

が得られる。これは

$$-\delta_2 J = \frac{1}{2} \int_0^T dt \delta H_{u^j} \delta u^j \quad (\text{M-44})$$

と書ける。ただし δH_{u^j} は

$$\delta H_{u^j} = H_{x^i u^j} \delta x^i + H_{p_i u^j} \delta p_i + H_{u^i u^j} \delta u^i \quad (\text{M-45})$$

である。

以上より δu に比例しない項を消せた。この式から、例えば H_{MP} の 2 次変分についての条件 (M-30) を導ける。これを、これを導くために、任意の時刻 $t_2 \in [0, T]$ を取り、その点を中心とした幅 2Δ の時間的領域を考えてその両端を $t_1 := t_2 - \Delta$, $t_3 := t_2 + \Delta$ とする。ここで、変分 $\delta u^i(t)$ を適当な関数 $a^i(t)$ を用いて

$$\delta u^i(t) = \varepsilon a^i(t) \quad (\text{M-46})$$

とする。ただしここで $a^i(t)$ を $[t_1, t_3]$ でのみ有限の値を持ってその境界 t_1, t_3 で 0 となるような関数を考える (先の例となるが、例えば図 M-2 の $a_{(0)}$ を $a(t)$ として取れば良い.)。このとき $t \in [t_1, t_3]$ で $|\delta u(t)| = \mathcal{O}(\varepsilon)$ であり、その積分によって得られる $|\delta x(t)|$, $|\delta p(t)|$ は $\mathcal{O}(\varepsilon)\mathcal{O}(\Delta)$ である。また、制御変数の変分 $\delta u^i(t)$ は Δ を十分短くとれば $\delta \mathbf{x}$ および $\delta \mathbf{p}$ は t_3 において 0 とみなせる^{*10}。したがって $[t_1, t_3]$ 以外の区間では $\delta \mathbf{x}$, $\delta \mathbf{p}$, $\delta \mathbf{u}$ は全て 0 であり、 δJ_2 の積分は区間 $[t_1, t_3]$ においてのみ考えれば良い。さらに同様の考察により、

$$\int_{t_1}^{t_3} |\delta u^i \delta u^j| = \mathcal{O}(\varepsilon^2)\mathcal{O}(\Delta) \quad (\text{M-47})$$

および

$$\int_{t_1}^{t_3} |\delta x^i \delta u^j| = \mathcal{O}(\varepsilon^2)\mathcal{O}(\Delta^2) \quad (\text{M-48})$$

となることが分かる。したがって Δ を十分小さく取ってその 1 次までを取る近似の下では、式 (M-44) は

$$-\delta_2 J = \frac{\varepsilon^2}{2} \int_{t_1}^{t_3} dt H_{u^i u^j} a^i a^j + \mathcal{O}(\Delta^2) \quad (\text{M-49})$$

と書ける。任意の変分 $a^i(t)$ に対して $\delta_2 J$ が非負であるためには、 $H_{u^i u^j} \leq 0$ が必要である。

^{*10} これを精確に述べるならば、微分方程式 (M-31), (M-32) を積分すれば良い。T の 1 次まで考える限りにおいては $\delta \mathbf{x}(t_3)$ および $\delta \mathbf{p}(t_3)$ は 0 となることが示される。

M-2 部分積分による 2 次変分の書き換え

Pontryagin ハミルトニアン の 2 階偏微分 $H_{u^i u^j}$ が 0 となるときには、式 (M-30) は自明に満たされてしまう。既に見たように、この条件は評価関数の 2 次変分 M-44 に対して特定の変分を取ることで得られたものである。これが自明に満たされてしまうのは、Pontryagin ハミルトニアン H_{MP} が制御変数 \mathbf{u} に見かけ上依存していないからである。しかし H_{MP} の定義 (K-11) から、 H_{MP} は \mathbf{x}, \mathbf{p} には依存していることが分かる。そして \mathbf{x}, \mathbf{p} はその時間微分方程式 (K-12), (K-13) を通して \mathbf{u} に依存している。すなわち Pontryagin ハミルトニアンを各時刻で即時的に評価していることが問題である。 H_{MP} を時間的な広がりを持って評価するために、GLC 条件では評価関数の 2 次変分 M-44 に対して部分積分を行ってから変分を取ることを考える。これにより最大値原理には含まれない最適性の必要条件を述べられる。

以下では、特異制御を考える。まず

$$Q_{i,j}^{(m)} = \frac{\partial}{\partial u^i} \left(\frac{d}{dt} \right)^m \frac{\partial}{\partial u^j} H_{MP} \quad (\text{M-50})$$

とする。特異制御では $m = 0$ のとき $U_0 = 0$ である。少なくとも 1 つの非零の成分をもつような最小の m を M とする。このとき $m = 0, 1, 2, \dots, M$ に対して

$$\frac{d}{dt} \left(X_{i,j}^{(m)} \delta x^i + P_{i,j}^{(m)} \delta p_i + Q_{i,j}^{(m)} \delta u^i \right) = X_{m+1}^{(i,j)} \delta x^i + P_{m+1}^{(i,j)} \delta p_i + U_{m+1}^{(i,j)} \delta u^i \quad (\text{M-51})$$

が成り立つ。ただし

$$X_{i,j}^{(m)} = \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{d}{dt} \right)^m \frac{\partial}{\partial u^j} H_{MP}, \quad (\text{M-52})$$

$$P_{i,j}^{(m)} = \frac{\partial}{\partial p_i} \left(\frac{d}{dt} \right)^m \frac{\partial}{\partial u^j} H_{MP} \quad (\text{M-53})$$

である。式 (M-51) は、後に示すように部分積分を取る際に有用である。以下ではまずこれを示す。

仮定より、 $0 \leq m < M$ に対して $Q_{i,j}^{(m)} = 0$ とする。任意の $m \leq M$ に対して、

$$U_{m+1}^{(i,j)} = X_m^{(k,j)} H_{p_k u^i} - P_m^{(k,j)} H_{x^k u^i}, \quad (\text{M-54})$$

$$X_{m+1}^{(i,j)} = X_m^{(k,j)} H_{p_k x^i} - P_m^{(k,j)} H_{x^k x^i} + \dot{X}_m^{(i,j)}, \quad (\text{M-55})$$

$$P_{m+1}^{(i,j)} = X_m^{(k,j)} H_{p_k p_i} - P_m^{(k,j)} H_{x^k p_i} + \dot{P}_m^{(i,j)} \quad (\text{M-56})$$

である。ここではこの漸化式を U_m についてのみ示す。 X_m, P_m についても同様に示せる。まず式

$$\left(\frac{d}{dt} \right)^m \frac{\partial}{\partial u^j} H_{MP} \quad (\text{M-57})$$

が一般に $\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{u}$ の関数であることを用いれば, 連鎖則より

$$U_{m+1}^{(i,j)} = \frac{\partial}{\partial u^i} \left[\left(\dot{x}^i \frac{\partial}{\partial x^i} + \dot{p}_i \frac{\partial}{\partial p_i} + \dot{u}^i \frac{\partial}{\partial u^i} \right) \left(\frac{d}{dt} \right)^m \frac{\partial}{\partial u^j} H_{\text{MP}} \right] \quad (\text{M-58})$$

である. 式 (M-53) の定義と運動方程式 (K-12), (K-13) を用いれば,

$$U_{m+1}^{(i,j)} = \frac{\partial}{\partial u^i} \left[H_{p_i} X_m^{(i,j)} - H_{x^i} P_m^{(i,j)} \right] \quad (\text{M-59})$$

が示される. ただし $U_m = 0$ を用いた.

上記の漸化式 (M-56) から, $Q_{i,j}^{(m)}$ が m の偶奇に応じて対称または反対称となること, すなわち

$$U_M^{(i,j)} = (-1)^M U_M^{(j,i)} \quad (\text{M-60})$$

が分かる.

これを示すために, 次の量

$$A_{m,n}^{(i,j)} := X_m^{(k,j)} P_n^{(k,i)} - X_n^{(k,i)} P_m^{(k,j)} \quad (\text{M-61})$$

を定義する. これは $P_0^{(k,i)} = H_{p_k u^i}$, $X_0^{(k,i)} = H_{x^k u^i}$ であることから, $A_{m-1,0} = U_m$ および $A_{0,m-1} = -U_m^T$ として U_m と結びついている (ただし T は転置を表す).

ここで漸化式 (M-56) を用いると,

$$\dot{A}_{m,n} = A_{m+1,n} + A_{m,n+1} \quad (\text{M-62})$$

が示せる. ここで s を, 少なくとも 1 つの $m (\neq 0)$ について $A_{m,n} \neq 0$ となるような最小の $m+n$ の値であるとする. ここで $A_{0,0}^{(i,j)} = H_{x^k u^j} H_{p^k u^i} - H_{x^k u^i} H_{p^k u^j} = U_1 = 0$ および $A_{M-1,0} = U_M \neq 0$ であるため, $0 < s \leq M-1$ を得る. 成分の和が s より小さい A は 0 となるので, $A_{s-i-1,i} = 0$ および $\dot{A}_{s-i-1,i} = 0$. これを式 (M-62) に適用すれば,

$$0 = A_{s-i,i} + A_{s-i-1,i+1} \quad (\text{M-63})$$

となる. これを繰り返し適用して,

$$(0 \neq) A_{s-i,i} = -A_{s-i-1,i+1} = (-1)^2 A_{s-i-2,i+2} = \cdots = (-1)^{s-i} A_{0,s} \quad (\text{M-64})$$

を得る. もし $s < M-1$ とすると式 (M-64) より $A_{s,0} = U_s^{(i,j)} \neq 0$ となってしまう仮定と反するため, $s = M-1$ である. したがって式 (M-64) をさらに適用すれば,

$$A_{M-1,0} = (-1)^{M-1} A_{0,M-1} \quad (\text{M-65})$$

を得る. $A_{M-1,0} = U_M$, $A_{0,M-1} = -U_M^T$ であるので, 結局

$$U_M = (-1)^{M-1} U_M^T \quad (\text{M-66})$$

である。

式 (M-51) は、漸化式 (M-56) および (M-31), (M-32) を適用して直接的に計算を行うことで示される。添字 j は固定してそれ以外の添字は和を取っていることに注意すると、

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dt} \left(X_{i,j}^{(m)} \delta x^i + P_{i,j}^{(m)} \delta p_i + Q_{i,j}^{(m)} \delta u^i \right) \\
&= \frac{d}{dt} \left(X_{i,j}^{(m)} \delta x^i \right) + \frac{d}{dt} \left(P_{i,j}^{(m)} \delta p_i \right) + \frac{d}{dt} \left(Q_{i,j}^{(m)} \delta u^i \right) \\
&= \dot{X}_m^{(i,j)} \delta x^i + X_{i,j}^{(m)} \delta \dot{x}^i + \dot{P}_m^{(i,j)} \delta p_i + P_{i,j}^{(m)} \delta \dot{p}_i \\
&= \left(X_{m+1}^{(i,j)} - X_m^{(k,j)} H_{p_k x^i} + P_m^{(k,j)} H_{x^k p_i} \right) \delta x^i \\
&\quad + X_{i,j}^{(m)} \left(H_{p_i x^k} \delta x^k + H_{p_i u^k} \delta u^k \right) \\
&\quad + \left(P_{m+1}^{(i,j)} - X_m^{(k,j)} H_{p_k p_i} + P_m^{(k,j)} H_{x^k p_i} \right) \delta p^i \\
&\quad - P_{i,j}^{(m)} \left(H_{x^i x^k} \delta x^k + H_{x^i u^k} \delta u^k + H_{x^i p_k} \delta p^k \right), \\
&= X_{m+1}^{(i,j)} \delta x^i + P_{m+1}^{(i,j)} \delta p^i + \left(X_{i,j}^{(m)} H_{p_i u^k} - P_{i,j}^{(m)} H_{x^i u^k} \right) \delta u^k \\
&= X_{m+1}^{(i,j)} \delta x^i + P_{m+1}^{(i,j)} \delta p^i + U_{m+1}^{(i,j)} \delta u^i \tag{M-67}
\end{aligned}$$

である。

それでは評価関数の 2 次変分 (M-44) を部分積分し、式 (M-51) を適用すると、

$$\begin{aligned}
-\delta_2 J &= (-1)^M \frac{1}{2} \int_{t_1}^{t_3} dt \left[\left(\frac{d}{dt} \right)^M \delta H_{u^j} \right] \left[\left(\int_{t_1}^{t_3} dt \right)^M \delta u^j \right] \\
&\quad + \sum_{m=1}^M (-1)^{m-1} \left[\left(\frac{d}{dt} \right)^{m-1} \delta H_{u^j} \left(\int_{t_1}^{t_3} dt \right)^m \delta u^j \right]_{t_1}^{t_3} \\
&= (-1)^M \frac{1}{2} \int_{t_1}^{t_3} dt \left[X_{i,j}^{(M)} \delta x^i + P_{i,j}^{(M)} \delta p_i + Q_{i,j}^{(M)} \delta u^i \right] \left[\left(\int_{t_1}^{t_3} dt \right)^M \delta u^j \right] \\
&\quad + \sum_{m=1}^M (-1)^{m-1} \left[\left[X_{m-1}^{(i,j)} \delta x^i + P_{m-1}^{(i,j)} \delta p_i + U_{m-1}^{(i,j)} \delta u^i \right] \left(\int_{t_1}^{t_3} dt \right)^m \delta u^j \right]_{t_1}^{t_3} \tag{M-68}
\end{aligned}$$

となる。ただし M は $U_m \neq 0$ である様な最小の m であるとする。

以下ではある時刻 $t_2 \in [0, T]$ において GLC 条件が破れているとしたときに、評価関数の変分 $\delta_2 J$ が負になるような変分の存在 (すなわち J が最小でない) を証明する。その際、(i) 偶数の $M = 2k$ に対して $(-1)^k Q^{(2k)} \geq 0$ となる場合、(ii) M が奇数 ($M = 2k + 1$) の場合の 2 つを考える。

(i), (ii) のいずれの場合においても、先ほどと同じように t_2 を中心とする幅 2Δ の時間的領域を考えて $t_1 = t_2 - \Delta$, $t_3 = t_2 + \Delta$ とし、変分 δu^i はこの領域でのみ値を持つものとする。前小節で述べたように、 Δ を十分小さくとれば 1 次までの近似で状態および共役状態

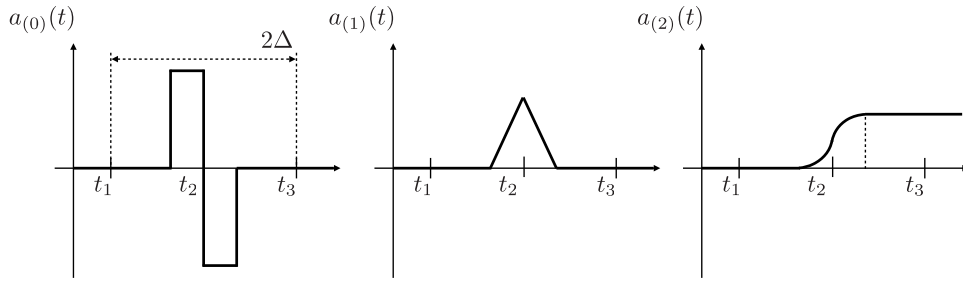


図 M-2 $M = 2$ の場合のときの適用可能な関数 $a_{(0)}^i(t)$ の具体例. ただし簡単のため i 添字は無視して制御変数は 1 つのみの場合を考えている. $a_{(0)}, a_{(1)}$ は $t = t_1, t_3$ で 0 となっている.

の変分 $\delta x^i, \delta p^i$ もこの領域でのみ値を持つようにできる. ここで $\delta u^i(t) = \varepsilon a_{(0)}^i(t)$ として

$$a_{(m)}^i(t) := \left(\int_{t_1}^t dt \right)^m a_{(0)}^i(t) \quad (\text{M-69})$$

とする (ただし $m = 1, 2, \dots, M$). ただし $a_{(m)}^i(t)$ は $k = 0, 1, \dots, k$ については区間 $[t_1, t_3]$ でのみ有限の値を持ち, その境界 t_1, t_3 において 0 となるような関数であるとする (例えば図 M-2). このとき, 式 (M-68) で初項以外は (境界上で $\delta x^i = \delta p^i = \delta u^i = 0$ より) 0 になることから,

$$\begin{aligned} -\delta_2 J &= (-1)^M \frac{\varepsilon^2}{2} \int_{t_1}^{t_3} dt Q_{i,j}^{(M)} a_{(0)}^i a_{(M)}^j \\ &= (-1)^M Q_{i,j}^{(M)}(t_2) \frac{\varepsilon^2}{2} \int_{t_1}^{t_3} dt a_{(0)}^i a_{(M)}^j + \mathcal{O}(\Delta^2) \\ &= (-1)^M Q_{i,j}^{(M)}(t_2) \frac{\varepsilon^2}{2} \int_{t_1}^{t_3} dt a_{(0)}^i a_{(M)}^j + \mathcal{O}(\Delta^2) \end{aligned} \quad (\text{M-70})$$

である. ここで $M = 2k$ のときにはさらに k 回部分積分を行うことで

$$\int_{t_1}^{t_3} dt a_{(0)}^i a_{(M)}^j = (-1)^k \int_{t_1}^{t_3} dt a_{(k)}^i a_{(k)}^j \quad (\text{M-71})$$

となり, $M = 2k + 1$ のときには

$$\int_{t_1}^{t_3} dt a_{(0)}^i a_{(M)}^j = (-1)^k \int_{t_1}^{t_3} dt a_{(k)}^i a_{(k+1)}^j \quad (\text{M-72})$$

となる. ただしここで, $a_{(m)}^i$ が $m = 0, 1, \dots, k$ に対して境界 t_1, t_3 において 0 となることを用いた.

(i) M が偶数で $M = 2k$ のときで $(-1)^k Q_{ij}^{(2k)} \geq 0$ の場合

このとき式 (M-70) は

$$-\delta_2 J = (-1)^k Q_{ij}^{(2k)}(t_2) \frac{\varepsilon^2}{2} \int_{t_1}^{t_3} dt a_{(k)}^i a_{(k)}^j + \mathcal{O}(\Delta^2) \quad (\text{M-73})$$

と書ける。仮定より、任意の $a_{(k)}^i$ についてこの初項は正の値となる。したがって $\delta_2 J$ は負であり、評価関数 J が極小でないとわかる。

(ii) M が奇数の場合 ($M = 2k + 1$)

このとき式 (M-70) は

$$\begin{aligned} -\delta_2 J &= (-1)^k Q_{ij}^{(2k+1)}(t_2) \frac{\varepsilon^2}{2} \int_{t_1}^{t_3} dt a_{(k)}^i a_{(k+1)}^j + \mathcal{O}(\Delta^2) \\ &= (-1)^k Q_{ij}^{(2k+1)}(t_2) \frac{\varepsilon^2}{2} \int_{t_1}^{t_3} dt \left[a_{(k)}^i a_{(k+1)}^j - a_{(k)}^j a_{(k+1)}^i \right] + \mathcal{O}(\Delta^2) \quad (\text{M-74}) \end{aligned}$$

と書ける。ただしここで $Q_{ij}^{(2k+1)}$ が反対称であることを用いた。ここで $a_{(k)}^i$ のとり方によっては初項は正負どちらの値も取りうる。

N 座標変換の下での GLC 条件の不変性

節 7.2.2 で定義した行列 $Q^{(m)}$ は定義上、ハミルトニアンを $u^j(t)$ でどのように表現するかには依存する。ここでは、それに関わらず $Q^{(M)} = 0$, $Q^{(M)} \geq 0$, および $Q^{(M)} \leq 0$ という性質はそれらの表現に依存しないことを見る。

1 つの同一のハミルトニアンが $\mathbf{u} = \{u^j(t)\}$ および $\mathbf{v} = \{v^j(t)\}$ による異なる表現を持っているとする。このとき、 u^j と v^j は座標変換のように

$$\frac{\partial}{\partial u^i} = \sum_{j=1}^l \frac{\partial v^j}{\partial u^i} \frac{\partial}{\partial v^j} \quad (\text{N-75})$$

という性質を持っている。ただし Jacobi 行列 $\partial v^j / \partial u^i$ は可逆であるとする。

まず、 $Q^{(M)}(\mathbf{u})$ と $Q^{(M')}(\mathbf{v})$ の関係式を導く。ただしここで M, M' はそれぞれ $Q^{(M)}(\mathbf{u})$, $Q^{(M')}(\mathbf{v})$ が少なくとも 1 つの非零の成分をもつような最小の m, m' である。ここで一般性を失わずに、 $M \leq M'$ とできる。式 (N-75) を式 (7.15) に直接適用すれば、

$$\begin{aligned} Q_{ij}^{(M)}(\mathbf{u}) &= \sum_{k,l=1}^l \frac{\partial v^k}{\partial u^i} \frac{\partial}{\partial v^k} \left[\left(\frac{d}{dt} \right)^M \left(\frac{\partial v^l}{\partial u^j} \frac{\partial}{\partial v^l} H_{\text{MP}} \right) \right] \\ &= \sum_{k,l=1}^l \frac{\partial v^k}{\partial u^i} \frac{\partial v^l}{\partial u^j} \frac{\partial}{\partial v^k} \left[\left(\frac{d}{dt} \right)^M \left(\frac{\partial}{\partial v^l} H_{\text{MP}} \right) \right] \\ &\quad + \sum_{n=1}^M \binom{M}{n} \sum_{k,l=1}^l \frac{\partial v^k}{\partial u^i} \frac{\partial}{\partial v^k} \left[\left(\frac{d}{dt} \right)^n \left(\frac{\partial v^l}{\partial u^j} \right) \left(\frac{d}{dt} \right)^{M-n} \left(\frac{\partial}{\partial v^l} H_{\text{MP}} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{N-76})$$

を得る。しかし、最後の項は仮定 $Q^m(\mathbf{v}) = 0$ ($m < M'$) と特異性条件の時間微分 (7.12),

すなわち

$$\left(\frac{d}{dt}\right)^m \left(\frac{\partial}{\partial v^l} H_{\text{MP}}\right) = 0 \quad (\text{N-77})$$

によって消える。したがって結局,

$$Q_{ij}^{(M)}(\mathbf{u}) = \sum_{kl} \frac{\partial v^k}{\partial u^i} Q_{kl}^{(M)}(\mathbf{v}) \frac{\partial v^l}{\partial u^j} \quad (\text{N-78})$$

を得る。Jacobi 行列 $\partial v^j / \partial u^i$ は可逆なので, $Q^{(M)}(\mathbf{u}) = 0 \Leftrightarrow Q^{(M)}(\mathbf{v}) = 0$ および $Q^{(M)}(\mathbf{u}) \geq 0 \Leftrightarrow Q^{(M)}(\mathbf{v}) \geq 0$, $Q^{(M)}(\mathbf{u}) \leq 0 \Leftrightarrow Q^{(M)}(\mathbf{v}) \leq 0$ を得る。

0 行列 $Q^{(m)}$ の漸化式

ここでは, 節 7.2 で定義した行列 $Q^{(m)}$ を量子系の時間最適制御について具体的に計算する。

まず一般の $m > 0$ について, 漸化式

$$\begin{aligned} Q_{ij}^{(m)} &= \frac{\partial}{\partial u^i} \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{d}{dt}\right)^{m-1} \frac{\partial}{\partial u^j} H_{\text{MP}} \right] \\ &= \frac{\partial}{\partial u^i} \left[\frac{du^k}{dt} \frac{\partial}{\partial u^k} \left(\frac{d}{dt}\right)^{m-1} \frac{\partial}{\partial u^j} H_{\text{MP}} + \text{Tr} \left[\frac{dF}{dt} \frac{\partial}{\partial F} \left(\frac{d}{dt}\right)^{m-1} \frac{\partial}{\partial u^j} H_{\text{MP}} \right] \right] \\ &= \frac{d}{dt} Q_{ij}^{(m-1)} - i \text{Tr} \left[\left[\frac{\partial H}{\partial u^i}, F \right] R_j^{(m-1)} \right] \end{aligned} \quad (\text{O-79})$$

が得られる。ただし, ここで

$$R_j^{(m)} := \frac{\partial}{\partial F} \left(\frac{d}{dt}\right)^m \frac{\partial}{\partial u^j} H_{\text{MP}} \quad (\text{O-80})$$

である。 $m = 0$ については,

$$R_j^{(0)} = \frac{\partial}{\partial F} \text{Tr} \left[\frac{\partial H}{\partial u^j} F \right] = \frac{\partial H}{\partial u^j} \quad (\text{O-81})$$

であり, $m > 0$ についても同様に漸化式が

$$\begin{aligned} R_j^{(m)} &= \frac{du^k}{dt} \frac{\partial}{\partial u^k} R_j^{(m-1)} + \frac{\partial}{\partial F} \text{Tr} \left[\frac{dF}{dt} R_j^{(m-1)} \right] \\ &= \frac{d}{dt} R_j^{(m-1)} - i \left[R_j^{(m-1)}, H \right] \end{aligned} \quad (\text{O-82})$$

で与えられる。

もしある $m > 0$ に対して, $Q^{(k)} = 0$ ($k = 1, 2, \dots, m-1$) であれば, 式 (O-79) は

$$Q_{ij}^{(m)} = -i \text{Tr} \left[\left[\frac{\partial H}{\partial u^i}, F \right] R_j^{(m-1)} \right] \quad (\text{O-83})$$

となる。特に $m = 1$ については

$$Q_{ij}^{(1)} = -i \operatorname{Tr} \left[\left[\frac{\partial H}{\partial u^j}, \frac{\partial H}{\partial u^i} \right] F \right] \quad (\text{O-84})$$

であり, $m = 2$ については

$$Q_{ij}^{(2)} = -i \operatorname{Tr} \left[\left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial H}{\partial u^j} \right), \frac{\partial H}{\partial u^i} \right] F \right] - \operatorname{Tr} \left[\left[\frac{\partial H}{\partial u^i}, F \right] \left[\frac{\partial H}{\partial u^j}, H \right] \right] \quad (\text{O-85})$$

である。なお, $\partial H / \partial u^j$ が時間に依存しなければ $Q_{ij}^{(2)}$ の初項は 0 となる。

P 例 3 に現れる演算子

節 7.3.3 に現れる \mathcal{H}_{sym} は 3 重項 $\{|\uparrow\uparrow\rangle, (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)/2, |\downarrow\downarrow\rangle\}$ を基底としたときに

$$\begin{aligned} \Sigma^x &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ S^1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad S^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{P-86})$$

と書かれる。ここで \mathcal{H}_{sym} 上のトレースを取れば

$$\operatorname{Tr} \Sigma^i + \frac{1}{3} \quad (\text{P-87})$$

なので, 演算子 Σ^i のトレース 0 部分は $\tilde{\Sigma}^i = \Sigma^i - 1/3$ と書ける。なお, S^i は \mathcal{H}_{sym} 上でもトレース 0 である。Gell-Mann 行列を用いれば,

$$\begin{aligned} \tilde{\Sigma}^x &= \lambda_4 - \frac{1}{2}\lambda_3 + \frac{1}{2\sqrt{3}}\lambda_8, \quad \tilde{\Sigma}^z = \lambda_3 - \frac{1}{\sqrt{3}}\lambda_8, \\ S^x &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda_1 + \lambda_6), \quad S^y = \frac{1}{\sqrt{2}}(\lambda_2 + \lambda_7), \quad S^z = \frac{1}{2}(\lambda_3 + \sqrt{3}\lambda_8) \end{aligned} \quad (\text{P-88})$$

と書ける。

Q 例 3 での境界に属する特異制御への GLC 条件の適用

ここでは, 例 3 (節 7.3.3) での境界上の特異制御, すなわち

$$J^2 + (b^1)^2 + (b^2)^2 + (b^3)^2 = \Omega^2 \quad (\text{Q-89})$$

を満たす特異制御が最適ではないことを示す。

まず、一般に（内部の特異制御についても）成り立つ条件から確認する。特異性条件 (7.11) およびその時間微分 (7.13) から、式 (7.35), (7.36), そして

$$b^1 f^2 - b^2 f^1 = 0, \quad (\text{Q-90})$$

$$J f^2 = 0, \quad (\text{Q-91})$$

$$f^1 (J - \omega_0) = 0 \quad (\text{Q-92})$$

が示される。さらに 2 階時間微分を考えることで

$$b^1 f^1 + b^2 f^2 + \sqrt{2} b^3 f^4 = 0 \quad (\text{Q-93})$$

を得る。代数的条件 (6.31) を用いれば $f^4 \neq 0$ (eq. (7.36)) も得られる。これらの条件は特異制御が領域 \mathcal{U} の内部であるか境界であるかに依らずに成り立っている。

GLC 条件を適用することで、以下では背理法によって最適な特異制御では $b^i = 0 (i = 1, 2, 3)$ となることを示し、最後にその制御法の最適性を確認する。

初めに、 $b^3 \neq 0$ を仮定する。ハミルトニアン (7.32) を b^1, b^2, J の関数とみなすと、

$$H(t) = \omega_0 \tilde{\Sigma}^x + J \tilde{\Sigma}^z + \sum_{i=1}^2 b^i(t) S^i + b^3(b^1, b^2, J; t) S^3 \quad (\text{Q-94})$$

である。ただしここで $b^3(b^1, b^2, J; t) = \pm \sqrt{\Omega^2 - J^2 - (b^1)^2 - (b^2)^2}$ である。ここで

$$\begin{aligned} h_i &:= \frac{\partial H}{\partial b^i} = S^i - \frac{b^i}{b^3} S^3 \quad (i = 1, 2), \\ h_3 &:= \frac{\partial H}{\partial J} = \tilde{\Sigma}^z - \frac{J}{b^3} S^3 \end{aligned} \quad (\text{Q-95})$$

と定義して 3×3 行列 $Q^{(1)}$ を計算すると、非零な成分は

$$Q_{13}^{(1)} = -Q_{31}^{(1)} = -4\sqrt{2} f^2, \quad (\text{Q-96})$$

$$Q_{23}^{(1)} = -Q_{32}^{(1)} = 4\sqrt{2} f^1 \quad (\text{Q-97})$$

となる。GLC 条件 $Q^{(1)} = 0$ を用いれば、 $f^1 = f^2 = 0$ を得る。これらと式 (Q-93) および $f^4 \neq 0$ を用いると、 $b^3 = 0$ を得る。これは仮定に矛盾するので、最適な特異制御では $b^3 = 0$ である。

次に $b^3 = 0$ の下で $b^1 \neq 0$ を仮定する。先ほどと同様にハミルトニアン (7.32) を b^2, b^3, J の関数とみなす。 $h_1 := \partial H / \partial b^2$, $h_2 := \partial H / \partial b^3$, $h_3 := \partial H / \partial J$ とすれば 3×3 行列 $Q^{(1)}$ を計算でき、そこでの非零な成分は

$$Q_{13}^{(1)} = -Q_{31}^{(1)} = 4\sqrt{2} \left(\frac{b^2 f^2}{b^1} + f^1 \right) \quad (\text{Q-98})$$

である。ただし $b^1 = \pm \sqrt{\Omega^2 - J^2 - (b^2)^2}$ である。GLC 条件によればこれは 0 になる必要があるので、 $b^1 f^1 + b^2 f^2 = 0$ を得る。さらに式 (Q-90) および (Q-93) を用いれば、

$f^1 = f^2 = 0$ を得る. しかし, $df^2/dt = -i \text{Tr} [\lambda_2[H, F]] = 0$ から $b^1 = 0$ なので, やはり仮定に矛盾する. 以上より, 最適な特異制御は必ず $b^1 = b^3 = 0$ を満たす.

最後に, $b^1 = b^3 = 0$ の下で $b^2 \neq 0$ を仮定する. 式 (Q-90) により $f^1 = 0$ が得られる. するとその時間微分 $df^1/dt = -i \text{Tr} [\lambda_1[H, F]] = 0$ は $b^2 = 0$ を導き, 仮定と矛盾する. したがって最適な特異制御は $b^i = 0 (i = 1, 2, 3)$ である.

結果として, 我々は $J \neq 0$ の場合のみを考えれば良く, ハミルトニアン (7.32) を $b^i (i = 1, 2, 3)$ の関数とみなす. このとき h_i は $b^1 = b^2 = b^3 = 0$ により

$$h_i := \frac{\partial H}{\partial b^i} = S^i \quad (\text{Q-99})$$

となる. 演算子 h_i は制御変数が u の内部に属するときと同じ形になっているので, $Q^{(1)}, Q^{(2)}$ は本文で導いたそれらの部分行列をとることで直ちに得られる. したがって $Q_{ij}^{(1)} = 0$ であり, $Q_{ij}^{(2)}$ についても式 (7.40) の初めの 3×3 部分行列を見れば良い. 結果として, 本文と同じ結論 (7.41) が得られる. しかし, 最適となるための条件 (7.41) は $J = \Omega > \omega_0$ によって満足できない. 以上により, 境界上の特異制御は最適でない.

参考文献

- [1] Landauer, R. (1986). Computation and physics: Wheeler's meaning circuit? *Foundations of Physics*, 16(6), pp. 551–564.
- [2] Wootters, W. K. & Zurek, W. H. (1982). A single quantum cannot be cloned. *Nature*, 299(28), pp. 802–803.
- [3] Dieks, D. (1982). Communication by EPR devices. *Physics Letters A*, 92(6), pp. 271–272.
- [4] Yuen, H. P. (1986). Amplification of quantum states and noiseless photon amplifiers. *Physics Letters A*, 113(8), pp. 405–407.
- [5] Bužek, V., & Hillery, M. (1996). Quantum copying: Beyond the no-cloning theorem. *Physical Review A*, 54(3), pp. 1844–1852.
- [6] Werner, R. F. (1998). Optimal cloning of pure states. *Physical Review A*, 58(3), pp. 1827–1832.
- [7] Helstrom, C. W. (1969). Quantum detection and estimation theory. *Journal of Statistical Physics*, 1(2), pp. 231–252.
- [8] Ivanovic, I. D. (1987). How to differentiate between non-orthogonal states. *Physics Letters A*, 123(6), pp. 257–259.
- [9] Dieks, D. (1988). Overlap and distinguishability of quantum states. *Physics Letters A*, 126(5,6), pp. 303–306.
- [10] Peres, A. (1988). How to differentiate between non-orthogonal states. *Physics Letters A*, 128(1,2), p. 19.
- [11] Ozawa, M. (2003). Universally valid reformulation of the Heisenberg uncertainty principle on noise and disturbance in measurement. *Physical Review A*, 67(4), 042105.
- [12] Ozawa, M. (2003). Physical content of Heisenberg's uncertainty relation: Limitation and reformulation. *Physics Letters A*, 318(1,2), pp. 21–29, November
- [13] Watanabe, Y., Sagawa, T., & Ueda, M. (2011). Uncertainty relation revisited from quantum estimation theory. *Physical Review A*, 84(4), 042121.
- [14] Watanabe, Y., & Ueda, M. (2011). Quantum estimation theory of error and dis-

- turbance in quantum measurement, *e-print*, arXiv:1106.2526.
- [15] Belavkin, V. P. (1999). Measurement, filtering and control in quantum open dynamical systems. *Reports on Mathematical Physics*, 43(3), pp. 405–425.
 - [16] Wiseman, H. M., Mancini, S., & Wang, J. (2002). Bayesian feedback versus Markovian feedback in a two-level atom. *Physical Review A*, 66(1), 013807.
 - [17] Wang, J., & Wiseman, H. M. (2001). Feedback-stabilization of an arbitrary pure state of a two-level atom. *Physical Review A*, 64(6), 063810.
 - [18] Brańczyk, A. M., Mendonça, P. E. M. F., Gilchrist, A., Doherty, A. C., & Bartlett, S. D. (2007). Quantum control of a single qubit. *Physical Review A*, 75(1), 012329.
 - [19] Mendonça, P. E. M. F., Gilchrist, A., & Doherty, A. C. (2008). Optimal tracking for pairs of qubit states. *Physical Review A*, 78(1), 012319.
 - [20] Bennett, C. H. (1992). Quantum cryptography: Uncertainty in the service of privacy. *Science*, 257(5071), pp. 752–753.
 - [21] Bennett, C. H., & Brassard, G. (1984). Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing. *Proceedings of IEEE International Conference on Computers Systems and Signal Processing*, pp 175–179.
 - [22] Zhang, S. L., Zou, X. B., Li, C., Jin, C. H., & Guo, G. C. (2008). Covariant feedback control of arbitrary qudit state against depolarizing noise is impossible. *e-print*, arXiv:0811.3254.
 - [23] Korotkov, A. N., & Keane, K. (2010). Decoherence suppression by quantum measurement reversal. *Physical Review A*, 81(4), 040103(R).
 - [24] Wang, C. Q., Xu, B. M., Zou, J., He, Z., Yan, Y., Li, J. G., & Shao, B. (2014). Feed-forward control for quantum state protection against decoherence. *Physical Review A*, 89(3), 032303.
 - [25] Gillett, G. G., Dalton, R. B., Lanyon, B. P., Almeida, M. P., Barbieri, M., Pryde, G. J., O’Brien, J. L., Resch, K. J., Bartlett, S. D., & White, A. G. (2010). Experimental feedback control of quantum systems using weak measurements. *Physical Review Letters*, 104(8), 080503.
 - [26] Lee, J. C., Jeong, Y. C., Kim, Y. S., & Kim Y. H. (2011). Experimental demonstration of decoherence suppression via quantum measurement reversal. *Optics Express*, 17(3), pp. 32–44.
 - [27] Sussmann, H. J., & Willems, J. C. (1997). 300 years of optimal control: From the brachistochrone to the maximum principle *IEEE Control Systems*, 19(17), pp. 16309–16316.
 - [28] Schulte-Herbrüggen, T., Spörl, A., Khaneja, N., & Glaser, S. J. (2005). Optimal

- control-based efficient synthesis of building blocks of quantum algorithms: A perspective from network complexity towards time complexity. *Physical Review A*, 72(4), 042331
- [29] Huang, S. Y., & Goan, H. S. (2014). Optimal control for fast and high-fidelity quantum gates in coupled superconducting flux qubits. *Physical Review A*, 90(1), 012318
- [30] Burkard, G., Loss, D., DiVincenzo D, P, & Smolin, J. A. (1999). Physical optimization of quantum error correction circuits. *Physical Review B*, 60(16), pp. 11404–11416.
- [31] Wang, X., Vinjanampathy, S., Strauch, F. W., & Jacobs, K. (2011). Ultraefficient cooling of resonators: Beating sideband cooling with quantum control. *Physical Review Letters*, 107(17), 177204.
- [32] Machnes, S., Cerrillo, J., Aspelmeyer, M., Wiczeorek, W., Plenio, M. B., & Retzker, A. (2012). Pulsed laser cooling for cavity optomechanical resonators. *Physical Review Letters*, 108(15), 153601.
- [33] Nielsen, M. A. (2006). Quantum computation as geometry *Science* 311(5764), pp. 1133–1135.
- [34] Nielsen, M., A., Dowling, M., R., Gu, M., & Doherty, A. C. (2006). *Physical Review A*, 73(6), 062323.
- [35] Koike, T., & Okudaira, Y. (2010). Time complexity and gate complexity. *Physical Review A*, 82(4), 042305.
- [36] Khaneja, N., Brockett, R., & Glaser, S. J. (2001). Time optimal control in spin systems. *Physical Review A*, 63(3), 032308.
- [37] Khaneja, N., & Glaser, S. J. (2001). Cartan decomposition of $SU(2^n)$ and control of spin systems. *Chemical Physics*, 267(1–3), 11–23.
- [38] Zhang, J., Vala, J., Sastry, S., & Whaley, K. B. (2003). Geometric theory of nonlocal two-qubit operations. *Physical Review A*, 67(4), 042313.
- [39] Carlini, A., Hosoya, A., Koike, T., & Okudaira, Y. (2006). Time-optimal quantum evolution. *Physical Review Letters*, 96(6), 060503.
- [40] Carlini, A., Hosoya, A., Koike, T., & Okudaira, Y. (2007). Time-optimal unitary operations. *Physical Review A*, 75(4), 042308.
- [41] Carlini, A., Hosoya, A., Koike, T., & Okudaira, Y. (2008). Time optimal quantum evolution of mixed states. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 41(4), 045303.
- [42] Russell, B., & Stepney, S. (2014). Zermelo navigation and a speed limit to quantum information processing *Physical Review A*, 90(1), 012303.

- [43] Brody, D. C., & Meier, D. M. (2015). Solution to the Quantum Zermelo Navigation Problem. *Physical Review Letters*, 114(10), 100502.
- [44] Russell, B., & Stepney, S. (2015). Zermelo navigation in the quantum brachistochrone. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 48(11), 115303.
- [45] Kirillova, E., Hoch, T., & Spindler, K. (2008). Optimal control of a spin system acting on a single quantum bit. *WSEAS Transactions on Mathematics*, 7(12), pp. 687–697.
- [46] Boozer, A. D. (2012). Time-optimal synthesis of SU(2) transformations for a spin-1/2 system. *Physical Review A*, 85(1), 012317.
- [47] Billig, Y. (2013). Time-optimal decompositions in SU(2). *Quantum Information Processing*, 12(2), pp. 955–971.
- [48] Garon, A., Glaser, S. J., & Sugny, D. (2013). Time-optimal control of SU(2) quantum operations. *Physical Review A*, 88(4), 043422.
- [49] Romano, R. (2014). Geometric analysis of minimum-time trajectories for a two-level quantum system. *Physical Review A*, 90(6), 062302.
- [50] Albertini, F., & D'Alessandro, D. (2015). Minimum time optimal synthesis for two level quantum systems. *Journal of Mathematical Physics*, 56(1), 012106.
- [51] Wang, X., Allegra, M., Jacobs, K., Lloyd, S., Lupo, C., & Mohseni, M. (2015). Quantum brachistochrone curves as geodesics: Obtaining accurate minimum-time protocols for the control of quantum systems. *Physical Review Letters*, 114(17), 170501.
- [52] Geng, J., Wu, Y., Wang, X., Xu, K., Shi, F., Xie, Y., Rong, X. & Du, J. (2016). Experimental time-optimal universal control of spin qubits in solids. *Physical Review Letters*, 117(17), 170501
- [53] Hegerfeldt, G. C. (2013). Driving at the quantum speed limit: Optimal control of a two-level system. *Physical Review Letters*, 111(26), 260501.
- [54] Lapert, M., Zhang, Y., Braun, M., Glaser, S. J. & Sugny, D. (2010). Singular extremals for the time-optimal control of dissipative spin $\frac{1}{2}$ particles. *Physical Review Letters*, 104(8), 083001.
- [55] Zhang, Y., Lapert, M., Sugny, D., Braun, M., & Glaser, S. J. (2011). Time-optimal control of spin 1/2 particles in the presence of radiation damping and relaxation. *The Journal of Chemical Physics*, 134(5), 054103.
- [56] Avinadav, C., Fischer, R., London, P., & Gershoni, D. (2014). Time-optimal universal control of two-level systems under strong driving. *Physical Review B*, 89(24), 245311.
- [57] Robbins, H. M. (1967). A Generalized Legendre-Clebsch condition for the singular

- cases of optimal control. *IBM Journal of Research and Development*, 11(4), pp.361-372.
- [58] Wakamura, H., Kawakubo, R., & Koike, T. (2017). Noise suppression by quantum control before and after the noise. *Physical Review A*, 95(2), 022321.
- [59] Wakamura, H., Kawakubo, R., & Koike, T. (2017). State protection by quantum control before and after noise processes. *Physical Review A*, 96(2), 022325.
- [60] Wakamura, H., & Koike, T. (2020). A general formulation of time-optimal quantum control and optimality of singular protocols. *New Journal of Physics*, 22, 073010.
- [61] Nielsen, M. A., & Chuang, I. L. (2000). *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge: Cambridge University Press.
- [62] Hayashi, M. (2006). *Quantum Information: An Introduction*. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- [63] 石坂 ; 智, 小川 ; 朋宏, 河内 ; 亮周, 木村 ; 元, 林 ; 正人. (2012). 量子情報科学入門. 東京: 共立出版.
- [64] von Neumann, J. (1955). *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*. NJ; Princeton University Press.
- [65] Gorini, V., Kossakowski, A., and Sudarshan, E. C. G. (1976). Completely positive dynamical semigroups of N-level systems. *Journal of Mathematical Physics*, 17(5), pp. 821–825.
- [66] Ozawa, M. (1984). Quantum measuring processes of continuous observables. *Journal of Mathematical Physics*, 25(1), pp. 79–87.
- [67] Ozawa, M. (2004). Uncertainty relations for noise and disturbance in generalized quantum measurements. *Annals of Physics*, 311(2), pp. 350–416.
- [68] Kitaev, A. Y. (2002). *Classical and Quantum Computation*. RI: American Mathematical Society.
- [69] Stinespring, W. F. (1955). Positive functions on C^* -algebras. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 6(2), pp. 211–216.
- [70] Meyer, C. D. (2000). *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*. PA: Society for Industrial and Applied Mathematics Philadelphia.
- [71] Ruskai, M. B., Szarek, S., & Werner, E. (2002). An analysis of completely-positive trace-preserving maps on \mathcal{M}_2 . *Linear Algebra and its Applications*, 347(1-3), pp. 159–187.
- [72] Fujiwara, A., & Algoet, P. (1999). One-to-one parametrization of quantum channels. *Physical Review A*, 59(5), pp. 3290–3294.
- [73] Byrd, M. S., Bishop, C. A., & Ou, Y.-C. (2011). General open-system quantum evolution in terms of affine maps of the polarization vector. *Physical Review A*,

- 83(1), 012301.
- [74] Kimura, G. (2003). The Bloch vector for N -level systems. *Physics Letters A*, 314(5,6), pp. 339–349.
 - [75] Bertlmann, R. A. and Krammer, P. (2008). Bloch vectors for qudits. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 41(23), 235303.
 - [76] King, C., & Ruskai, M. B. (2001). Minimal entropy of states emerging from noisy quantum channels. *IEEE Transactions on Information Theory*, 47(1), pp. 192–209.
 - [77] Bruß, D., & Macchiabello, C. (1999). Optimal state estimation for d -dimensional quantum systems. *Physics Letters A*, 253(5,6), pp. 249–251.
 - [78] Vidal, G., & Tarrach, R. (1999). Robustness of entanglement. *Physical Review A*, 59(1), pp. 141–155.
 - [79] Shor, P. W. (1995). Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory. *Physical Review A*, 52(4), pp. R2493–R2496.
 - [80] Knill, E., & Laflamme, R. (1997). Theory of quantum error-correcting codes. *Physical Review A*, 55(2), pp. 900–911.
 - [81] Reimpell, M., & Werner, R. F. (2005). Iterative optimization of quantum Error correcting codes. *Physical Review Letters*, 94(8), 080501.
 - [82] Yamamoto, N., Hara, S., & Tsumura, K. (2005). Suboptimal quantum-error-correcting procedure based on semidefinite programming. *Physical Review A*, 71(2), 022322.
 - [83] Lidar, D. A., Chuang, I. L., & Whaley, K. B. (1998). Decoherence-free subspaces for quantum computation *Physical Review Letters*, 81(12), pp. 2594–2597.
 - [84] Viola, L., Knill, E., & Lloyd, S. (1999). Dynamical decoupling of open quantum systems. *Physical Review Letters*, 82(12), pp. 2417–2421.
 - [85] Temme, K., Bravyi, S., & Gambetta, J. M. Error mitigation for short-depth quantum circuits. *Physical Review Letters*, 119(18), 180509.
 - [86] Fuchs, C. A., & Peres, A. (1996). Quantum-state disturbance versus information gain: Uncertainty relations for quantum information. *Physical Review A*, 53(4), pp. 2038–2045.
 - [87] Banaszek, K. (2001). Fidelity balance in quantum operations. *Physical Review Letters*, 86(7), pp. 1366–1369.
 - [88] Buscemi, F., Hayashi, M., & Horodecki, M. (2008). Global information balance in quantum measurements. *Physical Review Letters*, 100(21), 210504.
 - [89] Cheong, Y. W., & Lee, S. W. (2012). Balance between information gain and reversibility in weak measurement. *Physical Review Letters*, 109(15), 150402.
 - [90] Albertini, F., & D’Alessandro, D. (2001). *Notions of controllability for quantum*

- mechanical systems*. Proceedings of the 40th IEEE conference on Decision and Control, pp. 1589–94.
- [91] Stoer, J., & Bulirsch, R. (2002). *Introduction to Numerical Analysis*. Berlin; Springer-Verlag.
- [92] Caneva, T., Murphy, M., Calarco, T., Fazio, R., Montangero, S., Giovannetti, V., & Santoro, G. E. (2009). Optimal control at the quantum speed limit. *Physical Review Letters*, 103(24), 240501.
- [93] Palao, J. P., & Kosloff, R. (2002). Quantum computing by an optimal control algorithm for unitary transformations. *Physical Review Letters*, 89(18), 188301.
- [94] Palao, J. P., & Kosloff, R. (2003). Optimal control theory for unitary transformations. *Physical Review A*, 68(6), 062308.
- [95] Khaneja, N., Reiss, T., Kehlet, C., Schulte-Herbrüggen, T., & Glaser, S. J. (2005). Optimal control of coupled spin dynamics: design of NMR pulse sequences by gradient ascent algorithms. *Journal of Magnetic Resonance*, 172(2), pp. 296–305.
- [96] Caneva, T., Calarco, T., & Montangero, S. (2011). *Physical Review A*, 84(2), 022326.
- [97] Boltyanski, V., Martini, H., & Soltan, V. (1999). *Geometric Methods and Optimization Problems*. Dordrecht; Kluwer Academic Publishers.
- [98] Pontryagin, L. S. (2000). 最適制御理論における最大値原理. 坂本實訳. 東京; 森北出版.
- [99] Barbero-Liñán, M., & Muñoz-Lecanda, M. C. (2009). Geometric Approach to Pontryagin’ s Maximum Principle, *Acta Applicandae Mathematicae*, 108, pp. 429–485.
- [100] Boyd, S., & Vandenberghe, L. (2004). *Convex Optimization*. Cambridge; Cambridge University Press.
- [101] Spindler, K. (2013). Optimal control on lie groups: Theory and applications *WSEAS Transactions on Mathematics*, 12(5), pp. 531–542.
- [102] Montgomery, R. (1992). Abnormal optimal controls and open problems in non-holonomic steering. *IFAC Proceedings Volumes*, 25(13), pp. 121–126.
- [103] Bliss, G. A. (1946). *Lectures on the Calculus of Variations*. Chicago; University of Chicago Press.
- [104] Chiribella, G. (2011). On Quantum Estimation, Quantum Cloning and Finite Quantum de Finetti Theorems. In W. van Dam, V. M. Kendon, and S. Severini (Eds.), *Theory of Quantum Computation, Communication, and Cryptography*, Lecture Notes in Computer Science (vol. 6519, pp. 9–25). Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag.

- [105] Gerry, C., & Knight, P. (2004). *Introductory Quantum Optics*. Cambridge: Cambridge University Press.
- [106] Bryson, A. E., & Ho, Y. C. (1975). *Applied Optimal Control - Optimization, Estimation and Control* DC; Hemisphere Publishing Corporation.