

(YITP-W-11-25)

基研研究会 物理と情報の階層構造 情報を接点とした諸階層の制御と創発

(Hierarchy in Physics through Information
—Its Control and Emergence—)

日程：2012年1月5日(木) - 7日(土)

場所：京都大学 基礎物理学研究所 湯川記念館 Panasonic 国際交流ホール

ホームページ：<http://www.th.phys.titech.ac.jp/shikano/yitp11/>

はじめに

本研究会は基研研究会「進化の力学への場の理論的アプローチ」から始まった研究会シリーズ「進化の力学」の25年目の区切りとして開催された。これまで終始世話人代表であった小嶋泉氏にはこの場を借りて感謝を申し上げます。また、京都大学基礎物理学研究所および数理解析研究所にも一連の研究会提案を採択し続けていただき、感謝を申し上げます。これらの断続的な支援がなければ、物理学の枠を超えた自然観を確立にするにふさわしい研究会は開催できなかったことであろう。今後、この研究会シリーズを契機に研究会の参加者一人一人が豊かな自然観をそれぞれに創出していくことを願っております。最後になりましたが、本研究会の研究会報告が出版が当初の予定より大幅に遅れてしまったことを世話人一同お詫び致します。

概要

自然界のすべての構造は、ミクロからマクロまで60桁のスケールにわたる階層を作って、自律的に生成・進化・崩壊を繰り返す動的存在である。これに対して、スケールの異なる階層ごとに異なる法則を想定し、それぞれの分野を独立に形成するやり方を探るのが普通であった。しかし自然界の情報を司る物理法則はスケールによって分断されるわけではなく、同じ法則や原理が形を変えて複数の階層を支配する。この階層を越えたミクロマクロ双方向の連続的な繋がりを「ミクロ・マクロ双対性」として了解し、複数階層に互って存在する普遍的な物理を議論する場を提供してきた。今年度の研究会では、物理現象の担う「情報」というスケールフリーな側面と役割に着目し、その制御と自律性との関連を広い視点から議論したい。もちろんすべてのスケールを一気に議論できるわけではなく、それぞれの専門分野からの視点とスケールの拡大という形が現実的と考えられる。

この目標が、多彩な話題の多岐に互る分野の単なる交流に終わることなく、分野を超えて広がる物理の普遍性を引き出すためには、理論と実験との有効な交流とそれを促進するような概念的、方法論的考察、それを可能にする数学的定式化と方法論の構築が不可欠である。特に、反復再現可能な法則性の発現が、それを支える階層的安定化諸領域の歴史的成立と相互規定的関係にあることに着目した法則と歴史という視点が重要になる。種々の「逆風」に晒され今年度が最後の機会となったが、以下のような研究会の議論・成果とそれによって鼓舞された新たなスピリットは、今後種々の場面で重要な役割を果たすに違いない。

研究会の成果および研究会 25 年間の総括

当研究会では、31 の講演と 12 のポスター発表が行われ、登録参加者は 86 名であった。議論されたテーマを大別すると以下ようになる：

1. 量子論定式化の基礎的・数学的再吟味：ボア相補性における実在性基準の数学的定式化 / 量子ゼノン効果の数学的扱い / 弱値・弱測定概念の検討と測定過程での増幅 / 測定の誤差と反作用 / 位相振幅と光子数の同時測定 / 量子反射における量子軌跡 / 3-qubit 純粋状態の LOCC 変換 / 「隠れた変数」と量子化，測定 / 量子 walk / 量子グラフ / インスタントン，非インスタントントンネル効果における半古典性と量子性
2. 量子論への統計学的方法論の拡張とその適用：大偏差原理に基づく量子状態推定と Born 統計公式の導出 / コヒーレント状態における擬分布関数 / 相互エントロピーと量子相関
3. 量子論の数学的基礎：有限型 Polish 群とその Lie 環構造 / 一般化されたスピノソソモデルの基底状態 / 量子場の紫外発散とくりこみの数学的扱い / イメージ処理と確率過程論 / White noise に依る群表現構成
4. (量子) 情報・熱力学・統計力学と関連する諸問題：量子アルゴリズム / 情報源符号化の統計力学的解釈 / Maxwell の魔とデータ圧縮 / フィードバック冷却と情報熱力学 / 孤立量子系におけるミクロカノニカル分布の適用条件 / 自己重力 N 体系の緩和現象 / 非線形輸送とエントロピー生成速度 / 非ガウス過程の揺らぎ
5. その他の基本的諸問題：異なる諸階層での準安定構造を貫く “magic ratio” / 複雑系ネットワークの圏論的対称性 / 河口幾何に基づく重力場のエネルギー運動量テンソルと場の共变的ハミルトン形式 / 3 項積代数とその応用 / 適応力学と量子類似動力学，意思決定の場合，生物における適応力学と量子類似動力学モデル / 法則性と歴史性 / 『進化の力学』

一見して無秩序とも見える多様なテーマの羅列に眩暈を覚える方もあるかも知れない。「業界」で通用する馴染みの語彙だけで以心伝心を狙って話を始めてみても、到底それでは問題の核心が伝わらない、そうした状況下、朝の 9 時半から夕方 6 時半までぶっ通しの過密スケジュールの中で、熱の籠った白熱の議論が終始繰り広げられたのは、その多様な外観にも関わらず、物理学、数学、数理諸科学、多くの諸分野を縦断する新しい問題構制の所在に、多くの参加者が気付いていることの証左に違いない。その重要な核心の一端は、既に [研究会の目的・趣旨] の項に提示済みなので繰り返さないが、「多様性」が重要なのは何も「生物学的多様性」に限るわけではない。「自然」それ自体の最重要な核心こそ「多様性と統一性」であり、新しい 21 世紀の科学の展開は、そこを出発点にしてこそ展望されるに違いない。その方向に向けて、当研究会がささやかな寄与をなし得たとすれば、多分それ以上望むべきものはないに違いない。

関連テーマ

1. 量子場理論：量子場の内部自由度と時空構造，ゲージ構造，非相対論的量子電気力学とその数学的構成，作用素論・作用素環論
2. 統計熱力学：平衡・非平衡統計力学と熱力学，非加法的統計

3. 量子論の数学的基礎と工学的応用：量子情報理論 = 量子通信 + 量子計算，量子論理・「量子集合論」，量子測定論
4. 確率と確率過程：古典・量子確率論，確率過程論，White-Noise Analysis，グラフ・ネットワーク解析
5. ミクロ・マクロ双対性とその方法論：推定理論，制御理論，学習理論

世話人

谷村 省吾（名古屋大学），筒井 泉（高エネルギー加速器研究機構），佐々木 隆（京都大学 基礎物理学研究所），細谷 暁夫（東京工業大学），早川 尚男（京都大学 基礎物理学研究所），森川 雅博（お茶の水女子大学），沙川 貴大（京都大学 基礎物理学研究所），鹿野 豊（東京工業大学，現：分子科学研究所），小嶋 泉（京都大学 数理解析研究所）

プログラム

敬称略，

1月5日(木)

- 9:25-9:30 開会と連絡事項
- 9:30-12:40 座長：鹿野 豊 (東京工業大学)
-
- 9:30-10:00 入山 聖史 (東京理科大学)
Shor の量子アルゴリズムと新しい探索量子アルゴリズムについて
- 10:00-10:40 谷村 省吾 (名古屋大学)
測定理論から見た超選択則
- 10:40-11:10 布田 徹 (北海道大学)
Some Mathematical Aspects of Quantum Zeno Effect
- 11:10-11:40 Coffee Break
- 11:40-12:10 田中 恵理子 (Palacky University)
Energy momentum of General relativity
- 12:10-12:40 大塚 隆巧 (お茶の水女子大学)
新しい場の共変的ハミルトン形式
- 12:30-14:10 Lunch
-
- 14:10-16:00 座長：早川 尚男 (京都大学基礎物理学研究所)
-
- 14:10-14:50 細谷 暁夫 (東京工業大学)
Maxwell's demon, data compression and Boltzmann distribution
- 14:50-15:20 寺西 功哲 (北海道大学)

一般化されたスピノソンモデルに於ける基底状態について

- 15:20-16:00 只木 孝太郎 (中央大学)
情報理論における情報源符号化の統計力学的解釈
- 16:00-16:30 Coffee Break
- 16:30-18:30 座長：細谷 暁夫 (東京工業大学)
-
- 16:30-17:00 市東 拓郎 (電気通信大学)
スピン 1 / 2 における擬分布関数を与える演算子と量子状態
- 17:00-17:30 古池 達彦 (慶応義塾大学)
弱い観測による増幅について
- 17:30-18:00 Agung Budiyo (RIKEN)
Hidden variable model for quantization and quantum measurement
- 18:00-18:30 岡村 和弥 (京都大学)
From Born rule to large deviations

1月6日(金)

- 9:30-12:30 座長：谷村 省吾 (名古屋大学)
-
- 9:30-10:00 坂下 達哉 (電気通信大学)
量子 i.i.d. 状態の仮説検定問題における数値計算手法
- 10:00-10:30 杉浦 祥 (東京大学)
量子純粋状態による統計力学の定式化と計算法
- 10:30-11:00 小松 信義 (金沢大学)
Collapse を伴う自己重力 N 体系の速度緩和の非単調性
- 11:00-11:30 Coffee Break
- 11:30-12:10 全 卓樹 (高知工科大学)
量子グラフとスケール異常
- 12:10-12:30 Poster Session 1 分紹介
- 12:30-14:00 Lunch
- 14:00-16:00 Poster Session
- 16:00-16:20 Coffee Break
- 16:20-18:30 座長：森川 雅博 (お茶の水女子大学)
-
- 16:20-17:20 小澤 正直 (名古屋大学)
ボアの実在性基準の代数的量子論における数学的再構成
- 17:00-17:30 廣島 文生 (九州大学)
Mathematical UV cutoff renormalization of a scalar quantum field model
- 17:30-18:00 大矢 雅則 (東京理科大学)
数理解析研究所での 20 年間の研究を振り返って

18:00-18:30 小嶋 泉 (京都大学)
自然における法則と歴史 – 『進化の力学』研究会 25 年目の一区切り

19:00- 懇親会 at カンフォーラ

Poster Session

渡辺 優 (東京大学)

推定理論を用いた量子測定の誤差と反作用の不確定性関係

高橋 公也 (九州工業大学)

インスタントン v.s. 非インスタントトンネル効果：その半古典的及び量子論的解釈

金澤 輝代士 (京都大学)

非ガウス過程の揺らぎのエネルギー論

西 和久 (前豊橋科学技術大学)

An informational aspect of special relativity in Hausdorff space

斉藤 辰徳 (東京理科大学)

Horodecki モデルの一般化について

鈴木 理 (日本大学)

Nonion 代数上の ternary analysis と quark 閉じ込め理論への応用

田島 裕康 (東京大学)

3-qubit 純粋状態の LOCC 変換

堀川 隼世, 和田 達明 (茨城大学)

量子反射における量子軌跡

森田 辰弥 (東京大学)

Aharonov らの時間対称な量子力学における物理量について

浅野 真誠 (東京理科大学)

Horodecki モデルの一般化について

斉藤 辰徳 (東京理科大学)

Quantum-like dynamics of decision-making

田中 芳治 (東京理科大学)

大腸菌のグルコース選好に対する適応力学と量子論的モデル

鹿野 豊 (東京工業大学 / Chapman University)

Survival probability in a one-dimensional quantum walk on a trapped lattice

1月7日(土)

9:30-12:30 座長：佐々木 隆 (京都大学基礎物理学研究所)

9:30-10:00 安藤 浩志 (京都大学)

有限型 Polish 群とその Lie 環について

10:00-10:30 春名 太一 (神戸大学)

Analysis of complex networks from the standpoint of the category theoretical duality

10:30-11:00 松岡 隆志 (諏訪東京理科大学)

Mutual entropy and quantum correlation

- 11:00-11:30 Coffee Break
- 11:30-12:00 鈴木 増雄 (東京理科大学)
非線形輸送現象におけるエントロピー生成速度最小の原理
- 12:00-12:30 飛田 武幸 (名古屋大学)
Stochastic area and image processing
- 12:30-14:00 Lunch
- 14:00-15:30 座長：筒井 泉 (高エネルギー加速器研究機構)
-
- 14:00-14:30 倉持 結 (東京大学)
直交位相振幅と光子数の同時測定過程の解析
- 14:30-15:00 永尾 敬一 (茨城大学)
Automatic Hermiticity
- 15:00-15:30 Si Si (愛知教育大学)
Representation of $SL_2(R)$ using a noise
- 15:30-16:00 Coffee Break
- 16:00-17:30 座長：小嶋 泉 (京都大学数理解析研究所)
-
- 16:00-16:30 内藤 健 (早稲田大学)
Quasi-stability: revealing the super-magic numbers common to
subatomic, biological, and cosmic systems
- 16:30-17:00 伊藤 創祐 (東京大学)
フィードバックによる冷却と有限時間の情報熱力学
- 17:00-17:30 池田 達彦 (東京大学)
孤立量子系でミクロカノニカル分布が適用出来るための十分条件とその数値的検証

On a New Quantum Algorithm for Searching

S.Iriyama and M.Ohya
Tokyo University of Science

Abstract

In this paper, we introduce the new quantum algorithm for searching which computational complexity is polynomial of input size. Using this algorithm, we can avoid the crucial points in Shor's quantum algorithm.

1 Search Problem

A search problem is to find x such that $f(x) = y$ for a given f and y . One of the special problems is to find an inverse function of f . Originally a search problem has been discussed by Levin[1, 2], and Solomonoff[3] described an algorithm of it. A quantum algorithm of search problem was proposed by Grover in 1996[5]. His algorithm contains an Oracle, a black box, and the computational complexity is a square root of the length of searching area.

When the above f is a discrete function, the relation between x and y are represented by a binary relation. More generally, instead of the above function f , the relation between x and y are represented by a binary relation R . If $x \in X$ and $y \in Y$ are related by R , then we denote this $R(x, y)$ or xRy . A search problem is defined by the following.

Problem 1 *For a given R and $y \in Y$, find $x \in X$ such that $R(x, y)$. Otherwise, reject.*

Without loss of generality for discrete cases, we take $X = Y = \{0, 1, \dots, 2^n - 1\}$. Let $M_{R, X, Y}$ be a Turing machine calculating $R(x, y)$ for $x \in X$ and $y \in Y$. It outputs 1 when $R(x, y)$, 0 otherwise. To solve the problem, one can construct a Turing machine M_R running as the following.

Step1 Set a counter $i = 0$.

Step2 If $i > 2^n - 1$, reject, else call $M_{R, X, Y}$ with inputs $x = i$ and a given y , then obtain the result.

Step3 If the result of Step 2 is 1, then outputs x .

Step4 If the result is 0, then go back to Step2 with the counter $i + 1$.

In the worst case, we must call $M_{R,X,Y}$ for all x to check $R(x, y)$. Let $T(M)$ be a computational complexity of a Turing machine M . The computational complexity of searching algorithm is the cardinal number of Y .

In the paper[8], we developed a new quantum algorithm for search problem, and showed that the computational complexity of it is polynomial of n . Moreover, we applied this quantum algorithm into prime factorization[9]. For the problem, it is well known that Shor's quantum algorithm is effective to solve[4]. However, in the paper[8] we pointed out that it is not clear to achieve the Shor reduction which can reduce the steps because of dust qubit problem and constructing unitary operator problem. Using our searching quantum algorithm, one can avoid these problems.

2 Quantum Search Algorithm

From this section, we use a discrete function f instead of general $R(x, y)$. Let n be a positive number, and f a function from $X = \{0, 1, \dots, 2^n - 1\}$ to $Y = \{0, 1\}$ where exist at least one $x \in \{0, 1, \dots, 2^n - 1\}$ holding $f(x) = 1$ or 0. We consider the following problem.

Problem 2 Find x such that $f(x) = 1$.

In classical algorithm, the computational complexity is 2^n at worst because the possibility of x is 2^n .

We propose a quantum algorithm to solve the problem in a polynomial time. First we start the following problem:

Problem 3 Is the 1st bit of x 0?

To solve this problem, we have to compute $f(x)$ for any x whose 1st bit is 0 denoted by a binary expression

$$x = \sum_{k=0}^{n-1} 2^k \varepsilon_k,$$

where $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_{n-1} \in \{0, 1\}$ and $\varepsilon_0 = 0$, denoted by $x = 0\varepsilon_1 \dots \varepsilon_k$. If the 1st bit is 0, then there exist at least one $x = 0\varepsilon_1 \dots \varepsilon_k$ such that $f(x) = 1$. If the

1st bit is not 0, then one considers two cases: the 1st bit is 1, or there does not exist any x such that $f(x) = 0$.

We go to the next problem with the result of the above problem:

Problem 4 *Is the 2nd bit 0?*

Using the result of the problem 3, we compute $f(x)$ for all x whose 1st bit are decided by the same way of problem 3, and the 2nd bit are 0, so that x are written by $00\varepsilon_2 \cdots \varepsilon_{n-1}$ or $10\varepsilon_2 \cdots \varepsilon_{n-1}$. After the computation, we know the 2nd bit.

In generally, we check the i -th bit by the same method as the above using the information of bits from 1st to $i - 1$ -th. We run the algorithm from 1st to n -th bit, and get one x holding $f(x) = 1$, or no. In the case that the result of the algorithm is $x = 1 \cdots 1$, we calculate $f(1 \cdots 1)$ again. If it becomes 1, then $x = 1 \cdots 1$ is a solution of search problem, else there does not exist x such that $f(x) = 1$.

Let m be a positive number, and we assume that m is written by a polynomial of n . Let $\mathcal{H} = (\mathbb{C}^2)^{\otimes n+m+1}$ be a Hilbert space. m qubits are used for the computation of f , so that the dust qubits are produced by the computation. We will show that this algorithm can be done in a polynomial time.

We construct the following algorithm M_1 , and let $|\psi_{in}^{(1)}\rangle = |0^n\rangle \otimes |0^m\rangle \otimes |0\rangle \in \mathcal{H}$ be an initial vector. Here (1) means that the quantum algorithm checks the 1st bit. The final qubit of $|\psi_{in}^{(1)}\rangle$ is for the result.

Step1: Apply Hadamard gates from 2nd qubit to n -th qubit.

$$\begin{aligned} I \otimes U_H^{\otimes n-1} \otimes I^{m+1} |\psi_{in}^{(1)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^{n-1}}} |0\rangle \otimes \left(\sum_{i=0}^{2^{n-1}-1} |e_i\rangle \right) \otimes |0^m\rangle \otimes |0\rangle \\ &= |\psi_1^{(1)}\rangle \end{aligned}$$

Step2: Apply the unitary gate U_f to compute f for the superposition made in Step1, and store the result in $n + m + 1$ -th qubit.

$$\begin{aligned} U_f |\psi_1^{(1)}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^{n-1}}} |0\rangle \otimes \left(\sum_{k=0}^{2^{n-1}-1} |e_k\rangle \otimes |z_k\rangle \otimes |f(0, e_k)\rangle \right) \\ &= |\psi_2^{(1)}\rangle \end{aligned}$$

where z_k is dust qubits depending on i .

Step3: Take a partial trace except of $n + m + 1$ -th qubit.

$$\begin{aligned} \text{tr}_{1, \dots, n+m} \rho &= (1-p) |0\rangle \langle 0| + p |1\rangle \langle 1| \\ \rho &= \left| \psi_2^{(1)} \right\rangle \left\langle \psi_2^{(1)} \right| \end{aligned}$$

where $p = \text{card} \{x | f(x) = 1\} / 2^{n-1}$.

Step4: If p is too small to observe, apply the Chaos Amplifier to check whether $n + m + 1$ -th qubit is 0 or 1. The detail was given by [6, 7].

Step5: If $p = 0$ in step 4, repeat this algorithm with an initial vector $\left| \phi_{in}^{(1)} \right\rangle = U_{NOT} \otimes I^{\otimes n-1+m+1} \left| \psi_{in}^{(1)} \right\rangle = |1, 0^{n-1}\rangle \otimes |0^m\rangle \otimes |0\rangle$.

After this algorithm, we know that the 1st bit denoted by x_1 is 0 (resp. 1) if the $n + m + 1$ -th qubit is 1 (resp. 0). We call this x_1 is the result and write as $M_1(0^n) = x_1$.

Next we repeat this algorithm with the 2nd vector $\left| \psi_{in}^{(2)} \right\rangle = |x_1, 0^{n-1}\rangle \otimes |0^m\rangle \otimes |0\rangle$ with a modified Step1 and Step5 as

Step1: Apply Hadamard gates from 3rd qubit to n -th qubit.

Step5: If we could not find that the qubit 1, repeat this algorithm with an initial vector $\left| \phi_{in,2}^{(2)} \right\rangle = I \otimes U_{NOT} \otimes I^{\otimes n-2+m+1} \left| \psi_{in}^{(2)} \right\rangle = |x_1, 1, 0^{n-2}\rangle \otimes |0^m\rangle \otimes |0\rangle$.

So forth we obtain the 2nd bit x_2 , and write as $M_2(x_1, 0^{n-1}) = M_2(M_1(0^n), 0^{n-1}) = x_2$.

In generally, we write the algorithm $M_i(x_1, x_2, \dots, x_{i-1}, 0^{n-i+1})$ for an initial vector $\left| \psi_{in}^{(i)} \right\rangle = |x_1, x_2, \dots, x_{i-1}, 0^{n-i+1}\rangle \otimes |0^m\rangle \otimes |0\rangle$ as the following:

Step1: Apply Hadamard gates from $i + 1$ -th to n -th qubits.

$$\begin{aligned} I^{\otimes i} \otimes U_H^{\otimes n-i} \otimes I^{m+1} \left| \psi_{in}^{(i)} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^{n-i}}} |x_1, \dots, x_{i-1}\rangle \otimes \left(\sum_{k=0}^{2^{n-i}-1} |e_k\rangle \right) \otimes |0^m\rangle \otimes |0\rangle \\ &= \left| \psi_1^{(i)} \right\rangle \end{aligned}$$

Step2: Apply the unitary gate to compute f for the superposition made in Step1, and store the result in $n + m + 1$ -th qubit.

$$\begin{aligned} U_f \left| \psi_1^{(i)} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^{n-i}}} |x_1, \dots, x_{i-1}\rangle \otimes \left(\sum_{k=0}^{2^{n-1}-1} |e_k\rangle \otimes |z_k\rangle \otimes |f(x_1, \dots, x_{i-1}, e_k)\rangle \right) \\ &= \left| \psi_2^{(i)} \right\rangle \end{aligned}$$

Step3: Take a partial trace except of $n + m + 1$ -th qubit.

$$\begin{aligned} \text{tr}_{1, \dots, n+m} \rho &= (1-p) |0\rangle \langle 0| + p |1\rangle \langle 1| \\ \rho &= \left| \psi_2^{(i)} \right\rangle \left\langle \psi_2^{(i)} \right| \end{aligned}$$

Step4: Apply the Chaos Amplifier to find that $n + m + 1$ -th qubit is 1.

Step5: If we did not find that the qubit is 1, repeat this algorithm with an initial vector $|\psi'_{in,i}\rangle = I^{\otimes i-1} \otimes U_{NOT} \otimes I^{\otimes n-i+m+1} |\psi_{in,i}\rangle$.

After this algorithm $M_i(x_1, x_2, \dots, x_{i-1}, 0^{n-i+1})$, we know the i -th bit such that $f(x) = 1$. Each $M_i, i \geq 2$ use the result of M_{i-1} as an initial vector.

3 Computational Complexity of the Quantum Search Algorithm

The computational complexity is the number of the total unitary gates and amplification channels in our search algorithm. In the above section, the quantum algorithm for searching is given by the products of unitary gates denoted by U_i below. Let $|\psi_{in}^{(i)}\rangle$ be an initial vector for the algorithm M_i as

$$\left| \psi_{in}^{(i)} \right\rangle = |x_1 \dots x_{i-1}, 0^{n-i}\rangle \otimes |0^m\rangle \otimes |0\rangle,$$

and it goes to the final vector

$$\begin{aligned} U_i \left| \psi_{in}^{(i)} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^{n-i}}} |x_1, \dots, x_{i-1}\rangle \otimes \left(\sum_{k=0}^{2^{n-1}-1} |e_k\rangle \otimes |z_k\rangle \otimes |f(x_1, \dots, x_{i-1}, e_k)\rangle \right) \\ &= \left| \psi_2^{(i)} \right\rangle \end{aligned}$$

where $f(x_1, \dots, x_{i-1}, e_k)$ is the result of the objective function for searching. The above unitary gates U_i for the algorithm M_i is defined by

$$U_i = U_f (U_H)^{\otimes n-i} \prod_{\{x_k | x_k=1\}} U_{NOT}(k)$$

where $U_{NOT}(k)$ is to apply a NOT gate for the k -th qubit only when the result of stage k is 1, ($k = 1, 2, \dots, i-1$).

The computational complexity T of the quantum algorithm for searching is given by the total number of unitary gates and quantum channels for the amplification. We obtain the following theorem.

Theorem 5 *We have*

$$T = \frac{13}{8}n^2 - \frac{9}{4}n + nT(U_f)$$

where $T(U_f)$ is a given complexity associated to the function f .

Proof. For the algorithm M_i , one should have the following gates: $i-1$ NOT gates, $n-i$ Hadamard gates and U_f , so that the computational complexity T_i for the algorithm M_i is given by

$$\begin{aligned} T_i &= n - i + i - 1 + T(U_f) \\ &= n - 1 + T(U_f) \end{aligned}$$

The total number of stages is n , then the computational complexity is

$$\sum_{i=1}^n T_i = n(n-1) + nT(U_f)$$

For the amplification process, the number of amplification channels needed for n qubits was shown in the paper[6, 7] as

$$\frac{5}{4}(n-1)$$

In the algorithm M_i , we have to apply $\frac{5}{4}(n-1)$ times amplification channels for $(n-i)$ qubits at worst. Then the number of total quantum channels is calculated as

$$\frac{1}{2}n \left(\frac{5}{4}(n-1-1) + 0 \right) = \frac{5}{8}n(n-2)$$

Therefore the computational complexity T becomes

$$\begin{aligned} T &= \sum_{i=1}^n T(U_i) + \frac{5}{8}n(n-2) \\ &= n(n-1) + nT(U_f) + \frac{5}{8}n(n-2) \\ &= \frac{13}{8}n^2 - \frac{9}{4}n + nT(U_f) \end{aligned}$$

■

References

- [1] L.A.Levin, Universal sequential search problems. Problems of Information Transmission, 9(3):265–266, 1973
- [2] L.A.Levin, Randomness Conservation Inequalities: Information and Independence in Mathematical Theories. Information and Control, 61:15-37, 1984.
- [3] R. J. Solomonoff, Optimum sequential search. Memorandum, Oxbridge Research, Cambridge, Mass., June 1984.
- [4] P.W.Shor, Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring, Proc. of 35th Annu. Symp. on Fou. of Comp. Sci., IEEE Press, Los Alamitos, CA, 1994
- [5] L.K.Grover, A fast quantum mechanical algorithm for database search, Proceedings, 28th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing, p. 212, 1996
- [6] M.Ohya and I.V.Volovich (2003) New quantum algorithm for studying NP-complete problems, Rep.Math.Phys.,52, No.1,25-33
- [7] M.Ohya and I.V.Volovich (2003) Quantum computing and chaotic amplifier, J.Opt.B, 5,No.6 639-642
- [8] S.Iriyama, M.Ohya, I.V.Volovich, On Quantum Algorithm for Binary Search and Its Computational Complexity, TUS preprint, 2012
- [9] K.Goto, S.Iriyama, M.Ohya, I.V.Volovich, On Quantum Algorithm of Prime Factoring Using Quantum Binary Search, TUS preprint, 2012

Some Mathematical Aspects of Quantum Zeno Effect

新井 朝雄 (北海道大学大学院理学研究院数学部門)

布田 徹 (北海道大学大学院理学院数学専攻)

概要

量子系において、観測を連続的に行うと系の状態が初期状態のまま凍結してしまう場合がある。本稿ではこの効果—量子ゼノン効果—の数学的側面について紹介する。まず、量子ゼノン効果の厳密な生起条件を提示し、量子ゼノン効果が起こらない場合についても例を挙げる。次に、量子ゼノン効果が起る場合の時間分割の個数に関する漸近挙動について述べる。最後に、連続的な観測によって、状態ベクトルを状態空間上の曲線に乗せて移動させることが出来ることをみる。

1 はじめに

量子系の状態は、状態空間と呼ばれる複素ヒルベルト空間 \mathcal{H} の 0 でない元で表され、物理量は状態空間上の自己共役作用素で表される。以下、 \mathcal{H} の内積を $\langle \cdot, \cdot \rangle$ で表し、内積から定まる自然なノルムを $\|\cdot\|$ で表すことにする。

任意の状態 $\Phi \in \mathcal{H} \setminus \{0\}$ に対して、部分空間 $\{\alpha\Phi \mid \alpha \in \mathbb{C}\}$ への射影演算子を P_Φ とする。いま、 P_Φ は物理量であると仮定しよう。 $\dim \mathcal{H} \geq 2$ ならば、

$$\sigma(P_\Phi) = \sigma_p(P_\Phi) = \{0, 1\}, \quad P_\Phi \Phi = \Phi$$

であるから、 P_Φ は、状態が Φ であるか否かを定める物理量であると解釈するのは自然である。状態 $\Psi \in \mathcal{H} \setminus \{0\}$ において P_Φ の観測値が 1 である確率は、ボルの確率規則とスペクトル定理により、次式で与えられる。

$$\frac{\|E_{P_\Phi}(\{1\})\Psi\|^2}{\|\Psi\|^2} = \frac{1}{\|\Psi\|^2} \int_{\{0,1\}} \lambda d\|E_{P_\Phi}(\{1\})\Psi\|^2 \quad (1.1)$$

$$= \frac{\|P_\Phi \Psi\|^2}{\|\Psi\|^2} \quad (1.2)$$

$$= \frac{|\langle \Phi, \Psi \rangle|^2}{\|\Phi\|^2 \|\Psi\|^2}. \quad (1.3)$$

よって, Ψ, Φ がともに単位ベクトルであるとする, 量子系が状態 Ψ であるとき, 状態が Φ であるか否かを決定する観測を行い, 観測後に状態が Φ に遷移する確率は, $|\langle \Phi, \Psi \rangle|^2$ で与えられることがわかる.

一方, 量子系の状態の時間発展は, $\hbar := \frac{h}{2\pi}$ (h はプランク定数) が 1 となる単位系を用いると, 途中で系に対する観測を行わない限り, 系のハミルトニアン H から定まる強連続 1 パラメータユニタリ群 $\{e^{-itH}\}_{t \in \mathbb{R}}$ によって記述される.

したがって, 量子系の初期状態が単位ベクトル Ψ で表されるとき, 時刻 t において状態が Ψ であるか否かを定める観測を行い, 状態が Ψ へ遷移する確率 (生き残り確率) は $|\langle \Psi, e^{-itH}\Psi \rangle|^2$ で与えられる. このような観測を繰り返し行うことを考える.

任意の時間 $t > 0$ に対して, Δ を区間 $[0, t]$ の任意の分割で,

$$\Delta : 0 = t_0 < t_1 < \cdots < t_{N-1} < t_N = t \quad (1.4)$$

であるものとし, $k = 1, \dots, N$ に対して, $\Delta_k := t_k - t_{k-1}$, $|\Delta| := \max_{1 \leq k \leq N} \Delta_k$ とおく. このとき,

$$P_\Delta(\Psi, t) := \prod_{k=1}^N |\langle \Psi, e^{-i\Delta_k H} \Psi \rangle|^2 \quad (1.5)$$

がどのような値になるかを考える. 上の議論により, $P_\Delta(\Psi, t)$ は, Δ の分点 (t_1, \dots, t_N) において状態が初期状態 Ψ であるか否かの観測を順に行い, いずれの観測でも状態が初期状態 Ψ に遷移する確率である.

$|\Delta|$ を無限小にすると $P_\Delta(\Psi, t)$ が 1 になる, つまり観測を間断なく行ってやると状態が初期状態のまま凍結される, というのが量子ゼノン効果である (B.Misra and E.C.G.Sudarshan [7]). 本稿では量子ゼノン効果の生起を次のように定義する.

定義 1.1

$$\lim_{|\Delta| \rightarrow 0} P_\Delta(\Psi, t) = 1 \quad (1.6)$$

のとき, 初期状態 Ψ に対する, 時間 t の量子ゼノン効果が起こるといふ.

量子ゼノン効果がどのような初期条件 Ψ に対して生起するのかを見極めたいが, ここでは, いくつかの制限のもとで $P_\Delta(\Psi, t) \rightarrow 1$ が実現する可能性があることを簡単に見ておこう. 分割 Δ を N 等分割であるとする,

$$P_\Delta(\Psi, t) = |\langle \Psi, e^{-itH/N} \Psi \rangle|^{2N}. \quad (1.7)$$

任意の $\Psi \in \cap_{n=1}^\infty D(H^n)$ に対して,

$$e^{-itH} = I - itH - \frac{t^2}{2}H^2 + O(t^3) \quad (t \rightarrow 0) \quad (1.8)$$

が成り立つことに注意すると, この Ψ に対して次式が成り立つ.

$$|\langle \Psi, e^{-itH} \Psi \rangle|^2 = 1 - (\Delta H)_\Psi^2 t^2 + O(t^4) \quad (t \rightarrow 0). \quad (1.9)$$

ただし,

$$(\Delta H)_\Psi := \|(H - \langle \Psi, H\Psi \rangle)\Psi\| = \sqrt{\|H\Psi\|^2 - \langle \Psi, H\Psi \rangle^2} \quad (1.10)$$

は状態 Ψ における H の不確定さである. このとき, 十分大きな N に対して,

$$P_\Delta(\Psi, t) \approx \left[1 - (\Delta H)_\Psi^2 \left(\frac{t}{N} \right)^2 \right]^N \approx e^{-(\Delta H)_\Psi^2 t^2 / N} \approx 1. \quad (1.11)$$

したがって, 連続的な観測によって状態が凍結されることがわかる.

しかし, 今の議論では (そして多くの量子ゼノン効果の説明では) 分割は等分割であり, また, 初期条件は $\Psi \in \bigcap_{n=1}^\infty D(H^n)$ であるなど, 強い制限が課されていた.

2 任意の分割に対する量子ゼノン効果

そこで, 量子ゼノン効果の生起に関する初期条件の制限をゆるめ, 分割に任意性を持たせることが望まれる.

定理 2.1 $\Psi \in D(H)$, $\|\Psi\| = 1$ とするとき,

$$\lim_{|\Delta| \rightarrow 0} P_\Delta(\Psi, t) = 1$$

が成り立つ.

この定理においては, 分割は任意であり, 生起条件も先に紹介した手法で得られる場合に比べて著しく改善されている.

また, 定理 2.1 の証明に際しては次の二つの補題を援用する.

補題 2.2

$$\lim_{|\Delta| \rightarrow 0} \sum_{k=1}^N \Delta_k^2 = 0. \quad (2.1)$$

補題 2.3 任意の $t \in \mathbb{R}$ と任意の単位ベクトル $\Psi \in D(H)$ に対して,

$$|\langle \Psi, e^{-itH}\Psi \rangle|^2 \geq 1 - t^2 \|H\Psi\|^2. \quad (2.2)$$

補題 2.2 は定理 2.1 における分割の任意性を, 補題 2.3 は量子ゼノン効果の生起についての初期条件が任意の単位ベクトル $\Psi \in D(H)$ でよいことを保証する.

さて, 定理 2.1 において, 仮定 $\Psi \in D(H)$ がない場合は必ずしも量子ゼノン効果が起こるわけではないことを次の例で示そう.

例 2.4 状態のヒルベルト空間が $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$, ハミルトニアンが $H = -\Delta_x/2m$ で与えられる量子系を考える. ただし, $m > 0$ であり, Δ_x は $L^2(\mathbb{R})$ 上の変数 x に関する一般化ラプラシアンであるとする. つまり, H は 1次元空間 \mathbb{R} の中を運動する質量 $m > 0$ の一つの量子力学的な自由粒子からなる量子系のハミルトニアンである.

さらに, $c > 0$ を定数とし, $\hat{\psi}_0$ を $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R})$ の L^2 -Fourier 変換とする.
 $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R})$ をその L^2 -Fourier 変換が

$$\hat{\psi}_0(k) = \sqrt{\frac{2c}{\pi}} \sqrt{\frac{|k|}{k^4 + c^2}}, \quad k \in \mathbb{R}. \quad (2.3)$$

で与えられているものとする.

このとき, 簡単な計算から $\|\psi_0\| = 1$ と $\psi_0 \notin D(H_0)$ がわかる. さらに, 任意の $\varepsilon > 0$ に対して, $c > -(m/t) \log \varepsilon$ とおくと,

$$\lim_{|\Delta| \rightarrow 0} \prod_{k=1}^N |\langle \psi_0, e^{-i\Delta_k H_0} \psi_0 \rangle|^2 < \varepsilon \quad (2.4)$$

であることもわかる.

したがって, この場合, 量子ゼノン効果は起こらない.

3 時間分割の個数に関する漸近挙動

次に, 量子ゼノン効果が起こる場合の時間分割の個数に関する漸近挙動について得られた結果を述べる. Δ が等分割であるとき, 生き残り確率 $P_\Delta(\Psi, t)$ が次の形に展開できると考えるのは自然であろう:

$$P_\Delta(\Psi, t) = 1 + c_1(\Psi, t) \frac{1}{N} + c_2(\Psi, t) \frac{1}{N^2} + \dots, \quad (N \rightarrow \infty). \quad (3.1)$$

ただし, $c_n(\Psi, t) \in \mathbb{R}$ ($n = 1, 2, \dots$) は N に依存しない定数であるとする.

このとき $c_n(\Psi, t) \in \mathbb{R}$ が具体的にどのような形になっているのかを考える.

定理 3.1 Δ が等分割であるとき, 単位ベクトル $\Psi \in D(H)$ に対して,

$$P_\Delta(\Psi, t) = \left| \left\langle \Psi, e^{-i\frac{t}{N} H} \Psi \right\rangle \right|^{2N} = 1 - t^2 (\Delta H)_\Psi^2 \frac{1}{N} + o\left(\frac{1}{N}\right), \quad (N \rightarrow \infty)$$

が成り立つ. ただし, $(\Delta H)_\Psi^2 = \|H\Psi\|^2 - |\langle \Psi, H\Psi \rangle|^2$ は Ψ におけるエネルギーの分散である.

定理 3.1 により, $c_1(\Psi, t) = -t^2 (\Delta H)_\Psi^2$ であることがわかった. 一般の $c_n(\Psi, t)$ については [2] を参照せよ.

4 状態空間における曲線上の量子ゼノン効果

量子ゼノン効果が連続観測によって状態ベクトルを一点に留めておく効果であるのに対して, 連続的な観測によって状態ベクトルを状態空間上の曲線に乗せて移動させることができることを示す.

ヒルベルト空間 \mathcal{H} 上の曲線が, \mathbb{R} 上の \mathcal{H} -値関数 $\Psi(\cdot)$ で与えられているとする. 量子系の初期状態が $\Psi(0)$ であるとき, (1.4) 式で与えられる時間間隔 $[0, t]$ の分割 Δ の分点 (t_1, \dots, t_N) において, 状態が $\Psi(t_k)$ ($k = 1, \dots, N$) であるか否かを決定する観測を順に行う.

このとき, 時刻 t_k ($k = 1, \dots, N$) における観測で, 状態が常に $\Psi(t_k)$ である確率は次式で与えられる.

$$P_\Delta(\Psi(\cdot), t) := \prod_{k=1}^N |\langle \Psi(t_k), e^{-i\Delta_k H} \Psi(t_{k-1}) \rangle|^2. \quad (4.1)$$

$\lim_{|\Delta| \rightarrow 0} P_\Delta(\Psi(\cdot), t) = 1$ がどのような条件の下で成立するかを述べたのが次の定理である.

定理 4.1 $\Psi(\cdot)$ を区間 $[0, t]$ 上の \mathcal{H} -値関数で, 任意の $\lambda \in [0, t]$ に対して, $\Psi(\lambda) \in D(H)$, $\|\Psi(\lambda)\| = 1$ であるものとする. さらに,

$$\xi := \sup_{0 \leq \lambda \leq t} \|H\Psi(\lambda)\| < \infty, \quad (4.2)$$

$$\eta := \sup_{\substack{\lambda, \nu \in [0, t] \\ \lambda \neq \nu}} \frac{\|\Psi(\lambda) - \Psi(\nu)\|}{|\lambda - \nu|} < \infty, \quad (4.3)$$

$$\lim_{|\Delta| \rightarrow 0} \sum_{k=1}^N \operatorname{Re} \langle \Psi(t_k) - \Psi(t_{k-1}), \Psi(t_{k-1}) \rangle = 0, \quad (4.4)$$

が満たされていると仮定する. このとき, 次の等式が成り立つ.

$$\lim_{|\Delta| \rightarrow 0} P_\Delta(\Psi(\cdot), t) = 1. \quad (4.5)$$

注意 4.2 定理 4.1 の仮定 (4.3) は, リプシッツ連続性

$$\|\Psi(\lambda) - \Psi(\nu)\| \leq \eta|\lambda - \nu|, \quad \forall \lambda, \nu \in [0, t]$$

を導く. 特に $\Psi(\cdot)$ は強連続であるから, 写像 $\Psi(\cdot) : [0, t] \rightarrow \mathcal{H}$ は \mathcal{H} 中の曲線を与える.

定理 4.1 の証明は, 定理 2.1 の証明と同様に補題 2.2, 2.3 を用い, スペクトル定理等を使って不等式で評価していく.

例 4.3 任意の $\lambda \in [0, t]$ に対して, $\Psi(\lambda) \equiv \Psi_0 \in D(H)$, $\|\Psi_0\| = 1$ とすると, $\Psi(\cdot)$ は定理 4.1 の仮定を全て満たすので, $\lim_{|\Delta| \rightarrow 0} P_\Delta(\Psi(\cdot), t) = 1$ である.

例 4.3 により, 定理 2.1 が定理 4.1 の特殊な場合であることがわかる. したがって, 定理 4.1 にいう $\lim_{|\Delta| \rightarrow 0} P_\Delta(\Psi(\cdot), t) = 1$ は, 量子ゼノン効果を含む, より一般的な効果であるといえることができる.

定理 4.1 を応用することで次の系 4.4 が得られる.

系 4.4 $\Psi(\cdot)$ を区間 $[0, t]$ 上の強微分可能な \mathcal{H} -値関数で, 任意の $\lambda \in [0, t]$ に対して, $\Psi(\lambda) \in D(H)$, $\|\Psi(\lambda)\| = 1$ であるものとする. さらに,

$$\xi := \sup_{0 \leq \lambda \leq t} \|H\Psi(\lambda)\| < \infty, \quad \eta := \sup_{0 \leq \lambda \leq t} \|\Psi'(\lambda)\| < \infty$$

であるとき, 次の等式が成り立つ.

$$\lim_{|\Delta| \rightarrow 0} P_{\Delta}(\Psi(\cdot), t) = 1.$$

系 4.4 の条件は定理 4.1 の条件よりも強いものであるが, この条件は具体的に与えられた曲線が $\lim_{|\Delta| \rightarrow 0} P_{\Delta}(\Psi(\cdot), t) = 1$ を導くかどうかを判定するのに便利である. 以下に系 4.4 の条件を満たす曲線の例を挙げよう.

例 4.5 A を \mathcal{H} 上の自己共役作用素とする.

$$\Psi_0 \in D(A) \cap \bigcap_{0 \leq \lambda \leq t} D(He^{-i\lambda A}), \quad (4.6)$$

$$\sup_{0 \leq \lambda \leq t} \|He^{-i\lambda A}\Psi_0\| < \infty \quad (4.7)$$

を満たす単位ベクトル Ψ_0 に対し, 区間 $[0, t]$ 上の \mathcal{H} -値関数 $\Psi(\cdot)$ を

$$\Psi(\lambda) := e^{-i\lambda A}\Psi_0, \quad 0 \leq \lambda \leq t \quad (4.8)$$

と定義すると, 系 4.4 の仮定が全て満たされる.

5 連続的な観測による任意の二つの状態間の遷移

命題 5.1 任意の単位ベクトル $\Psi, \Phi \in D(H)$ 間を, 系 4.4 の仮定を満たすような曲線 $\Psi(\cdot)$ で結ぶことができる. つまり, 系 4.4 の仮定を満たすある \mathcal{H} -値関数 $\Psi(\cdot) : [0, t] \rightarrow \mathcal{H}$ が存在し, $\Psi(0) = \Psi, \Psi(t) = \Phi$ が成り立つ.

したがって, 命題 5.1 の曲線 $\Psi(\cdot)$ に対して, $\lim_{|\Delta| \rightarrow 0} P_{\Delta}(\Psi(\cdot), t) = 1$ が成り立つ. 以上により, 次の解釈が可能な数学的内容が証明された:

任意の単位ベクトル $\Psi, \Phi \in D(H)$ に対して, Ψ と Φ を結ぶ曲線が存在して, この曲線の分割によって指定される一連の観測の極限によって, 確率 1 で状態 Ψ から状態 Φ への遷移が達成される.

例 5.2 状態のヒルベルト空間が $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, ハミルトニアンが \mathbb{C}^2 上のエルミート行列 H で与えられる量子系を考える.

$$|0\rangle := (1, 0), \quad |1\rangle := (0, 1) \in \mathbb{C}^2, \quad (5.1)$$

$$\Psi(t) := \left(\cos \frac{t}{2}\right) |0\rangle + \left(\sin \frac{t}{2}\right) |1\rangle, \quad t \in [0, \pi] \quad (5.2)$$

とおくと, \mathbb{C}^2 -値関数 $\Psi(\cdot) : [0, \pi] \rightarrow \mathbb{C}$ は系 4.4 の仮定を満たすので,

$$\lim_{|\Delta| \rightarrow 0} P_{\Delta}(\Psi(\cdot), \pi) = 1.$$

が成り立つ.

例 5.2 には次のように物理的な意味を付与することができる:
電子のスピンを考える. \mathbb{R}^3 において,

$$x_0 := (1, 0, 0), \quad y_0 := (0, 1, 0), \quad z_0 := (0, 0, 1)$$

とおく. 例 5.2 の $|0\rangle$ を電子が $+z_0$ 方向のスピンを持つ状態, $|1\rangle$ を電子が $-z_0$ 方向のスピンを持つ状態とする. 時刻 $t \in [0, \pi]$ の観測で状態が例 5.2 の $\Psi(t)$ であるか否かを確認する観測とは, 時刻 t において電子が $+\left((\cos t)z_0 + (\sin t)x_0\right)$ 方向のスピンを持つか $-\left((\cos t)z_0 + (\sin t)x_0\right)$ 方向のスピンを持つかを確認する観測である. このような一連の観測の極限で, 状態 $|0\rangle$ から状態 $|1\rangle$ への遷移が確率 1 で達成される.

参考文献

- [1] A. Arai and T. Fuda, Some Mathematical Aspects of Quantum Zeno Effect, *Lett. Math. Phys.* (2011), DOI 10.1007/s11005-011-0539-0, Online First.
- [2] A. Arai, Asymptotic Analysis of the Fourier Transform of a Probability Measure with Application to Quantum Zeno Effect, Hokkaido University Preprint Series in Mathematics, #1008, pp1-10, 2012.
- [3] O. Alter and Y. Yamamoto, Quantum Measurement of a Single System, John Wiley & Sons, Inc., New York, 2001.
- [4] D. Home and M. A. B. Whitaker, A Conceptual Analysis of Quantum Zeno; Paradox, Measurement, and Experiment, *Annals of Physics* **258**(1997), 237–285.
- [5] W. M. Itano, D. J. Heinzen, J. J. Bollinger, and D. J. Wineland, Quantum Zeno effect, *Phys. Rev. A* **41**(1990), 2295.
- [6] R. Joos, Decoherence Through Interaction with the Environment, Chapter 3, §3.3 in *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory* (Editors: D. Giulini, E. Joos, C. Kiefer, J. Kupsch, I.-O. Stamatescu and H. D. Zeh), Springer, Berlin, Heidelberg, 1996.
- [7] B. Misra and E. C. G. Sudarshan, The Zeno's paradox in quantum theory, *J. Math. Phys.* **18** (1977), 756–763.
- [8] J. von Neumann, Die Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik, Springer, Berlin, 1932. Reprint:1981.

Lagrange formulation of Einstein's General Relativity using Kawaguchi geometry

Erico Tanaka*

Mathematics Department, Palacky University,

Svobody 26, Olomouc, Czech Republic

Physics Department, Ochanomizu University,

2-1-1 Ootsuka Bunkyo Tokyo, Japan and

Advanced Research Institute for Science and Engineering,

Waseda University, 3-4-1 Ohkubo Shinjuku, Tokyo, Japan

Takayoshi Ootsuka[†] and Ryoko Yahagi[‡]

Physics Department, Ochanomizu University,

2-1-1 Ootsuka Bunkyo Tokyo, Japan

We construct the fibration free theory of general relativity in the extended configuration space using the properties of Kawaguchi geometry. The spacetime is understood as a immersed submanifold of the total space, and the geometrical structure is chosen as such that it will reproduce Einstein's general relativity when pulled back to a spacetime regarding the immersion. The theory in this formulation will gain extended general covariance, and internal and external symmetry can be treated on equal level. We show that the Nöether theorem expressed in this formulation gives an n -form energy momentum on the $(n + 1)$ -dimensional spacetime.

I. INTRODUCTION

Recently, a novel approach of Lagrangian formalism for field theory using Kawaguchi geometry was proposed [1]. Here, we will apply this formalism to Einstein's general rel-

*Electronic address: erico.tanaka01@upol.cz

†Electronic address: ootsuka@cosmos.phys.ocha.ac.jp

‡Electronic address: g1140626@edu.cc.ocha.ac.jp

ativity, and review this classical theory from the perspective of fibration independence. Kawaguchi geometry is a natural extension of Finsler geometry, which is a natural extension of Riemannian geometry [2–5]. In other words, Finsler geometry is a special case of Kawaguchi geometry where the dimension of parameter space is one, and first order derivative is considered. In the first section we give the basic definitions of Kawaguchi geometry and its notations and explain this perspective of fibration independence. Second section will be devoted to the Lagrangian formalism. Kawaguchi Lagrangian and Euler-Lagrange equations of general relativity are expressed. We give the Nöether theorem in terms of Kawaguchi geometry in section 3. Discussion and further problems are in the final section 4.

II. KAWAGUCHI GEOMETRY

Kawaguchi manifold is a set of differentiable manifold M , $\dim M = N + 1 = n + 1 + D$, with a Kawaguchi structure K . Usually the $(n + 1)$ dimension stands for the dimension of spacetime, while D expresses the dimension of fields. The Kawaguchi structure is a map that operates on $(n + 1)$ -multivector field to give a function over M , which could be regarded as a non-linear $(n + 1)$ -form on M . We choose a coordinate chart (V, Ψ) , $\Psi = (x^\mu)$, $\mu = 0, \dots, N$ on $V \subset M$, for local expressions. Before giving the definition of Kawaguchi structure, we define the term *non-linear forms* used in this paper. First we define a derivative d as the following:

Definition II.1. On Kawaguchi manifold, there is a derivative d that acts on either function over M or (non-)linear k -forms.

Let u be a vector field on M , and v a k -multivector field.

i) The operation of d on $f \in \mathfrak{F}(M)$ is defined by:

$$df(u) = u(f) \tag{II.1}$$

where $u(f)$ is the directional derivative of f with respect to u . Therefore, in this case it can be identified as an operation of an exterior derivative which we denote with bold face \mathbf{d} , and the derivative df can be regarded as a standard linear 1-form. We can create k -degree forms by using the wedge product between these 1-forms. In these cases, we

call them linear forms. Additionally, we create from these derivatives, non-linear forms, which are arithmetic compositions of the derivatives with certain rules. In this paper, we use two kinds of non-linear forms.

a) Product

Let α and β a k -form, and v a k -multivector field. Then define a new non-linear k -form by

$$(\alpha \cdot \beta)(v) = \alpha(v)\beta(v) \in \mathfrak{F}(M).$$

a) Division

Let α and β a k -form, and v a non-vanishing k -multivector field. Then define a new non-linear k -form by

$$(\alpha/\beta)(v) = \alpha(v)/\beta(v) \in \mathfrak{F}(M).$$

With these example of non-linear forms, we define the operation of d on (non-)linear k -form α by:

$$(d\alpha \wedge \beta)(v) = (d\alpha(v) \wedge \beta)(v) = (\mathbf{d}(\alpha(v)) \wedge \beta)(v). \quad (\text{II.2})$$

where β is a standard linear $k - 1$ -form. These operation are also non-linear, and we call them second order non-linear k forms.

Now we define the Kawaguchi structure using these non-linear forms.

Definition II.2. The second order Kawaguchi structure K of degree $(n+1)$ is a non-linear $(n+1)$ -form on M , written explicitly as

$$K = K(x^\mu, dx^{\mu_0\mu_1\cdots\mu_n}, d^2x^{\mu_0\mu_1\cdots\mu_n} \wedge dx^{\nu_1\cdots\nu_n}) \quad (\text{II.3})$$

and satisfies the following homogeneity condition,

$$\begin{aligned} & K(x^\mu, \lambda dx^{\mu_0\mu_1\cdots\mu_n}, \lambda^2 d^2x^{\mu_0\mu_1\cdots\mu_n} \wedge dx^{\nu_1\cdots\nu_n} + \lambda^{\nu_1\cdots\nu_n} dx^{\mu_0\mu_1\cdots\mu_n}) \\ &= \lambda K(x^\mu, dx^{\mu_0\mu_1\cdots\mu_n}, d^2x^{\mu_0\mu_1\cdots\mu_n} \wedge dx^{\nu_1\cdots\nu_n}). \end{aligned} \quad (\text{II.4})$$

λ is an arbitrary positive number, and $\lambda^{\nu_1\cdots\nu_n}$ are arbitrary numbers anti-symmetric with ν_1, \cdots, ν_n . The indices $\mu, \mu_0, \cdots, \mu_n, \nu_1, \cdots, \nu_n$ all run from 0 to N .

We have used the $(n+1)$ -form $dx^{\mu_0 \cdots \mu_n} := dx^{\mu_0} \wedge \cdots \wedge dx^{\mu_n}$ and second order non-linear $(n+1)$ -form $d^2x^{\mu_0 \cdots \mu_n} \wedge dx^{\nu_1 \cdots \nu_n} := d(dx^{\mu_0} \wedge \cdots \wedge dx^{\mu_n}) \wedge (dx^{\nu_1} \wedge \cdots \wedge dx^{\nu_n})$ to describe first order differential and second order differentials. These objects both act on $(n+1)$ -multivector field v , and returns a function on $V \subset M$. By the previous definition, the operation of the second order term on v becomes,

$$\begin{aligned} (d^2x^{\mu_0 \cdots \mu_n} \wedge dx^{\nu_1 \cdots \nu_n})(v) &= (d(dx^{\mu_0 \cdots \mu_n}(v)) \wedge dx^{\nu_1 \cdots \nu_n})(v) \\ &= \left(\frac{\partial v^{\mu_0 \cdots \mu_n}}{\partial x^{\nu_0}} dx^{\nu_0} \wedge dx^{\nu_1 \cdots \nu_n} \right)(v) = \frac{\partial v^{\mu_0 \cdots \mu_n}}{\partial x^{\nu_0}} v^{\nu_0 \cdots \nu_n} \end{aligned} \quad (\text{II.5})$$

Though somewhat confusing, this is a convenient notation for several reasons. First, it is related to the standard linear forms. Second, it is related to the notation of infinitesimals by Cartan. Third, the expression hints that they are derivatives without specific parameterisation.

The most important properties of this geometry is the following. Let P be a $(n+1)$ -dimensional oriented manifold and $\sigma : P \rightarrow M$ an immersion. Then Kawaguchi structure measures a geometric $(n+1)$ -area for a $(n+1)$ -dimensional submanifold $S = \sigma(P)$ in M by,

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[S] &= \int_S K(x^\mu, dx^{\mu_0 \cdots \mu_n}, d^2x^{\mu_0 \cdots \mu_n} \wedge dx^{\nu_1 \cdots \nu_n}) = \int_P \sigma^* K(x^\mu, dx^{\mu_0 \cdots \mu_n}, d^2x^{\mu_0 \cdots \mu_n} \wedge dx^{\nu_1 \cdots \nu_n}) \\ &= \int_P K\left(\tilde{x}^\mu, \frac{\partial \tilde{x}^{\mu_0}}{\partial s^{i_0}} \cdots \frac{\partial \tilde{x}^{\mu_n}}{\partial s^{i_n}} ds^{i_0 \cdots i_n}, \frac{\partial}{\partial s^{j_0}} \left(\frac{\partial \tilde{x}^{\mu_0}}{\partial s^{i_0}} \cdots \frac{\partial \tilde{x}^{\mu_n}}{\partial s^{i_n}} \right) \frac{\partial \tilde{x}^{\nu_1}}{\partial s^{j_1}} \cdots \frac{\partial \tilde{x}^{\nu_n}}{\partial s^{j_n}} ds^{i_0 \cdots i_n} \cdot ds^{j_0 \cdots j_n}\right) \\ &= \int_P \tilde{K}\left(\tilde{x}^\mu, \frac{\partial \tilde{x}^{\mu_0}}{\partial s^{i_0}} \cdots \frac{\partial \tilde{x}^{\mu_n}}{\partial s^{i_n}}, \frac{\partial}{\partial s^{j_0}} \left(\frac{\partial \tilde{x}^{\mu_0}}{\partial s^{i_0}} \cdots \frac{\partial \tilde{x}^{\mu_n}}{\partial s^{i_n}} \right) \frac{\partial \tilde{x}^{\nu_1}}{\partial s^{j_1}} \cdots \frac{\partial \tilde{x}^{\nu_n}}{\partial s^{j_n}}\right) ds^{0 \cdots n}, \end{aligned} \quad (\text{II.6})$$

with $\tilde{x}^\mu := x^\mu \circ \sigma$. We have used the definition of the pull back of $d^2x^{\mu_0 \mu_1 \cdots \mu_n} \wedge dx^{\nu_1 \cdots \nu_n}$,

$$\sigma^*(d^2x^{\mu_0 \cdots \mu_n} \wedge dx^{\nu_1 \cdots \nu_n}) = d\sigma^*(dx^{\mu_0 \cdots \mu_n}) \wedge \sigma^* dx^{\nu_1 \cdots \nu_n}. \quad (\text{II.7})$$

$\tilde{K} ds^{0 \cdots n}$ is a standard linear form on P , therefore its integration is well defined. Denote another immersion, $\tilde{\sigma} : P \rightarrow M$, then due to the homogeneity condition (II.4), this area is invariant. This is the meaning of *geometric area*. From the standard context of fibre bundle, the submanifold P corresponds to the base space or the parameter space, and the M to the total bundle. However, while fibre bundle structure requires a surjective submersion from M to P , σ is a immersion from P to M . It is possible to choose a σ such that gives a fibre bundle structure, but not necessary. Furthermore, now the

integration of such non-linear forms are provided, we can choose a complete different $(n + 1)$ -dimensional oriented submanifold P' , and a immersion $\sigma' : P' \rightarrow M$. We call this choosing of the parameter space and its mapping to M , a *gauge fixing*. Once the gauge is fixed, we can always return to the standard expression by the pullback to the chosen base space. However, we rather take the advantage of the expression before fixing the gauge, and consider the theory on the extended configuration space M with Kawaguchi structure. Then, the theory constructed would be automatically independent to the choice of gauge. Since no fibration is required, we call this a fibration free perspective. We emphasise that changing the gauge is not a mere coordinate transformation on the base space, since it also concerns changing the global topology of the submanifold.

Regarding the geometric properties of the action (II.6), it is natural to take the Kawaguchi structure as *Lagrangian*, and further on we use the term Lagrangian in this sense. For first order finite dimensional mechanics, it was shown that every conventional Lagrangian of mechanics can be rewritten by the Finsler structure [6]. Here for the generalisation to second order field theory, the relation will be,

$$\begin{aligned} & K(x^\mu, dx^{\mu_0\mu_1\cdots\mu_n}, d^2x^{\mu_0\mu_1\cdots\mu_n} \wedge dx^{\nu_1\cdots\nu_n}) \\ &= \mathcal{L}\left(x^\mu, \frac{dx^{\mu_0\mu_1\cdots\mu_n}}{dx^{0\cdots n}}, \frac{(d^2x^{\mu_0\mu_1\cdots\mu_n} \wedge dx^{\nu_1\cdots\nu_n}) \cdot dx^{0\cdots n} - dx^{\mu_0\mu_1\cdots\mu_n} \cdot (d^2x^{0\cdots n} \wedge dx^{\nu_1\cdots\nu_n})}{(dx^{0\cdots n})^3}\right) dx^{0\cdots n}, \\ \sigma^* K(x^\mu, dx^{\mu_0\mu_1\cdots\mu_n}, d^2x^{\mu_0\mu_1\cdots\mu_n} \wedge dx^{\nu_1\cdots\nu_n}) &= \tilde{\mathcal{L}}\left(s^i, \varphi^\alpha, \frac{\partial\varphi^\alpha}{\partial s^i}, \frac{\partial^2\varphi^\alpha}{\partial s^i\partial s^j}\right) ds^{0\cdots n} \end{aligned} \quad (\text{II.8})$$

The conventional Lagrangian $\tilde{\mathcal{L}}$ is a function on the spacetime, and here we denoted the local coordinates of spacetime (s^0, \cdots, s^n) , and $(\varphi^1, \cdots, \varphi^D)$ are the field variables, which are functions of spacetime. The expression $dx^{0\cdots n}$ is the canonical volume form on \mathbb{R}^{n+1} , which is now naturally identified with a scalar.

III. LAGRANGE FORMULATION

Let (M, K) be a Kawaguchi manifold with $\dim M = n + 1 + D$, and K the non-linear $(n + 1)$ -form Kawaguchi structure. For comparison to the conventional Lagrangian formulation, we choose a immersion $\sigma : P \rightarrow M$, where P is a $(n + 1)$ -dimensional immersed submanifold in M . Consider the variation of the action by taking the Lie

derivative, for arbitrary vector field u on M .

$$\delta_u \mathcal{A}[S] = \int_S L_u K(x^\mu, dx^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n}, d^2 x^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n} \wedge dx^{\nu_1 \dots \nu_n}). \quad (\text{III.1})$$

The Lie derivative is defined by,

$$\begin{aligned} L_u K &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\psi_t^* K - K}{t} \\ (L_u K)(v)(p) &= \lim_{t \rightarrow 0} \frac{(\psi_t^* K) - K}{t}(v)(p) \end{aligned} \quad (\text{III.2})$$

as in the case of a linear form. ψ_t is the one-parameter group of transformations associated to u , with $t \in \mathbb{R}$. However, due to the non-linear property of K , the algebraic definition of Lie derivative is not valid. We obtain the formula,

$$\begin{aligned} L_u K &= u^\mu \frac{\partial K}{\partial x^\mu} + \frac{1}{n!} du^{\mu_0} \wedge dx^{\mu_1 \dots \mu_n} \frac{\partial K}{\partial dx^{\mu_0 \dots \mu_n}} \\ &+ \left(\frac{1}{(n!)^2} (d(du^{\mu_0} \wedge dx^{\mu_1 \dots \mu_n}) \wedge dx^{\nu_1 \dots \nu_n}) \right. \\ &\left. + \frac{1}{(n-1)!(n+1)!} (d^2 x^{\mu_0 \dots \mu_n} \wedge (du^{\nu_1} \wedge dx^{\nu_2 \dots \nu_n})) \right) \frac{\partial K}{\partial d^2 x^{\mu_0 \dots \mu_n} \wedge dx^{\nu_1 \dots \nu_n}} \end{aligned} \quad (\text{III.3})$$

This could be divided into two parts as

$$\begin{aligned} L_u K &= u^\mu \left[\frac{\partial K}{\partial x^\mu} - \frac{1}{n!} d \left(\frac{\partial K}{\partial dx^{\mu \mu_1 \dots \mu_n}} \right) \wedge dx^{\mu_1 \dots \mu_n} \right. \\ &+ \frac{1}{(n!)^2} d \left(d \left(\frac{\partial K}{\partial d^2 x^{\mu \mu_1 \dots \mu_n} \wedge dx^{\nu_1 \dots \nu_n}} \right) \wedge dx^{\nu_1 \dots \nu_n} \right) \wedge dx^{\mu_1 \dots \mu_n} \\ &\left. + \frac{1}{(n-1)!(n+1)!} d \left(\frac{\partial K}{\partial d^2 x^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n} \wedge dx^{\mu \nu_2 \dots \nu_n}} \right) \wedge d^2 x^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n} \wedge dx^{\nu_2 \dots \nu_n} \right] \\ &+ d \left(u^{\mu_0} \frac{\partial K}{\partial dx^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n}} \right) \wedge dx^{\mu_1 \dots \mu_n} \\ &+ \frac{1}{(n!)^2} \left\{ d \left(du^{\mu_0} \wedge dx^{\mu_1 \dots \mu_n} \cdot \frac{\partial K}{\partial d^2 x^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n} \wedge dx^{\nu_1 \dots \nu_n}} \right) \wedge dx^{\nu_1 \dots \nu_n} \right. \\ &\left. - d \left(u^{\mu_0} d \left(\frac{\partial K}{\partial d^2 x^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n} \wedge dx^{\nu_1 \dots \nu_n}} \right) \wedge dx^{\nu_1 \dots \nu_n} \right) \wedge dx^{\mu_1 \dots \mu_n} \right\} \\ &+ \frac{1}{(n-1)!(n+1)!} \left\{ d \left(dx^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n} \cdot \frac{\partial K}{\partial d^2 x^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n} \wedge dx^{\nu_1 \dots \nu_n}} \right) \wedge (du^{\nu_1} \wedge dx^{\nu_2 \dots \nu_n}) \right. \\ &\left. - d \left(\frac{\partial K}{\partial d^2 x^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n} \wedge dx^{\nu_1 \dots \nu_n}} \right) \wedge d(u^{\nu_1} dx^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n}) \wedge dx^{\nu_2 \dots \nu_n} \right\} \end{aligned} \quad (\text{III.4})$$

The first part proportional to u^μ becomes the Euler-Lagrange equation. The rest gives the Nöether current when pulled back to the base space P . Due to the homogeneity

condition, the Euler-Lagrange equations are not independent [7]. The term of the form $d\alpha \wedge d\beta \wedge \gamma$ in (III.4) where α and β is a (non-)linear $(n+1)$ -form and γ a linear n -form express an operation to a $(n+1)$ -multi vector field $v \in \mathfrak{X}(M)$ by

$$(d\alpha \wedge d\beta \wedge \gamma)(v) = (d(\alpha(v)) \wedge d(\beta(v)) \wedge \gamma)(v) \in \mathfrak{F}(M). \quad (\text{III.5})$$

Now we will consider the example of general relativity. To obtain the Kawaguchi structure by (II.8), we use the Einstein Hilbert Lagrangian of the 4-dimensional spacetime. The Kawaguchi manifold becomes 14-dimensional, and we choose a chart which is adapted to the gauge; i.e. $(V, \psi), \psi = (x^0, x^1, x^2, x^3, g^{00}, g^{01}, g^{11}, \dots, g^{33})$. It should be noted that the symbol $g^{\mu\nu}$ only means a coordinate function, and is not necessarily a Riemannian metric. In this chart the Lagrangian becomes,

$$\begin{aligned} K &= \sqrt{-g} \frac{\varepsilon_{mp_1 \dots p_3} \varepsilon_{nq_1 \dots q_3}}{(3!)^2 dx^{0123}} \left[A_{kl}^{mn} \frac{(d^2 x^{(kl)p_1 \dots p_3} \wedge dx^{q_1 \dots q_3}) \cdot dx^{0123} - dx^{(kl)p_1 \dots p_3} \cdot (d^2 x^{0123} \wedge dx^{q_1 \dots q_3})}{dx^{0123}} \right. \\ &\quad \left. + B_{ijkl}^{mn} dx^{(ij)p_1 \dots p_3} \cdot dx^{(kl)q_1 \dots q_3} \right], \\ A_{kl}^{mn} &= g_{kl} g^{mn} - \delta_{(k}^m \delta_{l)}^n, \\ B_{ijkl}^{mn} &= \frac{1}{4} (-g_{ij} g_{kl} g^{mn} - 5g_{k(i} g_{j)l} g^{mn} + 4g_{kl} \delta_{(i}^m \delta_{j)}^n + 2g_{k(j} \delta_{i)}^m \delta_l^n), \end{aligned} \quad (\text{III.6})$$

where the Latin indices runs from 0 to 3. It could be checked that this Lagrangian gives the standard Einstein-Hilbert Lagrangian $\sqrt{-g}R$ with R being the scalar curvature, when pulled back to the parameter space. The Euler-Lagrange equation obtained from this Lagrangian becomes,

$$\begin{aligned} \mathcal{E}\mathcal{L}_{(ij)}(K) &= -\frac{1}{2} g_{ij} K \\ &\quad + \sqrt{-g} \frac{\varepsilon_{mp_1 \dots p_3} \varepsilon_{nq_1 \dots q_3}}{(3!)^2 dx^{0123}} \left[C_{ijkl}^{mn} d^2 x^{(kl)q_1 \dots q_3} \wedge dx^{p_1 \dots p_3} \right. \\ &\quad + D_{abkl ij}^{mn} dx^{(ab)p_1 \dots p_3} \cdot dx^{(kl)q_1 \dots q_3} \\ &\quad + E_{ijkl}^{mn} \frac{dx^{(kl)q_1 \dots q_3} \cdot (d^2 x^{0123} \wedge dx^{p_1 \dots p_3})}{dx^{0123}} \\ &\quad + 2A_{ij}^{mn} \frac{d^2 x^{0123} \wedge dx^{p_1 \dots p_3} \cdot d^2 x^{0123} \wedge dx^{q_1 \dots q_3}}{(dx^{0123})^2} \\ &\quad \left. - \frac{1}{dx^{0123}} A_{ij}^{mn} d(d^2 x^{0123} \wedge dx^{p_1 \dots p_3}) \wedge dx^{q_1 \dots q_3} \right] = 0, \end{aligned} \quad (\text{III.7})$$

with

$$\begin{aligned}
C_{ijkl}^{mn} &:= \frac{1}{2}g_{k(i}g_{j)l}g^{mn} - g_{k(j}\delta_i^m\delta_l^n + \frac{1}{2}g_{kl}\delta_i^m\delta_j^n \\
D_{abklij}^{mn} &:= -\frac{3}{4}g_{k(a}g_{b)l}\delta_{(i}^m\delta_{j)}^n + \frac{1}{2}g_{k(i}g_{j)l}\delta_{(a}^m\delta_{b)}^n - \frac{1}{2}g_{k(i}g_{j)(b}\delta_a^m\delta_l^n + g_{k(a}g_{b)(j}\delta_i^m\delta_l^n \\
&\quad + \frac{1}{2}g_{ab}g_{k(j}\delta_i^m\delta_l^n - \frac{1}{2}g_{k(i}g_{j)(a}g_{b)l}g^{mn} - \frac{1}{4}g_{ab}g_{k(i}g_{j)l}g^{mn} \\
E_{ijkl}^{mn} &= \frac{1}{2}g_{ij}g_{kl}g^{mn} + \frac{1}{2}g_{k(i}g_{j)l}g^{mn} - g_{ij}\delta_{(k}^m\delta_{l)}^n + g_{k(j}\delta_i^m\delta_l^n - g_{kl}\delta_{(i}^m\delta_{j)}^n. \tag{III.8}
\end{aligned}$$

We have used the notation such as $dg^{ij} \wedge dx^{p_1 \cdots p_3} = dx^{(ij)} \wedge dx^{p_1 \cdots p_3} = dx^{(ij)p_1 \cdots p_3}$. When pulled back to the parameter space, this equation gives the standard vacuum Einstein equation,

$$\sigma^* \mathcal{E}\mathcal{L}_{(ij)}(K) = \sqrt{-g} \left[-\frac{1}{2}g_{ij}R + R_{ij} \right] dx^{0123} = 0 \tag{III.9}$$

Where R and R_{ij} is the scalar curvature and Ricci tensor.

IV. NÖETHER THEOREM

The Nöether's theorem expressed in the fibration free perspective is very simple. Consider the equation (III.4), and supposing there is a symmetry which is expressed by a vector field ξ , then the Nöether's theorem will be stated as,

Theorem IV.1. *Nöether's theorem*

Let (M, K) be a Kawaguchi manifold, and K a Lagrangian which is a $(n+1)$ -dimensional non-linear form. Suppose the Lagrangian has a symmetry $\xi \in \mathfrak{X}(M)$. Then there exists a conserved current J on any $(n+1)$ -dimensional immersed submanifold $P \subset M$, which is a linear n -form.

Proof. By equation (III.4), the Lie derivative of K can be divided into Euler-Lagrange term and the rest.

$$\begin{aligned}
L_\xi K &= \xi^\mu \mathcal{E}\mathcal{L}_\mu(K) + dJ(K), \\
dJ(K) &:= d\alpha_1 \wedge \beta_1 + d\alpha_2 \wedge \beta_1 + d\alpha_3 \wedge \beta_1 + d\alpha_4 \wedge \beta_2 + d\alpha_5 \wedge d\alpha_6 \wedge \gamma, \tag{IV.1}
\end{aligned}$$

where $\alpha_1, \dots, \alpha_6$ are non-linear $(n + 1)$ -forms, and β a linear n -form, and γ a linear $(n - 1)$ -form, with

$$\begin{aligned}
\alpha_1 &= \xi^{\mu_0} \frac{\partial K}{\partial d x^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n}}, & \beta_1 &= d x^{\mu_1 \dots \mu_n} \\
\alpha_2 &= \frac{1}{(n!)^2} d \xi^{\mu_0} \wedge d x^{\nu_1 \dots \nu_n} \cdot \frac{\partial K}{\partial d^2 x^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n} \wedge d x^{\nu_1 \dots \nu_n}}, \\
\alpha_3 &= -\frac{1}{(n!)^2} \xi^{\mu_0} d \left(\frac{\partial K}{\partial d^2 x^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n} \wedge d x^{\nu_1 \dots \nu_n}} \right) \wedge d x^{\nu_1 \dots \nu_n} \\
\alpha_4 &= \frac{1}{(n-1)!(n+1)!} d x^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n} \cdot \frac{\partial K}{\partial d^2 x^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n} \wedge d x^{\nu_1 \dots \nu_n}}, & \beta_2 &= d \xi^{\nu_1} \wedge d x^{\nu_2 \dots \nu_n} \\
\alpha_5 &= -\frac{1}{(n-1)!(n+1)!} \frac{\partial K}{\partial d^2 x^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n} \wedge d x^{\nu_1 \dots \nu_n}}, & \alpha_6 &= \xi^{\nu_1} d x^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n}, & \gamma &= d x^{\nu_2 \dots \nu_n}
\end{aligned} \tag{IV.2}$$

The d in the left hand side of the formula (IV.1) is a mere symbol, since there is no exterior derivative working in the Kawaguchi space. However the terms in the form $d\alpha \wedge \beta$ or $d\alpha_5 \wedge d\alpha_6 \wedge \gamma$ becomes an exact form when pulled back to P . The proof is given in the appendix. The pulled back conservation law will be given by,

$$\begin{aligned}
\sigma^* dJ(K) &= \mathbf{d}\tilde{J}(\tilde{\mathcal{L}}) = 0, \\
\tilde{J}(\tilde{\mathcal{L}}) &= \tilde{\alpha}_1 \tilde{\beta}_1 + \tilde{\alpha}_2 \tilde{\beta}_1 + \tilde{\alpha}_3 \tilde{\beta}_1 + \tilde{\alpha}_4 \tilde{\beta}_2 + \tilde{\alpha}_5 \mathbf{d}\tilde{\alpha}_6 \wedge \tilde{\gamma},
\end{aligned} \tag{IV.3}$$

with the tilde representing the pull back to P , and bold \mathbf{d} the standard exterior derivative. Therefore, for a symmetry $L_\xi K = 0$, there exists a closed linear n -form $\tilde{J}(\tilde{\mathcal{L}})$ on P which satisfies the conservation law, under on-shell condition. \square

This is a fibration free notion of Nöether current valid for any $(n + 1)$ -dimensional spacetime which is a immersed submanifold of M . By the homogeneity condition of K , $\alpha_1, \dots, \alpha_4$ becomes 0th order homogeneity, and α_5, α_6 becomes -1 and $+1$ order homogeneity function, which becomes a power of the volume form ω of P , when pulled back to P . Explicit expression of $\tilde{J}(\tilde{\mathcal{L}})$ will be

$$\begin{aligned}
\tilde{J}(\tilde{\mathcal{L}}) &= \left(\frac{\partial \tilde{x}^{\mu_1}}{\partial s^{k_1}} \dots \frac{\partial \tilde{x}^{\mu_n}}{\partial s^{k_n}} \left(\tilde{\xi}^{\mu_0} F_1 + \frac{1}{(n!)^2} \epsilon^{i_0 \dots i_n} \left(\frac{\partial \tilde{x}^{\nu_1}}{\partial s^{i_1}} \dots \frac{\partial \tilde{x}^{\nu_n}}{\partial s^{i_n}} \right) \left(\frac{\partial \tilde{\xi}^{\mu_0}}{\partial s^{i_0}} F_2 - \tilde{\xi}^{\mu_0} \frac{\partial F_2}{\partial s^{i_0}} \right) \right) \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{(n-1)!(n+1)!} \epsilon^{i_0 \dots i_n} F_2 \tilde{\xi}^{\nu_1} \frac{\partial \tilde{x}^{\nu_2}}{\partial s^{k_2}} \dots \frac{\partial \tilde{x}^{\nu_n}}{\partial s^{k_n}} \left(\frac{\partial}{\partial s^{k_1}} \left(\frac{\partial \tilde{x}^{\mu_0}}{\partial s^{i_0}} \dots \frac{\partial \tilde{x}^{\mu_n}}{\partial s^{i_n}} \right) \right) \right) d s^{k_1 \dots k_n}
\end{aligned} \tag{IV.4}$$

with

$$\begin{aligned}
F_1 &:= \sigma^* \frac{\partial K}{\partial dx^{\mu_0 \mu_1 \dots \mu_n}} = \frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}}{\partial \left(\frac{1}{(n+1)!} \epsilon^{i_0 \dots i_n} \left(\frac{\partial \tilde{x}^{\mu_0}}{\partial s^{i_0}} \dots \frac{\partial \tilde{x}^{\mu_n}}{\partial s^{i_n}} \right) \right)} \\
F_2 &:= \sigma^* \frac{\partial K}{\partial d^2 x^{\mu_0 \nu_1 \dots \mu_n} \wedge dx^{\mu_1 \dots \mu_n}} \frac{1}{\omega} = \frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}}{\partial \left(\frac{1}{n!(n+1)!} \epsilon^{i_0 \dots i_n} \epsilon^{j_0 \dots j_n} \left(\frac{\partial \tilde{x}^{\nu_1}}{\partial s^{j_1}} \dots \frac{\partial \tilde{x}^{\nu_n}}{\partial s^{j_n}} \right) \frac{\partial}{\partial s^{j_0}} \left(\frac{\partial \tilde{x}^{\mu_0}}{\partial s^{i_0}} \dots \frac{\partial \tilde{x}^{\mu_n}}{\partial s^{i_n}} \right) \right)}.
\end{aligned} \tag{IV.5}$$

The values with tilde in (IV.4), (IV.5) are all functions on P , by $\tilde{x}^\mu = x^\mu \circ \sigma$, $\tilde{\xi}^\mu = \xi^\mu \circ \sigma$. Though the current $\tilde{J}(\tilde{\mathcal{L}})$ is directly calculable in principle by (IV.4), it is much more easy to consider the conservation law directly on M . For the case of general relativity, the chosen immersion σ was such that maps local coordinate of P ; (U, Φ) , $\Phi = (x^0, x^1, x^2, x^3)$ to local coordinate of M ; (V, Ψ) , $\Psi = (x^0, x^1, x^2, x^3, g^{00}, g^{01}, g^{11}, \dots, g^{33})$. This makes the calculation easy to handle.

The diffeomorphism invariance of general relativity is expressed by the invariance of the Einstein-Hilbert Lagrangian with respect to spacetime coordinate transformations, which in fibration free perspective can be also easily seen in the invariance of Kawaguchi structure with respect to the transformations between first four coordinate functions. This translational invariance corresponds to the covariant expression of energy momentum. The symmetry is described by $\xi = \frac{\partial}{\partial x^a}$, $a = 0, 1, 2, 3$, and the current $\tilde{J}_a(\tilde{\mathcal{L}})$ associated to $\frac{\partial}{\partial x^a}$ is given by,

$$\begin{aligned}
\tilde{J}_a(\tilde{\mathcal{L}}) &= \tilde{R} ds^{\hat{a}} \\
&- \frac{1}{3!} \epsilon_{bp_1 \dots p_3} \left\{ \frac{\partial g^{ij}}{\partial s^a} \left(\frac{\partial \tilde{R}}{\partial \partial_b g^{ij}} - 2 \frac{\partial}{\partial s^n} \left(\frac{\partial \tilde{R}}{\partial \partial_b \partial_n g^{ij}} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial s^n} \left(\frac{\partial \tilde{R}}{\partial \partial_b \partial_n g^{ij}} \frac{\partial g^{ij}}{\partial s^a} \right) \right\} ds^{p_1 \dots p_3}
\end{aligned} \tag{IV.6}$$

This is a standard linear 3-form.

V. DISCUSSIONS

By using the fibration free perspective which does not set a fibre bundle structure, we were able to define the Lagrangian on Kawaguchi manifold, and derived equations of motion and stated the Nöethers theorem. The Lie derivative of the Kawaguchi action

separates into two parts which one corresponds to the Euler-Lagrange equation and the other to the surface term on the parameter space. The latter corresponds to the Nöether current up to exact term. The gravitational energy-momentum derived by this theorem becomes a three form on the 4-dimensional spacetime. The symmetry on the original parameter space was lifted on to the Kawaguchi manifold, and then pulled back. The equation of motion and conserved currents are invariant on the Kawaguchi manifold, that is, these are independent on the choice of spacetime with same dimension, even in the aspect of global topology. The Lagrangian of Kawaguchi manifold was derived from the conventional Einstein-Hilbert Lagrangian, and this is not satisfactory from the view of constructing a true general relativity on extended configuration space. Since there is a great freedom of choosing coordinate transformations such that mixes the spacetime and field variables, it is anticipated that variables more appropriate for expressing general relativity should be found. These variables should be searched in the direction, such that this fibration free theory of general relativity would be more applicable and appropriate for further problems, such as quantisation of the theory.

VI. ACKNOWLEDGEMENTS

The authors acknowledge the support of the Ochanomizu University, Czech Science Foundation (grant No. 201/09/0981), Palacky University (grant No. PrF-2010-008, PrF-2011-022) and RIHSGP. YITP of Kyoto University has generously given us the privilege to use the computer faculty. We thank Professor Kozma, Professor Tamassy of Debrecen university and Professor Morikawa of Ochanomizu university for fruitful discussions.

Appendix

The proof used in the body is described.

$$L_\xi K = \xi^\mu \mathcal{E}\mathcal{L}_\mu(K) + dJ(K),$$

$$dJ(K) := d\alpha_1 \wedge \beta_1 + d\alpha_2 \wedge \beta_1 + d\alpha_3 \wedge \beta_1 + d\alpha_4 \wedge \beta_2 + d\alpha_5 \wedge d\alpha_6 \wedge \gamma$$

Lemma VI.1. Let (M, K) be a Kawaguchi manifold. 1. The non-linear $(n + 1)$ form $d\alpha \wedge \beta$ where α is a non-linear $(n + 1)$ -form of homogeneity degree of zero and $\beta :=$

$d\beta_1 \wedge \cdots \wedge d\beta_n$ with $\beta_1, \dots, \beta_n \in \mathfrak{F}(M)$ becomes an exact term when pulled back to the $(n+1)$ -dimensional parameter space.

Proof. Since the pullback commutes with d , we have

$$\sigma^*(d\alpha \wedge \beta) = (d\sigma^*\alpha \wedge \sigma^*\beta)$$

Since α is homogeneity zero, it will be a function when pulled back to P . We denote this by $\tilde{\alpha} := \sigma^*\alpha$.

$$\begin{aligned} \mathbf{d}\tilde{\alpha} \wedge \sigma^*\beta &= \frac{\partial \tilde{\alpha}}{\partial s^{i_0}} ds^{i_0} \wedge \left(\frac{\partial \beta_{q_1}}{\partial s^{i_1}} \cdots \frac{\partial \beta_{q_n}}{\partial s^{i_n}} \right) ds^{i_1 \cdots i_n} \\ &= \frac{\partial \tilde{\alpha}}{\partial s^{i_0}} \left(\frac{\partial \beta_{q_1}}{\partial s^{i_1}} \cdots \frac{\partial \beta_{q_n}}{\partial s^{i_n}} \right) ds^{i_0 \cdots i_n} = \mathbf{d} \left(\tilde{\alpha} \frac{\partial \beta_{q_1}}{\partial s^{i_1}} \cdots \frac{\partial \beta_{q_n}}{\partial s^{i_n}} ds^{i_1 \cdots i_n} \right) \end{aligned}$$

This is an exact form on P . □

Lemma VI.2. 2. The non-linear $(n+1)$ -form $d\alpha \wedge d\beta \wedge \gamma$ where α is a non-linear $(n+1)$ -form of homogeneity degree of k (k : integer), β is a non-linear $(n+1)$ -form of homogeneity degree of $-k$, and $\gamma := d\gamma_2 \wedge \cdots \wedge d\gamma_n$ with $\gamma_2, \dots, \gamma_n \in \mathfrak{F}(M)$ becomes an exact term when pulled back to the $(n+1)$ -dimensional parameter space.

Proof. Since the pullback commutes with d , we have

$$\sigma^*(d\alpha \wedge d\beta \wedge \gamma) = (d\sigma^*\alpha \wedge d\sigma^*\beta \wedge \sigma^*\gamma)$$

Since α and β both is nonlinear $(n+1)$ -form, their pull back to P will be in the powers of the volume form ω of P . We denote this by $\tilde{\alpha}\omega^k := \sigma^*\alpha$, $\tilde{\beta}\omega^{-k} := \sigma^*\beta$.

$$\begin{aligned} \mathbf{d}(\tilde{\alpha}\omega^k) \wedge \mathbf{d}(\tilde{\beta}\omega^{-k}) \wedge \sigma^*\gamma &= \frac{\partial \tilde{\alpha}}{\partial s^{i_0}} ds^{i_0} \wedge \frac{\partial \tilde{\beta}}{\partial s^{i_1}} ds^{i_1} \wedge \left(\frac{\partial \tilde{\gamma}_{q_2}}{\partial s^{i_2}} \cdots \frac{\partial \tilde{\gamma}_{q_n}}{\partial s^{i_n}} \right) ds^{i_1 \cdots i_n} \\ &= \frac{\partial \tilde{\alpha}}{\partial s^{i_0}} \frac{\partial \tilde{\beta}}{\partial s^{i_1}} \left(\frac{\partial \tilde{\gamma}_{q_2}}{\partial s^{i_2}} \cdots \frac{\partial \tilde{\gamma}_{q_n}}{\partial s^{i_n}} \right) ds^{i_0 \cdots i_n} = \mathbf{d} \left(\tilde{\alpha} \frac{\partial \tilde{\beta}}{\partial s^{i_1}} \frac{\partial \tilde{\gamma}_{q_2}}{\partial s^{i_2}} \cdots \frac{\partial \tilde{\gamma}_{q_n}}{\partial s^{i_n}} ds^{i_1 \cdots i_n} \right) \end{aligned}$$

This is an exact form on P . □

[1] T. Ootsuka, New covariant Lagrange formulation for field theories, arXiv:1206.6040 .

- [2] A. Kawaguchi, Theory of connections in the generalized Finsler manifold, Proc. Imperial Academy 7 (6) (1931) 211–214.
- [3] A. Kawaguchi, Theory of connections in the generalized Finsler manifold II, Proc. Imperial Academy 8 (8) (1932) 340–343.
- [4] A. Kawaguchi, Theory of connections in the generalized Finsler manifold III, Proc. Imperial Academy 9 (8) (1933) 347–350.
- [5] A. Kawaguchi, An introduction to the theory of areal spaces, Fac. Sci. Hokkaido .
- [6] T. Ootsuka, E. Tanaka, Finsler Geometrical Path Integral, Phys. Lett. A 374 (2010) 1917–1921.
- [7] T. Ootsuka, R. Yahagi, E. Tanaka, Higher order Lagrange formulation using Kawaguchi geometry, *In preparation* .

一般化されたスピノソンモデルに於ける 基底状態について

北海道大学 寺面功哲

1 序文

非相対論的粒子と場の相互作用する系の数学的解析に於いて、基底状態が存在するかどうかは問題となることがある。粒子と場が相互作用するモデルは Nelson や Pauli-Fierz モデルといった幾つかの重要な物理的に重要なモデルが存在するが、ここではスピノソンモデルの一般化である一般化されたスピノソン (generalized spin-boson, 以下単に GSB と書く) モデルの基底状態について述べる。元の粒子のハミルトニアンが基底状態をもち、スペクトルの下限にギャップが存在していれば、相互作用をいれた全ハミルトニアンにも基底状態をもつことが知られている [AH97]。近年、双極子近似をした Pauli-Fierz モデルに於いて、粒子のハミルトニアンが基底状態をもたなくても、相互作用が強くなると全ハミルトニアンに基底状態が現れる”束縛の高まり”という現象が確認された [HS01]。GSB モデルに於いても同様の現象が [AK03] により示された。先の論文によると GSB モデルに於いては、結合定数がある区間にある場合に束縛の高まりが生じるのだが、その範囲の外側では基底状態が存在するか否か確認されていないようである。そこで、ここでは GSB モデルで粒子のハミルトニアンが基底状態をもたないとき、結合定数が十分小さければ束縛の高まりが生じず基底状態が存在しないことを確認する。GSB モデルに於いては [AHH99] により赤外正則条件を外すと、条件付ではあるが基底状態が存在しないことが部分的に示されている。そこで、ここでは以下に於いて赤外正則条件を仮定していても基底状態が存在しないことを示す。

2 準備

先ず幾つかの記号と定義を確認することにする。 \mathcal{X} を Hilbert 空間とする。 \mathcal{X} の内積、ノルムをそれぞれ $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{X}}$, $\|\cdot\|_{\mathcal{X}}$ により表すことにする。煩雑さを避ける為に混乱の恐れがない場合は添字の \mathcal{X} を省略し、単に $\langle \cdot, \cdot \rangle$, $\|\cdot\|$ と記す。 Hilbert 空間 \mathcal{X} 上の線形作用素 T に対し、その定義域を $D(T)$, レゾルベント, スペクトル, 本質的スペクトル, 点スペクトルの集合をそれぞれ $\rho(T)$, $\sigma(T)$, $\sigma_{\text{ess}}(T)$, $\sigma_p(T)$, 自己共役作用素 T のスペクトル測度を $E_T(\cdot)$ とする。 T が下に有界な自己共役作用素のとき (i.e. ある実数 c が存在し $\sigma(T) \geq c$) スペクトルの下限を $E_0(T)$ と表す。

$$E_0(T) := \inf \sigma(T).$$

もし $E_0(T)$ が T の固有値となるとき、 T は基底状態を持つといい、 $\ker(T - E_0(T))$ の 0 でない元を T の基底状態と言う事にする。

Hilbert 空間 \mathcal{X} 上のボソソフック空間を次で定める .

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_b(\mathcal{X}) &:= \bigoplus_{n=0}^{\infty} \otimes_s^n \mathcal{X} \\ &= \left\{ \psi = \{\psi^{(n)}\}_{n=0}^{\infty} \mid \text{任意の } n \in \mathbb{N} \text{ に対して } \psi^{(n)} \in \otimes_s^n \mathcal{X}, \sum_{n=0}^{\infty} \|\psi^{(n)}\|^2 < \infty \right\}, \end{aligned}$$

但し, $\otimes_s^n \mathcal{X}$ は \mathcal{X} の n 重対称テンソル積 (i.e. \mathfrak{S}_n を n 次の対称群, $U_\sigma(\psi_1, \dots, \psi_n) := (\psi_{\sigma(1)}, \dots, \psi_{\sigma(n)})$ とするとき $\otimes_s^n \mathcal{X}$ 上の対称化作用素を $S_n := (1/n!) \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_n} U_\sigma$ により定める . このとき $\otimes_s^n \mathcal{X} := S_n(\otimes^n \mathcal{X})$ である . 但し, $\otimes_s^0 \mathcal{X} = \mathbb{C}$ とする .) . ボソソフック空間の部分空間として有限粒子空間を次により定める .

$$\mathcal{F}_0(\mathcal{X}) := \{\psi \in \mathcal{F}_b(\mathcal{X}) \mid \text{ある自然数 } n_0 \in \mathbb{N} \text{ が存在して, 任意の } n \geq n_0 \text{ に対して } \psi^{(n)} = 0\}.$$

この有限粒子空間 $\mathcal{F}_0(\mathcal{X})$ はボソソフック空間 $\mathcal{F}_b(\mathcal{X})$ で稠密な部分空間となっている .

ボソソフック空間 $\mathcal{F}_b(\mathcal{X})$ 上の重要な作用素である生成, 消滅作用素を次のようにして定義する . 任意の $f \in \mathcal{X}$ に対して, 生成作用素 $a^*(f)$ を $\mathcal{F}_b(\mathcal{X})$ 上稠密に定義された閉線形作用素で, 任意の $\psi = \{\psi^{(n)}\}_{n=0}^{\infty} \in D(a(f)^*) \supset \mathcal{F}_0(\mathcal{X})$ に対して,

$$\begin{aligned} (a(f)^* \psi)^{(0)} &= 0, \\ (a(f)^* \psi)^{(n)} &= \sqrt{n} S_n(f \otimes \psi^{(n-1)}), \quad \text{for } n \geq 1. \end{aligned}$$

を満たすものとする . 生成作用素 $a^*(f)$ は n 粒子空間 $\otimes_s^n \mathcal{X}$ を $(n+1)$ 粒子空間 $\otimes_s^{n+1} \mathcal{X}$ に写すことが分かる . 消滅作用素を生成作用素 $a^*(g)$ の共役作用素として定め, 是を $a(g)$ と表すことにする . 生成・消滅作用素の定義より, 任意の $f, g \in \mathcal{X}$ に対して, 次の正準交換関係が有限粒子空間 \mathcal{F}_0 上で成立することが分かる .

$$[a(f), a(g)^*] = \langle f, g \rangle_{\mathcal{X}}, \quad [a(f), a(g)] = 0, \quad [a(f)^*, a(g)^*] = 0. \quad (2.1)$$

ここで $[X, Y] := XY - YX$ である .

次に Segal の場の作用素 $\phi(f)$ を

$$\phi(f) := \frac{a(f) + a(f)^*}{\sqrt{2}}, \quad f \in \mathcal{X}.$$

とする . 場の作用素 $\phi(f)$ は \mathcal{F}_0 上で本質的自己共役作用素であることが知られている [RS75, Theorem X.41 (a)]. そこで場の作用素 $\phi(f)$ の閉包も同じ記号 $\phi(f)$ で表すことにする . 正準交換関係 (2.1) より, 有限粒子空間 \mathcal{F}_0 上で次の交換関係が成立することが分かる .

$$[\phi(f), \phi(g)] = i \operatorname{Im} \langle f, g \rangle, \quad f, g \in \mathcal{X}.$$

又, これより次の Weyl 関係式が成立することが分かる [RS75, Theorem X.41 (c)].

$$e^{i\phi(f)} e^{i\phi(g)} = e^{i \operatorname{Im} \langle f, g \rangle} e^{i\phi(g)} e^{i\phi(f)}, \quad f, g \in \mathcal{X},$$

線形作用素 S の第 2 量子化作用素 $d\Gamma(S)$ を

$$d\Gamma(S) := \bigoplus_{n=0}^{\infty} S^{(n)},$$

とする．ここで $S^{(n)}$ は次で定まる作用素とする．

$$S^{(0)} := 0,$$

$$S^{(n)} := \overline{\sum_{j=0}^n I \otimes \cdots \otimes I \otimes S_{(j^{\text{th}})} \otimes I \otimes \cdots \otimes I} \Big|_{\otimes_{\text{alg}}^n D(T)}, \quad \text{if } n \geq 1.$$

(\bar{S} は作用素 S の閉包, I は恒等作用素, $S|_M$ を作用素 S の M 上への制限, \otimes_{alg} を代数的テンソル積とする．) S が自己共役または正の作用素であれば, その第 2 量子化 $d\Gamma(S)$ もまた自己共役または正の作用素であることが分かる.

3 GSB モデル

\mathcal{K} を Hilbert 空間とする．ボソン場として N 成分 ($N \in \mathbb{N}$) の量子場を考える事にする．従ってボソン 1 粒子を記述する Hilbert 空間 \mathcal{W} として \mathcal{K} の N 直和

$$\mathcal{W} := \bigoplus^N \mathcal{K}.$$

をとる事にし, ボソン場の Hilbert 空間を $\mathcal{F}_b(\mathcal{W})$ とする． W_0 を単射かつ自己共役な正の \mathcal{K} 上の作用素とし,

$$W := \bigoplus^N W_0$$

とする．そして, 自由なボソン場のハミルトニアンを

$$H_b := d\Gamma(W)$$

とする．

以下, 量子系とボソン場の相互作用する系を考える為に Hilbert 空間として

$$\mathcal{F} := \mathcal{H} \otimes \mathcal{F}_b(\mathcal{W}), \quad (3.1)$$

を考えることにする．(ここで \mathcal{H} は適当な Hilbert 空間である)．量子系のハミルトニアンとして \mathcal{H} 上の自己共役作用素 A をとり, B_j ($j = 1, \dots, J \in \mathbb{N}$) をそれぞれ \mathcal{H} 上の自己共役作用素で $\bigcap_{j=1}^J D(B_j)$ が \mathcal{H} で稠密になるものとする． $g_j \in \mathcal{W}$ と結合定数 $\lambda \in \mathbb{R}$ に対し, 相互作用している系の全ハミルトニアンを次で定める:

$$H(\lambda) := A \otimes I + I \otimes H_b + \lambda \sum_{j=1}^J B_j \otimes \phi(g_j). \quad (3.2)$$

このようなハミルトニアンは [AH97] で導入されたものである．厳密には [AH97] で導入されているものと少し異なるが, ここではこのハミルトニアンを GSB ハミルトニアンと呼ぶ事にする.

例 3.1. (Spin-Boson モデル)

GSB モデルの重要な例をひとつだけ見ておくことにする． $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, $J = N = 1$, σ_i ($i = 1, 2, 3$) を Pauli 行列とする, $A = \mu\sigma_3/2$ ($\mu > 0$:定数), $B_1 = \sigma_1$. このときには GSB ハミルトニアンは次の形である．

$$H_{SB}(\lambda) := \frac{\mu}{2}\sigma_3 \otimes I + I \otimes H_b + \lambda\sigma_1 \otimes \phi(g).$$

このハミルトニアンはスピン-ボソンハミルトニアンと呼ばれている．これは 2 準位原子と中世スカラー場の相互作用するモデルである．スピン-ボソンモデルの基底状態等については [Spo89] を見ていただくと良い．

上で GSB ハミルトニアンを形式的に定めたわけだが, 式 (3.2) のハミルトニアンは自己共役作用素になるか為, 基底状態について考えるにあたりこの GSB ハミルトニアンは少し広すぎる．その為, 幾つかの仮定を設けることにするが, 仮定について述べる前に可換性の定義を確認しておく．

定義 3.2. T と S を或る Hilbert 空間上の自己共役作用素とする．ここで T と S が強可換であるとは, それぞれのスペクトル測度が可換であるとする, つまり任意の Borel 集合 $I_1, I_2 \subset \mathbb{R}$ に対して $E_T(I_1)E_S(I_2) = E_S(I_2)E_T(I_1)$ となる事である．

又, 自己共役作用素のなす族 $\{S_j\}_{j=1}^n$ 画強可換であるとは, 各 $k, l = 1, \dots, n$ に対して S_k と S_l が強可換であるとする．

以下では基本的に次の仮定を満たすハミルトニアンを考えることにする

H-I. $g_j \in D(W^{-3/2})$ ($j = 1, \dots, J$) かつ $\langle W^{-1/2}g_j, W^{-1/2}g_l \rangle \in \mathbb{R}$ ($j, l = 1, \dots, J$).

H-II. 作用素 A は次の形をしているとする：

$$A = A_0 + A_1$$

ここで A_0 は正かつ自己共役な作用素, A_1 は A_0 -有界な対称作用素とする．従って $D(A_0) \subset D(A_1)$ かつ, 或る定数 $a, b \geq 0$ が存在して

$$\|A_1 u\| \leq a\|A_0 u\| + b\|u\|, \quad u \in D(A_0)$$

が成立する．

H-III. 作用素 A_0 は B_j ($j = 1, \dots, J$) と強可換であり

$$D(A_0) \subset \bigcap_{j,l=1}^J D(B_j B_l)$$

とする．更に, 或る定数 $c_j, d_j \geq 0$ が存在して

$$\|B_j u\| \leq c_j \|A_0^{1/2} u\| + d_j \|u\|, \quad (j = 1, \dots, J) \quad \text{for } u \in D(A_0^{1/2})$$

が成り立つとする．

H-IV. $\{B_j\}_{j=1}^J$ は強可換な自己共役作用素のなす族とする.

H-V. A_0 は $D(A_0) \subset \bigcap_{j=1}^J D(B_j A_1) \cap D(A_1 B_j)$ を満たし $[B_j, A_1]|_{D(A_0)}$ ($j = 1, \dots, J$) がそれぞれ有界であるとする.

H-VI.

$$\Lambda := \{\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\} \mid A(\lambda) \text{ は自己共役かつ下に有界}\}$$

は空集合でないとする. 但し

$$A(\lambda) := A - \lambda^2 R_B \text{ and } R_B := \frac{1}{2} \sum_{j,l=1}^J \left\langle W^{-1/2} g_j, W^{-1/2} g_l \right\rangle_{\mathcal{W}} B_j B_l.$$

である.

注 3.3. 仮定 (H-I)-(H-III) と

$$a + \frac{\lambda^2}{2} \sum_{j,l=1}^J \left| \left\langle W^{-1/2} g_j, W^{-1/2} g_l \right\rangle \right| c_j c_l < 1. \quad (3.3)$$

を仮定すると $H(\lambda)$ は自己共役かつ下に有界な作用素となる. 従って特に $a < 1$ ならば (H-VI) は満たされる. 実際に (H-III) から

$$\|B_j B_l u\| \leq c_j c_l \|A_0 u\| + (c_j d_l + c_l d_j) \|A_0^{1/2} u\| + d_j d_l \|u\|, \quad u \in D(A_0).$$

が分かる. 従って

$$\begin{aligned} \|(A_1 - \lambda^2 R_B)u\| &\leq \left(a + \frac{\lambda^2}{2} \sum_{j,l=1}^J \left| \left\langle W^{-1/2} g_j, W^{-1/2} g_l \right\rangle \right| c_j c_l \right) \|A_0 u\| \\ &\quad + \lambda^2 \left(\sum_{j,l=1}^J \left| \left\langle W^{-1/2} g_j, W^{-1/2} g_l \right\rangle \right| c_j d_l \right) \|A_0^{1/2} u\| \\ &\quad + \left(b + \frac{\lambda^2}{2} \sum_{j,l=1}^J \left| \left\langle W^{-1/2} g_j, W^{-1/2} g_l \right\rangle \right| d_j d_l \right) \|u\|. \end{aligned}$$

$A_0^{1/2}$ は A_0 に対して無限小の作用素であるので, 不等式 (3.3) $A_1 - \lambda^2 R_B$ の A_0 に対する相対限界は 1 より小さくなることが分かる. 従って Kato-Rellich の定理から, $A(\lambda) = A_0 + A_1 - \lambda^2 R_B$ は $D(A(\lambda)) = D(A_0)$ 上で自己共役で下に有界となる.

さて, $H(\lambda)$ の自己共役性について述べることにする. GSB ハミルトニアン $H(\lambda)$ のユニタリ変換を考え, うまく評価することにより自己共役性を示す. そこで次の作用素 T を考える.

$$T := \overline{\sum_{j=1}^J B_j \otimes \phi(iW^{-1}g_j)}.$$

この作用素 T は自己共役である．そこで， T を生成子にもつ強連続 1 変数ユニタリ作用素を

$$U(\lambda) := e^{-i\lambda T} \quad (3.4)$$

とする． $L := A_0 \otimes I + I \otimes H_b$. としたとき [AK03, Lemma 3.7] と同様にして次が示せる．

補題 3.4. (H-I)–(H-VI) を満たすとする． $\lambda \in \mathbb{R}$ に対して

$$U(\lambda)D(L) = D(L),$$

$$U(\lambda)H(\lambda)U(\lambda)^{-1}\Psi = \left(A(\lambda) \otimes I + I \otimes H_b + \delta A_1(\lambda) \right) \Psi, \quad \Psi \in D(L)$$

となる, 但し

$$\delta A_1(\lambda) := U(\lambda)(A_1 \otimes I)U(\lambda)^{-1} - A_1 \otimes I$$

である．

[AK03, Theorem 2.1] と同様にして上のユニタリ変換を用いる事で次の定理が得られる．

定理 3.5. ハミルトニアン $H(\lambda)$ は仮定 (H-I)–(H-VI) を満たすとする．このとき任意の結合定数 $\lambda \in \Lambda$ に対して $H(\lambda)$ は定義域を $D(H(\lambda)) = D(A_0 \otimes I) \cap D(I \otimes H_b)$ にもつ下に有界な自己共役作用素である．

4 基底状態の非存在

基底状態の非存在を示すのだが，先の仮定では少し広すぎる．ここではもう少し狭いクラスを扱う為に，更に次の仮定を設けることにする．

仮定 I. 作用素 A_0 基底状態をもたない，即ち $E_0(A_0) = \inf \sigma(A_0) \notin \sigma_p(A_0)$ とする．

仮定 II. 作用素 A_1 は自己共役かつ正な A_0 -コンパクト作用素とする．つまり $D(A_0) \subset D(A_1)$ であり，任意の $z \in \rho(A_0)$ に対して $A_1(A_0 - z)^{-1}$ はコンパクトとなる．

仮定 III. $A_0(\lambda) := A_0 - \lambda^2 R_B$ とする．或る定数 $\lambda_0 \in \Lambda$ が存在して $A_0(\lambda_0) - E_0(A_0)$ は単射かつ正の作用素であり， $\text{Ker}(A_0(\lambda_0) + A_1 - E_0(A_0))$ は高々可算次元とする．

仮定 IV. 任意の $E < E_0(A_0)$ に対して，Birman-Schwinger 作用素 $K_E := |A_1|^{1/2}(A_0(\lambda_0) - E)^{-1}|A_1|^{1/2}$ は有界であり，ノルムが 1 未満の自己共役なコンパクト作用素 K が存在して $\overline{K_E} \leq K$ が成立する．

注 4.1. A に対して相対コンパクトな作用素は A に対して無限小な作用素である事と注 3.3 より，(H-II) と仮定 II から (H-VI) が満たされることが容易に分かる．

これらの仮定の下で, $H(\lambda)$ は十分小さい結合定数 λ で基底状態をもたない事を見ていく. そこで, 次の Birman-Schwinger の評価のようなものを用いて固有空間の次元を評価することが重要になる.

補題 4.2. \mathcal{H} を Hilbert 空間, A を \mathcal{H} 上の正な自己共役作用素, B を \mathcal{H} 上の A -コンパクトかつ正な自己共役作用素とする. 今 $E_0(A) = \inf \sigma(A) \notin \sigma_p(A)$ であり, 任意の $E < E_0(A)$ に対して $|B|^{1/2}(A - E)^{-1}|B|^{1/2}$ はコンパクト作用素で $\dim \text{Ker}(A + B - E_0(A)) \leq \aleph_0$ とする. もしコンパクト作用素 $K_0 := \lim_{E \uparrow E_0(A)} |B|^{1/2}(A - E)^{-1}|B|^{1/2}$ が存在するならば, 次の不等式が成立する.

$$\dim \text{Ran}(E_{A+B}((-\infty, E_0(A)])) \leq \dim \text{Ran}(E_{1-K_0}(\mathbb{R}_{\leq})),$$

ここで $\mathbb{R}_{\leq} := (-\infty, 0]$ である.

この補題から直ちに $A(\lambda)$ の基底状態が存在しないことがわかる.

補題 4.3. (H-I)-(H-V) と仮定 I-IV を満たすと仮定する. $|\lambda| \leq |\lambda_0|$ となる $\lambda \in \Lambda$ に対して, $A(\lambda)$ は基底状態をもたない. 更に $A \geq E_0(A_0)$ となる.

これから GSB ハミルトニアンが基底状態をもたないことが次により分かる.

定理 4.4. (H-I)-(H-V) と仮定 I-IV を満たすとする. このとき任意の $|\lambda| \leq |\lambda_0|$ となる結合定数 $\lambda \in \Lambda$ に対し, $H(\lambda)$ は基底状態をもたない.

証明の概略. $\inf \sigma(A_0) = 0$ として示せば良い. 真空ベクトル $\Omega = (1, 0, 0, \dots) \in \mathcal{F}_b(\mathcal{W})$ と任意の $\psi \in D(A_0)$ に対して.

$$\begin{aligned} \langle \psi \otimes \Omega, H(\lambda)\psi \otimes \Omega \rangle &= \langle \psi \otimes \Omega, (A_0 + A_1)\psi \otimes \Omega \rangle \\ &= \langle \psi, (A_0 + A_1)\psi \rangle \end{aligned}$$

となる. 従って, 最小-最大原理から $\inf \sigma(H(\lambda)) \leq \sigma(A_0 + A_1)$ がわかる. 仮定から A_1 は A_0 -コンパクトなので, $\sigma_{\text{ess}}(A_0 + A_1) = \sigma_{\text{ess}}(A_0)$ となるので $\inf \sigma(H(\lambda)) \leq 0$ が分かる. よって, あとは $H(\lambda)$ が 0 以下の固有値をもたない事を示せば良い. 補題 3.4 と W の正值性から, 次の不等式の評価を得る;

$$\tilde{H}(\lambda) \geq A_0(\lambda) + U(\lambda)A_1U(\lambda)^* = U(\lambda)(A_0(\lambda) + A_1)U(\lambda)^*.$$

即ち $H(\lambda) \geq A(\lambda)$ となる. しかし補題 4.3 から $A(\lambda)$ 0 以下の固有値と負のスペクトルをもたない. 従って $H(\lambda)$ は 0 以下の固有値をもたないことが分かった.

5 Pauli-Fierz type モデル

先ほど述べた仮定を満たす具体的なモデルを考える. Hilbert 空間として $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$, $\mathcal{W} = \bigoplus^N L^2(\mathbb{R}^d)$ とする. また, $A_0 = -\Delta$, A_1 を \mathbb{R}^3 上の非正な急減少関数 V の掛算作用素,

$B_j = p_j := -iD_j$, W_0 を \mathbb{R}^d 上非負な連続関数 $\omega(k)$ の掛算作用素で次を満たすものとする

$$\lim_{|k| \rightarrow \infty} \omega(k) = \infty$$

かつ、或る定数 $\gamma > 0$ と $C > 0$ が存在して

$$|\omega(k) - \omega(k')| \leq C|k - k'|^\gamma(1 + \omega(k) + \omega(k')), \quad k, k' \in \mathbb{R}^d,$$

となる. $g_j \in \mathcal{W}$ ($j = 1, 2, 3$) を $g_j/\omega^2 \in \mathcal{W}$ を満たすものとする. この場合 $H(\lambda)$ は次の形になっている.

$$H_{PF}(\lambda) = (-\Delta + V) \otimes I + I \otimes H_b + \lambda \sum_{j=1}^3 p_j \otimes \phi(g_j).$$

このハミルトニアンは Pauli-Fierz ハミルトニアンを双極子近似して A^2 の項をおとしたものである. この場合 (H-I)-(H-V) の仮定はこの場合満たされることが容易に分かる. ここで $\{g_j\}_{j=1}^3$ を [AK03, Example 6.2] のようにとると, 任意の $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3) \in \mathbb{R}^3$ に対して

$$\frac{1}{2} \sum_{j,l=1}^3 \left(\frac{g_j}{\sqrt{\omega}}, \frac{g_l}{\sqrt{\omega}} \right) \xi_j \xi_l = G(g) \xi^2,$$

を満たすものとしてとることができる. ここで $G(g)$ は ξ 依存しない定数である. すると R_b と $A(\lambda)$ は次の形になる:

$$R_B = \frac{1}{2} \sum_{j,l=1}^3 \left(\frac{g_j}{\sqrt{\omega}}, \frac{g_l}{\sqrt{\omega}} \right) p_j p_l = -G(g) \Delta,$$

$$A(\lambda) = -(1 - \lambda^2 G(g)) \Delta + V.$$

従って

$$\Lambda = \left(-\frac{1}{\sqrt{G(g)}}, 0 \right) \cup \left(0, \frac{1}{\sqrt{G(g)}} \right) \neq \emptyset$$

となり (H-VI) も満たすことが分かる.

補題 4.2 は今の場合よく知られている Birman-Schwinger の評価と一致するので, それから基底状態が存在しないことが分かるが, 先の定理 4.4 が適用できることを一応確認する. 仮定 I と III を満たすことは直ちに分かる. $L^2(\mathbb{R}^3)$ の場合, $V \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$ の関数の掛算作用素は Δ -コンパクトであることが知られている. ただし,

$$L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3) = \left\{ V : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R} \mid \begin{array}{l} \text{任意の } \epsilon > 0 \text{ に対して, 関数 } V_1 \in L^2(\mathbb{R}^3) \text{ と } V_2 \in L^\infty(\mathbb{R}^3) \\ \text{が存在して } V = V_1 + V_2 \text{ かつ } \|V_2\|_\infty < \epsilon \text{ となるものが存在する.} \end{array} \right\}$$

である. 従って 仮定 II も満たす.

最後に 仮定 III を確認する. Rollnik ノルムを次で定める.

$$\|V\|_{\mathcal{R}}^2 := \int \frac{|V(x)||V(y)|}{|x-y|^2} d^3x d^3y.$$

Hardy-Littlewood-Sobolev 不等式 (see [RS75, IX.4 Example 3]) から $V \in L^{3/2}(\mathbb{R}^3)$ であれば Rollnik ノルムは有限 $\|V\|_{\mathcal{R}} < \infty$ である. 任意の $E < 0$ に対して, $(\Delta - E)^{-1}$ は

$e^{-\sqrt{-E}|x-y|}/4\pi|x-y|$ を積分核にもつ積分作用素であることを用いると, 任意の $E < 0$ と $f \in L^2(\mathbb{R}^3)$ に対して,

$$\begin{aligned} \langle f, |A_1|^{1/2}(A(\lambda) - E)^{-1}|A_1|^{1/2}f \rangle &\leq \lim_{E \uparrow 0} \int \overline{f(x)} (|V|^{1/2}((1 - \lambda^2 G(g))\Delta - E)^{-1}|V|^{1/2}f)(x) d^3x \\ &= \lim_{E \uparrow 0} \frac{1}{1 - \lambda^2 G(g)} \int \frac{\overline{f(x)}|V|^{1/2}(x)e^{-\sqrt{-E}|x-y|}|V|^{1/2}(y)f(y)}{4\pi|x-y|} d^3y d^3x \\ &= \frac{1}{1 - \lambda^2 G(g)} \int \frac{\overline{f(x)}|V|^{1/2}(x)|V|^{1/2}(y)f(y)}{4\pi|x-y|} d^3y d^3x \\ &= \frac{1}{4\pi(1 - \lambda^2 G(g))} \langle f, K_V f \rangle \end{aligned}$$

である. いま K_V は $|V|^{1/2}(x)|V|^{1/2}(y)/|x-y|$ を積分核にもつ積分作用素とした. 仮定から K_V 自己共役な Hilbert Schmidt 作用素であるのでコンパクト, 自己共役である. 従って 仮定 IV も成立している. 従って Theorem 4.4 から次を得る.

定理 5.1. $V \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ かつ $V \leq 0$ とする. もし $\|V\|_{\mathcal{R}} < 4\pi$ ならば, 或る定数 $\lambda_0 \in \Lambda$ 存在して任意の結合定数 $|\lambda| < |\lambda_0|$ に対して $H_{\text{PF}}(\lambda)$ は基底状態をもたない.

参考文献

- [AH97] Asao Arai and Masao Hirokawa, On the existence and uniqueness of ground states of a generalized spin-boson model, *J. Funct. Anal.* **151** (1997), no. 2, 455–503.
- [AHH99] Asao Arai, Masao Hirokawa, and Fumio Hiroshima, On the absence of eigenvectors of Hamiltonians in a class of massless quantum field models without infrared cutoff, *J. Funct. Anal.* **168** (1999), no. 2, 470–497.
- [AK03] Asao Arai and Hiroyuki Kawano, Enhanced binding in a general class of quantum field models, *Rev. Math. Phys.* **15** (2003), no. 4, 387–423.
- [HS01] Fumio Hiroshima and Herbert Spohn, Enhanced binding through coupling to a quantum field, *Ann. Henri Poincaré* **2** (2001), no. 6, 1159–1187.
- [HSS11] Fumio Hiroshima, Herbert Spohn, and Akito Suzuki, The no-binding regime of the Pauli-Fierz model, *J. Math. Phys.* **52** (2011), no. 6, 062104, 12.
- [HVV03] Christian Hainzl, Vitali Vougalter, and Semjon A. Vougalter, Enhanced binding in non-relativistic QED, *Comm. Math. Phys.* **233** (2003), no. 1, 13–26.
- [RS75] Michael Reed and Barry Simon, *Methods of modern mathematical physics. II. Fourier analysis, self-adjointness*, Academic Press [Harcourt Brace Jovanovich Publishers], New York, 1975.
- [Spo89] Herbert Spohn, Ground state(s) of the spin-boson Hamiltonian, *Comm. Math. Phys.* **123** (1989), no. 2, 277–304.

情報理論における情報源符号化の統計力学的解釈

中央大学研究開発機構 只木孝太郎*¹

1 はじめに

情報源符号化は、通信路符号化と並ぶ、情報理論の主要テーマである。例えば、コンピュータでテキストファイルを圧縮する場合など、0,1 記号を使って情報をできる限り少ない容量で記憶する問題が、情報源符号化の問題である。本稿では、情報源符号化で最も基本的な設定である、瞬時符号による無歪み情報源符号化の枠組に対して、平衡統計力学的解釈を与える。

一般に、統計力学とは外見上隔たりのある現象や枠組に対して、統計力学的解釈を施すためには、そこにミクロカノニカルアンサンブルを同定することが重要である。ミクロカノニカルアンサンブルさえ同定できれば、後は、通常の統計力学の教科書で行われている平衡統計力学の理論の理論展開に従うことにより、ほぼ自動的に、その枠組上に統計力学的解釈を展開することが可能となる。

本稿では、最適な瞬時符号による無歪み情報源符号化の枠組の中に、ミクロカノニカルアンサンブルを同定する。そして、それを足掛かりとして、情報源符号化の枠組の上に平衡統計力学を展開する。これにより、(統計力学的)エントロピー、温度、熱平衡など、平衡統計力学における諸概念が情報源符号化の枠組に導入される。その上で、我々はこれら諸概念の情報理論的な意味について明らかにする。

我々の統計力学的解釈では、瞬時符号の符号語系列と、統計力学で取り扱われる大自由度の量子系のエネルギー固有状態とを同一視する。そして、その符号語系列の長さ、このエネルギー固有状態のエネルギーとを同一視する。符号語系列の長さの離散性は、量子系におけるエネルギー固有値の離散性に自然に対応する。ところで、統計力学でよく知られているように、量子系のエネルギースペクトルに有限の最大値がある場合、そのような系は負の温度を持ち得る。どんな瞬時符号でも符号語は有限個しかないので、無歪み情報源符号化に対する我々の統計力学的解釈でも、負の温度が現れる。

特に我々は、(統計力学的)エントロピーの概念に基づいて、この統計力学的解釈

*¹ E-mail: tadaki@kc.chuo-u.ac.jp WWW: <http://www2.odn.ne.jp/tadaki/>

では、温度 1 は瞬時符号の平均符号長に対応することを明らかにする。この事実は、温度一定の符号語系列の集合に対するフラクタル次元（ボックス次元）を用いた解析によっても更に明らかとなり、温度 1 がティピカル列に対応していることが確認される。このように、我々の統計力学的解釈において、温度 1 は特別な役割を果たす。

更に、我々は、熱平衡概念に基づいて、この統計力学解釈の情報理論的な応用について考察する。

なお、本稿では、議論の数学的厳密さには拘らない。我々の目標は、情報源符号化の枠組の中に隠された統計力学的な構造を明らかにすることなので、統計力学に倣い、本稿での議論も統計力学と同程度の数学的厳密さで進める。

2 無歪み情報源符号化と瞬時符号

本節では、以下で必要となる数学的概念、並びに情報源符号化の基本概念、特に瞬時符号の定義と性質について簡単に復習する（詳しくは [11, 2, 8, 4]などを参照されたい）。

任意の集合 S に対して、 S に属する元の個数を $\#S$ で表す。有限二進列（即ち、 $0, 1$ 記号からなる有限列）全体の集合を $\{0, 1\}^*$ で表す。任意の $s \in \{0, 1\}^*$ に対して、 s の長さを $|s|$ で表す。 $\{0, 1\}^*$ の部分集合 S が prefix-free であるとは、 S に属するどのような 2 つの異なる有限二進列についても、一方が他方の接頭語になることはない、ということである。 χ が空でない有限集合のとき、 χ をアルファベットと呼ぶ。

X を、アルファベット χ に値をとり、確率分布 $p_X(x) = \Pr\{X = x\}$ ($x \in \chi$) を持つ任意の確率変数とする。このとき、 X のエントロピー $H(X)$ は次式で定義される。

$$H(X) = - \sum_{x \in \chi} p_X(x) \log p_X(x).$$

ここで、対数の底は 2 である。我々は、後程、統計力学的エントロピーの概念を導入するが、これは上記 $H(X)$ とは（少なくとも、定義に関しては）異なるものであることを注意されたい。確率変数 X に対する瞬時符号とは、 χ から $\{0, 1\}^*$ への単射 C で、その像 $C(\chi) = \{C(x) \mid x \in \chi\}$ が prefix-free であるものをいう。このとき、各 $x \in \chi$ に対し、有限二進列 $C(x)$ は、 x に対応する符号語と呼ばれる。なお、以下で $|C(x)|$ は $l(x)$ と表す。各 i について $x_i \in \chi$ となる系列 x_1, x_2, \dots, x_N は、情報源系列と呼ばれる。一方、有限二進列 $C(x_1)C(x_2)\cdots C(x_N)$ は、情報源系列

x_1, x_2, \dots, x_N に対応する符号語系列と呼ばれる。

瞬時符号は、無歪み情報源符号化の問題において、基本的かつ重要な役割を果たす。さて、 X_1, X_2, \dots, X_N を、確率分布 $p_X(x)$ に従う定常独立な確率変数列 (即ち、i.i.d. 情報源) とする。瞬時符号による無歪み情報源符号化問題の目的は、 N を非常に大きな数とした場合に、確率変数列 $\{X_i\}$ によって生成される情報源系列 x_1, x_2, \dots, x_N に対応する符号語系列 $C(x_1)C(x_2) \cdots C(x_N)$ の長さを、最小にすることである。この目的のためには、 N とは無関係に、確率変数 X に対する瞬時符号 C の平均符号長

$$L_X(C) = \sum_{x \in \mathcal{X}} l(x)p_X(x)$$

を考察することで十分である。この平均符号長は、 X のエントロピーとの間で次の重要な関係を満たす。即ち、 X に対する任意の瞬時符号 C について、

$$L_X(C) \geq H(X) \quad (1)$$

が成り立つのである。従って、エントロピー $H(X)$ は、瞬時符号による無歪み情報源符号化問題において、圧縮限界を与える。この圧縮限界を達成する瞬時符号は、情報源符号化の目的からして特に重要な存在であり、そのような瞬時符号、即ち (1) で等号が成り立つ瞬時符号 C は、確率変数 X に対して最適であると言われる。このとき、次の定理が成り立つ。

定理 1. 確率変数 X に対する瞬時符号 C が最適であることと、任意の $x \in \mathcal{X}$ に対して $p_X(x) = 2^{-l(x)}$ が成り立つことは同値である。 \square

最後に、以下では各 $x^N = (x_1, x_2, \dots, x_N) \in \mathcal{X}^N$ について、

$$p_X(x_1)p_X(x_2) \cdots p_X(x_N)$$

を $p_X(x^N)$ で表す。

3 統計力学の基本的枠組の復習

無歪み情報源符号化に対して統計力学的解釈を与えるにあたり、本節では、まず統計力学の基本的枠組について復習する。

一般に、統計力学 [9, 15, 10] では、極めて多数の同一の部分系から構成される量子系 S_{total} を考察する。 N をそのような部分系の個数としよう。例えば、 1 cm^3 の常

温の気体では $N \sim 10^{22}$ である。ここで我々は、これら極めて多数の部分系は（原理的には）互いに区別できるものと仮定する。即ち、我々は、Bose-Einstein 統計でも Fermi-Dirac 統計でもなく、Maxwell-Boltzmann 統計に基づいて統計力学を展開する。この仮定の下では、各 $i = 1, \dots, N$ に対して、 i 番目の量子部分系 S_i を識別することができる。さて、一般に量子力学では、系の状態は、量子状態によって完全に記述される。そのような量子状態の中でも、特に統計力学で重要となるのは、エネルギー固有状態である。各部分系 S_i のエネルギーの固有状態は、量子数と呼ばれる正整数 $n = 1, 2, 3, \dots$ によって指定される。そして、量子数 n によって指定されるエネルギー固有状態にある部分系は、確定したエネルギー E_n を持つ。このとき、全系 S_{total} のエネルギー固有状態は、 N 対の量子数 (n_1, n_2, \dots, n_N) によって指定される。もし全系 S_{total} が、 (n_1, n_2, \dots, n_N) で指定されるエネルギー固有状態にあるならば、各部分系 S_i は n_i で指定されるエネルギー固有状態にあり、全系 S_{total} 自身は、確定したエネルギー $E_{n_1} + E_{n_2} + \dots + E_{n_N}$ を持つ。

以上の設定の下、統計力学の基本仮定である The Principle of Equal Probability（等重率の原理）は、次のように与えられる。

The Principle of Equal Probability: 系 S_{total} のエネルギーが、 E から $E + \delta E$ の間にあることがわかっているものとする。ここで、 δE は、系 S_{total} のエネルギーの測定における不確定の幅である。このとき、系 S_{total} は、 $E \leq E_{n_1} + E_{n_2} + \dots + E_{n_N} \leq E + \delta E$ を満たす (n_1, n_2, \dots, n_N) で指定される各エネルギー固有状態に、同様の確からしさで実現される。□

$\Omega(E, N)$ を、 $E \leq E_{n_1} + E_{n_2} + \dots + E_{n_N} \leq E + \delta E$ を満たす、 N 対の量子数 (n_1, n_2, \dots, n_N) の総数とする。このとき、The Principle of Equal Probability の主張は「系 S_{total} のエネルギー固有状態で、そのエネルギーが E と $E + \delta E$ の間にあるものは、どれも同じ確率 $1/\Omega(E, N)$ で実現される」というものである。これは、そのエネルギーが E と $E + \delta E$ との間にあるエネルギー固有状態の一様分布を、統計力学の議論の出発点にしようとするものであり、この一様分布はマイクロカノニカルアンサンブルと呼ばれる。

そして統計力学では、 $\Omega(E, N)$ に基づいて、全系 S_{total} のエントロピー $S(E, N)$ を次式で定義する。

$$S(E, N) = k \ln \Omega(E, N). \quad (2)$$

ここで、 k は Boltzmann 定数と呼ばれる定数であり、また、 \ln は自然対数を表す。

部分系 1 個当りの平均エネルギー ε は、 E/N によって与えられる。一般に、 ε が有限値となる通常の場合、エントロピー $S(E, N)$ は N に比例する。一方、エネルギーの不確定の幅 δE は項 $k \ln \delta E$ を通じて $S(E, N)$ に寄与するが、 δE が小さ過ぎない限り、 N に比べてこの項は無視される。従って、 δE の大きさは、それが小さ過ぎない限り、エントロピー $S(E, N)$ の値に影響を与えない。

更に統計力学では、エントロピー $S(E, N)$ に基づいて、全系 S_{total} の温度 $T(E, N)$ を次式で定義する。

$$\frac{1}{T(E, N)} = \frac{\partial S}{\partial E}(E, N).$$

従って、温度は E と N の関数である。

4 最適な瞬時符号の統計力学的解釈

前節での統計力学の復習を踏まえ、本節では、最適な瞬時符号による無歪み情報源符号化に対して、統計力学的解釈を与える。

X をアルファベット χ に値をとる任意の確率変数とし、 C を確率変数 X に対する最適な瞬時符号とする。 X_1, X_2, \dots, X_N を、確率分布 $p_X(x)$ に従う定常独立な確率変数列とする。ここで、 N は 10^{22} 程度の非常に大きな数とする。瞬時符号 C による無歪み情報源符号化の枠組は、前節で展開した統計力学の基本的枠組に、以下のように対応する。

確率変数列 X_1, X_2, \dots, X_N は、量子系 S_{total} に対応する。その際、各確率変数 X_i は i 番目の量子部分系 S_i に対応する。各 $x \in \chi$ に対し、 x (同じことであるが、 $C(x)$) は、部分系のエネルギー固有状態に対応し、 $l(x) = |C(x)|$ は、そのエネルギー E_n に対応する。このとき、情報源系列 $(x_1, \dots, x_N) \in \chi^N$ (同じことであるが、符号語系列 $C(x_1) \cdots C(x_N)$) は、 (n_1, \dots, n_N) で指定される系 S_{total} のエネルギー固有状態に対応する。そして、 $l(x_1) + \cdots + l(x_N)$ は、系 S_{total} のそのエネルギー固有状態のエネルギー $E_{n_1} + \cdots + E_{n_N}$ に対応する。

なお、この無歪み情報源符号化の統計力学的解釈においては、 $l(x) = |C(x)|$ であるので、“部分系”では、“エネルギー固有状態”である有限二進列 $C(x)$ の長さが、その状態が持つ“エネルギー”に等しいという状況が成立している。しかし、 $l(x_1) + \cdots + l(x_N) = |C(x_1) \cdots C(x_N)|$ が成り立つので、これは“部分系”に限らず“全系”でも成り立っていることがわかる。このように、無歪み情報源符号化に対す

る我々の統計力学的解釈においては、一般に、“エネルギー固有状態”である有限二進列の長さは、その状態が持つ“エネルギー”に等しい。

$A(L, N)$ を、符号語系列 $C(x_1) \cdots C(x_N)$ のうち、その長さが L と $L + \delta L$ の間にあるもの全てからなる集合とする。そして、 $\Omega(L, N)$ を $\#A(L, N)$ で定義する。即ち、 $\Omega(L, N)$ とは、 N 個の符号語からなる符号語系列のうち、その長さが L と $L + \delta L$ の間にあるものの総数である。さてこのとき、 C が最適な瞬時符号であることから、定理 1 より、 $C(x_1) \cdots C(x_N) \in A(L, N)$ ならば $2^{-(L+\delta L)} \leq p(x^N) \leq 2^{-L}$ となることがわかる。従って、 $A(L, N)$ に属する符号語系列 $C(x_1) \cdots C(x_N)$ は、全て同じ確率 2^{-L} で生起することがわかる。なおここで、我々は前節の統計力学での議論に倣い、 δL の大きさは問題とせず、 L に比べて十分に小さいものとして、無視してしまうことに注意されたい。このようにして、The Principle of Equal Conditional Probability と名付ける次の原理が成り立つ。

The Principle of Equal Conditional Probability: 符号語系列の長さが L に等しいという条件の下で、各符号語系列が生起する条件付確率は、どれも $1/\Omega(L, N)$ である。 \square

我々は、この The Principle of Equal Conditional Probability に基づいて、無歪み情報源符号化の枠組の中に、マイクロカノニカルアンサンブルを同定する。そして、このマイクロカノニカルアンサンブルから出発して、無歪み情報源符号化の枠組の上に、平衡統計力学を構築する。その方法は、前節で見た通常の平衡統計力学に対するものと同じであり、通常の平衡統計力学の理論展開を単になぞり返せばよい。

ところで、統計力学においては、The Principle of Equal Probability は、現実的な物理系では、まだその成立が完全に証明させていない仮説である。これに対し、無歪み情報源符号化に対する我々の統計力学的解釈では、The Principle of Equal Conditional Probability は、仮定なしで自動的に成り立つものである。

前節で統計力学の展開に倣い、瞬時符号 C の統計力学的エントロピー $S(L, N)$ を次式で定義する。

$$S(L, N) = \log \Omega(L, N). \quad (3)$$

ここで、統計力学のエントロピーの定義 (2) に現れる Boltzmann 定数 k は、 $1/\ln 2$ に選んでいることに注意されたい。我々の統計力学的解釈は、無歪み情報源符号化の形式に対する解釈であり、実際の物理系とは関係がない。従って、 k の選び方は任意であるが、二進数に立脚している情報理論との整合性を考えると、このように k を選

ぶのが自然である。この選択は、次節以降の議論によって正当化される。

このように定義した統計力学的エントロピー $S(L, N)$ に基づいて、統計力学の場合と全く同様に、瞬時符号 C の温度 $T(L, N)$ を次式で定義する。

$$\frac{1}{T(L, N)} = \frac{\partial S}{\partial L}(L, N). \quad (4)$$

従って、温度は L と N の関数である。符号語系列の 1 符号語当りの平均の長さ λ は、 L/N によって与えられる。平均の長さ λ は、前節の統計力学での平均エネルギー ε に対応する。

5 統計力学的エントロピーの性質

一般に、統計力学に基づく研究においては、量子部分系 S_i のエネルギー値 E_n を、全ての量子数 n について知ることが重要である。それらの値が量子系 S_{total} のエントロピー $S(E, N)$ を決定し、系の物理的性質を決定するからである。この事実に対応し、無歪み情報源符号化に対する我々の統計力学的解釈においても、全ての $x \in \chi$ に対する $l(x)$ の具体的な値が重要な役割を果たす。特に、それらの値により統計力学的エントロピー $S(L, N)$ が決定される。本節では、関数 $l(x)$ に基づいて、 $S(L, N)$ と $T(L, N)$ の性質を調べる。

統計力学でよく知られている通り、量子系 S_{total} のエネルギーに上限値がある場合には、系は負の温度を持ち得る。これと同じ状況が、無歪み情報源符号化に対する我々の統計力学的解釈でも起こる。どんな瞬時符号でも、その符号語は有限個しかないからである。

l_{\min} と l_{\max} のそれぞれを、 $\min\{l(x) \mid x \in \chi\}$ と $\max\{l(x) \mid x \in \chi\}$ で定義する。さて、 N を固定した場合について考えよう。このとき、統計力学的エントロピー $S(L, N)$ は、 L の単峰型関数であり、 Nl_{\min} と Nl_{\max} の間でのみ $S(L, N)$ は非零となる。 $S(L, N)$ を最大にする L の値を L_0 とおくと、温度の定義 (4) から、 $L < L_0$ ならば $T(L, N) > 0$ であり、他方、 $L > L_0$ ならば $T(L, N) < 0$ である。温度 $T(L, N)$ は、 $L = L_0$ で $\pm\infty$ となる。

Boltzmann-Planck の方法 ([1] 参照) に従うことにより、

$$S(L, N) = NH(G(C, T(L, N))) \quad (5)$$

を示すことができる。ここで $G(C, T)$ は、アルファベット χ に値をとる確率変数で

あり、その確率分布 $p_{G(C,T)}(x) = \Pr\{G(C,T) = x\}$ は

$$p_{G(C,T)}(x) = \frac{2^{-l(x)/T}}{\sum_{a \in \mathcal{X}} 2^{-l(a)/T}} \quad (6)$$

で定義されるものである。この $G(C,T)$ は瞬時符号 C と実数 T に依存している。式 (5) で温度 $T(L,N)$ は、式

$$\frac{L}{N} = \sum_{x \in \mathcal{X}} l(x) p_{G(C,T(L,N))}(x) \quad (7)$$

を通じて、陰に、 L と N の関数として決定される。

以上の $S(L,N)$ と $T(L,N)$ の性質は、集合 $A(L,N)$ の組み合わせ論的な側面のみに基づいて導かれたものであることに注意されたい。これに対し、以下では、確率変数 X_1, X_2, \dots, X_N の導入によってもたらされる確率論的な問題を考察しよう。

瞬時符号 C は最適なので、定理 1 より、長さ L の特定の符号語系列は、確率 2^{-L} で生じる。これゆえ、長さ L の符号語系列のどれかが生じる確率は、 $2^{-L} \Omega(L,N)$ で与えられる。従って、 $2^{-L} \Omega(L,N)$ を L について微分し、結果を 0 とおくことで、符号語の数 N を一定とした場合における、符号語系列の長さの最も確からしい値 L^* を決定することができる。対数をとってから微分するようにすると、この L^* は次式を満たす。

$$\left. \frac{\partial}{\partial L} \{-L + S(L,N)\} \right|_{(L,N)=(L^*,N)} = 0.$$

この式から $T(L^*,N) = 1$ が得られる。従って、温度 1 は、(N を一定とした場合の) 符号語系列の最も確からしい長さ L^* に対応していることがわかる。他方、温度 $T(L^*,N) = 1$ では、まず式 (6) から $p_{G(C,1)}(x) = 2^{-l(x)}$ であり、これと式 (7) により $L^*/N = L_X(C) (= H(X))$ が得られる。この結果は、大数の法則に合致している。このように、温度 1 において、符号語系列の 1 符号語当りの平均の長さ λ は、平均符号長 $L_X(C)$ と一致し、温度 1 は瞬時符号 C の平均符号長 $L_X(C)$ に対応している。

6 二つの瞬時符号の間の熱平衡

本節では、二つの瞬時符号の間に生じる“熱平衡概念”について考察する。 X^I をアルファベット \mathcal{X}^I に値をとる任意の確率変数とし、 C_I をそれに対する最適な瞬時符号とする。そして、 $X_1^I, X_2^I, \dots, X_{N_I}^I$ を確率分布 $p_{X^I}(x)$ に従う定常独立な確率変数

列とする。ここで、 N_I は非常に大きな数とする。他方、 X^{II} をアルファベット χ^{II} に値をとる任意の確率変数とし、 C_{II} をそれに対する最適な瞬時符号とする。そして、 $X_1^{II}, X_2^{II}, \dots, X_{N_{II}}^{II}$ を確率分布 $p_{X^{II}}(x)$ に従う定常独立な確率変数列とする。ここで、やはり N_{II} は非常に大きな数であるとする。なお、 C_I と C_{II} は同じものである必要はないし、 $N_I = N_{II}$ である必要もない。

さてこのとき、次の問題を考えよう：確率変数列 $\{X_i^I\}$ に対する瞬時符号 C_I による符号語系列の長さ L_I と、確率変数列 $\{X_i^{II}\}$ に対する瞬時符号 C_{II} による符号語系列の長さ L_{II} の和 $L_I + L_{II}$ が、与えられた L に等しいという条件の下で、最も確からしい L_I と L_{II} の値を見つける。

この問題を解くために、統計力学における熱平衡の概念を用いることができる。初めに次の事実に注意しよう。長さが L_I である C_I の特定の符号語系列と、長さが L_{II} である C_{II} の特定の符号語系列は、確率 $2^{-L_I} 2^{-L_{II}} = 2^{-L}$ で同時に現れる。これは、瞬時符号 C_I と C_{II} が最適だからである。これゆえ、 C_I の符号語系列と C_{II} の符号語系列の特定の対は、対を形成するそれら二つ列の長さの和が L に等しいという条件の下では、どの特定の対も同じ確率で生起する。従って、最も確からしい $L = L_I + L_{II}$ の配分 (L_I^*, L_{II}^*) は、積 $\Omega_I(L_I, N_I) \Omega_{II}(L_{II}, N_{II})$ を最大にするものである。この条件は、統計力学的エントロピー及び温度の定義式 (3)、(4) から、次の等式に同値である。

$$T_I(L_I^*, N_I) = T_{II}(L_{II}^*, N_{II}).$$

ここで、関数 T_I と T_{II} は、それぞれ、 C_I と C_{II} の温度である。この等式は、統計力学において、全エネルギーが一定の場合の二つの系の間の熱平衡の条件に対応するものである。

さて、 L_I^* および L_{II}^* の具体的計算方法であるが、まず、 T を未知数とする次の方程式を解くことにより、 $T_I(L_I^*, N_I) (= T_{II}(L_{II}^*, N_{II}))$ が求まる^{*2}。

$$\frac{N_I}{L} \sum_{x \in \chi^I} |C_I(x)| p_{G(C_I, T)}(x) + \frac{N_{II}}{L} \sum_{x \in \chi^{II}} |C_{II}(x)| p_{G(C_{II}, T)}(x) = 1. \quad (8)$$

$T_I(L_I^*, N_I)$ が式 (8) を満たすことは、式 (7) と $L = L_I + L_{II}$ から確認できる。一旦 $T_I(L_I^*, N_I)$ の値が求まれば、再び式 (7) により、 L_I^* および L_{II}^* が計算できる。

^{*2} 実際の計算の際には、 T ではなく、まず $2^{-\frac{1}{T}}$ について (8) を解く。

7 符号語系列集合のフラクタル次元

フラクタル次元の概念は、フラクタル幾何学において中心的な役割を果たしている [7]。本節では、フラクタル次元、特にボックス次元を用いて、無歪み情報源符号化に対する我々の統計力学解釈を更に調べる。

F を \mathbb{R} の有界な部分集合とし、 $N_n(F)$ を F と交わる 2^{-n} -mesh cubes の個数とする。ここで、 2^{-n} -mesh cube とは、ある整数 m に対して $[m2^{-n}, (m+1)2^{-n}]$ の形をした \mathbb{R} の部分集合のことである。このとき、 F のボックス次元 $\dim_B F$ は次式で定義される。

$$\dim_B F = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log N_n(F)}{n}.$$

さて、

$$\{0, 1\}^\infty = \{b_1 b_2 b_3 \cdots \mid b_i = 0, 1 \text{ for all } i = 1, 2, 3, \dots\}$$

を無限二進列（即ち、0, 1 記号からなるの片側無限列）全体の集合とする。我々は、[12, 13] で、アルゴリズム的情報理論（algorithmic information theory）の文脈において、無限の長さを持つ符号語系列の集合のフラクタル次元（特に、ハウスドルフ次元）を研究した。ここでは、その方法に従い、瞬時符号 C の符号語系列で無限の長さを持つものを考察し、特に、それらの中でも一定の温度を持つものから成る集合を考え、その集合のボックス次元を調べる。

式 (7) により、比 L/N は、温度 T から一意に決定されることがわかる。従って、比 L/N を一定に保ちながら $L, N \rightarrow \infty$ とすることにより、集合 $A(L, N)$ は、 $\{0, 1\}^\infty$ の部分集合とみなすことができる。この種の極限操作は、統計力学では、熱力学的極限と呼ばれる。熱力学的極限をとった結果において、 $A(L, N)$ を $F(T)$ と表すことにする。その際、 T は式 (7) を通じて、 L/N の極限值に関係付けられる。ところで、このように定義された $F(T)$ は、本来 $\{0, 1\}^\infty$ の部分集合であるが、任意の無限二進列 $\alpha \in \{0, 1\}^\infty$ を、二進表示の実数 $0.\alpha$ と同一視することにより、 $F(T)$ を $[0, 1]$ の部分集合とみなすことが可能である。このようにして、 $F(T)$ に対して、そのボックス次元 $\dim_B F(T)$ を定義することができる。

以下では、 $-\infty \leq T \leq \infty$ の範囲で、 $\dim_B F(T)$ の温度 T に対する依存性を調べ

る。初めに、次が成り立つことがわかる。

$$\begin{aligned}\dim_B F(T) &= \lim_{L, N \rightarrow \infty} \frac{\log \Omega(L, N)}{L} \\ &= \lim_{L, N \rightarrow \infty} \frac{S(L, N)}{L}.\end{aligned}$$

ここで極限 \lim は、各 T に対して、式 (7) を満たしながら $L, N \rightarrow \infty$ としている。この式を見ると、瞬時符号 C の統計力学的エントロピー $S(L, N)$ と、 $F(T)$ のボックス次元 $\dim_B F(T)$ とは強く関連していることがわかる。この式と、式 (5)、(6)、(7) により、 $\dim_B F(T)$ は具体的には次式で与えられる。

$$\dim_B F(T) = \frac{1}{T} + \frac{1}{\lambda(T)} \log \sum_{x \in \mathcal{X}} 2^{-l(x)/T}. \quad (9)$$

ここで、 $\lambda(T)$ は次式で定義される。

$$\lambda(T) = \sum_{x \in \mathcal{X}} l(x) p_{G(C, T)}(x).$$

瞬時符号 C の“最大エネルギー固有値”と“最低エネルギー固有値”のそれぞれの縮退度 d_{\max} と d_{\min} を、

$$\begin{aligned}d_{\max} &= \#\{x \in \mathcal{X} \mid l(x) = l_{\max}\}, \\ d_{\min} &= \#\{x \in \mathcal{X} \mid l(x) = l_{\min}\}\end{aligned}$$

によって定義する。なお、 C は最適なので $\sum_{x \in \mathcal{X}} 2^{-l(x)} = 1$ であり、それゆえ d_{\max} は偶数である。さて、比 L/N (即ち、 $\lambda(T)$) に関して増加する順に、 $\dim_B F(T)$ の値を見て行くと、式 (9) より、次のようになる。

$$\begin{aligned}\lim_{T \rightarrow +0} \dim_B F(T) &= \frac{\log d_{\min}}{l_{\min}}, \\ \dim_B F(1) &= 1, \\ \lim_{T \rightarrow \pm\infty} \dim_B F(T) &= \frac{n \log n}{\sum_{x \in \mathcal{X}} l(x)}, \\ \lim_{T \rightarrow -0} \dim_B F(T) &= \frac{\log d_{\max}}{l_{\max}}.\end{aligned}$$

ここで、 C の全ての符号語の長さが同一でない限り、 $n \log n < \sum_{x \in \mathcal{X}} l(x)$ であることに注意されたい。また、やはりそのような自明な場合を除けば、明らかに

$\log d_{\min}/l_{\min} < 1$ かつ $\log d_{\max}/l_{\max} < 1$ となる。従って、一般に、 $\dim_B F(T)$ は温度 $T = 1$ で最大となることがわかる。

この事実はまた、式 (9) を利用する $\dim_B F(T)$ の微分計算に基づいて確認することができる。即ち、 C の全ての符号語の長さが同一でない限り、次が成り立つことが、この微分計算で確認できる。

$$(i) \quad \left. \frac{d}{dT} \dim_B F(T) \right|_{T=T_0} = 0 \iff T_0 = 1,$$

$$(ii) \quad \left. \frac{d^2}{dT^2} \dim_B F(T) \right|_{T=1} < 0.$$

さて、 $\dim_B F(1) = 1$ であり、 $\dim_B F(1)$ は $\dim_B [0, 1]$ に一致するから、集合 $F(1)$ は、或る意味において、集合 $[0, 1]$ くらいに大きい。これは次のように説明することができる。

C は最適な瞬時符号なので、無限の長さを持つ符号語系列 $C(x_1)C(x_2)\cdots$ は、全体で集合 $\{0, 1\}^\infty$ を埋め尽くし、従って $[0, 1]$ を埋め尽くす。更に、 C は最適なので、これらの符号語系列は、 $[0, 1]$ 上の一様分布、即ち、 $[0, 1]$ 上の Lebesgue 測度に従って生起する。一方、 N が十分に大きい場合には、大数の法則により、 N 個の符号語から成る符号語系列の長さは、ほぼ確実に $NL_X(C)$ に等しい。これらの観察は、 N が十分に大きい場合には、長さが $NL_X(C)$ となる符号語系列が、或る意味において、 $[0, 1]$ を埋め尽くすことを示す。このとき、第 5 節で見たように、温度 $T = 1$ は、長さが $NL_X(C)$ となるこれらの符号語系列に対応するので、 $T = 1$ の場合の $F(T)$ 、即ち $F(1)$ は、集合 $[0, 1]$ くらいに“大きい”のである。

このように、 $F(1)$ は、或る意味において、情報源系列のティピカル列に対応する符号語系列の全てを含み、これにより $\dim_B F(1) = 1$ が成り立つ。

8 まとめ

本稿では、最適な瞬時符号による無歪み情報源符号化の枠組において、ミクロカノニカルアンサンブルを同定し、それに基づいて、情報源符号化の枠組に対し平衡統計力学的解釈を与えた。その際、統計力学的エントロピー、温度、熱平衡など、統計力学における諸概念を情報理論に移植し、それらの情報理論的な性質を調べた。特に、この統計力学的解釈では、温度 1 は瞬時符号の平均符号長 $L_X(C)$ に対応することを発

見し、この対応の存在は、ボックス次元を用いた解析によっても確認できた。

なお、本稿では議論しなかったが、無歪み情報源符号化の枠組に対するこの統計力学的解釈では、通常の平衡統計力学の理論展開に更に従うことにより、瞬時符号のカノニカルアンサンブルの概念、並びに、瞬時符号の化学ポテンシャルや、それで特徴付けられる粒子の交換に関する平衡や、グランドカノニカルアンサンブルの概念を導入することが可能である。そして、それらの情報理論的な意義について考察を行うことが可能である。この事実は、本稿で我々が行った、無歪み情報源符号化の枠組におけるミクロカノニカルアンサンブルを同定が、自然かつ普遍的なものであることを示している。

参考文献

- [1] 有村卓, 確率・情報・エントロピー. 森北出版, 1980.
- [2] R. B. Ash, *Information Theory*. Dover Publications, Inc., New York, 1990.
- [3] C. S. Calude and M. A. Stay, “Natural halting probabilities, partial randomness, and zeta functions,” *Inform. and Comput.*, vol. 204, pp. 1718–1739, 2006.
- [4] T. M. Cover and J. A. Thomas, *Elements of Information Theory*, 2nd ed. John Wiley & Sons, Inc., New York, 2006.
- [5] A. Dembo and O. Zeitouni, *Large Deviations Techniques and Applications*, 2nd ed. Springer, New York, 1998.
- [6] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, 4th ed. Oxford University Press, London, 1958.
- [7] K. Falconer, *Fractal Geometry, Mathematical Foundations and Applications*. John Wiley & Sons, Inc., Chichester, 1990.
- [8] 韓太瞬, 小林欣吾, 情報と符号化の数理. 培風館, 1999.
- [9] F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. McGraw-Hill, Inc., Singapore, 1965.
- [10] D. Ruelle, *Statistical Mechanics, Rigorous Results*, 3rd ed. Imperial College Press and World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, 1999.
- [11] C. E. Shannon, “A mathematical theory of communication,” *Bell Syst. Tech. J.*, vol. 27, pt. I, pp. 379–423, 1948; pt. II, pp. 623–656, 1948.

- [12] 只木孝太郎, アルゴリズムの情報理論とフラクタル集合. 1999 年情報論的学習理論ワークショップ (IBIS'99) 予稿集, pp. 105–110, 1999 年 8 月 26, 27 日, 静岡県 田方郡 修善寺.
- [13] K. Tadaki, “A generalization of Chaitin’s halting probability Ω and halting self-similar sets,” *Hokkaido Math. J.*, vol. 31, pp. 219–253, 2002.
- [14] K. Tadaki, A statistical mechanical interpretation of instantaneous codes. Proceedings of 2007 IEEE International Symposium on Information Theory (ISIT2007), pp. 1906–1910, June 24–29, 2007, Nice, France.
- [15] 戸田盛和, 久保亮五編, 統計物理学, 岩波講座 現代物理学の基礎 [第 2 版] 5. 岩波書店, 1978.

スピン 1/2 における擬分布関数を 与える演算子と量子状態

市東 拓郎

2012年1月5日

1 イントロダクション

我々の研究では伏見関数、Wigner 関数、Glauber-Sudarshan 関数の性質をこれらの分布を与える POVM 演算子もしくは POVM 演算子らしきものの性質をもっとも簡単な 2次元ヒルベルト空間で考察した。

量子力学における状態は一般的に波動関数で記述される。波動関数は表示の取り方に任意性があり一般的には興味のある物理量に対して表示をとる。この波動関数の絶対値の 2乗を計算すればその物理量の分布関数が得られ、これは実験であられるであろう分布を正確に予言できる。しかし、分布関数自体は絶対値をとってしまっているために元の波動関数の完全な情報を持たない。今回、議論する擬分布関数である伏見関数、Wigner 関数、Glauber-Sudarshan 関数は分布関数としての性質を一部持ちながら元の波動関数の完全な情報を持つ特殊な分布関数である。しかし、それぞれに確率分布関数と解釈するのにやっかいな問題、もしくは計算するときにやっかいな問題を持っている [1][2][3][5]。今回はこれらの擬分布関数の性質を状態に対する解析を使って考察した。

2 伏見関数と Wigner 関数、Glauber-Sudarshan 関数

スピン系 (2次元ヒルベルト空間を \mathcal{H}_2 と表記する) の擬分布関数を定義する。これからは特に断りがなければ状態を $\hat{\rho}$ とする。はじめに伏見関数を定義する。伏見関数は最小不確定状態であるコヒーレント状態から定義される分布関数であり [1]、Q 関数とも呼ばれている。まず、コヒーレント状態を定義するが実は現在考えている 2次元ヒルベルト空間 \mathcal{H}_2 の任意の純粋状態は最小不確定状態であり、コヒーレント状態である。コヒーレント状態のセットを作るためにブロッホ表現を使う。ブロッホ表現は半径が 1 の球内部の点、言い換えれば $x^2 + y^2 + z^2 \leq 1$ を満たす (x, y, z) と \mathcal{H}_2 上の状態 $\hat{\rho}$ の間に 1対1の対応が存在することを利用した状態の表現方法である。また、純粋状態は球面に対応する。つまり $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ を満たす (x, y, z) は純粋状態を表している。 \mathcal{H}_2 上の任意の純粋状態はコヒーレント状態であった。球面上の座標は半径 r 固定されているため

極座標を用いて2つの偏角の組 (θ, ϕ) で表すことができるためコヒーレント状態を $|(\theta, \phi)\rangle$ と書くことができる。今回はブロッホ表現での球面の状態 $|(\theta, \phi)\rangle$ をコヒーレント状態と定義しよう。このコヒーレント状態 $|(\theta, \phi)\rangle$ の波動関数で表示を取ったものを \mathcal{H}_2 上での伏見関数とする。

$$Q(\theta, \phi) = \frac{1}{2\pi} \langle(\theta, \phi)| \hat{\rho} |(\theta, \phi)\rangle \quad (1)$$

ここで式 (1) を次のように変形する。

$$Q(\theta, \phi) = \frac{1}{2\pi} \langle(\theta, \phi)| \hat{\rho} |(\theta, \phi)\rangle = \frac{1}{2\pi} \mathbf{Tr} \hat{\rho} \hat{Q}(\theta, \phi) \quad (2)$$

ここで $\hat{Q}(\theta, \phi) = |(\theta, \phi)\rangle \langle(\theta, \phi)|$ とおいた。この演算子 $\hat{Q}(\theta, \phi)$ は次の関係を満たす。

$$\sum_{\theta, \phi} \hat{Q}(\theta, \phi) = \hat{\mathbf{I}} \quad (3)$$

$$\hat{Q}(\theta, \phi) \geq 0 \quad (4)$$

つまり $\{\hat{Q}(\theta, \phi)\}_{(\theta, \phi)}$ は POVM となっている [4]。また POVM であるために対応する測定が存在し、 $Q(\theta, \phi)$ は対応する測定から得られる確率分布となっている [6]。次に Glauber-Sudarshan 関数を考える。Glauber-Sudarshan 関数 $P(\theta, \phi)$ は P 関数とも呼ばれ、伏見関数と同様にコヒーレント状態から次の関係式を満たす関数として定義される [2]。

$$\hat{\rho} = \sum_{\theta, \phi} P(\theta, \phi) |(\theta, \phi)\rangle \langle(\theta, \phi)| \quad (5)$$

このような $P(\theta, \phi)$ を伏見関数の時と同様に

$$P(\theta, \phi) = \frac{1}{2\pi} \mathbf{Tr} \hat{\rho} \hat{P}(\theta, \phi) \quad (6)$$

と書く。 $\hat{P}(\theta, \phi)$ の具体的な形は後で議論する。この演算子 $\hat{P}(\theta, \phi)$ について POVM 演算子の性質を満たすか考えてみると

$$\sum_{\theta, \phi} \hat{P}(\theta, \phi) = \hat{\mathbf{I}} \quad (7)$$

$$\hat{P}(\theta, \phi) \not\geq 0 \quad (8)$$

となり半正定値性を満たさないために POVM と言うことができない。しかし、Glauber-Sudarshan 関数は伏見関数との間に次のような重要な関係式がある [5]。

$$\sum_{\theta, \phi} P_A(\theta, \phi) Q_B(\theta, \phi) = \mathbf{Tr} \hat{A} \hat{B} \quad (9)$$

ただし、 $P_A(\theta, \phi)$ や $Q_B(\theta, \phi)$ はそれぞれ演算子 \hat{A} 、 \hat{B} に対する Glauber-Sudarshan 関数、伏見関数である。式 (2)、(6) より、任意の演算子からこれらの関数が定義できる。またこの関係から

$$\hat{\rho} = \sum_{\theta, \phi} Q(\theta, \phi) \hat{P}(\theta, \phi) \quad (10)$$

$$\hat{\rho} = \sum_{\theta, \phi} P(\theta, \phi) \hat{Q}(\theta, \phi) \quad (11)$$

が得られる。伏見関数と Glauber-Sudarshan 関数には一種の双対の関係がある。最後に Wigner 関数を定義する。通常の設定 [3] とは逆の方法であるが Wigner 関数の性質として次の関係がある [5]。

$$\sum_{\theta, \phi} W_A(\theta, \phi) W_B(\theta, \phi) = \text{Tr} \hat{A} \hat{B} \quad (12)$$

これは伏見関数と Glauber-Sudarshan 関数の関係式 (9) に対応する関係式であるが、Wigner 関数は自分自身が双対の関数になっている。この関係を満たす関数 $W(\theta, \phi)$ を次の様に書き換える。

$$W(\theta, \phi) = \frac{1}{2\pi} \text{Tr} \hat{\rho} \hat{W}(\theta, \phi) \quad (13)$$

この演算子 $\hat{W}(\theta, \phi)$ について POVM 演算子であるかを確認すれば

$$\sum_{\theta, \phi} \hat{W}(\theta, \phi) = \hat{\mathbf{I}} \quad (14)$$

$$\hat{W}(\theta, \phi) \not\geq 0 \quad (15)$$

となり POVM ではないことが分かる。これまで定義した $\hat{Q}(\theta, \phi)$ 、 $\hat{P}(\theta, \phi)$ 、 $\hat{W}(\theta, \phi)$ の具体的な行列を求めてみよう。まず $\hat{Q}(\theta, \phi)$ はコヒーレント状態の密度行列そのものであり、他もコヒーレント状態の密度行列と関係式 (9)、(12) より簡単に計算ができ

$$\hat{Q}(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} 1 + \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{+i\phi} & 1 - \cos \theta \end{pmatrix} \quad (16)$$

$$\hat{P}(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} 1 + 3 \cos \theta & 3 \sin \theta e^{-i\phi} \\ 3 \sin \theta e^{+i\phi} & 1 - 3 \cos \theta \end{pmatrix} \quad (17)$$

$$\hat{W}(\theta, \phi) = \begin{pmatrix} 1 + \sqrt{3} \cos \theta & \sqrt{3} \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sqrt{3} \sin \theta e^{+i\phi} & 1 - \sqrt{3} \cos \theta \end{pmatrix} \quad (18)$$

が得られる。ところで、伏見関数は POVM であることは確認したが POVM が満たさなければならない関係式以外に次の関係も満たす。

$$\text{Tr} \hat{Q}(\theta, \phi) = 1 \quad (19)$$

これは伏見関数がコヒーレント状態から定義されたためである。 $\hat{P}(\theta, \phi)$ や $\hat{W}(\theta, \phi)$ についても確認してみると

$$\text{Tr} \hat{P}(\theta, \phi) = 1 \quad (20)$$

$$\text{Tr} \hat{W}(\theta, \phi) = 1 \quad (21)$$

となり、関係式を満たす。しかしながら POVM の議論で確認したように半正定値ではないために状態であるとはいえない。

3 擬分布関数と状態

次に擬分布関数を与えていた演算子 $\hat{W}(\theta, \phi)$ 、 $\hat{Q}(\theta, \phi)$ 、 $\hat{P}(\theta, \phi)$ に関して別な目線から考察を試みる。前の章で議論したように Wigner 関数、Glauber-Sudarshan 関数は POVM ではないので測定から得られる確率分布であるとは言い難いたく擬分布関数と呼ばれている。これらが分布関数と思うためには半正定値性を満たさないことに目をつむらなければならない。しかし、半正定値性について目をつむるのであれば式 (20)、(21) の関係から演算子 $\hat{P}(\theta, \phi)$ 、 $\hat{W}(\theta, \phi)$ を状態らしきものとも考えることもできそうである。また $\hat{Q}(\theta, \phi)$ はそもそも状態としての関係式を満たす。この章では状態に対する解析をこれらの演算子に対しておこなってみる。

最初にこれらの演算子がブロッホ表現ではどのような点で表せるか考えてみる。定義から明らかのように $\hat{Q}(\theta, \phi)$ は $x^2 + y^2 + z^2 = 1$ となる座標 (x, z, y) を表している。つぎに $\hat{W}(\theta, \phi)$ を考えてみよう、これも極座標系とデカルト座標系の変換を考えれば $x^2 + y^2 + z^2 = \sqrt{3}$ となる座標 (x, z, y) を表していることが分かる。 $\hat{P}(\theta, \phi)$ も同様に考えれば、 $x^2 + y^2 + z^2 = 3$ となる座標 (x, z, y) を表していることが分かる。 $\hat{W}(\theta, \phi)$ と $\hat{P}(\theta, \phi)$ は半正定値性を満たさなかった為に半径 1 の球に含まれていない。ちなみにブロッホ表現は半径 1 の球内部の点と状態つまりは $\text{Tr} \hat{\rho} = 1$ と $\hat{\rho} \geq 0$ を満たす演算子に 1 対 1 の対応があることを利用しているが、状態の条件 $\hat{\rho} \geq 0$ を緩めてエルミート性 $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$ に変えればこれらを満たすエルミート演算子と 3 次元ユークリッド空間上の点に対して 1 対 1 の対応がとれる。また $\hat{\rho} \geq 0 \Rightarrow \hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$ である。

次に、状態と思ったときの不確定性を計算してみよう。不確定性を計算する為の物理量 \hat{A} に対する分散は次の様に定義する。

$$\Delta \hat{A}^2 = \text{Tr} \hat{\rho} (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \quad (22)$$

ただし $\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr} \hat{\rho} \hat{A}$ である。確率分布が負になることがあるので一般的な確率論での分散と解釈する時に注意が必要である。これらを使って不確定関係を計算する。実はこれは \mathcal{H}_2 の回転対称性からブロッホ表現での動経 r のみで表現ができ

$$\Delta \hat{l}_x^2 + \Delta \hat{l}_y^2 + \Delta \hat{l}_z^2 = \frac{1}{4}(3 - r^2) \quad (23)$$

とかける。量子状態は $r \leq 1$ なので最小値は $1/2$ である。当然、 $\hat{Q}(\theta, \phi)$ は $1/2$ である。 $\hat{W}(\theta, \phi)$ は $r = \sqrt{3}$ であった為に 0 となる。同様に $\hat{P}(\theta, \phi)$ は $r = 3$ より $-3/2$ となる。 $\hat{P}(\theta, \phi)$ のように負の値になってしまうと意味がわからなくなってしまうが、 $\hat{W}(\theta, \phi)$ は分散がかろうじて 0 である。つまりは、完全な確定状態である。当然ながら量子系の状態においては許されない状態であるが、半正定値性を求めなければ作ることが出来る。Wigner 関数はこのような性質を持つ演算子のセットで POVM のようなものを作り上げた分布関数となっている。

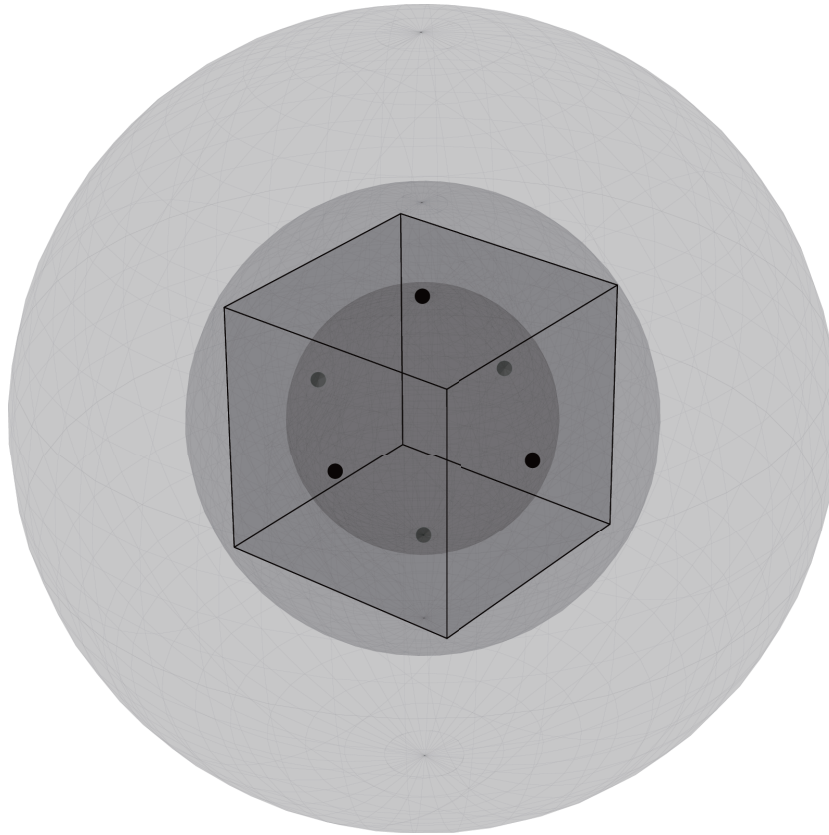


図1 この図は伏見関数、Wigner 関数、P 関数を与える演算子をプロット表現に直した図である。一番内側の球面が伏見関数の演算子つまりはコヒーレント状態を表している。次の球面は Wigner 関数を与える演算子を表している。もっとも外側の球面は P 関数を与える演算子を表している。また、黒い点はパウリ行列の固有状態で作る射影演算子を表している。射影演算子を表す点は伏見関数を作る演算子に対応する球面上にある。つまりは伏見関数を作る演算子の一部が射影演算子になっている。伏見関数を作る演算子に対応する球面に射影演算子に対応するところで外接する立方体を考える。これに外接する円が Wigner 関数を作る演算子を表している。これは射影演算子の座標の合成が立方体の頂点つまりは Wigner 関数を作る演算子を表す球の一部になっているものと考えられる。たとえば射影演算子に対応する点 $(1, 0, 0)$ 、 $(0, 1, 0)$ 、 $(0, 0, 1)$ の合成が立方体の頂点 $(1, 1, 1)$ に対応する。

4 まとめ

今回の研究では擬分布関数の性質をそれを与える演算子の性質を調べることによって議論した。伏見関数を与える POVM 演算子は状態としての性質を満たしていたが、Wigner 関数や Glauber-Sudarshan 関数を与える演算子は POVM 演算子でなく、また状態の性質もそれぞれ半正定値でないために満たさない。これは状態の立場から見ると不確定を量子力学の許す値より小さくしてしまっているからである。今議論している伏見関数、Wigner 関数、Glauber-Sudarshan 関

数は構成している演算子がそれぞれトレースが1となるような特別な POVM もしくは POVM に近い擬分布関数であったために状態と考えて物理的な意味を考えることができた。

今回、擬分布の性質を解析するにあたり、通常の解析ではやらないような方法を用いたが、POVM 演算子 \hat{M}_ω が $\text{Tr}\hat{M}_\omega = 1$ を満たすような特別な POVM に意味を持たせる議論ができれば幸いである。

参考文献

- [1] K. Husimi, *Proc. Phys. Soc. Jpn.*, **22**, 264, 1940.
- [2] R. J. Glauber, *Phys. Rev.*, **131**, 2766, 1963.
- [3] E. P. Wigner, *Phys. Rev.*, **40**, 749, 1932.
- [4] M. A. Nielsen, I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press, 2000
- [5] U. Leonhardt, *Measuring the Quantum State of Light*, Cambridge University Press, 1997.
- [6] A. Holevo *Probabilistic and Statistical Aspects of Quantum Theory*, North Holland, 1982.

弱い観測による増幅について*

古池達彦[†], 田中咲
慶應義塾大学理工学部

概要

Sagnac 干渉系に対する Aharonov-Albert-Vaidman の弱い測定を利用した増幅 [P. B. Dixon et al., Phys. Rev. Lett. 102, 173601 (2009)] に対し, 非測定系と測定器の結合の強さについて全てのオーダーを含む解析を行う. この「増幅器」は微小な鏡の傾きを, レーザービームの大きな横方向変位に変換するものである. 従来の結合定数について線形の解析では, 増幅率が任意に大きくできるとされていたが, これが正しくないことを示す. また, 実際に行われた実験について非線形効果を具体的に比較し, 実験の改善を行う場合に非線形解析が必要になることを示す.

1 序論

量子力学における通常の測定理論では, 被測定系に対して観測を行った結果, 一定の確率にしたがって測定値と測定後の量子力学的状態を得る [2, 3, 4, 5]. 一方, Aharonov, Albert, Vaidman (AAV) [6] は, 今日「AAV の弱い測定」(以下では単に「弱測定」と呼ぶ)と呼ばれる測定を提案した. これは, 被測定系に対して, 事前選択 (pre-selection) のみならず事後選択 (post-selection) も行うことが特徴である. まず, 測定者は被測定系の初期状態 $|i\rangle$ を準備する. また, 測定器の初期状態を $|\Phi_i\rangle$ とする. 被測定系と測定器の間に一定の相互作用を行わせたのち, 被測定系の状態 $|f\rangle$ を事後選択する. 測定する被測定系のオブザーバブルを A とすると, A の「弱い値」(または「弱値」)を

$$A_w := \frac{\langle f|A|i\rangle}{\langle f|i\rangle}. \quad (1)$$

で定義することができる.

弱値は奇妙な性質を持つ. まず, A_w は A の固有値の範囲より外側の値をとりうる. さらに, A_w は複素数にもなりえる. 特に, (1) から, $|i\rangle$ と $|f\rangle$ がほぼ垂直のとき, 弱値 A_w の絶対値がいくらかでも大きくなるのがすぐにわかる. すなわち, **弱測定により事後選択の成功確率を犠牲にして物理量の大きな値が得られる**, と標語的に言うことができる.

近年, 弱測定はこの性質が精密測定に応用されつつある. Hosten と Kwiat [7] は, 光線の微小な変位を弱測定で増幅し, 光のスピン Hall 効果の測定に成功した. Dixon ら [8] は,

*この講演は論文 [1] の研究に基づいている.

[†]電子メールアドレス: koike@phys.keio.ac.jp.

Sagnac 干渉系の鏡の 400frad の傾きを検出した。それらの実験では、測定値はそれぞれある物理量 A の弱値 (1) に比例している。したがって、原理的には増幅率はいくらでも大きくできることになる。しかし、これらの解析が立脚している弱測定の通常の議論は、被測定系と測定器の間の結合定数が小さいとした線形近似を用いている。はたして、増幅率は実際にいくらでも大きくなるのであろうか？ これを知るために、我々は弱測定の完全な解析を行う。関連する研究として、最近 Wu と Li [9] は Jozsa [10] による線形レベルの一般論を非線形に拡張し、形式的べき展開による議論を行っている。また、非線形部分の効果を簡単なモデルで議論している。

我々は Sagnac 干渉系での弱測定による増幅効果について、被測定系と測定器の結合定数について全オーダーの解析を行う。増幅率に限界があること、すなわち、**事後選択の成功確率を犠牲にしても、いくらでも大きな増幅率が得られるわけではない**ことを示す。また、既存の実験でも非線形効果の兆候が現れていること、および今後の改善された実験においては非線形解析が必要であることを示す。

2 Sagnac 干渉系を用いた増幅

この節では、Dixon ら [8] の Sagnac 干渉系を用いた精密測定について振り返る。これは、光子がどの経路を通るかという自由度を被測定系、ビームの横方向へのずれを測定器とする弱測定を利用したものである。

図1のように、入力ビームはまず、時計回り $|\odot\rangle$ および反時計回り $|\ominus\rangle$ の経路に分離される。ビームは1周して再びビームスプリッターに戻る。他の素子がなければ、ビームは全て入力と同じポートに出力される (bright port と呼ばれる。他方は dark port と呼ばれる)。ところが、もしも2つの経路のビームの間に位相差があると、dark port にも光子が出てくる。実際には、これは以下のように行われる。まず、偏光版 (P) によって入力ビームを全て水平偏光にする。次に、半波長板 (HWP) によって偏光を垂直に変換する。一方で、Soleil-Babinet 補償版 (SBC) によって水平偏光と垂直偏光のビームに位相差をつける。時計回りと反時計回りのビームで、HWP と SBC を通過する順序が異なるため、時計回りと反時計回りのビームの間に位相差 ϕ が生じる。最後に、dark port において、ビームの横方向変位 x を測定し、その期待値 $\langle x \rangle$ を得る。この方法により、Piezo 素子 (PA) を取り付けられた鏡の微小な傾きから大きな $\langle x \rangle$ を得ることができ、傾きの精密測定が可能となる。

経路自由度 (被測定系) の初期状態は、

$$|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i\phi/2}|\odot\rangle + ie^{i\phi/2}|\ominus\rangle) \quad (2)$$

で与えられる。上述の通り、 $\phi = 0$ のとき dark port は完全に暗くなる。横方向変位 (測定器) の初期状態は、

$$|\Phi_i\rangle = \int dx |x\rangle \Phi_i(x) \quad (3)$$

である。全系の初期状態は、

$$|\Psi_i\rangle = |\Phi_i\rangle |i\rangle \quad (4)$$

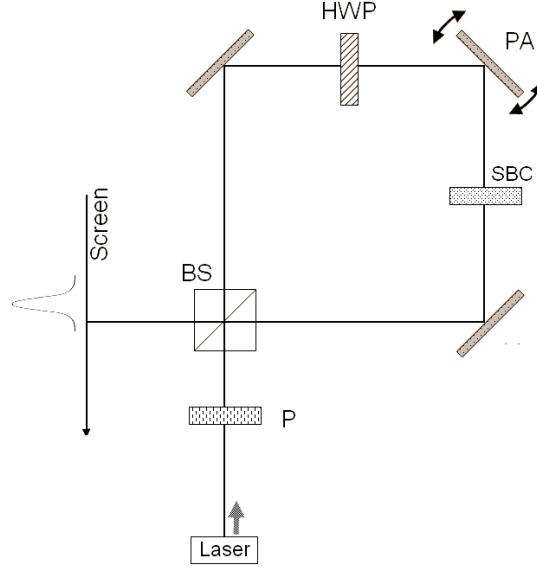


図 1: Sagnac 干渉系による増幅器.

である. 鏡の傾げにより, ビームには $\pm k$ の運動量が与えられる. 符号はビームの経路によっている. この効果はユニタリ作用素 e^{-ikxA} で記述することができる. ただし, $A := |\circ\rangle\langle\circ| - |\circ\rangle\langle\circ|$ は経路を区別する作用素である.

被測定系 (経路自由度) に対する事後選択は, dark port のみのビーム

$$|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(i|\circ\rangle + |\circ\rangle) \quad (5)$$

である. このとき, 測定器 (ビームの変位) の終状態は,

$$|\Phi_f\rangle = \langle f|\Psi\rangle = \int dx|x\rangle\Phi_i(x)\langle f|e^{-ikxA}|i\rangle \quad (6)$$

で与えられる. 弱測定の通常の議論では, 上式に現れる項 $\langle f|e^{-ikxA}|i\rangle$ を展開し, $\langle f|A|i\rangle$ を弱値 A_w で表したのち, 再び指数関数の形にまとめる:

$$\langle f|e^{-ikxA}|i\rangle \simeq \langle f|i\rangle(1 - ikxA_w) \simeq \langle f|i\rangle e^{-ikxA_w}. \quad (7)$$

これより,

$$|\Phi_f\rangle \simeq \langle f|i\rangle \int dx|x\rangle\Phi_i(x)e^{-ikxA_w} \quad (8)$$

となる. ゆえに, 測定器の読みの期待値は,

$$\langle x\rangle = \frac{\langle \Phi_f|x|\Phi_f\rangle}{\langle \Phi_f|\Phi_f\rangle} \simeq 2ka^2\text{Im}A_w = 2ka^2 \cot \frac{\phi}{2}, \quad (9)$$

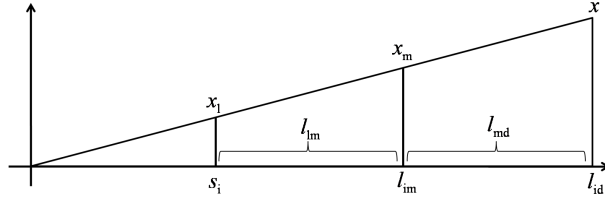


図 2: 経路長に関する記号の定義. 左の点から, 像, レンズ, 鏡, 測定器である. 鏡はレンズから測定器への経路を $l_{lm} : l_{md}$ の比で分割している.

となる. ここで, $a = \sqrt{\langle x^2 \rangle_i}$ は入力ビームの半径, $\langle \bullet \rangle_i$ は初期状態に関する期待値である. ただし, 簡単のため $\Phi_i(x)$ は偶関数であると仮定した. また, $A_w = i \cot \frac{\phi}{2}$ であることを用いた. 実際の実験 [8] ではビームの広がりがあるため, (9) の結果は,

$$\langle x \rangle = 2k\sigma[(1 - \gamma)a + \gamma\sigma] \text{Im}A_w, \quad \gamma := \frac{l_{lm}}{l_{lm} + l_{md}}, \quad (10)$$

と修正される. ただし, l_{lm} および l_{md} はそれぞれ, レンズ-鏡間および鏡-検出器間の経路長である (図 2). また, σ は検出器の位置におけるビーム半径である. この結果 (10) は [10] の結果と整合している. すなわち, 相互作用ハミルトニアンが xA で与えられるとき, (係数を除いて) 弱値の虚部が x のずれを与える.

Dixon らは増幅率を,

$$\mathcal{A} = \frac{|\langle x \rangle|}{\delta} \quad (11)$$

で定義した. すなわち, 干渉系があるときの変位 $\langle x \rangle$ と, ないときの変位 δ の比である. ここで, δ は, レーザーの波数を k_0 として, $\delta = kl_{md}/k_0$ で与えられる. (10) より, $\langle x \rangle$ および増幅率 \mathcal{A} はともに弱値 (1) に比例する. したがって, 初期状態と事後選択状態が直交する極限 $\phi \rightarrow 0$ で, これらの値は発散する. もちろんその際には $|\langle f|i \rangle|^2 = \sin^2 \frac{\phi}{2}$ に比例する出力ビームの強度は限りなく小さくなり, 実験は非常に困難になる. しかしそれを除くと, 原理的には, $\langle x \rangle$ と増幅率 \mathcal{A} はいくらでも大きくできると結露される.

あとの節では, 弱測定の実験結果が実際には弱値からどのようにずれるかを計算する. そして, $\langle x \rangle$ と \mathcal{A} は, 実際は $\langle f|i \rangle \rightarrow 0$ の極限でも発散しないことを示す.

3 非線形効果

この節では, k の全オーダーを含んだ計算を行い, 増幅された変位 $\langle x \rangle$ と増幅率 \mathcal{A} を求めよう. ビームが広がっていく一般の場合を考える. なお, ここで行う計算はやや直感的なものである. 同じ結論 (20) を導くより正統的な方法による計算は, 論文 [1] の付録を参照されたい.

さて, ビームの, レンズ, 鏡, 測定器の位置での横変位を, x_l, x_m, x とする (図 2). このとき, 像距離を s_i , 像-鏡間経路長を l_{im} , 像-測定器間経路長を l_{id} とすると,

$$\frac{x_l}{s_i} = \frac{x_m}{l_{im}} = \frac{x}{l_{id}}, \quad (12)$$

が成り立つ. 初期状態における x_ℓ , x_m , x の分散を, それぞれ, a^2 , a_m^2 , σ^2 としよう. す
ると,

$$\frac{x_\ell}{a} = \frac{x_m}{a_m} = \frac{x}{\sigma} \quad (13)$$

および,

$$a_m = (1 - \gamma)a + \gamma\sigma \quad (14)$$

が成り立つ. 状態の非自明な発展は傾いだ鏡によって生じるため, 計算においては座標と
して x_m を用いるのが便利である.

初期状態は,

$$|\Psi_i\rangle = |\Phi_i\rangle|i\rangle, \quad |\Phi_i\rangle = \int dx_m |x_m\rangle \Phi_{m,i}(x_m), \quad (15)$$

で与えられる. ただし, $\Phi_{m,i}(x_m)$ は鏡の位置における初期波動関数である. [レンズ位置に
おける波動関数 $\Phi_{\ell,i}(x_\ell)$ との関係は, $\Phi_{m,i}(x_m) = \Phi_{\ell,i}(x_\ell) = \Phi_{\ell,i}(s_i x_m / l_{im})$ で与えられる.]
光子は鏡の位置で横方向の運動量を得る. 状態変化はユニタリ作用素 $e^{-ikx_m A}$ で記述され,
全系の状態は,

$$|\Psi\rangle = \int dx_m |x_m\rangle \Phi_{m,i}(x_m) e^{-ikx_m A} |i\rangle. \quad (16)$$

となる. 状態 $|f\rangle$ への事後選択を行ったあとの測定器の状態は,

$$|\Phi_f\rangle = \langle f | \Psi \rangle = \int dx_m |x_m\rangle \Phi_{m,i}(x_m) \langle f | e^{-ikx_m A} |i\rangle, \quad (17)$$

である. ただし, 規格化を行っていない. A がべき単, すなわち $A^2 = 1$ の性質を持つため,
 $\langle f | e^{-ikx_m A} |i\rangle$ の計算は厳密に実行できて,

$$\begin{aligned} & \langle f | e^{-ikx_m A} |i\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ikx_m)^{2n}}{(2n)!} \langle f | i \rangle + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ikx_m)^{2n+1}}{(2n+1)!} \langle f | A | i \rangle \\ &= \langle f | i \rangle (\cos kx_m - iA_w \sin kx_m) \end{aligned} \quad (18)$$

となる. (17), (18) より,

$$\langle x_m^n \rangle = \frac{\langle \Phi_f | x_m^n | \Phi_f \rangle}{\langle \Phi_f | \Phi_f \rangle} = \frac{\langle x_m^n | \cos kx_m - iA_w \sin kx_m |^2 \rangle_i}{\langle | \cos kx_m - iA_w \sin kx_m |^2 \rangle_i}. \quad (19)$$

これより, x の任意のモーメントの期待値が

$$\begin{aligned} \langle x^n \rangle &= \left(\frac{\sigma}{a_m} \right)^n \langle x_m^n \rangle = \left(\frac{\sigma}{a_m} \right)^n \\ &\cdot \frac{\alpha_+ \langle x_m^n \rangle_i + \alpha_- \langle x_m^n \cos 2kx_m \rangle_i + \text{Im} A_w \langle x_m^n \sin 2kx_m \rangle_i}{\alpha_+ + \alpha_- \langle \cos 2kx_m \rangle_i + \text{Im} A_w \langle \sin 2kx_m \rangle_i}, \end{aligned} \quad (20)$$

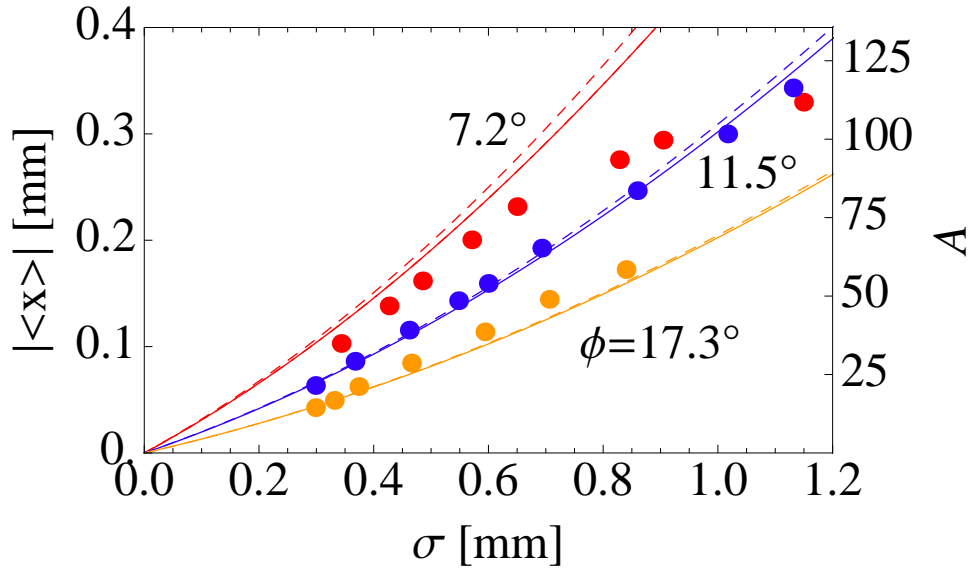


図 3: 横方向変位 $|\langle x \rangle|$ と増幅率 \mathcal{A} の、検出器におけるビーム半径 σ に対する振舞い. 点は Dixon [8] らによる実験値. 実線は非線形解析 (21), 破線は線形解析 (10) によるもの.

で与えられる. ただし, $\alpha_{\pm} := (1 \pm |A_w|^2)/2$ である. 変位の期待値 $\langle x \rangle$ は (20) で $n = 1$ としたもので与えられる. 増幅率は, その $\langle x \rangle$ を用いて (11) で与えられる.

今のモデルでは, 弱値は純虚数であった: $A_w = i \cot \frac{\phi}{2}$. 以下では簡単のため, $|\Phi_{m,i}(x_m)|^2$ が偶関数であると仮定する. このとき, (20) より, 期待値は単純な形になる:

$$\langle x \rangle = \frac{\sigma}{a_m} \frac{\sin \phi \langle x_m \sin 2kx_m \rangle_i}{1 - \cos \phi \langle \cos 2kx_m \rangle_i}. \quad (21)$$

これは, (すぐ上の仮定を満たす) 任意の $\Phi_{m,i}(x_m)$ について, 弱測定による測定値の期待値を与える表式である. なお, k の最低次では (21) は $\langle x \rangle = 2ka_m\sigma \cot \frac{\phi}{2}$ となり, Dixon らの結果 (10) と一致する.

位相差 ϕ を変化させたときの $|\langle x \rangle|$ の最大値は, (21) より,

$$|\langle x \rangle|_{\max} = \frac{\sigma}{a_m} \frac{\langle x_m \sin 2kx_m \rangle_i}{\sqrt{1 - \langle \cos 2kx_m \rangle_i^2}} \quad (22)$$

である. これは, $\cos \phi = \langle \cos 2kx_m \rangle_i$ となるとき実現される. 特に, ka_m が小さいときは, (22) より,

$$|\langle x \rangle|_{\max} = \sigma + O(ka_m)^2 \quad (23)$$

となる. 線形解析では出力ビームの強度が 0 になる極限 ($\phi \rightarrow 0$) で横変位 $|\langle x \rangle|$ と増幅率 \mathcal{A} はともに発散した. 一方, 全オーダーを含めた結果では, (21) より, 事前・事後選択状態が直交する極限においても, 横変位 $|\langle x \rangle|$ と増幅率 \mathcal{A} はともに有限であることがわかる. 実際, そのときいずれも 0 となる. また, 横変位 $|\langle x \rangle|$ と増幅率 \mathcal{A} には上限 (22) が存在する.

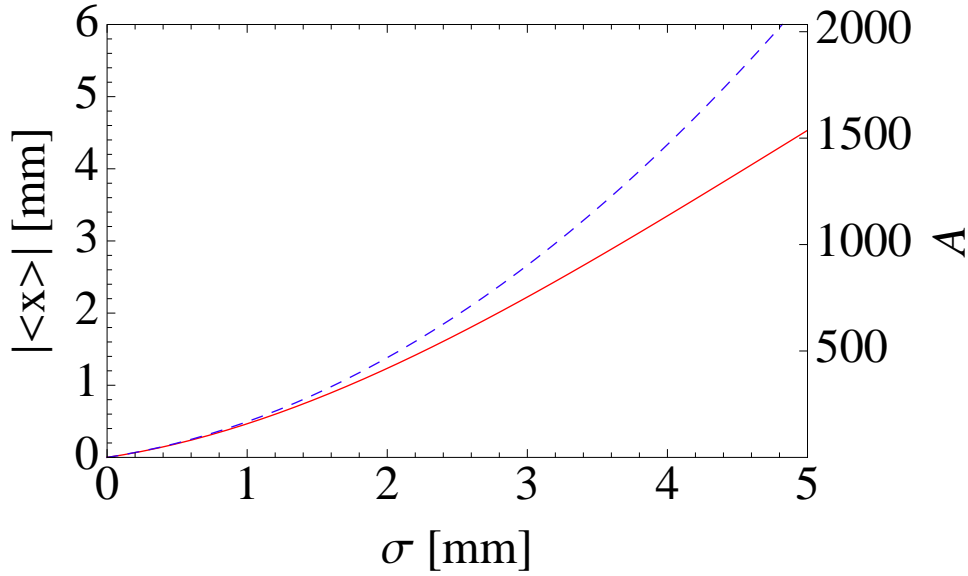


図 4: 図 3 の $\phi = 7.2^\circ$ の場合を, さらに大きなスケールまで表示したもの. 実線は非線形解析 (21), 破線は線形解析 (10) によるもの.

$\langle x \rangle$ や $|\langle x \rangle|_{\max}$ を具体的に評価して実験と比較するため, 実験では初期波動関数がガウス型であったと仮定しよう:

$$|\Phi_{m,i}(x_m)|^2 = \frac{e^{-x^2/2a_m^2}}{\sqrt{2\pi} a_m}. \quad (24)$$

このとき, $\langle \cos 2kx_m \rangle_i = e^{-2(ka_m)^2}$ および $\langle x_m \sin 2kx_m \rangle_i = 2ka_m^2 e^{-2(ka_m)^2}$ より,

$$\langle x \rangle = \frac{2ka_m \sigma \sin \phi}{e^{2(ka_m)^2} - \cos \phi}, \quad (25)$$

$$|\langle x \rangle|_{\max} = \frac{2ka_m \sigma}{\sqrt{e^{4(ka_m)^2} - 1}} \quad \text{at } \cos \phi = e^{-2(ka_m)^2} \quad (26)$$

を得る. ただし, $a_m = (1 - \gamma)a + \gamma\sigma$ であった.

図 3 (25) で与えられた測定値の絶対値 $|\langle x \rangle|$ を測定器の位置でのビーム半径 σ の関数としてグラフにしたものである. パラメータは, 行われた実験 [8] の図 2 と合わせた: $a = 640\mu\text{m}$, $\gamma = 0.296$, $k = 20.8\text{m}^{-1}$. 位相差 ϕ が大きいとき, 非線形解析 (21) と線形解析 (10) による $|\langle x \rangle|$ の差異は小さい. 位相差 ϕ が小さいとき, 非線形解析 (21) の方が実験値に近いが, 十分合っていない. このことは, 実験で用いられた光学系のより詳細な解析が必要であることを示唆している. 参考のため, 同じ条件で, ビーム半径 σ がさらに大きいとしたときの計算結果を図 4 に示した. [8] の設定では, $\sigma \gtrsim 1\text{-}2\text{ mm}$ で非線形効果が顕著になることがわかる. 増幅率で見ると, それは数百程度で非線形効果が顕著になる.

図 5 は $|\langle x \rangle|$ と A を位相差 ϕ の関数として描いたものである. 典型的な値 $\sigma = 500\mu\text{m}$ を選んだ. 事前・事後選択状態が直交する極限 $\phi \rightarrow 0$ において, 線形解析で $\langle x \rangle$ が発散するのに対し, 非線形解析では 0 となることが確認できる. また, (23) または (26) が示す通

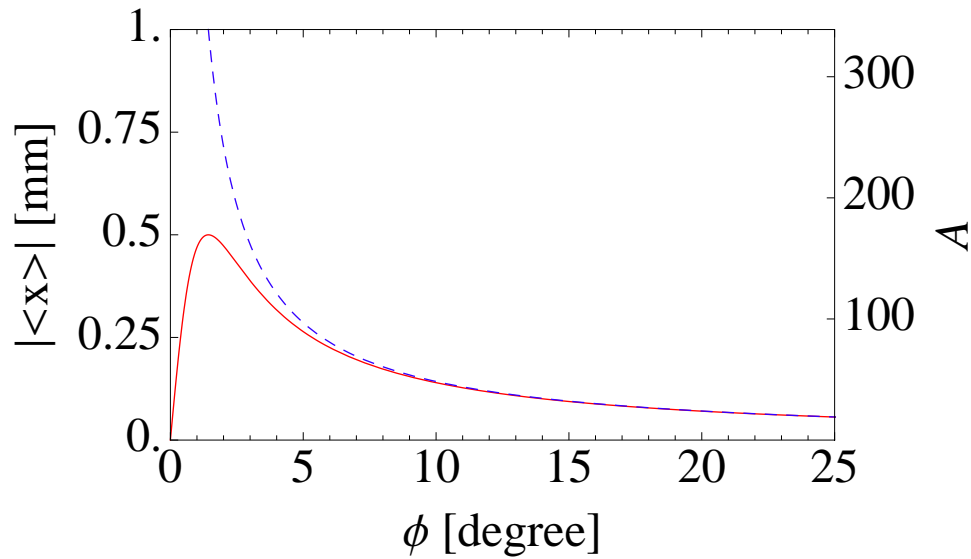


図 5: 横方向変位 $|\langle x \rangle|$ と増幅率 A の, 位相差 ϕ に対する振舞い. 実線は非線形解析 (21), 破線は線形解析 (10) によるもの.

り, $|\langle x \rangle|_{\max} \simeq \sigma$ であることも確認できる. さらに, 実際の実験 [8] における最小の位相差 $\phi = 7.2^\circ$ は, 線形解析が有効な限界にあることがわかる. これより小さな位相差では, 元の鏡の傾げを評価するために非線形解析を行う必要がある.

4 まとめ

Sagnac 干渉系における弱測定を用いた増幅に対し, 結合定数の全オーダーの解析を行った. 従来の線形解析では, 測定値 $\langle x \rangle$ は弱値に比例し, 事前・事後選択状態が直交する極限で発散した. すなわち, 事後選択の成功確率を犠牲にして, 増幅率を稼ぐことができた. しかし, 非線形の部分を含めた解析では, これは正しくないことがわかった. すなわち, 同じ極限で増幅率は 0 となった. また, 増幅率には上限があった. さらに, 現在の実験を少しでも改善した場合には, 非線形解析が必要であることもわかった. 現実的な実験の設定では, これは増幅率 A がおよそ 100 を越えたあたりで起こる.

参考文献

- [1] T. Koike and S. Tanaka, Phys. Rev. A 84, 062106 (2011).
- [2] J. von Neumann, *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik* (Springer, Berlin, 1932), *Mathematical foundations of quantum mechanics* (Princeton University Press, Princeton, NJ, 1955).
- [3] K. Kraus, Ann. Phys. 64, 311–335 (1971).

- [4] E. B. Davies and J. T. Lewis, *Commun. Math. Phys.* 17, 239–260 (1970).
- [5] M. Ozawa, *J. Math. Phys.* 25, 79–87 (1984).
- [6] Y. Aharonov, D. Z. Albert, and L. Vaidman, *Phys. Rev. Lett.* 60, 1351 (1988); see also Y. Aharonov, D. Rohrlich, *Quantum Paradoxes: Quantum Theory for the Perplexed* (Wiley-VCH, 2005). *J. Phys. A: Math. Theor.* 43 (2010) 385307.
- [7] O. Hosten and P. Kwiat, *Science* 319, 787 (2008).
- [8] P. B. Dixon, D. J. Starling, A. N. Jordan, and J. C. Howell, *Phys. Rev. Lett.* 102, 173601 (2009).
- [9] S. Wu and Y. Li, *Phys. Rev. A* 83, 052106 (2011).
- [10] R. Jozsa, *Phys. Rev. A* 76, 044103 (2007).

Born の公式から大偏差原理へ

京都大学数理解析研究所 小嶋 泉* , 岡村 和弥 †
長浜バイオ大学 西郷 甲矢人 ‡ .

1 導入：統計科学としての物理学と再現性・法則

非決定性・確率論的記述が量子論という名で物理学の表舞台に降り立ってから、もはや人の寿命を超えるほどの歳月が経った。それに内在する非決定性は多くの人々にとって魅力である一方、とても受け入れ難いと考える人たちがいるのも事実である。受け入れにくさの原因は人それぞれだろうが、物理学という学問に限定した場合には、古典物理学での天体運動に代表される質点系の力学、マクロな熱的物体の状態変化を扱う熱力学、および、電気回路と電磁場を扱う電磁気学をはじめとする対象の記述において、ある時点での物理量の初期値 (初期状態) を指定すれば検証可能な時点での物理量の値もしくは (終) 状態が決定される という (経験的・理論的) 事実とそれに由来する強固な決定論的イメージがあるからであろう。このイメージそれ自体も (量子論の短い歴史とは比較にならない) 幾世代にも亘る膨大な年月の末に定着したもので、決して自明なものではないが、もはやそれらが適用不能な現象に我々が直面してしまったのである。そのことを受け容れてもなお、対象について何がしかの決定論的言明・帰結を述べずにはおれないのは人情ということかもしれない。

物理学を離れて、非決定性と向き合っている主な学問は何であろうか？ 著者ならば迷わず統計学を挙げる。統計学は人文・社会学分野から、医学・薬学、そして、生物学を代表とする自然科学分野と産業技術の基盤となる工学までの非常に広い分野で、主役から影武者・懐刀まで場面ごとに何役もこなす。はじめに断っておきたいことは、大学教養教育での統計学のようにいつでもどこでも二項分布、正規分布や Poisson 分布のようなものばかりを扱っているのではなく、解析対象に根ざした方法論が諸分野での統計的手法として培われている。統計学自体にも一定の普遍性を求める 必要性はあるが、考察する対象を大きく分類して、その一分類の中で考察対象から何かしらの結論を得るために 組み込まれるべきデータ解析の基盤として統計学を捉えるのが適切であろう。非決定性に正面から挑むべき物理学は統計学から学ぶべき理念・方法論ともに多く、統計学との関係性を深める作業は物理学にとって非常に 将来性のある方向性であると考え¹。

では現実的・具体的にどのような出発点から議論を展開し、いかなる手段を用いるべきであるかが問題となる。本稿の対象である量子論に限定して²具体化を試みよう。まず要点は、

*ojima@kurims.kyoto-u.ac.jp

†発表者, kazuqi@kurims.kyoto-u.ac.jp

‡h_saigoh@nagahama-i-bio.ac.jp

¹これは同時に、統計学的手法を鵜呑みにするのではなく新たに方法論を開発し、旧来の統計学の方法論を再検証する機会となる。近年情報理論と物理学の関係が叫ばれて久しいが、情報理論、特に、通信理論の基礎は確率論と統計学の基盤の上に成立しており、物理過程である通信過程の解析に統計的手法の関与する余地は大きい。尚、量子通信において通信路推定の議論がなされている。

²込み入った議論の中に量子論特有なものもあり、敢えてこのように限定する形をとった。領分を弁えた議論を心がけるためにも必要な選択であると考えているが、実際はどの程度の制約になっているだろうか。

量子論で扱う対象は元来非決定性を有し，測定器のメーターの値などデータのレベルにおける確率論的記述は避けられない³，

という事実を認めるに尽きる。この言明には，測定器と対象系を物理系として分けて考察すべし，という側面と，データのレベルでの確率論的記述と対象系の振舞・在り方とを一旦切り分ける，という側面がある⁴。これらについては次章以降で詳しく議論しよう。そのような前提においても対象系の記述が可能であるために，事象同定における“5W1H”＝「いつ・どこで」・「誰が」・「何を」・「なぜ・どうした」，をヒントにしてどのような記述形式が必要であるかを捉えていこう [35]：

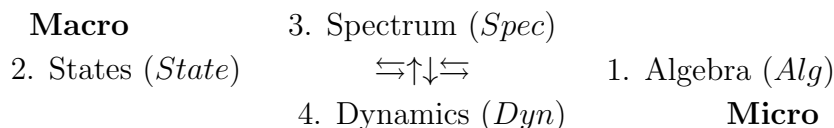
1. 「何が (“誰” が)」 → 運動・作用の“主役”としての物理系の同定，
2. 「何を・どうした」 → 作用対象の在り方とその変化，
3. 「いつ・どこで」 → 「事象」の時空的局在化 (= “座標付け”)，
4. 「どのように・なぜ」 → 動力学と解釈・意味論。

1. については，突き詰めれば“誰”とは形容しがたくナニモノにもなれない対象を相手にするのだから，物理量の代数 (algebra) を指定することによって“誰”と呼ばれる対象系が確定したとみなす。次に，2. であるが，こちらは作用対象の在り方とその変化であり，その変化とは測定器等でマクロに確認可能なもののみで指定されるべきものである。この位置は系の状態 (state) が占めるとするのが妥当である。より正確には状態はミクロとマクロのインターフェイスであり，“セクター”をマクロの一単位と規定することで動的かつ不可視のミクロ (= セクター内部) とデータのレベルに現れるマクロ (= セクター間) の往復を可能とする。物理的・実験的状況ごとにデータとして現れるものは違うが，この事実をセクターの変化として実にうまく数学的にも表現し，「何を・どうした」を説明する役割を果たす。そして，3. については，対象が生み出す事象の時空での局在化を記述する。時空は物理学の記述においてあらゆる対象の記述に登場することは周知であろう。この事実はあたかも対象から切り離しても時空が存在するようなイメージを与えがちだが，時空が普遍的な分類空間 (spectrum) の役割を果たす故に可能な記述形態の帰結であり，決して物理的自由度抜きに時空が物理的実体を持つわけではない，ということを忘れてはならない。物理的な対象の記述において不可欠な分類指標として機能する自由度を付与した際，解析の出発点において抽象的数学的概念でしかなかった時空が，その自由度を通じて理解・解釈可能な状況が物理的に形成されるということが時空“創発”の現実的意味である。最後に 4. であるが，対象の変化の法則性に直結する動力学 (dynamics) に 1, から 3. の記述形式の意味を求めるのは自然であり，我々のアプローチからは最後に

³理論記述の出発点もしくは一定の到達点において確率論的記述が必要ということである。付け加えれば，慣例的に言われてきたように“解釈”として理論に付与するものではなく，データ解析・処理と不可分な記述形式として位置づけるのである。

⁴太字で表した一側面が測度論的な確率論的記述と量子論の記述のギャップをもたらす要因に対して理念的に迫っているように思われる。測度論的な確率論による物理学の記述が単に安直であった，ということでは決して終わらない。後に状態の概念の介在と量子測定理論の議論によってこのギャップがしっかりと埋められる。

到達可能なもののはずである。4. の在り様には別の観点から次のようにも言及できる：存在論的には出発点にあるべき動力学を，認識論的には（本質的に非決定性が支配する状況下で available な限られた種類のデータのみでは原理的に同定不能のため）我々の議論の出発点に採用し得る可能性は乏しい。「どのように・なぜ」に対する説明は「誰」が以上の根源的な難しさを備えていると同時に，要求される解答のレベルも当然高くなる。これら“5W1H”に対応する概念は現実の系でも確かに見出される。以上の議論は次の4項図式としてまとめられる：



この図式の重要性は，先の議論では逐次定義した図式の各項は単独ではそのあり方が危うく，解釈に多義性・“不確定性”が伴いうるが，それらが相互補完しあってひとまとまりの系を構成すれば，そこから現実的な解釈可能性がもたらされるというところにある。この図式は垂直方向と水平方向の2つのミクロ・マクロ双対性 [17] を同時に表現するものだという点に注意して頂きたい。

ただし，上の4項図式に則った物理系の記述・解析にも常に有限試行・有限精度の制約がつきまとい，No-Go 定理である次の逆理に直面する。

Duhem-Quine の逆理 [19]：測定量の試行回数と実験精度の有限性のため，
現象データを再現する理論を一意に決定することはできない。

この逆理の意味は，試行回数・精度と無関係に理論の一意性はなく，この制約ゆえに対象とする系に対して，その存在，在り様について，絶対的なものの言い方をしても意味がない，ということである。有限試行・有限精度という現実的制約から「試行回数・精度と無関係な」状況はあり得ず，したがって，理論の諸概念に対する位置づけを有限試行・有限精度の条件下で適切に与えられれば Duhem-Quine の逆理と対峙する場面は回避され，こうした意味でこの逆理は解消される。そこにはやはり統計学が登場し，具体的方法を提供する。

確率論および統計学的な記述を物理学，特に量子論の中でより明確に展開するにあたり，再現性と法則(性)⁵に関して議論を深めよう⁶。再現性を出発点に議論をはじめることにする。確率論的な記述法を採る限り，適当な確率測度(分布)を仮定した際，物理量に対応した確率変数の列および族の挙動(i.i.d., (N-)Markov 過程, (局所)マルチンゲールおよび(連立, 超関数値)確率微分方程式等を含む)がその確率測度に従っていることを(ここでは抽象的かつブラックボックスである)統計的処理を介して確認可能であることが暗黙

⁵傾向性と読み替える方が適切な議論が以下続く本段落の議論に含まれている。

⁶本稿では再現性と法則という言葉に分けているが，再現性という言葉はどちらかといえば可視化されたデータとしての3.の分類空間のイメージに直結する状況で用いているのに対し，法則という言葉は4.の動力学のイメージと強く結びついており，動力学に対する知識がもたらす記述形式の必然性および裏付けをその定義と捉えている。物理学を学ぶにあたり，再現性と法則の関係とは理論と実験を結びつけるために必要な，物理量代数と状態の間のミクロ・マクロ双対性に支えられた物理の学問的在り様を支配する理念およびメタのレベルでの双対性そのものであると主張したい。

の前提である。それは物理系においては状態準備という形で、(ある一定の) 時空的な自由度や外部環境に左右されない、対象系と実験装置を含めた実験設定の“ 同等性 ”の要求へと直結する。これを抜きにしては異なる実験環境でのデータを比較することは不可能であり、再現性など到底要求し得るものではない。再現性が担保されなければ、法則を実証・確認する術は失われる。“ 実証不可能な法則 ”など、そう呼ぶに相応しいと判明した時点から、“ 法則 ”という座から既に滑り落ちている。それ故、法則の検証に必要な再現性を保証するための、実験データの“ 同等性 ”を保証する概念が介在しなければならない。その一端を担う顕著な概念が対称性⁷である。並進対称性を代表とする時空に関わる外部対称性は至るところでの実験が同等であるためにも必要であり、その同等性の故に多くの物理量を時空とは無関係に扱う土壌が生まれる。内部対称性には時空のあり方と切り離して扱える部分があり、そのような扱いをする場合には時空とは切り離されたいくつもの実体を想定し、それらが互いに似通っている、もしくは、同等の扱いを受けるべき状況を考える必要がある。その一方で、至るところでの実験が同等であり、いくつもの実体が似通ったものであるとしても、実験をする限りある範囲の時空領域 = “ どこか ”で実際にその実験設定で対象が生み出す変化を測定器を用いて事象としてつかまえない限りは、いくつもの実体を想定することが根拠づけられるためにはそれぞれが異質であるような状況が現実になければならない。それ故、対称性とその破れとは一蓮托生の運命にある。破れた対称性の部分対称性が破れない状況が対称性の自発的破れにおいて考察されるが、その部分対称性さえも破れる状況が現実的な実験設定 (と実験間の相互関係) を考えるにあたって不可欠である。対称性の破れの多様性が、想定された対象が生起すべき現象の多様性へとつながっていることにも関心を向ける必要がある。一方で、自然と思われる実験状況で、法則を前提しない条件下で再現性をもつデータを考えるのは、理解不可能な状況設定である。その再現性を担う対象をどう想定すべきか? なんら法則がないと知りながらそれをする我々の感性・感覚は、モデリングをしながらそのできあがったモデルの意味を問わない状況を想起させ、物理学での法則を問う以前に学問に取り組む姿勢として不可解である。なぜなら、与えられたデータを忠実に模するか生み出すモデルは構成できたが、そのモデル自体はなんら想定すべき対象に関する説明などしていないと端から主張するようなものだからである。したがって、再現性をもつデータを担う対象が何かしら意味を持つのは法則があると主張できるときだけである⁸。

歴史と法則の関係については本報告集の小嶋の [34, 36] により詳しい記述があることを先に断っておく。再現性と法則は宇宙史・科学史をはじめとした歴史においても重要な位置を占める。法則に従っている現象は数多く、この宇宙・世界は法則に従って移り変わる世界観が築かれている。しかし、我々が記述できる宇宙の歴史は一つであるとともに法則

⁷生物学の場合には対称性の代わりに、「生物や細胞等が生存・存在可能な条件」等で置き換えられるべきであると考え。学問ごとに物理学における対称性にとって替わるべき概念はその学問を捉えるべき動機や出発点と強く結びついているはずである。このように見ることが学問的に公平な立場であろう。物理学が人を惹きつける魅力は何であったか (詳細は人それぞれでも、共通していると思われる事項を) 今一度思い出して頂きたい。

⁸この文章の主張に対してある“ 極限 ”をとった先の、“ 普遍的真理 ”というキャッチコピーはこの世界に求めたい理想像を一学問がそれを明らかにする力を持つことを主張し、幾度となく使われることで文字通りの意味すら擦り切れた末の、一種のカルト色を帯びたものであろうか? 現在ではここまでのキャッチコピーを引っさげた人はほぼいないようである。

では捉えきれない様相が歴史の中に確かにある⁹。歴史を遡る方向については、[36]でも指摘された偶々起きた“事象”＝「歴史の“if”」の積み重ねの上に我々は存在し、それ故歴史的な現象・事象の残した痕跡を解析してその事実を受容する他ない。更に言えば、我々の無知さや限界が原因で解明できない現象は勿論あるが、一度として同一の現象などない歴史の流れの中でありふれた法則化できない現象の多くに対しては起きた後の後知恵による説明が関の山で、歴史の中でその現象の果たした役割を問わない限りはそもそも説明にすらなり得ないものに違いない¹⁰。また、科学に限らず一貫したストーリー展開は魅力ある代物だが、その魅力に縛られてそのストーリーを否定する事実を見て見ぬふりというあるまじき行為を無意識にしてしまう可能性は誰にでもある。しかしながら、歴史におけるストーリーの構築に関わるのならば、ストーリー＝モデルであることを認識し、特定のモデルに対する否定的事実とも整合する新しいモデルを構築する作業を絶えず行うことでその危険性から逃れる展望が開ける。宇宙論での宇宙形成シナリオのモデリングについて、以上の観点から欠如している感は否めない。我々の認識は、そもそもそれを支える我々の存在自体も含め、歴史的に形成された偶然の上に成立ち、未来も知りようがない以上、法則・再現性をもつ現象を認識の暫定的土台に据えた上で、“歴史的事象”のそこからのズレを評価する、というアプローチは法則からの逸脱を踏まえた歴史展開の正統的方法論と言うべきではなかろうか¹¹。科学的予測の確実性・不確実性に関わる議論はこの事実を前提としてなされるのでなければ、多くの重要な側面を見落とす恐れがある。人間の営みの一環として物理学研究を行っていく限り、再現性・法則に依った現象の解析、そしてこれを基に法則化できない現象を解析する土壌を養っていくこと、このどちらにも大切な意義があると考えられる。前者ではモデリングと統計的手法を含むデータの解析法の発展とその継承が課題であり、物理学のみではなく異分野との関係も考慮した広い視点に基づく展望を持ち続ける気概が必要であろう。一方の后者は21世紀になった今でも未熟な段階にあることを最後に強調したい。

本題の統計学的な理念・方法論に基づく量子論の定式化についての議論に戻ろう。実験によって仮説が判断される物理学ではどのような定量的な概念もデータとの結びつきなくしては仮想的な概念でしかない、というのが事実であろう。例えば、状態概念は物理量の出力に関係するが、ある実験設定において定まっている状態が実際にどのようなものであるかはデータから推定する他ない。状態概念は確率測度の一般化以上の概念的含意をもち、そして抽象性も高いためしばしばその概念的な重要度に見合わない不適切な扱いを受けるが、無限自由度系を含むあらゆる系で統計学的な推定の対象となることが本稿で示される¹²。ただし測定誤差を含めた誤差論を前提とするため、考慮すべき事項も多く、組み立てられる論理は一見複雑になる。ここでは状態の推定を例として統計的推測に関する理

⁹「この世界が何故あるのか？」という問題に事実上ほぼ等しい「(物理)量と(量を介さない)動力学とは何か？」という物理学上の究極的な問題には答えられないのと同様である。

¹⁰未来での法則化できない現象については、現象の予測はできてもその現象の起こる機構は解明できないはずであり、その現象が明確な意義をもつのはやはり起こった後、すなわち、事後的に歴史の中で問われるときだけであろう。ただし、本段落の議論が科学“技術”に対して当てはまるとは限らない。

¹¹歴史的契機となった研究の紹介からその延長上に成り立つ現代的な解析手法までを科学史の中に位置づけて議論する“Practical Scientific History for Working Physicists”という名を冠する本(現時点で存在したとしても、それは想像とは別物)が将来的に学部教育で必要となるかもしれない。

¹²[21, 23, 37, 38] 等も参照のこと。

念・方法論を掘り下げよう。状態推定は、通常、有限次元パラメータ付きの(統計系)モデルを仮定することによって、パラメータ推定という形に問題を置き換える。物理においては物理的に意味を持つパラメータを推定する状況も考えられるが、必ずしもそうでない純統計学的な場合を一応想定して議論を進める。このようにパラメータ付きのモデルから、実際に物理量を測定して得られたデータを用いて(統計的決定理論の立場から)リスク関数を最小化する状態を構成する。量子論の場合には「物理量の値のデータ」セクター(後述)であって、データの意味と扱いに注意が必要である。経験的に物理学ではデータ数がとても大きいときに仮説の判定を行う。それ故、データ数が大きい状況に適した統計的理論である大標本理論が用いられ、量子論もその例に漏れない。大数の法則および中心極限定理の援用はその最も典型的な場合である。より一般的な枠組みとして、大数の法則を精密化し「基準」状況への収束の速さを判定する関数(レート関数)を導く大偏差原理(large deviation principle)が展開されている¹³。データを用いて構成される確率測度(経験測度)の「基準」となる確率測度への収束レートを測る大偏差型評価は Sanov の定理と呼ばれており、レート関数として相対エントロピーが導かれる。相対エントロピーは擬距離の性質を持ち、確率測度間の乖離度を測る指標となる。尚、大偏差原理は、現代の確率論・統計学において発展的な教育事項かつ主要な研究課題となっている。大標本理論では大偏差原理は推定量の収束等の漸近的振舞いを調べるために用いられ、レート関数による収束の速さの判定は特に重宝される。この文脈で我々が試みたのは、4項図式に則って量子論の諸概念に対する大偏差原理を定式化し、諸概念の統計的妥当性を与える方法を組織化して大偏差戦略(large deviation strategy)という方法論的枠組みの提示、構築で、今後さらにそれを整備、拡張するという課題である。具体的には、大偏差戦略の第2段階として Sanov の定理の量子版を示し、レート関数として量子相対エントロピーが現れることをみた。この結果から、物理的・実験的な状況が指定される毎に状態が定まるとする確率論的・統計学的根拠が明らかにされ、また、量子相対エントロピーの操作的な意味が見出された。ただし、物理的・実験的な状況が指定されるごとに定まっている状態を仮定することはできても、どの状態が“真”であるか、という質問は(状態に限らない多くの概念で)適切ではない。というのも、統計学においては“真”と見做す状態は、仮定した「状態の族」=モデルの全体との関係で相対的に定めるものでしかないからである。現実的には物理的・実験的な状況が指定された時点で具体的に系の状態を指定することはできず、データを見てから“真”と見做す状態(具体形も可能ならば)を想定しており、それと同時にモデルの構築を行って推定を試みる。データを前にすれば“真”と見做す状態も統計的モデルも対等、という考え方をしなければこのような発想は出てこない。そして、モデルが“真”と見做す状態を含むとは限らない(実現不可能と呼ぶ)のが一般的であり、モデルと“真”と見做す状態は虚心坦懐には無関係であることが多い。この議論は単なる抽象論ではなく、実現不可能な場合の推定が今日では機械学習の分野などで益々必要となってきた [29, 30, 31, 39]。最後に、“予測(prediction)”の観点なしには推定して定められる状態の良さの判定は不可能であることを述べたい。推定することで状態は定まるが、もちろんその状態を知って終わりというわけではない、クイズではないのだから。最も肝心なのは、その状態を用いることが物理量の確率分布等の予測にどれほど相応しいものである

¹³中心極限定理のより一般的な定式化は「経験過程論」として研究されている。[28]を参照して頂きたい。

か、ということである。故 赤池弘次氏の言にもあるように「温故知新」としての統計学であって、“timely”に解析対象の構造への理解を深めていくための対象に根ざした解析の一環として統計的手法を用いるのである。当然のことながら、不確実性からは逃れられない。また、データ数が増えれば“真”と見做す状態およびモデルを変更する必要性に迫られるかもしれないが、「温故知新」の観点からは先に用いられていた状態とモデルが不適切であったとは簡単には判定できない。この変更を(絶え間なく続く)「温故知新」の過程の一環であると捉えるべきである。過去に収集したデータを未来の時点で活用する「温故知新」の実践の、時間的に未来方向を強調したものが“予測”である。この「温故知新」の過程の終了は、科学的議論においては決して個人に一任されないことを記憶に留めたい。

本稿では Born の公式の導出をこれまでの確率論および統計学の議論に適合し、しかも量子測定理論における測定の扱いとも一貫して整合するように一新する。そして、Born の公式に関する議論から大偏差原理 (Sanov の定理の量子版) の議論へと自然につながることを示す。4 章では [38] の内容と重複するが、全体像の正確な把握のためにほぼ同一記述ではあるけれども敢えてここに再録した。

2 状態, セクターと状態の(準)中心分解

ここではセクター概念, および任意状態をセクターに分解する(準)中心分解の定義とその活用について論ずる。既に他の機会に述べてきた内容についてはなるべく簡略な記述にとどめよう。詳しくは [17, 21, 23, 37] を参照して頂きたい。

いくつかの作用素環の概念が必要になる。 C^* -代数 \mathcal{X} に対し, \mathcal{X} 上の規格化された正值線型汎関数として定義される \mathcal{X} 上の状態の全体を $E_{\mathcal{X}}$ で表す。状態 $\omega \in E_{\mathcal{X}}$ は, $\omega(X) = \langle \Omega_{\omega} | \pi_{\omega}(X) \Omega_{\omega} \rangle$, ($X \in \mathcal{X}$) を満たす GNS 表現 $(\pi_{\omega}, \mathfrak{H}_{\omega}, \Omega_{\omega})$ に対応した von Neumann 代数 $\pi_{\omega}(\mathcal{X})''$ の中心 $\mathfrak{Z}_{\omega}(\mathcal{X}) := \pi_{\omega}(\mathcal{X})'' \cap \pi_{\omega}(\mathcal{X})' = \mathbb{C}1_{\mathfrak{H}_{\omega}}$ が自明のとき因子状態と呼び, その全体を $F_{\mathcal{X}}$ と書く。 \mathcal{X} の表現を $\pi: \mathcal{X} \rightarrow B(\mathfrak{H})$ として, $\pi(\mathcal{X})''$ の正規状態 ρ によって, $X \in \mathcal{X}$ に対し

$$\omega(X) = \rho(\pi(X)) \quad (1)$$

と表される状態 ω を, π -正規であると言う。 C^* -代数 \mathcal{X} の 2 つの表現 π_1 と π_2 は任意の π_1 -正規状態が π_2 -正規であり, その逆も成立するとき, 準同値と呼ばれ, $\pi_1 \approx \pi_2$ と表される。この準同値は多重度を無視したユニタリ同値と等価であることが知られている。以上の準備の下, セクターの概念を定義する。

定義 1 ([16]). C^* -代数 \mathcal{X} の因子状態の準同値類を \mathcal{X} のセクターと呼ぶ。

異なるセクター π_1, π_2 間にはゼロでない繋絡作用素 (intertwiner) T が存在しない, すなわち, $T\pi_1(X) = \pi_2(X)T \Rightarrow T = 0$ ($X \in \mathcal{X}$) であるから, この 2 つの表現を繋ぐ非対角項が存在せず互いに移りあうことはない。このように定義したセクターの物理的意味は次のように言い表される:

セクターは熱力学的な相概念を一般化することにより,
マクロな分類指標として状態の基本単位を構成する。

セクターの系統的活用がなければ、こうした意味づけも単なる抽象論に終わるところだが、与えられた任意状態をセクターに一意的に(積分)分解することが常に可能で、しかもその分解は物理的に有用な解釈を持つ。それを支える数学的機構を説明するため、必要最小限の準備を行う。

定義 2. $\omega_1, \omega_2 \in \mathcal{X}_+^*$ が次の等価な 3 つの条件を満たすとき、 ω_1 と ω_2 は直交すると言われ、 $\omega_1 \perp \omega_2$ と表す:

1. $\omega' \in \mathcal{X}_+^*$ に対し $\omega' \leq \omega_1$ かつ $\omega' \leq \omega_2$ ならば $\omega' = 0$ である;
2. $\omega_1(X) = \langle P\Omega_\omega | \pi_\omega(X)\Omega_\omega \rangle$ かつ $\omega_2(X) = \langle (1-P)\Omega_\omega | \pi_\omega(X)\Omega_\omega \rangle$ となる射影作用素 $P \in \pi_\omega(\mathcal{X})'$ が存在する;
3. $\omega = \omega_1 + \omega_2$ に伴う表現は ω_1, ω_2 それぞれに伴う表現の直和となる,

$$\mathfrak{H}_\omega = \mathfrak{H}_{\omega_1} \oplus \mathfrak{H}_{\omega_2}, \quad \pi_\omega = \pi_{\omega_1} \oplus \pi_{\omega_2}, \quad \Omega_\omega = \Omega_{\omega_1} \oplus \Omega_{\omega_2}.$$

定義 3. $E_\mathcal{X}$ 上の正則 Borel 測度 μ は任意の Borel 集合 $S \subset E_\mathcal{X}$ に対し、

$$\left(\int_S d\mu(\rho) \rho \right) \perp \left(\int_{E_\mathcal{X} \setminus S} d\mu(\rho) \rho \right), \quad (2)$$

を満たすとき、 $E_\mathcal{X}$ 上の直交測度と呼ぶ。

次の定理が状態の分解の要となる。

定理 1 (冨田分解定理: [3] 参照). \mathcal{X} を C^* -代数とし、 ω を \mathcal{X} 上の状態とする。次の 3 つの集合に一対一対応が存在する:

- (1) 直交測度 $\mu \in M_\omega(E_\mathcal{X})$;
- (2) 可換 von Neumann 代数 $\mathfrak{B} \subseteq \pi_\omega(\mathcal{X})'$;
- (3) \mathfrak{H}_ω 上の射影作用素 P で、 $P\Omega_\omega = \Omega_\omega$, $P\pi_\omega(\mathcal{X})P \subseteq \{\mathfrak{B}\Omega_\omega\}'$ を満たす。

μ, \mathfrak{B}, P の間に上の対応があるとき、次を満たす:

- (1) $\mathfrak{B} = \{\pi_\omega(\mathcal{X}) \cup P\}'$;
- (2) $P = [\mathfrak{B}\Omega_\omega]$;
- (3) $\mu(\widehat{X}_1 \widehat{X}_2 \cdots \widehat{X}_n) = \langle \Omega_\omega | \pi_\omega(X_1) P \pi_\omega(X_2) P \cdots P \pi_\omega(X_n) \Omega_\omega \rangle$;
- (4) \mathfrak{B} は $\langle \Omega_\omega | \kappa_\mu(f) \pi_\omega(X) \Omega_\omega \rangle = \int d\mu(\rho) f(\rho) \widehat{X}(\rho)$ で定義される写像 $L^\infty(\mu) := L^\infty(E_\mathcal{X}, \mu) \ni f \mapsto \kappa_\mu(f) \in \pi_\omega(\mathcal{X})'$ の像に $*$ -同型であり、 $X, Y \in \mathcal{X}$ に対し

$$\kappa_\mu(\widehat{X}) \pi_\omega(Y) \Omega_\omega = \pi_\omega(Y) P \pi_\omega(X) \Omega_\omega$$

が成立する。

上の測度 μ は状態 ω の重心測度と呼ばれ、一方、状態 ω を μ の重心と呼び、 $b(\mu)$ と表す。そして、 ω を重心とする $E_\mathcal{X}$ 上の直交確率測度 μ の集合を $\mathcal{O}_\omega(E_\mathcal{X})$ と表す。また、上の定理において、可換 von Neumann 代数 \mathfrak{B} に対応する測度 μ を $\mu_{\omega, \mathfrak{B}}$ と表す。

定義 4. $\mu \in \mathcal{O}_\omega(E_\mathcal{X})$ に対応する可換 von Neumann 代数 \mathfrak{B} が ω の GNS 表現 π_ω の中心 $\mathfrak{Z}_\omega(\mathcal{X})$ の部分 von Neumann 代数であるとき、 μ を ω の準中心測度と呼ぶ。部分 von Neumann 代数 \mathfrak{B} に対応する ω の準中心測度を $d^\mathfrak{B}\omega$ と表す。また、中心そのもの $\mathfrak{Z}_\omega(\mathcal{X})$ に対応する直交測度を ω の中心測度と呼び、 μ_ω あるいは $d\omega$ と表す。

ω の任意の準中心測度 μ に対し, 任意の Borel 集合 $\Delta \in \mathcal{B}(E_{\mathcal{X}})$ に対して ω の μ による積分分解で現れる 2 つの正值線型汎関数

$$\omega_{\Delta} = \int_{\Delta} d\mu(\rho) \rho, \quad \omega_{E_{\mathcal{X}} \setminus \Delta} = \int_{E_{\mathcal{X}} \setminus \Delta} d\mu(\rho) \rho$$

それぞれの GNS 表現 $\pi_{\omega_{\Delta}}, \pi_{\omega_{E_{\mathcal{X}} \setminus \Delta}}$ の間に, 零でない繋絡作用素がないという意味で, 無縁である, という条件を満たす。中心測度は因子状態 $F_{\mathcal{X}}$ に準台をもつ測度であり, 状態をセクターに過不足なく分解する唯一の測度である。 $\text{Spec}(\mathfrak{Z}_{\omega}(\mathcal{X}))$ によって ω の中心測度の台のセクターは識別され, 特別な場合には中心に属する物理量のスペクトルの値でセクターが識別される (この場合については後述)。それ故, 本稿では次の言明を前提として議論を進めよう:

$\Delta \in \mathcal{B}(E_{\mathcal{X}})$ に属するセクターが見出される確率は $\mu_{\omega}(\Delta)$ で与えられる。

この言明には混合相の中から特定の純粋相が抽出される確率を指定する物理的意味があり, また同時に, 各セクターが確率論の文脈での根源事象として現実に見出されることを示すものである。しかも, 各セクター自身が測定された後の状態の指定に直結していることが以下の議論からもわかる。そして, この言明を認めることにより, 中心の部分 von Neumann 代数 (つまり, 秩序変数のなす物理量代数) と一対一対応する準中心測度を利用する物理的妥当性が得られる。このとき, インストゥルメント汎関数 (instrumental functional) を

$$\mathcal{I}(f; d^{\mathcal{B}}\omega)(X) = \int d^{\mathcal{B}}\omega(\rho) f(\rho) \rho(X), \quad f \in L^{\infty}(d^{\mathcal{B}}\omega), X \in \mathcal{X}, \quad (3)$$

で定める。定義から,

$$\mathcal{I}(f; d^{\mathcal{B}}\omega)(X) = \langle \Omega_{\omega} | \kappa_{d^{\mathcal{B}}\omega}(f) \pi_{\omega}(X) \Omega_{\omega} \rangle \quad (4)$$

がわかる。インストゥルメント汎関数はインストゥルメント等の現代量子測定理論の諸概念の親玉に当たり, セクターの識別と物理量の出力を統一的に記述する概念である。 $f \in L^{\infty}(d^{\mathcal{B}}\omega)$ として, 任意の物理量 $X \in \mathcal{X}$ と \mathbb{R} の部分集合 Δ に対し,

$$\chi_{\Delta}^X(\rho) = \chi_{\{\rho \in \text{supp } d^{\mathcal{B}}\omega | \rho(X) \in \Delta\}}(\rho), \quad (5)$$

で定義される X の定義関数が測定理論の文脈において標準的に用いられる。ただし, 定義の通りに基準となる (状態の) 準中心測度の台に制限を行うことにする。 $\Delta \in \mathcal{B}(E_{\mathcal{X}})$ に属するセクターが測定された後に定まる状態は

$$\frac{\mathcal{I}(\chi_{\Delta}; d^{\mathcal{B}}\omega)(X)}{\mathcal{I}(\chi_{\Delta}; d^{\mathcal{B}}\omega)(1)} = \frac{1}{d^{\mathcal{B}}\omega(\Delta)} \int d^{\mathcal{B}}\omega(\rho) \chi_{\Delta}(\rho) \rho(X) \quad (6)$$

で与えられる。ただし, $d^{\mathcal{B}}\omega(\Delta) = 0$ のときは不定とする。

3 Bornの公式の導出

漸くだが本題に移ろう。物理量のスペクトルの分布は物理的・実験的状況が指定されているときの系の状態および特徴を知る上でとても大切な知識である。その象徴である Born の公式は von Neumann の公理系では状態の定義の次に ad hoc なものであるが、物理学である以上は物理的な状況設定の議論を欠かしてはならない。したがって、成立する条件を無限自由度系にも適用可能な形で再考する意義がある。本稿では、マクロ化する自由度を考察するセクター理論および物理過程である測定過程に基づいて Born の公式を導出する。

まずは [8, 17] で議論された測定過程について復習しよう。対象系の物理量を \mathcal{X} 、対象系の基準状態を ω とする。 $(\pi_\omega, \mathfrak{H}_\omega, \Omega_\omega)$ を ω に対する \mathcal{X} の GNS 表現とする。簡単のため、物理量 $A \in \pi_\omega(\mathcal{X})''$ の測定を行う状況を考察する。物理量 A のスペクトルは

$$Sp(A) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid (A - \lambda 1)^{-1} \text{が存在しない}\}$$

で定義される。 A は自己共役であるから、 $Sp(A) \subseteq \mathbb{R}$ である。このとき、

$$C(A) = \{f(A) \mid f \in C(Sp(A))\}$$

によって物理量 A を測定する測定器の物理量代数を定める。 $C(A)$ は \mathfrak{H}_ω 上の C^* -代数であるから、 $id : C(A) \rightarrow B(\mathfrak{H}_\omega)$ を $C(A)$ の表現として $L^\infty(A) = C(A)''$ によってその von Neumann 代数とする。このとき、ある $\xi \in \mathfrak{H}_\omega$ から生成される \mathfrak{H}_ω の部分 Hilbert 空間 $\overline{C(A)\xi}$ 上では、 $Sp(A)$ 上のある確率測度 μ が存在して、 $L(A)$ と $L^\infty(Sp(A), \mu)$ が同型になることが示せる¹⁴。それ故、 $\overline{C(A)\xi}$ 上の von Neumann 代数として $L^\infty(A)$ は極大可換、すなわち、 $L^\infty(A) = L^\infty(A)'$ となる。測定器の物理量代数を $C(A)$ とし、測定器の状態を中立位置(neutral position) m_A とする [8, 17]。ただし、 m_A は $L^\infty(A)$ 上で定義されているとし、 $C(A)$ 上に制限することで $C(A)$ 上の状態として用いる。

物理量 A を測定する測定器の物理量代数として $C(A)$ を、対象系と物理量 A を測定する測定器との合成系を記述する物理量代数として $\mathcal{X} \otimes C(A)$ を採用する。このとき、 $\alpha \in Aut(\pi_\omega(\mathcal{X})'' \otimes L^\infty(A))$ が測定相互作用として実現している状況を考える。物理量 A を測定する前の任意の物理量 $Y \in \pi_\omega(\mathcal{X})'' \otimes L^\infty(A)$ は物理量 A の測定後には $\alpha(Y)$ となるから、物理量 A 測定後の物理量に関心がある状況では全ての物理量が $\alpha(Y)$ ($Y \in \pi_\omega(\mathcal{X})'' \otimes L^\infty(A)$) の形で記述されていると考えてよい。特に、物理量の C^* -代数の元 $X \in \mathcal{X} \otimes C(A)$ に対しては $\alpha((\pi_\omega \otimes id)(X))$ が A 測定後の X を意味する。 α を C^* -代数 \mathcal{X} 上の $*$ -自己同型写像とすると、 $\alpha^* : E_{\mathcal{X}} \rightarrow E_{\mathcal{X}}$ を $(\alpha^*\omega)(X) = \omega(\alpha(X))$ ($\omega \in E_{\mathcal{X}}, X \in \mathcal{X}$) によって定める。一方、物理量 A 測定前の合成系の状態は $\tilde{\omega} \otimes m_A$ であるから、 A を測定した後の物理量をこの状態で評価することにより

$$\omega_{(A,\alpha)}(X) := \alpha^*(\tilde{\omega} \otimes m_A)((\pi_\omega \otimes id)(X)) \quad (7)$$

を物理量 A 測定後の合成系の状態とみなしても良いことがわかる。ただし、このように見る場合、物理量は測定によって変化せず、状態のみ変化すると解釈していることになる。本来は時間発展及び測定によって物理量と状態の双方が変化する状況が物理的にも自然か

¹⁴正確には、[25, Chapter III Theorem 1.2.] と連続関数カルキュラスを用いた議論が必要となる。

つ最も普遍的である。この観点からすれば些か特殊な状況であって、対象系固有の動力学の測定が関与しなかった結果の単純化と考えるべきである。

ここでは簡単のため、基準状態 ω は因子状態、すなわち、 $\mathfrak{Z}_\omega(\mathcal{X}) = \mathbb{C}1$ であると仮定する。物理量代数 $\mathcal{X} \otimes C(A)$ の表現 $\pi_\omega \otimes id$ での von Neumann 代数は $\pi_\omega(\mathcal{X})'' \otimes L^\infty(A)$ であり、仮定から $\mathbb{C}1 \otimes L^\infty(A)$ を中心にもつ。 A 測定後の合成系の状態 $\omega_{(A,\alpha)}$ を (中心 $\mathbb{C}1 \otimes L^\infty(A)$ に対応する) 中心測度 $d\omega_{(A,\alpha)}$ による積分分解を行う: $X \in \mathcal{X} \otimes C(A)$ に対し、

$$\omega_{(A,\alpha)}(X) = \int d\omega_{(A,\alpha)}(\rho) \rho(X). \quad (8)$$

すると、 $\text{supp } d\omega_{(A,\alpha)}$ の全ての元 ρ はセクターであり、物理量代数を $\mathbb{C}1 \otimes C(A)$ 上に制限したとき、 $\pi_\omega(\mathcal{X})'' \otimes L^\infty(A)$ の中心 $\mathbb{C}1 \otimes L^\infty(A)$ は $\mathbb{C}1 \otimes C(A)$ の表現 $\pi_\omega \otimes id$ における von Neumann 代数に他ならず、しかも $\mathbb{C}1 \otimes L^\infty(A) = (\mathbb{C}1 \otimes L^\infty(A))'$ となるので、 $\omega_{(A,\alpha)}$ の中心分解と $\omega_{(A,\alpha)}$ を $\mathbb{C}1 \otimes C(A)$ 上に制限したときの端点分解を $\mathcal{X} \otimes C(A)$ 上に拡張したものが一致する。それ故、各 $\rho \in \text{supp } d\omega_{(A,\alpha)}$ は $\omega_{\alpha,a} \otimes \delta_a$ ($a \in Sp(A)$) の形で書ける。ここで、 $\omega_{\alpha,a}$ は $a \in Sp(A)$ ごとに測定相互作用 α に依存して定まる \mathcal{X} 上の状態である。すなわち、 $\text{supp } d\omega_{(A,\alpha)}$ は次のように表すことができる:

$$\text{supp } d\omega_{(A,\alpha)} = \overline{\{\omega_{\alpha,a} \otimes \delta_a | a \in Sp(A)\}}. \quad (9)$$

合成系のセクターが物理量 A のスペクトルの各点 $a \in Sp(A)$ ごとに定まることを意味している。各セクターは $\rho = \omega_{\alpha,a} \otimes \delta_a$ ($a \in Sp(A)$) なので、 $(\omega_{\alpha,a} \otimes \delta_a)(1 \otimes A) = a$ が出力される。これは物理量 A のスペクトル $Sp(A)$ の各点が測定値に反映することを意味する。このとき、 $L^\infty(d\omega_{(A,\alpha)})$ の元として $\chi_\Delta^{1 \otimes A}$ を扱う場合を考えると

$$\chi_\Delta^{1 \otimes A}(\omega_{\alpha,a} \otimes \delta_a) = \begin{cases} 1, & (a \in \Delta), \\ 0, & (a \notin \Delta), \end{cases} \quad (10)$$

となるから、

$$d\omega_{(A,\alpha)}(\chi_\Delta^{1 \otimes A}) = \int d\omega_{(A,\alpha)}(\rho) \chi_\Delta^{1 \otimes A}(\rho) \quad (11)$$

$$= (\tilde{\omega} \otimes m_A)(\alpha(E_{\omega_{(A,\alpha)}}(\chi_\Delta^{1 \otimes A}))) \quad (12)$$

が成り立つ。このとき、 $E_{\omega_{(A,\alpha)}} : L^\infty(d\omega_{(A,\alpha)}) \rightarrow \mathbb{C}1 \otimes L^\infty(A)$ 及び $\chi_\Delta^{1 \otimes A}$ の定義に基づけば、 $\chi_\Delta^{1 \otimes A}$ と一対一に対応する $\mathbb{C}1 \otimes L^\infty(A)$ の元は

$$E_{\omega_{(A,\alpha)}}(\chi_\Delta^{1 \otimes A}) = 1 \otimes E^A(\Delta) \quad (13)$$

という形になる。以上の議論をまとめると次の定理が得られる:

定理 2 (一般化された Born の公式). 対象系の状態が ω であるとき、物理量 A を測定する測定器と対象系との間の測定相互作用が α である場合に測定器のメーターが $\Delta \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ に含まれる値を出力する確率は次で与えられる:

$$(\tilde{\omega} \otimes m_A)(\alpha(1 \otimes E^A(\Delta))) \quad (14)$$

続いて, 状態 $\omega_{(A,\alpha)}$ の中心測度 $d\omega_{(A,\alpha)}$ に対してインストゥルメント汎関数を定めよう: 任意の $X \in \mathcal{X} \otimes C(A)$ と $f \in L^\infty(d\omega_{(A,\alpha)})$ に対し,

$$\mathcal{I}(f; d\omega_{(A,\alpha)})(X) = \int d\omega_{(A,\alpha)}(\rho) f(\rho) \rho(X). \quad (15)$$

特に, 任意の $\Delta \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ に対して, $f = \chi_\Delta^{1 \otimes A}$ のとき,

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(\chi_\Delta^{1 \otimes A}; d\omega_{(A,\alpha)})(X) &= \int d\omega_{(A,\alpha)}(\rho) \chi_\Delta^{1 \otimes A}(\rho) \rho(X) \\ &= (\tilde{\omega} \otimes m_A)(\alpha(X \otimes E^A(\Delta))) \end{aligned} \quad (16)$$

となる。また, 規格化されたインストゥルメント汎関数は

$$\begin{aligned} \mathcal{I}^{\text{ren}}(\chi_\Delta^{1 \otimes A}; d\omega_{(A,\alpha)})(X) &= \frac{1}{d\omega_{(A,\alpha)}(\chi_\Delta^{1 \otimes A})} \int d\omega_{(A,\alpha)}(\rho) \chi_\Delta^{1 \otimes A}(\rho) \rho(X) \\ &= \frac{(\tilde{\omega} \otimes m_A)(\alpha(X \otimes E^A(\Delta)))}{(\tilde{\omega} \otimes m_A)(\alpha(1 \otimes E^A(\Delta)))} \end{aligned} \quad (17)$$

となる。 $\mathbb{C}1 \otimes L^\infty(A)$ は $\mathfrak{J}_\omega(\mathcal{X}) \otimes L^\infty(A)$ の部分 von Neumann 代数であるから, 対象系の物理量代数に非自明な中心があるとき, 中心測度の代わりに $\mathfrak{J}_\omega(\mathcal{X}) \otimes L^\infty(A)$ の部分 von Neumann 代数に対応する準中心測度を用いれば良い。

本章のこれまでの結果を受けて, Born の公式を導出する。一般化された Born の公式から Born の公式を導くかたちとなる。まずは完全相関という概念を定義しよう。 \mathcal{M} を von Neumann 代数, X, Y を \mathcal{M} の自己共役元, S を \mathcal{M} 上の正規状態全体のなす集合の部分集合とする。 X と Y が S において完全相関するとは, $\Delta \cap \Gamma = \emptyset$ となる任意の $\Delta, \Gamma \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ と任意の $\varphi \in S$ に対して,

$$\varphi(E^X(\Delta)E^Y(\Gamma)) = 0 \quad (18)$$

となるときをいう。特に, $S = \{\varphi\}$ のとき, $X =_\varphi Y$ と表す。完全相関は物理量の間と同値関係である:

$$(i) X =_S X, \quad (ii) X =_S Y \Rightarrow Y =_S X, \quad (iii) X =_S Y, Y =_S Z \Rightarrow X =_S Z.$$

X と Y が状態 φ で完全相関するならば, φ における X と Y の結合確率分布は対角線集合 $\mathbb{D} = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 | x = y\}$ 上に台をもつことが示されている [24]。

現在考察している実験設定では, $A \otimes 1 =_{\tilde{\omega} \otimes m_A} \alpha(1 \otimes A)$ となる測定相互作用 α が実現していれば, この測定器によって対象の物理量 A を測定しているとしてよいであろう。ただし, この仮定を満たす測定相互作用ではほんの少し状態が変化しただけで完全相関が壊れてしまうので, (数学的な簡易化はあるが) より強い仮定

$$A \otimes 1 =_{\pi_\omega(\mathcal{X})''_{*,1} \otimes m_A} \alpha(1 \otimes A) \quad (19)$$

を満たす状況も適当であろう。ただし, $\pi_\omega(\mathcal{X})''_{*,1} \otimes m_A = \{\varphi \otimes m_A | \varphi \in \pi_\omega(\mathcal{X})''_{*,1}\}$ であり, von Neumann 代数 \mathcal{M} に対して $\mathcal{M}_{*,1} = \{\varphi \in \mathcal{M}_* | \|\varphi\| = 1\}$ で定義される。対象系の表現を保つ範囲の状態変化であれば, $A \otimes 1$ と $\alpha(1 \otimes A)$ これら 2 つの物理量は完全相関する

という条件である。この2つの条件の中間にあたる条件を満たす測定相互作用 α が実現していれば、一般化された Born の公式より、通常 Born の公式と呼ばれる次の定理が成立する：

定理 3 (Born の公式). 対象系の状態が $\omega \in E_{\mathcal{X}}$ であるとする。この状態において、物理量 $A \in \pi_{\omega}(\mathcal{X})''$ が $\Delta \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$ に値をとる確率は、

$$\tilde{\omega}(E^A(\Delta)) = \langle \Omega_{\omega} | E^A(\Delta) \Omega_{\omega} \rangle \quad (20)$$

で与えられ、 $\Pr\{A \in \Delta | \omega\}$ で表す。

“増幅過程”の考慮が本来必要なことを最後に補足したい。一般的な測定において、対象系と相互作用してメーターが測定値を出力するまでの間に、測定器内部ではメーターへの出力が可能な物理過程へと対象系との相互作用の結果生じる物理的变化・変位を変換する物理過程が介在し、これを一般に増幅過程と呼ぶ [18, 8]。測定器(の内部の機構)の個性、つまり、先ほどまで象徴的に α と書かれていた測定相互作用の数学的表現を強く特徴付ける要因の1つが増幅過程である。この事実から明らかのように、測定誤差の要因の1つが増幅過程であり、対象系と測定器の相互作用という(直観的にわかりやすい)要因とは全く異なる物理過程として研究すべき対象である。測定による擾乱が(不可避な時間発展の影響を除けば)対象系と測定器の間の相互作用のみに由来するのとは対照的である。本稿では測定相互作用は2つの系をまたぐという程度の物理過程としての扱いであったが、測定過程をより物理的に扱い、そして、測定器をモデリングする際の測定に関わる物理的自由度の同定のためにも増幅過程に対する理解がますます必要になると考えられる。

4 大偏差原理と量子エントロピー

4.1 相対エントロピーの定義と日合・大矢・塚田の定理

$M_1(\Omega)$ によって (Ω, \mathcal{F}) 上の確率測度の空間を表す。確率測度 $\nu \in M_1(\Omega)$ の $\mu \in M_1(\Omega)$ に対する相対エントロピーを

$$D(\nu || \mu) = \begin{cases} \int d\nu(\rho) \log \frac{d\nu}{d\mu}(\rho) & (\nu \ll \mu) \\ +\infty & (\text{otherwise}). \end{cases} \quad (21)$$

で定める。 $\nu, \mu \ll \sigma$ となる Ω 上の測度 σ が存在して、 $q := \frac{d\nu}{d\sigma}$ and $p := \frac{d\mu}{d\sigma}$ となるとき、 $D(\nu || \mu)$ のかわりに $D(q || p)$ と書く。

荒木および Uhlmann による2種の相対エントロピーを定義する [2, 27, 11, 33]。 $(\mathcal{M}, \mathcal{H}, J, \mathcal{P})$ を von Neumann 代数 \mathcal{M} の標準形¹⁵とし、 φ, ψ を \mathcal{M} 上の正規状態とする。任意の

¹⁵Hilbert 空間 \mathcal{H} 上の von Neumann 代数 \mathcal{M} の標準形とは \mathcal{M}, \mathcal{H} および以下の条件を満たすユニタリー対合 J と \mathcal{H} 上の自己双対錐 \mathcal{P} からなる4つ組 $(\mathcal{M}, \mathcal{H}, J, \mathcal{P})$ のことである：(i) $JMJ = \mathcal{M}'$; (ii) $JAJ = A^*$, $A \in \mathfrak{3}(\mathcal{M})$; (iii) $J\xi = \xi$, $\xi \in \mathcal{P}$; (iv) $AJAJ\mathcal{P} \subset \mathcal{P}$, $A \in \mathcal{M}$. 詳しくは [26] を参照して頂きたい。

$A \in \mathcal{A}$ に対し, $\varphi(A) = \langle \Phi | A \Phi \rangle, \psi(A) = \langle \Psi | A \Psi \rangle$ を満たす $\Phi, \Psi \in \mathcal{P}$ が存在する。定義域を $Dom(S_{\Phi, \Psi}) = \mathcal{M}\Psi + (1 - s^{\mathcal{M}'(\Psi)})\mathcal{H}$ とする作用素 $S_{\Phi, \Psi}$ を

$$\begin{aligned} S_{\Phi, \Psi}(A\Psi + \Omega) &= s^{\mathcal{M}'(\Psi)}A^*\Phi, \\ A \in \mathcal{M}, \quad s^{\mathcal{M}'(\Psi)}\Omega &= 0, \end{aligned}$$

で定める。ここで, $s^{\mathcal{M}'(\Psi)}$ は Ψ の \mathcal{M} -台, すなわち, E は $(1 - E)\Psi = 0$ を満たす \mathcal{M} の最小の射影である。 $S_{\Phi, \Psi}$ は可閉作用素であるとわかる。このとき, 相対モジュラー作用素 $\Delta_{\Phi, \Psi}$ を $\Delta_{\Phi, \Psi} = (S_{\Phi, \Psi})^* \overline{S_{\Phi, \Psi}}$ で定め, $\Delta_{\Phi, \Psi} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE_{\Phi, \Psi}(\lambda)$ を $\Delta_{\Phi, \Psi}$ のスペクトル分解とする。荒木の相対エントロピー $S(\varphi \parallel \psi)_{\text{Araki}}$ を

$$S(\varphi \parallel \psi)_{\text{Araki}} = \begin{cases} \int_{-\infty}^{\infty} \log \lambda d\langle \Phi | E_{\Phi, \Psi}(\lambda) \Phi \rangle, & (s(\varphi) \leq s(\psi)), \\ +\infty, & (\text{その他}). \end{cases}$$

で定める。ここで, $s(\varphi)$ は \mathcal{M} の $\varphi(1 - E) = 0$ を満たす最小の射影 E であり, φ の台と呼ばれる。

次に Uhlmann の相対エントロピーを定義しよう。こちらが2次形式によるエントロピーの定式化となる。複素線型空間 \mathcal{L} 上の半ノルム p と q に対し, 2次平均 (quadratical mean) $QM(p, q)$ を

$$QM(p, q)(x) = \sup_{\alpha \in \mathcal{S}(p, q)} \alpha(x, x)^{\frac{1}{2}}, \quad x \in \mathcal{L},$$

で定める。ここで, $\mathcal{S}(p, q)$ は \mathcal{L} 上の正値エルミート形式 α であって, 任意の $x, y \in \mathcal{L}$ に対して $|\alpha(x, y)| \leq p(x)q(y)$ が成り立つものの全体である。 \mathcal{L} 上の半ノルムに値をとる関数 $[0, 1] \ni t \mapsto p_t$ は次の条件を満たすとき, p から q への2次補間 (quadratical interpolation) と呼ぶ:

- (i) 各 $x \in \mathcal{L}$ に対し, 関数 $t \mapsto p_t(x)$ は連続;
- (ii) 次の条件を満たす;

$$\begin{aligned} p_t &= QM(p_{t_1}, p_{t_2}), \quad t = \frac{t_1 + t_2}{2}, \quad t_1, t_2 \in [0, 1], \\ p_{\frac{1}{2}} &= QM(p, q), \\ p_{\frac{t}{2}} &= QM(p, p_t), \quad t \in [0, 1], \\ p_{\frac{1+t}{2}} &= QM(p_t, q), \quad t \in [0, 1]. \end{aligned}$$

更には, 正値エルミート形式 α と β に対し \mathcal{L} 上の正値エルミート関数に値をとる関数 $[0, 1] \ni t \mapsto QF_t(\alpha, \beta)$ が存在し, 各 $x \in \mathcal{L}$ に対し $p_t(x) = QF_t(\alpha, \beta)(x, x)^{\frac{1}{2}}$ によって定められる関数 p_t は $\alpha(x, x)^{\frac{1}{2}}$ から $\beta(x, x)^{\frac{1}{2}}$ への2次補間となる。 α と β の相対エントロピー汎関数 (relative entropy functional) $S(\alpha \parallel \beta)(x)$ を

$$S(\alpha \parallel \beta)(x) = - \liminf_{t \rightarrow +0} \frac{QF_t(\alpha, \beta)(x, x) - \alpha(x, x)}{t}.$$

で定める。

\mathcal{A} を $*$ -代数¹⁶ とし, φ, ψ を \mathcal{A} 上の正值線型汎関数とする。Uhlmann の相対エントロピー $S(\varphi\|\psi)_{\text{Uhlmann}}$ を

$$S(\varphi\|\psi)_{\text{Uhlmann}} = S(\varphi^R\|\psi^L)(1),$$

で定める。ここで, φ^R and ψ^L は $\varphi^R(A, B) = \varphi(BA^*)$, $\psi^L(A, B) = \psi(A^*B)$ によって定義される \mathcal{A} 上の正值エルミート形式である。

[11] において, 次の 2 つの重要な定理が証明された:

定理 4. von Neumann 代数 \mathcal{M} 上の任意の状態 φ, ψ に対し, $S(\varphi\|\psi)_{\text{Uhlmann}} = S(\varphi\|\psi)_{\text{Araki}}$ が成り立つ。

ゆえに, 以後 2 つの相対エントロピーを区別せず, 今後 2 つとも量子相対エントロピーと呼ぶ。

定理 5. φ, ψ を C^* -代数 \mathcal{X} の状態とし, π をある Hilbert 空間上の \mathcal{X} の非縮退表現¹⁷ とする。 $\varphi(A) = \tilde{\varphi}(\pi(A))$, $\psi(A) = \tilde{\psi}(\pi(A))$ を満たす φ, ψ の $\pi(\mathcal{X})''$ 上への正規拡張 $\tilde{\varphi}, \tilde{\psi}$ があるとき, $S(\tilde{\varphi}\|\tilde{\psi}) = S(\varphi\|\psi)$ が成り立つ。

本稿では π として $\varphi + \psi$ に伴う GNS 表現 $\pi_{\varphi+\psi}$ を用いる場面が登場する。

次の定理 (日合・大矢・塚田の定理) が量子相対エントロピーを応用する活路を切り開く。

定理 6 ([11, 33]). μ, ν を $\psi, \omega \in E_{\mathcal{X}}$ を重心とする $E_{\mathcal{X}}$ 上の正則 Borel 測度とする。 $\mu, \nu \ll m$ となる $E_{\mathcal{X}}$ 上の準中心測度 m が存在するならば, $S(\psi\|\omega) = D(\mu\|\nu)$ が成立する。

すなわち, 量子相対エントロピーは各状態に対応する重心測度に対する測度論的相対エントロピーに一致する。それ故に重心測度の評価が量子相対エントロピーの評価に直結する。特に, 準中心分解は物理的にもその意味が保証されており, 測定状況の指定ごとに対応する準中心測度が定まる。当然ながら, 量子相対エントロピーと同様に定義される量子 α -ダイバージェンスに対しても同様の定理が成立する。

4.2 量子 Sanov の定理

統計学・情報理論 [4] および学習理論 [29, 30, 31, 39] の多くの解析の出発点は大偏差原理 [5, 6, 7] にある。それ故に量子推定理論においても大偏差型の評価から議論を行う。まず, 前節の議論から基準となる状態 $\psi \in E_{\mathcal{X}}$ の中心測度 μ_{ψ} を用いる。

$\mathcal{B}^w(M_1(E_{\mathcal{X}}))$ を $M_1(E_{\mathcal{X}})$ 上の弱位相で生成される Borel σ -集合族とする。 $\tilde{\rho} = (\rho_1, \rho_2, \dots) \in (\text{supp } \mu_{\psi})^{\mathbb{N}}$ および $A \in \mathcal{B}(\text{supp } \mu_{\psi})$ and $\Gamma \in \mathcal{B}^w(M_1(E_{\mathcal{X}}))$ に対し,

$$Y_j(\tilde{\rho}) = \rho_j, \quad L_n(\tilde{\rho}, A) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \delta_{Y_j(\tilde{\rho})}(A), \quad Q_n(\Gamma) = P_{\mu_{\psi}}(L_n \in \Gamma)$$

と定める。ただし, $P_{\mu_{\psi}}$ は直積測度 $\mu_{\psi}^{\mathbb{N}}$ を意味する。 $\{Y_j\}_{j=1}^{\infty}$ が i.i.d. であることは明らかであり, この $\{Y_j\}_{j=1}^{\infty}$ により状態を確率変数として扱うことが可能となる。このとき, Sanov の定理の量子版が成立する。

¹⁶ 対合演算 $*$: $A \mapsto A^*$ で閉じた代数。

¹⁷ 非自明な固有空間がない表現のこと。

定理 7. Q_n は $S(b(\cdot)\|\psi)$ をレート関数とする LDP を満たす: $\{L_n \in \Gamma\}$ が可測集合となる任意の $\Gamma \in \mathcal{B}^w(M_1(E_{\mathcal{X}}))$ に対し,

$$\begin{aligned} -\inf \{S(b(\mu)\|\psi) \mid \mu \in \Gamma^o, \mu \ll \mu_\psi\} &\leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log Q_n(\Gamma) \\ &\leq \limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log Q_n(\Gamma) \leq -\inf \{S(b(\mu)\|\psi) \mid \mu \in \bar{\Gamma}, \mu \ll \mu_\psi\}. \end{aligned}$$

ただし, 上限と下限は集合 $\{\mu \in \Gamma, \mu \ll \mu_\psi\}$ が空のときは無限大の値をとることとする。

\mathcal{X} は可分と仮定する。このとき, $E_{\mathcal{X}}$ は次で定義される距離 d によりコンパクト距離空間となる:

$$d(\omega_1, \omega_2) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{2^j} \frac{|\omega_1(A_j) - \omega_2(A_j)|}{\|A_j\|}, \quad (22)$$

ただし, 集合 $\{A_j \mid A_j \neq 0, j = 1, 2, \dots\}$ は \mathcal{X} の稠密な部分集合である。加えて, $B^{cy}(M_1(E_{\mathcal{X}}))$ ($M_1(E_{\mathcal{X}})$ 上の有界な Borel 可測関数による積分を行う汎関数を可測にするような筒集合が生成する Borel 集合族 [6]) が $\mathcal{B}^w(M_1(E_{\mathcal{X}}))$ と一致する。故に, \mathcal{X} が可分なときは任意の $\Gamma \in \mathcal{B}^w(M_1(E_{\mathcal{X}}))$ に対して $\{L_n \in \Gamma\}$ が可測集合になる。

4.3 量子仮説検定

では次に, 仮説検定の議論を簡単に行おう。以下の定理の古典版は非常に良く知られているので, 詳しくは [4, 6] を参照して頂きたい。量子 Sanov の定理に引き続き, 日合・大矢・塚田の定理の積極的利用の効用とも言える結果である。

定義 5. 検定 \mathcal{T} とは, ここでは 2 つの対立する仮説 H_0 と H_1 に対して定義される, 可測関数の列 $T_n : (\text{supp } d\omega_2)^n \rightarrow \{0, 1\}$ で, 解釈 $\{T_n = 0\} = \{H_0 \text{ を採用}\} = \{H_1 \text{ を棄却}\}$ と $\{T_n = 1\} = \{H_1 \text{ を採用}\} = \{H_0 \text{ を棄却}\}$ を要請するもののことである。もし $\mathcal{T} = (T)$ ならば, \mathcal{T} と T とを区別しない。

第 1 種および第 2 種の誤り確率を

$$\begin{aligned} \alpha_n(T_n) &= P_{\omega_1}(T_n = 1) = P_{\omega_1}(H_0 \text{ は棄却}), \\ \beta_n(T_n) &= P_{\omega_2}(T_n = 0) = P_{\omega_2}(H_1 \text{ は棄却}). \end{aligned}$$

で定義する。ここで, $i = 1, 2$ に対し P_{ω_i} は μ_{ω_i} の可算直積確率測度であって,

$$X_j = -\log \frac{d\omega_1}{d\omega_2}(\rho_j), \quad S_n = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n X_j.$$

それぞれは対数尤度比, 平均化された対数尤度比である。誤り確率 α_n, β_n とともに 0 とならず, 一方が小さくなればもう一方はある程度の大きさを持つトレードオフの関係にある。それ故, 誤り確率の

$$\beta_n(\varepsilon) = \inf \{\beta_n(T_n) \mid T_n : \text{検定}, \alpha_n(T_n) < \varepsilon\}$$

これは $\alpha_n(T_n) < \varepsilon$ となる全ての検定 T_n を用いたときの $\beta_n(T_n)$ の下限の値である。Neymann-Pearson 検定によってこの下限は達成されるので、少なくとも一つこの下限を達成するものが存在する。次の定理が Stein の補題の量子版である。

定理 8. 任意の $\varepsilon < 1$ に対し,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \beta_n(\varepsilon) = -S(\omega_1 \| \omega_2).$$

次に Chernoff 限界について考える。 $\mathcal{R}_n^\pi(T_n) = \pi_1 \alpha_n(T_n) + \pi_2 \beta_n(T_n)$ と定める。ここで、 π_1, π_2 は $\pi_1, \pi_2 > 0, \pi_1 + \pi_2 = 1$ を満たす実数である。

定理 9 (Chernoff 限界).

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \inf_{T_n} \frac{1}{n} \log \mathcal{R}_n^\pi(T_n) = \inf_{0 \leq t \leq 1} \log F_t(\omega_1, \omega_2).$$

ここで、 $F_t(\omega_1, \omega_2) = QF_t(\omega_1^R, \omega_2^L)(1, 1)$ である。

Stein の補題と Chernoff 限界のどちらも古典的な定理と日合・大矢・塚田の定理を組み合わせることで証明ができ、量子状態が定量的尺度として現れることが確認された。現実的な状況では適切な測定過程の選択をする必要がある [23]. これについては次節で議論しよう。測定過程を考慮することで、[10, 13] で議論されている量子統計的決定理論および量子仮説検定の議論の無限自由度系への一般化となる。量子仮説検定の漸近論については [12, 14, 9] 等の議論があるが、こちらはどちらかといえば工学的な設定で行われる場合の漸近論であり、本稿とは立場が異なる。

4.4 測定過程の考慮とそれによる定理の修正

\mathcal{X} を C^* -代数、 ω_1, ω_2 を \mathcal{X} 上の状態、 $(\pi_\omega, \mathcal{H}_\omega, \Omega_\omega)$ を \mathcal{X} の $\omega = \omega_1 + \omega_2$ に伴う GNS 表現とすると、 ω_1 と ω_2 を比較する測定の集合を以下で定義する：

$$\begin{aligned} M(\omega_1 \prec \omega_2) &= \bigcup_{A=A^* \in \pi_\omega(\mathcal{X})''} M(A; \omega_1 \prec \omega_2), \\ M(A; \omega_1 \prec \omega_2) &= \{(A, \alpha) \in \pi_\omega(\mathcal{X})'' \times \text{Aut}(\pi_\omega(\mathcal{X})'' \otimes L^\infty(A)) | \\ &\quad L^\infty(A) = C_0(A)'', d\omega_{1,(A,\alpha)} \ll d\omega_{2,(A,\alpha)}\}, \end{aligned}$$

ここで、合成系の C^* -代数は $\mathcal{X} \otimes C(A)$ であって、 $i = 1, 2$ に対し $\omega_{i,(A,\alpha)}$ は

$$\omega_{i,(A,\alpha)} = \alpha^*(\tilde{\omega}_i \otimes m_A) \circ (\pi_\omega \otimes id)$$

で定義される $\mathcal{X} \otimes C(A)$ 上の状態である。 $\alpha \in \text{Aut}(\mathcal{X})$ に対し、 $S(\omega_1 \| \omega_2) = S(\alpha^* \omega_1 \| \alpha^* \omega_2)$ となることを用いると、 $M(\omega_1 \prec \omega_2) \neq \emptyset$ であるとき、 $(A, \alpha) \in M(\omega_1 \prec \omega_2)$ に対して、

$$\begin{aligned} \infty &> D(d\omega_{1,(A,\alpha)} \| d\omega_{2,(A,\alpha)}) = S(\alpha^*(\tilde{\omega}_1 \otimes m_A) \circ (\pi_\omega \otimes id) \| \alpha^*(\tilde{\omega}_2 \otimes m_A) \circ (\pi_\omega \otimes id)) \\ &= S(\alpha^*(\tilde{\omega}_1 \otimes m_A) \| \alpha^*(\tilde{\omega}_2 \otimes m_A)) = S(\tilde{\omega}_1 \otimes m_A \| \tilde{\omega}_2 \otimes m_A) = S(\tilde{\omega}_1 \| \tilde{\omega}_2) = S(\omega_1 \| \omega_2). \end{aligned}$$

が成り立つ。Born の公式は測定後の合成系の状態の中心測度を与えることと同値なので， $\omega_{1,(A,\alpha)}, \omega_{2,(A,\alpha)}$ それぞれの中心測度 $d\omega_{1,(A,\alpha)}, d\omega_{2,(A,\alpha)}$ は測定データから特定されると結論できる。 $M(\omega_1 \prec \omega_2) \neq \emptyset$ であるときはいつでも， ω_1 の ω_2 に対する量子相対エントロピー $S(\omega_1||\omega_2)$ は統計的に評価される。これまでの議論から，次の予想が思いつく：

予想： $S(\omega_1||\omega_2) < \infty$ ならば， $M(\omega_1 \prec \omega_2) \neq \emptyset$ 。

これは当然ながら数学的に自明ではない。強い条件 $S(\omega_1||\omega_2) < \infty$ は ω_1 と ω_2 とがとても似ており，前者と後者を量子相対エントロピー $S(\omega_1||\omega_2)$ で比較できるという，物理的に肯定的な言明である。 $M(\omega_1 \prec \omega_2) \neq \emptyset$ であれば，上の式から測定データの確率分布（測定）に対する相対エントロピーから元の量子状態に対する量子相対エントロピーが計算されるので，適切な相互作用を考えれば大偏差型の評価やモデル選択 [1, 32, 29, 39] の議論を実験的な状況で実際に適用できることが示された。特に，測定過程を考慮して定理 7，定理 8 および定理 9 を示す場合は，定理 7 においてはどのような可測集合 $\Gamma \in B^w(M_1(E_\chi))$ が重要であり，また，定理 8 および定理 9 ではそれぞれの設定にあわせた 2 つの状態を比較する測定を見出すかが課題となる。定理 9 に適合する 2 つの状態を比較する測定の集合の定義については [23] を参照して頂きたい。

5 展望

本稿では測定過程の力学系の側面については増幅過程も含め全く触れられなかった。測定器が機能する理由を説明するために十分なほど測定過程を物理的に扱うことができたが，やはり力学系の側面を抜きにして測定過程を理解することは不可能であろう。Born の公式を導出するために確率論的記述を行い，かつ，測定過程を物理的自由度として勘定する前提の下での minimal な測定過程の定式化・記述としては十分なものと信ずる。測定過程の力学系の側面は，量子化の根幹を支配する内在化原理を正当化する。本稿の内容の詳細及び力学系としての記述については [22] を参照して頂きたい。

参考文献

- [1] H. Akaike, IEEE Trans. Automatic Control **19**, 716-723 (1974).
- [2] H. Araki, Publ. Res. Inst. Math. Sci. **13**, 173-192 (1977).
- [3] O. Bratteli and D.W. Robinson, *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics* (vol. 1), Springer-Verlag (1979).
- [4] T.M. Cover and J.A. Thomas, *Elements of Information Theory*, (Wiley, New York, 1991).
- [5] I. Csiszár, Bull. Brazilian Math. Soc. **37**, (2006) 453-459.
- [6] A. Dembo and O. Zeitouni, *Large deviations techniques and applications* (2nd ed.), (Springer, 2002).
- [7] R.S. Ellis, *Entropy, Large Deviations, and Statistical Mechanics*, (Springer, 1985).
- [8] R. Harada and I. Ojima, Open Sys. Inform. Dyn. **16**, 55-74 (2009).
- [9] *Asymptotic Theory of Quantum Statistical Inference*, edited by M. Hayashi (World Scientific, Singapore, 2005).

- [10] C.W. Helstrom, *Quantum Detection and Estimation Theory* (Academic Press, New York, 1976).
- [11] F. Hiai, M. Ohya and M. Tsukada, *Pacific J. Math.* **107**, 117-140 (1983).
- [12] F. Hiai and D. Petz, *Commun. Math. Phys.* **143**, 99-114 (1991).
- [13] A.S. Holevo, *Probabilistic and Statistical Aspects of Quantum Theory* (North-Holland, Amsterdam, 1982).
- [14] T. Ogawa and H. Nagaoka, *IEEE Trans. Inform. Theory* **46**, 2428-2433 (2000).
- [15] I. Ojima, *RIMS Kokyuroku* **1066** (1998), 121-132.
- [16] I. Ojima, *Open Sys. Inform. Dyn.* **10**, 235-279 (2003).
- [17] I. Ojima, "Micro-Macro Duality in Quantum Physics", pp.143-161 in *Proc. Intern. Conf. on Stochastic Analysis, Classical and Quantum* (World Scientific, 2005), arXiv:math-ph/0502038.
- [18] I. Ojima, Lévy process and innovation theory in the context of Micro-Macro duality, A brief summary of talks at the 5th Lévy Seminar (2006), edited by T. Hida; I. Ojima, Micro-Macro duality and emergence of macroscopic levels, *Quantum Probability and White Noise Analysis*, 21, 217-228 (2008) (math-ph/07052945).
- [19] I. Ojima, *J. Phys.: Conf. Ser.* **201**, 012017 (2010).
- [20] I. Ojima, Space(-Time) Emergence as Symmetry Breaking Effect, Invited talk at International Conference in QIBC (= Quantum Bio-Informatics Center, Tokyo University of Sciences) 2010; Dilation and Emergence in Physical Sciences, Invited talk at International Conference, "Advances in Quantum Theory" at Linnaeus University, June 2010.
- [21] I. Ojima and K. Okamura, arXiv:1101.3690.
- [22] I. Ojima, K. Okamura and H. Saigo, in preparation.
- [23] K. Okamura, arXiv:1202.2943.
- [24] M. Ozawa, *Ann. Phys. (N.Y.)* **321**, 744-769 (2006).
- [25] M. Takesaki, *Theory of Operator Algebras I*, (Springer, 1979).
- [26] M. Takesaki, *Theory of Operator Algebras II*, (Springer, 2002).
- [27] A. Uhlmann, *Commun. Math. Phys.* **54** (1977), 21-32.
- [28] A.W. van der Vaart and J.A. Wellner, *Weak Convergence and Empirical Processes*, (Springer, 1996).
- [29] S. Watanabe, *Algebraic geometry and statistical learning theory*, (Cambridge University Press, 2009).
- [30] S. Watanabe, *J. Phys.: Conf. Ser.* **233**, 012014 (2010).
- [31] S. Watanabe, *J. Mach. Learn. Res.* **11**, 3571-3594 (2010).
- [32] 赤池 弘次 著, 第 I 編 " 統計的推論とモデリング ", 室田 一雄, 土谷 隆 編, 『赤池情報量基準 AIC』, (共立出版, 2007).
- [33] 大矢 雅則, 梅垣 壽春 『量子論的エントロピー』, (共立出版, 1984).
- [34] 小嶋 泉, " だれが量子場を見たか ", 『だれが量子場をみたか』に収録, (日本評論社, 2004), pp.65-107.
- [35] 小嶋 泉, " 量子古典対応とミクロ・マクロ双対性 ", 平成 20 年度 (第 30 回) 数学入門公開講座テキスト, (2008), <http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~kenkyubu/kokai-koza/ojima.pdf>.
- [36] 小嶋 泉, " 自然における法則と歴史 : 『進化の力学』研究会 25 年目の一区切り ", 同じ号に掲載.
- [37] 小嶋 泉, 岡村 和弥, 大偏差戦略における逆問題と創発, *素粒子論研究* **119** No.4A (2012).
- [38] 岡村 和弥, " 量子相対エントロピーと統計的推測 - 仮説検定とモデル選択 - ", *RIMS 研究集会「独立性と従属性の数理」*, (数理解析研究所講究録に収録予定).
- [39] 渡辺 澄夫, 『ベイズ統計の理論と方法』, コロナ社, (2012).

量子 i.i.d. 状態の仮説検定問題における数値計算手法

坂下 達哉 (電気通信大学)

1 はじめに

量子情報理論を理解する上で、量子 i.i.d. 状態 (n 次テンソル積で表される状態) に関する漸近的性質が重要である。これまで、古典情報理論において漸近性を研究する上で、各種の数値的手法が活用されてきた。一方、量子情報理論においては、このような手法が実現可能とも有効であるとも考えられていなかった。

テンソル積の既約分解は群の表現論における基本的概念の一つであり、林 [1] によって量子 i.i.d. 状態の漸近性の研究に導入されて以来、量子情報理論における重要な数学的手段となっている。長岡は、テンソル積の既約分解が量子 i.i.d. 状態に関する数値シミュレーション手法として有効であることを見だし、文献 [2] において、 2×2 の密度行列からなる i.i.d. 状態の仮説検定の誤り確率について $n = 50$ の場合までの計算例を示した。このアイデアは、長岡の指導のもと、柿崎 [3]、堂嶋 [4] によって検討され、後者では $n = 300$ までの計算例が示された。

本研究の目的は、この手法を用いて、既知の量子仮説検定の定理を題材として大規模な次数 n について高精度の数値シミュレーションが可能であることを実証することである [5–8]。また、このように既知の定理を利用して確立した数値的手法を新しい問題の漸近的性質の数値的検証に活用することである。例えば、文献 [5] では、中心極限定理に関連した新しい予想を数値的に検証している。

本稿では、以上の成果を統計学、物理的側面に焦点を当てて報告する。本稿の構成は以下のとおりである。2 節では、量子 i.i.d. 状態の定義、二つの量子 i.i.d. 状態に対する仮説検定を紹介する。3 節では、 $n \rightarrow \infty$ のときの量子仮説検定の漸近論について述べる。3 節の目標は、数値計算の題材とする量子 Hoeffding の定理を説明することである。4 節で 2×2 行列のテンソル積の既約分解について述べ、これを適用した誤り確率の計算手法を 5 節で記述する。この計算手法を確立するために量子 Hoeffding の定理の数値的検証を行った結果を 6 節で述べる。7 節では、中心極限定理に関連した新しい予想の問題設定を述べ、対応する古典版を導出した後、上記の計算手法を用いて予想の数値的検証を行う。8 節をまとめとする。

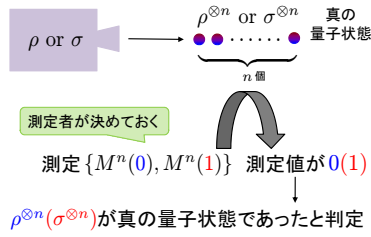
2 量子 i.i.d. 状態とその仮説検定

本節では、量子 i.i.d. 状態の定義、二つの量子 i.i.d. 状態に対する仮説検定の問題設定について述べる [2]。

量子 i.i.d. (independent and identically distributed) 状態とは、数学的には n 次テンソル積 $\rho^{\otimes n} = \rho \otimes \cdots \otimes \rho$ で表される量子状態のことである。ただし、 ρ の行列サイズを $d \times d$ とすると $\rho^{\otimes n}$ の行列サイズは $d^n \times d^n$ である。ここで、 n をテンソル次数と呼ぶ。量子 i.i.d. 状態は、物理的には n 個の量子系が独立に同じ状態 ρ に置かれている状況を指す。また、古典確率論においてはデータ数 n の独立同一分布に相当する。本稿では、密度行列 ρ として物理的に興味のある個々の例をとるのではなく、一般の密度行列 ρ に対する量子 i.i.d. 状態 $\rho^{\otimes n}$ を考察の対象とする。

今、二つの量子 i.i.d. 状態 $\rho^{\otimes n}, \sigma^{\otimes n}$ のうちどちらかが与えられているとして、何らかの測定を用いて真の量子状態がどちらであるかを判定する問題を考える。判定結果が「 $\rho^{\otimes n}$ である」「 $\sigma^{\otimes n}$ である」という事象をそれぞれ $0, 1$ で表すことにし、判定のプロセスは二値測定を表す POVM (Positive Operator-Valued Measure) $M^n = \{M^n(0), M^n(1)\}$ で与える。ただし、 $M^n(0), M^n(1)$ は、 $\rho^{\otimes n}, \sigma^{\otimes n}$ と同じサイズの半正定値行列である。以上の判定のプロセスを図 1 に図示する。

以上の判定方法では、 $\rho^{\otimes n}$ が真であるが $\sigma^{\otimes n}$ が真と判定する誤りと、 $\sigma^{\otimes n}$ が真であるが $\rho^{\otimes n}$ が真と判定す

図1 量子仮説検定: $\rho^{\otimes n}$ v.s. $\sigma^{\otimes n}$

真の状態	測定値	判定	正・誤
$\rho^{\otimes n}$	0	$\rho^{\otimes n}$	正しい
	1	$\sigma^{\otimes n}$	第1種誤り
$\sigma^{\otimes n}$	0	$\rho^{\otimes n}$	第2種誤り
	1	$\sigma^{\otimes n}$	正しい

図2 量子仮説検定における誤り

る誤りが生じ得る。これらをそれぞれ第1種・第2種誤りと呼ぶ。この状況を図2に示す。

POVM $M^n = \{M^n(0), M^n(1)\}$ において $M^n(0) + M^n(1) = I_n$ が成り立つので、 M^n を一つの行列 $T_n := M^n(0)$ で指定することができる。この T_n を検定と呼ぶ。検定を用いてこれらの誤りが生じる確率を表すと、

$$\alpha_n[T_n] := \text{Tr}[\rho^{\otimes n}(I - T_n)] = 1 - \text{Tr}[\rho^{\otimes n}T_n] \quad (1)$$

$$\beta_n[T_n] := \text{Tr}[\sigma^{\otimes n}T_n] \quad (2)$$

となる。ここで、 $\alpha_n[T_n], \beta_n[T_n]$ はそれぞれ第1種・第2種誤り確率と呼ばれる。

検定 T_n として、実数パラメータ a をもつ量子 Neyman-Pearson 検定

$$S_n(a) := \{\rho^{\otimes n} - e^{na}\sigma^{\otimes n} > 0\} \quad (3)$$

を考える。ここで、任意のエルミート行列 A に対し、行列 $\{A > 0\}$ を以下のように定める*1。 A の固有値と固有ベクトルから成る正規直交基底をそれぞれ $\{\lambda_i\}$, $\{|x_i\rangle\}$ (縦ベクトル) とおくと、 A のスペクトル分解

$$A = \sum_i \lambda_i |x_i\rangle \langle x_i| \quad (4)$$

が得られる。これに対し、

$$\{A > 0\} := \sum_{\lambda_i > 0} |x_i\rangle \langle x_i| \quad (5)$$

と定義する。すなわち、 $\{A > 0\}$ は A と同じサイズのエルミート行列であり、 A の正固有値に対応する固有空間の直和への射影を表す。同様に、

$$\{A \leq 0\} := \sum_{\lambda_i \leq 0} |x_i\rangle \langle x_i| \quad (6)$$

も定義できる。ここで、

$$\{A > 0\} + \{A \leq 0\} = I$$

であるから、集合 $\{\{A > 0\}, \{A \leq 0\}\}$ は POVM をなしていることに注意する。

量子 Neyman-Pearson 検定 $S_n(a)$ を用いたときの第1種・第2種誤り確率は式(1),(2)より、

$$\begin{aligned} \alpha_n(a) &:= \alpha_n[S_n(a)] \\ &= \text{Tr}[\rho^{\otimes n}\{\rho^{\otimes n} - e^{na}\sigma^{\otimes n} \leq 0\}] = 1 - \text{Tr}[\rho^{\otimes n}\{\rho^{\otimes n} - e^{na}\sigma^{\otimes n} > 0\}] \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \beta_n(a) &:= \beta_n[S_n(a)] \\ &= \text{Tr}[\sigma^{\otimes n}\{\rho^{\otimes n} - e^{na}\sigma^{\otimes n} > 0\}] \end{aligned} \quad (8)$$

と表される。

第1種・第2種誤り確率 $\alpha_n(a), \beta_n(a)$ に対して、以下が成り立つ。

*1 $\{A > 0\}$ という記法は、「確率変数 A が正の値をとるという事象」の類似物として導入されたものである [2]。

定理 1 (量子 Neyman-Pearson の補題 [9]). 任意の検定 T_n と実数 a に対して, $\alpha_n[T_n] \leq \alpha_n(a)$ ならば $\beta_n[T_n] \geq \beta_n(a)$ が成り立つ.

この定理は, $\alpha_n[T_n]$ を $\alpha_n(a)$ よりも小さく抑えようとする, もう片方の $\beta_n[T_n]$ が $\beta_n(a)$ よりも大きくなってしまふことを主張している. この意味で, 量子 Neyman-Pearson 検定は最適な検定である.

3 量子仮説検定の漸近論

本節では, 第 1 種・第 2 種誤り確率 $\alpha_n[T_n], \beta_n[T_n]$ の $n \rightarrow \infty$ における漸近的挙動に関するいくつかの事実を述べる [1, 2].

$n \rightarrow \infty$ における漸近的挙動については, 誤り確率そのものよりも,

$$-\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \alpha_n[T_n], \quad -\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \beta_n[T_n] \quad (9)$$

といった指数的な量に興味がある. ここで,

$$-\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \alpha_n[T_n] = R, \quad -\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \beta_n[T_n] = r \quad (10)$$

の関係が成り立っているとき,

$$\alpha_n[T_n] \sim e^{-nR}, \quad \beta_n[T_n] \sim e^{-nr} \quad (11)$$

というように $\alpha_n[T_n]$ と $\beta_n[T_n]$ を近似できることに注意する. また, 極限 \lim を用いているが, 極限が存在するとは限らないので本来は \limsup, \liminf を使うべきである. しかし, 本稿では簡単のため極限 \lim が存在すると仮定して議論をしていく.

第 1 種誤り確率 $\alpha_n[T_n]$ に指数的な制約を課した状況で, 第 2 種誤り確率 $\beta_n[T_n]$ の収束値に関して, 以下の定理が知られている. それについて述べるため, 量子相対エントロピー

$$D(\sigma \parallel \rho) := \text{Tr}[\sigma(\log \sigma - \log \rho)] \quad (12)$$

という量を導入しておく.

定理 2 (量子 Stein の補題の順定理 [10]). 任意の $R < D(\sigma \parallel \rho)$ に対して,

$$-\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \alpha_n[T_n] \geq R, \quad (13)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \beta_n[T_n] = 0 \quad (14)$$

を満たす検定の列 $\{T_n\}$ が存在する.

定理 3 (量子 Stein の補題の強逆定理 [11]).

$$-\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \alpha_n[T_n] > D(\sigma \parallel \rho) \quad (15)$$

ならば

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \beta_n[T_n] = 1 \quad (16)$$

である.

式 (11) からわかるように, r や R は誤り確率が 0 に近づく指数的な速度であるから, 双方ともできるだけ大きくできることが望ましい. しかし, R, r は $\alpha_n[T_n], \beta_n[T_n]$ と同様に, 片方を大きくすればもう片方が小さ

$$V(aA^{\otimes n} + bB^{\otimes n})V^* = \bigoplus_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \bigoplus^{m_k} (aA_k + bB_k) \quad (22)$$

$$V(A^{\otimes n} B^{\otimes n})V^* = \bigoplus_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \bigoplus^{m_k} (A_k B_k). \quad (23)$$

ここで、我々は行列のトレースを計算するために既約分解を用いるので、ユニタリ行列 V そのものを求める必要はないことを注意しておく。

既約成分 A_k の (i, j) 成分 $\alpha_{k,ij}$ ($i, j \in \{0, 1, \dots, r\}$) は以下のように求められる、 $r := n - 2k$ とし、まず

$$(a_{11}y + a_{21}z)^{r-j} (a_{12}y + a_{22}z)^j = \sum_{i=0}^r \alpha'_{k,ij} y^{r-i} z^i \quad (24)$$

という多項式展開から係数 $\alpha'_{k,ij}$ を求め、これを用いて

$$\alpha_{k,ij} = (\det A)^k \sqrt{\frac{rC_j}{rC_i}} \alpha'_{k,ij} \quad (25)$$

と計算できる。

例 (テンソル次数 $n = 2$ の場合). この場合、 4×4 のユニタリ行列 V が存在して、

$$VA^{\otimes 2}V^* = \begin{bmatrix} A_0 & O \\ O & A_1 \end{bmatrix}$$

とブロック対角化でき、 $\dim A_0 = 3, \dim A_1 = 1$ で、 $m_0 = m_1 = 1$ となり既約成分に重複はない。

まず、既約成分 A_0 の行列成分 $[\alpha_{0,ij}]$ を求める。式 (24),(25) より、

$$[\alpha'_{0,ij}] = \begin{bmatrix} a^2 & ab & b^2 \\ 2ac & ad + cb & 2bd \\ c^2 & cd & d^2 \end{bmatrix}$$

$$[\alpha_{0,ij}] = \begin{bmatrix} a^2 & \sqrt{2}ab & b^2 \\ \sqrt{2}ac & ad + cb & \sqrt{2}bd \\ c^2 & \sqrt{2}cd & d^2 \end{bmatrix}$$

と求められる。

次に、既約成分 A_1 の行列成分 $[\alpha_{1,ij}]$ を求める。既約成分 A_0 を求めるときと同様に、

$$[\alpha'_{1,ij}] = [1]$$

$$[\alpha_{1,ij}] = (\det A)[\alpha'_{1,ij}] = [ad - bc]$$

となる。

5 テンソル積の既約分解を用いた誤り確率の計算

本節では、前節で述べたテンソル積の既約分解を誤り確率の計算に適用する。

以下では、第2種誤り確率 $\beta_n(a)$ の計算手順について述べるが、第1種誤り確率 $\alpha_n(a)$ についてもまったく同様である。式 (22),(23) より、誤り確率 $\beta_n(a)$ は次のように表される:

$$\beta_n(a) = \text{Tr}[\sigma^{\otimes n} \{\rho^{\otimes n} - e^{na} \sigma^{\otimes n} > 0\}] \quad (26)$$

$$= \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} m_k \text{Tr}[\sigma_k \{\rho_k - e^{na} \sigma_k > 0\}]. \quad (27)$$

ただし, $\{\rho_k\}$ と $\{\sigma_k\}$ はそれぞれ $\rho^{\otimes n}$ と $\sigma^{\otimes n}$ の既約成分である. 式 (27) で,

$$\beta_{n,k}(a) := \text{Tr}[\sigma_k \{\rho_k - e^{na} \sigma_k > 0\}] \quad (28)$$

とおくと, 誤り確率 $\beta_n(a)$ は

$$\beta_n(a) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} m_k \beta_{n,k}(a) \quad (29)$$

と表せる. 図 3 で式 (28),(29) の計算手順を与える.

(ステップ) 1. 各 k について, 以下を行う.

(a) 式 (24),(25) を用いて $\{\rho_k\}$ と $\{\sigma_k\}$ を計算する.

(b) 行列 $\rho_k - e^{na} \sigma_k$ の固有値 $\{\lambda_{n,k,i}\}_i$ と正規直交化された固有ベクトル $\{v_{n,k,i}\}_i$ を数値解法で求める.

(c) $\beta_{n,k}(a) = \sum_{\lambda_{n,k,i} > 0} \langle v_{n,k,i} | \sigma_k | v_{n,k,i} \rangle$ を求める.

(ステップ) 2. $\beta_n(a) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} m_k \beta_{n,k}(a)$ を求める.

図 3 $\beta_n(a)$ の計算手順

図 3 の手順のステップ 1 において各 k に対する処理は独立なので, 計算機実装する際には並列化を施している. また, ステップ 1.(b) で固有値分解を行う行列の固有値は指数的にばらついているため, 固有値分解の過程で大きな数値誤差が生じる. そのため, 通常の数値計算で用いられる倍精度の桁数では足りないので, 多倍長演算を用いることにする.

本研究では, 密度行列 ρ, σ は 2×2 の場合に限るので, ρ, σ は実対称行列に限っても一般性を失わない. そのため, 実際の計算では ρ, σ は実対称行列のみを扱う. 行列 $\rho_k - e^{na} \sigma_k$ も実対称行列であるので, この固有値分解にも実対称行列向けのルーチンを用いる.

6 量子 Hoeffding の定理の数値的検証

本節では, 前節で述べた既約分解を用いた誤り確率の計算法を使って, 量子 Hoeffding の定理の数値的な検証を行う.

計算を行う値に対する用語や記号を整理しておく. 密度行列 ρ, σ を一組固定し, 任意のテンソル次数 n と実数 a に対し,

$$r_n(a) := -\frac{1}{n} \log \beta_n(a) \quad (30)$$

$$r(a) := \lim_{n \rightarrow \infty} r_n(a) \quad (31)$$

とおく. ここで, $r_n(a)$ を誤り指数, $r(a)$ を極限值と呼ぶことにする.

我々は量子 Hoeffding の定理を数値的に検証するために, 誤り指数 $r_n(a)$ と極限值 $r(a)$ の数値計算を行い, n が大きくなるにつれて $r_n(a)$ が $r(a)$ に近づいていく様子を観察する. なお, 極限值 $r(a)$ は, 定理 4 より表式 (18) がわかっている. ここで, 式 (20) の $\psi(\theta)$ は凸関数であるので, Newton 法を用いて簡単に式 (18) の最右辺の \max を計算できる.

用いる密度行列は

$$\rho = U \left(\frac{\pi}{4} \right)^* \begin{bmatrix} 0.1 & 0 \\ 0 & 0.9 \end{bmatrix} U \left(\frac{\pi}{4} \right), \quad \sigma = U \left(\frac{\pi}{6} \right)^* \begin{bmatrix} 0.95 & 0 \\ 0 & 0.05 \end{bmatrix} U \left(\frac{\pi}{6} \right) \quad (32)$$

である。ただし、

$$U(\theta) := \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \quad (33)$$

である。

この密度行列について、まず、いくつかの n に対して誤り指数 $r_n(a)$ と極限值 $r(a)$ を計算した結果を図 4 に示す。なお、本稿の図において、計算結果の曲線はスプラインを用いず折れ線で描画している。図 4 より、テンソル次数 n を大きくしていくにつれて $r_n(a)$ が $r(a)$ に近づいていく様子が見て取れる。

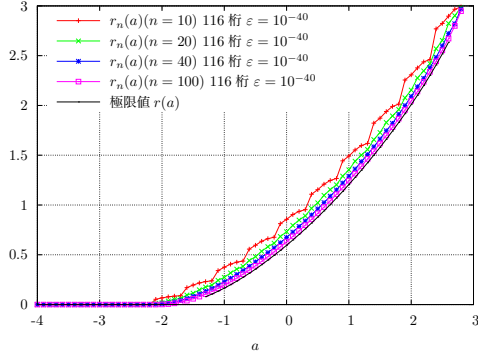


図 4 誤り指数 $r_n(a)$ が極限值 $r(a)$ に近づいていく様子

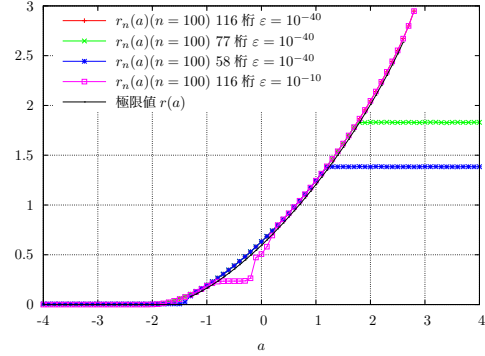


図 5 桁数や ε を変えたときの誤り指数 $r_n(a)$

次に、 $n = 100$ の場合の $r_n(a)$ を桁数と ε を変えて計算した結果を図 5 に掲載する。図 5 において、桁数を 58, 77 桁と少なくした場合 (青色・緑色のグラフ) は、それぞれ $a = 1.3, 1.9$ 以上でグラフが乱れ飽和するような現象が生じている。また、 $\varepsilon = 10^{-10}$ と甘い場合 (桃色のグラフ) は $a = -0.8 \sim 0.2$ あたりで乱れている。

このような歪は、他の ρ, σ でも起きることを確認している。理論的に $r_n(a) > r(a)$ がわかっているのに、誤り指数 $r_n(a)$ が極限值 $r(a)$ を下回っている箇所は数値誤差が原因である。

7 新種の量子中心極限定理の数値的検証

前節では、既に知られた量子 Hoeffding の定理を数値的に検証するために既約分解を用いた計算法を用いたが、本節では、この計算法を新しい数学的予想の数値的検証に適用し、その有効性を示す。

まず、新しい予想の問題設定を述べる。これまで、パラメータ a は n に依存しない定数としていた。ここでは、新たなパラメータ $y \in \mathbb{R}$ を導入し、

$$a := -D(\sigma \parallel \rho) - \frac{y}{\sqrt{n}}$$

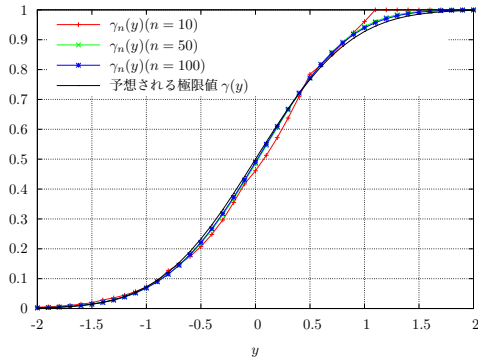
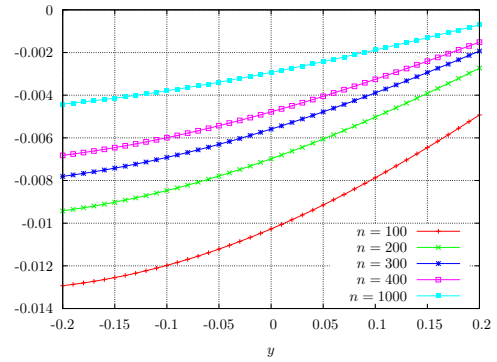
とおく。このとき、 $\beta_n(a)$ は

$$\gamma_n(y) := \text{Tr}[\sigma^{\otimes n} \{ \rho^{\otimes n} - \exp[-n(D(\sigma \parallel \rho) + \frac{y}{\sqrt{n}})] \sigma^{\otimes n} > 0 \}] \quad (34)$$

と表される。我々は、 $\gamma_n(y)$ の $n \rightarrow \infty$ としたときの漸近的な振る舞いに興味がある。

古典論では、 $\gamma_n(y)$ は

$$\begin{aligned} \gamma_n(y) &= \Pr\{p^n(X^n) - \exp[-n(D(q \parallel p) + \frac{y}{\sqrt{n}})]q^n(X^n) > 0\} \\ &= \Pr\{\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n \log \frac{p(X_t)}{q(X_t)} > -D(q \parallel p) - \frac{y}{\sqrt{n}}\} \end{aligned} \quad (35)$$

図6 $\gamma_n(y)$ と予想極限值 $\gamma(y)$ 図7 予想極限值との差 $\gamma_n(y) - \gamma(y)$

と表される. ここで, p, q は任意の確率分布で, その相対エントロピーは $D(q||p) := \sum_x q(x) \log \frac{q(x)}{p(x)}$ である. また, $X^n = (X_1, \dots, X_n)$ は確率変数で, q の i.i.d. 拡張 q^n に従っているとす. このとき,

$$A_t := \log \frac{p(X_t)}{q(X_t)}$$

は平均値が相対エントロピー $D(q||p)$ の実数値確率変数である. ここで, A_t の分散を s とすると, $\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{t=1}^n (A_t - \mu)$ は中心極限定理より, 漸的に平均値 0, 分散 s の正規分布に従う. すなわち,

$$\gamma_n(y) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{y/s} \exp(-\frac{\alpha^2}{2}) d\alpha \quad (n \rightarrow \infty) \quad (36)$$

である.

古典版の式 (36) からの類推より, 式 (34) の量子版の $\gamma_n(y)$ の極限值について次のような予想を立てる.

予想 1 (新種の量子中心極限定理).

$$\gamma_n(y) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{y/s} \exp(-\frac{\alpha^2}{2}) d\alpha =: \gamma(y) \quad (n \rightarrow \infty) \quad (37)$$

ここで, $s^2 = \text{Tr}[\sigma(\log \sigma - \log \rho - D(\sigma||\rho))^2]$ である.

この予想の量子仮説検定における意義はまだ明らかではないが, 現時点では証明も反例も知られておらず成り立っているかどうかという数学的な興味を引き起こす.

次に, 既約分解を用いた誤り確率の計算アルゴリズムを使用して, この予想を数値的に検証する. シミュレーションで扱う密度行列は次の通りである:

$$\rho = U\left(\frac{\pi}{6}\right)^* \begin{bmatrix} 0.75 & 0 \\ 0 & 0.25 \end{bmatrix} U\left(\frac{\pi}{6}\right), \quad \sigma = \begin{bmatrix} 0.9 & 0 \\ 0 & 0.1 \end{bmatrix}. \quad (38)$$

信頼できる結果を得るため, 計算はすべて多倍長演算で行う. また, 計算にはスーパーコンピュータ 東京大学 HA8000 [17] を用いることにする.

図6に小さな n についてのシミュレーション結果を掲げる. 図6において, $\gamma_n(y)$ のグラフはほとんど $\gamma(y)$ に重なっている.

収束していることを確かめるために, 図7に大きな n について予想極限值との差 $\gamma_n(y) - \gamma(y)$ を掲げる. 図7において, n が大きくなるほど, この差が0に近づいていく様子が観察できる. 他の密度行列 ρ, σ の組に関しても同様の収束を確認した. この結果は予想1の正しさを支持していると考えられる.

未知の極限定理の正答を数値シミュレーションによって調べることは, 通常確率論においては常套手段となっているが, 量子情報理論ではそのような研究例はほとんど報告されていない. 本章で示した結果はそのような研究の有効性を示した一例であるといえる.

8 まとめ

本稿では、二つの量子状態の i.i.d. 状態に対する仮説検定問題を紹介した。また、この問題設定における誤り確率の計算にテンソル積の既約分解を適用した計算手法について述べた。以下は、この計算手法を用いて得られた結果である。

1. 量子 Hoeffding の定理を数値的に検証した。具体的には、テンソル次数 n が大きくなるほど、誤り指数 $r_n(a)$ が極限值 $r(a)$ に収束していくことを確認した。
2. 新種の量子中心極限定理に適用し、予想した極限值に収束していくことを確かめた。

今後の課題としては、以下が考えられる。

3. 新種の量子中心極限定理の量子情報理論における意義を明らかにすること
4. 本稿では 2×2 サイズの密度行列を扱ったが、 3×3 サイズ以上に拡張すること
5. 本稿では二つの量子状態に関する仮説検定問題を扱ったが、三つ以上の量子状態に拡張し、その漸近的性質を解明すること
6. 量子推定など他の問題への応用

謝辞

本研究を進めるにあたって、ご指導頂いた長岡浩司教授に感謝申し上げます。

平成 21 年度後期・22 年度前期の二度にわたってスパコン若手利用者推薦の支援をいただいた東京大学情報基盤センター・スーパーコンピューティング部門に謝意を表す。東京大学情報基盤センターには、平成 23 年度学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点に際し、共同研究利用大学としても支援をいただいている。

最後に、基礎物理学研究所研究会「物理と情報の階層構造 —情報を接点とした諸階層の制御と創発—」で発表する機会を与えていただき感謝する。

参考文献

- [1] Masahito Hayashi. Asymptotics of quantum relative entropy from a representation theoretical viewpoint. *J. Phys. A: Math. Gen.*, Vol. 34, No. 16, pp. 3413–3419, 2001.
- [2] Hiroshi Nagaoka and Masahito Hayashi. An information-spectrum approach to classical and quantum hypothesis testing for simple hypotheses. *IEEE Trans. Inf. Theory*, Vol. 53, No. 2, pp. 534–549, 2007.
- [3] 柿崎晃. 量子的 i.i.d. 情報源に関する数値計算によるアプローチ. Master's thesis, 電気通信大学情報システム学研究科, 2006.
- [4] 堂嶋隆幸, 片桐孝洋, 長岡浩司. 量子 i.i.d. 状態における仮説検定の漸近特性に関する数値的アプローチ. 第 29 回情報理論とその応用シンポジウム予稿集 (SITA), pp. 767–770, 2006.
- [5] Tatsuya Sakashita and Hiroshi Nagaoka. A numerical study of hypothesis testing for quantum i.i.d. states. *Asian conference on quantum information science(AQIS)*, pp. 213–214, Aug. 2010.
- [6] 坂下達哉, 片桐孝洋, 長岡浩司. 量子 i.i.d. 状態の仮説検定に関する数値的手法とその誤差分析. 情報処理学会論文誌コンピューティングシステム (ACS), No. 35, October 2011.
- [7] 坂下達哉. 量子 i.i.d. 状態のシミュレーションとその理論的考察. スーパーコンピューティングニュース,

Vol.13 特集号 1, , March 2011.

- [8] 坂下達哉, 長岡浩司. 量子 i.i.d. 状態のシミュレーションとその理論的考察. 日本応用数理学会 2010 年度年会 講演予稿集, pp. 245–246, 2010.
- [9] Alexander S. Holevo. Statistical decision theory for quantum systems. *Journal of Multivariate Analysis*, Vol. 3, No. 4, pp. 337–394, December 1973.
- [10] Fumio Hiai and Dénes Petz. The proper formula for relative entropy and its asymptotics in quantum probability. *Commun. Math. Phys.*, Vol. 143, No. 1, pp. 99–114, December 1991.
- [11] Tomohiro Ogawa and Hiroshi Nagaoka. Strong converse and stein’s lemma in quantum hypothesis testing. *IEEE Trans. Inf. Theory*, Vol. 46, No. 7, pp. 2428 –2433, November 2000.
- [12] Tomohiro Ogawa and Masahito Hayashi. On error exponents in quantum hypothesis testing. *IEEE Trans. Inf. Theory*, Vol. 50, No. 6, pp. 1368 – 1372, June 2004.
- [13] Masahito Hayashi. Error exponent in asymmetric quantum hypothesis testing and its application to classical-quantum channel coding. *Phys. Rev. A*, Vol. 76, No. 6, pp. 062301–1,062301–4, 2007.
- [14] Hiroshi Nagaoka. The converse part of the theorem for quantum Hoeffding bound. *arXiv:quant-ph/0611289v1*, 2006.
- [15] 山内恭彦, 杉浦光夫. 連続群論入門. 培風館, 2010.
- [16] 岩堀長慶. 対称群と一般線型群の表現論 (岩波講座 基礎数学). 岩波書店, 1978.
- [17] 東京大学情報基盤センター. HA8000 クラスタシステム. <http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/system/ha8000/>.

Collapse を伴う自己重力 N 体系の速度緩和の非単調性

小松 信義

金沢大学 理工研究域 機械工学系

1. はじめに

重力エネルギーが支配的な N 体系は、力学的進化の初期に、激しい緩和により準定常状態に到達する。その後、コアが形成される崩壊 (collapse) を経て、長期間かけてコア・ハロー状態へ、次第に系が進化していく [1-3]。このような自己重力 N 体系では、重力特有の長距離力のために、厳密な意味での熱力学的平衡は存在しない。しかし、熱・統計力学的な観点から考えると、速度分布は、系の進化に伴いガウス分布 (いわゆるマクスウェル-ボルツマン分布) に相当する状態へと、徐々に緩和するものと予想される [2]。一方、散開星団の観測データに基づく、 10^9 年以上の古い星団の速度分布は、ガウス分布に近づくどころか、非ガウスの分布にさらに進化するという興味深い報告が近年されている [4]。本研究では、このような自己重力 N 体系の速度緩和を明らかにするため、断熱球殻壁内の少粒子系を対象に、自由落下時間から崩壊時間までの時間スケールに渡り、 N 体シミュレーションを実施した [5,6]。(本稿では、文献[5]で発表され、文献[6]にまとめられている研究内容の一部を紹介する。)

2. シミュレーション手法

本研究では、半径 R の球殻の断熱壁に囲まれた自己重力 N 体系を考え、重力ポテンシャル に Plummer softened potential [1,2,5-7]

$$\Phi = -1/\sqrt{r^2 + r_0^2} \quad (1)$$

を用いる (r : 粒子間距離, r_0 : ソフトニング半径)。但し、重力定数 G , 半径 R , 粒子の質量 m を $G=R=m=1$ に設定し、ソフトニング半径を $r_0=0.005R$, 粒子数を $N=125$ とする。また、cold collapse を模擬するため、ビリアル比 $2K/|U|$ が 0.01 以下になるように微小の初期速度を与え、初期密度分布は Plummer 分布 [6] とした。ここで、 K は運動エネルギー、 U は重力エネルギーを表す。以下、この初期状態を用いて、系の時間発展をマイクロカノニカル解析する (アンサンブル数 30)。尚、重力エネルギーが支配的な自己重力 N 体系を解析するため、エネルギーは $ER/(Gm^2N^2) = -1$ とする。本解析の単位系に基づく、系の自由落下時間は $t = 0.2$, 緩和時間は $t = 0.5$ である [6]。

本検討では、速度緩和を評価するため、規格化した velocity moments の比 V_M [5,6] と Tsallis の entropic parameter q [8] を使用する。時刻 t の velocity moments の比は、

$$v_m(t) = \frac{\langle v_i^2(t) \rangle^2}{\langle v_i^4(t) \rangle} \quad (2)$$

として計算できるので (v_i : 各粒子の速さ, $\langle \rangle$: 全粒子に対する平均操作), 式(2)を用いて、「規格化した velocity moments の比」を次式で定義する。

$$V_M(t) = \frac{v_m(t)}{v_{mG}} \quad (3)$$

ここで、式(3)の分母はガウス (Gauss) 分布に相当する $v_m(t)$ の値を表す。従って、速度分布がガウス分布ならば $V_M=1$ となる。尚、速度分布は速度分布と密接に関連するため、本研究では、 V_M を「規格化した velocity moments の比」と呼んでいる [6]。さらに、非ガウスの速度分布関数として、 q -Gaussian 分布を次式で定義する。

$$f_q(v) = A \exp_q(-Bv^2) = A[1 - B(1-q)v^2]^{\frac{1}{1-q}} \quad (4)$$

$$\exp_1(-Bv^2) = \exp(-Bv^2) \quad (5)$$

ここで、 q は Tsallis' entropic parameter を表し、 $q=1$ の場合がガウス速度分布である。 A は規格化パラメータ、 B は温度の逆数におよそ相当する(但し、 B は q にも依存する)。

3. 結果

規格化した velocity moments の比 V_M 、Tsallis' entropic parameter q およびコア粒子数 N_c の時間発展を Fig.1 に示す。Fig.1 から、およそ自由落下時間 ($t \approx 0.2$) から緩和時間 ($t \approx 0.5$) が経過すると、 q および V_M は 1 から偏移した非ガウスの速度分布 (non-Gaussian) に落ち着く。これは、系が準定常状態に到達したためである。更に系が進化すると、コア粒子数 N_c が急増し、コアが形成される。すなわち、準定常状態が終了し、collapse がはじまる。この時、 q および V_M の 1 からの偏移量は更に増加する。従って、collapse 過程のため、速度分布は、より非ガウスの分布 (higher non-Gaussian) へと偏移する。この結果は、散開星団の速度分布の偏移[4]と関連があるのではないかと予想される。但し、コアの形成後、更に長時間経過すると、 q および V_M は徐々に 1 に到達し、速度分布がガウス分布に緩和していく。従って、collapse を経由する自己重力 N 体系では、速度分布は最終的にはガウス分布に到達するものの、その速度緩和は collapse 過程のために、非単調な緩和であることが明らかになった。

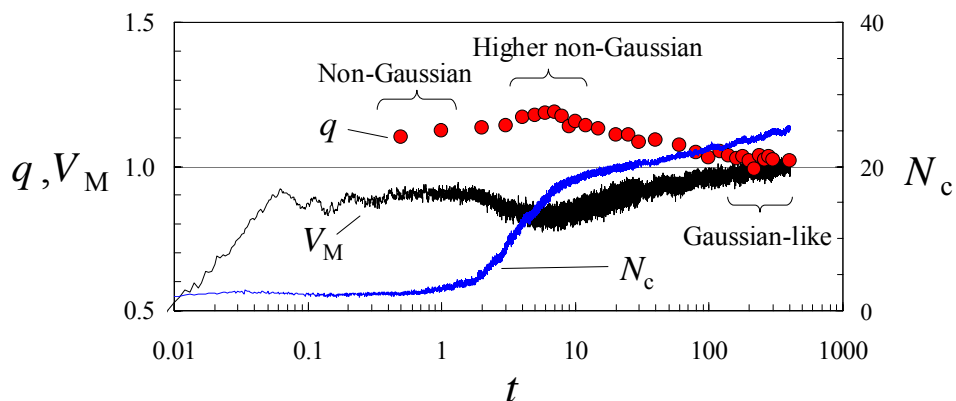


Fig. 1. Time evolutions of normalized ratio of velocity moments V_M , Tsallis' entropic parameter q , and number of core particles N_c [5, 6].

4 . まとめ

自己重力 N 体系の速度分布の緩和過程を明らかにするため, cold collapse を模擬した N 体シミュレーションを実施した. その結果, 初期速度がほぼ 0 の特殊な初期条件を用いても, 自由落下時間から緩和時間のオーダーで, 速度分布は急激に非ガウスのな分布に緩和することが確認できた. しかし, collapse がはじまると, 速度分布は, さらに非ガウスのな分布に進化していくことが判明した. 但し, 最終的には, 速度分布はガウスのな分布に緩和することも確認され, 速度緩和の非単調性が示された. 尚, 初期速度分布をガウス分布に設定した場合でも, 同様の速度緩和の非単調性が得られることを確認している [6].

参考文献

- [1] J. Binney, S. Tremaine, Galactic Dynamics, Princeton University Press, Princeton, 1987.
- [2] I. Ispolatov, M. Karttunen, Phys. Rev. E **68**, 036117, 2003.
- [3] T. E. C. Merrall, *et al.*, Astrophys. J. **595**, 43, 2003.
- [4] J. C. Carvalho *et al.*, Physica A **384**, 507, 2007.
- [5] N. Komatsu, *et al.*, Book of Abstracts of the 2nd international symposium on 'Multi-scale Simulations of Biological and Soft Materials', pp.22, 2011; 小松ほか, 日本物理学会講演概要集, 第 66 巻, 第 2 号 (2011 年秋季大会) 第 2 分冊, 2011, pp.206, 2011; N. Komatsu, Book of Abstracts: IUTAM Symposium on 50 Years of Chaos: Applied and Theoretical, pp.76, 2011 (*to be published in* Procedia IUTAM 2012).
- [6] N. Komatsu, *et al.*, Phys. Rev. E **85**, 021132, 2012.
- [7] N. Komatsu, *et al.*, Phys. Rev. E **82**, 021118, 2010; Phys. Rev. E **80**, 041107, 2009.
- [8] C. Tsallis, Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics: Approaching a Complex World, Springer, 2009.

量子グラフ理論と量子素子

全 卓樹*

* 高知工科大学 782-8502 高知県香美市土佐山田町宮の口 185
* Kochi University of Technology, Tosa Yamada, Kochi, Japan
* E-mail: taksu.cheon@kochi-tech.ac.jp

キーワード：量子グラフ、単電子素子、量子的可解系
平成24年6月20日

1. 序

量子グラフとは、複数の一次元的直線を節点たちで結んだグラフ様の物体を考えて、その中を量子的粒子が動き回る、という系の謂いである¹⁾。この場合直線の中は多かれ少なかれ自由運動のようなものを想定し、何かが起こるのは節点においてということになる。

長らくもっぱら数理的興味から細々と研究されてきた量子グラフが、最近ではナノスケールの量子的な単電子素子のモデルとしても語られるようになってきた。カーボンナノチューブ等のナノワイヤーに基づくもの、超電導体のエッジ電流に基づくもの等、実験的にはいろいろ考えられる。実用はまだ大分先のようなでもあるが、今や一次元的な媒体の中の単一量子の運動の制御が実験室段階で充分可能になってきており、そのような系を理論的に取り扱う一般的な枠組みとして、量子グラフ理論を整備する機が熟しているとも考えられる。

量子素子の数理的モデルとして量子グラフを眺めた場合の問題設定は、まず望ましい性質や面白い性質を指定して、ついでそのような性質を帯びた量子グラフを構成する、という順序になる。すると我々に与えられるのは二つの課題である。

- [1] 指定したS行列とをたらず量子グラフを造る道筋：
S行列→接続行列→デルタ型節点からの構成、を確立する事
- [2] どのような基準で「面白い性質」を決め、それをどう「望ましい性質」の「有用な素子」につなげるかというシナリオを描く事

である。本稿では量子グラフの素粒子とも言うべき「星状量子節点」を取り上げ、まず第1の課題に「フロップ筒井型量子節点の逆散乱問題」を解くことによって応える。ついで第2の課題に対しては、無反射かつ無透過外線を持つグラフにおける「閾値共鳴現象」という特別な性質に焦点を当て、それから齎される「制御可能なスペクトルフィルター」を考察する事で応えようとする。

2. 接続行列と散乱行列

一つの節点から n 本の直線が出ているものを想定し、その上での量子粒子の運動を考える。各直線の座標 x_i を節点

を零に外向きにとり、その上での波動関数を $\psi_i(x_i)$ とする。各線には線ごとに一様なポテンシャル U_i がかかっているとしてみよう。粒子の自由空間でのエネルギーを $E = k^2$ とお

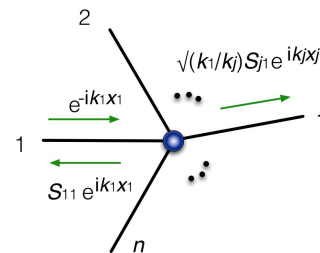


図1 グラフ上の量子粒子の散乱

くと、各直線上での運動量 k_i は $k_i = \sqrt{k^2 - U_i}$ となる。各直線上での節点近傍での波動関数とその微分を $\psi_i = \psi(0)$, $\psi'_i = \psi'(0)$ とかいて、それらより二つの接続ベクトル

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}, \Psi' = \begin{pmatrix} \psi'_1 \\ \vdots \\ \psi'_n \end{pmatrix}, \quad (1)$$

を定義する。量子粒子にとって Ψ , および Ψ' がどのように定まるかで「節点の性質」が決まる。有限のチューブを接続して小さな極限を考えれば、どのような接続を考えたかに応じて異なった節点の性質が得られるのは当然だが、そのような具体的な考察以前に、そもそも健全な量子力学が出来るためには、節点で量子的流速が保存されねばならない。各直線の外向きの流速は $J_\ell = i(\psi_\ell \psi'_\ell - \psi'_\ell \psi_\ell)$ であり、流速の保存は $\sum_\ell J_\ell = 0$ で与えられるが、これは接続ベクトルを用いて $\Psi'^\dagger \Psi - \Psi^\dagger \Psi' = 0$ と表現できる。この条件は

$$B\Psi' + A\Psi = 0 \quad (2)$$

ただし

$$A^\dagger B = B^\dagger A, \quad \text{rank}(A, B) = n, \quad (3)$$

と同等である事が簡単に示せる²⁾。A, Bを指定するのに $2n^2$ 個の複素数が必要で、これが $2n^2 + n^2$ の拘束条件の元にあるので、自由に指定出来るパラメータの数は $4n^2 - 3n^2 = n^2$

となる。この条件はさらに詳細に見ると、0 以上 n 以下の値をとる数 m で A, B 各行列を 4 分割した

$$\begin{pmatrix} I^{(m,m)} & T \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \Psi' + \begin{pmatrix} -S & 0 \\ T^\dagger & -I^{(n-m,n-m)} \end{pmatrix} \Psi = 0 \quad (4)$$

(ただし S は $m \times m$ 次元のエルミート行列、 T は $(n-m) \times m$ 次元の一般複素行列) の型にける事が示されている⁴⁾。これはまた「双対」な形

$$\begin{pmatrix} -\bar{S} & 0 \\ \bar{T}^\dagger & -I^{(n-m',n-m')} \end{pmatrix} \bar{\Psi}' + \begin{pmatrix} I^{(m',m')} & \bar{T} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \bar{\Psi} = 0 \quad (5)$$

とも書ける。ただし $\bar{\Psi}, \bar{\Psi}'$ は Ψ, Ψ' で適宜番号の付け替えを行ったものである。ここで m' はこれも 0 以上 n 以下の数であり、結局接続を特徴づける量の組 (m, m') があることになる。およその意味を言えば、 S の対角要素はデルタの強さ、 \bar{S} の対角要素はデルタプライムの強さを表し、 T の各要素の 1 からのズレはその線への透過のしやすさにくさの目安である： T_{ij} が大きいと j から i への透過が起こりにくい。簡単な考察から S ならびに \bar{S} のうちの真に独立な成分の数、すなわち $rank$ は等しいと判り、これを $r = rank(S) = rank(\bar{S})$ と呼ぶと

$$m + m' = n + r \quad (6)$$

という関係が示せる。

いま特に $r = 0$ の場合を考えるとこれは $S = \bar{S} = 0$ を意味しており、 $m' = n - m$ となって、二つの双対表現 (4)、(5) は同じものである。これは接続条件に「スケールが入らない」という要求からも導かれ、このに叶う接続条件を Fulop-Tsutsui 型と称する³⁾。本稿ではもっぱら Fulop-Tsutsui 型のみを扱う。

系における粒子の散乱を観測して定まる量は散乱行列 S から得られ、これは波動関数がある一つの外線 j からの入射波と反射波、そのあらゆる外線 i への透過波とで

$$\begin{aligned} \psi_{ij}(x) &= e^{-ik_j x} + S_{jj} e^{ik_j x} & \text{for } i = j, \\ &= S_{ij} \sqrt{\frac{k_j}{k_i}} e^{ik_i x} & \text{for } i \neq j. \end{aligned} \quad (7)$$

と表した時の反射波ならびに透過波の振幅係数で決まる。節点近傍での波動関数 $\psi_{ij}(0)$ とその微分 $\psi'_{ij}(0)$ をあつめて作った行列 $M = \{\psi_{ij}(0)\}$ 、 $M' = \{\psi'_{ij}(0)\}$

$$\begin{aligned} M &= I^{(n)} + K^{-1} S K, \\ M' &= iK^2 + iK S K, \end{aligned} \quad (8)$$

は $AM + BM' = 0$ を満たす。ただし $K = \{\sqrt{k_i} \delta_{ij}\}$ である。これから散乱行列は

$$S = -(AK^{-1} + iBK)^{-1} (AK^{-1} - iBK). \quad (9)$$

特にすべての U_i がゼロの場合は、これは非常に簡単になり

$$S = -I^{(n)} + 2 \begin{pmatrix} I^{(m)} \\ T^\dagger \end{pmatrix} \left(I^{(m)} + T T^\dagger \right)^{-1} \begin{pmatrix} I^{(m)} & T \end{pmatrix} \quad (10)$$

の形をとる。

3. ユニタリ&エルミート行列の対角表示とフロップ筒井節点の逆散乱

まずは各外線状の粒子が自由運動をする場合、すなわち全ての j について $U_j = 0$ の場合を考察する。この場合の Fulop-Tsutsui 型の散乱行列 (10) を見ると $S^{-1} = S^\dagger = S$ となっていて、 S は Unitary であるだけでなく Hermite である事も見て取れる。そしてまた接続行列中の S がゼロでない場合は散乱行列 S の Hermite 性が破れるという事実も一般の表現 (9) から導ける。すなわち「節点の接続条件が Fulop-Tsutsui 型で散乱行列が入射エネルギーに依存しない」事と「散乱行列がユニタリーに加えてエルミートでもある」は同等なのである。すると自然に湧く疑問は「あらゆるユニタリーかつエルミートな行列は、何らかの Fulop-Tsutsui 型グラフの散乱行列となっているのだろうか」というものである。その答えが「さよう」であるのは次のようにして解る。

まず式 (10) が少しの変形で次のようにも書き表せる事に留意しよう。

$$S = X_m^{-1} Z_m X_m \quad (11)$$

ただしここで X_m, Z_m は

$$\begin{aligned} X_m &= \begin{pmatrix} I^{(m)} & T \\ T^\dagger & -I^{(n-m)} \end{pmatrix}, \\ Z_m &= \begin{pmatrix} I^{(m)} & 0 \\ 0 & -I^{(n-m)} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (12)$$

で与えられる。この式はユニタリーでエルミートな行列 S の対角化を表しており、 $m, n - m$ は固有値 1 と -1 夫々の個数である事、またこの対角化のための変換行列 X_m の適宜の選択によるブロック化から、Fulop-Tsutsui 接続条件の行列 T を求められる事を示しているのである。このようにして求まる T が一意であるのは、 S を

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}. \quad (13)$$

と分解して、関係 $S_{11} = -I^{(m)} + 2(I^{(m)} + T T^\dagger)^{-1}$ 、また $S_{12} = 2(I^{(m)} + T T^\dagger)^{-1} T$ 、そしてまた $S_{22} = I^{(n-m)} - 2(I^{(n-m)} + T^\dagger T)^{-1}$ が得られ、これから

$$\begin{aligned} T &= \left(I^{(m)} + S_{11} \right)^{-1} S_{12} \\ &= S_{21}^\dagger \left(I^{(n-m)} - S_{22} \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (14)$$

という式が導ける事から解る。この式はまた、関係 $m = \text{rank}(S + I^{(n)})$ 、 $n - m = \text{rank}(S - I^{(n)})$ をも示していて、これは実際に分解 (13) するのに必要な数 m を求める具体的な手順を示している⁵⁾。

ユニタリーでエルミートである行列はかならず固有値 1 と -1 に対角化出来て、上の手順で T が求まるので、どんな散乱パターンを持つ S でも FT 量子グラフで実現可能である。すると問題は「ユニタリーかつエルミートな S としてどんなものが有り得るか」に移行する。例えばこんな問題を考えてみよう。

- 各外線からの入射に対し、反射も含め各線への散乱振幅が等しく、かつ散乱行列が実のものは存在するだろうか
- 各外線からの入射に対し、反射が常にゼロで、その他の各線への散乱振幅がすべて等しく、かつ散乱行列が実のものは存在するだろうか

またこれを少し緩めた次のようなものも考えられる。

- 各外線からの入射に対し、反射も含め各線への散乱振幅が等しいものは存在するだろうか
- 各外線からの入射に対し、反射が常にゼロで、その他の各線への散乱振幅がすべて等しいものは存在するだろうか

これらはそれぞれ「アダマル予想」とそれに関連した「カンファレンス行列予想」、そしてその各々の複素数版に他ならない!

さらにはこれらアダマル行列、カンファレンス行列を含む次ような一般化した行列を考えることもできる。

$$S = \frac{1}{\sqrt{d^2 + n - 1}} \begin{pmatrix} d & e^{i\phi_{12}} & \dots & e^{i\phi_{1n}} \\ e^{i\phi_{21}} & d & \dots & e^{i\phi_{2n}} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ e^{i\phi_{n-11}} & \dots & -d & e^{i\phi_{n-1n}} \\ e^{i\phi_{n1}} & \dots & e^{i\phi_{nn-1}} & -d \end{pmatrix}, \quad (15)$$

このような S 行列はどの外線から入射した粒子も同じ反射確率をもち、全ての他の外線への透過確率も等しい。 d に如何なる値が許されるかという数学的な問題は

$$d \in [0, n/2] \quad (16)$$

という条件が必要との証明は初等的に可能であるが、その領域が全て埋まるのかどうかは非常に困難な問題で、現時点ではその答えは与えられていない⁶⁾。

4. 「通常」の端点からの構成

量子的節点の接続条件のうちで $m = 1$ であって

$$T = \begin{pmatrix} 1 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} s \end{pmatrix} \quad (17)$$

で与えられるものは「デルタ関数形節点」

$$\psi'_1(0) + \dots + \psi'_n(0) = s\psi_1(0) = \dots = s\psi_n(0) \quad (18)$$

であって、これは $n = 2$ の場合の直線上の「デルタ関数ポテンシャル」の一般化に他ならない。そしてここで更に $s = 0$ としたものが「自由接続」である。(文献上は名称に混乱が見られ、「自由接続条件」は「キルヒホフ」、「ディリクレ型」等と称されることもある) 2次元、3次元のチューブを複数接続してその中の量子状態を考え、チューブの幅を狭めて極限をとると、通常の滑らかな極限ではほとんどの場合この自由接続やデルタ型節点に帰着する事が、いろいろな計算から明らかになっている⁸⁾。その意味で「デルタ型」接続条件は時 t 減するのが容易で、それ以外の接続条件は「エキゾチック」でそうすぐには実現出来ないと考えられてきた。実際量子グラフが論ぜられる場合、そこで扱われたのはほぼ常に自由接続を含むデルタ型に限られていた。

では Fulop-Tsutsui 型を代表とするエキゾチックな量子節点は現実の系とは差し当たり縁遠い単なる数学的な構成物なのだろうか。これが決してそうではなく、デルタ型接続条件をもった節点を要素とした内線でつながれた構造を持つグラフの小サイズ極限として実現可能である事が、近年我々によって示されてた⁴⁾。基本的な構成法は次の通りである。

- 節点近傍をカットする。ばらけた n 本の外線間すべてを長さ d の ${}_nC_2$ 本の内線でつなぐ。
- このとき出来た新たな n 個の節点に各々然るべき強さのデルタポテンシャルを置く。(n 個の節点をデルタ型に選ぶ、といっても同様である) このときの強度は d にスケールして発散する。
- 内線 ${}_nC_2$ 本それぞれの中点に然るべき強さのデルタポテンシャルを置く。このときの強度は d にスケールして発散する。さらに各内線毎にに然るべき強さのベクトルポテンシャルを印加する。このベクトルポテンシャルの強度も d にスケールして発散する。
- こうして構成した系が $d \rightarrow 0$ の極限でノルムリゾルベントの意味で与えられた接続条件の系に収束する事が示せる。

この方法だと調整可能なパラメータの数が $n + n(n+1)/2 + n(n+1)/2 = n^2$ となるので、これは接続条件を指定するパラメータの数 n^2 と同じになって話がうまく進みそうである。実際にそのようにしてあらゆる接続条件 (2)、(3) の任意の量子節点を作れる事が判ったのである⁴⁾。実際の構成にあっては場合に応じて、内線中点のデルタポテンシャルを取払い、その代わりに内線間の長さの比を調整可能パラメータとすることももある。

ここでは話を Fulop-Tsutsui 型に限って具体的な構成法を示してみよう。

(i) 接続行列 T から

$$Q = \begin{pmatrix} -TT^\dagger & T \\ -T^\dagger & I^{(m)} \end{pmatrix} \quad (19)$$

を作る。行列 Q の各要素をその絶対値で置き換えた行列 R を作る。外線 j と l の間を長さ d/R_{jl} でつなぐ。ただし $R_{jl} = 0$ の場合は j と l はつながらない。

(ii) $Q_{jl} < 0$ となっている二つの外線をつなぐ内線にベクトルポテンシャルを印加して、内線両端の間で位相が $e^{i\pi}$ だけ余計に出るようにする。

(iii) 上記の行列 R と単位行列 $I^{(n)}$ 、そして全ての要素が1である次数 n の正方行列 $J^{(n)}$ から行列

$$V = (2I^{(n)} - J^{(n)})R, \quad (20)$$

を作る。 j 番目の外線と内線との節点に強度 $s = \frac{V_{jj}}{d}$ のデルタポテンシャルを置く

こうして作った内線のあるグラフの性質は $d \rightarrow 0$ で接続行列 T へと与えられる Fulop-Tsutsui 節点に収束するのである⁹⁾。

例としてまず、散乱行列が次数6のカンファレンス行列で与えられるものを考える。

$$S = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} I^{(3)} - J^{(3)} & -2I^{(3)} + J^{(3)} \\ -2I^{(3)} + J^{(3)} & -I^{(3)} + J^{(3)} \end{pmatrix}. \quad (21)$$

これは六本の外線からなる量子グラフで、どの外線から入射しても反射がゼロ、透過率はどこへいくのも等しく $\frac{1}{5}$ である無反射等透過系である。処方 (14) に従って Fulop-Tsutsui 接続行列を計算すると

$$T = -\gamma I^{(3)} + (1 + \gamma)J^{(3)} \quad (22)$$

となる。ここで γ は黄金比 $\gamma = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$ である。これから Q 、 R 、そして V と計算していつて構成した有限の内線をもつグラフが図2の左のものである。ここでパラメータは $R_{12} = R_{23} = R_{13} = 4 + 3\gamma$ 、 $R_{14} = R_{25} = R_{36} = 1$ 、 $R_{15} = R_{16} = R_{26} = R_{24} = R_{31} = R_{32} = 1 + \gamma$ 、 $R_{45} = R_{46} = R_{56} = 0$ 、 $e^{i\chi_{12}} = e^{i\chi_{23}} = e^{i\chi_{13}} = -1$ 、他のすべての (ij) の組について $e^{i\chi_{ij}} = 1$ 、そして $s_1 = s_2 = s_3 = -6\frac{\gamma+1}{d}$ 、 $s_4 = s_5 = s_6 = -2\frac{\gamma+1}{d}$ となっている。

つぎの例として、散乱行列が次数8のアダマール行列で与えられるものを考える。

$$S = \frac{1}{\sqrt{8}} \begin{pmatrix} 2I^{(4)} - J^{(4)} & -2I^{(4)} + J^{(4)} \\ -2I^{(4)} + J^{(4)} & -2I^{(4)} + J^{(4)} \end{pmatrix}. \quad (23)$$

これは八本の外線からなる量子グラフで、どの外線から入射してどの線へ出るのも反射率、透過率ともに等しく $\frac{1}{8}$ で

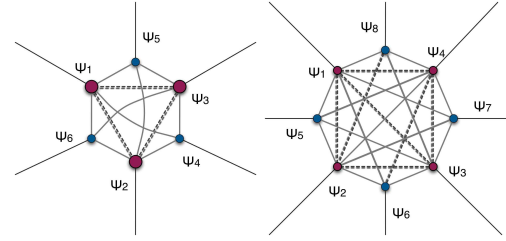


図2 $n = 6$ 無反射等透過節点 (左)、ならびに $n = 8$ 等散乱節点 (右) の有限グラフによる近似

ある等透過系である。処方 (14) に従って Fulop-Tsutsui 接続行列を計算すると

$$T = \frac{\sigma - 1}{\sigma + 1} I^{(4)} + \frac{1}{\sigma + 1} J^{(4)} \quad (24)$$

となる。ここで σ はいわゆる白銀比 $\sigma = \sqrt{2} - 1$ である。これから Q 、 R 、そして V と計算していつて構成した有限の内線をもつグラフが図2の右のものである。ここではパラメータは $R_{12} = R_{13} = R_{14} = R_{23} = R_{24} = R_{34} = 1 + \sigma$ 、 $R_{15} = R_{26} = R_{37} = R_{48} = \frac{\sigma}{1 + \sigma}$ 、 $R_{16} = R_{17} = R_{18} = R_{27} = R_{28} = R_{25} = R_{38} = R_{35} = R_{36} = R_{45} = R_{46} = R_{47} = \frac{1}{1 + \sigma}$ 、 $R_{56} = R_{57} = R_{58} = R_{67} = R_{68} = R_{78} = 0$ 、 $e^{i\chi_{12}} = e^{i\chi_{13}} = e^{i\chi_{14}} = e^{i\chi_{23}} = e^{i\chi_{35}} = e^{i\phi_{28}} = e^{i\chi_{46}} = -1$ 、その他の (i, j) の組では $e^{i\chi_{ij}} = 1$ 、 $s_1 = s_2 = s_3 = s_4 = -\frac{5\sigma+3}{d}$ 、 $s_5 = s_6 = s_7 = s_8 = -\frac{\sigma+1}{d}$ となっている。このように構成した有限グラフが、粒子の波数に比し

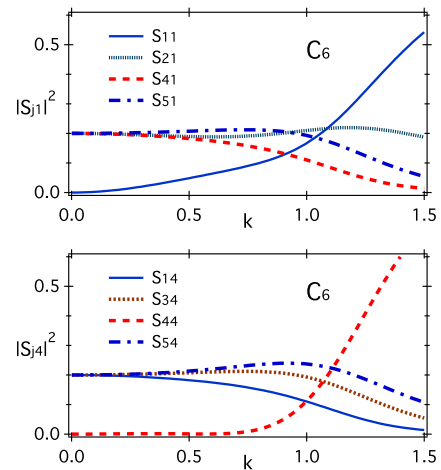


図3 無反射グラフを近似する有限グラフでの散乱

て構造部の大きさが小さい極限で、実際に指定された性質の Fulop-Tsutsui 型の節点を与えているかを数値的にチェックしたのが図3である。ここでは上の最初の例の $n = 6$ の無反射等透過グラフを取り上げている。有限グラフにおける散乱の計算は次の要領で行っている。内線上での波動関

数 $\phi(x) = \phi_{i,j}(x)$ は $r = R_{ij}$ という表記で

$$\begin{pmatrix} \phi'(0) \\ e^{i\chi} \phi'(\frac{d}{r}) \end{pmatrix} = -\frac{r}{d} \begin{pmatrix} F(\frac{d}{r}) & -G(\frac{d}{r}) \\ G(\frac{d}{r}) & -F(\frac{d}{r}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi(0) \\ e^{i\chi} \phi(\frac{d}{r}) \end{pmatrix}, \quad (25)$$

で決められる。ただし $F(x) = x \cot x$ 、 $G(x) = x \operatorname{cosec} x$ であり、 χ はベクトルポテンシャルによる位相反転があれば π 、なければ 0 である。外線 i が内線と接する節点での条件は

$$\psi'_i(0) + \sum_{j \neq i} \phi'_{ij}(0) = s_i \psi_i(0) \quad (26)$$

で与えられるので、この式と上の式から内線の波動関数を消去することができて、式

$$d\psi'_i = \left(v_i d + \sum_{l \neq i} r_{il} F_{il} \right) \psi_i - \sum_{l \neq i} e^{i\chi_{il}} r_{il} G_{il} \psi_l, \quad (27)$$

が得られる。ここに $\psi_j = \psi_j(0)$ 、 $\psi'_j = \psi'_j(0)$ 、そして $F_{j\ell} = F(\frac{d}{R_{j\ell}})$ という略式表記を用いてある。この接続条件をもって図2の左のグラフでの散乱行列を計算し、行列要素の絶対値二乗をプロットしたものが図3に示されている。 k の単位は $\frac{1}{d}$ である。 $kd < 0.5$ あたりで期待されるような無反射等透過の特性が実際に得られている事が読み取れる。

5. ポテンシャル印加のある量子グラフと 閾値共鳴

いま $n = 3$ の Fulop-Tsutsui 型節点で接続条件が

$$T = \begin{pmatrix} a & b \end{pmatrix} \quad (28)$$

で与えられるものを考える⁷⁾。外線1と2は「自由端子」で、制御端子である外線3にのみポテンシャル $U_3 = U$ が働くものとする。すなわち

$$k_1 = k_2 = k, \quad k_3 = \sqrt{k^2 - U} \quad (29)$$

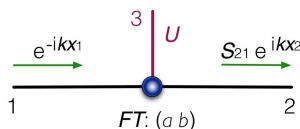


図4 $n = 3$ Fulop-Tsustui グラフで「制御用外線」にポテンシャル U を印加したもの。

外線1からの入射粒子の散乱を見ると

$$\begin{aligned} S_{21}(k; U) &= \frac{2a}{1 + a^2 + b^2 \sqrt{1 - \frac{U}{k^2}}}, \\ S_{11}(k; U) &= \frac{1 - a^2 - b^2 \sqrt{1 - \frac{U}{k^2}}}{1 + a^2 + b^2 \sqrt{1 - \frac{U}{k^2}}}, \\ S_{31}(k; U) &= \frac{2b \left(1 - \frac{U}{k^2}\right)^{\frac{1}{4}} \Theta(k - \sqrt{U})}{1 + a^2 + b^2 \sqrt{1 - \frac{U}{k^2}}}. \end{aligned} \quad (30)$$

となっていて、ここで $\Theta(k - \sqrt{U})$ は外線3への透過が $k \geq \sqrt{U}$ のみで開くという閾値現象を表している。いま特に外線1から外線2への透過確率を $\mathcal{P} = |S_{21}|^2$ とかくと、

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(k; U) &= \frac{4a^2}{\left(1 + a^2 + b^2 \sqrt{1 - U/k^2}\right)^2} && \text{for } k \geq \sqrt{U}, \\ &= \frac{4a^2}{(1 + a^2)^2 + b^4(U/k^2 - 1)} && \text{for } k \leq \sqrt{U}. \end{aligned} \quad (31)$$

これを k の関数としてみたとき

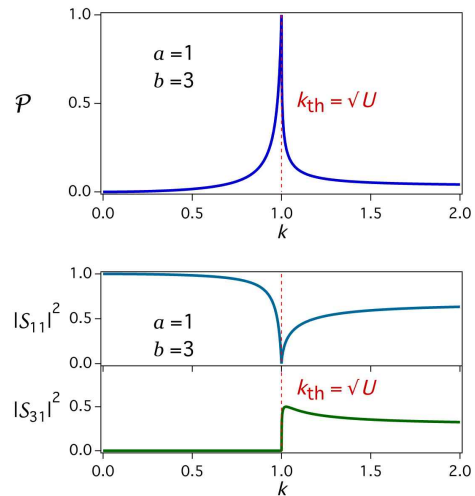


図5 図4の量子グラフの外線1からの透過特性。外線3に掛けた電圧による外線1 2間の透過の制御可能性を示している。

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow 0} \mathcal{P}(k; U) &= 0, \\ \mathcal{P}(\sqrt{U}; U) &= \left(\frac{2a}{1 + a^2} \right)^2, \\ \lim_{k \rightarrow \infty} \mathcal{P}(k; U) &= \left(\frac{2a}{1 + a^2 + b^2} \right)^2. \end{aligned} \quad (32)$$

という振る舞いが観察される。もし条件 $b \gg a \geq 1$ が満たされれば \mathcal{P} は $k = \sqrt{U}$ で非常に鋭いピークを持つ。図5

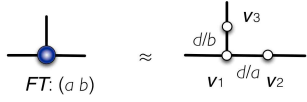


図6 $n = 3$ の強い閾値共鳴を持つ量子節点の有限グラフによる構成

にそのような例を示した。このピークは今のような閾値現象があるときによく見られる共鳴現象で、非物理的なリーマン面の実軸上にある極 $k_{pol} = \frac{b^2}{\sqrt{b^4 - (1+a^2)^2}} \sqrt{U}$ と関係している。このピークが鋭いための条件 $b \gg 1$ は、これが節点が通常の「自由接続」と著しく異なった Fulop-Tsutsui 型接続に特有の現象である事を如実に示している。このような接続条件を、通常のデルタ型接続から実現する有限近似の一つを図6に示した。

6. 無反射端子、無透過端子を持つ量子グラフと制御可能な量子フィルター

いま $n = 4$ の Fulop-Tsutsui 型節点で接続条件が

$$T = \begin{pmatrix} a & a \\ a & -a \end{pmatrix} \quad (33)$$

で与えられるものを考える⁷⁾。まず全ての線の上でポテンシャルが無い場合 $U_j = 0$ を考えると、これの散乱行列は

$$S = \begin{pmatrix} \frac{1-2a^2}{1+2a^2} & 0 & \frac{2a}{1+2a^2} & \frac{2a}{1+2a^2} \\ 0 & \frac{1-2a^2}{1+2a^2} & \frac{2a}{1+2a^2} & -\frac{2a}{1+2a^2} \\ \frac{2a}{1+2a^2} & \frac{2a}{1+2a^2} & -\frac{1-2a^2}{1+2a^2} & 0 \\ \frac{2a}{1+2a^2} & -\frac{2a}{1+2a^2} & 0 & -\frac{1-2a^2}{1+2a^2} \end{pmatrix} \quad (34)$$

と求まって、各線から一つの線への透過がゼロとなっている。特に $a = \pm\sqrt{2}$ では全ての反射もゼロになり入射粒子は等確率 $\frac{1}{2}$ で二本の線へ透過することがわかる。また $a = \pm\frac{1\pm\sqrt{3}}{2}$ ではゼロとなる線以外への透過、反射確率が全て等しく $\frac{1}{3}$ となっている。

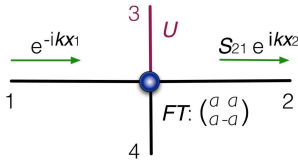


図7 $n = 4$ 無反射グラフで「制御用外線」にポテンシャル U を印加したもの。

ここで線のうちの一つ、たとえば「3」にのみポテンシャル $U_3 = U$ を印加してみる。線「1」からの入射粒子を考えると

$$S_{21}(k; U) = \frac{2a^2 \left(1 - \sqrt{1 - \frac{U}{k^2}}\right)}{(1+2a^2) + 2a^2(1+2a^2)\sqrt{1 - \frac{U}{k^2}}}, \quad (35)$$

そして

$$S_{11}(k; U) = \frac{1 - 4a^4 \sqrt{1 - \frac{U}{k^2}}}{(1+2a^2) + 2a^2(1+2a^2)\sqrt{1 - \frac{U}{k^2}}}, \quad (36)$$

$$S_{31}(k; U) = \frac{2a(1+2a^2) \left(1 - \frac{U}{k^2}\right)^{\frac{1}{4}} \Theta(k - \sqrt{U})}{(1+2a^2) + 2a^2(1+2a^2)\sqrt{1 - \frac{U}{k^2}}}, \quad (37)$$

$$S_{41}(k; U) = \frac{2a + 4a^3 \sqrt{1 - \frac{U}{k^2}}}{(1+2a^2) + 2a^2(1+2a^2)\sqrt{1 - \frac{U}{k^2}}}. \quad (38)$$

で与えられる。特に「1」から「2」への透過確率を $\mathcal{P} = |S_{21}|^2$ とかくと、

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(k; U) &= \frac{4a^4 U/k^2}{(1+2a^2)^2 (1 - 4a^4 + 4a^4 U/k^2)} \\ &\quad \text{for } k \leq \sqrt{U}, \\ &= \frac{4a^4 \left(1 - \sqrt{1 - U/k^2}\right)^2}{(1+2a^2)^2 \left(1 + 2a^2 \sqrt{1 - U/k^2}\right)^2} \\ &\quad \text{for } k \geq \sqrt{U}, \end{aligned} \quad (39)$$

となっている。注目すべきは次の性質

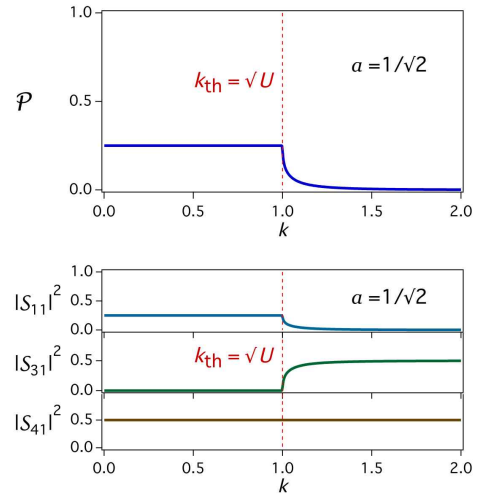


図8 図7の量子グラフの外線1からの透過特性。外線3に掛けた電圧による外線1 2間の透過の制御可能性を示している。

$$\lim_{k \rightarrow 0} \mathcal{P}(k; U) = \frac{1}{(1+2a^2)^2}, \quad (40)$$

$$\mathcal{P}(\sqrt{U}; U) = \frac{4a^4}{(1+2a^2)^2}, \quad (41)$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathcal{P}(k; U) = 0. \quad (42)$$

であって、 \mathcal{P} は $k = \sqrt{U}$ をこえると急激にゼロになる事である。つまり「3」へのポテンシャルの印加によって「1」

から「2」へ透過する運動量の上限を調整出来るのである。特に $ab = \pm \frac{1}{2}$ を選ぶと $k < \sqrt{U}$ ではフラットな透過特性 $\mathcal{P} = \frac{1}{4}$ が得られる。

このフィルターのメカズムの背後には1) 量子干渉による無透過外線の存在、2) 閾値での特異的な振る舞い、の二つの現象がある。1) は節点の有限構成から見て取れる。2) は非物理リーマン面のポール $k_{pol} = \frac{2a^2}{\sqrt{(4a^4-1)}}\sqrt{U}$ の存在に関係している。

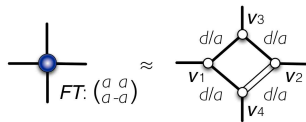


図9 $n = 4$ の無透過端を持つ量子節点の有限グラフによる構成

7. まとめと展望

星状量子グラフはその一見しての単純さとは裏腹に、節点にて非自明で多様な物理を実現し得る。それは n^2 の広大なパラメータ空間のためであり、それは節点を有限グラフによって近似的に構成する際に現れる複雑な構造から了解されるのである。そのような豊富さは、節点を「スケール不変」な Fulop-Tsutsui 型節点に限定して散乱を k によらないものだけに限定した場合でも既に存在している。それは散乱行列として「ユニタリーかつエルミートな行列」を選ぶ事に相当する。逆に言えばそれは、ユニタリーかつエルミートな正方行列として構成出来る散乱パターンは、すべて Fulop-Tsutsui 型量子節点として実現可能という事である。明らかにこれは「望んだ性質を持つオーダーメイドな量子グラフ」への最短の道である。

本稿で示した、無反射グラフ、等透過等のグラフ、そして外場の印加をによる制御可能なフィルターとして働くグラフの例からみて、今後の発展にもいろいろの可能性が想定されるのである。

謝辞

本稿の起草にあたって高知工科大での同僚であるオンジェイ・トゥレク博士との度重なる議論から裨益を受けていることを、感謝とともにここに記しておきたい。

文 献

- 1) P. Exner, J.P. Keating, P. Kuchment, T. Sunada, A. Teplyaev, eds., *Analysis on Graphs and Applications*, AMS "Proc. of Symposia in Pure Math." Ser., vol. 77, Providence, R.I., 2008, and references therein.
- 2) V. Kostyrykin, R. Schrader, Kirchhoff's rule for quantum wires, *J. Phys. A: Math. Gen.* **32**, 595–630 (1999).
- 3) T. Fülöp, I. Tsutsui, A free particle on a circle with point interaction, *Phys. Lett.* **A264**, 366–374 (2000).

- 4) T. Cheon, P. Exner and O. Turek, Approximation of a general singular vertex coupling in quantum graphs, *Ann. Phys. (NY)* **325**, 548–578 (2010).
- 5) T. Cheon, P. Exner and O. Turek, *Inverse scattering problem for quantum graph vertices*, *Phys. Rev. A* **83**, 062715(4pp) (2011).
- 6) O. Turek and T. Cheon, *Hermitian unitary matrices with modular permutation symmetry*, arXiv.org:1104.0408 (2011).
- 7) O. Turek and T. Cheon, *Threshold resonance and controlled filtering in quantum star graphs*, *Europhys. Lett.* **98**, 50005(5pp) (2012).
- 8) P. Exner, O. Post, *Approximation of quantum graph vertex couplings by scaled Schrödinger operators on thin branched manifolds*, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42** (2009), 415305 (22pp).
- 9) T. Cheon and O. Turek, Fulop-Tsutsui interactions on quantum graphs, *Phys. Lett. A* **374**, 4212–4221 (2010).

Quantum graph theory and quantum devices

Taksu Cheon

Kochi University of Technology, Tosa Yamada, Kochi 782-8502, Japan

Abstract: A new development in quantum graph theory is reviewed with the emphasis on its aspects as a model for quantum single electron devices

Keywords: quantum graph, solvable quantum system, single electron device, threshold resonance, spectral filter

自然における法則と歴史：

『進化の力学』研究会 25 年目の一区切り

小嶋 泉

京都大学数理解析研究所

1 はじめに

2005 年以来 7 回に亘って数研 (2005 - 2009) および基研 (2009 - 2011) [: 2009 年度は数研・基研共催] で開催された「ミクロ・マクロ双対性」を巡るこの一連の研究会は、とりあえず今回を以て幕とすることになった。

当初、海のものとも山のものともつかぬこの研究会、特にそのタイトル・趣旨については、一体何をしたいのか？と訝しい思いを持たれた方もきっと多かったに違いない。その戸惑いを乗り越え、積極的参加、有益な講演発表、活発な議論を通じて、研究会の中味・趣旨を具体化し、充実させ、実のあるものへと盛り上げて下さったのは、多くの異なる分野から参入した若手の方々を中心に、その若手の活躍を温かい目で見守りつつ、いつしか老若問わぬ議論の輪に加わって下さった中堅・年配の諸先生方のご厚意・熱意・ご努力の賜物に他ならない。改めて参加者の皆さんのお力添えに心からお礼を申し上げたい。

年を追って増加する参加者数・講演数および論じられるテーマの広がり・深まりをもたらしたのは、一体何だったのだろうか？「境界領域の重要性」の掛け声にもかかわらず個別化・分断化を深める一方の現代科学展開の渦中であってなお、何が深い共通の研究の動因となり得たか？敢えて手前味噌を承知で言うならば、ミクロとマクロ、量子と古典の相互関係を具体的な形と例に即して扱うことを主目的に据えたこの研究会の趣旨が、そうした本質的疑問に対して、ある動的な答を与え続けて来たところにこそ、その真の原因が求められるのではないか。そして、これはこの 7 回の研究会の報告集の個別内容を仔細に辿り検討すれば、必ずや裏付けられるだろうと私は信じる。その一方、この言い方は専ら「共通性」の側面だけから「歴史」を振り返ったものであり、実際には「異質性」の側面からの大きな諸インパクトが作用したこともまた明らかなことである。ただし、2011 年度最終回としての今研究会が開催された 2012 年 1 月初めの時点は依然この研究会の展開渦中にあり、公平で客観的な視点から歴史を振り返るだけのゆとりはあり得なかったというのが率直なところで、したがって、この研究会報告も、そうした「渦中」の文脈で書かれたものということをご了解願いたい。

*2012 年 1 月 6 日 基研研究会：物理と情報の階層構造 情報を接点とした諸階層の制御と創発

2 歴史と理論の二部構成

こういう流れの中で改めて当研究会開催の趣旨を振り返り、それを今後の研究に活かすため、以下のような歴史と理論の二部構成の形でこの研究会の基本理念を掘下げてみたいと思う。

1) 歴史について：基研研究会『進化の力学への場の理論的アプローチ』の回顧

⇒ 《法則と歴史》：「全自然史解説」の理論的・方法論的基礎として

2) 理論について：[Spec $\xleftarrow{\text{emergence}}$ States], [Alg $\xleftarrow{\text{co-emergence}}$ Dyn] の三角行列構造（後述）と、[安定化領域 $\text{stabilized domain} \rightleftharpoons$ 法則] の「共軛関係」

これを説明するためには、[ミクロ・マクロ双対性 = 4項図式][1, 2] から出発する記述枠として、“theory bundle with theory sectors” [3] という考え方があり得る：

← 偶然性	↷	[歴史 世界]	→	法則間の移行関係
N	:	「画期」 = セクター	2 1	← 安定化領域の名称
⋮	⋮	⋮	⋮	↑
γ_N	γ	γ_2	γ_1	↷ 法則的世界
⋮	⋮	⋮	⋮	↓

ここで sector = fiber に対応するのは、「法則的必然性」が支配する *stabilized domain of repeatable laws* = 必然性世界であり、他方、sector 相互の関係を記述するレベルは、歴史のレベルとそこでの偶然性に対応する。つまり、「法則的必然性」は、偶々実現した安定化領域内部でのみ働き、その外部は偶然性の支配する世界であって、どの安定化領域 *stabilized domain* が実現するかは全くの偶然、という見方があり得る。西郷甲矢人君の表現に従えば、この偶然性は分岐過程に常に伴う “*non-canonical choices*” の存在ということであり、しばしば「構造主義」で強調される「恣意性」とは、この non-canonicity の主観的恣意的言い表わし方と見ることも可能ではないだろうか？「法則的必然性」が機能する安定化領域 = 必然性世界》の外部にあって、異なる必然性世界を *intertwine* するこの偶然性世界 (“inter-theoretical worlds”) こそが歴史の舞台？

⇒ とすれば、「歴史的必然性」なる考え方は、各 *stabilized domain of repeatable laws* 成立の際、本質的に関与した “*non-canonicity*” (= 「歴史の *if*」) を忘れ、それら domains が遺した痕跡・残骸を特定の視点から勝手につなぎ合わせたときのみ浮かび上がる後知恵の幻影・虚像ではないだろうか？それは、決定論的法則性の欠けたところ (e.g., 量子状態遷移) に主観的補助線を引くという一種の “hidden variables” に他ならないのではないか？

2.1 歴史について：基研研究会『進化の力学への場の理論的アプローチ』の回顧

さて、

a) 基研研究会『進化の力学への場の理論的アプローチ』は、次のような形で ’86.10 – ’90.3 の期間、基研で開催された：

第 1 回：1986.10.2-4 研究会報告は素粒子論研究 74 (1987); 物性研究 47 (1987) [同時掲載]

第 2 回：1987.12.1 – 4 素粒子論研究 78 (1988); 物性研究 51 (1988) [同時掲載]

第3回：1989.1.18 – 20 素粒子論研究 80 (1990), No.4; 物性研究 52 (1989) No.5 [同時掲載]

第4回：1990.3.26-28 物性研究 54 (1990) No.5

b) そして、1991 年以後は、名称を変更して数研研究会に移行した：

1992 年 – 2004 年：大矢雅則先生の主催（：大矢先生の講演録を参照のこと；数研講究録として刊行された会議録は京大リポジトリからダウンロードすることが可能）。

c) '05 年以降、小嶋が引継ぎ '09 年まで数研、'09 年以降は世話人の方々のご援助により基研で。

このようにして約 25 年の間、ほぼ毎年研究会が開催されてきた。この間、1996 年、最初の 10 年間の成果の一部を、『量子情報と進化の力学』（大矢・小嶋共編著、牧野書店）に要約。

2.2 個人的視角から見た研究会の core とは？

'86 年 10 月の第 1 回研究会冒頭での「基調報告」（小嶋泉：場の量子論と非平衡・不可逆過程，素粒子論研究 74 (1987), F2-F15; 物性研究 47 (1987) [同時掲載]）では、

《反復再現可能性で特徴づけられる法則性の世界と歴史的・一回性を本質とする（宇宙）進化の過程との相互関係を論じ 》

という表現が現れる。つまり、今回お話しする

「自然における法則と歴史」の關係の整合的理解という課題

は、実は私にとって '86 年秋に始まる 25 年来の懸案事項だったことになる。¹ そして、第 4 回 '90.3, 基研での最終回の報告集前書きには、

《標記の長期研究計画に基く研究会は、1990 年 3 月 26 日 (月) から 3 月 28 日 (水) にかけての 3 日間、京都大学基礎物理学研究所で開催された。'86 年秋以来開かれてきた本研究会の趣旨は、ミクロ反復法則とマクロレベルでの非反復的進化過程との關係を、両者のフィードバック的な相互移行の問題として統一的に捉えようというところにある。今回は、この目標の具体化において概念的・技術的に重要な役割を担うと期待される量子情報理論の枠組に注目し、これを中心テーマに据えた総合講演 》

という文章があり、その最初の部分：[ミクロ とマクロ との關係を、両者のフィードバック的な相互移行として捉え] が [ミクロ・マクロ双対性] [1] という形を取って後に具体化したこと、そして、その実現を目指す理論深化のため、量子情報理論の枠組に注目した、ということが了解できる。

私流の「歴史解釈」では、翌 '91 年から数研での研究会に移行し、'92 年から '04 年まで大矢雅則先生に研究会主催をお願いしたのは、大矢先生、小澤正直先生により展開された量子情報理論・量子測定理論に学び、その発展を図ることによって課題に対する私自身の理解が深まるはずとの期待で、それは 120% 満たされたことになる。数研での研究会シリーズ b) にご尽力下さった大矢先生のご苦勞には重ね重ねお礼申し上げたい。

実際、そのシリーズ b) の終わりに近い '02 年 1 月 [i.e., ちょうど 10 年前!] の大矢研究会での講演準備中 [ミクロ・マクロ双対性] の理論枠の基本構成が見つかった。'05 年以降今回に至る研究会企画がこの方法論的視点に沿うものだったことは、私自身の主観的立場からは自明のことに属する。

¹お願い：この何とも悠長な牛のごとき歩みを笑わないで下さい！

2.3 基研長期研究計画「進化の力学-の場の理論的アプローチ」報告の一部

ご参考までに、上記'90年3月の研究会報告集まえがきを引用して、歴史回顧の節を締めくくりたい：

物性研究 54- 5(1990-8)

基研長期研究計画「進化の力学-の場の理論的アプローチ」報告

標記の長期研究計画に基く研究会は、1990年3月26日(月)から3月28日(水)にかけての3日間、京大基礎物理学研究所で開催された。

'86年秋以来開かれてきた本研究会の趣旨は、ミクロ反復法則とマクロレベルでの非反復的進化過程との関係を、両者のフィードバック的な相互移行の問題として統一的に捉えようということにある。今回は、この目標の具体化において概念的・技術的に重要な役割を担うと期待される量子情報理論の枠組に注目し、これを中心テーマに据えた総合講演を、通常の研究発表と並ぶ形で企画した。

物理学との相互交流に主眼をおきつつ、今後の理論的發展の土台となるような基本的諸問題を選んで、包括的な総合報告の形に整理し直して頂く ということ、次のような御講演をお願いした：

- i) 戸田幹人氏 [力学系と散逸性: 非可積分系と不安定性・非決定性],
- ii) 甘利俊一氏 [情報幾何学: 統計学における微分幾何学的方法],
- iii) 大矢雅則氏 [量子情報理論・量子エントロピー論],
- iv) 広田 修氏 [光通信理論と量子状態制御]。

加えて、量子情報理論の草分けの1人ともいえるべき R. S. Ingarden 氏が京大数理解析研に滞在中であり、帰国前の慌ただしい日程を割いて快く御参加頂けたことは意義深いことであった。

「常識」的な見方からはかなり「偏った」テーマの設定という偏見を生ずることも懸念されたが、50名を大きく越える方々の御参加を得、基本テーマを軸としてそれと関連する original な研究の発表や熱心な討論が終始展開されて、その意図した本来の趣旨を深く汲み取って頂いたことは世話人として大きな感銘であった。一つ一つの講演が全て力作であり、当該領域の専門家でない人にもそれぞれの内容の重要性が伝わるようなコメントがあればよかったかもしれないが、スペース・時間の制約と力量の限界もあり、実現できなかった。この点御容赦下さい。

世話人(順不同)：大矢雅則，福田礼次郎，小玉英雄，小嶋 泉 (文責 小嶋 泉)

3 理論について： ミクロ・マクロ双対性と量子古典複合系

旧来の既約表現に基づく「セクター」概念 [4] を《セクター=因子表現》という形に一般化 [5, 6] すれば、混合状態・可約表現の扱いが不可避な熱的状况や量子場の局所状態にもそのまま適用可能。特に熱力学・統計力学の文脈では、この意味の「セクター」とそれに付随する状態が「熱力学的純粋相」の概念にピッタリ一致し、「純粋相」と「セクター」とは単に物理と数学での用語の違いだけに帰着する。するとこの拡張された「セクター」概念によって、ミクロ・マクロ、量子・古典の相互関係が次のように明快な形に整理される [5, 6]：

← 独立性	= 可視的	マクロ	→	セクター間関係
N	セクター の 名前	2	1	$Sp(3)$
⋮	⋮	⋮	⋮	↑ セクター内 レベル
γ_N	γ	γ^2	γ^1	
⋮	⋮	⋮	⋮	↓ 不可視 のミクロ

ミクロ・マクロ双対性と4項図式 この記述枠は、他者に伝達・理解可能な言語形式を踏まえなくてはならないから、伝達文の基本要素である5W1H (when, where; who, what; how & why) を備える必要があり、ここでは、それを物理学理論に共通の《動力学 (Dyn) / 物理量 (Alg) / 状態 (State) / 分類パラメータの空間 (時空を含む) Spec》という4項から成る「4項図式」(quadrality scheme) という理論形式にまとめて理解する。

「双対性」の本質は下図のようにヨコ方向・タテ方向に2重の形で「4項図式」に組み込まれている [i.e., Duality $\overset{\text{dual}}{\rightleftharpoons}$ Quadrality]

参照系・記述系 (what to describe)	分類空間・時空 <i>Spec</i>	
↗ 状態 <i>State</i>	↑↓ ⇔ ↑↓	物理量の代数: <i>Alg</i>
	動力学 <i>Dyn</i>	↗ 対象系 (what to be described)

この文脈で時空とは、通常の物理理論でのように、「アприオリな幾何学」ではなく、ミクロ量子系から物理的に創発 (emerge) したものと記述され [7]、その結果、理論の semantics space を供給する。すると、代数的量子場理論の基礎概念 local net $\mathcal{K} \ni \mathcal{O}_1 \rightarrow \mathcal{A}(\mathcal{O})$: local subalgebra とは、(global な) 物理量 = 定数項を変量化する「論理拡大」[8] が産み出す「量子場」概念に他ならない。

更に、双対性 = 圏論的随伴関係の「条件性・暫定性」 → その破れ (!) による stabilized domain の不安定化・新たな進化過程の開始、という問題に目を向ければ、「法則と歴史」の動的・双対的理解を志向する数学的・概念的的方法論、それを実現する柔軟な記述のための理論枠としての可能性が開ける。

ここで一つ一つを詳説する余裕はないが、重要項目として：

対称性の破れ with “augmented algebra” / 測定スキーム

創発 + 強制法 = 相分離： ⇒ 一般相対論の時空と等価原理の間の双対的關係

大偏差戦略による統計的手法と物理理論との融合

4つの相互作用と素粒子物理学の新たな視点に基づく統一的理解

(ただし, 量子重力・quark-gluon 模型・超弦理論はその存在理由を失うことが予想される)

「力の統一」の non-standard な理解 この4項図式は, 4つの相互作用の特徴づけとも重なる本質を持つ:

	重力	
電磁力	$\Leftrightarrow \left(\begin{array}{c} \text{熱統計性 } k_B \\ \text{量子性 } \hbar \end{array} \right) \Leftrightarrow$	弱い力
	強い力	

「4つの力の統一」の non-standard な意味: 単純な「一元化」でなく, 4つの力が [自然界, 理論枠の中で異なる場所を占め, それぞれに固有の異なる機能を担うことで, 統一的全体系としての自然, 理論を構成することに資する] という「有機的統合」の意味の“unification”があり得てよいのではないか?

「物理学の幾何学化」の文脈での“unification”にはこういうニュアンスが欠け, brute force による単なる4力の「一元化」になってはいはしないか?

3.1 「対称性の破れ」の本質的役割

創発= 対称性の破れ (自発的 or 明示的) に伴う *order parameters* の凝縮

自発的 vs. 明示的破れは, 単に変換によって Dyn(amics) が不変に保たれるか否か? というだけの違い

a) 対称性の破れと「創発」:

対称性の破れ \Rightarrow 「メタレベル = semantic space」を形成する

「創発過程」と「相分離 by 強制法」

b) 科学 (= 法則的認識) と歴史:

対称性の明示的破れ \Rightarrow 自然定数変化法 [3] とそれに基づく *Theory Bundle* 構造

: 共時的・個体発生的にみたとき

\Rightarrow *Stabilized domain* (= 階層的領域) の歴史的形成(「縁」) \Leftrightarrow 反復再現可能な「法則」の発現(「因」)

= [歴史= 階層的諸領域の形成過程] と [法則的諸世界] との duality

: 通時的・系統発生的にみたとき

こういう視点で「力の統一」を見直せば, 次のような新しい描像に導かれる [IO, 準備中]:

Alg \ Dyn	重力	弱力	電磁力	核力	
重力場 $\leftarrow m \ \& \ E$	◆	0	0	0	
電磁場 $\leftarrow Q$	◆	?	0	0	
ニュートリノ ν	*	◆	0	0	: 下三角行列 !!
荷電軽粒子	*	*	◆	0	
ハドロン:					
中間子 $B = 0$	*	*	*	*	
重粒子 $B \neq 0$					

◆ 印を物質の新しい安定形態の出現と見ると,

方向 ↖ は階層領域の歴史的形成とそこでの反復法則成立の過程，

逆の ↘ は人間の認識の進む方向

↖ 方向の発散と ↘ 方向の収束は，時空創発過程に対応

この下三角構造は，組成列の可解性を記述する旗多様体の概念を通じて数学的に理解でき，それは既にマイクロレベルに内在する歴史的一方向性の徴候として了解することができるだろう (ref. Borel parabolic subalgebras)

Alg \ Dyn	重力	弱力	電磁力	核力
重力場 ← $m \& E$	◆	0	0	0
電磁場 ← Q	◆	?	0	0
軽粒子	*	*	◆	0
ハドロン	*	*	*	*

$\begin{pmatrix} \text{核力} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ * \end{pmatrix}$: 極端に高い運動性を持ち全ての力の作用の下で常に生き延びて来たハドロン
 (= 双対共鳴): ハドロン | * * * * 以外に核力を担う存在なし!
 [: これとよく似た構図をどこかで見なかったか? ⇒ 生命界でのバクテリア! ref.[9]]

vs. $\begin{pmatrix} \text{重力} \\ \text{◆} \\ \text{◆} \\ * \\ * \end{pmatrix}$: 重力の万有引力性 (: i.e., universal に引力)

上の table の ? = $\begin{bmatrix} 0 \\ \text{◆} \end{bmatrix}$ は，マイクロ領域の電磁場か，マクロ領域の電磁場かで変わる！

マクロ: purely abelian gauge field として or ミクロ: $SU(2) \ U(1)$ の *Weinberg-Salam* 混合

創発: (*Spec* ← *States*) は先の *co-emergence* (*Alg* ← *Dyn*) の dual :

Spec \ States	重力場	電磁場	ν 荷電 軽粒子	ハドロン
$\Gamma_{\mu\nu}^\lambda \curvearrowright$ 重力の spec = x^μ	: initial obj.'s ◆	*	* *	*
弱い力の spec = 量子数 I_3	0	?*	◆ *	*
電磁力の spec = 電荷 Q	0	0	0 ◆	*
Regge 軌道の spec = (I, B, S)	0	0	0 0	*: terminal obj.'s

: 上三角
行列

“*Terminal* object” (with up to one in-coming arrow) としてのハドロンは，*initial* object (with up to one out-going arrow) としての時空点 x^μ と dual，かつ，“クォーク閉込め” と同値!!

3.2 時空創発と等価原理の新しい解釈 [9, 10]

ミクロ量子系の凝縮効果によるマクロへの創発 → 強制法の物理的応用 ([7])

重力場と一般相対論的時空の場合にこの具体化を見よう：

重力以外の3力, 強い相互作用と電磁弱相互作用のみが働く状況で, 並行的に進行する複数の時空創発過程を想定し, その各々を時空座標 x^μ で parametrize された “fiber” = セクター = 純粹相と解釈する。

単に複数の創発過程というだけで, その相互関係を未だ何も知らず, 各 “fiber” 内部は, Minkowski 時空上に強・電磁・弱相互作用の働く物理世界が Poincaré 共変な量子場理論で記述されていると想定しよう。この状況で, 特定の “fiber” 1個だけに focus すれば, 「無重力状態の自由落下系」に: その自由落下系内部に展開する Poincaré 共変な量子場理論とは, 「時空1点 (x^μ)」上 (?; or 時空1点の「内部」?) に広がる平坦な Minkowski 時空としての局所 Lorentz 構造を備えた「接空間」上の物理学に他ならない。

このように特殊相対論的局所時空が「個別に」創発済みの状況で, 等価原理, すなわち, 重力質量と慣性質量との等価性: $m_{grav} = m_{inert}$ という「物理的要請」をおくことは, 一体何を意味するか? 「慣性質量」は, 自由落下系内部に想定された無重力系としての「標準的」物理学の中に織り込み済みだが, 「重力質量」の方はそうではない。それを考えることは, on-shell 概念を担う「(漸近的)自由な」質点に, Einstein 重力方程式 $R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R = \kappa T_{\mu\nu}$ を介して強弱電磁3力以外の第4の力としての「重力」を生成する属性を与えることである。(第0近似として)重力の働きを, 複数の自由落下系 = “fiber” (or セクター) 相互の関係を調整するものと想定すると, 重力質量 m_{grav} の作用域は「“fiber” (or セクター)間関係」のレベル, それに対して慣性質量 m_{inert} の方は “fiber” (or セクター)内部の物理に関わるから, 定性的に言って等価原理とは, “fiber” (or セクター)の内部外部間の等価性の要請に他ならない。

最初の図式のように「隣接点」 x^μ & $x^\mu + dx^\mu$ の “fiber” (or セクター)間関係が, 接続係数 $\Gamma_{\mu\nu}^\lambda$ で調整され, それが重力質量 m_{grav} に比例する力を慣性質量 m_{inert} に及ぼすとして, Newton の運動方程式を速度 $v^\lambda := \frac{dx^\lambda}{d\tau}$ について

$$m_{inert}dv^\lambda = v^\mu(m_{grav}\Gamma_{\mu\nu}^\lambda dx^\nu) = m_{grav}v^\mu\nabla_\mu dx^\lambda$$

の形で与えれば, 等価原理 $m_{grav} = m_{inert}$ の要請は, 質点に対する重力作用が質量に無関係に, 純幾何学的な測地線方程式: $\frac{dv^\lambda}{d\tau} + \Gamma_{\mu\nu}^\lambda v^\mu v^\nu = 0$ に帰着するという意味で universality を持つことを保証する。つまり, 等価原理 $m_{grav} = m_{inert}$ の成立する範囲内では, 「時空」概念 x^μ が(過去現在未来に関わりなく)独立の存在(=物理的意味)を獲得し, その時空幾何学が Newton 運動方程式を universal な形で包含するという物理的機能を担うことになる。そして, このとき $dp^\lambda = p^\mu\nabla_\mu dx^\lambda$ と書くと, 測地線方程式 = 質点運動という概念は(共変化された)一般座標変換の下での共変性に含まれることも分かる [10]。

Maxwell の電磁理論の場合, 話はもう少し単純で, ミクロ物質運動の生成する電磁 current J_μ から場としての普遍性を持つ電磁場 $F_{\mu\nu}$ が Maxwell 方程式を通じて生成され: $J_\mu \rightarrow F_{\mu\nu}$, 生成された電磁場が4元速度 v^μ を持つ物質運動に Lorentz 力 $eF_{\mu\nu}v^\nu$ を及ぼすことで, 電磁場と物質運動との coupled system が閉じるという仕組みだった。重力場の場合も, Einstein 方程式

$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R = \kappa T_{\mu\nu}$ を通じて、物質運動に付随するエネルギー運動量テンソル $T_{\mu\nu}$ が重力場 $R_{\mu\nu}$ & $g_{\mu\nu}$ を生成する： $T_{\mu\nu} \rightarrow R_{\mu\nu}$ & $g_{\mu\nu}$ [：ミクロからマクロ or メタレベルへ]，という部分は Maxwell 理論と同じだが，そうして生成した重力場 $R_{\mu\nu}$ & $g_{\mu\nu}$ がその源となった物質運動にどのように反作用を及ぼすか？という部分には，かなり錯綜したメカニズムを含み，単純なマクロ [or メタ] レベルからミクロへでは終わらない，というのが，上の議論の物理的中味である。

つまり，重力場の物質運動への反作用の仕方を決めるのは，自由落下系の族として創発した時空点 x^μ だけでなく，Einstein 方程式を通して重力場の源となった重力質量 m_{grav} と，Newton 力学的質点概念としての慣性質量 m_{inert} との間の等価性 = 「等価原理」： $m_{grav} = m_{inert}$ ，を間に挟むことによって，「時空点」 x^μ の創発的な物理的意味を確定し，その Newton 力学的運動を測地線の幾何学に吸収することで，漸く，一般相対論的「時空」と「重力」の物理的意味が確定するのである。

ただし結果的に，物質運動への電磁場，重力場，何れの作用も， $dp_\mu = (d\tau eF_{\mu\nu}/m)p^\nu$ ， $dp^\lambda = (\nabla_\mu dx^\lambda)p^\mu$ (if $m_{grav} = m_{inert}$) という形を取って，ちょうど縮退真空の空間 G/H 上に働く破れた対称性 G の変換が Goldstone mode G/H によって Lie 群 G の左 G -shift として記述されるのと完全に平行的であることに注意。つまり，電磁場，重力場の何れも，対称性の破れが引き起こす凝縮効果によって創発したマクロ古典対象に対して transitive に作用する Goldstone-like mode として振舞うのである。

電磁場の場合何が破れるかは微妙だが，とりあえず局所ゲージ変換の破れ，凝縮創発するのは時空，Goldstone mode は $F_{\mu\nu}$ （または， $eF_{\mu\nu}/m$ ）で，重力場の場合に破れるのは一般座標変換，凝縮創発するのは自由落下系としての時空点 x^μ ，Goldstone mode は重力場 $\Gamma_{\mu\nu}^\lambda$ （または， $\nabla_\mu dx^\lambda = \Gamma_{\mu\nu}^\lambda dx^\nu$ ），ということになる。こういう目で次の図式を見て頂きたい：

<i>Spec</i> = 時空 $\{x^\mu\}$	一般相対論 =	一般共变的 関手的対称性 \mathcal{G}
$g_{\mu\nu}$	$\Gamma_{\mu\nu}^\lambda \curvearrowright$ 異なる点 $\{x^\mu\}$ での自由落下系の族	\uparrow 誘導表現 $Ind_H^{\mathcal{G}}$
$R, R_{\mu\nu}$ \updownarrow	\uparrow $m_{grav} = m_{inert}$ 等価原理 = 無重力セクター x^μ の内部外部の等価性	破れない対称性 $H = \mathcal{P}_+^\uparrow$
<i>Einstein</i> 方程式 $R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R$	$\left[\begin{array}{l} x \text{ 双} \\ \vdots \text{ 対} \\ p \text{ 性} \end{array} \right] \swarrow \searrow$	特殊相対論的 局所時空の創発 $1/c$
\parallel $\kappa\omega(T_{\mu\nu})$ 状態 ω : \updownarrow	(物質運動の経路) Weinberg-Salam angle $ws \swarrow \nearrow$	$F_{\mu\nu} \xleftarrow{\text{Maxwell 方程式}} eJ_\mu$ \updownarrow $A_\mu \xrightarrow{\text{共変微分}}$
\updownarrow	弱い相互作用	
$T_{\mu\nu}$: 動力学 = 強い相互作用	

3.3 重力吸い込み口の不在とそれによる重力波不在

最後に、重力波の不在を帰結するであろう新しい知見についてコメントしたい：

1) 一般相対論および全ての現代物理学において、時空点 x^μ の概念は、巨視的自然に生起する全ての事象を parametrize するものとしてもっとも基礎的な位置づけを与られている \Rightarrow これは集合論の「要素」に対応するもので、後者はその上に（殆ど）全ての構造が形成されるものとして想定されている。この了解を、ミクロからマクロへ至る創発の過程と組み合わせると、時空点 x^μ とは圏論における “initial objects” として解釈可能²：それは、そこから出る arrow の一意性で特徴づけられ、それ以外の全ての arrows は全てそこへ収束するような特別の object のことである：この文脈では、時空点 x^μ のミクロ側とマクロ側に顕著な非対称性が生じ、 x^μ へ向かう arrows は無数に在って重力以外の3つの相互作用が絡むのに対して、重力が絡むのは x^μ の各々から出て行く一意的 arrow のみ、という状況になる。

2) この非対称性は重力に対する吸い込み口（= 重力効果を伴う arrows が収束する点）の不在を意味する。集合論における要素としての資格を x^μ に与える際、この非対称性がなければ、要素の下に下部構造があることになって、集合論の正則性公理が成立しなくなる。この状況から帰結するのは、重力の作用の仕方は、全て引力的か全て斥力的かの二者択一しかないことを帰結し、それが「万有引力」としての重力の在り方を (up to sign で!) 特徴づけていることになる。

3) この結論は、特異点としてのブラックホールが重力吸い込みとして機能することまでも排除するものではないが、非特異的な物理的領域で重力波を物理的に検出することは、重力吸い込み口の不在により、不可能である。このため、実験的観測可能なレベルには重力波は存在しない。

4) よって、“graviton” や「重力量子化」という概念は、物理的には無意味である。なぜなら、量子論の文脈では、波と粒子との dual な関係が本質的役割を演ずるのだから。

5) 上の見方を、「重力的黒体」の不在、という形で捉えることもでき (due to 西郷君)、その見方だと、重力波を使って「ダブルスリット実験」をすることができない (なぜなら、スリットが作れないのだから!) ので、干渉効果を検出する実験が不可能となる。これも重力場に波動的性格がないことを結論づける。

以上については、西郷甲矢人君との共著論文 [11] を準備中。

重力場の存在とその諸側面は、深く物質運動に根差し、それに支えられて、産み出されてきたものではないか？もしそういう捉え方が正しいとすると、重力場を量子化し、時空を量子化して、そこに全ての物理現象を取り込むことは、自然科学として見たとき、一体何を意味することになるのだろうか？

References

- [1] Ojima, I., Micro-macro duality in quantum physics, 143-161, Proc. Intern. Conf. “Stochastic Analysis: Classical and Quantum – Perspectives of White Noise Theory” ed. by T. Hida, World Scientific (2005), arXiv:math-ph/0502038; Ojima, I. and Takeori, M., How to observe and recover quantum fields from observational data? –Takesaki duality as a Micro-macro

²Initial 及び terminal objects の概念の重要性は、集合の圏の重要性と共に、西郷甲矢人君によって強調されたもので、それについて関連する有益な議論と併せて深い謝意を表したい。

- duality-, Open Systems and Information Dynamics **14**, 307–318 (2007); Harada, R. and Ojima, I., A unified scheme of measurement and amplification processes based on Micro-Macro Duality – Stern-Gerlach experiment as a typical example –, Open Systems and Information Dynamics **16**, 55–74 (2009).
- [2] Ojima, I., J. Phys.: Conf. Ser. **201**, 012017 (2010).
- [3] Ojima, I., Micro-Macro duality and emergence of macroscopic levels, Quantum Probability and White Noise Analysis, **21**, 217 - 228 (2008).
- [4] Doplicher, S. and Roberts, J.E., Why there is a field algebra with a compact gauge group describing the superselection structure in particle physics, Comm. Math. Phys. **131** (1990), 51-107; Endomorphism of C*-algebras, cross products and duality for compact groups, Ann. Math. **130** (1989), 75-119; A new duality theory for compact groups, Inventiones Math. **98** (1989), 157-218.
- [5] 小嶋 泉, 場の量子論における秩序変数と large deviation, 京都大学数理解析研究所講究録 1066 (1998), 121–132.
- [6] Ojima, I., A unified scheme for generalized sectors based on selection criteria –Order parameters of symmetries and of thermality and physical meanings of adjunctions–, Open Systems and Information Dynamics, **10** (2003), 235-279 (math-ph/0303009) ; How to formulate non-equilibrium local states in QFT?–General characterization and extension to curved spacetime–, pp.365-384 in “A Garden of Quanta”, World Scientific (2003).
- [7] Ojima, I., Space(-Time) Emergence as Symmetry Breaking Effect, Quantum Bio-Informatics IV, 279 - 289 (2011). (arXiv:math-ph/1102.0838 (2011)); Micro-Macro Duality and Space-Time Emergence, Proc. Intern. Conf. “Advances in Quantum Theory”, 197 – 206 (2011).
- [8] Ojima, I. and Ozawa, M., Unitary representations of the hyperfinite Heisenberg group and the logical extension methods in physics, Open Systems and Information Dynamics **2**, 107-128 (1993).
- [9] Ojima, I., QFT and Hadronic World as Dynamical Bases of Natural History, Invited talk at International Conference in QIBC (= Quantum Bio-Informatics Center, Tokyo University of Sciences) 2011.
- [10] Ojima, I., New interpretation of equivalence principle in General Relativity from the viewpoint of Micro-Macro duality (arXiv:gen-ph/1112.5525), Foundations of Probability and Physics 6, Sweden, 2011.6 (invited talk).
- [11] Ojima, I. and Saigo, H., in preparation.

インスタントン v.s. 非インスタントントンネル効果：半古典論 および量子論的解釈

高橋公也（九州工業大学大学院 情報工学研究院）

平成 24 年 6 月 30 日

概要

周期摂動が加わった障壁ポテンシャルでは、インスタントン型トンネル効果と非インスタントントンネル効果が共存し、摂動周波数の変化により2つのトンネルメカニズムの間の遷移が起きる。この論文では、2つのトンネルメカニズムの関係を半古典論及び量子論の両面から解析する。中間の周波数領域で優勢になる非インスタントントンネル効果は、半古典的には安定・不安定多様体誘導トンネル効果と解釈でき、量子論的には多重フォト・アシスト・トンネル効果によって説明される。低周波数極限では、インスタントン型トンネル効果が支配的になり、トンネル確率は摂動強度に依存した一定値に収束する。高周波数極限では無摂動系のトンネル確率に収束する。

1 Introduction

古典的に非可積分な多自由度系のトンネル効果には、可積分系には見られない複雑なトンネル現象が観測される [1, 2, 3, 4, 5]. このようなトンネル現象は量子カオスの立場から研究され、それらに物理的な解釈を与える理論として、カオス・アシスト・トンネル効果、レゾナンス・アシスト・トンネル効果、ジュリアセット・アシスト・トンネル効果等の理論が提案されてきた [6, 7, 8, 9, 10, 11, 12].

最も単純な多重度系の一つとして、周期摂動を加えた次元障壁ポテンシャルがある。このような場合にも、インスタントン理論では説明できないトンネル現象が観測される [13, 14, 15, 16]. ここでは、それらを非インスタントントンネル効果と呼ぶ。我々は、近年の論文で、非インスタントントンネル効果を半古典的に説明するために、安定・不安定多様体誘導トンネル効果 (SUMGT) の理論を提案した [13, 14]. この理論は首藤・池田のジュリアセット・アシスト・トンネル効果と本質的に同じものと考えられるが [11, 12], 彼らの理論が離散力学系に限られているのに対し、我々の理論はより一般的な時間連続な系に適用可能であり、インスタントン理論 [17] との比較も容易である。

さらに、我々は、インスタントン型トンネル効果が実質的に禁止される周期摂動を加えたステップ型ポテンシャルを用いて、そこで見られる非インスタントントンネル効果が半古典的には SUMGT 理論で解釈可能であり、量子論的には多重フォト・アシスト・トンネル効果で説明可能であることを示した [18, 19]. この報告では、インスタントン型トンネル効果と非インスタントントンネル効果が共存する周期摂動を加えた障壁ポテンシャルを用いて、2つのトンネル効果の関係を量子論及び半古典論の両面から解析する。量子論的な解析には周期摂動を加えた箱形ポテンシャルが、半古典論的な解析には周期摂動を加えた Eckart ポテンシャルが用いられる。これら2つの系では、摂動周波数の変化にともない、2つのトンネルメカニズム (インスタントン型トンネル効果と非インスタントントンネル効果) の間の遷移が見られる。このとき2つの系は非常に似た振る舞いをするので、量子論と半古典論の2つの解釈の比較検討に適している。

2 量子論的な解釈

2.1 モデルと数値計算の結果

モデルは、図1に示すような箱型ポテンシャルに周期摂動を加えたものである。

$$H(Q, P, \omega t) = \frac{1}{2}P^2 + (1 + \epsilon \sin \omega t)(\theta(Q - b_w) - \theta(Q)) \quad (1)$$

ここで、 $\theta(x)$ は高さ1のステップ関数で、 $|b_w| (b_w < 0)$ はポテンシャルの幅を決めるパラメータである。 $Q = +\infty$ から、 $E = E_I (< 1)$ の平面波を入射させる。 その時の入射波 Ψ_I 、反射波 Ψ_R 、透過波 Ψ_T は、以下のように表せる。

$$\Psi_I = e^{-\frac{i}{\hbar}E_I t} e^{-\frac{i}{\hbar}P_I Q}, \quad (2)$$

$$\Psi_R = \sum_n \Psi_{rn} = \sum_n R_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} e^{\frac{i}{\hbar}P_{rn} Q} \quad (3)$$

$$\Psi_T = \sum_n \Psi_{tn} = \sum_n T_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} e^{-\frac{i}{\hbar}P_{tn} Q} \quad (4)$$

ここで、入射波の運動量は、 $P = -P_I = -\sqrt{2E_I} < 0$ となる。 励起状態のエネルギーは $E_n = E_I + n\hbar\omega$ となるので、その状態の反射波及び透過波の運動量は、それぞれ $P = P_{rn} = \sqrt{2E_n} > 0$ 及び $P = -P_{tn} = -\sqrt{2E_n} < 0$ となる。 相互作用領域 ($b_w < Q < 0$) における左方向及び右方向に進む波は以下のように表せる。

$$\Psi_{bl} = \sum_n \Psi_{bln} = \sum_n B_{ln} e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon \cos \omega t} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} e^{-\frac{i}{\hbar}P_{bn} Q} \quad (5)$$

$$\Psi_{br} = \sum_n \Psi_{brn} = \sum_n B_{rn} e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon \cos \omega t} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} e^{\frac{i}{\hbar}P_{bn} Q} \quad (6)$$

ここで、 $P_{bn} = \sqrt{2(E_n - 1)}$ である。 したがって、相互作用領域での波動関数は、 $\Psi_b = \Psi_{bl} + \Psi_{br}$ となる。 この領域の波動関数は、周期摂動による変調 $e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon \cos \omega t}$ を受けたものになる [20, 21]。 特に、 $n \geq n$ ($\equiv \min\{n | E_n > 1\}$) の場合は、 $e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon \cos \omega t}$ によって変調された平面波になる。 一方、 $E_n < 1 (n < n)$ の場合は、 P_{bn} は純虚数 $i\sqrt{2(1 - E_n)}$ になるので、 Ψ_{bln} と Ψ_{brn} は、以下のように表せる。

$$\Psi_{bln} = B_{ln} e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon \cos \omega t} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} e^{\frac{1}{\hbar}|P_{bn}|Q}, \quad (7)$$

$$\Psi_{brn} = B_{rn} e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon \cos \omega t} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} e^{-\frac{1}{\hbar}|P_{bn}|Q}, \quad (8)$$

これは、変調 $e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon \cos \omega t}$ を受けた壁を透過するトンネル波 (インスタントン型トンネル波) に他ならない。

ポテンシャルの両端における接続問題を解くと、以下のような B_{ln} と B_{rn} に対する連立方程式が求まる。

$$\sum_m i^{m-n} J_{m-n}\left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega}\right) ((P_{rn} + P_{bm})B_{lm} + (P_{rn} - P_{bm})B_{rm}) = 2P_I \delta_{n,0} \quad (9)$$

$$\sum_m i^{m-n} J_{m-n}\left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega}\right) ((P_{tn} - P_{bm})e^{\frac{i}{\hbar}P_{bm}|b_w|} B_{lm} + (P_{tn} + P_{bm})e^{-\frac{i}{\hbar}P_{bm}|b_w|} B_{rm}) = 0. \quad (10)$$

連立方程式を数値的に解けば、 B_{ln} と B_{rn} が求まる。反射係数 R_n と透過係数 T_n は、 B_{ln} と B_{rn} から以下のように求まる。

$$R_n = -\delta_{n,0} + \sum_m (B_{lm} + B_{rm}) i^{m-n} J_{m-n} \left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} \right) \quad (11)$$

$$T_n = e^{-\frac{i}{\hbar} P_{tn} |b_w|} \left(\sum_m i^{m-n} J_{m-n} \left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} \right) (e^{\frac{i}{\hbar} P_{bm} |b_w|} B_{lm} + e^{-\frac{i}{\hbar} P_{bm} |b_w|} B_{rm}) \right). \quad (12)$$

同様の結果は、文献 [21] で与えられている。

図 2(a)-(c) に、数値計算で得られた $E_I = 0.5$, $\omega = 0.03, 0.3, 10$ におけるトンネルスペクトル $|T_n|$ を示す。

低周波数領域 ($\omega = 0.03$) では、トンネルスペクトルは入射エネルギー E_I の周りに局在化し、摂動強度 ϵ とともにスペクトル強度は大きくなり、また分散も大きくなる。後で述べるように、このようなインスタント型トンネル現象は、断熱近似で解析可能である。

中間領域 ($\omega = 0.3$) では、摂動強度 ϵ によって異なったスペクトルが見られる。強い強度 ($\epsilon = 0.4$) では、プラトースペクトルと呼ばれる ($1 - \epsilon < E < 1 + \epsilon$) に広がった特徴的なスペクトルが見られる。これは、非インスタントトンネル効果によって引き起こされたもので、量子論的な立場からは、多重フォト・アシスト・トンネル効果と解釈される。小さな摂動 ($\epsilon = 0.1$) では、スペクトルは局在化し、インスタント型トンネルが起きていることが分かる。中間的な摂動 ($\epsilon = 0.2$) では、2つの特徴的なスペクトルが混ざったような分布が見られる。入射エネルギー E_I の周りには大きなトンネル確率を持つ局在化した分布が見られるが、その上のエネルギー領域に肩のような平らな分布が現れる。肩部分は振動数 ω の増加とともに高くなり、局在化したスペクトルを飲み込みプラトースペクトルへと変化する。局在化したスペクトルからプラトースペクトルへの変化は、摂動強度が大きいほど速く起こる。

高周波数領域 ($\omega = 10$) では、スペクトルの間隔 $\hbar\omega$ が大きくなり、スペクトルのピークは疎らになる。図 2(c) では、 $E = E_I + \hbar\omega$ の第一励起状態のピークが最も大きな値を取りトンネル確率を支配する。しかし、振動数 ω の増加とともに励起状態のピークは減衰する。一方、 $E = E_I$ の基底状態ピークは、 $\omega \rightarrow \infty$ で非摂動系のそれに収束するので、トンネル確率は無摂動系のトンネル確率になる。

図 3 に、トンネルスペクトル強度の周波数による変化を示す。 $\omega \rightarrow 0$ の極限で、トンネル確率は摂動強度に依存した一定値に近づく。これらは、断熱近似を用いて説明可能である。 $\omega \rightarrow \infty$ では、(数値計算の都合上図では見る事が出来ないが) トンネル確率は無摂動系のそれに収束する。中間領域では、トンネル確率は最大値を取る。この現象は、インスタント理論では説明不可能であり、非インスタントトンネル効果 (多重フォト・アシスト・トンネル効果) によるものである。

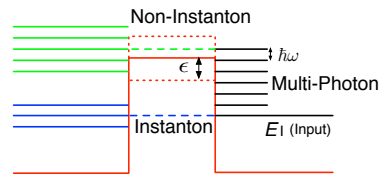


図 1: 周期摂動を加えた箱形ポテンシャル

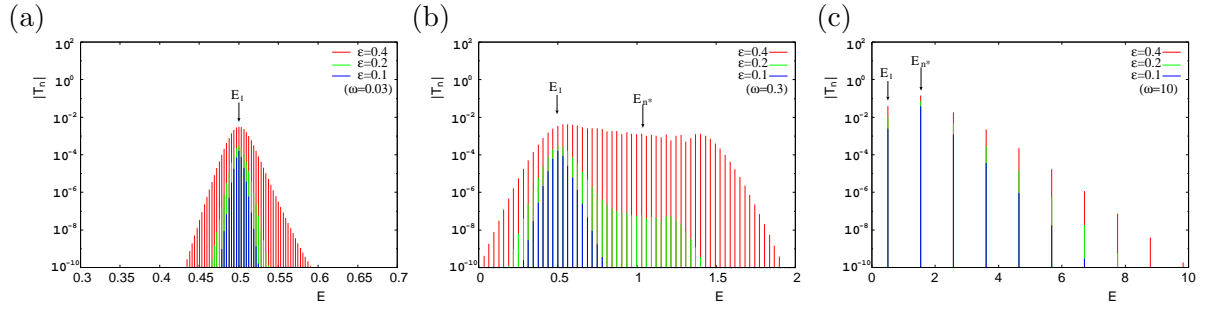


図 2: 周期摂動を加えた箱形ポテンシャルのトンネルスペクトル $|T_n|$. パラメータは, $|b_w| = 1$, $E_I = 0.5$, $\hbar = 1000/(3\pi \times 2^{10}) \sim 0.1036$ である. (a) $\omega = 0.03$. (b) $\omega = 0.3$. (c) $\omega = 10$.

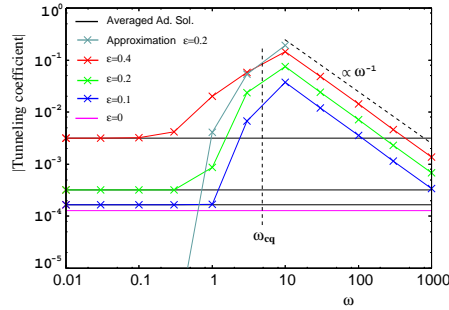


図 3: 周期摂動を加えた箱形ポテンシャルにおけるトンネルスペクトル強度の ω に対する変化. 'Averaged Ad. Sol.' は, (18) 式を (21) 式に代入して得られる断熱近似解である. 'Approximation $\epsilon = 0.2$ ' は, (17) 式で与えられる多重フォト・アシスト・トンネル効果の $\epsilon = 0.2$ における近似解である.

2.2 量理論的な解釈

2.2.1 非インスタントトンネル効果

この節では, 数値計算で得られたトンネル効果の量子論的な解釈を行う. 特に, 非インスタントトンネル効果が顕著に現れプラトースペクトルが観測される中間の周波数領域と, 局在化したスペクトルが観測される低い周波数領域に焦点を絞る. 解析の鍵となるのは, 励起状態への遷移確率を決める相互作用領域の係数 B_{ln} と B_{rn} である. (10) 式より, $n < n^*$ では, $|B_{rn}/B_{ln}| \sim e^{-\frac{2}{\hbar}|P_{bn}||b_w|}$ すなわち $|B_{rn}| \ll |B_{ln}|$, $n \geq n^*$ では, $B_{rn}/B_{ln} \sim O(1)$ と考えられる. したがって, B_{ln} を調べるのが重要である.

図 4 に, $\omega = 0.03, 0.3$ における B_{ln} の分布を示す. 各分布ともプラトー型の分布をしていて, その高さは $O(10^0 \sim 10^{-1})$ で, 頂上の平らな部分は摂動強度 ϵ に依存し ($E_I - \epsilon < E < E_I + \epsilon$) の範囲に広がる. 両側の断崖の部分の傾きは, ω が小さくなるにしたがい急速に急になる. 非インスタントトンネル効果に寄与するのは, $E_n \geq 1$ の成分で, 特に閾値 $E = E_n$ における成分がトンネル確率を支配すると考えられる. 実際, $\omega = 0.3$ での $\epsilon = 0.4, 0.2$ における閾値の係数 B_{ln} の大きさは, それぞれ図 2(b) のプラトースペクトルの高さと同混合スペクトルの肩の平らな部分の高さにほぼ一致する.

B_{ln} を近似的に評価する方法を考える. (9) 式は $\sum_m J_{m-n} A_n(m) = \delta_{n,0}$ と書き直せるが, これ

は、ベッセル関数の恒等式 $\sum_m J_{m+n} J_m = \delta_{n,0}$ と極めて類似している。したがって、数学的な証明はないが、 $B_{ln} \sim O(J_n)$ と仮定し、 $\hbar\omega \ll \epsilon$ における B_{ln} を $J_n(\frac{\epsilon}{\hbar\omega})$ で近似する。 $n \ll \frac{\epsilon}{\hbar\omega}$ の場合には、 $|B_{ln}|$ は、ベッセル関数の漸近形により以下のように評価される。

$$|B_{ln}| \sim \left| J_n \left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} \right) \right| \sim \sqrt{\frac{2\hbar\omega}{\pi\epsilon}} \quad (13)$$

これは、 B_{ln} のプラトー分布の頂上の平らな部分 ($E_I - \epsilon < E < E_I + \epsilon$) の評価を与える。一方、 $|n| \gg \frac{\epsilon}{\hbar\omega}$ の場合は、 n が大きいときの J_n の漸近形 $J_n(x) \sim \sqrt{\frac{1}{2\pi n}} \left(\frac{ex}{2n} \right)^n$ を使うと、 B_{ln} は以下のように評価される。

$$\begin{aligned} |B_{ln}| &\sim \left| J_n \left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} \right) \right| \\ &\sim \sqrt{\frac{1}{2\pi n}} \exp \left(-n \left(\log \left(\frac{2n\hbar\omega}{\epsilon} \right) - 1 \right) \right) \end{aligned} \quad (14)$$

これは、プラトーの両端の崖の部分の評価を与える。 $|n| > \frac{\epsilon}{2\hbar\omega} > \frac{\epsilon}{\hbar\omega}$ の場合、 $\log \left(\frac{2n\hbar\omega}{\epsilon} \right) - 1 > 0$ なので、 $|B_{ln}|$ は $|n|$ の増加とともに指数関数よりも早く減衰する。

$E_n > 1$ では、非インスタントトンネルが起きる。主な寄与は、閾値 $n = n > \frac{\epsilon}{\hbar\omega}$ の成分からくると考えられる。閾値の B_{ln} は、近似 $n \hbar\omega \sim 1 - E_I$ を使うと以下のように評価される。

$$\begin{aligned} |B_{ln}| &\sim \left| J_n \left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} \right) \right| \\ &\sim \sqrt{\frac{1}{2\pi n}} \exp \left(-n \left(\log \left(\frac{2n \hbar\omega}{\epsilon} \right) - 1 \right) \right) \\ &\sim \sqrt{\frac{\omega}{2\omega_{cq}}} \exp \left(-\frac{\omega_{cq}}{\omega} \left(\log \left(\frac{2(1 - E_I)}{\epsilon} \right) - 1 \right) \right) \end{aligned} \quad (15)$$

(12) 式を使い、 $O(B_{ln}) \sim O(B_{rn})$ を考慮すると、非インスタントトンネル効果が作り出す透過係数 T_n は以下のように評価できる。

$$\begin{aligned} |T_n| &\sim \left| J_{n-n} \left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} \right) \right| |B_{ln}| \\ &\sim \left| J_{n-n} \left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} \right) \right| \left| J_n \left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} \right) \right| \end{aligned} \quad (16)$$

J_n の漸近形 (13), (14) 式を (16) 式の $J_{n-n}(\frac{\epsilon}{\hbar\omega})$ に適用すると、トンネルスペクトル $|T_n|$ が、 $E = E_n$ を中心に ($E_n - \epsilon < E < E_n + \epsilon$) の領域に広がるプラトースペクトルを作る事が分かる。また、その高さは、

$$\begin{aligned} |T_n| &\sim \sqrt{\frac{2\hbar\omega}{\pi\epsilon}} \left| J_n \left(\frac{\epsilon}{\hbar\omega} \right) \right| \\ &\sim \frac{\hbar\omega}{\sqrt{\pi\epsilon(1 - E_I)}} \exp \left(-\frac{1 - E_I}{\hbar\omega} \left(\log \left(\frac{2(1 - E_I)}{\epsilon} \right) - 1 \right) \right) \end{aligned} \quad (17)$$

と評価される。

2.2.2 低周波数領域の断熱近似

$\omega \rightarrow 0$ の極限では、トンネルスペクトルは入射エネルギー E_I の周りに局在化した分布になるが、これを前節で行った近似を用いて再現することは不可能である。なぜなら、 B_{ln} は広いエネル

ギ一領域 ($E_I - \epsilon < E < E_I + \epsilon$) に広がっているので、局在化が起きる為には (12) 式における各項間の位相相殺を考慮しなければならないからである。位相を取り込んだ近似を行う事は簡単ではない。ここでは、その代わりに $\omega \ll 1$ の場合に有効な断熱近似を用いた評価を行う。

断熱近似のもとでは、相互作用領域の運動量 P_b はポテンシャルの時間変化を考慮した瞬時値で近似される。

$$\tilde{P}_b(t) \sim i\sqrt{2(a(t) - E_I)} \quad (18)$$

ここで、 $a(t) = 1 + \epsilon \sin \omega t$ である。したがって、透過係数の瞬時値 $\tilde{T}(t)$ は、

$$\tilde{T}(t) \sim e^{-\frac{i}{\hbar} P_I |b_w|} (e^{-\frac{1}{\hbar} |\tilde{P}_b(t)| |b_w|} \tilde{B}_l(t) + e^{\frac{1}{\hbar} |\tilde{P}_b(t)| |b_w|} \tilde{B}_r(t)) \quad (19)$$

$$\sim e^{-\frac{i}{\hbar} P_I |b_w|} e^{-\frac{1}{\hbar} |\tilde{P}_b(t)| |b_w|} \frac{4P_I \tilde{P}_b(t)}{(P_I + \tilde{P}_b(t))^2} \quad (20)$$

となる。 $\tilde{B}_l(t)$ と $\tilde{B}_r(t)$ は、 $\tilde{P}_b(t)$ を無摂動系の相互作用領域の係数 $B_l(E), B_r(E)$ に代入したものである。

透過係数の時間平均は、

$$T_0 \sim \langle \tilde{T}(t) \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \tilde{T}(t) dt, \quad (21)$$

で与えられ、これがトンネル確率を決める。ここで、 $T = \frac{2\pi}{\omega}$ である。さらに、スペクトルの各ピークは、フーリエ分解を用いて、以下のように与えられる。

$$T_n \sim \frac{1}{T} \int_0^T \tilde{T}(t) e^{-in\omega t} dt \quad (22)$$

$\tilde{P}_b(t)$ と $\tilde{T}(t)$ は、 ωt の関数なので、変数変換 $\theta = \omega t$ を (21) 式と (22) 式の積分に適用すると、 T_0 と T_n が ω に依存しないことが分かる。したがって、各ピークの高さは変わらないが、ピーク間隔が $\hbar\omega$ なので、スペクトルの分布の幅は $\hbar\omega$ に比例して変化する。

$\epsilon \ll 1 - E_I$ 及び $\epsilon \sim$ (or \ll) $\hbar \ll 1$ が成り立つ条件のもとで、 ϵ のべき展開を行うと、 \tilde{P}_b は、

$$\tilde{P}_b(t) \sim i\sqrt{2(1 - E_I)} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\epsilon}{1 - E_I} \sin \omega t \right) \quad (23)$$

と近似できる。さらに少し面倒な計算の後、 $\langle \tilde{T}(t) \rangle$ は、

$$\langle \tilde{T}(t) \rangle \sim e^{-\frac{i}{\hbar} P_I |b_w|} \frac{4P_I P_b}{(P_I + P_b)^2} e^{-\frac{|b_w|}{\hbar} \sqrt{2(1 - E_I)}} \left(1 + \frac{\epsilon^2 |b_w|^2}{8\hbar^2 (1 - E_I)} \right) \quad (24)$$

と近似され、“無摂動系の係数” $\times O(\epsilon^2/\hbar^2)$ の補正分だけ実質的な透過係数が摂動により増加することが分かる。さらに、 T_m は以下のように評価される。

$$T_m \sim e^{-\frac{i}{\hbar} P_I |b_w|} \frac{4P_I P_b}{(P_I + P_b)^2} e^{-\frac{|b_w|}{\hbar} \sqrt{2(1 - E_I)}} \frac{1}{m!} \left(-\frac{\epsilon |b_w|}{2i\hbar \sqrt{2(1 - E_I)}} \right)^m \quad (25)$$

ピークの高さ $|T_m|$ は、 $|T_m/T_0| \sim O(1/m!)$ のように、 $|m|$ の増加とともに急激に減衰する。これらの結果は、インスタントン型トンネル効果 (障壁透過型トンネル効果) が、 $\omega \rightarrow 0$ で局在化したスペクトル分布を持つ事を示唆している。

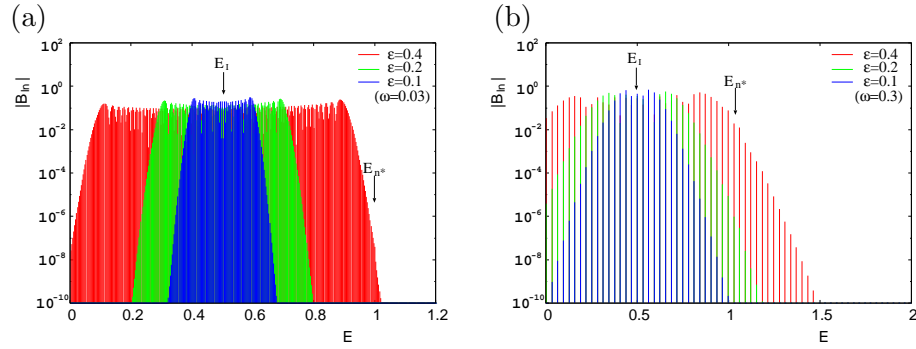


図 4: 係数 B_{ln} の分布. (a) $\omega = 0.03$. (b) $\omega = 0.3$.

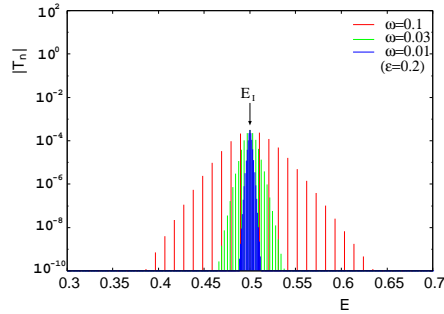


図 5: 低周波数領域における数値解と断熱近似解の比較. パラメータは, $\epsilon = 0.2$ 及び $\omega = 0.01, 0.03, 0.1$ に選んだ. (a) 数値解. (b) (18), (19) 式を (22) 式に代入して得られた断熱近似スペクトル.

2.2.3 低周波数及び中間周波数領域のまとめ

図 6 に, 数値的に得られたトンネルスペクトルと非インスタントトンネル効果の近似解及びインスタント型トンネル効果の断熱近似解を比較したものを示す.

図 6(a) は, 低周波数領域の局在化したスペクトルが見られる場合である. 'Averaged Ad. Sol.' とラベルされた線は (21) 式に (18), (19) 式を代入して得られた断熱近似解であり, この線は ($E_{-m_{max}} \leq E \leq E_{m_{max}}$) の範囲で描かれている. ここで, $m_{max} = \max\{m \mid |T_m/T_0| \leq 10^{-2}, m > 0\}$ である. 断熱近似解が, トンネルスペクトルの強度とその幅を良く近似しているのが分かる.

図 6(c) に, 中間の周波数領域でプラトースペクトルが観測される場合を示す. 'Approx $|T_n|$ ' とラベルされた線は, (16) 式で与えられるプラトースペクトルの近似解である. 近似解は, プラトースペクトルの形を良く再現しているが, その強度は過剰評価になっている. これは, B_{rn} 効果を見逃したためと考えられる. すなわち, (12) 式の中で, B_{ln} と B_{rn} の項がほぼ同じ大きさで逆位相を持つためと考えられる.

図 6(b) は, 混合スペクトルが見られる場合である. 局在化した頭の部分は, 断熱近似解で良く再現されているのが分かる. また, 高いエネルギー領域に広がる肩の部分の形は, プラトースペクトルの近似解で良く再現されているが, この場合もその強度は過剰評価になっている.

これらの事から, 低周波数領域で見られる局在化したスペクトルは, 断熱近似で解析可能なインスタント型トンネル効果によって説明可能であり, 中間領域で見られるプラトースペクトルは, 多重フォト・アシスト・トンネル効果によるものである事が分かる. したがって, この 2 つの

トンネル機構は、それぞれ異なったものと考えてよい。

最後に、高周波領域 $\omega > \omega_{qc}(= (1 - E_I)/\hbar)$ のスペクトルについて触れておこう。この場合は、 $n = 0$ と $n = 1$ の2つの成分だけを取り込んだ近似を行う事で数値計算で得られた結果を説明できる。得られた第一励起状態 ($n = 1$) は、 ω_{qc} の近くでは、基底状態 ($n = 0$) より大きな値を取るが、 ω に逆比例して減少する。一方、基底状態は、 $\omega \rightarrow \infty$ の極限で無摂動解に収束する。その結果、トンネルスペクトルがベキ減衰 ($\propto \omega^{-1}$) した後、無摂動解に収束する。

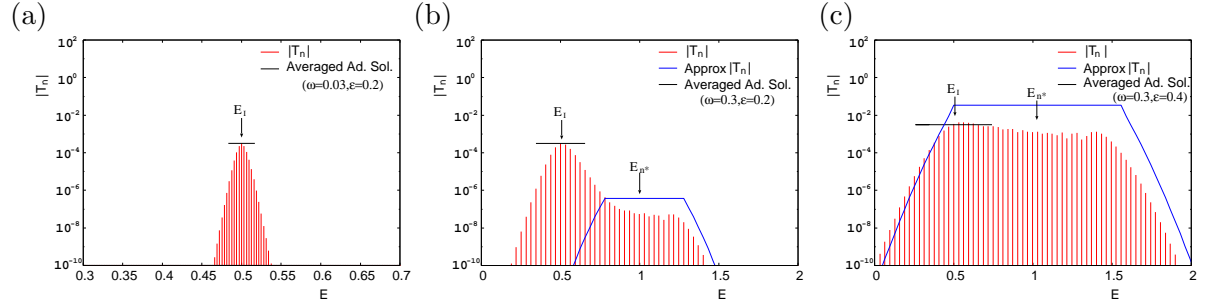


図 6: 数値的に得られたトンネルスペクトルと近似解の比較. 'Approx $|T_n|$ ' は、(16) 式によるプラトースペクトルの近似解を表す. 'Averaged Ad. Sol.' は、(18), (19) 式を (21) に代入して得られる断熱近似のスペクトル強度を表す. この線は、($E_{-m_{max}} \leq E \leq E_{m_{max}}$) の範囲で描かれている. ここで、 $m_{max} = \max\{m \mid |T_m/T_0| \leq 10^{-2}, m > 0\}$ である. (a) 局在化したスペクトル ($\epsilon = 0.2$, $\omega = 0.03$). (b) 混合スペクトル ($\epsilon = 0.2$, $\omega = 0.3$). (c) プラトースペクトル ($\epsilon = 0.4$, $\omega = 0.3$).

3 半古典論的な解釈

3.1 モデルと数値計算の結果

複素半古典近似には、箱形ポテンシャルのような微分不連続点を持つポテンシャルは不向きである。そこで、Eckart ポテンシャルに周期摂動を入れた系を考える。

$$H(Q, P, \omega t) = \frac{1}{2}P^2 + (1 + \epsilon \sin \omega t)\text{sech}^2 Q \quad (26)$$

図 7(a)-(c) に、数値計算で得られた $E_I = 0.5$, $\omega = 0.03, 0.3, 10$ におけるトンネルスペクトルを示す。各周波数で、周期摂動が入った箱形ポテンシャルと類似したスペクトルが観測される。

低周波数領域 ($\omega = 0.03$) では、入射エネルギーの周りに局在化したスペクトルが存在し、インスタントンの断熱近似により説明可能である。中間領域 ($\omega = 0.3$) では、摂動強度 ϵ に応じて異なったスペクトルが観測される。強い摂動 ($\epsilon = 0.4$) では、プラトースペクトルが観測される。プラトースペクトルは、非インスタントントンネル効果の特徴的なスペクトルであり、複素半古典論の立場からは、安定・不安定多様体誘導トンネル効果 (SUMGT) 理論を用いて説明される。小さな摂動 ($\epsilon = 0.1$) では、局在化したスペクトルが見られるが、中間的な摂動 ($\epsilon = 0.2$) では、2つの特徴的なスペクトルが混ざった混合スペクトルが見られる。ただし、箱形ポテンシャルの場合に比べ全体的に丸みを帯び、肩の部分と局在化した頭の部分との分離が悪い。この傾向は、 $\epsilon = 0.4$ の時のプラトースペクトルにも見られ、箱形に比べ全体的に丸みを帯びている。

高周波数領域 ($\omega = 10$) では、スペクトル間隔 $\hbar\omega$ が大きくなり、基底状態 ($E = E_I$) の成分と第一励起状態 ($E_1 = E_I + \hbar\omega$) の成分がトンネル確率を支配する。図 7(c) では、第一励起状態の

ピークが最大であるが、 ω の増加と急速に減衰し、それに代わり非摂動解に収束する基底状態の成分がトンネル過程を支配するようになる。

図 8 に、トンネル確率の周波数による変化を示す。 $\omega \rightarrow 0$ の極限で、トンネル確率は摂動強度に依存した一定値に近づく。一方、 $\omega \rightarrow \infty$ では、トンネル確率は無摂動系のそれに収束する。ただし、箱形では、トンネル確率はベキ減衰するのに対し、この場合は指数関数的に減衰する。中間領域で、トンネル確率は最大値を取る。この現象は、非インスタントトンネル効果によるもので、SUMGT 理論で説明可能である。

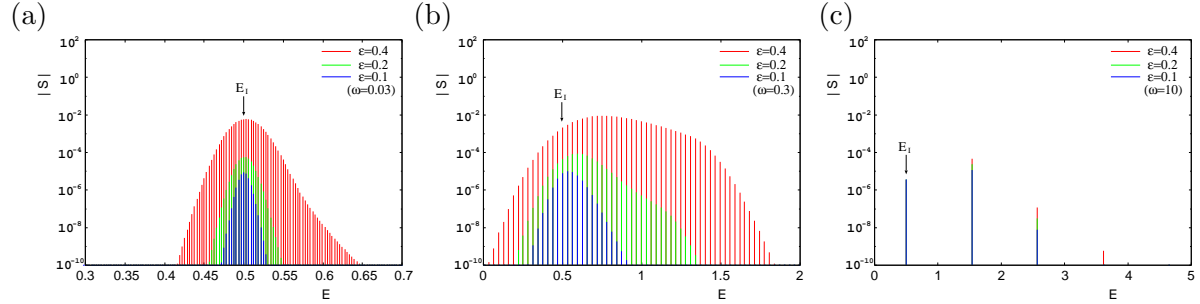


図 7: 周期摂動を加えた Eckart ポテンシャルのトンネルスペクトル。パラメータは、 $E_I = 0.5$, $\hbar = 1000/(3\pi \times 2^{10}) \sim 0.1036$ と選んだ。(a) $\omega = 0.03$. (b) $\omega = 0.3$. (c) $\omega = 10$.

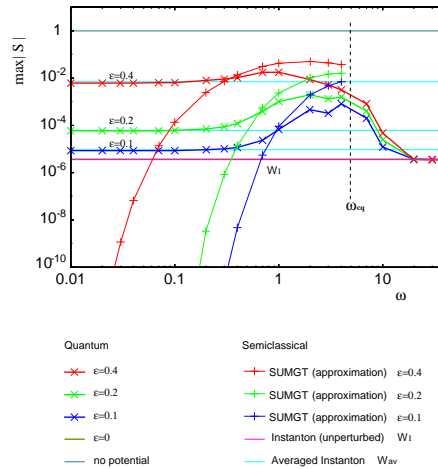


図 8: 周期摂動を加えた Eckart ポテンシャルにおける、 ω の変化に対するトンネル強度の変化。'SUMGT' は、(37) 式を (35) 式に代入して得られる SUMGT の近似解である。'Instanton' と 'Averaged instanton' は、無摂動系のインスタントン解と断熱インスタントン解である。

3.2 半古典近似

低周波数領域の局在化したスペクトルは、インスタントン解を用いた断熱近似によって説明可能である。箱形ポテンシャルでは瞬間的な無摂動解を用いた断熱近似を行ったが、ここでは半古典的な解釈をする立場から、瞬間的なインスタントン解を用いた断熱近似を考える。解析の手順は、箱形ポテンシャルとほぼ同じで、解析結果もほぼ同じ結果になる。したがって、ここではそ

の詳細を述べる事はしない。高周波数領域 $\omega > \omega_{qc}(= (1 - E_I)/\hbar)$ では、半古典論による近似は不可能である。この場合には、基底状態と第一励起状態のみを考慮した量子的な摂動理論が有効で、第一励起状態の ω の増加にともなう指数関数的な減衰や基底状態の成分が無摂動系の解に収束して行く事が示される。ここでは、これについても詳細を述べる事はしない。以下では、中間周波数領域で見られる、非インスタントトンネル効果の半古典論的な解釈に集中する。

周期摂動が入った系の S-行列の半古典近似は以下のように与えられる [22, 23].

$$S(E_O, E_I) \sim \lim_{|Q_I|, |Q_O| \rightarrow \infty} \sum_{\text{c.t.}} \frac{\sqrt{|P_O||P_I|}}{\sqrt{2\pi i \hbar P_I P_O}} \sqrt{-\frac{\partial^2 S_S}{\partial E_I \partial E_O}} e^{-i(P_O Q_O - P_I Q_I)/\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} S_S(Q_O, E_O, Q_I, E_I)} \quad (27)$$

ここで、作用積分 S_S は、以下のように定義される。

$$S_S = \int_{Q_I}^{Q_O} P dQ - \int_{t_I}^{t_O} H(Q, P, \omega t) dt + E_O t_O - E_I t_I \quad (28)$$

記号 $\sum_{\text{c.t.}}$ は、半古典近似に寄与する全ての(複素)古典軌道について和を取る事を意味する [22, 23]. それらの軌道は、以下の入射境界条件 \mathcal{I} と散乱後の観測条件 \mathcal{F} を満たすものである。

$$\mathcal{I} = \{(t_I, Q, P) | t_I \in \mathbf{C}, Q = Q_I, P = P_I (= -\sqrt{2E_I})\} \quad (29)$$

$$\mathcal{F} = \{(t_O, Q, P) | t_O \in \mathbf{C}, Q = Q_O, P = P_O (= -\sqrt{2E_O})\} \quad (30)$$

系の周期性のため、寄与する軌道の初期点集合は、初期面 \mathcal{I} 上で周期的になる。したがって、一周期分の初期集合で半古典近似を実行する事が可能である。その為には、半古典 S-行列を以下のように書き直す必要がある [23].

$$S(E_2, E_1) \sim \lim_{|Q_1|, |Q_2| \rightarrow \infty} \sum_n \hbar \omega \delta(E_2 - E_1 - n\hbar \omega) \times \sum_{\text{c.t.} \in \mathcal{I}} \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar}} \frac{\sqrt{|P_2||P_1|}}{\sqrt{P_1 P_2}} \sqrt{-\frac{\partial^2 S_S}{\partial E_1 \partial E_2}} e^{-i(P_2 Q_2 - P_1 Q_1)/\hbar} e^{i S_S(Q_2, E_2, Q_1, E_1)/\hbar} \quad (31)$$

ここで、 \mathcal{I} は、 $\mathcal{I} = \{t_1 | -T < \text{Re } t_1 \leq 0\}$ で定義される一周期分の初期点集合で、 $T(= 2\pi/\omega)$ は摂動周期である。周期的な摂動は、 $\sum_n \hbar \omega \delta(E_2 - E_1 - n\hbar \omega)$ で表される間隔 $\hbar \omega$ の離散的なスペクトルを作り出す。数値計算では、 $\delta(E_2 - E_1 - n\hbar \omega)$ を $\delta_{n, (E_2 - E_1)/\hbar \omega}$ で置き換えた規格化されたスペクトルを用いる。

3.3 非インスタントトンネル効果の半古典的解析

エネルギー E_I の平面波を入射する場合、対応する古典的な初期状態 \mathcal{I} は、複素 (E, t) 面上のエネルギー $E = E_I$ の面になる (図 9). 透過領域で観測される確率波がすべてトンネル現象による場合、ポテンシャル障壁の頂上にある古典的な不安定周期軌道の安定多様体 W_S と初期面 \mathcal{I} が、実面上で交差する事は無い。しかし、複素領域ではこれら 2つの多様体は必ず交差し、交わりは孤立点(臨界点)となる [13, 14]. 非インスタントトンネル効果に寄与する SUMGT 軌道は、臨界点 t_{Ic} の近傍に初期点を持ち、そのため、複素安定多様体 W_S に導かれて不安定周期軌道に向かって進み、不安定周期軌道近傍を通過した後、不安定多様体 W_U に導かれて反射領域または透過領域

に向かう [13, 14]. 透過領域に行く複素軌道がトンネル効果に寄与する. このような軌道は, 虚時間の周期軌道として記述されるインスタントン軌道 [17] とは大きく異なるものである. 結果として SUMGT によって作り出されるプラトースペクトルは, インスタントン型トンネル効果によって作り出される局在化したスペクトルとは大きく異なる.

SUMGT 解析の鍵となるのが臨界点の虚軸方向の深さ $\text{Im}t_{Ic}$ である. Melnikov 理論を用いると $\text{Im}t_{Ic}$ は以下のように評価される [13, 14, 24].

$$\text{Im}t_{Ic} = \frac{1}{\omega} \cosh^{-1} \left\{ \frac{1 - E_I}{\epsilon(1 - \chi(\omega))} \right\} \quad (32)$$

ここで, $\chi(\omega)$ は以下のように与えられる.

$$\begin{aligned} \chi(\omega) &\equiv 2\omega \int_0^\infty \frac{\sin \omega s}{1 + e^{2\sqrt{2}s}} ds \\ &= \omega \left(\frac{1}{\omega} - \frac{\pi}{2\sqrt{2}} \text{cosech} \left(\frac{\omega\pi}{2\sqrt{2}} \right) \right) \end{aligned} \quad (33)$$

低周波数領域 ($\omega \ll 1$) では, $\chi(\omega)$ は $\chi(\omega) \sim \frac{\pi^2}{48}\omega^2$ と近似でき, したがって, $\text{Im}t_{Ic}$ は ω に逆比例する.

$$\text{Im}t_{Ic} = \frac{1}{\omega} \cosh^{-1}((1 - E_I)/\epsilon) \quad (34)$$

インスタントン軌道の虚軸方向深さは, $|t_{inst}(E_I)| \sim \pi/\sqrt{2}$ で与えられる. したがって, $\text{Im}t_{Ic} < |t_{inst}(E_I)|$ となる ω の領域で SUMGT 軌道の方がインスタントン軌道よりも実面に近く, 大きなトンネル確率を与える事が期待できる. 実際, $|t_{inst}(E_I)|$ は ω に依存せず一定値を取るのに対し, $\omega \rightarrow \infty$ で, $\text{Im}t_{Ic}$ は $\frac{\pi}{2\sqrt{2}} (< |t_{inst}(E_I)|)$ に収束するので, $(\omega_{ci} < \omega < \omega_{cq})$ の領域で SUMGT がトンネル過程を支配する. ここで, ω_{ci} は $\text{Im}t_{Ic} = |t_{inst}(E_I)|$ となる ω である.

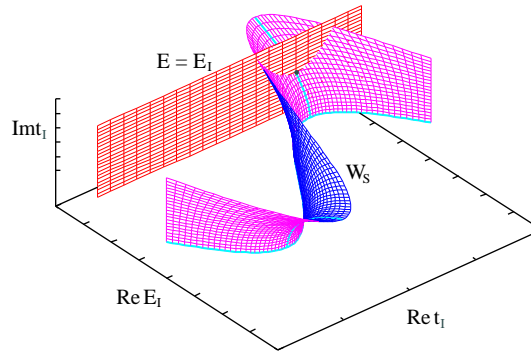


図 9: 複素空間における初期面 ($E = E_I$) と安定多様体 W_S . ● は交点 (臨界点) を表す.

(31) 式から, SUMGT が作り出す半古典的な重みは,

$$W_S = \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar}\text{Im}S_S\right) \quad (35)$$

と近似できる. SUMGT 軌道の作用積分の虚部 $\text{Im}S_S$ は, 臨界点を初期点とする複素安定多様体上の臨界軌道の作用積分の虚部で近似できる事が確かめられている [14, 15, 16]. さらに, 臨界軌道の作用積分は, Melnikov 理論によって良い近似が得られる [14, 15, 16].

結果として、 $\text{Im}S_S$ は、以下のように評価される。

$$\text{Im}S_S \sim \text{Im}t_{Ic}(1 - E_I) - \frac{1 - E_I}{\omega} \tanh(\omega \text{Im}t_{Ic}) + \sqrt{2} \sinh(\omega \text{Im}t_{Ic}) \int_{-\infty}^0 dx \int_{-\infty}^x ds \frac{\epsilon \sin \omega s}{\cosh^2(\sqrt{2}s)} \quad (36)$$

(36) 式の右辺の最後の項は、 $\omega \rightarrow 0$ で有限値になり無視できる。(34) 式を用いると、低周波数領域で、 $\text{Im}S_S$ が

$$\text{Im}S_S \sim \text{Im}t_{Ic}(1 - E_I) - \frac{1 - E_I}{\omega} \tanh(\omega \text{Im}t_{Ic}) \quad (37)$$

$$\sim \frac{1 - E_I}{\omega} \left(\cosh^{-1} \left(\frac{2(1 - E_I)}{\epsilon} \right) - \tanh \left(\frac{2(1 - E_I)}{\epsilon} \right) \right) \quad (38)$$

と近似できる。さらに、 $T - E_I \gg \epsilon$ の場合には、

$$\text{Im}S_S \sim \frac{1 - E_I}{\omega} (\log(2(1 - E_I)/\epsilon) - 1) \quad (39)$$

となる。この結果より、SUMGT の作り出す半古典的な重みは、

$$W_s \sim \frac{\hbar\omega}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left(-\frac{1 - E_I}{\hbar\omega} \left(\log \left(\frac{2(1 - E_I)}{\epsilon} \right) - 1 \right) \right) \quad (40)$$

となり、箱形ポテンシャルに対して得られた評価式 (17) と本質的に同じ式が得られる。したがって、 $\omega < \omega_{qc}$ において、SUMGT は多重フォト・アシスト・トンネル効果の半古典的な解釈であると考えてよい。

図 8 で、'SUMGT' とラベルされた曲線は、(37) 式を (35) 式に代入して得られたものである。(36) 式の最後の項を無視した為に、 ω_{qc} 近傍での近似は良くないが、低周波数領域では、 ω の増加にともないインスタント型トンネル効果から非インスタントトンネル効果に切り替わり、それによるスペクトル強度の増加の様子をよく再現している。

4 結論

この論文では、インスタント型トンネル効果と非インスタントトンネル効果が共存する周期摂動を加えた障壁ポテンシャルを用いて、2つのトンネル効果の関係を量子論及び半古典論の両方の立場から解析した。量子論的な解析には、周期摂動を加えた箱形ポテンシャルを用い、半古典論的な解析には、周期摂動を加えた Eckart ポテンシャルを用いた。

これら2つの系では、ほぼ同じ振る舞いをするトンネル現象が観測される。特に、周波数の変化に対しインスタント型トンネル効果と非インスタントトンネル効果の間の遷移が見られる。

中間的な周波数領域では、非インスタントトンネル効果が支配的になり、トンネル確率が増大し、プラトースペクトルが観測される。このときの非インスタントトンネル効果は、半古典的には安定・不安定多様体誘導トンネル効果と解釈され、量子論的には多重フォト・アシスト・トンネル効果と解釈される。さらに、半古典論解析と量子論解析は、非インスタントトンネル効果の作り出すトンネル確率の周波数に対する変化にもほぼ同じ評価を与える。それによれば、そのトンネル確率は周波数の減少とともに超指数関数的に減衰する。この評価は数値計算の結果と良い一致を示す。

低周波数領域では、インスタントトンネル効果が支配的になり、入射エネルギーの周りに局在化したトンネルスペクトルが観測され、 $\omega \rightarrow 0$ の極限でトンネル確率は摂動強度に依存した一定値に収束する。この場合には、断熱近似による解析が有効であり、それによれば、各ピークの大きさは ω に依存しない一定値に収束するが、スペクトルの分布の幅は $\hbar\omega$ に比例し、 $\omega \rightarrow 0$ の極限で無限に小さくなる。したがって、ある種のスケージング則がある。

高周波数極限では、トンネル確率は減衰し無摂動系のトンネル確率に収束する。この場合、無摂動系のインスタント解が有効である。減衰過程のトンネル確率は、第一励起状態(一つの光子を吸収するフォト・アシスト・トンネル効果)のピーク強度により決まる。減衰率はポテンシャルの形状により異なり、箱形では ω^{-1} 型のべき減衰になるのに対し、Eckartポテンシャルでは指数関数的な減衰になる。

謝辞

この研究は科学研究費補助金基盤研究(B) No.20340100の補助のもとで行われた。

参考文献

- [1] S.Tomsovic ed. *Tunneling in Complex Systems* (World Scientific, Singapore 1998).
- [2] J.Ankerhold, *Quantum Tunneling in Complex Systems The Semiclassical Approach*, (Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2007).
- [3] S. Keshavamurthy, *Int. Rev. Phys. Chem.* **26**, 521 (2007).
- [4] S. Keshavamurthy and P. Schlagheck eds. *Dynamical Tunneling: Theory and Experiment* (CRC Press Taylor & Francis Group 2011).
- [5] W.K. Hensinger, *et al*, *Nature* **412**, 52 (2001); D.A. Steck, W.H. Oskay and M.G. Raizen, *Science* **293**, 274 (2001); C. Dembowski, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 867 (2000).
- [6] O. Bohigas, S. Tomsovic, and D. Ullmo, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 5 (1990); *Phys.Rep.* **223**, 45 (1993) 45.
- [7] S.C. Creagh S.C. and N.D. Whelan, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4084 (2000).
- [8] S.C. Creagh, *Nonlinearity* **17**, 1261 (2004); S.C. Creagh, *Nonlinearity* **18**, 2089 (2005); C.S. Drew, S.C. Creagh and R.H. Tew, *Phys. Rev. A* **72**, 062501 (2005).
- [9] O. Brodier, P. Schlagheck and D. Ullmo, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 064101 (2001); O. Brodier, P. Schlagheck and D. Ullmo, *Ann. Phys.(NY)* **300**, 88 (2002); C. Eltschka and P. Schlagheck, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 014101 (2005).
- [10] A. Bäcker, R. Ketzmerick, S. Löck and L. Schilling *Phys. Rev. Lett.* **100**, 104101 (2008); A. Bäcker *et al.* *Phys. Rev. Lett.* **100**, 174103 (2008); A. Bäcker, R. Ketzmerick, S. Löck, J. Wiersig and M. Hentschel *Phys. Rev. A* **79**, 063804 (2009); S. Löck, A. Bäcker, R. Ketzmerick and P.Schlagheck, *Rhys. Rev. Lett.* **104**, 114101 (2010).

- [11] A. Shudo and K. S. Ikeda, Phys. Rev. Lett. **74**, 682 (1995); Physica **D115**, 234 (1998); T.Onishi *et al*, Phys. Rev. E **64**, 025201(R) (2001); Phys. Rev. E **68**, 056211 (2003).
- [12] A. Shudo, Y. Ishii and K. S. Ikeda, J.Phys.A **35**, L225 (2002); Europhysics Letters **81**, 50003 (2008); J.Phys.A **42**, 265101 (2009); J.Phys.A **42**, 265102 (2009).
- [13] K. Takahashi, A.Yoshimoto and K. S. Ikeda, Phys.Lett.A **297**, 370 (2002); K.Takahashi and K. S. Ikeda, J.Phys.A **36**, 7953 (2003).
- [14] K. Takahashi and K. S. Ikeda, Europhysics Letters **71**, 193 (2005); J.Phys.A. **41**, 095101 (2008).
- [15] K. Takahashi and K. S. Ikeda, Phys.Rev.A **79**, 052114 (2009).
- [16] K. Takahashi and K. S. Ikeda, J. Phys. A **43**, 192001 (2010).
- [17] L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration* (Wiley, N.Y., 1981).
- [18] K.Takahashi and K.S.Ikeda, Phys. Rev. Lett. **97**, 240403 (2006); Phys. Rev. Lett. **107**, 219903(E), (2011) (Erratum).
- [19] K.Takahashi and K.S.Ikeda, Phys. Rev. E **84**, 026203 (2011).
- [20] M. Büttiker and R. Landauer, Phys. Rev. Lett. **49** (1982) 1739; Physica Scripta **32**, 429 (1985).
- [21] W.J. Li and L.E. Reichl, Phys.Rev. B **60**, 15732 (1999).
Phys.Rev. E **81**, 051136 (2010).
- [22] W. H. Miller, J. Chem. Phys, **53**, 1949 (1970); Adv. Chem. Phys. **25**, 69 (1974).
- [23] K. Takahashi and K. S. Ikeda, Ann. Phys. (NY) **283**, 94 (2000).
- [24] V. K. Melnikov, Transaction of Moscow Mathematical Society, **12**, 2 (1963).

Horodecki モデルについて

斎藤辰徳[†] 浅野真誠[†] 松岡隆志[‡] 大矢雅則[†]

[†] 東京理科大学 [‡] 諏訪東京理科大学

概要

$\mathbb{C}^3 \otimes \mathbb{C}^3$ 上の circulant state[1] において, その部分クラスとして有名な Horodecki 等のモデル [2] や他の部分クラスを含むような状態のクラスを紹介し, 可分割である必要十分条件を示す. この新しい状態のクラスは, $\mathbb{C}^3 \otimes \mathbb{C}^3$ 上の可分割な状態やエンタングルド状態の構造に対する視野をより広げてくれるであろう.

1 導入

量子系において, 合成系の状態が可分割であるか, エンタングルしているかを判定する一般的な手法は未だ見つかっていない. 合成系 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ の合成状態 θ が可分割であるとは, θ が次のように表現出来るときをいう.

$$\theta = \sum_r p_r \rho_r \otimes \sigma_r,$$

ここに, $p_r \geq 0$, $\sum_r p_r = 1$ であり, ρ_r, σ_r はそれぞれ $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ 上の状態である. これに対し, 合成状態 θ がエンタングルしているとは, θ が可分割でないときをいう.

合成状態に対する可分割性の議論においては, よく PPT 条件 [3] と呼ばれる条件が使われる. PPT 条件について確認する. \mathcal{H}_2 の正規直交基底 $\{e_i\}$ を任意に固定する. このとき, $T|e_i\rangle\langle e_j| = |e_j\rangle\langle e_i|$ と定義される線形写像, いわゆる転置 T を考える. 合成状態 θ に対する PPT 条件とは, 条件 $(I \otimes T)\theta \geq 0$ のことである. PPT 条件を満たす合成状態は PPT 状態と呼ばれる. 可分割な合成状態は常に PPT 状態である.

対象となる合成系が $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$, $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^3$, $\mathbb{C}^3 \otimes \mathbb{C}^2$ であるとき, PPT 条件は合成状態が可分割であることの必要十分条件となることが知られている [4]. しかし一般的には, PPT 条件は可分割性に対する必要条件でしかない. 即ち, PPT かつエンタングルしている合成状態が実際に存在しており, このような状態の存在が合成状態が可分割であるか否かの判定を難しくしている. 合成状態に対する可分割性の判定問題は合成系が $\mathbb{C}^3 \otimes \mathbb{C}^3$ のときにおいても十分に興味深い. 我々は今回, $\mathbb{C}^3 \otimes \mathbb{C}^3$ 上の circulant state[1] と呼ばれる状態のクラスにおける, ある部分クラスに対して, その可分割性を議論する.

2 新しい部分クラス

$\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle\}$ を \mathbb{C}^3 の正規直交基底とする. 次のような $\mathbb{C}^3 \otimes \mathbb{C}^3$ 上の状態に対する可分割性を議論する.

$$\theta = p_\psi |\Psi\rangle\langle\Psi| + \frac{p}{3} \sum_{i=0}^2 |i\rangle\langle i| \otimes |i+1\rangle\langle i+1| + \frac{q}{3} \sum_{i=0}^2 |i\rangle\langle i| \otimes |i-1\rangle\langle i-1|, \quad (1)$$

よって、与えられた a, b, c に対し式 (2) における θ_{sep} と $|i\rangle\langle i| \otimes |k\rangle\langle k|$ ($i, k = 0, 1, 2$) の係数全てが非負であるとき、即ち

$$\frac{p_\Psi}{3T^2} \geq 0, \quad (3)$$

$$p_\Psi \cdot \max\left(\frac{a^2}{b^2}, \frac{b^2}{c^2}, \frac{c^2}{a^2}\right) \leq p \leq 1 - p_\Psi - p_\Psi \cdot \max\left(\frac{b^2}{a^2}, \frac{c^2}{b^2}, \frac{a^2}{c^2}\right). \quad (4)$$

が満たされるとき、 θ は可分割である。明らかにいつも式 (3) の条件は満たされる。従って、式 (4) を満たすようなパラメータの組 $\{a, b, c\}$ が一つでも存在すれば、 θ は可分割である。

式 (4) の条件に対し、 $\max(\frac{a^2}{b^2}, \frac{b^2}{c^2}, \frac{c^2}{a^2})$ と $\max(\frac{b^2}{a^2}, \frac{c^2}{b^2}, \frac{a^2}{c^2})$ を最小化するパラメータの組 $\{a, b, c\}$ を考える。このために、 $a^2 \leq b^2 \leq c^2$ を仮定する。 $\frac{a^2}{b^2} \leq 1$, $\frac{b^2}{c^2} \leq 1$, $\frac{c^2}{a^2} \geq 1$ であるから

$$\max\left(\frac{a^2}{b^2}, \frac{b^2}{c^2}, \frac{c^2}{a^2}\right) \geq 1, \quad \max\left(\frac{b^2}{a^2}, \frac{c^2}{b^2}, \frac{a^2}{c^2}\right) \geq 1.$$

が得られる。このことから、 $a^2 = b^2 = c^2 = \frac{1}{3}$ を満たすように与えられたパラメータの組 $\{a, b, c\}$ は $\max(\frac{a^2}{b^2}, \frac{b^2}{c^2}, \frac{c^2}{a^2})$ と $\max(\frac{b^2}{a^2}, \frac{c^2}{b^2}, \frac{a^2}{c^2})$ を共に 1 に最小化する。

$a^2 = b^2 = c^2 = \frac{1}{3}$ における p に対する区間 $[p_\Psi, 1 - 2p_\Psi]$ は常に式 (4) の区間 $[p_\Psi \cdot \max(\frac{a^2}{b^2}, \frac{b^2}{c^2}, \frac{c^2}{a^2}), 1 - p_\Psi - p_\Psi \cdot \max(\frac{b^2}{a^2}, \frac{c^2}{b^2}, \frac{a^2}{c^2})]$ を含む。故に式 (1) の状態 θ は与えられた p_Ψ に対し p が

$$p_\Psi \leq p \leq 1 - 2p_\Psi, \quad (5)$$

を満たすとき、可分割である。

ここまでの議論により、式 (5) は θ が可分割であるための十分条件である。しかし未だ、どんな可分割な状態も式 (5) の条件をみたすということは自明ではない。次の節では、式 (5) の条件が必要条件でもあることを示す。そのために、準エンタングルメント蒸留 [6] という概念を用いる。

3 準エンタングルメント蒸留

式 (1) の状態 θ に対する条件 “ θ は可分割である”、“ $p > 1 - 2p_\Psi$ ”、“ $p < p_\Psi$ ” をそれぞれ $R(\theta)$, $Q_+(\theta)$, $Q_-(\theta)$ とおく。前節ではどんな θ に対しても $\neg Q_+(\theta) \wedge \neg Q_-(\theta) \Rightarrow R(\theta)$ が真であることを示した。この節ではその逆、即ち $R(\theta) \Rightarrow \neg Q_+(\theta) \wedge \neg Q_-(\theta)$ がまた真であることを示す。そのために、準エンタングルメント蒸留 [6] という概念を用いる。

エンタングルメント蒸留は、局所操作と古典通信 (LOCC) を用いて、いくつかの同じ非最大エンタングルドペアから最大エンタングルドペアを作り出す、よく知られた手法である [7, 8]。このとき、最大エンタングルドペアの蒸留は確率的に成功する。もちろん、資源となるペアがエンタングルしていなければ、この成功確率は 0 である。また、たとえ資源となるペアがエンタングルしていたとしても、蒸留は成功することがない場合も知られている。このようなエンタングルメントは束縛エンタングルメントと呼ばれる [9]。

これに対し準エンタングルメント蒸留と呼ばれるスキームは、資源として用いるペアに、少数の束縛されていないエンタングルメントをもつペアと、極めて多数の束縛エンタングルメントをもつペアというような、異なるペアの組み合わせを許す。この場合、束縛エンタングルメントをもつペアは、蒸留の成功を助ける有益な資源となる。

二種類のペア $\sigma(f)$ と θ を用いた準エンタングルメント蒸留について考える。ここに、 $\sigma(f)$ は

$$\sigma_+(f) = f |\Psi\rangle\langle\Psi| + (1 - f)\theta_+, \quad (6)$$

か

$$\sigma_-(f) = f |\Psi\rangle\langle\Psi| + (1-f)\theta_-, \quad (7)$$

のいずれかである。ただし、 $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|0\rangle\otimes|0\rangle + |1\rangle\otimes|1\rangle + |2\rangle\otimes|2\rangle)$, $\theta_+ = \frac{1}{3} \sum_{i=0}^2 |i\rangle\langle i| \otimes |i+1\rangle\langle i+1|$, $\theta_- = \frac{1}{3} \sum_{i=0}^2 |i\rangle\langle i| \otimes |i-1\rangle\langle i-1|$. $\sigma_{\pm}(f)$ は $0 < f < 1$ のとき、束縛されていないエンタングルメントをもつことが知られている [6]. もう一つのペアである θ は、式 (1) で与えられる;

$$\theta = p_{\Psi} |\Psi\rangle\langle\Psi| + \frac{p}{3} \sum_{i=0}^2 |i\rangle\langle i| \otimes |i+1\rangle\langle i+1| + \frac{q}{3} \sum_{i=0}^2 |i\rangle\langle i| \otimes |i-1\rangle\langle i-1|.$$

この準エンタングルメント蒸留の過程は次のようにして説明される:

- (i) アリスとボブは $\mathcal{H}_{\sigma}^A \otimes \mathcal{H}_{\sigma}^B$ と $\mathcal{H}_{\theta}^A \otimes \mathcal{H}_{\theta}^B$ で記述される系のペア $\sigma(f)$ と θ を共有する. $\sigma(f) \otimes \theta$ はリフティング $\mathcal{E}^*[10]$ を用いて、次のように表される;

$$\mathcal{E}^*(\sigma(f)) = \sigma(f) \otimes \theta.$$

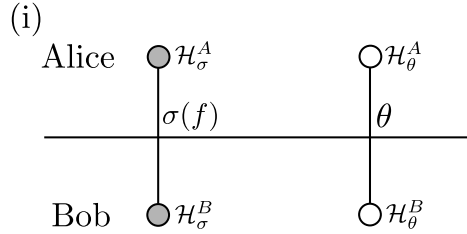


図 1: ペア $\sigma(f)$ と θ を用いた準エンタングルメント蒸留の初期設定

- (ii) アリスとボブは各々の系にユニタリ U_{XOR} を図 2-(ii) のように作用させる. U_{XOR} はベクトル $|i\rangle \otimes |j\rangle$ ($i, j = 0, 1, 2$) を次のように変換する;

$$U_{XOR} |i\rangle \otimes |j\rangle = |i\rangle \otimes |j+i\rangle.$$

この変換はチャネル Γ^* を用いて次のように記述される.

$$\Gamma^*[\mathcal{E}^*(\sigma(f))] = V [\mathcal{E}^*(\sigma(f))] V^*,$$

ここに、 $V \in \mathbf{B}(\mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B)$, $V = U_{XOR} \otimes U_{XOR}$ である ($\mathcal{H}^A = \mathcal{H}_{\sigma}^A \otimes \mathcal{H}_{\theta}^A$, $\mathcal{H}^B = \mathcal{H}_{\sigma}^B \otimes \mathcal{H}_{\theta}^B$).

- (iii) 系 $\mathcal{H}_{\theta}^A \otimes \mathcal{H}_{\theta}^B$ において、アリスとボブは固有状態として $|0\rangle\langle 0|$, $|1\rangle\langle 1|$, $|2\rangle\langle 2|$ をもつ観測量を図 2-(iii) のように観測する. 観測後、古典通信を用いて互いの観測結果を比較する. 観測結果が異なるとき、試みは失敗であり、全ての系を破棄する. 観測結果が一致するとき、試みは成功であり、 $\mathcal{H}_{\theta}^A \otimes \mathcal{H}_{\theta}^B$ の系のみを破棄する. その後、残されたペアを新たな $\sigma(f)$ として、ステップ (i) に戻り、ステップ (ii) と (iii) を繰り返す.

観測結果が r のとき、観測後の全系の状態はチャネル Π_r^* によって、次のように記述される.

$$\Pi_r^* \left(\Gamma^*[\mathcal{E}^*(\sigma(f))] \right) = \frac{P_r \Gamma^*[\mathcal{E}^*(\sigma(f))] P_r}{\text{tr} [P_r \Gamma^*[\mathcal{E}^*(\sigma(f))] P_r]},$$

ここに, $P_r \in \mathbf{B}(\mathcal{H}_\sigma \otimes \mathcal{H}_\theta)$, $P_r = I \otimes |rr\rangle\langle rr|$ である ($\mathcal{H}_\sigma = \mathcal{H}_\sigma^A \otimes \mathcal{H}_\sigma^B$, $\mathcal{H}_\theta = \mathcal{H}_\theta^A \otimes \mathcal{H}_\theta^B$). すると, 初期のペアである $\sigma(f)$ と残されたペアとの関係はチャネル Λ^* を用いて, 次のように記述される;

$$\Lambda^*(\sigma(f)) = \text{tr}_{\mathcal{H}_\theta^A \otimes \mathcal{H}_\theta^B} \left[\Pi_r^* \left(\Gamma^*[\mathcal{E}^*(\sigma(f))] \right) \right].$$

また, $\Lambda^*(\sigma_\pm(f))$ は次のように計算される;

$$\begin{aligned} \Lambda^*(\sigma_+(f)) &= \frac{fp_\Psi}{fp_\Psi + (1-f)q} |\Psi\rangle\langle\Psi| + \frac{(1-f)q}{fp_\Psi + (1-f)q} \theta_+, \\ \Lambda^*(\sigma_-(f)) &= \frac{fp_\Psi}{fp_\Psi + (1-f)p} |\Psi\rangle\langle\Psi| + \frac{(1-f)p}{fp_\Psi + (1-f)p} \theta_-. \end{aligned} \quad (8)$$

これらは式 (6), (7) における定義から, $\sigma_+(\frac{fp_\Psi}{fp_\Psi + (1-f)q})$, $\sigma_-(\frac{fp_\Psi}{fp_\Psi + (1-f)p})$ に等しい. 即ち

$$\begin{aligned} \Lambda^*(\sigma_+(f)) &= \sigma_+ \left(\frac{fp_\Psi}{fp_\Psi + (1-f)q} \right), \\ \Lambda^*(\sigma_-(f)) &= \sigma_- \left(\frac{fp_\Psi}{fp_\Psi + (1-f)p} \right), \end{aligned} \quad (9)$$

である. 故にステップ (i), (ii), (iii) を n 回繰り返すことに成功したとき, 残されたペアとして $\Lambda^{*n}(\sigma_\pm(f))$ が得られる.

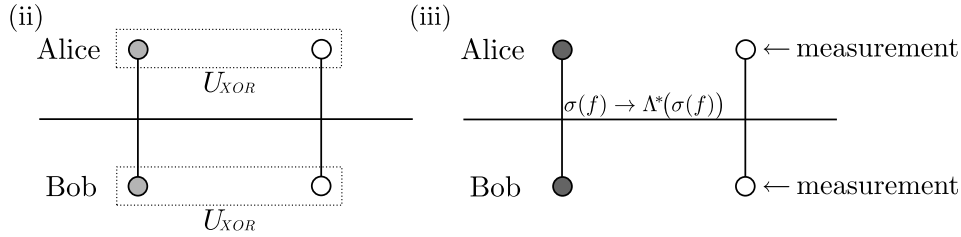


図 2: 準エンタングルメント蒸留の過程. ステップ (ii), (iii) により, ペア $\sigma(f)$ は $\Lambda^*(\sigma(f))$ に変わる.

f_n を $\langle \Psi | \Lambda^{*n}(\sigma(f)) | \Psi \rangle$ とおく. この値はフィデリティと呼ばれる. このとき数列 $\{f_n\}$ が 1 に近づくことは “ペア $\sigma(f)$ と θ を用いた準エンタングルメント蒸留は成功する可能性がある” ということを意味する. f_n は次のように評価される;

$$f_n = \begin{cases} \frac{f_{n-1}p_\Psi}{f_{n-1}p_\Psi + (1-f_{n-1})q} & (\sigma(f) = \sigma_+(f)) \\ \frac{f_{n-1}p_\Psi}{f_{n-1}p_\Psi + (1-f_{n-1})p} & (\sigma(f) = \sigma_-(f)) \end{cases}.$$

このことから, 次を得る.

$$a_n = \begin{cases} \frac{q}{p_\Psi} \cdot a_{n-1} & (\sigma(f) = \sigma_+(f)) \\ \frac{p}{p_\Psi} \cdot a_{n-1} & (\sigma(f) = \sigma_-(f)) \end{cases},$$

ここに, $a_n = \frac{1}{f_n} - 1$. この関係は次のように書き直せる;

$$a_n = \begin{cases} \left(\frac{q}{p_\Psi}\right)^n \cdot a_0 & (\sigma(f) = \sigma_+(f)) \\ \left(\frac{p}{p_\Psi}\right)^n \cdot a_0 & (\sigma(f) = \sigma_-(f)) \end{cases}.$$

よって, 数列 $\{f_n\}$ が 1 に近づくことは, 数列 $\{a_n\}$ が 0 に近づくことと同値なので, 条件 $\{f_n\} \rightarrow 1$ は次の条件に同値である;

$$\begin{cases} p > 1 - 2p_\Psi & (\sigma(f) = \sigma_+(f)) \\ p < p_\Psi & (\sigma(f) = \sigma_-(f)) \end{cases}.$$

ここで, $P(\sigma(f), \theta)$ を “ペア $\sigma(f)$ と θ を用いた準エンタングルメント蒸留は成功する可能性がある” という条件とする (i.e., $P(\sigma(f), \theta)$ は $\{f_n\} \rightarrow 1$ と同値). このとき

$$\begin{aligned} P(\sigma_+(f_0), \theta) &\Leftrightarrow p > 1 - 2p_\Psi \text{ (i.e., } Q_+(\theta)), \\ P(\sigma_-(f_0), \theta) &\Leftrightarrow p < p_\Psi \text{ (i.e., } Q_-(\theta)). \end{aligned}$$

がどんな f_0 に対しても得られる. 故に, 与えられた θ によって, 準エンタングルメント蒸留の成功可能性の有無が決まる.

我々は式 (1) のペア θ が可分割であるとき, θ を用いた準エンタングルメント蒸留は成功する可能性がない, 即ち条件 $P(\sigma_+(f_0), \theta)$, $P(\sigma_-(f_0), \theta)$ がどんな f_0 に対しても満たされないことを示した.

定理 3.1 θ が可分割ならば, 条件 $P(\sigma_+(f_0), \theta)$, $P(\sigma_-(f_0), \theta)$ はどんな f_0 に対しても満たされない.

証明 どんな f_0 に対しても, 次の関係が成り立つ;

$$P(\sigma_+(f_0)) \Leftrightarrow \{f_n\} \rightarrow 1 \Leftrightarrow \{a_n\} \rightarrow 0 \Leftrightarrow \frac{q}{p_\Psi} < 1 \Leftrightarrow Q_+(\theta). \quad (10)$$

また

$$\frac{q}{p_\Psi} < 1 \Leftrightarrow \forall n, a_n < a_{n-1} \Leftrightarrow \forall n, f_n > f_{n-1}, \quad (11)$$

であるから, どんな f_0 に対しても

$$\neg P(\sigma_+(f_0), \theta) \Leftrightarrow \neg Q_+(\theta), \quad (12)$$

$$\neg P(\sigma_-(f_0), \theta) \Leftrightarrow \exists n, f_n \leq f_{n-1}, \quad (13)$$

が得られる. ここで, 式 (12) の $\neg Q_+(\theta)$ が f_0 に依存しない条件であることに注意すると

$$\neg Q_+(\theta) \Leftrightarrow \forall f_0, \neg P(\sigma_+(f_0), \theta) \quad (14)$$

が成り立つ. 式 (12), (14) から

$$\exists f_0, \neg P(\sigma_+(f_0), \theta) \Leftrightarrow \neg Q_+(\theta) \Leftrightarrow \forall f_0, \neg P(\sigma_+(f_0), \theta)$$

が得られるため, 式 (13) により

$$\exists f_0, f_1 \leq f_0 \Rightarrow \neg P(\sigma_+(f_0), \theta) \Leftrightarrow \neg Q_+(\theta) \Leftrightarrow \forall f_0, \neg P(\sigma_+(f_0), \theta), \quad (15)$$

が成立. 同様にして $P(\sigma_-(f_0)), \neg Q_-(\theta)$ との間にも

$$\exists f_0, f_1 \leq f_0 \Rightarrow \neg P(\sigma_-(f_0), \theta) \Leftrightarrow \neg Q_-(\theta) \Leftrightarrow \forall f_0, \neg P(\sigma_-(f_0), \theta), \quad (16)$$

の成立が示される. 以上より

$$\theta \text{が可分割} \Rightarrow \exists f_0, f_1 \leq f_0, \quad (17)$$

を示せば十分である.

θ が可分割であるとする. このとき, θ は次のように表現できる:

$$\theta = \sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i| \otimes |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad (\lambda_i > 0, \sum_i \lambda_i = 1, \|\phi_i\| = 1, \|\psi_i\| = 1).$$

$|\phi_i\rangle$ と $|\psi_i\rangle$ を $|\phi_i\rangle = \sum_j \phi_j^i |j\rangle, |\psi_i\rangle = \sum_j \psi_j^i |j\rangle$ と表す. $\sigma_+(f_0)$ と θ を用いた準エンタングルメント蒸留において, 観測結果が r で一致したとき, $\Lambda^*(\sigma_+(f_0))$ は

$$\frac{f_0 \sum_{i,k} \lambda_i |\phi_k^i|^2 |\psi_k^i|^2 |\xi_i\rangle\langle\xi_i| + (1-f_0) \sum_{i,k} \lambda_i |\phi_k^i|^2 |\psi_{k-1}^i|^2 |r-k, r-k+1\rangle\langle r-k, r-k+1|}{f_0 \sum_{i,k} \lambda_i |\phi_k^i|^2 |\psi_k^i|^2 + (1-f_0) \sum_{i,k} \lambda_i |\phi_k^i|^2 |\psi_{k-1}^i|^2},$$

と評価される. ここに

$$|\xi_i\rangle = \frac{\sum_k \phi_k^i \psi_k^i}{\sqrt{\sum_\alpha |\phi_\alpha^i|^2 |\psi_\alpha^i|^2}} |r-k, r-k\rangle.$$

このことから, $f_1 = \langle \Psi | \Lambda^*(\sigma_+(f)) | \Psi \rangle$ は次のように計算される;

$$f_1 = \frac{f_0 \sum_i \lambda_i |\sum_k \phi_k^i \psi_k^i|^2}{3f_0 \sum_{i,k} \lambda_i |\phi_k^i|^2 |\psi_k^i|^2 + 3(1-f_0) \sum_{i,k} \lambda_i |\phi_k^i|^2 |\psi_{k-1}^i|^2}.$$

ここで, 全ての f_0 に対して $f_1 > f_0$ であると仮定する. このとき

$$\sum_{i,k} \lambda_i |\phi_k^i|^2 \left(\frac{1-3f}{3(1-f)} |\psi_k^i|^2 - |\psi_{k-1}^i|^2 \right) > 0, \quad (18)$$

が全ての f_0 に対して成立する. しかし, この条件は $f_0 \geq \frac{1}{3}$ において満たされないため, 矛盾である.

$\sigma_-(f_0)$ と θ を用いた準エンタングルメント蒸留においても, θ が可分割であるとき, 全ての f_0 に対して $f_1 > f_0$ であると仮定すると, 同様に矛盾が導かれる.

以上より, θ が可分割ならば, 条件 $P(\sigma_+(f_0), \theta)$ と $P(\sigma_-(f_0), \theta)$ はどんな f_0 に対しても満たされない. ■

定理 3.1 の証明における式 (15), (16), (17) から, θ が可分割 (i.e., $R(\theta)$) であれば $\neg Q_+(\theta), \neg Q_-(\theta)$ が共に成り立つ. 即ち, $R(\theta) \Rightarrow \neg Q_+(\theta) \wedge \neg Q_-(\theta)$ が成立する. 故に, 式 (5) は式 (1) の状態 θ が可分割であるための必要十分条件であることが示された.

4 他の部分クラスとの比較

前節までの議論で, 式 (1) の状態 θ が可分割である必要十分条件は式 (5) の条件であることが示された;

$$\theta \text{が可分割} \Leftrightarrow p_\psi \leq p \leq 1 - 2p_\psi.$$

この節では、 θ に対する可分割性を θ の PPT 条件や、他の部分クラスに対する可分割性と比較する。 θ の PPT 条件は次のようになる;

$$\frac{1 - p_\Psi - \sqrt{1 - 2p_\Psi - 3p_\Psi^2}}{2} \leq p \leq \frac{1 - p_\Psi + \sqrt{1 - 2p_\Psi - 3p_\Psi^2}}{2}.$$

図 3 に示すように、 θ はパラメータ p_Ψ, p によって、三つの領域に分類される。

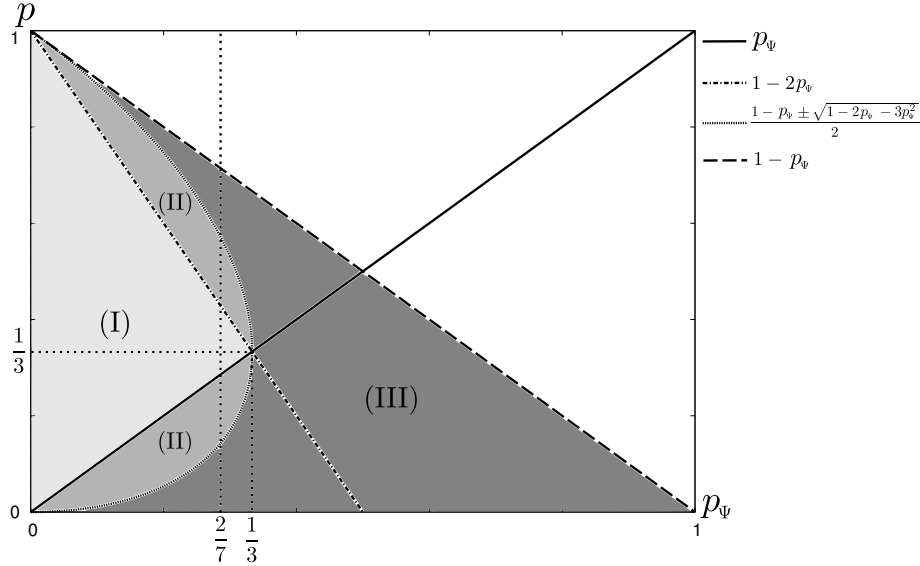


図 3: θ の可分割性と PPT 条件及び、他の部分クラスとの関係

(I), (II), (III) の領域はそれぞれ θ が

- (I) ... 可分割.
- (II) ... エンタングルしており、かつ PPT.
- (III) ... エンタングルしているが、PPT でない.

であることを示している。

また $p_\Psi = \frac{2}{7}$ のとき、 θ は Horodecki 等が [2] で紹介したクラス $\theta(\alpha)$ に一致する。

$$\theta(\alpha) = \frac{2}{7} |\Psi\rangle\langle\Psi| + \frac{\alpha}{7} \theta_+ + \frac{5-\alpha}{7} \theta_-, \quad (19)$$

ここに、 $0 \leq \alpha \leq 5$. Horodecki 等は $\theta(\alpha)$ の可分割性を次のように示している;

$$\begin{cases} 2 \leq \alpha \leq 3 & \Leftrightarrow \theta(\alpha) \text{ は可分割.} \\ 1 \leq \alpha < 2 \text{ または } 3 < \alpha \leq 4 & \Leftrightarrow \theta(\alpha) \text{ はエンタングルしており、かつ PPT.} \\ 0 \leq \alpha < 1 \text{ または } 4 < \alpha \leq 5 & \Leftrightarrow \theta(\alpha) \text{ はエンタングルしているが、PPT でない.} \end{cases}$$

もちろん、この可分割性は $p_\Psi = \frac{2}{7}$ における θ の可分割性と一致することが確かめられる。

さらに、 $p = \frac{1 - p_\Psi \pm \sqrt{1 - 2p_\Psi - 3p_\Psi^2}}{2}$ なる θ を考える。このとき、 θ は図 3 の曲線上にあり、Jurkowski, Chruściński, Rutkowski が [5] で紹介したクラス $\theta(\varepsilon)$ に一致する。

$$\theta(\varepsilon) = \frac{1}{\Lambda} |\Psi\rangle\langle\Psi| + \frac{\varepsilon}{\Lambda} \theta_+ + \frac{\varepsilon^{-1}}{\Lambda} \theta_-,$$

ここに, $\varepsilon > 0$, $\Lambda \equiv 1 + \varepsilon + \varepsilon^{-1}$. 彼等は $\theta(\varepsilon)$ の可分割性を次のように示している;

$$\begin{cases} \varepsilon = 1 & \Leftrightarrow \theta \text{は可分割.} \\ \varepsilon \neq 1 & \Leftrightarrow \theta \text{はエンタングルしており, かつ PPT.} \end{cases}$$

Horodecki 等のモデル同様, この可分割性も $p = \frac{1-p_\Psi \pm \sqrt{1-2p_\Psi-3p_\Psi^2}}{2}$ における θ の可分割性と一致することが確かめられる.

参考文献

- [1] D. Chruściński and A. Kossakowski: “On circulant states with positive partial transpose”, Phys. Rev. A, **76**, (2007).
- [2] M. Horodecki, P. Horodecki and R. Horodecki: “Mixed-state entanglement and quantum communication admitting a hidden-variable model”, Vol. 173 of Quantum Information, Springer Tracts in Modern Physics (2001).
- [3] A. Peres: “Separability criterion for density matrices”, Phys. Rev. Lett., **77**, pp. 1413–1415 (1996).
- [4] M. Horodecki, P. Horodecki and R. Horodecki: “Separability of mixed states: necessary and sufficient conditions”, Phys. Lett. A, **223**, pp. 1–8 (1996).
- [5] J. Jurkowski, D. Chruściński and A. Rutkowski: “A class of bound entangled states of two qutrits”, Open Systems & Information Dynamics, **16**, pp. 235–242 (2009).
- [6] P. Horodecki, M. Horodecki and R. Horodecki: “Bound entanglement can be activated”, Phys. Rev. Lett., **82**, pp. 1056–1059 (1999).
- [7] C. Bennett, G. Brassard, S. Popescu and B. Schumacher: “Concentrating partial entanglement by local operations”, Phys. Rev. A, **53**, pp. 2046–2052 (1996).
- [8] C. Bennett, G. Brassard, S. Popescua, B. Schumacher, J. Smolin and W. Wootters: “Purification of noisy entanglement and faithful teleportation via noisy channels”, Phys. Rev. Lett., **76**, pp. 722–725 (1996).
- [9] M. Horodecki, P. Horodecki and R. Horodecki: “Mixed-state entanglement and distillation: Is there “bound” entanglement in nature?”, Phys. Rev. Lett, **80**, pp. 5239–5242 (1998).
- [10] L. Accardi and M. Ohya: “Compound channels, transition expectations, and liftings”, Applied Mathematics & Optimization, **39**, 1, pp. 33–59 (1999).

Non-commutative Galois theory on Nonion algebra and $su(3)$ and its application to constructions of quark models

By

J.Larynowicz*, **K.Nouno ****, **D. Nagayama***** and **O. Suzuki *****

* Institute of physics, Lodz University , ul. Pomorska 153/156,Lodz, Poland, Email: jlawryno@uni.lodz.pl

** Department of Mathematics, Fukuoka Education University, Munakata Fukuoka, Japan,

Email:nouno [@fukuoka-edu.ac.jp](mailto:nouno@fukuoka-edu.ac.jp)

*** Department of Compute rand System Analysis College of Humanities and Sciences, Nihon University 156

Setagaya,Tokyo,Japan E-mail: osuzuki@cssa.chs.nihon-u.ac.jp

Keywords:Non-commutative Galois extension, Clifford algebra,quark confinement

Abstract. A concept of non-commutative Galois extension is introduced and binary and ternary extensions are chosen. A concept of ternary Clifford algebra is introduced for non-commutative Galois extensions and the corresponding Dirac operators are associated. Non-commutative Galois extensions for Nonion algebra and $su(3)$ are constructed and ternary and binary Clifford analysis are given. Finally a ternary approach to constructions of quark models is suggested.

1. BINARY AND TERNARY NON-COMMUTATIVE GALOIS EXTENSIONS

We introduce a concept of non-commutative Galois extension:

Basic definitions on non commutative Galois extensions

Let A be an algebra and A' be a subalgebra of A . We make the following definition:

DEFINITION 1

(1) We take an element $\tau \in A$ with the following condition $\tau^k = 1$. The following subalgebra $A'[\tau]$ of A is called non-commutative Galois extension of k -nary type:

$$A'[\sqrt[k]{1}] = \left\{ \sum_{\rho=0}^{k-1} \zeta_{\rho} \tau^{\rho} \mid \zeta_{\rho} \in A' \right\}$$

The extension is called proper when $\tau^{\rho} \notin A' (\rho = 1, \dots, k-1)$.

(2) When $k = 2$ (or $k = 3$), the extension is called binary (resp. ternary) extension.

REMARK: (1) To define the Galois extension structure, we have to put additional conditions on the algebra: For example, $\xi \tau^l = \sum_{\alpha} \tau^{\alpha} \xi_{\alpha}$ holds with some $\xi_{\alpha} \in A$ for any $\xi \in A, \alpha, l = 1, 2, \dots, k-1$. We are concerned with the algebra with this condition. (2) The Galois extension is given by the choice of τ . Hence it is not unique. We are concerned with the Galois extensions which do not depend on the choice $\tau (\neq 1)$.

We give several examples of binary and ternary extensions.

Example 1(Complex numbers and Quaternion numbers)

The complex numbers are obtained by $R[\sqrt{-1}]$ and the quaternion numbers are obtained by successive binary Galois extensions:

$$\begin{aligned} C &= R[\sqrt{-1}] = \{\theta_1 1 + \theta_2 \sqrt{-1} \mid \theta_1, \theta_2 \in R\} \\ &= \left\{ \begin{pmatrix} \theta_1 & \theta_2 \\ -\theta_2 & \theta_1 \end{pmatrix} \mid \theta_1, \theta_2 \in R \right\} \\ H &= C[\sqrt{-1_2}] = \{\theta_1 1 + \theta_2 \sqrt{-1_2} \mid \theta_1, \theta_2 \in C\} \\ &= \left\{ \begin{pmatrix} \theta_1 & \theta_2 \\ \theta_2 & -\theta_1 \end{pmatrix} \mid \theta_1, \theta_2 \in C \right\} \\ &= \left\{ \begin{pmatrix} \theta_1 & \theta_2 & \theta_3 & \theta_4 \\ -\theta_2 & \theta_1 & \theta_4 & -\theta_3 \\ \theta_3 & \theta_4 & -\theta_1 & -\theta_2 \\ \theta_4 & -\theta_3 & +\theta_2 & -\theta_1 \end{pmatrix} \mid \theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4 \in R \right\} \end{aligned}$$

Example 2 (Cubic root numbers)

The simplest example of ternary extension is given by the complex cubic number $R[\sqrt[3]{1}]$:

$$\begin{aligned} R[\sqrt[3]{1}] &= \{\theta_1 1 + \theta_2 j + \theta_3 j^2 \mid \theta_1, \theta_2, \theta_3 \in R\} \\ &= \left\{ \begin{pmatrix} \theta_1 & \theta_2 & \theta_3 \\ \theta_3 & \theta_1 & \theta_2 \\ \theta_2 & \theta_3 & \theta_1 \end{pmatrix} \mid \theta_1, \theta_2, \theta_3 \in R \right\} \end{aligned}$$

2. The Galois extension structure of Nonion algebra

We introduce a concept of Nonion algebra N and discuss its Galois extension structure.

DEFINITION

(1) The matrix algebra which is generated by two of the following 3 elements over $R[\sqrt[3]{1}]$ is called Nonion algebra:

$$Q_1 = \begin{pmatrix} 0 & j & 0 \\ 0 & 0 & j^2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad Q_2 = \begin{pmatrix} 0 & j^2 & 0 \\ 0 & 0 & j \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad Q_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(2) The matrix algebra which is generated by two of the following 3 elements over the real field R is denoted by B :

$$T_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad T_5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad T_6 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(3)The algebra generated by T_2 (or T_3) is called cubic algebra and is denoted by B' :

$$T_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad T_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(4) The algebra \tilde{N} generated by the following elements is called the binary extension of N , $\tilde{N} = N[\sqrt[3]{1}] : \tilde{N} = \{x + yT_4 \mid x, y \in N\}$.

Then we can prove the following the proposition:

PROPOSITION

(1)The following 9 elements constitute linear basis of Nonion algebra:

$$\begin{aligned} Q_1 &= \begin{pmatrix} 0 & j & 0 \\ 0 & 0 & j^2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & Q_2 &= \begin{pmatrix} 0 & j^2 & 0 \\ 0 & 0 & j \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & Q_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \bar{Q}_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ j^2 & 0 & 0 \\ 0 & j & 0 \end{pmatrix}, & \bar{Q}_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ j & 0 & 0 \\ 0 & j^2 & 0 \end{pmatrix} & \bar{Q}_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ R_1 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & R_2 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & j & 0 \\ 0 & 0 & j^2 \end{pmatrix} & R_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & j^2 & 0 \\ 0 & 0 & j \end{pmatrix} \end{aligned}$$

(2) The following 6 elements are linear basis of B :

$$\begin{aligned} T_1 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & T_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & T_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ T_4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & T_5 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & T_6 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

(3) The following 3 elements are linear basis of B'

$$T_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad T_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad T_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(4) B and B' are subalgebras of N and \tilde{N} respectively.

PROOF: We can prove the assertions by use of the following product tables:

	Q_1	Q_2	Q_3	\bar{Q}_1	\bar{Q}_2	\bar{Q}_3	R_1	R_2	R_3
Q_1	\bar{Q}_1	$j^2\bar{Q}_3$	$j\bar{Q}_2$	R_1	j^2R_3	jR_2	Q_1	Q_2	Q_3
Q_2	$j\bar{Q}_3$	\bar{Q}_2	$j^2\bar{Q}_1$	jR_2	R_1	j^2R_3	Q_2	Q_3	Q_1
Q_3	$j^2\bar{Q}_2$	$j\bar{Q}_1$	\bar{Q}_3	j^2R_3	jR_2	R_1	Q_3	Q_1	Q_2
\bar{Q}_1	R_1	R_2	R_3	Q_1	j^2Q_3	jQ_2	\bar{Q}_1	$j^2\bar{Q}_3$	$j\bar{Q}_2$
\bar{Q}_2	R_3	R_1	R_2	jQ_3	Q_2	j^2Q_1	\bar{Q}_2	$j^2\bar{Q}_1$	$j\bar{Q}_3$
\bar{Q}_3	R_2	R_3	R_1	j^2Q_2	jQ_1	Q_3	\bar{Q}_3	$j^2\bar{Q}_2$	$j\bar{Q}_1$
R_1	Q_1	Q_2	Q_3	\bar{Q}_1	\bar{Q}_2	\bar{Q}_3	R_1	R_2	R_3
R_3	j^2Q_2	j^2Q_3	j^2Q_1	\bar{Q}_3	\bar{Q}_1	\bar{Q}_2	R_2	R_3	R_1
R_3	jQ_3	jQ_1	jQ_2	\bar{Q}_2	\bar{Q}_3	\bar{Q}_1	R_3	R_1	R_2

	T_1	T_2	T_3	T_4	T_5	T_6
T_1	T_1	T_2	T_3	T_4	T_5	T_6
T_2	T_2	T_3	T_1	T_5	T_6	T_4
T_3	T_3	T_1	T_2	T_6	T_4	T_5
T_4	T_4	T_6	T_5	T_1	T_3	T_2
T_5	T_5	T_4	T_6	T_2	T_1	T_3
T_6	T_6	T_5	T_4	T_3	T_2	T_1

The Galois extension structure of Nonion algebra

We can give the following Galois extension structure of the Nonion algebra. Namely we

can prove the following theorem:

THEOREM I

- (1) Nonion algebra is a ternary Galois extension of the algebra $B' : N = B'[\sqrt[3]{1}]$. The extension can be realized by $B'[\tau](\tau^3 = 1)$ with the choice of $\tau = Q_i, \bar{Q}_i (i = 1, 2, 3)$
 (2) \tilde{N} is a binary extension of $B : \tilde{N} = B[\sqrt[2]{1}]$.

Hence we have the following commutative diagram:

$$\begin{array}{ccc} & \tilde{N} & \\ & \swarrow \quad \searrow & \\ N & & B \\ & \swarrow \quad \searrow & \\ & B' & \end{array}$$

PROOF (1) We notice that B' is the commutative Galois extension: $B' = R[\sqrt[3]{1}]$.

Choosing $\tau = Q_i, \bar{Q}_i (i = 1, 2, 3)$, we make the Galois extension $B'[\sqrt[2]{1_3}]$. Then we see that this is identical with N .

(2) We notice that B is the non-commutative Galois extension of $B' : B = B'[\sqrt[2]{1}]$ where $\sqrt[2]{1} = T_4$. Choosing $\tau = T_4$, we make the Galois extension. Then we see that it is identical with $\tilde{N} : \tilde{N} = B[\sqrt[3]{1}]$.

THEOREM II

We can prove the following assertions for the Galois group of the extension N .

(1) We have the following Galois extensions:

$$\left\{ \begin{array}{l} A[R] = \{xR_1 + yR_2 + zR_3 \mid x, y, z \in R[j]\} \\ A[Q_i] = \{xR_1 + yQ_i + z\bar{Q}_i \mid x, y, z \in R[j]\} (i = 1, 2, 3) \\ A[\bar{Q}_i] = \{xR_1 + y\bar{Q}_i + zQ_i \mid x, y, z \in R[j]\} (i = 1, 2, 3) \end{array} \right.$$

The extension does not depend on the choice of τ with $B'[\tau](\tau^3 = 1)$. Namely we have $N = A[Q_1] = A[Q_2] = A[Q_3]$

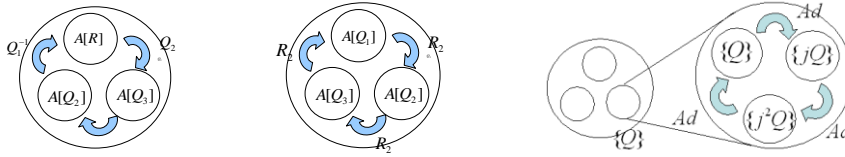
(2) $Q_i, \bar{Q}_j (i, j = 1, 2, 3)$ give a part of generators of the Galois group of $N : N = B'[\sqrt[3]{1}]$.

Namely putting $A_U[R] = \{xR_1 + yUR_2 + z\bar{U}R_3 \mid x, y, z \in R[j]\}$, where $U = Q_i, \bar{Q}_j (i, j = 1, 2, 3)$, we can obtain new Galois extensions:

$$\left\{ \begin{array}{l} (1) \quad A_{Q_i}[R] = A[Q_2], A_{Q_2}[R] = A[Q_3], \\ \quad \quad A_{\bar{Q}_i}[R] = A[Q_3], A_{\bar{Q}_2}[R] = A[Q_1], \\ (2) \quad A_{R_2}[Q_1] = A[Q_2], A_{R_2}[Q_2] = A[Q_3], A_{R_2}[Q_3] = A[Q_1], \\ \quad \quad A_{\bar{Q}_1}[R] = A[Q_3], A_{\bar{Q}_2}[R] = A[Q_1], A_{\bar{Q}_3}[R] = A[Q_2], \end{array} \right.$$

(3) We have the following results for the Adjoint operations:

$$\left\{ \begin{array}{l} Ad_{Q_i}R_1 = R_1, Ad_{Q_i}R_2 = jR_2, Ad_{Q_i}R_3 = j^2R_3 (i = 1, 2, 3), \\ Ad_{Q_i}Q_1 = Q_1, Ad_{Q_i}Q_2 = jQ_2, Ad_{Q_i}Q_3 = j^2Q_3 (i = 1, 2, 3), \\ Ad_{Q_i}\bar{Q}_1 = \bar{Q}_1, Ad_{Q_i}\bar{Q}_2 = j^2\bar{Q}_2, Ad_{Q_i}\bar{Q}_3 = j\bar{Q}_3 (i = 1, 2, 3), \end{array} \right.$$



3. The Galois extension structure of su(3)

We discuss the structure of the Galois extension on the algebras su(3).

(1) We recall bases of su(3).

$$\begin{aligned}
 f_1 &= \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & f_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & f_3 &= \begin{pmatrix} i & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 f_4 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, & f_5 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & f_6 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, & f_7 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, & f_8 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

(2) We prepare the three linear subspaces:

$$\begin{aligned}
 L_1: \quad e_1 &= \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & e_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & e_3 &= \begin{pmatrix} i & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
 L_2: \quad e'_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, & e'_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & e'_3 &= \begin{pmatrix} i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \end{pmatrix} \\
 L_3: \quad e''_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, & e''_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, & e''_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & -i \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

REMARK: We notice the following relation $f_8 = 1/\sqrt{3}(e'_3 + e''_3)$. Hence we see that e_1, e_2, \dots, e''_3 constitute the basis omitting one of e_3, e'_3, e''_3 .

Then we can prove the following theorem:

THEOREM III

We have the binary and ternary Galois extension structures on su(3):

(1) We have the following Adjoint representation on $L_i (i = 1, 2, 3)$.

$$\left\{ \begin{aligned}
 He_1H^{-1} &= -e_2, & He_2H^{-1} &= e_1, & He_3H^{-1} &= e_3, \\
 H'e_1H'^{-1} &= -e'_2, & H'e_2H'^{-1} &= -e'_1, & H'e_3H'^{-1} &= e'_3, \\
 H''e_1H''^{-1} &= e''_2, & H''e_2H''^{-1} &= e''_1, & H''e_3H''^{-1} &= e''_3,
 \end{aligned} \right.$$

where

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad H' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & i \end{pmatrix}.$$

We can obtain the following commutation relations:

$$\left\{ \begin{array}{l} e_1^2 = e_2^2 = e_3^2 = -1 \\ e_1e_2 = -e_2e_1 = e_3, e_2e_3 = -e_3e_2 = e_1, e_3e_1 = -e_1e_3 = e_3, \end{array} \right.$$

After the central extension, we have the Clifford algebra which is isomorphic to Quaternion algebra. For the case of e'_i and $e''_i (i=1,2,3)$, we have the same assertions on $L_i (i=1,2,3)$. Hence we obtain the Dirac operators .

(3) We have

$$\left\{ \begin{array}{l} G_1e^{(0)}_kG_1^{-1} = e^{(1)}_k (k=1,2,3), G_1e^{(1)}_kG_1^{-1} = e^{(2)}_k (k=1,2), G_1e^{(1)}_3G_1^{-1} = -e^{(2)}_3 \\ G_1e^{(2)}_kG_1^{-1} = e^{(0)}_k (k=1,3), G_1e^{(2)}_2G_1^{-1} = -e^{(0)}_2, \end{array} \right.$$

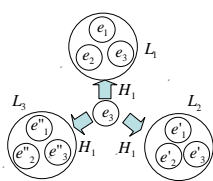
where

$$G_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

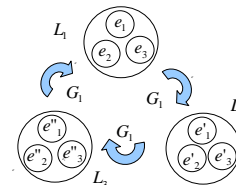
By this result, we can find a ternary non-commutative Galois extension. Hence we can introduce the ternary Dirac operators.

Summary: We have the non-commutative Galois extension structure on $su(3)$:

- | | |
|---|--|
| $su(3)$
$\downarrow \sqrt[3]{1_3}$
$su(2)$
$\downarrow \sqrt[3]{1_3}$
$su(1)$ | <p>(1) $su(3) = L_1 \cup L_2 \cup L_3$</p> <p>(2) $L_i (i=1,2,3)$ is isomorphic to $su(2)$ and it is a binary Galois extension $L_i = B_0[\sqrt[2]{1_3}]$ over $B_0 = R[e_3]$</p> <p>(3) $su(3)$ is a ternary Galois extension $B[\sqrt[3]{1_3}]$ over $B = su(2)$</p> |
|---|--|



Binary extension



Ternary extension

4. A METHOD OF NON-COMMUTATIVE GALOIS EXTENSIONS TO THE THEORY OF ELEMENTARY PARTICLES

We shall give possibilities of describing the theory of elementary particles in terms of binary and ternary non-commutative Galois extensions.

(1) Generation scheme of elementary particles

We have several schemes of generation of elementary particles in physics. One of them can be given as follows ([5]):

- (1) At the very beginning of the universe, there exist only photons γ .
- (2) Then photon is decomposed into particles and anti-particles. $\gamma \rightarrow X_i + \bar{X}_i (i=1,2,\dots,M)$.
- (3) In high temperature, they behave as free particles. When the temperature is going down, some of them make composite particles (i.e. meson): $\{X_i \bar{X}_j\} (i, j=1,2,\dots,M')$.
- (4) When they interact strongly, we have the interacting ternary states and we can obtain baryons which can be stated as the quark-baryon phase transition:

THE QUARK-BARYON PHASE TRANSITION

We can understand the quark-baryon phase transitions as the following scheme:

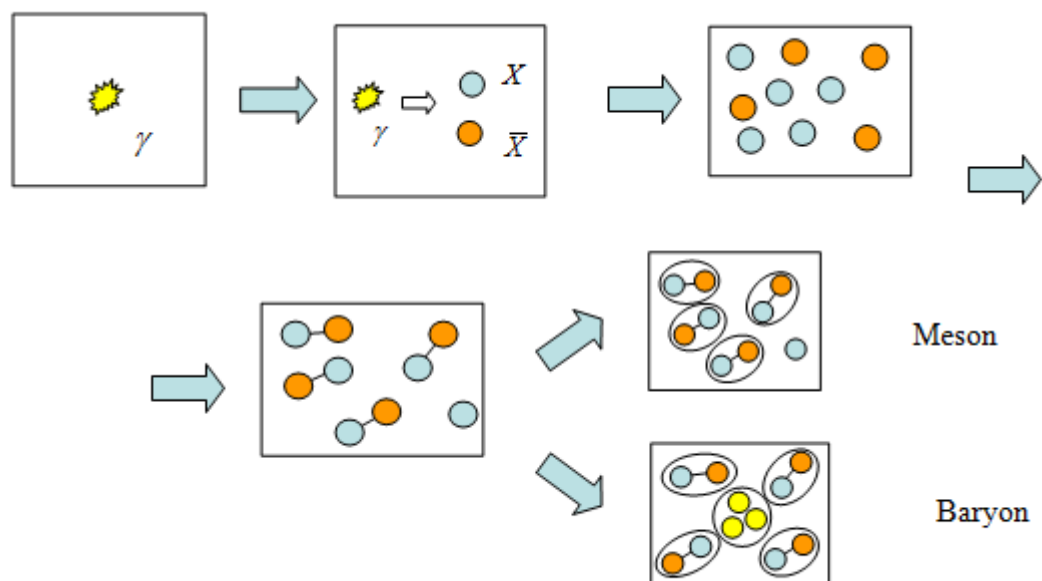


Figure 5

(2) Method of non-commutative Galois extensions to elementary particles

We shall try to describe the processes of generation of particles in terms of non-commutative Galois extensions in the following manner:

- (1) The photon is identified with the identity matrix:
- (2) The binary particles of particles and anti-particles are described by the binary Galois extensions. The relation between particles and anti particles is described by the involution of the binary extension.
- (3) We can understand the quark baryon phase transitions as a relationship between the ternary and binary extensions. This can be observed in $su(3)$.

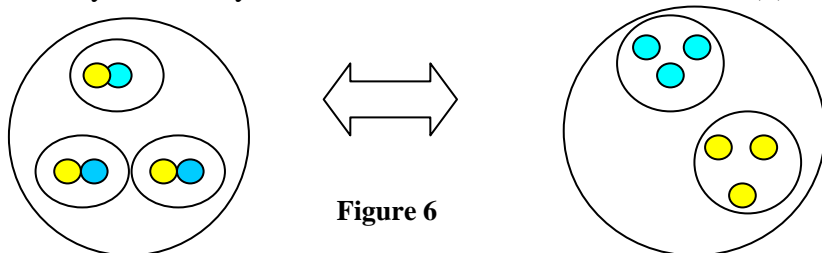


Figure 6

(4) We can determine the possible particles by the binary and ternary Pauli exclusion principles. By this we can make quark models.

(3) Ternary Pauli exclusion principle and quark model

Prof. Kerner has generalized the well known Pauli condition to quarks which is called ternary Pauli exclusion principle ([3]). We consider an algebra A which is generated by $\theta^A (A=1,2,\dots,M)$ and $\bar{\theta}^A (A=1,2,\dots,M)$. We make the following definitions: .

(1) $\theta^A \bar{\theta}^B$ is called to satisfy the j^k -conjugate Pauli exclusion condition, when

$$\theta^A \bar{\theta}^B = j^k \bar{\theta}^B \theta^A (k=0,1,2)$$

(2) $\theta^A \theta^B \theta^C$ is called to satisfy the j -conjugate (resp j^2 -conjugate)Pauli exclusion condition, when

$$\theta^A \theta^B \theta^C = j \theta^B \theta^C \theta^A = j^2 \theta^C \theta^A \theta^B \quad \text{resp} \quad (\theta^A \theta^B \theta^C = j^2 \theta^B \theta^C \theta^A = j \theta^C \theta^A \theta^B).$$

We choose an algebra and can define binary particles and ternary particles making compositions of two generators and three generators. By this we can define the confined particles by the Pauli conditions. In fact, Kerner has proved that only one quark can not exist, namely single quark is confined and that four quarks can not exist ([3]).

(4) Binary and ternary Clifford algebras and Galois extensions

We show that binary and ternary Galois extensions introduce binary and ternary Clifford algebras.

The binary Clifford algebra/analysis and binary Galois extensions

We begin with a binary Clifford algebra with generators $\{T_1, T_2, \dots, T_n\} (n=2^m)$. Then we have the following commutation relations:

$$T_i T_j + T_j T_i = \pm 2\delta_{ij} 1 (i, j = 1, 2, \dots, n)$$

We can introduce the following operators on the n -dimensional Euclidean space:

$$\left\{ \begin{array}{l} D = T_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + T_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + \dots + T_n \frac{\partial}{\partial x_n} \\ D^* = T_1^* \frac{\partial}{\partial y_1} + T_2^* \frac{\partial}{\partial y_2} + \dots + T_n^* \frac{\partial}{\partial y_n} \end{array} \right.$$

The operators are called Dirac operator and its conjugate operator respectively when they satisfy the following condition:

$$\Delta = D^* D = D D^*, \quad \Delta = \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial x_m^2} \right) \otimes 1_2$$

The operator is called the binary Laplace operator. We can prove the following theorem:

THEOREM IV

Binary Clifford algebra with negative signature can be obtained from a successive

Galois extension.

PROOF: We prove the assertion by induction. The quaternion numbers can be obtained by the non-commutative Galois extensions for complex numbers. Next we show that we can construct a sequence Clifford algebras for a given Clifford algebra which are non-commutative Galois extensions. We take a Clifford algebra A_n . Let $\{T_1, T_2, \dots, T_n\}$ be a system of the Clifford algebra. Putting

$$\hat{T}_i = \begin{pmatrix} T_i & 0 \\ 0 & -T_i \end{pmatrix} \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad \hat{T}_{n+1} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{T}_{n+2} = \begin{pmatrix} 0 & J \\ J & 0 \end{pmatrix},$$

we have a new Clifford algebra A_{n+2} which is generated by $\{\hat{T}_1, \hat{T}_2, \dots, \hat{T}_{n+2}\}$ which has a Galois extension structure:

$$A_{n+1} = A_n[\hat{T}_{n+1}], \quad A_{n+2} = A_{n+1}[\hat{T}_{n+2}]$$

By this result we can prove the assertion of Theorem:

The ternary Clifford algebra/analysis and ternary Galois extension

Next we proceed to the ternary Clifford analysis .

DEFINITION

The basic ternary Clifford algebra which is generated by $\{T_1, T_2, T_3\}$ satisfying the following commutation relations:

$$\left\{ \begin{array}{l} T_a T_b T_c + T_b T_c T_a + T_c T_b T_a = 3\eta^{abc} E_3 \\ \eta^{abc} = \eta^{bca} = \eta^{cab} \\ \eta^{111} = \eta^{222} = \eta^{333} = 1, \eta^{123} = \eta^{231} = \eta^{321} = j^2, \\ \eta^{321} = \eta^{213} = \eta^{132} = j \end{array} \right.$$

Next we proceed to the derivation of field operators from a ternary Galois extension. Choosing $\{T_1, T_2, T_3\}$, we introduce the following three operators on the 3-dimensional Euclidean space:

$$\left\{ \begin{array}{l} D = T_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + T_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + T_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \\ D^* = T_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + j^2 T_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + j T_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \\ D^{**} = T_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + j T_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + j^2 T_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \end{array} \right.$$

The operators are called Dirac operator and its conjugate operators when they satisfy the following condition:

$$\Delta = DD^*D^{**} \quad \Delta = \left(\frac{\partial^3}{\partial x_1^3} + \frac{\partial^3}{\partial x_2^3} + \frac{\partial^3}{\partial x_3^3} - 3 \frac{\partial^3}{\partial x_1 \partial x_2 \partial x_3} \right) \otimes 1_3$$

The operator is called the ternary Klein Gordon operator.

THEOREM V

For Nonion algebra, a triple $\{T_1, T_2, T_3\}$ gives a ternary Dirac operators and Klein-Gordon operator, if and only if

$$\begin{aligned} & \{R_1, Q_1, \bar{Q}_1\} \{R_1, Q_2, \bar{Q}_2\} \{R_1, Q_3, \bar{Q}_3\} \{R_1, R_2, R_3\} \{R_1, R_1, R_1\} \\ & \{Q_1, Q_1, Q_1\} \{Q_2, Q_2, Q_2\} \{Q_3, Q_3, Q_3\} \{Q_1, Q_2, Q_3\} \{R_2, R_2, R_2\} \\ & \{\bar{Q}_1, \bar{Q}_1, \bar{Q}_1\} \{\bar{Q}_2, \bar{Q}_2, \bar{Q}_2\} \{\bar{Q}_3, \bar{Q}_3, \bar{Q}_3\} \{\bar{Q}_1, \bar{Q}_2, \bar{Q}_3\} \{\bar{R}_2, \bar{R}_2, \bar{R}_2\} \end{aligned}$$

Hence we can introduce the Dirac operators.

PROOF: The assertions can be obtained by the direct calculations and may be omitted.

5. QUARK MODEL BY NONION ALGEBRA

In this section we make a quark model by Nonion algebra. Although this model is just a mathematical model, we propose it. It may suggest us how to treat the ternary Pauli condition and to construct quark model. We determine elements with j^k -condition for Nonion algebra.

(1) Construction of Quark algebra

We take a system of linear basis $\{R_1, R_2, \bar{R}_2, Q_1, Q_2, Q_3, \bar{Q}_1, \bar{Q}_2, \bar{Q}_3\}$ of Nonion algebra. We try to make a quark model choosing the following binary decomposition:

$$\begin{cases} K' = \{Q_1, Q_2, Q_3, R_2\}, \bar{K}' = \{\bar{Q}_1, \bar{Q}_2, \bar{Q}_3, \bar{R}_2\} \\ K = K' \oplus \bar{K}' \oplus R_1 \end{cases}$$

We denote an element of K' (or \bar{K}') by θ^A (or $\bar{\theta}^A$) ($A = 1, 2, 3$). Then we can prove the following theorem:

THEOREM VI

We can describe binary particle and ternary particles with the Pauli exclusion principles:

(1) The possible particles arising from the photon are :

$$\{R_1, \bar{R}_1\}, \{R_2, \bar{R}_2\}, \{R_3, \bar{R}_3\} \{Q_1, \bar{Q}_1\}, \{Q_2, \bar{Q}_2\}, \{Q_3, \bar{Q}_3\}$$

(2) The possible binary particles are

$$\{R_2, \bar{Q}_1\}, \{R_2, \bar{Q}_2\}, \{R_3, \bar{Q}_3\} \{Q_1, \bar{Q}_3\}, \{Q_2, \bar{Q}_1\}, \{Q_3, \bar{Q}_3\}.$$

(3) The following 6 ternary particles are possible:

$$\begin{aligned} & \{Q_1, Q_1, Q_1\}, \{Q_2, Q_2, Q_2\}, \{Q_3, Q_3, Q_3\}, \{Q_1, Q_2, Q_3\} \\ & \{Q_1, Q_1, Q_2\}, \{Q_1, Q_1, Q_3\}, \{Q_1, Q_1, R_2\} \{Q_2, Q_2, Q_3\}, \{Q_2, Q_2, R_2\}, \{Q_3, Q_2, R_2\} \end{aligned}$$

Hence we have the following tables of Meson and Baryons of Nonionic quarks

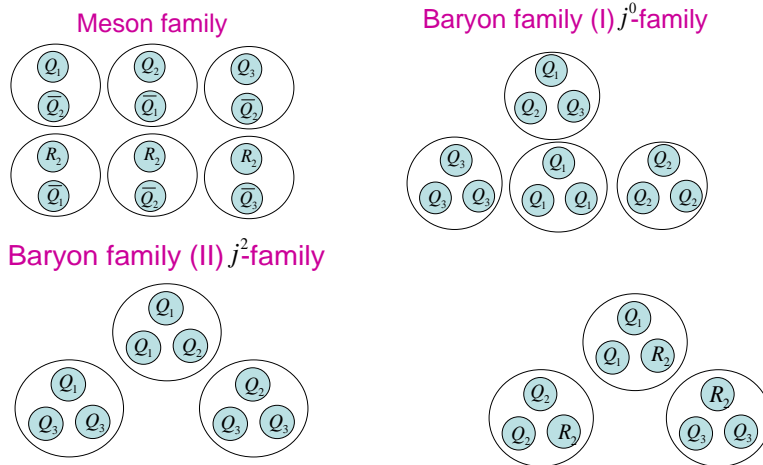


Figure 7

PROOF: Proof can be given by use of the following table:

$j=0$	$\{Q_1\bar{Q}_1\}, \{Q_2\bar{Q}_2\}, \{Q_3\bar{Q}_3\},$ $\{R_2\bar{R}_2\},$
$j=1$	$\{Q_1\bar{Q}_3\}, \{Q_2\bar{Q}_1\}, \{Q_3\bar{Q}_2\},$ $\{R_2, \bar{Q}_1\}, \{R_2, \bar{Q}_2\}, \{R_2, \bar{Q}_3\},$
$j=2$	$\{Q_1\bar{Q}_2\}, \{Q_2\bar{Q}_3\}, \{Q_3\bar{Q}_1\},$ $\{Q_1\bar{R}_2\}, \{Q_2\bar{R}_2\}, \{Q_2, \bar{R}_2\},$

$j=0$	$\{Q_1Q_1Q_1\}, \{Q_2Q_2Q_2\}$
	$\{Q_2Q_2Q_2\}$
	$\{Q_1Q_2Q_3\}, \{Q_1Q_3Q_2\},$
	$\{Q_2Q_1Q_3\}, \{Q_2Q_3Q_1\},$ $\{Q_3Q_1Q_2\}, \{Q_3Q_2Q_1\}$

$j=1$	$\{Q_1Q_1Q_3\}, \{Q_1Q_2Q_2\}, \{Q_1Q_3Q_1\},$
	$\{Q_1R_2R_2\}, \{Q_2Q_1Q_2\}, \{Q_2Q_2Q_1\},$
	$\{Q_2Q_3Q_3\}, \{Q_2R_2R_2\}, \{Q_3Q_1Q_1\},$
	$\{Q_3Q_2Q_3\}, \{Q_3Q_3Q_2\}, \{Q_3R_2R_2\},$
	$\{R_2R_2Q_1\}, \{R_2R_2Q_2\}, \{R_2R_2Q_3\}$
	$\{R_2Q_1R_2\}, \{R_2Q_2R_2\}, \{R_2Q_3R_2\},$

$j=2$	$\{Q_1Q_1Q_2\}, \{Q_1Q_2Q_1\}, \{Q_1Q_3Q_3\},$
	$\{Q_1Q_1R_2\}, \{Q_1R_2Q_1\}, \{Q_2Q_1Q_1\},$
	$\{Q_2Q_2Q_3\}, \{Q_2Q_3Q_2\}, \{Q_2R_2R_2\},$
	$\{Q_2R_2Q_2\}, \{Q_3Q_1Q_3\}, \{Q_3Q_2Q_2\},$
	$\{Q_3Q_3Q_1\}, \{Q_3Q_3R_2\}, \{Q_3R_2Q_3\}$
	$\{R_2Q_1Q_1\}, \{R_2Q_2Q_2\}, \{R_3Q_3Q_3\},$

6. QUARK MODEL OF GELL-MANN TYPE BY $su(3)$

We try to realize the known Gell-Mann model by use of the non-commutative Galois extensions on $su(3)$. Although the observation is not complete, we do not hesitate to propose it. The complete version will be given in the near future.

At first we notice that we can introduce three quarks by the binary Galois extension on

su(3). We may identify the quarks as up-quark, down-quark, strange quark respectively:

$$\{e_0, e_1, e_2, e_3\} \Rightarrow u \quad \{e'_0, e'_1, e'_2, e'_3\} \Rightarrow d \quad \{e''_0, e''_1, e''_2, e''_3\} \Rightarrow s$$

We begin with the construction of Gell-Mann model by use of binary Galois extensions. We consider the algebra A_0 which is generated by three elements u, d, s . We introduce the conjugate operation by $u, d, s \rightarrow \bar{u}, \bar{d}, \bar{s}$. Also we make the binary extension of A_0 generating complex numbers from real numbers (see Example 1 in S. 1). We realize mesons by use of the binary Galois extension. We choose A_0 and consider the following Galois extension:

$$A_0[\sqrt[2]{1}] = \{\theta_1 1 + \theta_2 i \mid \theta_1, \theta_2 \in A_0 \otimes C\}$$

Then we choose an element corresponding Dirac operator $i(\theta_1 u + \theta_2 d + \theta_3 s)$ and its conjugate operator $-i(\bar{\theta}_1 \bar{u} + \bar{\theta}_2 \bar{d} + \bar{\theta}_3 \bar{s})$. Making the decomposition into symmetric and anti-symmetric elements of the invariant element corresponding Klein Gordon operator, we may expect to obtain the so called 8-fold model:

$$\begin{aligned} & (\theta_1 u + \theta_2 d + \theta_3 s)(\bar{\theta}_1 \bar{u} + \bar{\theta}_2 \bar{d} + \bar{\theta}_3 \bar{s}) \\ &= (\theta_1, \theta_2, \theta_3) \begin{pmatrix} u\bar{u} & u\bar{d} & u\bar{s} \\ d\bar{u} & d\bar{d} & d\bar{s} \\ s\bar{d} & s\bar{d} & s\bar{s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\theta}_1 \\ \bar{\theta}_2 \\ \bar{\theta}_3 \end{pmatrix} (= {}^t \theta \Theta \bar{\theta}) \end{aligned}$$

Then decomposing the matrix into the symmetric and the skew symmetric matrix we can obtain a similar realization due to Gell-Mann model:

$$\Theta = \begin{pmatrix} u\bar{u} & 0 & 0 \\ 0 & d\bar{d} & 0 \\ 0 & 0 & s\bar{s} \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & u\bar{d} + d\bar{u} & u\bar{s} + s\bar{u} \\ u\bar{d} + d\bar{u} & 0 & d\bar{s} + s\bar{d} \\ s\bar{u} + u\bar{s} & s\bar{d} + d\bar{s} & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & u\bar{d} - d\bar{u} & u\bar{s} - s\bar{u} \\ d\bar{u} - u\bar{d} & 0 & d\bar{s} - s\bar{d} \\ s\bar{u} - u\bar{s} & s\bar{d} - d\bar{s} & 0 \end{pmatrix}$$

Next we proceed to the realization of baryons. We choose an algebra A_0 and make the cubic extension (see Example 3):

$$A_0[\sqrt[3]{1}] = \{\theta_1 1 + \theta_2 j + \theta_3 j^2 \mid \theta_1, \theta_2, \theta_3 \in A_0\}$$

Then we can expect to realize the Gell-Mann model in this extension scheme. Then choosing the following element $j(\theta_1 u + \theta_2 d + \theta_3 s)$ corresponding to the ternary Dirac operator, we may realize the baryons by the Gauge invariant elements :

$$\begin{aligned} & j(\theta_1 u + \theta_2 d + \theta_3 s)j(\theta_1 u + \theta_2 d + \theta_3 s)j(\theta_1 u + \theta_2 d + \theta_3 s) \\ &= uuu\theta_1^3 + ddd\theta_2^3 + sss\theta_3^3 \\ &+ (uud + udu + duu)\theta_1^2\theta_2 + (ddu + dud + udd)\theta_2\theta_1^2 \\ &+ (ssd + sds + dss)\theta_2\theta_3^2 + (dds + dsd + sdd)\theta_3^2\theta_2 \\ &+ (uus + usu + suu)\theta^2\theta_3 + (ssu + sus + uss)\theta_3\theta^2 \\ &+ (usd + uds + dus + dsu + sud + uds)\theta_1\theta_2\theta_3 \end{aligned}$$

Making the symmetrization of each element, we may realize the 10-fold model:

$$\begin{array}{cccc}
 uuu & udd & uud & uuu \\
 & dds & uds & uus \\
 & & dss & uss \\
 & & & sss
 \end{array}$$

7. CONCLUSIONS AND DISCUSSIONS

We have given explicit constructions of non-commutative Galois extensions for Nonion algebra and $su(3)$. Base on the constructions, we have proposed a method of non-commutative Galois theory for the theory of elementary particles and obtained the following results:

- (1) The universe is created by a successive binary and ternary Galois extension.
- (2) Mesons are created by a binary extension. (3) Baryons are created by ternary extensions. (3) The quark baryon phase transitions can be description by the successive extension (see Figure 6).
- (4) The reason why mesons constitute quarks and anti-quarks and the why baryons constitute only quarks or anti-quarks and not mixed combinations can be understood in this scheme.
- (5) The binary Galois extension on $su(3)$ derives three particles of spin 1/2 which may describe three quarks in Gell-Mann model and mesons and baryons in the model can be derived from the binary and ternary Galois extensions.
- (6) Binary and ternary Clifford analysis can discussed in a unified manner. Hence we may conclude that our method has possibilities of descriptions of elementary particles. But we can give only fragmental understandings on them and we need further studies.

REFERENCE

- [1] V.Abramov, R.Kerner, B. Le Roy:Journ. Math. Phys., 38,1650-1669 (1997)
- [2]R.Kerner: Journ. Math. Phys. 33, 403-411(1997)
- [3] R.Kerner: Class And Quantum Gravity, 14, A203-A 225(2002)
- [4]Gell'Mann and Ne'mann: The eight-fold Way, W.A.Benjamin, INC. New York, Amsterdam (1964)
- [5]S.Weinberg: The first three minutes, Basic Books, Inc.Publisher, New York(1988)

量子反射における量子軌跡¹

和田達明、堀川隼世 茨城大学

1 緒言

量子力学の基礎を築いた Schrödinger の一連の論文が出版されたわずか数ヶ月後の 1926 年に、Madelung[1] は複素関数である波動関数の極座標表示

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = R(\mathbf{x}, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar}S(\mathbf{x}, t)\right), \quad (1)$$

を導入し、量子流体方程式を導出した。振幅 $R(\mathbf{x}, t)$ と作用関数 $S(\mathbf{x}, t)$ は共に実関数であり、振幅は非負 ($R \geq 0$) と仮定する。波動関数 Ψ に対する確率密度は $\rho \equiv \Psi^*\Psi = R^2$ と表せて、作用関数の変換 $S \rightarrow S + 2\pi n\hbar$ (n は整数) に対して波動関数是不変である。この Madelung 表示 (1) を Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x})\Psi(\mathbf{x}, t), \quad (2)$$

へ代入し実部と虚部をまとめると、次の連立方程式を得る。

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} R^2 + \nabla \cdot \left[R^2 \frac{\nabla S}{m} \right] = 0, & (3a) \\ \frac{\partial}{\partial t} S + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V(\mathbf{x}) + \mathcal{Q}(\mathbf{x}) = 0. & (3b) \end{cases}$$

最初の式 (3a) は連続の式 ($\partial\rho/\partial t + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$) の形をしており、 R^2 を確率密度 ρ と、 $\rho\nabla S/m$ を確率密度流 \mathbf{j} とそれぞれ見做すことができる。古典流体に対する流束の表式は $\mathbf{j} = \rho\mathbf{v}$ なので、確率密度流の流速 \mathbf{v} は $\nabla S/m$ と表せ、よって共役運動量は $\mathbf{p} = \nabla S$ となる。

2 番目の方程式 (3b) は古典力学における Hamilton-Jacobi 方程式の量子版と見做せるので、対応する運動方程式を導出すると、

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = -\nabla \{ V(\mathbf{x}) + \mathcal{Q}(\mathbf{x}) \}, \quad (4)$$

となり、これら方程式 (Bohm 力学) により量子の軌跡が記述できる。式 (4) は Newton の運動方程式と類似しており、古典力学との違いは Bohm 力学 [2] における量子ポテンシャル

$$\mathcal{Q}(\mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 R(\mathbf{x})}{R(\mathbf{x})}, \quad (5)$$

を通じて表されている。

量子の軌跡を求める方法は量子軌跡法と呼ばれ、Bohm 力学の他にも幾つか開発されており、最近出版された Wyatt の本 [3] に詳しい解説がある。本研究では、1 次元空間において Schrödinger 方程式の停留状態に対する量子軌跡を求めることのできる Floyd の量子軌跡法について解説し、それを利用して量子反射における Floyd 軌跡を調べた。

¹基礎物理学研究所研究会「物理と情報の階層構造 – 情報を接点とした諸階層の制御と創発 –」、京大基礎物理学研究所、Jan. 6 (2012) の講演報告書

2 量子力学の軌跡表現

一般化された Hamilton-Jacobi 形式に基づいて Floyd は、Bohm 力学とは極めて異なる、空間次元が 1 の場合に対する量子力学の軌跡表現 [4, 5] を開発した。

エネルギー E の停留状態に対して、作用関数は $S(x, t) = W(x) - Et$ と時間部分と空間部分とに変数分離できて、 $W(x)$ は Hamilton の特性関数（あるいは還元作用）と呼ばれている。更に、振幅 R の時間依存性はなく、空間次元が 1 (x -方向のみ) であるので、連続の式 (3a) は以下の簡単な形となる。

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{R^2}{m} \left(\frac{\partial W(x)}{\partial x} \right) \right] = 0. \quad (6)$$

これを積分すると $R^2(\partial W/\partial x) = \text{const.}$ となる²ので、振幅は $R(x) \propto 1/\sqrt{\partial W/\partial x}$ と表せる。これと式 (1) により、波動関数は

$$\Psi(x, t) \propto \frac{1}{\sqrt{\partial W(x)/\partial x}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} W(x)\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right), \quad (7)$$

と表せるので、停留状態の Schrödinger 方程式へ代入してまとめると次の量子停留 Hamilton-Jacobi (QSHJ) 方程式を得る。

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 + V(x) + Q(x) - E = 0, \quad (8)$$

ここで $Q(x)$ は、

$$Q(x) = \frac{\hbar^2}{4m} \langle W; x \rangle, \quad (9)$$

と表せて、 $\langle W; x \rangle$ は $W(x)$ の x に関する Schwarz 微分

$$\langle W; x \rangle = \frac{\partial^3 W/\partial x^3}{\partial W/\partial x} - \frac{3}{2} \left(\frac{\partial^2 W/\partial x^2}{\partial W/\partial x} \right)^2. \quad (10)$$

である。Floyd とは独立に、Fraggi and Matone [6] は等価原理に基づき、同じ形の QSHJ 方程式を導出している。Schwarz 微分 $\langle W; x \rangle$ がゼロとなる時に、この方程式 (8) は、良く知られた古典 Hamilton-Jacobi 方程式に帰着する。つまり、高次の量子効果は、この Schwarz 微分によって表されている。

更に Floyd は、QSHJ 方程式の $\partial W/\partial x$ に対する解の解析表現 [7] が、

$$p(x) \equiv \frac{\partial W(x)}{\partial x} = \frac{\sqrt{2m}}{a\phi^2(x) + b\theta^2(x) + c\phi(x)\theta(x)}, \quad (11)$$

で与えられることを示した。ここで、 a, b, c は、 $a, b > 0$ かつ $ab > c^2/4$ を満たす 3 つの実数パラメータで、 $\phi(x)$ と $\theta(x)$ は停留 Schrödinger 方程式の 2 つの独立解である。 $\phi(x), \theta(x)$ のスケール因子は、それらの Wronskian

$$\mathcal{W}(\phi, \theta) = \phi(x) \frac{\partial}{\partial x} \theta(x) - \theta(x) \frac{\partial}{\partial x} \phi(x), \quad (12)$$

が、 $\mathcal{W}^2(\phi, \theta) = 2m/[\hbar^2(ab - c^2/4)] > 0$ を満たすように決める。

式 (11) を積分して、

$$W(x) = \hbar \arctan \left(\frac{b(\theta(x)/\phi(x)) + c/2}{\sqrt{ab - c^2/4}} \right) + K, \quad (13)$$

²これは空間次元が 1 なので成立することに注意。空間次元が 1 より大きい場合には、式 (6) は $\nabla \cdot [R^2 \nabla W/m] = 0$ であるので、 $R^2 \nabla W$ の項は必ずしも一定とは限らず一般的には divergence-free である。

を得る。ここで K は積分定数であるが、理論の一般性を失うことなく $K = 0$ とおくことができる。

エネルギー E が連続的に変化することが許される停留状態³に対して、Floyd は Jacobi の定理を適用して、量子軌跡

$$t - \tau = \frac{\partial W(x)}{\partial E}. \quad (14)$$

を導出した。パラメータ τ は、古典力学では t に依存せず定数だが、量子力学では必ずしもそうではない。Brown [8] は、Floyd 軌跡に対しては $d\tau/dt = 0$ を、Bohm 軌跡に対しては τ は t 依存性があると仮定することで、両者の軌跡が関連づけられることを示している。

ところで、分散性 $\omega = \omega(k)$ のある波に対して一般に位相速度と群速度は異なり、位相速度は $v_p \equiv \omega/k$ 、群速度は $v_g \equiv \partial\omega/\partial k$ で与えられる。Planck-Einstein-de Broglie の関係 ($E = \hbar\omega, p = \hbar k$) を適用すると、

$$v_g \equiv \frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{\partial(\hbar\omega)}{\partial(\hbar k)} = \frac{\partial E}{\partial p}, \quad (15)$$

である。Floyd 軌跡の速度 v_Q は、式 (14) と (12) を利用すると

$$v_Q \equiv \frac{\partial x}{\partial t} = \frac{1}{\frac{\partial}{\partial x}(t - \tau)} = \frac{1}{\frac{\partial}{\partial x}(\frac{\partial W}{\partial E})} = \frac{1}{\frac{\partial}{\partial E}(\frac{\partial W}{\partial x})} = \frac{\partial E}{\partial p}, \quad (16)$$

であり、波に対する群速度と対応していることが分かる。

一般に、共役運動量 p と力学的運動量 $m\partial x/\partial t$ は異なり、古典力学での関係 $p = mv$ は必ずしも成立しない。そこで、Faraggi と Matone [6] は、共役運動量 $p = \partial W/\partial x$ と量子軌跡の速度 v_Q の間に $p = m_Q v_Q$ の関係を要請することで、量子の有効質量 m_Q を導入した。

$$\begin{aligned} m_Q &= \frac{p}{(\partial x/\partial t)} = \frac{\partial W}{\partial x} \frac{\partial t}{\partial x} = \frac{\partial W}{\partial x} \frac{\partial^2 W}{\partial x \partial E} = \frac{\partial W}{\partial x} \frac{\partial^2 W}{\partial E \partial x} = \frac{\partial}{\partial E} \frac{1}{2} \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 \\ &= m \frac{\partial}{\partial E} (E - V(x) - Q(x)) = m \left(1 - \frac{\partial Q}{\partial E} \right), \end{aligned} \quad (17)$$

この変形の最後の段階において、式 (8) と量子ポテンシャル $Q(x)$ がエネルギー E に依存するという事実を利用した。

停留状態の波動関数 $\Psi(x)$ は、境界条件 $\Psi(x_0)$ と $\Psi'(x_0)$ に⁴よって一義的に確定する。重ね合わせの原理により、 $\Psi(x) = A\phi(x) + B\theta(x)$ とすると、係数 A と B は、

$$A = \frac{\Psi(x_0)\theta'(x_0) - \Psi'(x_0)\theta(x_0)}{\mathcal{W}(\phi, \theta)}, \quad B = -\frac{\Psi(x_0)\phi'(x_0) - \Psi'(x_0)\phi(x_0)}{\mathcal{W}(\phi, \theta)}. \quad (18)$$

と表される。 $\Psi(x)$ は、式 (7) より、

$$\Psi(x) = \frac{(2m)^{1/4}}{\sqrt{ab - c^2/4}} \frac{\exp(\pm \frac{i}{\hbar} W)}{\sqrt{\partial W/\partial x}}, \quad (19)$$

とも表せるので、

$$A = \frac{1}{\sqrt{b}} \left[1 \pm i \frac{c/2}{\sqrt{ab - c^2/4}} \right], \quad B = \pm i \frac{\sqrt{b}}{\sqrt{ab - c^2/4}}. \quad (20)$$

の関係がある。これより、Wronskian $\mathcal{W}(\phi, \theta)$ の規格化の下に、係数 (a, b, c) を定めることは、(物理的に無関係な全体に掛かる位相因子を除いて) Schrödinger 波動関数の境界条件を定めることと等しい。

Floyd の軌跡表現における哲学的な側面については、文献 [9] を参照して欲しい。

³束縛状態では E が離散的となるのでこの条件は満たさないが、Brown[8] による修正版が提案されている。

⁴ここでは、 x に関する微分を' で表す。

対応する QSHJ 方程式の解は、

$$W(x) = \begin{cases} \hbar k_2 x, & \text{for } x > 0, \\ \hbar \arctan \left[\frac{k_2}{k_1} \tan(k_1 x) \right], & \text{for } x < 0, \end{cases} \quad (25a)$$

で与えられ、これより、共役運動量は

$$p(x) = \frac{\partial W(x)}{\partial x} = \begin{cases} \hbar k_2, & \text{for } x > 0, \\ \frac{\hbar k_2}{1 + (k_2^2/k_1^2 - 1) \sin^2(k_1 x)}, & \text{for } x < 0, \end{cases} \quad (26a)$$

となる。式 (14) を適用すると、Floyd 軌跡は

$$t - \tau = \begin{cases} \frac{mx}{\hbar k_2}, & \text{for } x > 0, \\ \frac{(m/\hbar) \{x/k_1 (k_2^{-2} - k_1^{-2}) \sin(2k_1 x)/2\}}{(k_1/k_2) \cos^2(k_1 x) + (k_2/k_1) \sin^2(k_1 x)}, & \text{for } x < 0, \end{cases} \quad (27a)$$

により定まる。

図 1 に、量子反射が起こる $k_1 \neq k_2$ の停留状態における典型的な Floyd 軌跡を示す。 $x > 0$ の領域における軌跡は傾きが一定の直線であり、透過波が単色の波動関数 ($\propto \exp(ik_2 x)$) であることに対応している。

一方、 $x < 0$ の領域では、ポテンシャルステップに進入する単色波動関数と反射する単色波動関数との重ね合わせにより干渉が生じ、(重ね合わせられた非単色の波動関数の) Floyd 軌跡は時間に逆向する軌跡を描く。これは Floyd 軌跡の大きな特徴であるので、波動関数の干渉に対する Floyd 軌跡について次に詳しく説明する。

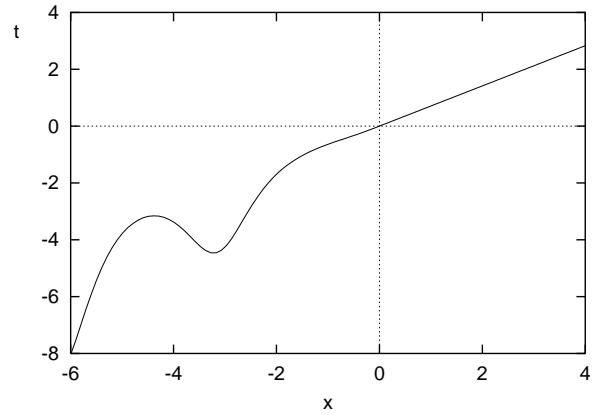


図 1: $k_1 = 1, k_2 = \sqrt{2}$ に対する Floyd 軌跡。

3.2 干渉

干渉は量子力学における基本的で重要な性質であり、量子エンタングルメントや非局所性を意味する。標準的な量子力学の確率解釈に訴えることなく、干渉は量子有効質量を併用することで Floyd の軌跡表現で記述できる。干渉は Floyd 軌跡における時間に逆向する運動として現れ、そこでは Faraggi と Matone の量子有効質量 (17) が負になる。

文献 [9] に沿って、1 次元空間で互いに進行方向が反対で、同じ波数 k を持つ単色波動関数を合成した非単色な (di-monochromatic) 波動関数 $\Psi_d(x)$ を考える。一方の波動関数 $\Psi_+(x) = A \exp(ikx)$ は正の x -方向へ進み、他方の $\Psi_-(x) = B \exp(-ikx)$ は負の x -方向へ進む。 $\Psi_+(x)$ の振幅 A は $\Psi_-(x)$ の振幅 B はよりも大きいと仮定する。つまり $A > B \geq 0$ であり、この場合には非単色な波動関数 $\Psi_d(x)$ は正の x -方向へ進む。

$$\begin{aligned} \Psi_d(x) &= A \exp(ikx) + B \exp(-ikx) = (A + B) \cos(kx) + i(A - B) \sin(kx) \\ &= \sqrt{A^2 + B^2 + 2AB \cos(2kx)} \exp \left[i \arctan \left(\frac{(A - B) \sin(kx)}{(A + B) \cos(kx)} \right) \right]. \end{aligned} \quad (28)$$

ここで、3つの波動関数 $\Psi_d(x)$ と $\Psi_{\pm}(x)$ は全て同じエネルギー $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ である。

非単色波動関数の還元作用 $W_d(x)$ は

$$W_d(x) = \hbar \arctan \left(\frac{(A - B) \sin(kx)}{(A + B) \cos(kx)} \right), \quad (29)$$

であり、 $\Psi_+(x)$ と $\Psi_-(x)$ のそれらはそれぞれ $W_+(x) = \hbar kx$ と $W_-(x) = -\hbar kx$ である。式 (14) を適用すると、Floyd 軌跡

$$t_d(x) = \frac{\partial W_d}{\partial E} = \frac{mx(A^2 - B^2)}{\hbar k [A^2 + B^2 + 2AB \cos(2kx)]}, \quad (30)$$

を得る。また、(17) より、Fraggi-Mattone の量子有効質量は、

$$m_{Qd}(x) = m \frac{(A^2 - B^2)^2 [A^2 + B^2 + 2AB \cos(2kx) + 4ABkx \sin(2kx)]}{\hbar k [A^2 + B^2 + 2AB \cos(2kx)]^3}, \quad (31)$$

と表される。

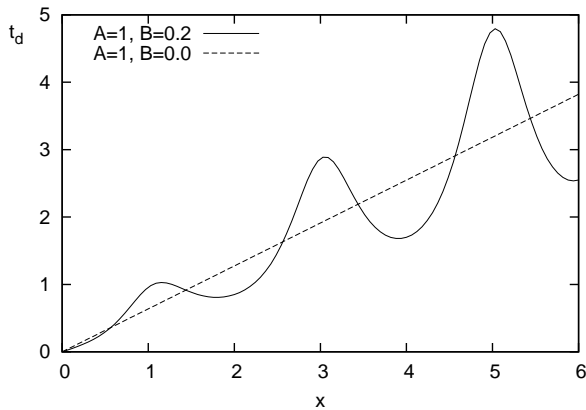


図 2: 非単色波動関数 Ψ_d (干渉あり) と単色波動関数 Ψ_+ (干渉なし) に対する Floyd 軌跡。干渉は時間に逆向する Floyd 軌跡として現れる。

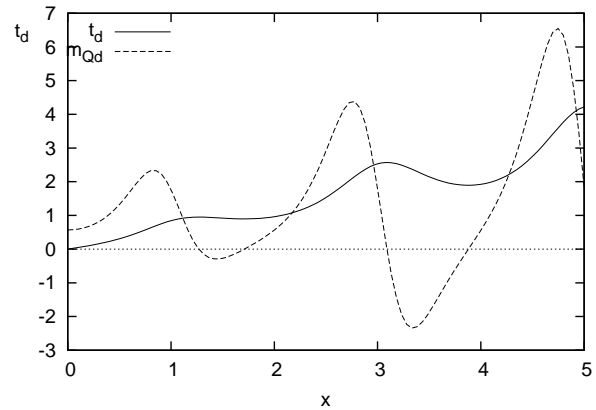


図 3: 干渉のある場合の Floyd 軌跡 $t_d(x)$ とその量子有効質量 $m_{Qd}(x)$ 。Floyd 軌跡の時間に逆向している部分で、量子有効質量 $m_{Qd}(x)$ が負となる。

、簡単のために $\hbar = 1, m = 1, k = \pi/2$ とし、干渉がある場合とない場合の典型的な Floyd 軌跡を図 2 に示す。 $B = 0$ の干渉のない場合は、単色な波動関数 Ψ_+ に帰着し、その軌跡は傾き (Floyd 量子の速度の逆数に対応) が $m/(\hbar k)$ の直線である。一方、 $B \neq 0$ の干渉のある場合は、非単色な波動関数 Ψ_d に対応し、その Floyd 軌跡は時間に逆向する準周期的な軌跡となる。図 3 に干渉がある場合の Floyd 軌跡と量子有効質量を示す。量子有効質量 m_{Qd} が負となる部分で Floyd 軌跡は時間に逆向しているのが分かる。

このように波動関数の干渉は、Floyd の軌跡表現における時間に逆向する軌跡として現れ、負の量子有効質量で表される。ポテンシャルに進入する平面単色波と量子反射による平面単色反射波の重ね合わせにより干渉が生じ、対応する Floyd 軌跡は時間に逆向する部分が現れ、そこでの量子有効質量は負となる。

3.3 量子反射における Floyd 量子軌跡

以上の準備の下に、本研究の主題である下り勾配ポテンシャルにおける量子反射の Floyd 量子軌跡について論じる。

次の勾配の程度が調節できる下り勾配ポテンシャル $V(x)$ における量子反射を Floyd 軌跡を用いて調べよう。

$$V(x) = \frac{-V_0}{1 + \exp\left(-\frac{x}{L}\right)}, \quad (32)$$

ここで V_0 と L はそれぞれ、このポテンシャルの高さと幅を定めるパラメータである。 $V_0 = 1.0$ とし、 L を変化させた場合の $V(x)$ の変化を図 4 に示す。原点付近にある $V(x)$ の勾配は L を小さくする程急峻になるのが分かる。

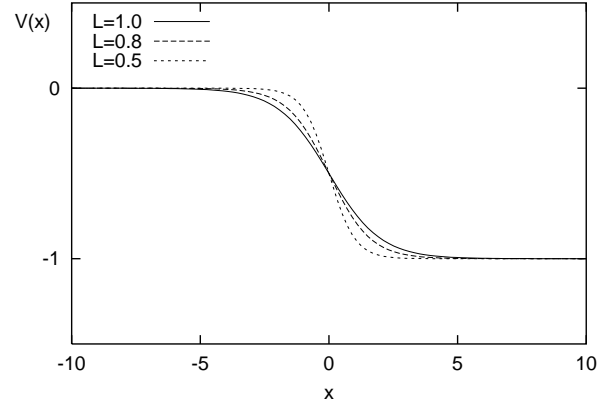


図 4: L を変化させた時の $V(x)$ の変化。

この $V(x)$ に対する停留状態の Schrödinger 方程式は、 $x \rightarrow \xi$ の変数変換

$$\xi = -\exp\left(-\frac{x}{L}\right), \quad (33)$$

と、次の形の解 (Ansatz)

$$\Psi = \xi^{-ik_2} w(\xi), \quad (34)$$

を要請することで、以下の超幾何型微分方程式に帰着する。

$$\xi(1-\xi) \frac{d^2 w}{d\xi^2} + \left(\gamma - (\alpha + \beta + 1)\xi\right) \frac{dw}{d\xi} - \alpha\beta w = 0. \quad (35)$$

ここで、

$$k_1 = \sqrt{2mE/\hbar^2}, \quad k_2 = \sqrt{2m(E + V_0)/\hbar^2}, \quad (36)$$

$$\alpha = -i(k_2 - k_1)L, \quad \beta = -i(k_1 + k_2)L, \quad \gamma = 1 - 2ik_2L. \quad (37)$$

2つの独立解は Gauss の超幾何関数を用いて、それぞれ

$$\phi(x) = \frac{1}{2\sqrt{\hbar k_2}} \left(\frac{2m}{ab - c^2/4}\right)^{1/4} \left[{}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma, \xi) \exp(ik_2 x) + {}_2F_1(\alpha^*, \beta^*, \gamma^*, \xi) \exp(-ik_2 x) \right], \quad (38)$$

$$\theta(x) = \frac{1}{2i\sqrt{\hbar k_2}} \left(\frac{2m}{ab - c^2/4}\right)^{1/4} \left[{}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma, \xi) \exp(ik_2 x) - {}_2F_1(\alpha^*, \beta^*, \gamma^*, \xi) \exp(-ik_2 x) \right], \quad (39)$$

と表せる。ここで、* は複素共役を表す。

表記を簡単にするために、以下の略記号を導入する。

$$F = {}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma, \xi), \quad \tilde{F} = {}_2F_1(\alpha^*, \beta^*, \gamma^*, \xi), \quad (40)$$

$$F_\alpha = \frac{\partial}{\partial \alpha} {}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma, \xi), \quad F_\beta = \frac{\partial}{\partial \beta} {}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma, \xi) \quad (41)$$

$$F_\gamma = \frac{\partial}{\partial \gamma} {}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma, \xi), \quad \tilde{F}_\alpha = \frac{\partial}{\partial \alpha^*} {}_2F_1(\alpha^*, \beta^*, \gamma^*, \xi) \quad (42)$$

$$\tilde{F}_\beta = \frac{\partial}{\partial \beta^*} {}_2F_1(\alpha^*, \beta^*, \gamma^*, \xi), \quad \tilde{F}_\gamma = \frac{\partial}{\partial \gamma^*} {}_2F_1(\alpha^*, \beta^*, \gamma^*, \xi) \quad (43)$$

式 (14) を適用すると、長い単純計算の後に、この場合の Floyd 軌跡に対する以下の解析表現を得る。

$$t(x) = \frac{m\sqrt{4ab - c^2}}{\hbar k_1 k_2} \times \left[2k_1 x \tilde{F} F - F L \{ (k_1 - k_2) \tilde{F}_\alpha + (k_1 + k_2) \tilde{F}_\beta + 2k_1 \tilde{F}_\gamma \} - \tilde{F} L \{ (k_1 - k_2) F_\alpha + (k_1 + k_2) F_\beta + 2k_1 F_\gamma \} \right] \div \left[e^{2ik_2 x} (a - b - ic) F^2 + e^{-2ik_2 x} (a - b + ic) \tilde{F}^2 + 2(a + b) F \tilde{F} \right]. \quad (44)$$

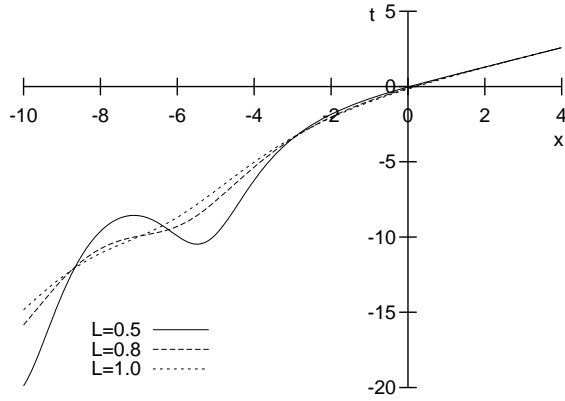


図 5: $E = 0.2$, $V_0 = 1.0$, $L = 0.5, 0.8, 1.0$ に対する Floyd 軌跡。

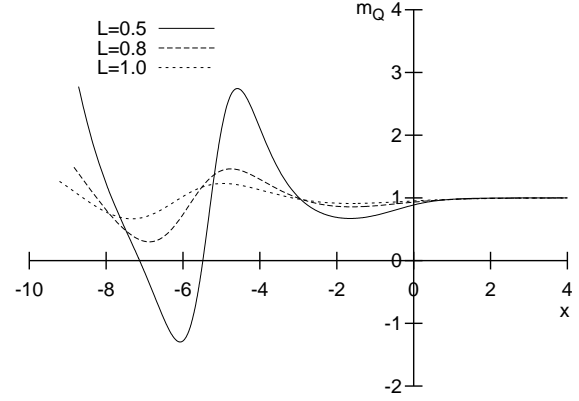


図 6: $E = 0.2$, $V_0 = 1.0$, $L = 0.5, 0.8, 1.0$ に対する量子有効質量 m_Q 。

図 5 に、 $E = 0.2$, $V_0 = 1.0$ に対して、ポテンシャル勾配の幅を定めるパラメータ L を幾つか変化させた場合の Floyd 軌跡を示す。 $\hbar = 1$, $m = 1$, $a = b$, $c = 0$ とした。 L を小さくするとポテンシャル勾配が急激に変化する。 $L = 0.5$ の軌跡には時間に逆向する部分が明確に現れており、量子反射が生じていることが分かる。一方、 $L = 1.0$ の場合はそのような時間に逆向する軌跡は見られず、古典力学の場合と殆ど同様で、入射した量子は $x = 0$ 付近に存在する下り勾配ポテンシャルにより加速されて、 $x > 0$ の領域では波数 k_2 の平面単色波となる。これは、恒等式 ${}_2F_1(\alpha, \beta, \gamma, 0) = 1$ と、式 (33) より $x \rightarrow \infty$ で $\xi \rightarrow 0$ となることから、 x が L に比べて十分に大きい領域において、 $a = b$, $c = 0$ の場合に

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{a\hbar k_2}} (2m)^{1/4} \cos(k_2 x), \quad \theta(x) = \frac{1}{\sqrt{a\hbar k_2}} (2m)^{1/4} \sin(k_2 x), \quad \text{for } x \gg L, \quad (45)$$

であることから分かる。

図 6 には、図 5 の各軌跡に対する量子有効質量 $m_Q(x)$ を示す。量子反射が生じている $L = 0.5$ の場合には、量子有効質量が負となる部分がはっきりと分かる。

量子反射の軌跡のイメージとして、量子が下り勾配ポテンシャルの途中で反射されるような軌跡を通常は期待するだろうが、Floyd 軌跡はそのような軌跡は描かない。エネルギー E の停留状態に対する波動関数（つまりエネルギー固有関数）は、正の x -方向へ進行する非単色な波動関数であり、その Floyd 軌跡は正の x -方向へ進む単一曲線を描き、決して途中で分岐したりはしないのである。

4 結言

停留状態に対して量子軌跡を求めることのできる Floyd の開発した量子力学の軌跡表現について説明し、それを下り勾配ポテンシャルにおける量子停留状態へ適用して量子反射における Floyd 量子軌跡を調べた。

下り勾配ポテンシャル $V(x)$ の幅 L に比べて入射波動関数の波長 $2\pi/k_1$ が十分長い場合に量子反射が生じ、下り勾配ポテンシャルへ入射した平面単色波動関数と反射波動関数との重ね合わせにより干渉が生じる。干渉は Floyd 軌跡における時間に逆向する部分として現れ、ここでは Fraggi と Matone による量子有効質量が負となる。

参考文献

- [1] E. Madelung, *Naturwissenschaften* **14** 10041004 (1926).
- [2] D. Bohm, *Phys. Rev.* **85**, 166179, 180-193, (1952).
- [3] R.E. Wyatt, *Quantum Dynamics with Trajectories: Introduction to Quantum Hydrodynamics*, Springer, 2005.
- [4] E.R. Floyd, *Phys. Rev. D* **25**, 1547 (1982); *ibid.*, **26**, 1339 (1982).
- [5] E.R. Floyd, *Physics Essay* **7** 135-145 (1994).
- [6] A.E. Fraggi and M. Matone, *Int. J. Mod. Phys. A* **15**, (2000) 3965.
- [7] E.R. Floyd, *Phys. Rev. D* *ibid.*, **34**, 3246 (1986).
- [8] M.R. Brown, arXiv: quant-ph/0102102, (2001).
- [9] E.R. Floyd, arXiv: quant-ph/0009070, (2000).
- [10] F. Shimizu and J. Fujita, *J. Phys. Soc. Jap.* **71**, 58 (2002).
- [11] P.L. Garrido, S. Goldstein, arXiv: 0808.0610v2, (2011).

大腸菌のグルコース選好に対する適応力学

浅野真誠¹, I.Basieva², A.Khrennikov², 大矢雅則¹, 田中芳治¹, 山登一郎³

¹ 東京理科大学理工学部情報科学科

²Linnaeus University, International Center for
Mathematical Modeling in Physics and Cognitive Sciences

³ 東京理科大学基礎工学部生物工学科

概要

生物学や認知心理学の実験において、通常確率法則 (total probability law) を破るような実験データの存在が近年指摘された。このような確率はコルモゴロフによる測度論的確率とは異なるものであり、非コルモゴロフ的確率と呼ばれる。我々は、適応力学とリフティングの数理を基にして、非コルモゴロフ的確率を数学的に取り扱う方法を提案した。本発表では、この新しい数理を用いて、大腸菌のグルコース選好に対する解析を行う。

1 はじめに

大腸菌は自然界に広く存在しているバクテリアの一種であり、生物学において生命現象の研究に用いられてきた。大腸菌が糖代謝を行う際、グルコースを選択的に代謝するという現象はよく知られている [13]。グルコースとラクトースが両方存在している培地で大腸菌を培養すると、まずグルコースが先に消費され、その後ラクトースが消費される。このことから大腸菌はグルコース選好を持つといわれる。大腸菌の糖代謝システムにおいて、ラクトースオペロンと呼ばれる遺伝子群が重要な役割を担っていることがわかり、ラクトースオペロンの遺伝子発現機構が明らかにされてきた [10]。このラクトースオペロンの働きは、グルコースやラクトースの濃度に強く影響を受けることが知られ、実験によって確かめられている。我々は、これらの実験より得られたデータが、古典確率論における基本的性質 (Total Probability Law: TPL) を満たさないことを示した [8]。このような確率はコルモゴロフによる測度論的確率とは異なるものであり、非コルモゴロフ的確率と呼ばれる。非コルモゴロフ的確率は、大腸菌の選択的糖代謝のみならず、他の生物学的実験や認知心理学の実験のデータにおいても存在することが知られている [4, 5, 6, 7]。しかし、このような非コルモゴロフ的確率を扱う数理はまだできていなかった。

この問題に対し我々は、適応力学 (Adaptive Dynamics: AD) と呼ばれる理論 [15, 16] とリフティングの数理 [1] を基にして、非コルモゴロフ的確率を数学的に取り扱う方法を提案した [2]。適応力学とは、周囲からの様々な影響下で対象がどのように存在するかを記述する数理であり、カオスや SAT (論理式の充足可能性判定) アルゴリズムの研究などに関連している [9, 11, 12, 15, 16]。我々は、この新しい数理を用いて、ゲーム理論における意思決定過程や、認知心理学における偏調されたベイズ推定などを説明した [5, 6, 7]。

本発表では、異なる系統の大腸菌に対する実験データについて、TPL の破れを示す。さらに、適応力学を基にした数理を用いて、その実験データを解析する。本発表は文献 [3] に基づくものである。

data	A	B	C	D	E
系統	W3110	W3110	ML30	ML308	ML308-2
<i>lacI</i> 遺伝子	+	+	+	-	-
<i>lacY</i> 遺伝子	+	+	+	+	-
前培養条件	LB	Gly	LB	LB	LB
MU(1)	2920 [†]	957	1763	2563	6140
MU(2)	33 [†]	5	14	1592	3062
MU(3)	3000 [†] , 2200 [‡]	1059	3133	2438	5326
MU(4)	43 [†]	486	184	2074	2668
MU(5)	64 [‡]	421	78	2050	862

表 1 β -galactosidase assay の結果を示した。(記号 ‘+’ や ‘-’ は、用いた大腸菌それぞれの遺伝子型を表す。† の値は文献 (Inada et al. 1996) から、また ‡ の値はオンラインページ (<http://ro119.com/archive/nagoya.cool.ne.jp/planta/bio/lac.operon.htm>.) から引用した。

2 大腸菌の糖代謝と非コロモゴロフ的確率

本節では、異なる系統の大腸菌を複数用意し、そのグルコース選好を調べた実験結果について述べる。さらにその実験データが TPL を破ることを示す。また、同系統の大腸菌を異なる培地で培養した場合の実験結果についても述べ、TPL の破れを示す。

2.1 実験手法と結果

大腸菌はラクトースを代謝する際に、 β -ガラクトシダーゼ (β -galactosidase) と呼ばれる酵素を細胞内で生産する。この酵素の量は、 β -galactosidase assay と呼ばれる方法により、実験的に見積もることができる。我々は、大腸菌を次の (1)~(5) の溶液中で培養した: (1) 0.4% のラクトース溶液, (2) 0.4% のグルコース溶液, (3) 0.4% ラクトースと 0.1% グルコースの混合液, (4) 0.4% ラクトースと 0.4% グルコースの混合液, (5) 2 mM の IPTG を加えた溶液。これらに対して、Miller unit (MU) と呼ばれる値を求めた。MU 値が高いほど、より多くの酵素が生産されたことを意味する。この実験では、異なる大腸菌の系統 W3110, ML30, ML308, ML308-2 を用意し、それぞれに対する結果を表 1 のデータ A,C,D,E に示した。

また、我々は 0.4% グリセロール (Gly), ルリア培地 (LB) という異なる 2 つの培地を用意し、実験前日の晩に大腸菌を培養した。この操作は前培養と呼ばれる。これに対し、実験時に (1)~(5) の溶液中で培養することを本培養と呼ぶ。前培養条件を変えた場合の結果は表 1 のデータ A,B に示す。

データ A, C において、MU(4) と MU(5) の値は MU(2) の値と同じくらい小さいことがわかる。これは W3110 と ML30 が自然界に存在する野生型の系統であり、グルコースに対する強い選好があるからである。一方で、データ D に見られるように、ML308 のグルコースに対する選好は弱く、MU(4) や MU(5) の値は比較的高い。このことは、ML308 がラクトースオペロンにある遺伝子 *lacI* が欠損している変異種であるためであると考えられる。*lacI* が欠損していると、グルコース濃度にかかわらずベータガラクトシダーゼの合成が行われてしまう。ML308-2 は、*lacI* 遺伝子だけでなく、ラクトースの膜輸送系に関係する *lacY* 遺伝子も欠

損した変異種である。ML308-2 もまた野生型の系統とは異なり、データ E の MU(4) や MU(5) の値が比較的高いことがわかる。

さらにデータ A と B では、MU(4) (5) の値は A と B で明らかに異なっていることがわかる。同じ W3110 の系統を用い、前培養本培養の手順も同じであるにもかかわらず、このような違いが生まれることから、大腸菌のグルコース選好は前培養の条件に大きく影響されることがわかる。

2.2 Total Probability Law の破れ

前節で示したデータが、TPL を破ることを示す。まず、大腸菌の一つの細胞に注目し、次の 2 つの事象系を考えよう：

$$S_1 = \{L, G\}$$

L： 大腸菌が細胞膜上でラクトース分子を検知する

G： 大腸菌が細胞膜上でグルコース分子を検知する

$$S_2 = \{+, \quad\}$$

＋： ラクトースオペロンは活性化し、 β -ガラクトシダーゼが生成される

： ラクトースオペロンは活性化せず、 β -ガラクトシダーゼが生成されない

確率 $P(+|L)$, $P(+|G)$ は MU 値より計算でき、例えばデータ C の場合は、MU(1)-(3) の値を用いて、以下のように求められる。

$$P(+|L) = \frac{1763}{3133}, \quad P(+|G) = \frac{14}{3133}.$$

ここで、(4) の場合について注目すると、ラクトースとグルコースの濃度比により、確率 $P(L)$ と $P(G)$ の値が定まる。例えばデータ C の (4) の場合における確率は

$$P(L) = \frac{0.4\%}{0.4\% + 0.4\%} = \frac{1}{2}, \quad P(G) = \frac{0.4\%}{0.4\% + 0.4\%} = \frac{1}{2},$$

のように計算できる。ラクトースオペロンが活性化している確率は、MU(3) と MU(4) の値を用いて

$$P(+) = \frac{184}{3133} \approx 0.059 \quad (1)$$

と計算されるが、

$$P(+|L)P(L) + P(+|G)P(G) = \frac{1763}{3133} \cdot \frac{1}{2} + \frac{14}{3133} \cdot \frac{1}{2} \approx 0.284 \quad (2)$$

の値とは明らかに異なっている。式 (1) の値が式 (2) の値と異なることを「Total Probability Law の破れ」とよぶ。我々は、他のデータに対しても TPL の破れが存在するかを調べた。それぞれのデータに対する結果を表 2 に示す。

データ A と C においては、 $P(+)$ と $P(+|L)P(L) + P(+|G)P(G)$ の値が大きく異なり、TPL を満たさないことが明らかにわかる。一方で、データ D, E においては、 $P(+)$ と $P(+|L)P(L) + P(+|G)P(G)$ の差がそれほど大きくない。特に、データ D における確率は、TPL を近似的に満たしているように見える。データ B はデータ A と同じ W3110 の系統を用いた実験結果だが、前培養の条件を変えたことによって、 $P(+)$ と $P(+|L)P(L) + P(+|G)P(G)$ の差が小さくなっていることがわかる。

	A	B	C	D	E
(4) $P(+)$	0.014	0.459	0.059	0.851	0.501
(4) $P(+ L)P(L) + P(+ G)P(G)$	0.780	0.723	0.117	0.722	0.660
(5) $P(+)$	0.029	0.398	0.025	0.841	0.462
(5) $P(+ L)P(L) + P(+ G)P(G)$	0.492	0.455	0.284	0.827	0.788

表2 ラクトースとグルコースの混合液を用いた実験 (4),(5) の場合における, TPL の左辺と右辺の値を示した. それぞれ表1のデータ A~E から計算した.

3 大腸菌の選択的糖代謝における適応力学と確率の定義

本節では, 適応力学とリフティングの数理を基にして, 非コルモゴロフ的確率を定義し, 大腸菌の選択的糖代謝を説明する.

ヒルベルト空間 \mathbb{C}^2 の基底を, $\{|e_1\rangle = (0, 1)^t, |e_2\rangle = (1, 0)^t\}$ とし, E_1, E_2 は射影作用素

$$E_1 = |e_1\rangle\langle e_1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad E_2 = |e_2\rangle\langle e_2| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

とする. これら E_1, E_2 を, それぞれ事象 L, G に対応させ, 大腸菌の初期状態を次のように与える.

$${}_0 = |x_0\rangle\langle x_0| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad |x_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|e_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|e_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

実験開始後, 大腸菌は自分の細胞の周りにおける糖分子の存在を認識すると, 大腸菌の状態が次のように変化する.

$${}_0 \rightarrow {}_D \quad \frac{{}_D {}_0 D}{\text{tr} |D|^2} = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\beta \\ \alpha\beta & |\beta|^2 \end{pmatrix}$$

ここで D は detection operator と呼ばれる作用素であり, $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ を満たす複素数を対角成分にもつ行列で表現される:

$$D = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}.$$

$|\alpha|^2$ と $|\beta|^2$ は L, G が生起する確率 $P(L), P(G)$ を意味し, 状態 ${}_D {}_D D$ は $P(L)$ と $P(G)$ の確率分布を表している. 外部環境 (糖濃度) に対する, 大腸菌の適応的な変化は, 作用素 D で与えられる.

次に, ラクトースオペロンの活動について考える. 大腸菌が β -ガラクトシダーゼを生産するかを記述する状態 ${}_{\text{op}}$ を次のように定義する.

$${}_D \rightarrow {}_{\text{op}} \quad \frac{{}_Q {}_0 Q}{\text{tr} |Q|^2} = \frac{1}{|\alpha\alpha + b\beta|^2 + |\alpha\alpha + d\beta|^2} \begin{pmatrix} |\alpha\alpha + b\beta|^2 & (\alpha\alpha + b\beta)(\alpha\alpha + d\beta) \\ (\alpha\alpha + b\beta)(\alpha\alpha + d\beta) & |\alpha\alpha + d\beta|^2 \end{pmatrix}$$

ここで, 上式の Q は activation operator と呼ばれ, この状態変化を与える作用素であり, 次のような行列で表される.

$$Q = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad a, b, c, d \in \mathbb{C}$$

この行列の各要素 a, b, c, d については後で議論する .

ラクトースオペロンの活動と外界の糖濃度との間における相関は , 次のリフティング $\mathcal{E}_{D,Q}$ によって与えられる .

$$\mathcal{E}_{D,Q}(\cdot) = \Lambda_Q \Lambda_D \otimes \Lambda_D, \quad \Lambda_X = \frac{X \cdot X}{\text{tr}|X|^2}$$

このリフティング $\mathcal{E}_{D,Q}$ を用いて , 同時確率を

$$\begin{aligned} P_D(+, L) &= \text{tr}(E_1 \otimes E_1) \mathcal{E}_{D,Q}(\cdot), & P_D(\cdot, L) &= \text{tr}(E_2 \otimes E_1) \mathcal{E}_{D,Q}(\cdot), \\ P_D(+, G) &= \text{tr}(E_1 \otimes E_2) \mathcal{E}_{D,Q}(\cdot), & P_D(\cdot, G) &= \text{tr}(E_2 \otimes E_2) \mathcal{E}_{D,Q}(\cdot), \end{aligned}$$

のように定義する . また , その他の確率も

$$P_D(+|L) = \text{tr}(E_1 \otimes I) \mathcal{E}_{D,Q}(E_1) = \frac{|a|^2}{|a|^2 + |b|^2}, \quad P_D(+|G) = \text{tr}(E_1 \otimes I) \mathcal{E}_{D,Q}(E_2) = \frac{|b|^2}{|a|^2 + |b|^2}, \quad (3)$$

$$P_D(\cdot|L) = \text{tr}(E_2 \otimes I) \mathcal{E}_{D,Q}(E_1) = \frac{|c|^2}{|c|^2 + |d|^2}, \quad P_D(\cdot|G) = \text{tr}(E_2 \otimes I) \mathcal{E}_{D,Q}(E_2) = \frac{|d|^2}{|c|^2 + |d|^2} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} P_D(+) &= \text{tr}(E_1 \otimes I) \mathcal{E}_{D,Q}(\cdot) = \frac{|a\alpha + b\beta|^2}{|a\alpha + b\beta|^2 + |c\alpha + d\beta|^2}, \\ P_D(\cdot) &= \text{tr}(E_2 \otimes I) \mathcal{E}_{D,Q}(\cdot) = \frac{|c\alpha + d\beta|^2}{|a\alpha + b\beta|^2 + |c\alpha + d\beta|^2}. \end{aligned}$$

のように , リフティング $\mathcal{E}_{D,Q}$ と射影 E_1, E_2 を用いて定義する . 事象系 S_1 における確率が

$$P_D(L) = \text{tr} E_1 \Lambda_D = |\alpha|^2, \quad P_D(G) = \text{tr} E_2 \Lambda_D = |\beta|^2$$

であるので , 式 (3),(4) で定義した条件付確率は , 以下のように古典確率とは異なる性質を持つ .

$$P_D(\cdot|L) \neq \frac{P_D(\cdot, L)}{P_D(L)}, \quad P_D(\cdot|G) \neq \frac{P_D(\cdot, G)}{P_D(G)}$$

式 (3),(4) から , activation operator Q を実数 k_L, k_G , を用いて

$$Q = \begin{pmatrix} \sqrt{P_{E_1}(+|L)} & \sqrt{P_{E_2}(+|G)} & k_L & 0 \\ \sqrt{P_{E_1}(\cdot|L)} & \sqrt{P_{E_2}(\cdot|G)} & 0 & k_G e^i \end{pmatrix} \quad (5)$$

の形に分解することができる . この k_L, k_G , を用いれば , 確率 $P_D(+)$ を

$$\begin{aligned} P_D(+) &= \frac{P_{E_1}(+|L)P_D(L)\sqrt{\frac{k_L}{k_G}} + P_{E_2}(+|G)P_D(G)\sqrt{\frac{k_G}{k_L}} + 2 \cos}{P_D(L)\sqrt{\frac{k_L}{k_G}} + P_D(G)\sqrt{\frac{k_G}{k_L}} + 2 \tilde{\cos}} \quad (6) \\ &= \sqrt{P_{E_1}(+|L)P_{E_2}(+|G)P_D(L)P_D(G)}, \\ &\sim \sqrt{P_D(L)P_D(G)} \left[\sqrt{P_{E_1}(+|L)P_{E_2}(+|G)} + \sqrt{P_{E_1}(\cdot|L)P_{E_2}(\cdot|G)} \right]. \end{aligned}$$

と表すことができる . 式 (6) より , TPL

$$P_D(+) = P_{E_1}(+|L)P_D(L) + P_{E_2}(+|G)P_D(G).$$

	A	B	C	D	E
$\sqrt{k_L/k_G}$	0.066	0.406	0.190	0.838	0.697
cos	0.842	1.000	0.461	0.251	0.733

表3 データ A ~ E に対する, $\frac{k_L}{k_G}$ と θ の計算値

が成立するための必要十分条件は, $k_L/k_G = 1$ かつ $\theta = \pi/2$ である. しかし, 一般的には TPL は破られており,

$$P_D(+) \neq P_{E_1}(+|L)P_D(L) + P_{E_2}(+|G)P_D(G)$$

となる.

3.1 実験結果に対する解析

大腸菌の選好を特徴付ける $\{k_L/k_G, \theta\}$ の値を実験データから求める. 前節で説明した確率公式を用いて, 表2で示した各データに対する $\{k_L/k_G, \theta\}$ の値を計算する.

まずデータ C について考えよう. 表2のデータ C より, 確率 $P_{E_1}(+|L), P_{E_2}(+|G)$ を

$$P_{E_1}(+|L) = 0.563, \quad P_{E_2}(+|G) = 0.011$$

と与える. さらに, (3) と (4) の場合における detection operator は異なるので, それぞれ

$$D = \begin{pmatrix} \sqrt{0.8} & 0 \\ 0 & \sqrt{0.2} \end{pmatrix}, \quad D' = \begin{pmatrix} \sqrt{0.5} & 0 \\ 0 & \sqrt{0.5} \end{pmatrix}$$

とし, 確率 $P_D(+), P_{D'}(+)$ を

$$P_D(+) = 0.459, \quad P_{D'}(+) = 0.025$$

と与える. このとき,

$$P_D(L) = 0.8, \quad P_{D'}(L) = 0.5$$

である. これらの確率を式 (6) に代入することで, 次の二つの $\sqrt{k_L/k_G}$ と $\cos \theta$ についての方程式が得られる

$$P_{E_1}(+|L) \{P_{D'}(L) - P_D(L)\} \sqrt{\frac{k_L}{k_G}} + \{P_D(+) - P_{D'}(+)\} \sqrt{\frac{k_L}{k_G}} + P_{E_2}(+|G) \{P_{D'}(G) - P_D(G)\} = 0,$$

$$\cos \theta = \frac{P_D(+|L) \left\{ P_{E_1}(+|L)P(L)\sqrt{\frac{k_L}{k_G}} + P_{E_2}(+|G)P(G)\sqrt{\frac{k_G}{k_L}} \right\}}{2}, \quad (7)$$

ここで,

$$= P_D(+) \sqrt{P_{E_1}(+|L)P_{E_2}(+|G)P_D(L)P_D(G)} + P_D(+) \sqrt{P_{E_1}(+|L)P_{E_2}(+|G)P_D(L)P_D(G)},$$

$$' = P_{D'}(+) \sqrt{P_{E_1}(+|L)P_{E_2}(+|G)P_{D'}(L)P_{D'}(G)} + P_{D'}(+) \sqrt{P_{E_1}(+|L)P_{E_2}(+|G)P_{D'}(L)P_{D'}(G)}.$$

式 (7) と式 (7) より, 各データ A ~ E に対する $\sqrt{k_L/k_G}$ と $\cos \theta$ の値を求め, 表3に示した.

表3に示されているように, 大腸菌の系統によって値が異なっている. さらにデータ A における $\sqrt{k_L/k_G}, \cos \theta$ の値は, データ B における値と異なり, 大腸菌の選好が前培養の条件に影響されている

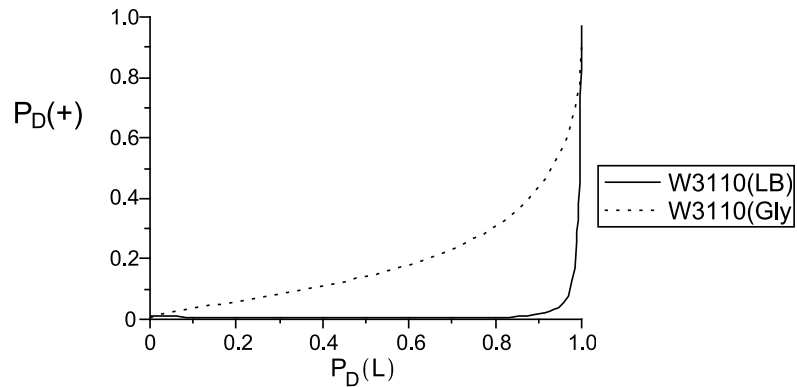


図5 前培養条件の違いによる比較：縦軸はオペロンが活性化する確率を表し，横軸はラクトースのグルコースに対する相対濃度を表す．

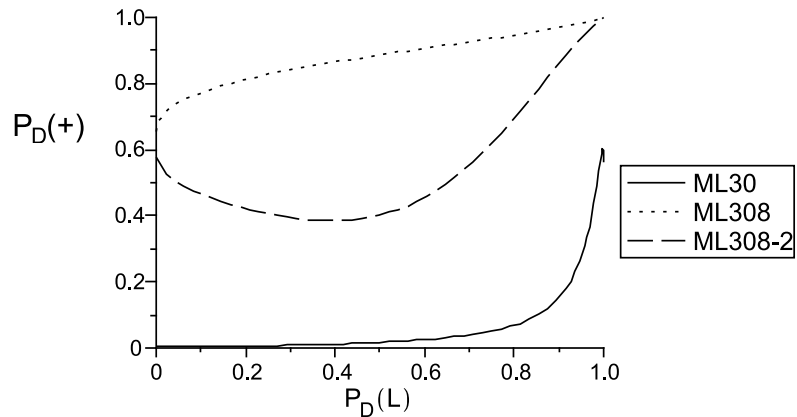


図6 遺伝子型の違いによる比較：縦軸はオペロンが活性化する確率を表し，横軸はラクトースのグルコースに対する相対濃度を表す．

ことを示している．これらの値 $\sqrt{k_L/k_G}$ を式(6)に代入し，縦軸を $P_D(+)$ の値，横軸を $P_D(L)$ としたグラフを図5, 6に示す．図5は前培養の条件を変えたときの，ラクトースオペロンの活動を表している．グリセロールで前培養したときの $P_D(+)$ は，緩やかに増加しており，LBで前培養したときのグラフとは異なっている．TPLが満たされているならばグラフが線形になるので，より線形に近いグラフを示しているグリセロールで培養した場合は，LBで培養した時よりもTPLの破れが小さいといえる．また，図6では，*lacI* 遺伝子や *lacY* 遺伝子のラクトースオペロンに対する影響を示している．ML308における $P_D(+)$ の値は， $P_D(L)$ の値に関してほぼ線形に増加するので，TPLはほとんど破られないことがわかる．

4 謝辞

本研究に関して，京都大学基礎物理学研究所湯川記念館にて行われた基礎物理学研究所研究会「物理と情報の階層構造～情報を接点とした諸階層の制御と創発」(YITP-W-11-25)で発表を行わせて頂きました．有意義な議論を行う機会を提供して頂いた，基礎物理学研究所の皆様，また世話人の方々に感謝致します．

参考文献

- [1] Accardi L., Ohya M.: Compound Channels, Transition Expectations, and Liftings, *Appl. Math. Optim.* **39** (1999) 33-59 .
- [2] Asano M., Basieva I., Khrennikov A., Ohya M., Yamato I.: A general quantum information model for the contextual dependent systems breaking the classical probability law. *Found. Phys.* (submitted) arXiv:1105.4769
- [3] Asano M., Basieva I., Khrennikov A., Ohya M., Tanaka Y., Yamato I.: Quantum-like model for the adaptive dynamics of the genetic regulation of *E. coli*'s metabolism of glucose/lactose. *Syst. Synth. Biol.* (2012) DOI:10.1007/s11693-012-9091-1
- [4] Asano M., Basieva I., Khrennikov A., Ohya M., Tanaka Y.: Quantum-like generalization of the Bayesian updating scheme for objective and subjective mental uncertainties. *J. Math. Psycho.* (2012) DOI:10.1016/j.jmp.2012.02.003
- [5] Asano M., Ohya M., Khrennikov A.: Quantum-Like Model for Decision Making Process in Two Players Game, *Founds. of Phys.* **41** (2010) 538-548
- [6] Asano M., Ohya M., Tanaka Y., Basieva I., Khrennikov A.: Quantum-like model of brain's functioning: Decision making from decoherence. *J. Theor. Biol.* **281** (2011) 56-64
- [7] Asano M., Ohya M., Tanaka Y., Khrennikov A., Basieva I.: On Application of Gorini-Kossakowski-Sudarshan-Lindblad Equation in Cognitive Psychology. *Open System and Information Dynamics* **17** (2010) 1-15
- [8] Basieva I., Khrennikov A., Ohya M., Yamato I.: Quantum-like interference effect in gene expression glucose-lactose destructive interference. *Syst. and Synth. Biol.* **5**(1-2) (2011), 59-68
- [9] Goto K., Iriyama S., Ohya M., Volovich I.V.: On Quantum Algorithm of Prime Factoring Using Quantum Binary Search. (in preparation)
- [10] Inada T., Kimata K., Aiba H.: Mechanism responsible for glucose-lactose diauxie in *Escherichia coli* challenge to the cAMP model. *Genes and Cells* **1** (1996) 293-301
- [11] Iriyama S., Ohya M., Volovich I.V.: On Computational Complexity of Shor's Quantum Factoring Algorithm. TUS preprint (2012)
- [12] Iriyama S., Ohya M., Volovich I.V.: On Quantum Algorithm for Binary Search and Its Computational Complexity. TUS preprint (2012)
- [13] Jacob F., Monod J.: Genetic regulatory mechanism in the synthesis of proteins. *J. Mol. Biol.* **3** (1961) 318-356
- [14] Khrennikov A.: Ubiquitous quantum structure: from psychology to finance. Springer, Heidelberg-Berlin-New York (2010)
- [15] Ohya M.: Adaptive dynamics and its applications to chaos and NPC problem. *QP-PQ:Quantum Prob. White Noise Anal.* **21** (2008) 186-216
- [16] Ohya M., Volovich I.: *Mathematical Foundations of Quantum Information and Computation and Its Applications to Nano-and Bio-systems.* Springer-Verlag (2011).

Survival probability in a one-dimensional quantum walk on a trapped lattice ¹

Yutaka Shikano^{♣,♠2}

[♣]Department of Physics, Tokyo Institute of Technology

[♠]Institute for Molecular Science

1 Introduction

Let us recapitulate the discrete time random walk. First, we prepare the **particle**, which is located in the origin at the begging, and the **coin**. We repeatably take the following procedures:

1. coin flip,
2. the shift due to the tail or head of the coin.

Finally, we calculate the probability distribution $\text{Pr}(n; t)$ at the position n and the step t .

Analogous to the discrete time random walk (DTQW), we define the discrete time quantum walk [7]. First, we prepare the **quantum particle**, which is located in the origin at the begging and is labeled as the position state like $|0\rangle$, and the **quantum coin** with the orthogonal basis; $|\uparrow\rangle = (1, 0)^{\mathbf{T}}$ and $|\downarrow\rangle = (0, 1)^{\mathbf{T}}$, where \mathbf{T} is the transposition. We repeatably take the following procedures:

1. quantum coin flip: This operator is generally defined as

$$\begin{aligned} C_t &= \sum_n [(a_{n,t}|n, \uparrow\rangle + c_{n,t}|n, \downarrow\rangle)\langle n, \uparrow| \\ &\quad + (d_{n,t}|n, \downarrow\rangle + b_{n,t}|n, \uparrow\rangle)\langle n, \downarrow|] \\ &= \sum_n \left[|n\rangle\langle n| \otimes \begin{pmatrix} a_{n,t} & b_{n,t} \\ c_{n,t} & d_{n,t} \end{pmatrix} \right] =: \sum_n \left[|n\rangle\langle n| \otimes \hat{C}_{n,t} \right], \end{aligned} \quad (1)$$

where $\hat{C}_{n,t} \in U(2)$ and $\hat{C}_{n,t}$ expresses the coin operator at the position n and the step t .

2. the shift due to the tail or head of the coin: This operator is defined as

$$W = \sum_n (|n-1, \uparrow\rangle\langle n, \uparrow| + |n+1, \downarrow\rangle\langle n, \downarrow|). \quad (2)$$

It is noted that these should be described as the unitary process. One step quantum walk operator at the step t is defined as $U_t = WC_t$.

¹This proceeding is for the talk at YITP Research Meeting ‘‘Hierarchy in Physics through Information - It’s Control and Emergence -’’ held at YITP, Kyoto university and is based on the work [1].

²e-mail: yshikano@ims.ac.jp

2 Multi-Particle Walk

One can easily envision that multi-agent random walks can be more advantageous in search algorithms than single particle ones. Indeed, recent experimental progress and theoretical studies favor the many-body random walk problem both in classical and in quantum realms [2–5]. As the general approach in terms of indistinguishable, correlated and interacting particles to this problem is too challenging to start with, we aim to comprehend the simplest scenario in this work and consider the complications in particular implementation settings in future studies. Let us assume the walkers are non-interacting distinguishable particles and they are initially uncorrelated. For N such walkers, the Hilbert space is given by a direct product of single walker spaces,

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{i=1}^N (\mathcal{H}_P \otimes \mathcal{H}_C)_i. \quad (3)$$

The particles walk independent of each other on the K -cycle so that the time evolution of the whole system is determined by

$$\hat{U}_{12\dots N} = \hat{U}^{\otimes N} \quad (4)$$

where \hat{U} is given as one-step time- and space-independent quantum walk operator defined in the previous section and is the same for all particles.

The initial state of N walkers is given by a tensor product of the single walker initial states. We suppose all the walkers are prepared in the same chirality state $|\chi\rangle$ and occupy all the untrapped sites x_i , ($i = 1 \dots N$) on the K -cycle. The initial state is expressed by

$$|\psi(0)\rangle = \bigotimes_{i=1}^N |\chi, x_i\rangle_i. \quad (5)$$

After t time steps, the state of the system becomes

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}_{12\dots N}^t |\psi(0)\rangle. \quad (6)$$

Using the reduced single particle density matrix

$$\rho_i(t) = \text{Tr}_{j \neq i} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|, \quad (7)$$

probability distribution of single walker at time t can be evaluated by

$$P_i(x_k, t) = \sum_{j=\uparrow, \downarrow} \langle j, x_k | \rho_i(t) | j, x_k \rangle. \quad (8)$$

This shows that $P_i(x_k, t)$ can be interpreted as a conditional probability, to find a walker at site x_k , $k = 1 \dots K$ at time t when the particle started to walk from site x_i at $t = 0$. The complete set of $\{P_i(x_k, t)\}$ for all particles $i = 1 \dots N$ can be visualized as the set of transition probabilities from $\{x_i\}$ to x_k of a single particle, so that the simplest multi-agent QW problem under study here is essentially a single particle problem which starts to walk at a set of different initial locations.

3 Survival probability

We use exact enumeration method to calculate the survival probability in classical random walk [6], which is suitable for the randomly distributed immobile traps on a one-dimensional

lattice. Initially, every untrapped site is occupied by a walker. At each time step, N walkers perform classical random walk on the 1D lattice, for which the probability of finding a walker at a particular site $P_i(x_k, t)$, is calculated with the sum of the corresponding probabilities at its nearest neighbor sites divided by two. Survival probability after t steps is,

$$P_r(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K P_i(x_k, t). \quad (9)$$

Here r enumerates a particular independent initial configuration of the system. Note that we have the relation $N = K - n$ or $N = K(1 - \rho)$ with $\rho = n/K$ is the concentration and n is the number of traps on the lattice. We take the lattice sites at $\{x_k : k = 1, \dots, K\}$. Let us note that we assume non-overlapping, immobile, perfectly absorbing traps such that $P_i(x_k, t) = 0$ if the site x_k is a trapping node, hence the sum is not restricted to the untrapped sites.

To account for random distribution of the traps, a statistical configurational average of mean survival probability is calculated over different independent realizations of the initial system via

$$\langle P(t) \rangle = \frac{1}{M} \sum_{r=1}^M P_r(t), \quad (10)$$

where M denotes the number of different configurations. We take $M = 10000$ in our calculations. The numerical results can be seen in Refs. [1, 8].

From our numerical observation, we found a gradual transition changing the parameter ρ . This result cannot be explained by any classical random walks. Especially speaking, the Flory-type argument (see Appendix A) may be related to such kinds of phenomena.

Acknowledgment

The author thanks the Yukawa Institute for Theoretical Physics at Kyoto University. Discussions during the YITP workshop YITP-W-11-25 on ‘‘Hierarchy in Physics through Information - It’s Control and Emergence -’’ were useful to complete this work. The author would like to acknowledge useful discussions with  . E. M stecapliođlu, Junsei Horikawa, and Tatsuaki Wada. Y.S. is supported by JSPS Research Fellowships for Young Scientists (Grant No. 21008624) and Global Center of Excellence Program ‘‘Nanoscience and Quantum Physics’’ at Tokyo Institute of Technology.

A Flory-type argument [9]

Spatial arrangements of macromolecules, or conformations of polymers, are closely related to the diffusion and the random walk problem. In early 1930s, structural chemistry descriptions of long-chain molecules were based upon unconstrained random walks, where the skeletal bonds of the molecule are represented by the uncorrelated steps of random walkers. This analogy yields scaling relations for the rms (root mean square) distance of the chain (squared radius of gyration) depending on the bond length and the number of the bonds. In 1949, P. J. Flory has provided a seminal work which takes into account volume exclusion effect (no segments of a molecule can overlap in space), which is awarded by the Nobel Prize of 1974. His arguments are based upon strong intuition, experience and experimental evidence and thus of heuristic nature, yet highly successful to comprehend size distribution of the macromolecules. His influence in

structural polymer chemistry is so strong that some call him as the father of modern polymer chemistry and his famous book as the holy book of polymer chemists.

Volume exclusion effect is closely related to the self-avoiding or repulsive random walks. Detailed numerical simulation results can be successfully explained by Flory's simple heuristic arguments. In particular for estimating critical exponents for linear polymer growth, such seemingly crude arguments give excellent approximations. Such arguments are also used in fractal Hausdorff dimensionality analysis. In self-avoiding walks, the walker would stop or become trapped if there are no more unvisited neighboring sites. Our trapped lattice model is in that sense is closely related to such random walk models of polymer growth and size distribution. Movement of a single walker to a nearest neighbor site can be imagined as initiating formation of an unsaturated bifunctional monomer, while trapping would give polymers of different sizes. We explain our numerical results by Flory-type arguments as well. We call this as Flory-type, rather than an exact Flory theory, as we do not know if our model is in the same universality class with the polymer chain model.

It would be a curious direction to pursue further the analogy of monomers and random walk steps for polymer growth dynamics in the context of quantum walk. Flory mean field theory can be considered as a minimization of the free energy which contains elastic contribution depending on the chain length (large voids being the exponentially rare highly energetic long polymers), repulsion due to trapping or self-avoiding walk, and the entropy due to configurations. Our work might be viewed as an extension that includes quantum corrections to such a model. However such a limited perspective study is beyond the scope of the present general work and demands a much more focused analysis. Our work should not be limited to the polymers, but is of fundamental nature so that is applicable to different realms, ranging from solid state systems to quantum algorithms. Our observations can be used to optimize the design, initiation and application of quantum algorithms on QW systems.

References

- [1] M. Gönülol, E. Aydiner, Y. Shikano, and Ö. E. Müstecaphoğlu, *New J. Phys.* **13**, 033037 (2011).
- [2] Y. Omar, N. Paunkovic, L. Sheridan, S. Bose, *Phys. Rev. A* **74**, 042304 (2006).
- [3] L. Sheridan, N. Paunkovic, Y. Omar, and S. Bose, *International Journal of Quantum Information (IJQI)*, **4**, 573 (2006).
- [4] M. Stefanak, T. Kiss, I. Jex, B. Mohring, *J. Phys. A: Math. Gen.* **39**, 14965 (2006).
- [5] S. K. Goyal and C. M. Chandrashekar, *J. Phys. A: Math. Theor.* **43**, 235303 (2010).
- [6] S. Havlin, G. H. Weiss, J. E. Kiefer and M. Dishon, *J. Phys. A: Math. Gen.* **17** L347, (1984).
- [7] A. Ambainis, E. Bach, A. Nayak, A. Vishwanath, and J. Watrous, in *Proceedings of the 33rd Annual ACM Symposium on Theory of Computing (STOC'01)* (ACM Press, New York, 2001), pp. 37 - 49.
- [8] Y. Shikano, J. Horikawa, and T. Wada, to be published from *Phys. Scr.*
- [9] P. J. Florry, *Principles of Polymer Chemistry* (Cornell University, Ithaca, 1971).

On Popa's Embedding Problem

Hiroshi Ando^{1*}

¹ Research Institute for Mathematical Sciences, Kyoto University
Kyoto, 606-8502, Japan
E-mail: andonuts@kurims.kyoto-u.ac.jp

Yasumichi Matsuzawa^{2,3†}

² Mathematisches Institut, Universität Leipzig
Johannisgasse 26, 04103, Leipzig, Germany
³ Department of Mathematics, Hokkaido University
Kita 10, Nishi 8, Kita-ku, Sapporo, 060-0810, Japan
E-mail: matsuzawa@math.sci.hokudai.ac.jp

January 7, 2012

Abstract

Sorin Popa defined the notion of Polish groups of finite type, which are those Polish groups embeddable into the unitary group of finite von Neumann algebras. We give a necessary and sufficient conditions for a Polish group to be of finite type using positive definite functions, and construct examples of finite type Polish groups which are not locally compact. Furthermore, we give partial answers to the question of Popa concerning the finiteness of unitarily representable Polish SIN-groups. This is a proceedings of the workshop "Hierarchy in Physics through Information - It's Control and Emergence -", at Yukawa Institute for Theoretical Physics on January 5-7, 2012. Most results are taken from [3]. We add new computation results beyond the above article.

Contents

1	Introduction	2
2	Finite von Neumann Algebras	3
2.1	C* and von Neumann Algebras	3
2.2	Properties of Finite von Neumann Algebras	9

*Supported by Research fellowships of the Japan Society for the Promotion of Science for Young Scientists (DC2)

†Supported by the JSPS International Training Program (ITP)

3 Polish Groups of Finite Type and its Characterization	11
3.1 Polish Groups of Finite Type	11
3.2 Positive Definite Functions	12
3.3 The First Characterization	13
3.4 Popa’s Question: SIN-groups and Unitarily Representability . . .	14
3.5 Simple Examples	15
3.6 More Examples of Finite Type Polish Groups	17
3.6.1 L^2 -unitary groups $\mathcal{U}(M)_2$	18
3.6.2 Automorphism group $\text{Aut}(M)$ of a II_1 Factor with Prop- erty (T)	19
3.7 Hereditary Properties of Finite Type Polish Groups	22
4 Popa’s problem	22
4.1 Affirmative Answers	22
4.2 Strategy for the General Case: Compactness Argument	23
5 Some Questions	24

1 Introduction

The origin of the current study is our work of infinite-dimensional Lie groups [2]: we looked for infinite-dimensional Lie groups which has not been considered so far and which are related to unitary representation theory. One natural candidate is the full unitary group $\mathcal{U}(\ell^2)$ equipped with strong operator topology. However, due to the appearance of unbounded operators, its “Lie algebra”

$$\text{Lie}(\mathcal{U}(\ell^2)) = \{\text{skew-adjoint operator } A \text{ on } \ell^2\}$$

is not even a linear space, for we cannot define $A + B$ as a densely defined operator for a bad choice of skew-adjoint operators ($\text{dom}(A + B) = \text{dom}(A) \cap \text{dom}(B)$ can be $\{0\}$). Since $\mathcal{U}(\ell^2)$ is important for unitary representation theory, it is natural to ask whether there are non-locally compact subgroup of $\mathcal{U}(\ell^2)$ for which one can associate a nice Lie algebra. In [2], we showed that if G is a strongly closed subgroup of a finite von Neumann algebra M on a separable Hilbert space \mathcal{H} , then the set $\text{Lie}(G)$ of skew-adjoint operator A on \mathcal{H} such that $e^{tA} \in G$ holds for all $t \in \mathbb{R}$ is indeed a complete topological Lie algebra with respect to the strong resolvent topology (the definition of von Neumann algebras and related objects are given in the next section). It is thus natural to ask what kind of Polish groups can be subgroups of $\mathcal{U}(M)$ for some M . This is the problem we are working on in this article. On the other hand, this problem of characterizing the strongly closed subgroups of $\mathcal{U}(M)$ already arised in a completely different point of view: motivated by his celebrated cocycle superrigidity theorem, S. Popa [21] defined a Polish group G to be of finite type if G is isomorphic to a closed subgroup of the unitary group of a finite von Neumann algebra. Denote by \mathcal{U}_{fin} the class of all finite type Polish groups. He proposed in [21] the problem of studying and characterizing the class \mathcal{U}_{fin} .

We give an answer in Theorem 3.6 to the above Problem by the aid of positive definite functions on groups and their GNS representations, and characterize locally compact groups or amenable Polish groups of finite type via compatible bi-invariant metrics (result for the case of locally compact groups is known, but we give another proof).

Combining with Popa's result [21], Theorem 3.6 gives a necessary and sufficient condition for a Polish group to be isomorphic onto a closed subgroup of the unitary group of a separable II_1 factor.

Although we have not found a complete answer to Popa's problem, we discuss some strategy for answering the general case. The key idea is to find some compactness of the action of the target Polish group on the space of positive definite functions.

We also give examples of Polish groups G of finite type using noncommutative integration of E. Nelson [20]. Finally we discuss some hereditary properties of finite type groups and pose some questions concerning Polish groups of finite type.

Notation. When we consider a group G , its identity is denoted as e_G . However, we also use 1 as the identity when we consider a concrete subgroup of the unitary group of a von Neumann algebra. We always regard the unitary group of a von Neumann algebra as a topological group with the strong operator topology.

2 Finite von Neumann Algebras

In this section we briefly recall basic notions about von Neumann algebra theory without proof for physicists. For the details, see [23], vol I. The notion of von Neumann algebras were originally introduced by John von Neumann in 1929 [24], motivated by quantum mechanics, as well as ergodic theory and infinite-dimensional representation theory. By definition, von Neumann algebras are C^* algebras. However, they behave quite strangely as C^* -algebras, and in general the study methods for von Neumann algebras are quite different from those for C^* algebras.

2.1 C^* and von Neumann Algebras

Let \mathcal{H} be a Hilbert space¹, $\mathbb{B}(\mathcal{H})$ be the set of all bounded operators in \mathcal{H} . For each $a \in \mathbb{B}(\mathcal{H})$, there is unique operator $a^* \in \mathbb{B}(\mathcal{H})$, called the adjoint of a , which is characterized by

$$\langle a\xi, \eta \rangle = \langle \xi, a^*\eta \rangle, \quad \forall \xi, \eta \in \mathcal{H}.$$

The operation $*$ has the following properties:

¹As usual for physicists, we use the convention that the inner product is linear in the right variable.

- $(\lambda a + \mu b)^* = \bar{\lambda}a^* + \bar{\mu}b^* \quad \lambda, \mu \in \mathbb{C}, a, b \in \mathbb{B}(\mathcal{H}).$
- $(a^*)^* = a.$
- For self-adjoint a , $\sigma(a) \subset [0, \infty) \Leftrightarrow a = b^*b$ for $\exists b \in \mathbb{B}(\mathcal{H}).$

Here, the spectrum $\sigma(a)$ of a is given by $\{\lambda \in \mathbb{C}; \lambda 1 - a \text{ is not invertible}\}.$ Note also that there are natural algebraic operations $x + y$, xy for operators $x, y \in \mathbb{B}(\mathcal{H}).$ Therefore, $\mathbb{B}(\mathcal{H})$ is equipped with a natural *-algebra structure (algebra with an involution *).

Recall that a sequence $\{a_n\}_{n=1}^\infty \subset \mathbb{B}(\mathcal{H})$ (or net) of operators converges to $a \in \mathbb{B}(\mathcal{H})$ in norm, if $\|a_n - a\| := \sup_{\|\xi\| \leq 1} \|a_n \xi - a \xi\| \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$) and in strong topology, if $\|a_n \xi - a \xi\| \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$) for every $\xi \in \mathcal{H}$ (but the “speed of convergence” may depend on the choice of ξ).

- Definition 2.1.** (1) A C^* -algebra A on \mathcal{H} is a subalgebra of $\mathbb{B}(\mathcal{H})$ which is self-adjoint ($a \in A \Rightarrow a^* \in A$) and is closed with respect to the norm topology of $\mathbb{B}(\mathcal{H}).$
- (2) A von Neumann algebra M on \mathcal{H} is a subalgebra of $\mathbb{B}(\mathcal{H})$ with unit $1 = 1_{\mathcal{H}}$ (identity operator), which is self-adjoint and is closed with respect to the strong operator topology.

For $S \subset \mathcal{H}.$ The set

$$S' := \{x \in \mathbb{B}(\mathcal{H}) ; xy = yx, \text{ for all } y \in M\}$$

is called the *commutant* of $S.$ It can be shown that S' is a von Neumann algebra, and the fundamental theorem of von Neumann states that $M \subset \mathbb{B}(\mathcal{H})$ is a von Neumann algebra if and only if $M = M''$ ($:= (M')'$) holds.

Definition 2.2. A von Neumann algebra M on \mathcal{H} is called a *factor* if the center $\mathcal{Z}(M) = M \cap M'$ is trivial, i.e., $M \cap M' = \mathbb{C}1$ holds.

We now introduce several operator topologies on $\mathbb{B}(\mathcal{H}).$ Denote by $\ell^2(\mathcal{H})$ the set of all sequences $\{\xi_n\}_{n=1}^\infty \subset \mathcal{H}$ such that $\sum_{n=1}^\infty \|\xi_n\|^2 < \infty$ holds.

Definition 2.3. On $\mathbb{B}(\mathcal{H}),$ we define the following topologies:

- (1) The *strong operator topology* (SOT for short) is the locally convex topology determined by the seminorm family $\{p_\xi\}_{\xi \in \mathcal{H} \setminus \{0\}},$ where

$$p_\xi(x) := \|x\xi\|, \quad x \in \mathbb{B}(\mathcal{H}).$$

- (2) The *weak operator topology* (WOT for short) is the locally convex topology determined by the seminorm family $\{p_{\xi, \eta}\}_{\xi, \eta \in \mathcal{H} \setminus \{0\}},$ where

$$p_{\xi, \eta}(x) := |\langle x\xi, \eta \rangle|, \quad x \in \mathbb{B}(\mathcal{H}).$$

- (3) The *strong* operator topology* (S*OT for short) is the locally convex topology determined by the seminorm family $\{p_\xi\}_{\xi \in \mathcal{H} \setminus \{0\}}$, where

$$p_\xi(x) := \|x\xi\| + \|x^*\xi\|, \quad x \in \mathbb{B}(\mathcal{H}).$$

- (4) The *σ -strong topology* (σ SOT for short) is the locally convex topology determined by the seminorm family $\{p_{\{\xi_n\}}\}_{\{\xi_n\} \in \ell^2(\mathcal{H}) \setminus \{0\}}$, where

$$p_{\{\xi_n\}}(x) := \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \|x\xi_n\|^2 \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad x \in \mathbb{B}(\mathcal{H}).$$

- (5) The *σ -weak topology* (σ WOT for short) is the locally convex topology determined by the seminorm family $\{p_{\{\xi_n\}, \{\eta_n\}}\}_{\{\xi_n\}, \{\eta_n\} \in \ell^2(\mathcal{H}) \setminus \{0\}}$, where

$$p_{\{\xi_n\}, \{\eta_n\}}(x) := \left| \sum_{n=1}^{\infty} \langle s\xi_n, \eta_n \rangle \right|, \quad x \in \mathbb{B}(\mathcal{H}).$$

- (6) The *σ -strong* topology* (σ S*OT for short) is the locally convex topology determined by the seminorm family $\{p_{\{\xi_n\}}\}_{\{\xi_n\} \in \ell^2(\mathcal{H}) \setminus \{0\}}$, where

$$p_{\{\xi_n\}}(x) := \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} (\|x\xi_n\|^2 + \|x^*\xi_n\|^2) \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad x \in \mathbb{B}(\mathcal{H}).$$

The product $(x, y) \mapsto xy$ is strongly continuous on the unit ball $\mathbb{B}(\mathcal{H})_1 := \{a \in \mathbb{B}(\mathcal{H}); \|a\| \leq 1\}$, and on the unit ball, σ -strong topology coincides with strong topology. However, if we take unbounded convergent nets, the situation becomes wild:

Example 2.4. There exist nets $\{x_\alpha\}_{\alpha \in A}, \{y_\alpha\}_{\alpha \in A} \subset \mathbb{B}(\mathcal{H})$ such that $x_\alpha \rightarrow 0$, $y_\alpha \rightarrow 0$ (SOT) and $\sup_\alpha \|y_\alpha\| \leq 1$, but $x_\alpha y_\alpha \rightarrow 1$ (SOT).

Such $\{x_\alpha\}$ must be an unbounded net if exists, but $\{y_\alpha\}$ can be bounded.

Proof. Let A be the net of all nonzero finite dimensional subspaces of \mathcal{H} , partially ordered by the set inclusion. For each $K \in A$, let $d_K := \dim(K) < \infty$. Take a partial isometry $u_K \in \mathbb{B}(\mathcal{H})$ such that $u_K^* u_K = P_K$ and $u_K u_K^* \leq P_{K^\perp}$ holds (such a u_K exists because $d_K < \infty$). Then define

$$x_K := d_K u_K^*, \quad y_K := \frac{1}{d_K} u_K, \quad K \in A.$$

Let $\xi \in \mathcal{H} \setminus \{0\}$. Then for any $K \in A$ with $K \geq K_0 := \mathbb{C}\xi$, we have

$$\begin{aligned} x_K \xi &= 0 \xrightarrow{K \rightarrow \mathcal{H}} 0, \\ y_K \xi &= \frac{1}{d_K} u_K \xi \xrightarrow{K \rightarrow \mathcal{H}} 0, \\ x_K y_K \xi &= u_K^* u_K \xi = P_K \xi = \xi \\ &\xrightarrow{K \rightarrow \mathcal{H}} \xi. \end{aligned}$$

Therefore the claim holds. \square

The group of all unitary operators in M is denoted by $\mathcal{U}(M)$. We denote by M_+ (resp. M_{sa}) the set of all positive (resp. self-adjoint) elements of M . The lattice of all projections in M is denoted by $P(M)$ or $\text{Proj}(M)$. The orthogonal projection onto the closed subspace $\mathcal{K} \subset \mathcal{H}$ is denoted by $P_{\mathcal{K}}$. For a projection p in M , we denote $1 - p$ as p^\perp .

By the fundamental result of Murray-von Neumann, any von Neumann algebra acting on a separable Hilbert space is a “generalized direct sum”² of factors. Therefore most of the problems of von Neumann algebras can be reduced to the ones about factors. Murray and von Neumann classified factors into three different groups. To explain this, we need to introduce the equivalence of projections in Murray-von Neumann sense.

Definition 2.5. Let M be a von Neumann algebra on \mathcal{H} . Let $p, q \in \text{Proj}(M)$.

- (1) p and q are called *equivalent*, denoted as $p \sim q$, if there exists a partial isometry $u \in M$ such that $u^*u = p$, $uu^* = q$ holds.
- (2) p is said to be *subequivalent* to q , denoted as $p \prec q$, if p is equivalent to a subprojection of q . That is, there exists $q_0 \in \text{Proj}(M)$ such that $p \sim q_0 \leq q$ holds.

\sim is an equivalence relation in $\text{Proj}(M)$.

Remark 2.6. $p, q \in \text{Proj}(M)$ are called *unitarily equivalent*, denoted as $p \sim_u q$ if there exists $u \in \mathcal{U}(M)$ such that $q = upu^*$. Obviously $p \sim_u q$ implies $p \sim q$, but the converse does not hold. Actually, $p \sim_u q$ holds if and only if $p \sim q$ and $1 - p \sim 1 - q$. Indeed, $p \sim q$ and $1 - p \sim 1 - q$ imply the existence of partial isometries $u, v \in M$ with $u^*u = p, uu^* = q, v^*v = 1 - p, vv^* = 1 - q$. Then $w = u + v$ is a unitary:

$$w^*w = (u^* + v^*)(u + v) = u^*u + v^*v + u^*v + v^*u = u^*u + v^*v = 1.$$

Here we used $v^*u = v^*vv^*uu^*u = v^*(1 - q)qu = 0$ and $ww^* = 1$ follows similarly. It then follows that

$$\begin{aligned} wpw^* &= (u + v)u^*u(u^* + v^*) = uu^*u(u^* + v^*) \\ &= uu^* + uu^*uv^* = uu^* \\ &= q. \end{aligned}$$

Here we used $vu^* = uv^* = 0$. Hence $p \sim_u q$.

It is known that in a finite von Neumann algebra, \sim_u and \sim are the same.

Example 2.7. Let $M = \mathbb{B}(\ell^2)$. Let $\{e_n\}_{n=1}^\infty$ be the canonical ONB of ℓ^2 . Define an isometry u by $ue_n := e_{n+1}$ ($n \geq 1$). Then its adjoint is

$$u^*e_n := \begin{cases} e_{n-1} & (n \geq 2) \\ 0 & (n = 1) \end{cases}.$$

²called *direct integral*, whose definition we omit here.

Let p be the one-dimensional projection onto $\mathbb{C}e_1$. Then we have $u^*u = 1$, $uu^* = 1 - p$. Therefore, $1 \sim 1 - p$. However, $1 - 1 = 0$ and $1 - (1 - p) = p \neq 0$ are not equivalent. Note that 1 and $1 - p$ are both infinite projections (more generally two projections are equivalent in $\mathbb{B}(\ell^2)$ if and only if they have the same rank). It is a general fact that in a countably decomposable infinite factor, all infinite projections are equivalent.

Let M be a von Neumann algebra and $p \in M \cup M'$ be a projection. Define the set M_p of bounded operators on the Hilbert space $\text{ran}(p)$ as

$$\{px|_{\text{ran}(p)} ; x \in M\},$$

then M_p forms a von Neumann algebra acting on the Hilbert space $\text{ran}(p)$ and $(M_p)' = (M')_p$ holds.

Definition 2.8. Let M be a von Neumann algebra on \mathcal{H} , $p \in \text{Proj}(M)$.

- (1) p is called *abelian* if M_p is an abelian von Neumann algebra.
- (2) p is called *finite* if it does not have a proper equivalent subprojection. That is, if $p_0 \leq p$, $p_0 \in \text{Proj}(M)$ is equivalent to p , then $p = p_0$ holds.
- (3) p is called *infinite* if it is not finite.
- (4) p is called *central* if $p \in \mathcal{Z}(M)$.
- (5) p is called *properly infinite* if pz is infinite for all $z \in \text{Proj}(\mathcal{Z}(M))$ with $pz \neq 0$.

Definition 2.9. Let M be a von Neumann algebra on \mathcal{H} .

- (1) M is called *type I* if each nonzero $p \in \text{Proj}(M)$ has a nonzero abelian subprojection of M .
- (2) M is called *type II* if it has no nonzero abelian projection and each nonzero $p \in \text{Proj}(M)$ has a nonzero finite subprojection of M .
- (3) M is called *type III* if it has no nonzero finite projection.
- (4) M is called *finite* (or *finite type*) if 1 is a finite projection.
- (5) M is called *properly infinite* if 1 is a properly infinite projection.

A finite type II factor is called a *II₁ factor*, and infinite type II factor is called a *II_∞ factor*. It can be shown that for any von Neumann algebra M there exist unique central projections $\{z_i\}_{i=I,II,III}$ of M such that M_{z_i} is of type i (of course some z_i can be 0).

Definition 2.10. Let M, N be von Neumann algebras. A linear map $\varphi : M \rightarrow N$ is called *normal* if it is σ -weakly continuous.

Among others, there is an important class of linear maps, called states.

Definition 2.11. A state on a unital C^* -algebra A is a linear functional $\varphi : A \rightarrow \mathbb{C}$ such that $\varphi(a^*a) \geq 0$ for every $a \in A$. φ is called *faithful* if $\varphi(a^*a) = 0$ implies $a = 0$.

For each state φ on a unital C^* -algebra A , one can associate a cyclic representation $\pi_\varphi : A \rightarrow \mathbb{B}(\mathcal{H}_\varphi)$ of A on a Hilbert space \mathcal{H}_φ with a distinguished cyclic vector ξ_φ in such a way that φ is represented as a vector state:

$$\varphi(x) = \langle \xi_\varphi, \pi_\varphi(x)\xi_\varphi \rangle, \quad x \in A.$$

This construction is called a *GNS representation* (Gelfand-Naimark-Segal). The construction is given in the following way: let $\langle \cdot, \cdot \rangle_\varphi$ be a sesqui-linear form on A given by

$$\langle a, b \rangle_\varphi := \varphi(a^*b), \quad a, b \in A.$$

Let $N_\varphi := \{a \in A; \langle a, a \rangle_\varphi = 0\}$. Then it turns out, using the Schwarz inequality

$$|\varphi(a^*b)| \leq \varphi(a^*a)^{\frac{1}{2}} \varphi(b^*b)^{\frac{1}{2}},$$

that N_φ is a linear subspace of A , and we can define an inner product $\langle \cdot, \cdot \rangle_\varphi$ on A/N_φ . Let \mathcal{H}_φ be the Hilbert space completion of A/N_φ with respect to $\langle \cdot, \cdot \rangle_\varphi$. For $a \in A$ denote by a_φ the canonical image of a in \mathcal{H}_φ . Let $\xi_\varphi := 1_\varphi$. Then we can define for each $a \in A$ an operator $\pi_\varphi^0(a)$ on $\{b_\varphi; b \in A\} \subset \mathcal{H}_\varphi$ by

$$\pi_\varphi^0(a)b_\varphi := (ab)_\varphi, \quad b \in A.$$

Again by Schwarz inequality, $\pi_\varphi^0(a)$ can be extended to a bounded operator $\pi_\varphi(a) \in \mathbb{B}(\mathcal{H}_\varphi)$. It is straightforward to check that $a \mapsto \pi_\varphi(a)$ is a representation of A , and $\varphi(x) = \langle \xi_\varphi, \pi_\varphi(x)\xi_\varphi \rangle$, ($x \in A$). This construction will be repeatedly used in the sequel.

Regarding the countability conditions on von Neumann algebras, we have:

Definition 2.12. Let M be a von Neumann algebra acting on a Hilbert space \mathcal{H} .

- (1) A von Neumann algebra is called *separable* if it acts on a separable Hilbert space.
- (2) A von Neumann algebra is called *countably decomposable* if it admits at most countably many non-zero orthogonal projections.

It is known that a von Neumann algebra M acting on a Hilbert space \mathcal{H} is countably decomposable if and only if there exists a countable separating subset of \mathcal{H} for M . This is also equivalent to the existence of a normal faithful state on M . Any von Neumann algebra M is a direct sum of the algebras of the form $N \overline{\otimes} \mathbb{B}(K)$, where N is countably decomposable and K is a (possibly non-separable) Hilbert space. In particular, a finite factor is always countably decomposable. Separable von Neumann algebra is countably decomposable, but the converse is false³.

³For example, the ultraproduct R^ω of the hyperfinite II_1 factor R is countably decomposable because it is a finite factor, but not separable. We will not explain the definition of ultraproduct.

2.2 Properties of Finite von Neumann Algebras

Finite von Neumann algebras behave like finite-dimensional algebras in some sense. This stems from the fact that they have distinguished normal states, called traces.

Definition 2.13. Let M be a von Neumann algebra.

- (1) A state τ on M is called *tracial* if for all $x, y \in M$,

$$\tau(xy) = \tau(yx)$$

holds.

- (2) A tracial state τ is called *faithful* if $\tau(x^*x) = 0$ ($x \in M$) implies $x = 0$.
 (3) A tracial state τ is called *normal* if it is σ -weakly continuous.

Theorem 2.14. Let M be a von Neumann algebra on a Hilbert space \mathcal{H} . The following conditions are equivalent.

- (1) M is of finite type.
 (2) There exists a family $\{\tau_i\}_{i \in I}$ of normal tracial states on M separating points of M . That is, for each nonzero $x \in M_+$, there exists $i \in I$ for which $\tau_i(x) \neq 0$ holds.

Moreover, for a finite factor M , there exists a unique normal faithful tracial state τ on M .

Remark 2.15. Let M be a finite factor with a faithful normal trace τ . Then for two projections e, f in M , $e \sim f$ if and only if $\tau(e) = \tau(f)$. For if $e \sim f$, then there is a partial isometry $u \in M$ with $u^*u = e$, $uu^* = f$. Thus

$$\tau(e) = \tau(u^*u) = \tau(uu^*) = \tau(f).$$

Conversely, if $\tau(e) = \tau(f)$, then since M is a factor, \prec is a total order in $\text{Proj}(M)$, so we may assume $e \prec f$. But this implies an existence of a partial isometry $u \in M$ with $u^*u = e$, $uu^* \leq f$. We have

$$\tau(f - uu^*) = \tau(f) - \tau(uu^*) = \tau(f) - \tau(u^*u) = \tau(f) - \tau(e) = 0.$$

Hence by the faithfulness of τ , $f = uu^*$ and $e \sim f$. This shows the usefulness of the trace.

Example 2.16 (Type I_n factor). Let $M = M_n(\mathbb{C})$. Then the functional

$$\tau([x_{i,j}]) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{i,i}, \quad [x_{i,j}] \in M_n(\mathbb{C})$$

is a normal faithful tracial state on M . It is easy to see that M is a factor. M is called of type I_n . Note that there is only one normal faithful tracial state on M .

Example 2.17. Let $M = L^\infty([0, 1], dx)$, where dx is the Lebesgue measure on $[0, 1]$. Then the functional

$$\tau(f) := \int_0^1 f(x)dx, \quad f \in L^\infty([0, 1])$$

is a normal faithful tracial state on M . Note that for each $g \in L^\infty([0, 1])$ with $g(x) > 0$ a.e. and $\int_0^1 g(x)dx = 1$, a functional τ_g given by

$$\tau_g(f) := \int_0^1 f(x)g(x)dx, \quad f \in L^\infty([0, 1])$$

is again a normal faithful tracial state on M . This reflects the existence of nontrivial center of M .

Example 2.18 (Group von Neumann algebra). Let Γ be a discrete countable group. Assume for each $g \neq e$, the conjugacy class $C(g) = \{h^{-1}gh; h \in \Gamma\}$ of g is infinite. Such a group is called an *ICC group*. Let $\ell^2(\Gamma)$ be a Hilbert space of square-summable functions on Γ with inner product

$$\langle \xi, \eta \rangle := \sum_{g \in \Gamma} \xi(g)\overline{\eta(g)}, \quad \xi, \eta \in \ell^2(\Gamma).$$

Define a unitary operator λ_g by

$$(\lambda_g \xi)(h) := \xi(g^{-1}h), \quad h, g \in \Gamma, \xi \in \ell^2(\Gamma).$$

The *group von Neumann algebra* $L(\Gamma)$ of Γ is defined to be the von Neumann algebra generated by $\{\lambda_g; g \in \Gamma\}$.

Let $\{\delta_g\}_{g \in \ell^2(\Gamma)}$ be the canonical ONB of $\ell^2(\Gamma)$. That is, $\delta_g(g) = 1$ and $\delta_g(h) = 0$ ($h \neq g$). The vector state τ defined by

$$\tau(x) = \langle x\delta_e, \delta_e \rangle, \quad x \in L(\Gamma),$$

is clearly normal, and $\tau(xy) = \tau(yx)$ holds for all x, y in the linear span of $\{\lambda_g; g \in \Gamma\}$. Thus by continuity, τ is a normal tracial state on $L(\Gamma)$. If $x \in L(\Gamma)$ satisfies $\tau(x^*x) = 0$, then for every $g \in \Gamma$, we have

$$\begin{aligned} \|x\delta_g\|_{\ell^2(\Gamma)}^2 &= \|x\lambda_g\delta_e\|_{\ell^2(\Gamma)}^2 = \tau(\lambda_g^*x^*x\lambda_g) \\ &= \tau(x^*x) = 0, \end{aligned}$$

which shows that $x\delta_g = 0$ for every $g \in \Gamma$. Hence $x = 0$. This shows τ is faithful. Since the map U from $A := \text{span}\{\lambda_g; g \in \Gamma\}$ to $\ell^2(\Gamma)$ given by

$$U_0 \left(\sum_{\text{finite}} x(g)\lambda_g \right) := \sum_{\text{finite}} x(g)\delta_g$$

satisfies $\|U_0x\|_{\ell^2(\Gamma)} = \|x\|_{2, \tau} = \tau(x^*x)^{\frac{1}{2}}$ for $x \in A$, it can be extended to an isometry $U : L^2(L(\Gamma), \tau) \rightarrow \ell^2(\Gamma)$. Here, $L^2(M, \tau)$ is the Hilbert space

completion of a von Neumann algebra M with respect to a normal faithful state τ with respect to the inner product

$$\langle x, y \rangle := \tau(y^*x), \quad x, y \in M.$$

It is clear that this U is unitary. In particular, $\{\lambda_g; g \in \Gamma\}$ is an ONB of $L^2(\Gamma, \tau)$ and every $x \in L(\Gamma)$ is expressed uniquely as $x = \sum_{g \in \Gamma} x(g)\lambda_g$ for $\{x(g)\}_{g \in \Gamma} \subset \mathbb{C}$, where the sum converges in $\|\cdot\|_{2,\tau}$ and

$$\|x\|_{2,\tau}^2 = \sum_{g \in \Gamma} |x(g)|^2.$$

We show $L(\Gamma)$ is a factor. Let $x \in L(\Gamma) \cap L(\Gamma)'$. Take the above expansion $x = \sum_{g \in \Gamma} x(g)\lambda_g$. Since $\lambda_h x \lambda_h^* = x$ for every $h \in \Gamma$, this shows

$$\begin{aligned} \sum_{g \in \Gamma} x(g)\lambda_g &= \sum_{g \in \Gamma} x(g)\lambda_{hgh^{-1}} \\ &= \sum_{g \in \Gamma} x(h^{-1}gh)\lambda_g. \end{aligned}$$

Since the $\|\cdot\|_{2,\tau}$ -expansion is unique, we have $x(g) = x(hgh^{-1})$ for all $g, h \in \Gamma$. But since the conjugacy class of $g \neq e$ is infinite, the condition $\sum_{g \in \Gamma} |x(g)|^2 < \infty$ shows that $x(g) = 0$ for all $g \neq e$. Thus $x = x(e)\lambda_e = x(e)1$. This shows that $L(\Gamma)$ is a factor. It is clear that $L(\Gamma)$ is infinite-dimensional, hence $L(\Gamma)$ is a II_1 factor.

3 Polish Groups of Finite Type and its Characterization

In this section, we characterize Polish groups of finite type via positive definite functions. We then characterize when locally compact groups or amenable Polish groups are of finite type via compatible bi-invariant metrics. To this end, we review notions of SIN-groups, bi-invariant metrics and unitary representability.

3.1 Polish Groups of Finite Type

Recall that a Polish space is a separable completely metrizable topological space, and a Polish group is a topological group whose topology is Polish.

We now introduce finite type groups after Popa [21].

Definition 3.1. A Hausdorff topological group is called of *finite type* if it is isomorphic as a topological group onto a closed subgroup of the unitary group of a finite von Neumann algebra.

All of second countable locally compact Hausdorff groups, the unitary group of a von Neumann algebra acting on a separable Hilbert space are Polish groups.

Furthermore, separable Banach spaces are Polish groups as an additive group. We denote the class of all Polish groups of finite type by \mathcal{U}_{fin} .

Note that since a von Neumann algebra is finite if and only if its unitary group is complete with respect to the left uniform structure, Polish groups of finite type are necessarily complete. Thus we have the following simple consequence.

Proposition 3.2. *The unitary group of a von Neumann algebra M acting on a separable Hilbert space is of finite type if and only if M is finite.*

Another examples of Polish groups of finite type are given later.

3.2 Positive Definite Functions

A complex valued function f on a Hausdorff topological group G is called *positive definite* if for all $g_1, \dots, g_n \in G$ and for all $c_1, \dots, c_n \in \mathbb{C}$,

$$\sum_{i,j=1}^n \bar{c}_i c_j f(g_i^{-1} g_j) \geq 0.$$

Moreover if a complex valued function f is invariant under inner automorphisms, that is

$$f(hgh^{-1}) = f(g), \quad \forall g, h \in G,$$

then f is called *a class function*.

It is well-known that there is an one-to-one correspondence between the set of all continuous positive definite functions on a topological group and the set of unitary equivalence classes of all cyclic unitary representations of it. more precisely, for each continuous positive definite function f on a topological group G , there exists a triple $(\pi_f, \mathcal{H}_f, \xi_f)$ consisting of a cyclic unitary representation π_f in a Hilbert space \mathcal{H}_f and a cyclic vector ξ_f in \mathcal{H}_f such that

$$f(g) = \langle \xi_f, \pi_f(g)\xi_f \rangle, \quad g \in G,$$

and this triple is unique up to unitary equivalence. This triple is called *the GNS triple* associated to f . Note that if G is separable, then so is \mathcal{H}_f .

The GNS triple is of the following form for each continuous positive definite class function.

Lemma 3.3. *Let f be a continuous positive definite class function on a topological group G and (π, \mathcal{H}, ξ) be its GNS triple. Then the von Neumann algebra M generated by $\pi(G)$ is finite and linear functional*

$$\tau(x) := \langle \xi, x\xi \rangle, \quad x \in M,$$

is faithful normal tracial state on M . In particular M is countably decomposable.

Proof. It is clear that τ is a normal state on M . Since f is a class function, it is easy to see that τ is tracial on the strongly dense $*$ -subalgebra of M spanned by $\pi(G)$. Therefore by normality, τ is tracial on M . Therefore we have only to check the faithfulness of τ . Assume $\tau(x^*x) = 0$. Since τ is a trace, we have

$$\|x\pi(g)\xi\|^2 = \tau(\pi(g)^*x^*x\pi(g)) = 0,$$

for all $g \in G$. By the cyclicity of ξ , x must be 0. \square

Example 3.4 (I. J. Schoenberg [22]). Let \mathcal{H} be a complex Hilbert space. Note that \mathcal{H} is an additive group. Then a function f defined by $f(\xi) := e^{-\|\xi\|^2}$ ($\xi \in \mathcal{H}$) is a positive definite (class) function on \mathcal{H} .

Example 3.5 (I. J. Schoenberg [22]). For all $1 \leq p \leq 2$ a function f_p defined by $f_p(a) := e^{-\|a\|_p^p}$ ($a \in l^p$) is a positive definite (class) function on a separable Banach space l^p .

For more details about positive definite class functions, see [15].

3.3 The First Characterization

We now characterize Polish groups of finite type.

Theorem 3.6. *For a Polish group G the following are equivalent.*

- (i) G is of finite type.
- (ii) G is isomorphic as a topological group onto a closed subgroup of the unitary group of a finite von Neumann algebra acting on a separable Hilbert space.
- (iii) A family \mathcal{F} of continuous positive definite class functions on G generates a neighborhood basis of the identity e_G of G . That is, for each neighborhood V at the identity, there are functions $f_1, \dots, f_n \in \mathcal{F}$ and open sets $\mathcal{O}_1, \dots, \mathcal{O}_n$ in \mathbb{C} such that

$$e_G \in \bigcap_{i=1}^n f_i^{-1}(\mathcal{O}_i) \subset V.$$

- (iv) There exists a positive, continuous positive definite class function which generates a neighborhood basis of the identity of G .
- (v) A family \mathcal{F} of continuous positive definite class functions on G separates the identity of G and closed subsets A with $A \not\ni e_G$. That is, for each closed subset A with $A \not\ni e_G$, there exists a continuous positive definite class function $f \in \mathcal{F}$ such that

$$\sup_{x \in A} |f(x)| < |f(e_G)|.$$

(vi) *There exists a positive continuous positive definite class function which separates the identity of G and closed subsets A with $A \not\ni e_G$.*

Remark 3.7. Popa (Lemma 2.6 of [21]) showed that a Polish group G is of finite type if and only if it is isomorphic onto a closed subgroup of the unitary group of a separable II_1 factor. Therefore Theorem 3.6 gives a necessary and sufficient condition for a Polish group to be isomorphic onto a closed subgroup of the unitary group of a separable II_1 factor.

3.4 Popa's Question: SIN-groups and Unitarily Representability

To discuss further properties of finite type groups, we consider the following notions, say SIN-groups, bi-invariant metrics and unitarily representability.

A neighborhood V at the identity of a topological group G is called *invariant* if it is invariant under all inner automorphisms, that is, $gVg^{-1} = V$ holds for all $g \in G$. A *SIN-group* is a topological group which has a neighborhood basis of the identity consisting of invariant identity neighborhoods. Note that a locally compact Hausdorff SIN-group is unimodular.

A *bi-invariant metric* on a group G is a metric d which satisfies

$$d(kg, kh) = d(gk, hk) = d(g, h), \quad \forall g, h, k \in G.$$

It is known that a first countable Hausdorff topological group is SIN if and only if it admits a compatible bi-invariant metric.

As Popa [21] pointed out, one of the most important fact of Polish groups of finite type is an existence of a compatible bi-invariant metric. Namely if G is a closed subgroup of $\mathcal{U}(M)$, where M is a II_1 factor with the normal faithful trace τ , then

$$d(u, v) := \tau((u - v)^*(u - v))^{\frac{1}{2}}, \quad u, v \in G$$

is a compatible bi-invariant metric on G . Therefore a finite type Polish group must be SIN. Another necessary condition for a Polish group G to be of finite type is the unitarily representability, which we discuss next section.

Definition 3.8. A Hausdorff topological group is called *unitarily representable* if it is isomorphic as a topological group onto a subgroup of the unitary group of a Hilbert space.

All locally compact Hausdorff groups are unitarily representable via the left regular representation.

The following characterization of unitary representability has been considered by specialists and can be seen in e.g., Gao [13].

Theorem 3.9. *For a Polish group G the following are equivalent.*

(i) *G is unitarily representable.*

(ii) *There exists a positive, continuous positive definite function which separates the identity of G and closed subsets A with $A \not\ni e_G$.*

It is clear that a Polish group of finite type is necessarily unitarily representable. It is clear that a finite type Polish group is unitarily representable. Popa asked whether the converse holds:

Problem 3.10 (Popa). Let G be a unitarily representable Polish SIN-group. Is G of finite type?

Thanks to the first characterization, Theorem 3.6, we can give affirmative answers to the above problem for some classes of Polish groups. Before discussing the Popa's problem let us see some easy examples of finite type Polish groups.

3.5 Simple Examples

All of the following examples are well-known. The first three examples are locally compact groups.

Example 3.11. Any compact metrizable group is a Polish group of finite type. This follows from the Peter-Weyl theorem.

Example 3.12. Any abelian second countable locally compact Hausdorff group is a Polish group of finite type. Indeed its left regular representation is an embedding into the unitary group of a Hilbert space and the von Neumann algebra generated by its image is commutative (in particular, finite).

Example 3.13. Any countable discrete group is a Polish group of finite type. For its left regular representation is an embedding into the unitary group of a finite von Neumann algebra.

The following two examples suggest there are few other examples of locally compact groups of finite type.

Example 3.14. Let $G := \left\{ \begin{pmatrix} x & y \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \in GL(2, \mathbb{K}) ; x \in \mathbb{K}^\times, y \in \mathbb{K} \right\}$ be the $ax + b$ group, where $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ or \mathbb{C} . By easy computations, we have

$$\begin{pmatrix} a & b \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x & y \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ 0 & 1 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} x & -bx + ay + b \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

so that the conjugacy class $C\left(\begin{pmatrix} x & y \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right)$ of $\begin{pmatrix} x & y \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ is

$$C\left(\begin{pmatrix} x & y \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right) = \begin{cases} \left\{ \begin{pmatrix} x & \# \\ 0 & 1 \end{pmatrix} ; \# \in \mathbb{K} \right\} & (x \neq 1), \\ \left\{ \begin{pmatrix} 1 & \# \\ 0 & 1 \end{pmatrix} ; \# \in \mathbb{K}^\times \right\} & (x = 1, y \neq 0), \\ \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} & (x = 1, y = 0). \end{cases}$$

Thus for each $n \in \mathbb{N}$ there exists a matrix $h_n \in G$ such that $h_n g_n h_n^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, where $g_n := \begin{pmatrix} 1 & 1/n \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$. Clearly, $g_n \rightarrow 1$ and $h_n g_n h_n^{-1} \not\rightarrow 1$. This implies that $ax + b$ group does not admit a compatible bi-invariant metric. Hence it is not of finite type.

Example 3.15. The special linear group $SL(n, \mathbb{K})$ ($n \geq 2$) is not of finite type since the map $\begin{pmatrix} a & b \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} a & b \\ 0 & a^{-1} \end{pmatrix}$ is an embedding of $ax + b$ group into $SL(2, \mathbb{K})$. Thus the general linear group $GL(n, \mathbb{K})$ ($n \geq 2$) is also not of finite type.

Next we consider abelian groups. Note that an abelian topological group is of finite type if and only if it is unitarily representable.

Example 3.16. Any separable Hilbert space is a Polish group of finite type. This follows from Example 3.4 and Theorem 3.6.

Example 3.17. A separable Banach space l^p ($1 \leq p \leq \infty$) is a Polish group of finite type if and only if $1 \leq p \leq 2$. The ‘‘only if’’ part follows from Example 3.5 and Theorem 3.6, but the ‘‘if’’ part is non-trivial. For details, see [18].

Here is another counter example.

Example 3.18. Separable Banach space $C[0, 1]$ of all continuous functions on the interval $[0, 1]$ is a Polish group but not of finite type. For, since every separable Banach space is isometrically isomorphic to a closed subspace of $C[0, 1]$, if $C[0, 1]$ is of finite type, then any separable Banach space is a Polish group of finite type. But this is a contradiction to the previous example.

Example 3.19. Let $\mathcal{U}(\ell^2)_2$ be the set of all $u \in \mathcal{U}(\ell^2)$ for which $u - 1$ is of Hilbert-Schmidt class. Define a metric d on $\mathcal{U}(\ell^2)_2$ by

$$d(u, v) := \|u - v\|_{\text{HS}}, \quad u, v \in \mathcal{U}(\ell^2)_2.$$

Here, $\|\cdot\|_{\text{HS}}$ denotes the Hilbert-Schmidt norm. It is easy to see that $(\mathcal{U}(\ell^2)_2, d)$ is a Polish metric group. Since the function $\varphi : \mathcal{U}(\ell^2)_2 \rightarrow \mathbb{C}$ given by

$$\varphi(u) := e^{-\|u-1\|_{\text{HS}}^2}, \quad u \in \mathcal{U}(\ell^2)_2,$$

is a continuous, positive definite function generating the neighborhood basis of the identity, $\mathcal{U}(\ell^2)_2$ is a Polish group of finite type.

Let us compute the Lie algebra of $\mathcal{U}(\ell^2)_2$. Denote by $S^2(\ell^2)_2$ the set of all Hilbert-Schmidt operators in ℓ^2 .

Theorem 3.20. *The Lie algebra of $\mathcal{U}(\ell^2)_2$ is the Hilbert Lie-algebra $\mathfrak{ul}_2 = \{a \in S^2(\ell^2); a^* = -a\}$. In particular, the unitary group $\mathcal{U}(N)$ of any II_1 factor N does not embed into $\mathcal{U}(\ell^2)_2$.*

Proof. Let $a \in \mathfrak{ul}_2$. There is a sequence $\{\lambda_n\}_{n=1}^\infty$ of real numbers satisfying $|\lambda_n| \geq |\lambda_{n+1}| \geq \dots$, $\lambda_n \rightarrow 0$, and a sequence of orthogonal unit vectors $\{\xi_n\}_{n=1}^\infty$ in ℓ^2 such that $a = \sum_{n=1}^\infty i\lambda_n \langle \xi_n, \cdot \rangle \xi_n$ holds. We show that $e^a - 1$ is of Hilbert-Schmidt type, whence $e^a \in \mathcal{U}(\ell^2)_2$. Since $e^a = \sum_{n=1}^\infty e^{i\lambda_n} \langle \xi_n, \cdot \rangle \xi_n$, we have

$$\begin{aligned} \|e^a - 1\|_{\text{HS}}^2 &= \sum_{n=1}^\infty |e^{i\lambda_n} - 1|^2 = 2 \sum_{n=1}^\infty (1 - \cos(\lambda_n)) \\ &\leq \sum_{n=1}^\infty \lambda_n^2 < \infty, \end{aligned}$$

hence $e^a - 1 \in S^2(\ell^2)$. This shows that $\mathfrak{ul}_2 \subset \text{Lie}(\mathcal{U}(\ell^2)_2)$. Conversely, suppose $u(t)$ is a $\|\cdot\|_2$ -continuous one-parameter subgroup of $\mathcal{U}(\ell^2)_2$. Since the topology given by $\|\cdot\|_2$ is stronger than the norm topology, there is a bounded skew-adjoint operator a such that $u(t) = e^{ta}$ holds for all $t \in \mathbb{R}$. Since a is the norm limit of the compact operator $(u(t) - 1)/t$, it is compact. Hence a has the form $a = \sum_{n=1}^\infty \lambda_n \langle \xi_n, \cdot \rangle \xi_n$ with $\{\lambda_n\}_{n=1}^\infty \subset \mathbb{R}$ and $|\lambda_n| \searrow 0$, $\{\xi_n\}_{n=1}^\infty$ orthogonal unit vectors. Since $\lim_{x \rightarrow 0} (1 - \cos x)/x = 1/2$, there is $\delta > 0$ such that $1 - \cos x \geq x^2/3$ holds for all x with $|x| < \delta$. The condition $\lambda_n \rightarrow 0$ implies that there is $n_0 \in \mathbb{N}$ such that $|\lambda_n| < \delta$ for all $n \geq n_0$. Therefore it holds that

$$\begin{aligned} \sum_{n=n_0+1}^\infty \lambda_n^2 &\leq \sum_{n=n_0+1}^\infty 3(1 - \cos(\lambda_n)) \\ &\leq \frac{3}{2} \|e^a - 1\|_{\text{HS}}^2 < \infty, \end{aligned}$$

which shows that $a \in \mathfrak{ul}_2$. Therefore $\text{Lie}(\mathcal{U}(\ell^2)_2) = \mathfrak{ul}_2$. In particular, $\text{Lie}(\mathcal{U}(\ell^2)_2)$ is a Hilbert-Lie algebra. Since the Lie algebra of the unitary group of any II_1 factor N is not locally convex (see [2]), $\mathcal{U}(N)$ cannot be embedded into $\mathcal{U}(\ell^2)_2$. \square

3.6 More Examples of Finite Type Polish Groups

In this section we will give more examples of groups of finite type.

3.6.1 L^2 -unitary groups $\mathcal{U}(M)_2$

Let M be a semifinite von Neumann algebra on a Hilbert space \mathcal{H} equipped with a normal faithful semifinite trace τ . A densely defined, closed operator T on \mathcal{H} is said to be *affiliated* to M if for all $u \in \mathcal{U}(M')$, $uTu^* = T$ holds. Denote by \overline{M} the set of all densely defined, closed operators on \mathcal{H} which are affiliated to M . Recall that $L^2(M, \tau)$ is a Hilbert space completion of the space $\mathfrak{n}_\tau := \{x \in M; \tau(x^*x) < \infty\}$ by the inner product

$$\langle x, y \rangle := \tau(x^*y), \quad x, y \in \mathfrak{n}_\tau.$$

We define $\|x\|_2 := \tau(x^*x)^{\frac{1}{2}}$ for $x \in L^2(M, \tau)$.

Definition 3.21. We call $\mathcal{U}(M)_2 := \{u \in \mathcal{U}(M); 1 - u \in L^2(M, \tau)\}$ the L^2 -unitary group of (M, τ) .

Note that when M is not a factor, $\mathcal{U}(M)_2$ depends on the choice of τ too. In the sequel we show the following theorem.

Theorem 3.22. *Let M be a separable semifinite von Neumann algebra with a normal faithful semifinite trace τ . Then $\mathcal{U}(M)_2$ is a Polish group of finite type, where the topology is determined by the following metric d ,*

$$d(u, v) := \|u - v\|_2, \quad u, v \in \mathcal{U}(M)_2.$$

It is not entirely obvious that the metric d on $\mathcal{U}(M)_2$ is complete: of course any d -Cauchy sequence $\{u_n\}_{n=1}^\infty$ in $\mathcal{U}(M)_2$ has a limit u with $u - 1 \in L^2(M, \tau)$, but we have to show that u is bounded.

Remark 3.23. Let us remark two points.

- (1) It is easy to see that $\mathcal{U}(M)_2'' = M$. This shows that the inclusion map $\mathcal{U}(M)_2 \hookrightarrow \mathcal{U}(M)$ is not an embedding in our sense.
- (2) When $M = \mathbb{B}(\mathcal{H})$, $\mathcal{U}(M)_2$ is the well-known example of a Hilbert-Lie group and is denoted as $\mathcal{U}(\mathcal{H})_2$.

Regarding $\mathcal{U}(M)_2, \mathcal{U}(\ell^2)_2$ and $\mathcal{U}(N)$ where M (resp. N) is a II_∞ (resp. II_1) factor, we have the following non-isomorphic properties.

J. Feldman [10] gave a complete description of a group isomorphism between the unitary groups of type II_1 von Neumann algebras. In particular, in the proof of Theorem 4 of [10], he uses the following simple observation: let p be a projection in a von Neumann algebra M , then $u_p := 1 - 2p$ is a self-adjoint unitary in M . Using this correspondence, he deduced that the group isomorphism $\pi : \mathcal{U}(M_1) \rightarrow \mathcal{U}(M_2)$ between type II_1 von Neumann algebras M_1, M_2 induces order isomorphism between their projection lattices, thereby proving that the isomorphism π is lifted to a ring $*$ -isomorphism $\bar{\pi} : M_1 \rightarrow M_2$ (which may not preserve the scalar multiplication) in such a way that

$$\bar{\pi}(u) = \theta(u)\pi(u), \quad \text{for all } u \in \mathcal{U}(M_1),$$

where θ is a multiplicative map from $\mathcal{U}(M_1)$ to $\mathcal{Z}(\mathcal{U}(M_2))$. Let \mathcal{H} be an infinite dimensional Hilbert space. Using his idea, we show that when M is a II_∞ factor and N is a finite von Neumann algebra, then $\mathcal{U}(M)_2$, $\mathcal{U}(\ell^2)_2$ and $\mathcal{U}(N)$ are mutually non-isomorphic.

Proposition 3.24. *Let M be a II_∞ factor, N be a II_1 factor. Then $\mathcal{U}(M)_2$, $\mathcal{U}(\ell^2)_2$ and $\mathcal{U}(N)$ are mutually non-isomorphic.*

3.6.2 Automorphism group $\text{Aut}(M)$ of a II_1 Factor with Property (T)

Recall that a finite von Neumann algebra N equipped with a normal faithful tracial state τ is said to have *property (T)* if for each $\varepsilon > 0$, there exists a finite set $\mathcal{F} \subset N$ and $\delta > 0$ with the property that whenever $\varphi : N \rightarrow N$ is a unital completely positive τ -preserving map satisfying $\|\varphi(x) - x\|_2 < \delta$ for all $x \in \mathcal{F}$, then $\|\varphi(a) - a\|_2 \leq \varepsilon\|a\|$ holds for all $a \in N$.

Let M be a separable II_1 factor with property (T), $\text{Aut}(M)$ be a Polish group of all *-automorphisms of M equipped with the pointwise $\|\cdot\|_2$ -convergence topology. Due to the property (T), this topology coincides with the topology of uniform $\|\cdot\|_2$ -convergence on the closed unit ball M_1 . Since the latter topology is given by the bi-invariant metric d defined by

$$d(\alpha, \beta) := \sup_{x \in M_1} \|\alpha(x) - \beta(x)\|_2, \quad \alpha, \beta \in \text{Aut}(M),$$

$\text{Aut}(M)$ is a Polish SIN-group. By considering the standard representation, $\text{Aut}(M)$ is unitarily representable as well. Therefore it would be interesting to check if $\text{Aut}(M)$ is actually of finite type or not. Recently the following idea of proof was communicated to us by Uffe Haagerup.

Theorem 3.25. *Let M be a separable II_1 factor with property (T). Then $\text{Aut}(M)$ equipped with u -topology is a Polish group of finite type.*

Lemma 3.26. *Let G be a topological group, N be a closed normal subgroup of G . Let φ be a positive definite function on N . Then the function $\psi : G \rightarrow \mathbb{C}$ defined by*

$$\psi(g) := \begin{cases} \varphi(g) & (g \in N) \\ 0 & (g \notin N) \end{cases}$$

is also positive definite.

Proof. Let $\{x_\lambda N\}_{\lambda \in \Lambda}$ be a representative of the quotient group G/N . Then any element in G is of the form $x_\lambda n_\lambda$ for some $\lambda \in \Lambda$ and $n_\lambda \in N$. Therefore all we have to prove is for any $n \geq 1$, $\mu_1, \dots, \mu_n \in \mathbb{C}$, $\lambda_1, \dots, \lambda_n \in \Lambda$, and $n_1, \dots, n_n \in N$, that

$$\sum_{i,j=1}^n \mu_i \overline{\mu_j} \psi(x_{\lambda_i} n_i n_j^{-1} x_{\lambda_j}^{-1}) \geq 0.$$

For $1 \leq i, j \leq n$, we have

$$\begin{aligned}
& x_{\lambda_i} n_i n_j^{-1} x_{\lambda_j}^{-1} = n_0 \in N \\
& \Leftrightarrow \underbrace{(x_{\lambda_i} n_i x_{\lambda_i}^{-1})}_{=: n'_i \in N} x_{\lambda_i} x_{\lambda_j}^{-1} \underbrace{(x_{\lambda_j} n_j x_{\lambda_j}^{-1})}_{=: n'_j \in N} = n_0 \in N \\
& \Leftrightarrow x_{\lambda_i} x_{\lambda_j}^{-1} = n_i'^{-1} n_0 n_j' \in N \\
& \Leftrightarrow \lambda_i = \lambda_j.
\end{aligned}$$

Hence by defining $J_\lambda := \{1 \leq i \leq n; \lambda_i = \lambda\}$ ($\lambda \in \Lambda$), we have

$$\begin{aligned}
\sum_{i,j=1}^n \mu_i \bar{\mu}_j \psi(x_{\lambda_i} n_i n_j^{-1} x_{\lambda_j}^{-1}) &= \sum_{\lambda \in \Lambda} \sum_{i,j \in J_\lambda} \mu_i \bar{\mu}_j \varphi(x_{\lambda_i} n_i n_j^{-1} x_{\lambda_j}^{-1}) \\
&= \sum_{\lambda \in \Lambda} \sum_{i,j \in J_\lambda} \mu_i \bar{\mu}_j \varphi((x_{\lambda_i} n_i x_{\lambda_i}^{-1})(x_{\lambda_j} n_j x_{\lambda_j}^{-1})^{-1}) \\
&\geq 0.
\end{aligned}$$

□

Proof of Theorem 3.25. It is known that property (T) implies $\text{Int}(M)$ is an open normal subgroup of $\text{Aut}(M)$, hence it is a closed normal subgroup as well. This means $\text{Int}(M)$ is isomorphic as a topological group to $\mathcal{U}(M)/\mathbb{T}$ by the factor property of M^4 . Since $\mathcal{U}(M)/\mathbb{T}$ is isomorphic onto the subgroup of $\mathcal{U}(M \bar{\otimes} M^{\text{op}})$ by $[u] \mapsto u \otimes u^*$, where M^{op} is the opposite von Neumann algebra of M , we can define the positive definite function φ_0 on $\text{Int}(M)$ by

$$\varphi_0(\text{Ad}(u)) := (\tau \otimes \tau)(u \otimes u^*) = |\tau(u)|^2, \quad u \in \mathcal{U}(M).$$

We see that φ is invariant by the uniqueness of the trace:

$$\begin{aligned}
\varphi_0(\alpha^{-1} \cdot \text{Ad}(u) \cdot \alpha) &= \varphi_0(\text{Ad}(\alpha^{-1}(u))) \\
&= |(\tau \circ \alpha^{-1})(u)|^2 \\
&= |\tau(u)|^2,
\end{aligned}$$

for $\alpha \in \text{Aut}(M)$. It is easy to show that the trace $\tau \otimes \tau$ generates the strong neighborhood basis of 1 in $\mathcal{U}(M \bar{\otimes} M^{\text{op}})$. Therefore φ_0 is a continuous positive definite invariant function on $\text{Int}(M)$ generating the neighborhood basis of 1. By Lemma 3.26, φ_0 can be extended to a positive definite function φ on $\text{Aut}(M)$ by

$$\varphi(\alpha) := \begin{cases} \varphi_0(\alpha) & (\alpha \in \text{Int}(M)) \\ 0 & (\alpha \notin \text{Int}(M)) \end{cases}.$$

⁴This is in contrast to the fact that $\text{Int}(R)$, where R is the hyperfinite II_1 factor, is not even a Polish group, so is not isomorphic to $\mathcal{U}(R)/\mathbb{T}$ as a topological group. That is, $\text{Int}(R)$ is a proper dense subgroup of the Polish group $\text{Aut}(R)$, so it cannot be Polish while $\mathcal{U}(R)/\mathbb{T}$ is Polish.

It is clear that φ is a continuous invariant function generating the neighborhood basis of 1 by the openness of $\text{Int}(M)$. Therefore the proof is finished thanks to Theorem 3.6. \square

Remark 3.27. In general, the automorphism group $\text{Aut}(M)$ of a von Neuman algebra M is not a SIN group. To see this, let $R = \bigotimes_{n=1}^{\infty} (M_2(\mathbb{C}), \tau_2)$ be the hyperfinite AFD II_1 factor, where $\tau_2 := \frac{1}{2}\text{Tr}$ is the normalized trace on $M_2(\mathbb{C})$. Let S be the subset of R consisting of elementary tensors:

$$S := \{x_1 \otimes x_2 \otimes \cdots \otimes x_n \otimes 1 \otimes \cdots; x_i \in M_2(\mathbb{C}), 1 \leq i \leq n, n \in \mathbb{N}\}.$$

Since $(R)_1$ is strongly-separable and metrizable, $S \cap (R)_1$ is strongly separable. Hence we may take a dense sequence $D = \{z_n\}_{n=1}^{\infty}$ in $S \cap (R)_1$. Since $\text{span}(S)$ is σ -strongly dense in R , $\text{span}(D)$ is also σ -strongly dense in R . We may thus define a left-invariant metric d on $\text{Aut}(R)$ by

$$d(\alpha, \beta) := \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{2^k} \|\alpha(z_k) - \beta(z_k)\|_2, \quad \alpha, \beta \in \text{Aut}(R).$$

d is indeed a metric, and the topology determined by d coincides with the u -topology in $\text{Aut}(R)$. On the other hand, let $\{\alpha_k\}_{k=1}^{\infty} \subset \text{Aut}(R)$ be a sequence of automorphisms determined by

$$\alpha_k(x_1 \otimes x_2 \otimes \cdots) := x_k \otimes x_1 \otimes x_2 \otimes \cdots \otimes x_{k-1} \otimes x_{k+1} \otimes x_{k+2} \otimes \cdots.$$

(Such α_k exists, and actually since α_k can be written as $\alpha'_k \otimes \text{Id}$, where α'_k is an automorphism of $M_2(\mathbb{C})^{\otimes k}$, and since all automorphisms of a type I factor are inner, they are implemented by unitaries in $\mathcal{U}(R)$). $\{\alpha_k\}_{k=1}^{\infty}$ is a d -Cauchy sequence. Indeed, given $\varepsilon > 0$, there exists $N \in \mathbb{N}$ such that $\sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{1}{2^n} \cdot 2 < \varepsilon$. Then there exists $l_N \in \mathbb{N}$ such that each α_k ($1 \leq k \leq l_N$) can be written as

$$z_k = x_1^{(k)} \otimes \cdots \otimes x_{l_N}^{(k)} \otimes 1 \otimes \cdots \quad (1 \leq k \leq l_N).$$

Then for $n, m \geq l_N + 1$ and $1 \leq k \leq l_N$, we have

$$\begin{aligned} \alpha_n(z_k) &= 1 \otimes x_1^{(k)} \otimes \cdots \otimes x_{l_N}^{(k)} \otimes 1 \otimes \cdots \\ &= \alpha_m(z_k), \end{aligned}$$

which implies

$$\begin{aligned} d(\alpha_n, \alpha_m) &= \sum_{k=N+1}^{\infty} \frac{1}{2^k} \|\alpha_n(z_k) - \alpha_m(z_k)\|_2 \\ &\leq \sum_{k=N+1}^{\infty} \frac{1}{2^k} \cdot 2 < \varepsilon. \end{aligned}$$

Thus $\{\alpha_n\}$ is d -Cauchy. However, for $x \in \text{span}(S)$, we have, for all large enough $k \in \mathbb{N}$, that

$$\alpha_k(x) \in \mathbb{C} \otimes \bigotimes_{k=2}^{\infty} (M_2(\mathbb{C}), \tau_2) \subsetneq R.$$

We then show

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\alpha_k(x) - 1 \otimes x\|_2 = 0, \quad x \in R.$$

Let $x \in R$ and $\varepsilon > 0$ be given. By the σ -strong density of $\text{span}(S)$ in R , there is $x_0 \in \text{span}(S)$ such that $\|x - x_0\|_2 < \frac{\varepsilon}{2}$ holds. By the above observation, there is $k_0 \in \mathbb{N}$ such that $\alpha_k(x_0) = 1 \otimes x_0$ for all $k \geq k_0$. We then see that for $k \geq k_0$,

$$\begin{aligned} \|\alpha_k(x) - 1 \otimes x\|_2 &\leq \|\alpha_k(x - x_0)\|_2 + \|\alpha_k(x_0) - 1 \otimes x\|_2 \\ &\leq \|x - x_0\|_2 + \|1 \otimes x_0 - 1 \otimes x\|_2 \\ &= 2\|x - x_0\|_2 < \varepsilon. \end{aligned}$$

Since $\varepsilon > 0$ is arbitrary, we have the claim. This shows that the d -limit of $\{\alpha_k\}_{k=1}^{\infty}$, if exists, cannot be surjective hence not an automorphism of R . This shows $\{\alpha_k\}_{k=1}^{\infty}$ does not d -converge. Hence d is not complete. Since the uniform structure given by d is the left-uniform structure of the topological group $\text{Aut}(R)$, we see that $\text{Aut}(R)$ is not a SIN group.

3.7 Hereditary Properties of Finite Type Polish Groups

The permanence properties of the class \mathcal{U}_{fin} under several algebraic operations are summarized as follows.

Operation	$\mathcal{U}_{\text{fin}}?$
Closed subgroup $H < G$	YES
Countable direct product $\prod_{n>1} G_n$	YES
Semidirect product $G \rtimes H$	NO
Quotient G/N	NO
Extension $1 \rightarrow N \rightarrow G \rightarrow K \rightarrow 1$	NO
Projective limit $\varprojlim_{\leftarrow} G_n$	YES

As can be seen from the above table, finiteness property is surprisingly delicate and can easily be broken under natural operations.

4 Popa's problem

4.1 Affirmative Answers

Let us return to Popa's Problem 3.10: Let G be a unitarily representable Polish SIN-group. Is G of finite type?

Although we are not able to provide complete answer to it, Theorem 3.6 gives affirmative answers to the problem for the following classes of Polish groups:

Theorem 4.1. *Popa's problem has affirmative answers for the following class of Polish group G :*

- (1) *Locally compact groups.*
- (2) *Amenable groups.*

4.2 Strategy for the General Case: Compactness Argument

One strategy, which we explain below, is to prove the weak-compactness of the orbit of positive definite functions and then to apply our characterization Theorem 3.6. Let G be a unitarily representable Polish SIN-group. Recall once again the folklore Theorem 3.9. Let $\varphi \in \mathcal{P}_1(G)$ be a function which satisfies condition (iv) of Theorem 3.9. So for each closed set $A \subset G$ with $e_G \notin A$, there exists $\delta = \delta_A > 0$ such that $\sup_{g \in A} |\varphi(g)| = 1 - \delta_A$. Let

$$\mathcal{O}_\varphi := \{\varphi_g; g \in G\}, \quad \varphi_g(h) := \varphi(g^{-1}hg),$$

for $g, h \in G$. Let $C_b(G)$ be the complex Banach space of all continuous bounded functions on G with norm

$$\|f\| := \sup_{g \in G} |f(g)|, \quad f \in C_b(G).$$

Then \mathcal{O}_φ is a uniformly bounded subset of $C_b(G)$. Now we remark the following sufficient condition for G to be of finite type.

Theorem 4.2. *Let $\varphi \in \mathcal{P}_1(G)$ which satisfies the condition in (2) of Lemma 3.9. If \mathcal{O}_φ is relatively weakly compact in $C_b(G)$, then G is of finite type.*

Thus, we are done if we solve the following problem:

Question 4.3. Let G be a unitarily representable Polish SIN-group, $\varphi \in \mathcal{P}_1(G)$ separating all closed subsets A with $e_G \notin A$ and e_G as in Theorem 3.9. Is \mathcal{O}_φ relatively weakly compact?

We do not know the answer yet, but on the other hand, we know that \mathcal{O}_φ is certainly relatively compact with respect to compact-open topology.

Proposition 4.4. *Let G be a unitarily representable Polish SIN-group, and let $\varphi \in \mathcal{P}_1(G)$. Then the convex hull $\text{co}(\mathcal{O}_\varphi)$ of the orbit space \mathcal{O}_φ is relatively compact in $C_b(G)$ with respect to the compact-open topology.*

The proof uses Ascoli-Arzelà Theorem for k -spaces.

Using above Proposition 4.4, we can state another possible strategy for Popa's embedding problem:

Theorem 4.5 (Lindelöf property). *Let G be a unitarily representable Polish SIN-group, $\varphi \in \mathcal{P}_1(G)$ be a function separating all closed subsets A with $e_G \notin A$ and e_G . If the pointwise-closure of $\text{co}(\mathcal{O}_\varphi)$ is norm-separable, then G is of finite type.*

The proof uses a slight modification of Namioka-Asplund Theorem and Ryll-Nardzewski fixed point Theorem. The details can be found in the first author's thesis [1], Chapter 10. Finally, we would like to add a question:

Question 4.6. When is $K = \overline{\text{co}}(\mathcal{O}_\varphi)$ norm-separable?

5 Some Questions

Finally let us discuss some questions related to Popa's problem. Recently L. van den Dries and S. Gao [8] constructed a Polish group G with a compatible bi-invariant metric, which does not have Lie sum (see [8] for the definition). On the other hand, we proved in [2] that if G belongs to the class \mathcal{U}_{fin} , then G has a complete topological Lie algebra, hence a fortiori has a Lie sum. Thus G is not of finite type. Therefore it is interesting to consider the following questions:

Question 5.1. Is van den Dries-Gao's Polish group unitarily representable?

Hopefully Theorem 3.6 will play the role for solving the above questions. Also, since l^p belongs to \mathcal{U}_{fin} if and only if $1 \leq p \leq 2$, it is worth considering whether

Question 5.2. Let \mathcal{H} be a separable infinite-dimensional Hilbert space. Does $\mathcal{U}(\mathcal{H})_p := \{u \in \mathcal{U}(\mathcal{H}); 1 - u \in S^p(\mathcal{H})\}$ belong to \mathcal{U}_{fin} for some $1 \leq p < 2$? Here $S^p(\mathcal{H})$ denotes the space of Schatten p -class operators.

It is unlikely that the same method as in the case of $p = 2$ works for $p \neq 2$.

Acknowledgements

The authors thank the Yukawa Institute for Theoretical Physics at Kyoto University. Discussions during the YITP workshop YITP- on "Hierarchy in Physics through Information – It's Control and Emergence –" were useful to complete this work.

References

- [1] H. Ando, Polish Groups of Finite Type and Their Lie Algebras, Doctoral Thesis, Kyoto University (2012)
- [2] H. Ando, Y. Matsuzawa, Lie group-Lie algebra correspondences of unitary groups in finite von Neumann algebras, Hokkaido Math. J. vol. **41**, No.1 (2012), pp31–99.
- [3] H. Ando, Y. Matsuzawa, On Polish Groups of Finite Type, Publications of RIMS Volume **48**, Issue 2, (2012), pp389–408.
- [4] W. Banaszczyk, *Additive subgroups of topological vector spaces*, Lecture Notes in Mathematics, 1466. Springer-Verlag, Berlin, 1991.

- [5] John. B. Conway, *A course in functional analysis*, Springer (1990).
- [6] D. Beltita, Lie theoretic significance of the measure topologies associated with a finite trace, *Forum Math.* **22** (2010), 241–253.
- [7] J. Dixmier, *C*-algebras*, North-Holland Mathematical Library vol. 15, 1977.
- [8] L. van den Dries, S. Gao, A Polish group without Lie sums, *Abh. Math. Sem. Hambourg* **79** (2009) 135–147.
- [9] M. Fabian, P. Habala, P. Hájek, V. Montesinos, V. Zizler, *Banach Space Theory: The Basis for Linear and Nonlinear Analysis*, CMS Books in Mathematics/Ouvrages de Mathématiques de la SMC. Springer, New York, 2011.
- [10] J. Feldman, Isomorphisms of finite type II rings of operators, *Ann. Math. (2)*, **63**, (1956), 565–571.
- [11] A. Furman, On Popa’s Cocycle Superrigidity Theorem, *Int. Math. Res. Not. IMRN* (2007), 1–46.
- [12] J. Galindo, On group and semigroup compactifications of topological groups, Online Note
<http://www.mat.ucm.es/imi/documents/topologicalGroups/JGalindo.pdf>
- [13] S. Gao, Unitary group actions and Hilbertian Polish metric spaces. in *Logic and its applications*, *Contemp. Math.* **380**, AMS Providence, RI (2005), 53–72.
- [14] S. Gao, V. Pestov, On a universality property of some abelian Polish groups, *Fund. Math.* **179** (2003), 1–15.
- [15] T. Hiraï, E. Hiraï, Positive definite class functions on a topological group and characters of factor representations, *J. Math. Kyoto. Univ.* **45** (2005), 355–379.
- [16] K. Hofmann, S. Morris and M. Stroppel, Varieties of topological groups, Lie groups and SIN-groups, *Colloq. Math.* **70** (1996), 151–163.
- [17] R. V. Kadison, I. M. Singer, Some remarks on representations of connected groups, *Proc. Nat. Acad. Sci.* **38** (1952), 419–423.
- [18] M. Megrelishvili, Reflexively but not unitarily representable topological groups, *Topol. Proc.* **25** (2000), 615–625.
- [19] J. Peterson, T. Sinclair, On cocycle superrigidity for Gaussian actions, *arXiv:0910.3958*, (2009).
- [20] E. Nelson, Notes on non-commutative integration, *J. Funct. Anal.* **15** (1974), 103–116.

- [21] S. Popa, Cocycle and orbit equivalence superrigidity for malleable actions of w -rigid groups, *Invent. Math.* **170** (2007), 243–295.
- [22] I. J. Schoenberg, Metric spaces and positive definite functions, *Trans. Amer. Math. Soc.* **44** (1938), 522–536.
- [23] M. Takesaki, *Theory of Operator Algebras*. I (2002), II (2003) and III (2003). Springer-Verlag, Berlin.
- [24] J. von Neumann, Zur Algebra der Funktionaloperationen und Theorie der normalen Operatoren, *Math. Ann.* **102** (1) (1929), 370–427.
- [25] S. Willard, *General Topology*, Dover Publications (2004).

Analysis of complex networks from the standpoint of the category theoretical duality

春名 太一

神戸大学大学院理学研究科地球惑星科学専攻

e-mail: tharuna@penguin.kobe-u.ac.jp

tel: +81-78-803-5739, fax: +81-78-803-5739

概要

生物のネットワークに対しては一般に二つの在り方が考えられる。第一の静的-構造的在り方では、ネットワークはその上を流れる何かの輸送経路である。第二の動的-機能的在り方では、ネットワークはシステムの構成要素の活動を貼り合わせて構成されるパターンである。本稿ではまず、これら二つの在り方が圏論的な双対性 (随伴関係) によって定式化でき、圏論による議論からそれぞれに対応する自然なネットワーク構造=経路概念が導出できることを示す。第一の在り方に対する経路概念は有向経路であり、第二の在り方に対する経路概念は側方経路と呼ばれるものになる。次に、それぞれの経路に対する矢印の媒介中心性を導入してこのような双対性がどのように実際の生物ネットワークに埋め込まれているかを調べる。両者の間には一方の値が高ければ他方は低いというトレードオフ関係が観測されることを示す。これは、ネットワーク上の輸送とネットワークの一体性の保持という特性間のネットワーク内でのトレードオフ関係とみることができる。このようなトレードオフ関係を示すネットワークがどのようにして出現しうるかを説明するために、両者を考慮したエネルギー関数に基づく複雑ネットワークの最適化モデルを提案し、ネットワークの一体性の保持が優位な場合にのみ進化したネットワークにおいて上述のトレードオフ関係が出現することを数値実験により示す。また、標準的な複雑ネットワーク解析により進化したネットワークが実際の生物ネットワークに広くみられる定性的性質を持つことをも示す。

1 序

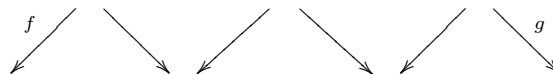
ここ十数年来、生物・社会・情報技術などに関する大規模な相互作用ネットワークのデータベースが利用可能となった。複雑ネットワークの科学の分野では、これらのネットワークに潜む構造や機能を明らかにするために様々な数理的指標や数理モデルが考案されてきた [2, 23, 4]。しかし一方で、ネットワークの意味を忘れてグラフ構造のみに注目した数理的研究に対する生物学者からの批判も存在する [3]。だからといって、個別のネットワークの意味に拘泥するばかりでは普遍的な数理的解析を行うことは困難になる。ネットワークの意味を何らかの形で考慮した数理的解析を行うにはネットワークの意味について議論することが可能となるような数理的な言語が必要であろう。本稿では、圏論 [21] にその可能性を見出し、辺に向きのある有向ネットワークについて、特に生物のネットワークを念頭に置いて頂点および矢印の意味を圏論を通じて議論することで複雑ネットワーク研究の新たな方向性を模索する。

圏論の生物学への応用を意図した研究の歴史は 1950 年代末の R. Rosen による試みまで遡れる [28, 29]。Rosen は当初は代謝のネットワークを維持する機構のモデルを圏論を通じて考案したが、ネットワークという視点はやがて消滅していったように見える。その後も圏論を用いて生物システムの作動を記述する試みは幾つかあるが (例えば、[8, 36] など)、いずれも抽象的なモデルの段階に留まっているように見える。本稿では、これまで著者らが模索してきた方向性 [17, 14, 18, 15, 16] を理論的にも徹底し、また具体的なデータの解析という文脈にも載せることを試みる。また、本稿は一見静的にしかみえない構造を動的にみるための方法論の提示ということも意図している。

生物に関わる有向ネットワークが何を表現しているかに関して、一般に次の二つのネットワークの在り方が考えられよう：(A) 有向ネットワークは、その上を何かが流れる通路である。(B) 有向ネットワークは、システムの個々の要素の活動（プロセスと呼ぶ）を貼り合わせて出来上がったパターンである。(A) はどちらかという構造-静的な在り方であり、(B) は機能的-動的な在り方ということも出来よう。例えば、ニューロンを頂点とし、その間のシナプス結合を矢印とする神経ネットワークを考えると、(A) では神経ネットワークは（電気もしくは化学）信号が流れる通路であり、(B) では、個々のニューロンは他のニューロンからの信号に応じて自身の応答を出力するという情報処理の担体とみなされる。生態系の被食者-捕食者関係によるネットワークや、遺伝子の制御ネットワークなども同様である。両者の (A) の在り方を簡単に述べれば、前者では炭素がネットワーク上を流れ、後者では遺伝子の ON-OFF についての指令が流れる、と考えられよう。では、これら二つの在り方に対応する自然なネットワークの構造は考えられるだろうか。(A) については、矢印に沿って情報やモノが流れるとすれば、有向経路が自然な構造であると考えられよう。では、(B) についてはどうだろうか。直感的に導き出すことは難しいように思える。本稿では、この問題を圏論を用いて定式化することで一つの解答を与えたい。

序を終えるにあたって、圏論を用いずに概略を説明しよう。(A) に対応する有向経路は、次のような矢印を頂点へと変換するネットワークの変換 R から生み出されると考えられる：有向ネットワーク $G = (A, N, \partial_0, \partial_1)$ に対して（ただし、 A は矢印の集合、 N は頂点の集合、 ∂_0, ∂_1 はどちらも A から N への写像で、それぞれ矢印に対してその始点もしくは終点を対応させる写像）、有向ネットワーク $R(G) = (A', N', \partial'_0, \partial'_1)$ は $A' = \{(f, g) \in A \times A \mid \partial_1(f) = \partial_0(g)\}$, $N' = N$, また $(f, g) \in A'$ に対して $\partial'_0(f, g) = f$, $\partial'_1(f, g) = g$ で定義される。このとき、 $R(G)$ の矢印集合は長さ 2 の有向経路の全体の集合である。 G に対して R を 2 回施すと、長さ 3 の有向経路の全体の集合が $R^2(G)$ の矢印集合として現れる。一般に、 $n \geq 0$ に対して $R^n(G)$ の矢印集合は、 G の長さ $n+1$ の有向経路全体の集合となる。ただし、ここでは有向経路は頂点間ではなく、矢印間で考えていることに注意されたい。

ネットワークの変換 R には、双対的なネットワークの変換 L が存在する（圏論の言葉でいえば、 L は R の左随伴関手）。 L は頂点を矢印へと変換するネットワークの変換であり、有向ネットワーク $G = (A, N, \partial_0, \partial_1)$ を次で定義される有向ネットワーク $L(G) = (A', N', \partial'_0, \partial'_1)$ へと変換する： $A' = N$, $N' = N \times \{0, 1\}$, また $x \in A$ に対して、 $\partial'_0(x) = [(x, 0)]$, $\partial'_1(x) = [(x, 1)]$. ただし、 $(x, 1)R(y, 0) \Leftrightarrow \partial_0(f) = x$ かつ $\partial_1(f) = y$ となる $f \in A$ が存在する、という $N \times \{0, 1\}$ 上の関係 R で生成される同値関係であり、 $[(x, i)]$ は (x, i) の同値類を表す。実は、以下の節で議論するとおり、変換 L が (B) の在り方に対応すると考えられ、以下のように有向経路に双対的と思える側方経路と呼ばれる構造が導出される。変換 L において頂点が矢印へと対応させられることは頂点におけるプロセスを矢印一本で表現していることになる。このとき、 G 内の矢印 f は $L(G)$ において矢印 $\partial'_0(f)$ と $\partial'_1(f)$ をつなぐ頂点 $[(\partial_0(f), 1)] (= [(\partial_0(f), 1)])$ へとうつる。標語的に、「相互作用はプロセス間のインターフェイス」といえよう。このアイデアは、数学的对象としては $f \mapsto [(\partial_0(f), 1)]$ で定義される写像 $\varphi : A \rightarrow N$ として表現できる。 G の二つの矢印 f, g に対して $\varphi(f) = \varphi(g)$ となるための必要十分条件は次のような f と g を繋ぐジグザグ列が存在することであることが容易に分かる：



ただし、両端の状況は 4 通りの可能性があり、その内の一つを書いていることに注意。このような矢印のジグザグ列を側方経路と呼ぶ。

以上のように、(A) と (B) のネットワークの在り方に対して、ネットワークの変換 R と L の双対性から有向経路、側方経路がそれぞれについて「自然な」構造であることが見出される。ただし、「自然な」という形容詞についてもう少し説明する必要がある。 L では、プロセスが矢印一本で表現されていたが、より複雑な対象で表現することも出来よう。実は、このような表現の全てを考えたとき、 L に対応する表現が特別

な位置を占める (圏論の言葉では普遍性を満たす) ことが示される。つまり、各表現に対して「相互作用はプロセス間のインターフェイス」に対応する矢印集合上の写像とこの写像が引き起こす矢印集合上の同値関係が定義され、上で定義した写像 φ の引き起こす矢印集合上の同値関係が、これらの同値関係の中で二項関係の包含関係に関して最小、となるのである (つまり、最も細かい分割)。

本稿の構成は以下のとおりである。第 2 節では以上の概略で述べた事項の圏論による正確な定式化を述べる。第 2 節の内容は、(B) の在り方に対して側方経路が自然に対応する構造であることの数学的説明と考えてよい。第 3 節では、有向経路と側方経路それぞれに基づく矢印の中心性 (矢印の重要度) を導入し、実際の生物ネットワークにおいて両者の間にどのような関係があるのか調べる。結果的に、様々なタイプの生物ネットワークにおいて両者の間にはトレードオフの関係があることが見出される。第 4 節では、第 3 節でみられたトレードオフの関係を説明できるネットワークの進化モデルを提案する。有向経路と側方経路それぞれに関する効率性 (最短経路長の逆数の和の平均値) を導入し、その線形結合としてエネルギー関数を定義する。エネルギー関数を最適化する方向にネットワークを進化させたときに、側方経路に関する効率性への重みが大きいときに限り、上述のトレードオフが出現することを数値実験によって示す。さらに、標準的な複雑ネットワーク解析によって進化したネットワークが実際の生物ネットワークと定性的によく似た特徴をもつことを示す。

2 有向ネットワークのインターフェイス理論およびその一般化

本節では、圏論の working knowledge を読者に仮定するが、必要な予備知識は [21] の該当する部分で十分である。

2.1 米田の埋め込みに沿った左 Kan 拡張

本節では米田の埋め込みに沿った左 Kan 拡張について後で必要な事項を述べる。 \mathcal{C} を小圏、 \mathcal{D} を余完備な圏、 $M : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{D}$ を関手とする。また、 $\mathbf{y} : \mathcal{C} \rightarrow \hat{\mathcal{C}}$ を米田の埋め込みとする。ただし、 $\hat{\mathcal{C}}$ は \mathcal{C} 上の前層 (ここでは、 \mathcal{C} から集合圏 \mathbf{Set} への反変関手) の圏で、 \mathcal{C} の対象 c に対し、 $\mathbf{y}(c) = \mathcal{C}(_, c)$ である。 M の \mathbf{y} に沿った左 Kan 拡張 $\mathbf{Lan}_{\mathbf{y}} M$ とは、 $\hat{\mathcal{C}}$ から \mathcal{D} への関手で、 $\hat{\mathcal{C}}$ の対象 G に対して $\mathbf{Lan}_{\mathbf{y}} M(G)$ は次の余極限

$$\mathbf{Lan}_{\mathbf{y}} M(G) = \operatorname{colim} \quad \operatorname{Elts}(G) \longrightarrow \mathcal{C} \xrightarrow{M} \mathcal{D} .$$

で与えられる。ここで、 $\operatorname{Elts}(G)$ は G の要素の圏で、対象は \mathcal{C} の対象 c と $x \in G(c)$ の対 (c, x) で、 (c, x) から (c', x') への射の集合は \mathcal{C} の射 $f : c \rightarrow c'$ で、 $G(f)(x') = x$ を満たすもの全体であるような圏である。また、 $\mathbf{y}_G : \operatorname{Elts}(G) \rightarrow \mathcal{C}$ は \mathcal{C} への射影である。以下で示すように、関手 $\mathbf{Lan}_{\mathbf{y}} M$ は Hom 関手を右随伴として持つ。線型代数におけるテンソル積と Hom との間の随伴関係との類似性を念頭に置いて以下では $\mathbf{Lan}_{\mathbf{y}} M(G)$ を $G \otimes M$ と書くことにする¹。

$\hat{\mathcal{C}}$ の射 $\alpha : G \rightarrow H$ に対して \mathcal{D} の射 $\alpha \otimes M : G \otimes M \rightarrow H \otimes M$ は次のように与えられる。 $\{\mu_{(c,x)}^{M,G} : M_{G(c,x)} = M(c) \rightarrow G \otimes M\}_{(c,x) \in \operatorname{Elts}(G)}$ を M_G 上の余極限錐とする。 $x \in G(c)$ 、 $c \in \mathcal{C}$ に対して、 $\alpha_c(x) \in H(c)$ であるから、 $\{\mu_{(c,\alpha_c(x))}^{M,H} : M_{H(c,\alpha_c(x))} = M(c) \rightarrow H \otimes M\}_{(c,x) \in \operatorname{Elts}(G)}$ は M_G 上の余極限錐となる。ただし、 $\mu^{M,H}$ は M_H 上の余極限錐である。 $G \otimes M$ の普遍性から $\mu_{(c,\alpha_c(x))}^{M,H} = \beta \circ \mu_{(c,x)}^{M,G}$ なる一意的な射 $\beta : G \otimes M \rightarrow H \otimes M$ として $\alpha \otimes M$ が定まる。

¹係数に対応するのは圏 \mathcal{C} なので $G \otimes_{\mathcal{C}} M$ と書くべきだが、以下では \mathcal{C} は固定されていることと、記号を簡単にするとといった理由から以下では \mathcal{C} を省略する。

次の図式は同型を除いて可換となる:

$$\begin{array}{ccc}
 \mathcal{C} & \xrightarrow{M} & \mathcal{D} \\
 & \searrow y & \uparrow \text{Lan}_y M \\
 & & \hat{\mathcal{C}}.
 \end{array}$$

つまり、 $y \otimes M = M$.

関数 $(\) \otimes M : \hat{\mathcal{C}} \rightarrow \mathcal{D}$ は右随伴 $\mathcal{D}(M(\), _1) : \mathcal{D} \rightarrow \hat{\mathcal{C}}$ を持つ。つまり、自然同型

$$\mathcal{D}(G \otimes M, F) = \hat{\mathcal{C}}(G, \mathcal{D}(M(\), F))$$

が成立する。ただし、 $G \in \hat{\mathcal{C}}, F \in \mathcal{D}$ である。実際、自然変換 $\eta^{M,G} : G \rightarrow \mathcal{D}(M(\), G \otimes M)$ を各 $c \in \mathcal{C}$ で $\eta_c^{M,G} : G(c) \rightarrow \mathcal{D}(M(c), G \otimes M) : x \mapsto \mu_{(c,x)}^{M,G}$ 定義すると、任意の射 $\alpha : G \rightarrow \mathcal{D}(M(\), F)$ に対して、 $\alpha = \mathcal{D}(M(\), \hat{\alpha}) \circ \eta^{M,G}$ となるような一意な射 $\hat{\alpha} : G \otimes M \rightarrow F$ が以下で定まる: $\{\alpha_c(x) : M_G(c, x) = M(c) \rightarrow F\}_{(c,x) \in \text{Elts}(G)}$ が M_G 上の余錐なので、任意の $(c, x) \in \text{Elts}(G)$ に対して $\alpha_c(x) = \hat{\alpha} \circ \mu_{(c,x)}^{M,G}$ となる一意な射 $\hat{\alpha} : G \otimes M \rightarrow F$ が存在する。任意の $(c, x) \in \text{Elts}(G)$ に対して $\alpha_c(x) = \hat{\alpha} \circ \mu_{(c,x)}^{M,G}$ となることは $\alpha = \mathcal{D}(M(\), \beta) \circ \eta^{M,G}$ と同値である。

$$\begin{array}{ccc}
 G & \xrightarrow{\eta^{M,G}} & \mathcal{D}(M(\), G \otimes M) & & G \otimes M \\
 & \searrow \alpha & \downarrow \mathcal{D}(M(\), \hat{\alpha}) & & \downarrow \hat{\alpha} \\
 & & \mathcal{D}(M(\), F) & & F
 \end{array}$$

2.2 表現のインターフェイス

\Uparrow を次のグラフで自由に生成される圏とする:

$$0 \begin{array}{c} \xrightarrow{m_0} \\ \xrightarrow{m_1} \end{array} 1.$$

このとき、 $\hat{\Uparrow}$ は有向ネットワークの圏となる²。実際、 $\hat{\Uparrow}$ の対象 G に対して、 $G(0)$ は頂点集合、 $G(1)$ は矢印集合、 $G(m_0)$ は各矢印に対してその始点を対応させる函数、 $G(m_1)$ は各矢印に対してその終点を対応させる函数となる。 \Uparrow は有向ネットワークのデータとしてのタイプを表していると考えられ、任意の関数 $M : \Uparrow \rightarrow \mathcal{D}$ はその表現となる。以下では、一般に小圏 \mathcal{C} からの関数 $M : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{D}$ を \mathcal{C} の表現と呼ぶことにする。

表現 $M_0 : \Uparrow \rightarrow \hat{\Uparrow}$ を以下で定義する:

$$M_0(0) = p_0 \xrightarrow{a} p_1, \quad M_0(1) = q_0 \xrightarrow{b_0} q_1 \xrightarrow{b_1} q_2,$$

$m_0 \ a = b_0, m_1 \ a = b_1$. ただし、 $M_0(m_i)(1)(a) = m_i \ a, i = 0, 1$ と書いた。 $M_0(0)$ が頂点の表現であり、 $M_0(1)$ が頂点間の相互作用 (矢印) の表現であると考えられる。序の言葉でいえば、 M_0 では頂点におけるプロセスが一本の矢印 a で表され、有向ネットワークの頂点間の矢印は $M_0(1)$ で二つの矢印 (プロセス) b_0, b_1 を繋ぐ頂点 q_1 として表されている (相互作用はプロセス間のインターフェイス)。序で考えたネットワーク変換 L は M_0 の米田の埋め込みに沿った左 Kan 拡張であり、 R はその右随伴となっている。つまり、 $L = (\) \otimes M_0, R = \hat{\Uparrow}(M_0(\), _1)$.

$M_0(1)$ の頂点 q_1 は $M_0(m_0)$ と $M_0(m_1)$ の pullback として考えることができる。そこで、一般のインターフェイスの定義として以下を与える:

²グラフとネットワークは同義語だが、本稿では特に $\hat{\Uparrow}$ の対象を有向ネットワークと呼び、有向グラフが圏を自由生成するなどというときにはグラフという用語を用いる。

定義 2.1 小圏 \mathcal{C} の完備な圏 \mathcal{D} における表現 $M : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{D}$ のインターフェイスとは以下で定義される関手 $\text{Int}_M : \mathcal{C}^{\text{op}} \rightarrow \mathcal{D}$ のことである。まず、 $c \in \mathcal{C}$ に対して

$$\text{Int}_M(c) = \lim_{\text{Elts}(\mathbf{y}(c)) \xrightarrow{c} \mathcal{C} \xrightarrow{M} \mathcal{D}}$$

とする。射 $f : c' \rightarrow c \in \mathcal{C}$ に対しては、 $\{\nu_{(c'',g)}^{M,c'} : \text{Int}_M(c') \rightarrow M_{c'}(c'',g) = M(c'')\}_{(c'',g) \in \text{Elts}(\mathbf{y}(c'))}$ を $M_{c'}$ 上の極限錐として、 $\{\nu_{(c'',fg)}^{M,c} : \text{Int}_M(c) \rightarrow M_c(c'',fg) = M(c'')\}_{(c'',g) \in \text{Elts}(\mathbf{y}(c'))}$ が $M_{c'}$ 上の錐となることから、 $\nu_{(c'',g)}^{M,c'} \circ \alpha = \nu_{(c'',fg)}^{M,c}$ なる一意的な射 $\alpha : \text{Int}_M(c) \rightarrow \text{Int}_M(c')$ が定まることから $\text{Int}_M(f) = \alpha$ とする。

2.3 インターフェイス変換

次に、序で述べた写像 φ に対応するインターフェイス変換を導入する。

定義 2.2 小圏 \mathcal{C} の両完備な圏 \mathcal{D} における表現 $M : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{D}$ と $G \in \hat{\mathcal{C}}$ が与えられたとする。 $x \in G(c)$, $c \in \mathcal{C}$ に対して $\varphi_c^{M,G}(x) = \mu_{(c,x)}^{M,G} \circ \nu_{(c,\text{id}_c)}^{M,c}$ とし \mathcal{C} 上の反変関手 G から共変関手 $\mathcal{D}(\text{Int}_M(\), G \otimes M)$ への自然変換 $\varphi^{M,G}$ が定まる³。これを、 G の M に関するインターフェイス変換と呼ぶ。

$$\begin{array}{ccc} \text{Int}_M(c) & \xrightarrow{\nu_{(c,\text{id}_c)}^{M,c}} & M(c) \xrightarrow{\mu_{(c,x)}^{M,G}} G \otimes M. \\ & \searrow & \nearrow \\ & & \varphi_c^{M,G}(x) \end{array}$$

定義 2.2 のインターフェイス変換が実際に反変関手から共変関手への自然変換となっていることを確かめよう。以下では、 $x \in G(c)$, $f : c' \rightarrow c \in \mathcal{C}$ に対して $G(f)(x) = x \cdot f$ と書く。

命題 2.3 小圏 \mathcal{C} の両完備な圏 \mathcal{D} における表現 $M : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{D}$ と $G \in \hat{\mathcal{C}}$ が与えられたとする。任意の \mathcal{C} の射 $f : c' \rightarrow c$ に対して以下の図式は可換である。

$$\begin{array}{ccc} G(c) & \xrightarrow{\varphi_c^{M,G}} & \mathcal{D}(\text{Int}_M(c), G \otimes M) \\ G(f) \downarrow & & \uparrow (\) \circ \text{Int}_M(f) \\ G(c') & \xrightarrow{\varphi_{c'}^{M,G}} & \mathcal{D}(\text{Int}_M(c'), G \otimes M) \end{array}$$

証明 任意の $x \in G(c)$ に対して $\varphi_c^{M,G}(x) = \varphi_{c'}^{M,G}(x \cdot f) \circ \text{Int}_M(f)$ が成り立つことを示せばよいが、これは以下の可換図式を辿ることから従う：

$$\begin{array}{ccccc} \text{Int}_M(c) & \xrightarrow{\nu_{(c,\text{id}_c)}^{M,c}} & M(c) & \xrightarrow{\mu_{(c,x)}^{M,G}} & G \otimes M. \\ \text{Int}_M(f) \downarrow & \searrow \nu_{(c',f)}^{M,c} & \uparrow M(f) & & \\ \text{Int}_M(c') & \xrightarrow{\nu_{(c',\text{id}_{c'})}^{M,c'}} & M(c') & \xrightarrow{\mu_{(c',x \cdot f)}^{M,G}} & G \otimes M. \end{array}$$

□

³ \tilde{G} を合成 $\mathcal{C}^{\text{op}} \times \mathcal{C} \xrightarrow{\pi_1} \mathcal{C}^{\text{op}} \xrightarrow{G} \mathbf{Set}$, $H = \mathcal{D}(\text{Int}_M(\), G \otimes M)$ として、 \tilde{H} を合成 $\mathcal{C}^{\text{op}} \times \mathcal{C} \xrightarrow{\pi_2} \mathcal{C} \xrightarrow{H} \mathbf{Set}$ で定義すると、 $\varphi^{M,G}$ は \tilde{G} から \tilde{H} への対角自然変換となっている。

2.4 圏 IT_G

定義 2.4 \mathcal{C} を小圏とする。 $G \in \hat{\mathcal{C}}$ に対し、圏 IT_G を以下で定義する：対象は、関手 $H : \mathcal{C} \rightarrow \text{Set}$ と G から H への自然変換 $\varphi : G \rightarrow H$ の組 (H, φ) 。ただし、反変関手 G から共変関手 H への自然変換 φ とは、写像の族 $\{\varphi_c : G(c) \rightarrow H(c)\}_{c \in \mathcal{C}}$ で、任意の射 $f : c' \rightarrow c \in \mathcal{C}$ に対して以下の図式を可換にするものであるとする。

$$\begin{array}{ccc} G(c) & \xrightarrow{\varphi_c} & H(c) \\ G(f) \downarrow & & \uparrow H(f) \\ G(c') & \xrightarrow{\varphi_{c'}} & H(c') \end{array}$$

(H, φ) から (H', φ') への射は、自然変換 $n : H \rightarrow H'$ で、 $\varphi' = n \circ \varphi$ を満たすものである：

$$\begin{array}{ccc} H(c) & \xrightarrow{n_c} & H'(c) \\ \varphi_c \swarrow & & \searrow \varphi'_c \\ & G(c) & \end{array}$$

命題 2.3 より以下の命題が成り立つ。

命題 2.5 小圏 \mathcal{C} の両完備な圏 \mathcal{D} における表現 $M : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{D}$ と $G \in \hat{\mathcal{C}}$ が与えられたとする。このとき、 G の M に関するインターフェイス変換 $\varphi^{M,G}$ は IT_G の対象 $(\hat{\text{Int}}_M(\mathcal{C}), G \otimes M, \varphi^{M,G})$ を引き起こす。

2.5 $G \in \hat{\mathcal{C}}$ に対する IT_G の initiality

定理 2.6 任意の $G \in \hat{\mathcal{C}}$ に対し、 IT_G は始対象を持つ。特に、小節 2.2 の表現 $M_0 : \mathcal{C} \rightarrow \hat{\mathcal{C}}$ に関する G のインターフェイス変換 $\varphi^{M_0,G}$ が引き起こす IT_G の対象 $(\hat{\text{Int}}_{M_0}(\mathcal{C}), G \otimes M_0, \varphi^{M_0,G})$ は IT_G の始対象である。

証明 任意の IT_G の対象 (H, φ) に対して、 $\iota = \iota \circ \varphi^{M_0,G}$ となる射 $\iota : \hat{\text{Int}}_{M_0}(\mathcal{C}, G \otimes M_0) \rightarrow H$ が一意に存在することを示せばよい。 $\text{Int}_{M_0}(0) = M_0(0) = \mathbf{y}(1)$ より、 $\hat{\text{Int}}_{M_0}(0, G \otimes M_0) = G \otimes M_0(1) = G(0)$ となり、最左辺と最右辺を同一視したとき、各同型での元の動きを追うと $\varphi_0^{M_0,G}$ は恒等写像 $\text{id}_{G(0)}$ としてよいことが分かる。従って、 ι_0 は $\iota_0 = \text{id}_{G(0)}$ で決まる。

ι_1 を構成しよう。一般に、小圏 \mathcal{C} の表現 $M : \mathcal{C} \rightarrow \hat{\mathcal{C}}$, $G \in \hat{\mathcal{C}}$ および $c \in \mathcal{C}$ に対して、

$$G \otimes M(c) = \left[\sum_{c' \in \mathcal{C}} G(c') \cdot M(c')(c) \right] / \sim$$

となる。ただし、 \sim は $f : c' \rightarrow c'' \in \mathcal{C}$ のとき、 $x \in G(c'')$, $p \in M(c')(c)$ に対して $(x, f \cdot p) R (x, p)$ で定義される二項関係 R が生成する同値関係である。余極限錐の成分 $\mu_{(c,x)}^{M,G}(c') : M(c')(c) \rightarrow G \otimes M(c')$ は、 $p \mapsto [(x, p)]$ で与えられる。ただし、 $[(x, p)]$ は (x, p) を含む同値類。

さて、 $\text{Int}_{M_0}(1) = \{(p_1, p_0)\} = \mathbf{y}(0)$ であり、 $\hat{\text{Int}}_{M_0}(1, G \otimes M_0) = G \otimes M_0(0)$ となる。また、 $\nu_{(1, \text{id}_1)}^{M_0,1}(0)(p_1, p_0) = q_1 \in M_0(1)(0)$, $\nu_{(0, m_i)}^{M_0,1}(0)(p_1, p_0) = p_{i+1} \in M_0(0)(0)$, $i = 0, 1$ であり、 $\text{Int}_{M_0}(0) = M_0(0)$ より $\text{Int}_{M_0}(m_i) = \nu_{(0, m_i)}^{M_0,1}$, $i = 0, 1$ となる。ただし、 $i+1$ は mod 2 で考える。従って、 $x \in G(1)$ に対して $\varphi_1^{M_0,G}(x) = [(x, q_1)]$ としてよく、また、 $(\text{id}_1) \circ \text{Int}_{M_0}(m_i) : \hat{\text{Int}}_{M_0}(0, G \otimes M_0) = G(0) \rightarrow \hat{\text{Int}}_{M_0}(1, G \otimes M_0) = G \otimes M_0(0)$

は、 $x \mapsto [(x, p_{i+1})]$ となる。以上より、 $i = 0, 1$ に対して、 ι_1 は以下の図式を可換にしなければいけない:

$$\begin{array}{ccc} G \otimes M_0(0) & \xrightarrow{\iota_1} & H(1) \\ \uparrow [(\cdot, p_{i+1})] & & \uparrow H(m_i) \\ G(0) & \xrightarrow{\iota_0} & H(0) \end{array}$$

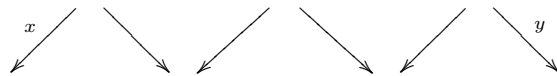
つまり、任意の $x \in G(0)$ に対して、 $\iota_1([(x, p_{i+1})]) = H(m_i) \circ \iota_0(x)$, $i = 0, 1$ が成り立たねばならない。この条件で ι_1 が定まることをみよう。まず、 $G \otimes M_0(0) = [G(0) \setminus \{p_0, p_1\} + G(1) \setminus \{q_0, q_1, q_2\}] /$ の任意の元は必ず (x, p) , $x \in G(0)$, $p \in \{p_0, p_1\}$ の形の代表元を持つ。実際、任意の $y \in G(1)$ に対して $(y, q_0) = (y, m_0 \setminus p_0) \setminus (y \setminus m_0, p_0)$, $(y, q_1) = (y, m_0 \setminus p_1) \setminus (y \setminus m_0, p_1)$, $(y, q_2) = (y, m_1 \setminus p_1) \setminus (y \setminus m_1, p_1)$ であるから。さて、 ι_1 が well-defined であることを確かめよう。そのためには、 $x = z \setminus m_0$, $y = z \setminus m_1$, $x, y \in G(0)$, $z \in G(1)$ として、 $H(m_0) \circ \iota_0(x) = H(m_1) \circ \iota_0(y)$ を示せば十分である。ところが、 ι_0 が G から H への自然変換であることから、 $H(m_0) \circ \iota_0(x) = H(m_0) \circ \iota_0(z \setminus m_0) = \iota_1(z) = H(m_1) \circ \iota_0(z \setminus m_1) = H(m_1) \circ \iota_0(y) = H(m_1) \circ \iota_0(y)$ となる。

最後に、 $\iota_1 = \iota_1 \circ \varphi_1^{M_0, G}$ であることについては、 $x \in G(1)$ に対して、 $\iota_1 \circ \varphi_1^{M_0, G}(x) = \iota_1([(x, q_1)]) = \iota_1([(x \setminus m_0, p_1)]) = H(m_0) \circ \iota_0(x \setminus m_0) = H(m_0) \circ \iota_0(x \setminus m_0) = \iota_1(x)$ で成り立つ。

□

系 2.7 任意の有向ネットワーク G に対して、 G の M_0 に関するインターフェイス変換の成分 $\varphi_1^{M_0, G} : G(1) \rightarrow \hat{\uparrow}(\text{Int}_{M_0}(1), G \otimes M_0)$ が引き起こす $G(1)$ 上の同値関係は、任意の両完備な圏 \mathcal{D} における $\hat{\uparrow}$ の任意の表現 $M : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{D}$ から定まる G の M に関するインターフェイス変換の成分 $\varphi_1^{M, G} : G(1) \rightarrow \mathcal{D}(\text{Int}_M(1), G \otimes M)$ が引き起こす $G(1)$ 上の同値関係の中で最小である。

系 2.7 の $G(1)$ 上の最小の同値関係を具体的に書くと、 $x, y \in G(1)$ に対して $\varphi_1^{M_0, G}(x) = \varphi_1^{M_0, G}(y) \Leftrightarrow [(x, q_1)] = [(y, q_1)]$ であるから、矢印 x, y を繋ぐ矢印のジグザク列 (両端の状況に応じて 4 通りある、以下は一例) が G 内に存在するときであることが分かる:



$x, y \in G(1)$ に対して、 $\varphi_1^{M_0, G}(x) = \varphi_1^{M_0, G}(y)$ のとき、 x, y は側方連結であるという。側方連結性の各同値類を側方連結成分と呼ぶ。また、 x, y を繋ぐ上述のようなジグザク列を側方経路と呼ぶ。

2.6 例

例 1. 表現 $\mathbf{y} : \hat{\uparrow} \rightarrow \hat{\uparrow}$ を考える。任意の $G \in \hat{\uparrow}$ に対して、 $\text{Int}_{\mathbf{y}}(0) = \mathbf{y}(0)$ より $\varphi_0^{\mathbf{y}, G}$ は同型となる。また、 $\text{Int}_{\mathbf{y}}(1) = \emptyset$ より $\varphi_1^{\mathbf{y}, G}$ は一点集合への写像となり、 $\varphi_1^{\mathbf{y}, G}$ が矢印集合 $G(1)$ 上に引き起こす同値関係は $G(1) \setminus G(1)$, つまり、任意の $x, y \in G(1)$ は同値になる。

例 2. 表現 $M_u : \hat{\uparrow} \rightarrow \hat{\uparrow}$ を以下で定義する:

$$M_u(0) = p_0 \xrightarrow{a} p_1, \quad M_u(1) = q_0 \xrightarrow{b_0} q_1 \xleftarrow{b_1} q_2,$$

$m_0 \setminus a = b_0$, $m_1 \setminus a = b_1$. このとき、 $\text{Int}_{M_u}(0) = M_u(0)$, $\text{Int}_{M_u}(1) = \{(p_1, p_1)\}$ である。任意の $G \in \hat{\uparrow}$ に対して $\varphi_0^{M_u, G}$ は同型となる。 $x, y \in G(1)$ に対し、 $\varphi_1^{M_u, G}(x) = \varphi_1^{M_u, G}(y) \Leftrightarrow [(x, q_1)] = [(y, q_1)]$

であり、今 $q_1 = m_0$ $p_1 = m_1$ p_1 なので、 $\varphi_1^{M_u, G}(x) = \varphi_1^{M_u, G}(y)$ で定まる $G(1)$ 上の同値関係は、 x $m_0 = y$ m_0 , x $m_0 = y$ m_1 , x $m_1 = y$ m_0 , x $m_1 = y$ m_1 で生成されることが分かる。従って、 $\varphi_1^{M_u, G}(x) = \varphi_1^{M_u, G}(y)$ であることは、 x と y を繋ぐ矢印の向きを無視した経路（無向経路）が存在することと同値である。このとき、 x と y は弱連結であるといい、同値類を弱連結成分という。

例 3. 一般に、表現 $M : \hat{\uparrow} \rightarrow \hat{\uparrow}$ を考えたとき、与えられた $G \in \hat{\uparrow}$ に対する $\varphi^{M, G}$ を計算しておく。 $\text{Int}_M(0) = M(0)$ であるから、 $x \in G(0)$ に対し、 $\varphi_0^{M, G}(x) : \text{Int}_M(0) = M(0) \xrightarrow{\nu_{(0, \text{id}_0)}^{M, 0} = \text{id}_{M(0)}} M(0) \xrightarrow{\mu_{(0, x)}^{M, G}} G \otimes M$ は $p \in M(0)(0)$ に対し、 $\varphi_0^{M, G}(x)(0)(p) = [(x, p)]$, $p \in M(0)(1)$ に対し、 $\varphi_0^{M, G}(x)(1)(a) = [(x, a)]$ となる。

次に、 $\varphi_1^{M, G}$ について、 $\text{Int}_M(1)(0) = \{(p, p') \in M(0)(0) \mid m_0 p = m_1 p'\}$ かつ $\text{Int}_M(1)(1) = \{(a, a') \in M(0)(1) \mid m_0 a = m_1 a'\}$ であり、可換図式

$$\begin{array}{ccc} \text{Int}_M(1) & \xrightarrow{\nu_{(0, m_1)}^{M, 1}} & M(0) \\ \nu_{(0, m_0)}^{M, 1} \downarrow & \searrow \nu_{(1, \text{id}_1)}^{M, 1} & \downarrow M(m_1) \\ M(0) & \xrightarrow{M(m_0)} & M(1) \end{array}$$

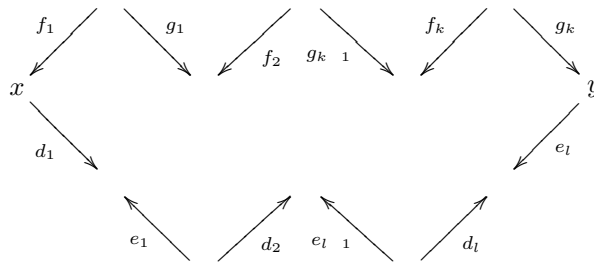
において $\nu_{(0, m_0)}^{M, 1}$ および $\nu_{(0, m_1)}^{M, 1}$ はそれぞれ第一成分、第二成分への射影である。従って、 $x \in G(1)$ に対して、 $\varphi_1^{M, G}(x) : \text{Int}_M(1) \xrightarrow{\nu_{(1, \text{id}_1)}^{M, 1}} M(1) \xrightarrow{\mu_{(1, x)}^{M, G}} G \otimes M$ は $(p, p') \in \text{Int}_M(1)(0)$ に対し、 $\varphi_1^{M, G}(x)(0)(p, p') = [(x, q)]$, ただし、 $q := m_0 p = m_1 p'$, また、 $(a, a') \in \text{Int}_M(1)(1)$ に対し、 $\varphi_1^{M, G}(x)(1)(a, a') = [(x, b)]$, $b := m_0 a = m_1 a'$ となる。

例 4. 表現 $M_1 : \hat{\uparrow} \rightarrow \hat{\uparrow}$ を以下で定義する:

$$M_1(0) = p_0 \xrightarrow{a_0} p_1 \xrightarrow{a_1} p_2, \quad M_1(1) = q_0 \xrightarrow{b_0} q_1 \xrightarrow{b_1} q_2 \xrightarrow{b_2} q_3,$$

$m_0 a_0 = b_0$, $m_0 a_1 = b_1$, $m_1 a_0 = b_1$, $m_1 a_1 = b_2$. このとき、 $\text{Int}_{M_1}(1)(0) = \{(p_1, p_0), (p_2, p_1)\}$ かつ $\text{Int}_{M_1}(1)(1) = \{(a_1, a_0)\}$ である。

$G \in \hat{\uparrow}$ とする。 $m_0 a_1 = b_1$ と $m_1 a_0 = b_1$ より、 $x, y \in G(0)$ に対して $\varphi_0^{M_1, G}(x) = \varphi_0^{M_1, G}(y) \Leftrightarrow \exists f_1, g_1, \dots, f_k, g_k \in G(1)$ ($k \geq 0$) s.t. $x = f_1 m_1, f_i m_0 = g_i m_0, g_i m_1 = f_{i+1} m_1$ ($i = 1, 2, \dots, k-1$), $y = g_k m_1$ かつ $\exists d_1, e_1, \dots, d_l, e_l \in G(1)$ ($l \geq 0$) s.t. $x = d_1 m_0, d_i m_1 = e_i m_1, e_i m_0 = d_{i+1} m_0$ ($i = 1, 2, \dots, l-1$), $y = e_l m_0$ であることが分かる。

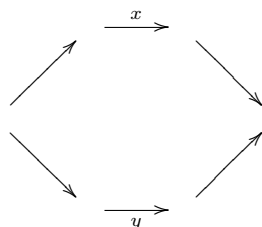


また、 $x, y \in G(1)$ に対しては $\varphi_1^{M_1, G}(x) = \varphi_1^{M_1, G}(y) \Leftrightarrow [(x, b_1)] = [(y, b_1)]$ となり、 $[(x, b_1)] = [(y, b_1)]$ は x と y が側方経路で繋がっていることに同値であることが分かる。

例 5. 表現 $M_2 : \uparrow\uparrow \rightarrow \hat{\uparrow}$ を以下で定義する:

$$M_2(0) = p_0 \xrightarrow{a_0} p_1 \xrightarrow{a_1} p_2 \xrightarrow{a_2} p_3, \quad M_2(1) = q_0 \xrightarrow{b_0} q_1 \xrightarrow{b_1} q_2 \xrightarrow{b_2} q_3 \xrightarrow{b_3} q_4,$$

$m_0 \ a_i = b_i, \ m_1 \ a_i = b_{i+1} \ (i = 0, 1, 2)$. $G \in \hat{\uparrow}$ とする. $x, y \in G(1)$ に対して、 x と y が側方経路で繋がっていれば $\varphi_1^{M_2, G}(x) = \varphi_1^{M_2, G}(y)$ となること、および、 $\varphi_1^{M_2, G}(x) = \varphi_1^{M_2, G}(y)$ であれば x と y を繋ぐ無向経路が存在すること、が分かる。さらに、いずれにおいても一般には逆は成立しない。例えば、 G が次の有向ネットワークならば $\varphi_1^{M_2, G}(x) = \varphi_1^{M_2, G}(y)$ となる:



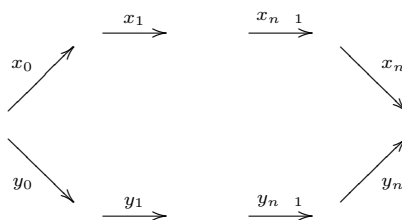
また、 G が次の有向ネットワークならば $\varphi_1^{M_2, G}(x) \neq \varphi_1^{M_2, G}(y)$ である:



例 6. 一般に、表現 $M_n : \uparrow\uparrow \rightarrow \hat{\uparrow}$ を以下で定義する:

$$M_n(0) = p_0 \xrightarrow{a_0} p_1 \xrightarrow{a_1} \dots \xrightarrow{a_n} p_{n+1}, \quad M_n(1) = q_0 \xrightarrow{b_0} q_1 \xrightarrow{b_1} \dots \xrightarrow{b_{n+1}} q_{n+2},$$

$m_0 \ a_i = b_i, \ m_1 \ a_i = b_{i+1} \ (i = 0, 1, \dots, n)$. また、有向ネットワーク G_n を

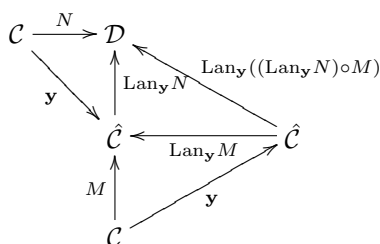


として定義する. $n \geq 1$ のとき、 $\varphi_1^{M_{2n}, G_{2n}}(x_n) = \varphi_1^{M_{2n}, G_{2n}}(y_n)$ となるが、 $\varphi_1^{M_{2(n-1)}, G_{2n}}(x_n) \neq \varphi_1^{M_{2(n-1)}, G_{2n}}(y_n)$ である。

M_n は M_0 の $n + 1$ 個のテンソル積となっている。次の小節で表現のテンソル積について述べる。

2.7 表現のテンソル積と IT_G の射

\mathcal{C} を小圏、 \mathcal{D} を両完備な圏とする。表現 $M : \mathcal{C} \rightarrow \hat{\mathcal{C}}$ と表現 $N : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{D}$ のテンソル積 $M \otimes N$ を、 $M \otimes N = (\text{Lan}_y N) \circ M$ で定義する。



上の図式は同型を除いて可換となる。実際、左随伴は余極限を保つので、任意の $G \in \hat{\mathcal{C}}$ に対して、同型 $\alpha_G : \text{Lan}_{\mathbf{y}} N (\text{Lan}_{\mathbf{y}} M(G)) \xrightarrow{\cong} \text{Lan}_{\mathbf{y}} ((\text{Lan}_{\mathbf{y}} N) \circ M) (G)$ がある。記号 \otimes を用いれば、これは $\alpha_G : (G \otimes M) \otimes N \xrightarrow{\cong} G \otimes (M \otimes N)$ となる。

例 7. 小圏 \mathcal{C} の任意の表現 $M : \mathcal{C} \rightarrow \hat{\mathcal{C}}$ に対し、 $M^{\otimes n} = \underbrace{M \otimes \dots \otimes M}_{n \text{ times}}$ とおく。このとき、 $M_0^{\otimes n+1} = M_n$ である。

$G \in \hat{\mathcal{C}}$ とする。命題 2.5 により、表現 $M : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{D}$ から IT_G の対象を構成することができた。 IT_G の射を構成する方法を述べよう。 $\{\nu_{(c',f)}^{M,c} : \text{Int}_M(c) \rightarrow M_c(c',f) = M(c')\}_{(c',f) \in \text{Elts}(\mathbf{y}(c))}$ を M_c 上の極限錐、 $\{\nu_{(c',f)}^{M \otimes N,c} : \text{Int}_{M \otimes N}(c) \rightarrow M \otimes N_c(c',f) = M(c') \otimes N\}_{(c',f) \in \text{Elts}(\mathbf{y}(c))}$ を $M \otimes N_c$ 上の極限錐とする。 $\{\nu_{(c',f)}^{M,c} \otimes N : \text{Int}_M(c) \otimes N \rightarrow M(c') \otimes N\}_{(c',f) \in \text{Elts}(\mathbf{y}(c))}$ は、 $M \otimes N_c$ 上の錐となるので、 $\text{Int}_{M \otimes N}(c)$ の普遍性から $\nu_{(c',f)}^{M,c} \otimes N = \nu_{(c',f)}^{M \otimes N,c} \circ \beta_c$ となる射 $\beta_c : \text{Int}_M(c) \otimes N \rightarrow \text{Int}_{M \otimes N}(c)$ が一意的に存在する。 β_c は c について自然であることが分かり、自然変換 $\beta : \text{Int}_M(\) \otimes N \rightarrow \text{Int}_{M \otimes N}$ を定める。

命題 2.8 \mathcal{C} を小圏、 \mathcal{D} を両完備な圏とする。表現 $M : \mathcal{C} \rightarrow \hat{\mathcal{C}}$ と表現 $N : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{D}$ に対して、自然変換 $\beta : \text{Int}_M(\) \otimes N \rightarrow \text{Int}_{M \otimes N}$ が同型であると仮定する。このとき、任意の $G \in \hat{\mathcal{C}}$ に対して IT_G の射 $j : (\hat{\mathcal{C}}(\text{Int}_M(\), G \otimes M), \varphi^{M,G}) \rightarrow (\mathcal{D}(\text{Int}_{M \otimes N}(\), G \otimes (M \otimes N)), \varphi^{M \otimes N,G})$ が、 $c \in \mathcal{C}$ と $\beta_c : \text{Int}_M(c) \rightarrow \text{Int}_{M \otimes N}(c)$ に対して、 $j_c(\)$ を合成 $\text{Int}_{M \otimes N}(c) \xrightarrow{\beta_c^{-1}} \text{Int}_M(c) \otimes N \xrightarrow{\otimes N} (G \otimes M) \otimes N \xrightarrow{\alpha_G} G \otimes (M \otimes N)$ とすることで、定義される。

例 8. \mathcal{C} を小圏とする。任意の表現 $M : \mathcal{C} \rightarrow \hat{\mathcal{C}}$ と表現 $\mathbf{y} : \mathcal{C} \rightarrow \hat{\mathcal{C}}$ のテンソル積 $M \otimes \mathbf{y} = M$ を考えると、 $\text{Int}_M(\) \otimes \mathbf{y} = \text{Int}_M = \text{Int}_{M \otimes \mathbf{y}}$ で、 $G \in \hat{\mathcal{C}}$ に対して IT_G に引き起こされる射 $j : \varphi^{M,G} \rightarrow \varphi^{M \otimes \mathbf{y},G}$ は同型。

例 9. \mathcal{D} を両完備な圏とする。表現 $\mathbf{y} : \uparrow \rightarrow \hat{\uparrow}$ と任意の表現 $N : \uparrow \rightarrow \mathcal{D}$ のテンソル積 $\mathbf{y} \otimes N = N$ を考える。 $\text{Int}_{\mathbf{y} \otimes N}(1) = \text{Int}_N(1)$ だが、 $\text{Int}_{\mathbf{y}}(1) = \emptyset$ なので、 $\text{Int}_{\mathbf{y}}(1) \otimes N = \emptyset \otimes N$ は \mathcal{D} の始対象。従って、一般に、 $\text{Int}_{\mathbf{y} \otimes N}(1) \neq \text{Int}_{\mathbf{y}}(1) \otimes N$ 。

例 10. 表現 $M_{1'} : \uparrow \rightarrow \hat{\uparrow}$ を以下で定義する:

$$M_{1'}(0) = p_0 \xrightarrow{a_0} p_1 \xrightarrow{a_1} p_2, \quad M_{1'}(1) = q_0 \xrightarrow{b_0} q_1 \xrightarrow[b_{11}]{b_{10}} q_2 \xrightarrow{b_2} q_3,$$

$m_0 \ a_0 = b_0, \ m_0 \ a_1 = b_{10}, \ m_1 \ a_0 = b_{11}, \ m_1 \ a_1 = b_2$. このとき、 $\text{Int}_{M_{1'}}(1) = \{ \ } \rightarrow \{ \}$ となり、 $\text{Int}_{M_{1'}}(1) \otimes M_0 = \{ \rightarrow \rightarrow \}$ である。一方、 $M_{1'} \otimes M_0 = M_0^{\otimes 3}$ であることが分かり、 $\text{Int}_{M_{1'} \otimes M_0}(1) = \{ \rightarrow \rightarrow \}$ である。

例 11. $\beta : \text{Int}_{M_0^{\otimes n}}(\) \otimes M_0 \xrightarrow{\cong} \text{Int}_{M_0^{\otimes n+1}}$ であることが直接計算することにより分かる。従って、任意の $G \in \hat{\uparrow}$ に対して、 $\varphi^{M_0,G} \rightarrow \varphi^{M_0^{\otimes 2},G} \rightarrow \dots \rightarrow \varphi^{M_0^{\otimes n},G} \rightarrow \dots$ という射の列が IT_G 内に存在する。特に例 6 より、 $\varphi^{M_0,G} \rightarrow \varphi^{M_0^{\otimes 3},G} \rightarrow \varphi^{M_0^{\otimes 5},G} \rightarrow \dots$ はどれも同型でないような G がとれる。

2.8 表現に関する安定性と表現の貼り合わせ条件

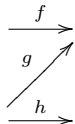
定義 2.9 \mathcal{C} を小圏、 \mathcal{D} を余完備な圏とし、 $M : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{D}$ を表現とする。 $G \in \hat{\mathcal{C}}$ が表現 M に関して安定であるとは、 $\eta^{M,G} : G \rightarrow \mathcal{D}(M(\), G \otimes M)$ が同型であるときをいう⁴。

⁴随伴 $(\) \otimes M \dashv \mathcal{D}(M(\), \)$ の引き起こすモナドの自由代数の特別な場合。

例 12. \mathcal{C} を小圏とすると、任意の $G \in \hat{\mathcal{C}}$ は表現 $y : \mathcal{C} \rightarrow \hat{\mathcal{C}}$ に関して安定である。

例 13. $G \in \hat{\uparrow}$ が表現 M_0 で安定であるための必要十分条件は、以下の二条件 (i), (ii) を満たすことである

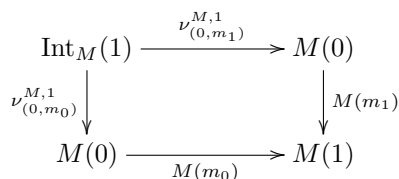
[26, 17]: (i) G において $\begin{array}{c} \xrightarrow{f} \\ \xrightarrow{g} \end{array}$ ならば $f = g$. (ii) G において



ならば、 G に矢印 $\partial_0(f) \xrightarrow{k} \partial_1(h)$ が存在する。

例 14. $G \in \hat{\uparrow}$ が表現 M_u で安定であるための必要十分条件は、 G が同値関係のグラフになることである。

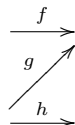
定義 2.10 \mathcal{D} を両完備な圏とする。表現 $M : \uparrow \rightarrow \mathcal{D}$ が貼り合わせ条件を満たすとは、 $\text{Int}_M(1)$ を定義する pullback の可換図式



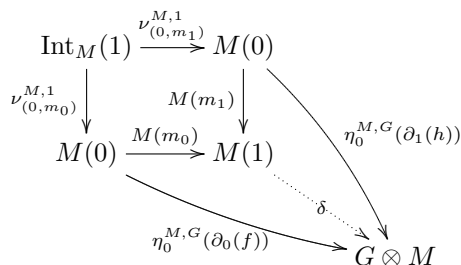
が pushout の図式にもなるときをいう。

定理 2.11 \mathcal{D} を両完備な圏とし、表現 $M : \uparrow \rightarrow \mathcal{D}$ は貼り合わせ条件を満たすとする。このとき、 $G \in \hat{\uparrow}$ が M に関して安定ならば、 M_0 に関して安定である。

証明 $\eta^{M,G} : G \rightarrow \mathcal{D}(M(\), G \otimes M)$ が同型るとき、例 13 の二条件 (i), (ii) が成立することを示せばよい。先に (ii) を示そう。 G において



であるとする。図式



を考える。ただし、 $\text{Int}_M(m_i) = \nu_{(0,m_i)}^{M,1}$, $i = 0, 1$ であることに注意。外の四角が可換であれば、 M が貼り合わせ条件を満たすことから中の四角が pushout であることにより、図式を可換にする一意な射 $\delta : M(1) \rightarrow G \otimes M$ を得る。 $k = \eta_1^{M,G}(\) \in G(1)$ とおくと、 $\circ M(m_0) = \eta_0^{M,G}(\partial_0(f))$, $\circ M(m_1) = \eta_0^{M,G}(\partial_1(h))$ であるから、 $\eta^{M,G}$ の自然性より、 $\partial_0(k) = \partial_0 \eta_1^{M,G}(\) = \eta_0^{M,G}(\partial_0(f)) = \eta_0^{M,G}(\circ M(m_0)) = \partial_0(f)$, $\partial_1(k) =$

$\partial_1 \eta_1^{M,G}(\)^{-1} = \eta_0^{M,G}(\)^{-1} \circ M(m_1) = \partial_1(h)$ となり、 G 内の矢印 $\partial_0(f) \xrightarrow{k} \partial_1(h)$ が構成できたことになる。そこで、 $\eta_0^{M,G}(\partial_0(f)) \circ \text{Int}_M(m_0) = \eta_0^{M,G}(\partial_1(h)) \circ \text{Int}_M(m_1)$ であることを示そう。ところが、 $\varphi_0^{M,G} = \eta_0^{M,G}$ であるから、 $\varphi^{M,G}$ の自然性で $\varphi_1^{M,G} = \eta_0^{M,G}(\partial_i(\)) \circ \text{Int}_M(m_i)$, $i = 0, 1$ が成り立つことに注意すると $\eta_0^{M,G}(\partial_0(f)) \circ \text{Int}_M(m_0) = \varphi_1^{M,G}(f) = \eta_0^{M,G}(\partial_1(f)) \circ \text{Int}_M(m_1) = \eta_0^{M,G}(\partial_1(g)) \circ \text{Int}_M(m_1) = \varphi_1^{M,G}(g) = \eta_0^{M,G}(\partial_0(g)) \circ \text{Int}_M(m_0) = \eta_0^{M,G}(\partial_0(h)) \circ \text{Int}_M(m_0) = \varphi_1^{M,G}(h) = \eta_0^{M,G}(\partial_1(h)) \circ \text{Int}_M(m_1)$ で示せた。

次に、 G の中で $\begin{matrix} f \\ \xrightarrow{\quad} \\ g \end{matrix}$ であるとする。つまり、 $f, g \in G(1)$ に対して $\partial_0(f) = \partial_0(g)$, $\partial_1(f) = \partial_1(g)$ とする。このとき、 $\eta_0^{M,G}(\partial_i(f)) = \eta_0^{M,G}(\partial_i(g))$, $i = 0, 1$ である。一方、 $\eta_0^{M,G}(\partial_0(f)) \circ \text{Int}_M(m_0) = \varphi_1^{M,G}(f) = \eta_0^{M,G}(\partial_1(f)) \circ \text{Int}_M(m_1)$ なので、(ii) の証明と同様にして $\text{Int}_M(1) \rightarrow G \otimes M$ なる射で $\text{Int}_M(m_i) = \eta_0^{M,G}(\partial_i(f))$, $i = 0, 1$ となるものが一意的存在する。ところで、 $\eta_1^{M,G}(f)$ は $\text{Int}_M(1) \rightarrow G \otimes M$ の満たす条件を満たすので、一意性から $\eta_1^{M,G}(f) = \eta_1^{M,G}(g)$ となる。また、 $\partial_i(f) = \partial_i(g)$, $i = 0, 1$ より $\eta_1^{M,G}(g)$ も条件を満たし、 $\eta_1^{M,G}(g) = \eta_1^{M,G}(f)$ となる。従って、 $\eta_1^{M,G}(f) = \eta_1^{M,G}(g)$ となり、 $\eta^{M,G}$ が同型なので $f = g$ となる。

□

命題 2.12 \mathcal{D} を両完備な圏とする。表現 $M : \uparrow \rightarrow \hat{\uparrow}$ が貼り合わせ条件を満たすとき、任意の表現 $N : \uparrow \rightarrow \mathcal{D}$ に対して $M \otimes N$ も貼り合わせ条件を満たす。

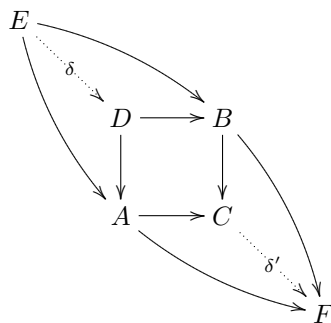
証明 M が貼り合わせ条件をみたすので

$$\begin{array}{ccc} \text{Int}_M(1) & \xrightarrow{\nu_{(0,m_1)}^{M,1}} & M(0) \\ \nu_{(0,m_0)}^{M,1} \downarrow & & \downarrow M(m_1) \\ M(0) & \xrightarrow{M(m_0)} & M(1) \end{array}$$

は pushout の図式で、 $(\) \otimes N$ は余極限を保つので可換図式

$$\begin{array}{ccc} \text{Int}_M(1) \otimes N & \xrightarrow{\nu_{(0,m_1)}^{M,1} \otimes N} & M(0) \otimes N \\ \nu_{(0,m_0)}^{M,1} \otimes N \searrow & & \downarrow M(m_1) \otimes N \\ \text{Int}_{M \otimes N}(1) & \xrightarrow{\nu_{(0,m_1)}^{M \otimes N, 1}} & M(0) \otimes N \\ \downarrow \nu_{(0,m_0)}^{M \otimes N, 1} & & \downarrow M(m_1) \otimes N \\ M(0) \otimes N & \xrightarrow{M(m_0) \otimes N} & M(1) \otimes N \end{array}$$

において外側の四角は pushout かつ中の四角は pullback となっている。このとき、中の四角は自動的に pushout になり、 $M \otimes N$ が貼り合わせ条件を満たすことが分かる。実際、任意の圏 \mathcal{A} において、図式



を考える。

$$\begin{array}{ccc} D & \longrightarrow & B \\ \downarrow & & \downarrow \\ A & \longrightarrow & C \end{array}$$

が pullback かつ

$$\begin{array}{ccc} E & \longrightarrow & B \\ \downarrow & & \downarrow \\ A & \longrightarrow & C \end{array}$$

は pushout であるとする。pullback の普遍性より $f: E \rightarrow D$ で図式の該当部分を可換にするものが一意的に存在する。

$$\begin{array}{ccc} D & \longrightarrow & B \\ \downarrow & & \downarrow \\ A & \longrightarrow & F \end{array}$$

が可換であるとする。すると、

$$\begin{array}{ccc} E & \longrightarrow & B \\ \downarrow & & \downarrow \\ A & \longrightarrow & F \end{array}$$

が可換となり、 $f: C \rightarrow F$ で図式の該当部分を可換にするものが一意的に存在する。これは、

$$\begin{array}{ccc} D & \longrightarrow & B \\ \downarrow & & \downarrow \\ A & \longrightarrow & C \end{array}$$

が pushout の図式であることを意味する。

□

M_0 が貼り合わせ条件を満たすことは容易に確認できるので、命題 2.12 から M_0 と任意の表現 $N: \uparrow \rightarrow D$ から貼り合わせ条件を満たす表現 $M_0 \otimes N$ が構成できる。

2.9 一般化

本小節では定理 2.6 の一般化について証明無しに述べる。

定義 2.13 小圏 \mathcal{C} が整礎であるとは、 \mathcal{C} の対象全体のなす集合 $|\mathcal{C}|$ 上の二項関係 $<$ を、 $c < c' \Leftrightarrow \exists f: c \rightarrow c'$ s.t. f は恒等射でない、で定義したとき、任意の空でない部分集合 $X \subseteq |\mathcal{C}|$ に対して X に $<$ に関する極小元 ($x \in X$ で、 $\forall y \in X$ に対して $y \not< x$ となる元) が存在するときをいう。

定義 2.14 小圏 \mathcal{C} が双対構造を持つとは同型 $\mathcal{C} \xrightarrow{\cong} \mathcal{C}^{\text{op}}$ が存在するときをいう。

定義 2.14 において $\mathcal{C}^{\text{op}} \xrightarrow{\cong} \mathcal{C}$ も与えるが、一般に \mathcal{C} は自分自身の逆となるとは限らないことに注意する。

定義 2.15 小圏 \mathcal{C} の余完備な圏 \mathcal{D} における表現 $M : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{D}$ の余インターフェイスとは以下で定義される関手 $\text{coInt}_M : \mathcal{C}^{\text{op}} \rightarrow \mathcal{D}$ のことである。まず、 $c \in \mathcal{C}$ に対して

$$\text{coInt}_M(c) = \text{colim} \quad \text{Elts}(\mathbf{y}^o(c)) \xrightarrow{c} \mathcal{C} \xrightarrow{M} \mathcal{D}$$

とする。ただし、 $\mathbf{y}^o : \mathcal{C}^{\text{op}} \rightarrow \text{Set}^{\mathcal{C}}$ は $\mathbf{y}^o(c) = \mathcal{C}(c, _)$ なる米田の埋め込み、また $F \in \text{Set}^{\mathcal{C}}$ の要素の圏 $\text{Elts}(F)$ は、対象がペア (c, x) 、 $c \in \mathcal{C}$ 、 $x \in F(c)$ で、射 $f : (c, x) \rightarrow (c', x')$ は \mathcal{C} の射 $f : c \rightarrow c'$ で $F(f)(x) = x'$ を満たすもの、として定義される。

射 $f : c \rightarrow c' \in \mathcal{C}$ に対しては、 $\{\mu_{(c',g)}^{M,c'} : M_{c'}(c',g) = M(c') \rightarrow \text{coInt}_M(c')\}_{(c',g) \in \text{Elts}(\mathbf{y}^o(c'))}$ を $M_{c'}$ 上の余極限錐として、 $\{\mu_{(c',gf)}^{M,c} : M_c(c',gf) = M(c') \rightarrow \text{coInt}_M(c)\}_{(c',g) \in \text{Elts}(\mathbf{y}^o(c'))}$ が $M_{c'}$ 上の余錐となることから、 $\mu_{(c',gf)}^{M,c} = \text{coInt}_M(f) \circ \mu_{(c',g)}^{M,c'}$ なる一意的な射 $\text{coInt}_M(f) : \text{coInt}_M(c') \rightarrow \text{coInt}_M(c)$ が定まる。

定義 2.16 小圏 \mathcal{C} が双対構造 $\hat{_} : \mathcal{C} \xrightarrow{\cong} \mathcal{C}^{\text{op}}$ を持つとする。 \mathcal{C} の双対構造 $\hat{_}$ に関する標準表現 $M_0 : \mathcal{C} \rightarrow \hat{\mathcal{C}}$ とは、合成 $M_0 = \text{coInt}_{\mathbf{y}} \circ \hat{_}$ のことである。

双対構造 $\hat{_}$ を持つ小圏 \mathcal{C} に対して、自然変換 $\hat{_} : \mathbf{y}^o \rightarrow \text{Int}_{M_0}$ が以下のように定まる。ただし、この式は $\mathcal{C}^{\text{op}} \xrightarrow{\cong} \mathcal{C}$ とみなしている。各 $c \in \mathcal{C}$ に対して、 $\text{Int}_{M_0}(c)$ を定義する極限錐を $\{\nu_{(c',f)}^{M_0,c} : \text{Int}_{M_0}(c) \rightarrow M_0_{c'}(c',f) = M_0(c')\}_{(c',f) \in \text{Elts}(\mathbf{y}(c))}$ とする。 $\mathbf{y}(c)$ を頂点に持つ錐

$$\{\mathbf{y}(c) \xrightarrow{\mathbf{y}(f)} \mathbf{y}(c') \xrightarrow{\mu_{(\sigma(c'), \text{id}_{\sigma(c')})}^{M_0, \sigma(c')}} M_0(c')\}_{(c',f) \in \text{Elts}(\mathbf{y}(c))}$$

が定まることが分かり (ただし、 $\mu_{(\sigma(c'), \text{id}_{\sigma(c')})}^{M_0, \sigma(c')}$ は $M_0(c')$ を定義する余極限錐の成分)、射 $\nu_c : \mathbf{y}(c) \rightarrow \text{Int}_{M_0}(c)$ で、 $\nu_{(c',f)}^{M_0,c} \circ \nu_c = \mu_{(\sigma(c'), \text{id}_{\sigma(c')})}^{M_0, \sigma(c')} \circ \mathbf{y}(f)$ を満たすものが一意的に定まり、さらに ν_c は c に関して自然であることが示せる。

定理 2.17 小圏 \mathcal{C} が整礎かつ双対構造 $\hat{_} : \mathcal{C} \xrightarrow{\cong} \mathcal{C}^{\text{op}}$ を持ち、 $M_0 : \mathcal{C} \rightarrow \hat{\mathcal{C}}$ を $\hat{_}$ に関する標準表現とする。このとき、自然変換 $\hat{_} : \mathbf{y}^o \rightarrow \text{Int}_{M_0}$ が同型であるなら、任意の $G \in \hat{\mathcal{C}}$ に対して $(\hat{\mathcal{C}}(\text{Int}_{M_0}(_), G \otimes M_0), \varphi^{M_0, G})$ は IT_G の始対象になる。

定理 2.17 の証明は整礎帰納法に依る。小圏 \mathcal{C} が有向グラフの同型 $\hat{_} : \Gamma \xrightarrow{\cong} \Gamma^{\text{op}}$ を持つ有限非輪状有向グラフ Γ で自由生成されているとする。ただし、 Γ^{op} は Γ の矢印をすべて反転されたグラフである。このとき、 \mathcal{C} は整礎でかつ $\hat{_}$ から引き起こされる双対構造 $\hat{_} : \mathcal{C} \xrightarrow{\cong} \mathcal{C}^{\text{op}}$ を持つ。極小な $c \in \mathcal{C}$ では $\nu_c : \mathbf{y}(c) \rightarrow \text{Int}_{M_0}(c)$ は同型で、極小でない $c \in \mathcal{C}$ に対しては $\text{cod}(f) = c$ となる異なる生成射 f が二つ以上存在すれば $\nu_c : \mathbf{y}(c) \rightarrow \text{Int}_{M_0}(c)$ が同型であることを示すことができる。極小でない $c \in \mathcal{C}$ に対して $\text{cod}(f) = c$ なる生成射 f がただ一つしか存在しないときには必ずしも ν_c は同型とは限らないが、 $\text{cod}(f) = c$ なる生成射 f が一つしかないことの特異性を用いて帰納法のステップを進めることができ、以下の系を得る。

系 2.18 小圏 \mathcal{C} が有向グラフの同型 $\hat{_} : \Gamma \xrightarrow{\cong} \Gamma^{\text{op}}$ を持つ有限非輪状有向グラフ Γ で自由生成されているとする。 $M_0 : \mathcal{C} \rightarrow \hat{\mathcal{C}}$ を $\hat{_}$ に関する標準表現とするとき、任意の $G \in \hat{\mathcal{C}}$ に対して $(\hat{\mathcal{C}}(\text{Int}_{M_0}(_), G \otimes M_0), \varphi^{M_0, G})$ は IT_G の始対象になる。

小節 2.2 で与えた M_0 は、 $(0) = 1$ 、 $(1) = 0$ 、 $(m_0) = m_1$ 、 $(m_1) = m_0$ で定義される同型 $\hat{_} : \uparrow \xrightarrow{\cong} \uparrow^{\text{op}}$ に関する標準表現である。双対構造が異なれば、対応する標準表現は関手としては一般に同型ではないが、どの標準表現も定理 2.17 もしくは系 2.18 の条件が満たされれば IT_G の同型な対象を引き起こし、それらはみな始対象である。例えば、圏 \uparrow の場合には、双対構造を $(m_0) = m_0$ 、 $(m_1) = m_1$ として与えることもできる。

定理 2.11 や命題 2.12 も一般化できるが、定理 2.17 の証明も含め詳細を述べることは別の機会に譲りたい。

3 生物ネットワークにおける双対性

前節において、序で考えた互いに双対の関係にあるネットワークの変換 R と L がある意味で標準的なものであることを示した。有向ネットワークの構造としては、 R には有向経路が対応し、 L には側方経路が対応するのであった。本節では、このような双対性がどのように実際の生物ネットワークに埋め込まれているのかを調べる。そのために矢印の媒介中心性 [12] をそれぞれの経路概念に応じて考える。媒介中心性とは一般に、頂点もしくは矢印のネットワーク内での重要度をその頂点もしくは矢印を通過する最短経路の個数で測る指標である。本節と次節では、自己ループがなく、同じ始点と終点を共有する矢印は高々一つしかないような有限の有向ネットワークのみを考える。

与えられた有向ネットワーク $G = (A, N, \partial_0, \partial_1)$ の矢印 f の側方媒介中心性は以下の式で定義される：

$$\text{LBC}_f = \frac{1}{\sum_{g,h \in A, l_{gh} > 0} (s_{gh} + 1)} \sum_{g,h \in A, l_{gh} > 0} \frac{l_{gh}^f}{l_{gh}}$$

ただし、 l_{gh} は矢印 g から矢印 h への最短側方経路の個数、 l_{gh}^f は矢印 g から矢印 h への最短側方経路で、矢印 f を通過するものの個数、 s_{gh} は矢印 g から矢印 h への最短側方経路の長さである。一方、矢印 f の有向媒介中心性は以下の式で定義される：

$$\text{DBC}_f = \frac{1}{\sum_{g,h \in A, d_{gh} > 0} (t_{gh} + 1)} \sum_{g,h \in A, d_{gh} > 0} \frac{d_{gh}^f}{d_{gh}}$$

ただし、 d_{gh} は矢印 g から矢印 h への最短有向経路の個数、 d_{gh}^f は矢印 g から矢印 h への最短有向経路で、矢印 f を通過するものの個数、 t_{gh} は矢印 g から矢印 h への最短有向経路の長さである。側方媒介中心性、有向媒介中心性ともに $\sum_{f \in A} \text{LBC}_f = 1$ 、 $\sum_{f \in A} \text{DBC}_f = 1$ となるように規格化してある。序で述べたネットワークの二つの在り方 (A), (B) という観点からは、側方媒介中心性はプロセスの貼り合わせ、いわばネットワークの一体性の保持に関する重要度、を測り、有向媒介中心性はネットワーク上の輸送に関する重要度を測るものだといえよう。

線虫の神経ネットワーク [35, 33] (頂点はニューロン、矢印は化学シナプス結合、頂点数 279, 矢印数 2194)、大腸菌の遺伝子転写制御ネットワーク [31] (頂点は遺伝子 (オペロン)、矢印は転写制御関係、頂点数 328, 矢印数 456)、フロリダ湾の生態系フローネットワーク [32] (頂点は生物群集、矢印は炭素のフローによる被食者-捕食者関係、頂点数 121, 矢印数 1767) ⁵ において側方媒介中心性および有向媒介中心性を計算した結果を図 1 の上段および下段左に示す。どの生物ネットワークにおいても、ある矢印の側方媒介中心性の値が大きければ有向媒介中心性の値は小さく、逆に有向媒介中心性の値が大きければ側方媒介中心性の値が小さいというトレードオフの関係が成立していることが分かる。また、線虫の神経ネットワークにおいて、ニューロンの機能 (感覚、介在、運動) との関係について、矢印の始点および終点の機能の組み合わせごとで平均的に側方媒介中心性と有向媒介中心性のどちらが優位かを示す図を図 1 の下段右に示す。これより、感覚ニューロンから介在または運動ニューロン、介在ニューロンから運動ニューロンといった、フィードフォワード的な結合では側方媒介中心性の方が平均的に有向媒介中心性よりも値が大きく、一方、運動ニューロンから感覚または介在ニューロン、介在ニューロンから感覚ニューロンといったフィードバック的な結合では有向媒介中心性の方が平均的に側方媒介中心性よりも値が小さくなっていることが分かる。つまり、媒介中心性の優位性と機能との対応がこの場合はついている。

トレードオフ関係が有意なものであることを確認するために、側方媒介中心性および有向媒介中心性の値の累積密度分布を、実際のデータと、頂点の次数を保存しつつ矢印をランダムに張り替えたネットワークとで比較した。実際のデータによるものと 1000 個のランダムネットワークの平均値との比較を図 2 に示す。大腸菌の遺伝子転写制御ネットワークの有向媒介中心性の場合のみを除いて、実際の生物ネットワーク

⁵ただし、元のデータからデトライタス (3 頂点) と木の根に対応する頂点とこれらのどれかを始点もしくは終点を持つ矢印が取り除いてある。

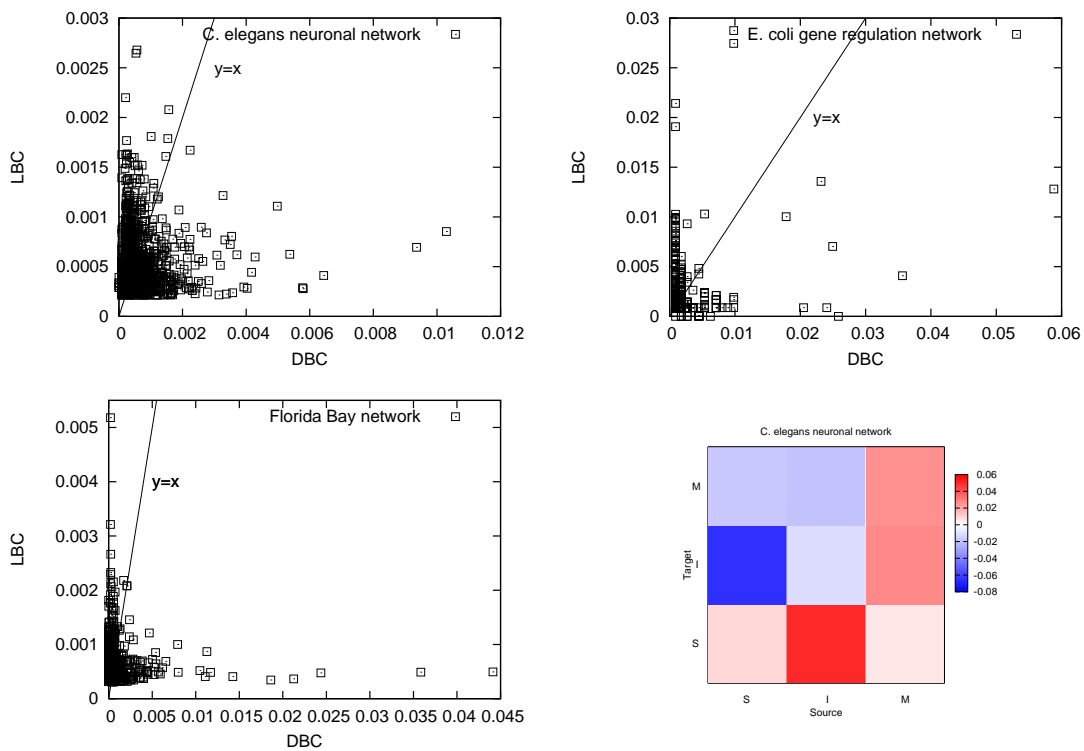


図 1: 上段および下段左: 各生物ネットワークにおける矢印の有向媒介中心性の値と側方媒介中心性の値の間関係。下段右: 線虫の神経ネットワークとニューロンの機能と二つの媒介中心性との関係。9つの各ブロックには始点(横軸, S:感覚ニューロン, I:介在ニューロン, M:運動ニューロン)および終点(縦軸)のニューロンの機能による矢印の分類が対応する。各分類ごとに有向媒介中心性の値の総和から側方媒介中心性の値の総和を引いた値が各ブロックの色で表示されている。

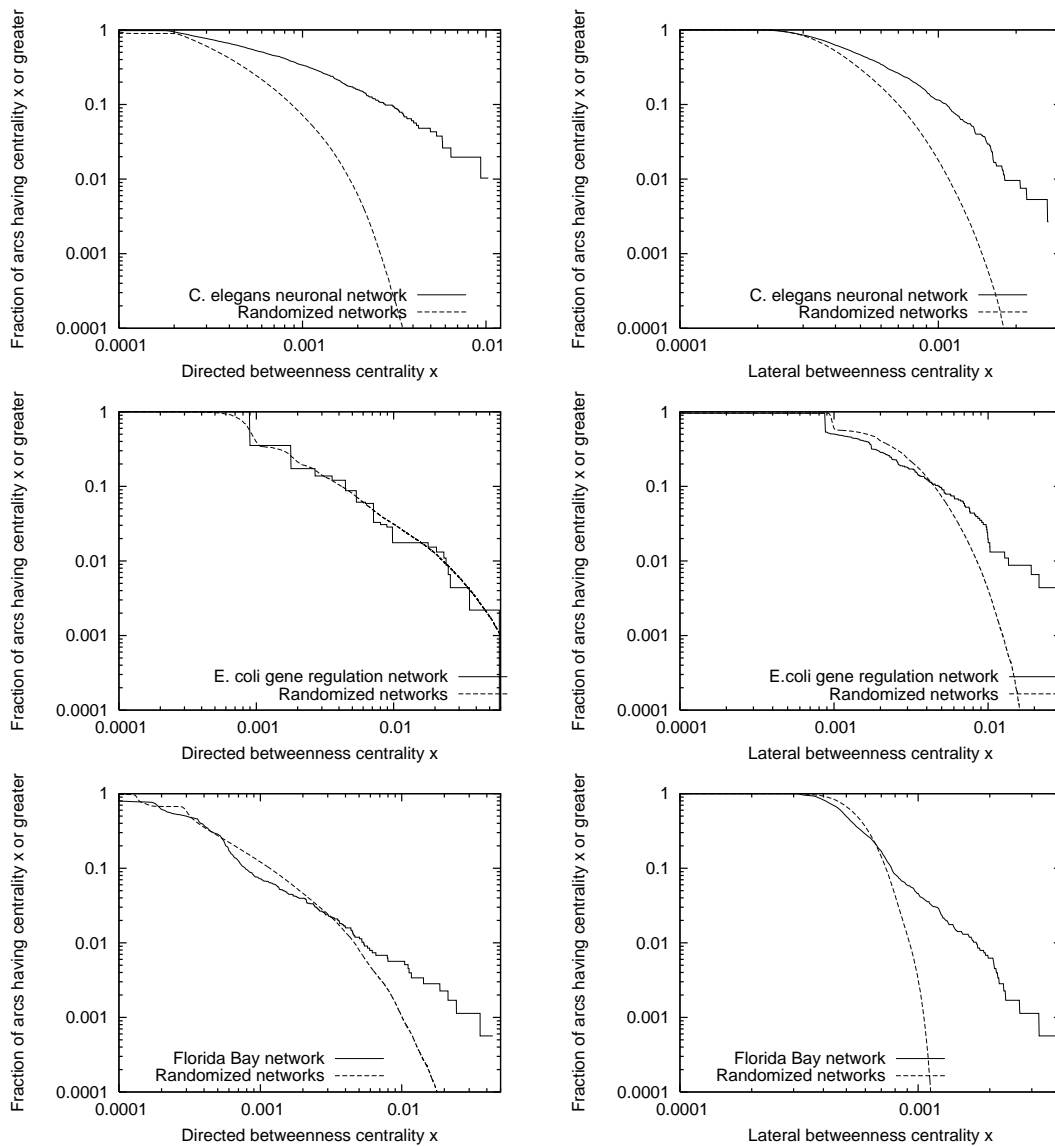


図 2: 各生物ネットワークにおける二つの媒介中心性の累積密度分布と 1000 個のランダムネットワークの累積密度分布の平均値との比較。

の方で累積密度分布が長く尾を引いていることが分かり、図 1 のトレードオフ関係は有意であると考えてよいであろう。

実際の生物ネットワークが、ネットワークの一体性の保持とネットワーク上の輸送について「分業」を行っていることはシステムの存続という観点からは理にかなっていると考えられる。何故なら、両者ともにシステムの活動にとって重要な要素であるが、システムに対する摂動によって両者が同時に不具合をきたす可能性が分業によって減少させられると考えられるからである。次節においてはこのようなトレードオフの関係がどのようにして生じるのか複雑ネットワークの最適化モデルを通じて議論する。

4 ネットワークの最適化モデル

前節において、様々なタイプの生物ネットワークにおいて矢印の側方媒介中心性と有向媒介中心性とが一方の値が大きければ他方の値は小さいというトレードオフの関係にあることをみた。では、このようなト

レードオフの関係はどのようにして生じうるのだろうか。本節では、生物ネットワークは一般に自然選択による進化過程の結果として形作られたと考え、複雑ネットワークの最適化モデルと呼ばれる範疇に属するモデルを提案する。

複雑ネットワークの最適化モデルでは何らかのエネルギー関数を設定し、そのエネルギー関数を減少もしくは増加させる方向にネットワークを少しずつ変化させ、進化させる。エネルギー関数は、二つの量の間のトレードオフ関係を考慮して選ばれることが多い。例えば、[10] はネットワーク上の輸送効率と辺を張るコストとのトレードオフの表現として平均最短経路長と規格化された矢印数の線形結合を最小化すべきエネルギー関数として設定した。また、[6] はネットワーク上の輸送効率とネットワークの頑健性とのトレードオフの表現として平均最短経路長と隣接行列の最大固有値の線形結合をエネルギー関数として考えた。ここでは、側方経路および有向経路それぞれに関する効率性 [20] の線形結合を最大化すべきエネルギー関数として採択する。序における (A), (B) の観点からは、プロセスの貼り合わせの平均的な強度、つまりネットワーク全体としての一体性の保持の強度 (側方効率性) とネットワーク上の輸送効率 (有向効率性) に関するトレードオフを考慮したエネルギー関数を考える。

有向ネットワーク $G = (A, N, \partial_0, \partial_1)$ の側方効率性は以下の式で定義される:

$$\text{Eff}_L = \frac{1}{|A|(|A| - 1)} \sum_{f, g \in A, f \neq g} \frac{1}{l_{fg}}$$

ただし、 $|A|$ は矢印の総数である。また、有向効率性は

$$\text{Eff}_D = \frac{1}{|A|(|A| - 1)} \sum_{f, g \in A, f \neq g} \frac{1}{d_{fg}}$$

で与えられる。このとき、エネルギー関数として

$$E(\lambda) = \lambda \text{Eff}_D + (1 - \lambda) \text{Eff}_L, \quad 0 \leq \lambda \leq 1$$

を考え、以下の手続きでネットワークを進化させる:

- (1) 初期ネットワークは、頂点数 n , 各頂点ペア間に矢印が存在する確率を p として、ランダムに生成する。以下の進化過程で矢印数は一定に保たれる。
- (2) ランダムに矢印を一つ選んで取り除き、ランダムに矢印を一つ加える。
- (3) (2) においてエネルギー関数が増加すればその結果を受け入れ、そうでなければ (2) を繰り返す。
- (4) (3) において矢印数だけ (2) を繰り返してもエネルギー関数が増加しなければ最適化されたものとみなし、終了する。

進化アルゴリズムとしては成長過程も取り入れるなどのより込み入ったものも考えることができるが [5]、ここでは最も単純なものを考えた。以下では、 $n = 100$, $p = 0.05$ として行った数値実験の結果について述べる。 λ は 0 から 0.05 刻みで動かし、各 λ の値ごとに異なる初期ネットワークから 100 個の最適化ネットワークを生成した。

図 3 は、各 λ の値ごとである一つの最適化ネットワークの矢印の有向媒介中心性と側方媒介中心性の値の間の関係を示している。 λ が 0.2 程度までの値なら、両者の間のトレードオフ関係が成立しているように見える。そこで、各 λ における矢印の有向媒介中心性と側方媒介中心性の値の間の相関係数の平均値をプロットしてみると図 4 のようになる。0 \leq λ \leq 0.10 では相関係数の平均値は負だが、0.15 \leq λ では正になっている。 $\lambda = 0.15, 0.20$ でも正になるのは、両方の値が小さい矢印が多数あることによると考えられる。このため、相関係数が負であることがトレードオフ関係のよい指標となるとはいえないが、いずれにせよ、側方効率性への重みが大きいエネルギー関数への最適化によって、有向媒介中心性と側方媒介中心性の値の間のトレードオフ関係が実現されるといってよいであろう。注意したいのは、進化の駆動力におけるトレー

ドオフと、進化の結果として得られる特性にみられるトレードオフは異なる概念であり、駆動力において偏った方向に最適化したとしても、進化の結果として得られる特性においてシステム内に分化が起こりうるということである。

最適化ネットワークにおける矢印の有向媒介中心性と側方媒介中心性の値の分布が有意であるかどうか調べるために、各最適化ネットワークごとにそれぞれの値のKolmogorov-Smirnov検定を行った。ただし、各最適化ネットワークごとに矢印を頂点の次数を保ちつつランダムに張り替えたネットワークを100個用意し、その平均累積分布関数を有向媒介中心性および側方媒介中心性に対して計算し、既知の累積分布関数として取り扱った。Kolmogorov-Smirnovの D (最適化ネットワークでの媒介中心性の累積分布関数と既知の累積分布関数の差の絶対値の最大値)の平均値と p 値の平均値を図5に示す。有向媒介中心性の p 値は $\lambda = 0.40$ 前後で0.005近くまで増加し、標準偏差も大きいものの、いずれの λ の値においても最適化ネットワークの側方媒介中心性、有向媒介中心性の値の分布はランダムネットワークのそれとは有意に異なると考えてよいであろう。

次に、最適化ネットワークの矢印の向きを無視した無向ネットワークに関して標準的な複雑ネットワークの解析を行う[24]。

図6に、クラスター係数 C (頂点の近傍の頂点同士に辺がある度合いの指標、ネットワーク全体での三角形の個数3を長さ2の経路の個数(ただし経路をたどる向きは無視する)で割った値)と頂点間の平均最短経路長 l の各 λ での100個の最適化ネットワークの平均値、および同じ頂点数、矢印数のErdős-Rényiランダムネットワークでのクラスター係数 $C_{ER} = \langle k \rangle / n$ 、および平均最短経路長 $l_{ER} = \ln(n) / \ln(\langle k \rangle)$ の平均値を示す。ただし、 n は頂点数、 $\langle k \rangle$ は平均次数である。最適化ネットワークの平均最短経路長は l_{ER} と同程度の大きさであり、クラスター係数はどの λ でも C_{ER} に比べて少なくとも2倍程度大きい。これらより、最適化ネットワークはどの λ においてもスモールワールド性[34]を持つことが示唆される。スモールワールド性の度合いの定量的指標であるSmall-world-ness[19]の各 λ での平均値を図7に示す。Small-world-nessは

$$S = \frac{l_{ER}}{l} \frac{C}{C_{ER}},$$

で定義される。 $S > 1$ なるネットワークをスモールワールドと呼ぶことが提案されている。図7においてはどの λ においても S の値はおよそ2以上であり、この観点からも最適化ネットワークがスモールワールド性を持つことが支持される。

最適化ネットワークの頂点の次数分布を調べよう。図8に各 λ における100個の最適化ネットワークの頂点の平均次数分布 $P(k)$ を冪則で近似した場合の指数の値を示す。指数の推定は冪則を仮定する範囲を $[k_{min}, k_{max}]$ として、

$$P(k) = k^{-\alpha} / \zeta(\alpha, k_{min}, k_{max}), \quad \zeta(\alpha, k_{min}, k_{max}) = \sum_{k=k_{min}}^{k_{max}} k^{-\alpha}$$

として、最尤推定法[7]を用いて行った。 $[k_{min}, k_{max}]$ も[7]の方法により推定している。図8より、 α は λ が増加するにつれて減少する傾向があることが分かる。実際のデータでよく観察される指数 α は2から3程度の値とされており、対応する λ の範囲はおよそ $\lambda \in [0.2, 0.4]$ である。

局所クラスター係数の頂点の次数依存性を図9に示す。頂点 i での局所クラスター係数 C_i とは、頂点 i の近傍であるような頂点のペアでその間に辺が存在するものの個数を、頂点 i の近傍であるような頂点のペアの個数で割った値のことである。 $C(k)$ を次数 k の頂点の局所クラスター係数の平均値とする。図9に各 λ での100個の最適化ネットワークの $C(k)$ の平均値を k の一定範囲内において冪則 $C(k) \propto k^{-\beta}$ で近似したときの指数を示す。指数の決定は最小二乗法に依る。冪則が成立すると仮定する範囲は二乗統計量を用いて[7]と同様の方法で決定した。どの λ においても指数 β は2から3.5の間の値をとっている。つまり、 $C(k)$ は(一定範囲内で) k の減少関数である。このことはネットワークのモジュール性と関連付けられるとされており[27, 24]、モジュール性は生物ネットワークが一般に持つ特徴の一つである。

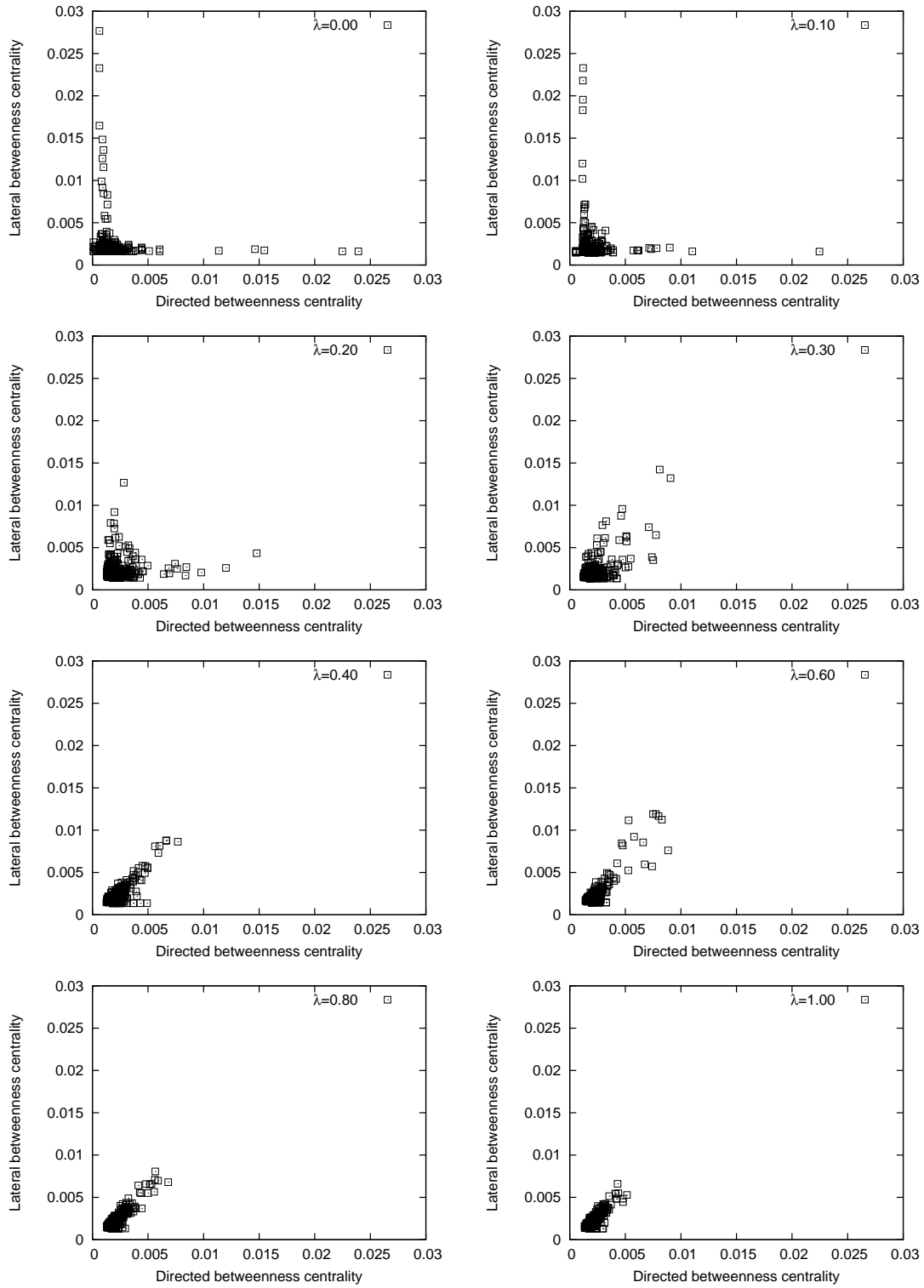


図 3: 各 λ におけるある一つの最適化ネットワークでの矢印の有向媒介中心性と側方媒介中心性の値の間の関係。

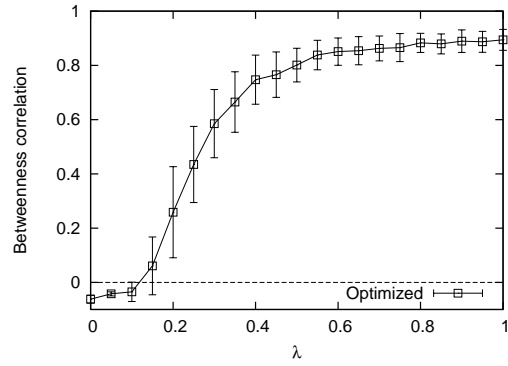


図 4: 各 λ における矢印の有向媒介中心性と側方媒介中心性の値の間の相関係数の平均値。バーは標準偏差。

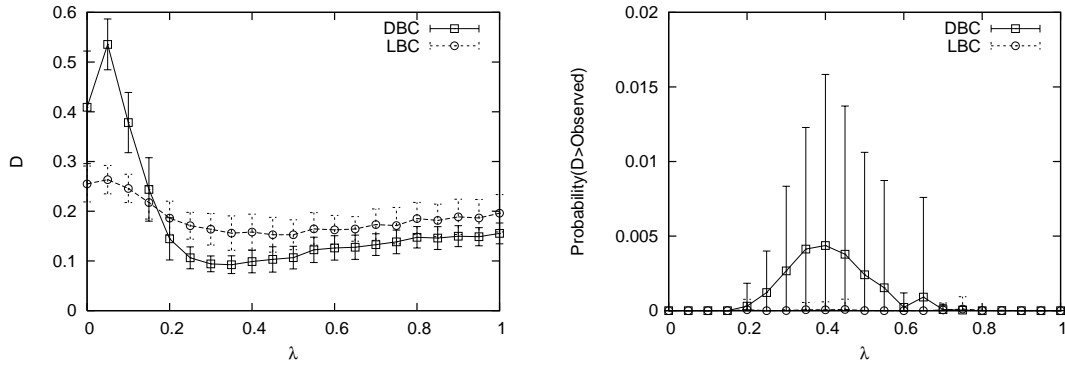


図 5: 最適化ネットワークの矢印の側方媒介中心性および有向媒介中心性の値の分布に対する Kolmogorov-Smirnov 検定の結果。詳細については本文を参照。

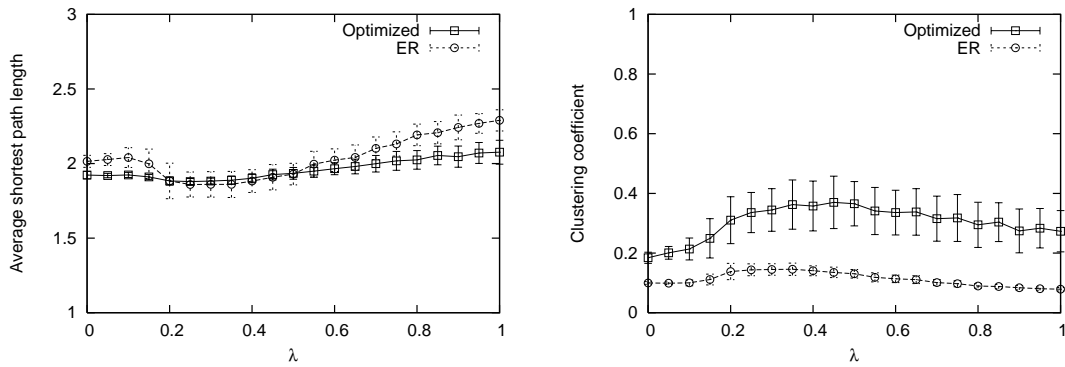


図 6: 各 λ における頂点間の平均最短経路長 (左) とクラスター係数 (右) の平均値。バーは標準偏差。ER は対応する Erdős-Rényi ランダムネットワークでの値。

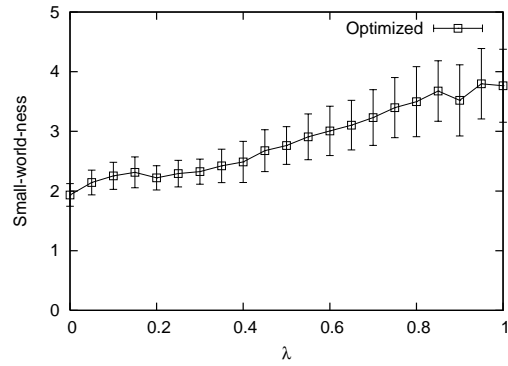


図 7: 各 λ における Small-world-ness の平均値。バーは標準偏差。

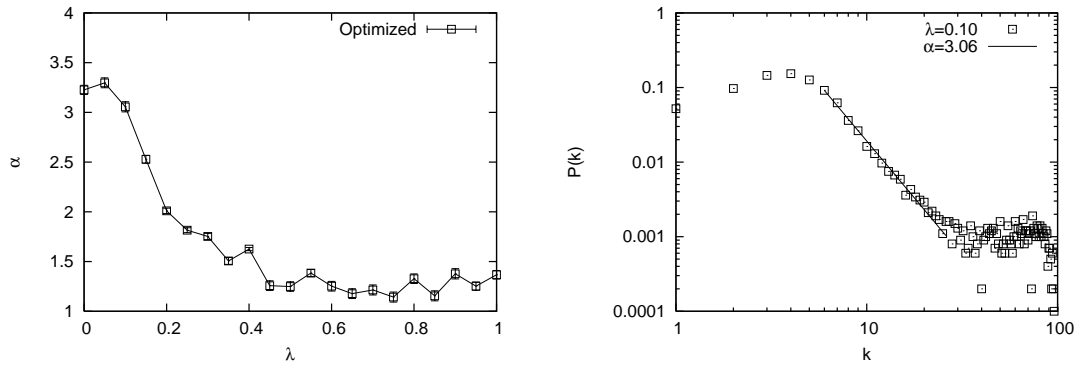


図 8: 各 λ における最適化ネットワークの頂点の平均次数分布を冪則 $P(k) \propto k^{-\alpha}$ で近似した場合の指数 α の値 (左)。平均次数分布の例として $\lambda = 0.10$ の場合を右に示す。

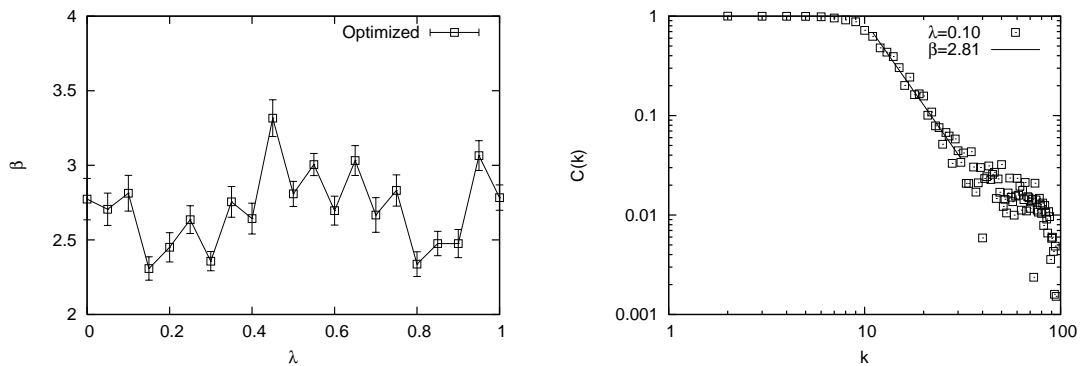


図 9: 各 λ での最適化ネットワークの局所クラスター係数の次数依存性を冪則 $C(k) \propto k^{-\beta}$ で近似したときの指数 β の値 (左)。 $\lambda = 0.10$ の場合の $C(k)$ を右に示す。

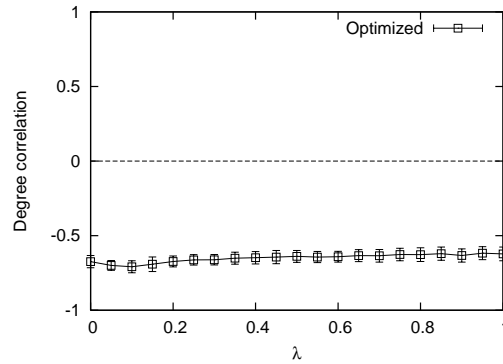


図 10: 各 λ における最適化ネットワークの次数相関係数の平均値。バーは標準偏差。

最後に、次数相関係数 [22] を調べる。次数相関係数 r は次式で定義され、ネットワークのタイプにより異なる値をとる傾向があることが知られている。

$$r = \frac{\sum_{i,j} (A_{ij} - k_i k_j / 2a) k_i k_j}{\sum_{i,j} (k_i - k_j)^2 k_i k_j}.$$

ただし、 A はネットワークの隣接行列、 k_i は頂点 i の次数、 a は辺の個数、 δ_{ij} は Kronecker のデルタである。特に、生物ネットワークは負の次数相関係数を持つことが多いとされている [22]。図 10 に各 λ での 100 個の最適化ネットワークの次数相関係数の平均値を示したが、どの λ でも有意に負の値をとっていることが分かる。

5 結論と今後の課題

本稿で得られた結果をまとめよう。

序において、特に生物ネットワークを念頭に置いて有向ネットワークに対する二つの在り方 (A), (B) を提示した。(A) の在り方では、ネットワークはその上を流れる何かの通路であり、ネットワーク自身は静的-構造的に捉えられる。一方で、(B) の在り方では、ネットワークはシステム構成要素の活動 (プロセス) を貼り合わせて構成されたパターンとして考えられ、(A) に比べてより動的-機能的に捉えられた。第 2 節において (B) の在り方を圏論的定式化し、対応する自然なネットワークの構造として側方経路を見出した。(A) に対応する有向経路は圏論的な意味での双対 (随伴関係) から得られた。

第 3 節では (A) と (B) という双対性がどのように実際の生物ネットワークに埋め込まれているかを調べるために、有向媒介中心性、側方媒介中心性という矢印の重要度の指標を導入した。それぞれ、ネットワーク上の輸送、ネットワークの一体性の保持、に関する重要度とみなすことができ、実際の生物ネットワークでは一方が大きければ他方が小さいというトレードオフの関係があることが見出された。

第 4 節では、実際の生物ネットワークのデータで観測されるような矢印の側方媒介中心性と有向媒介中心性の値の間のトレードオフ関係を説明すべく、複雑ネットワークの最適化モデルを導入し、数値実験の結果を述べた。側方効率性と有向効率性の線形結合を最適化すべきエネルギー関数とし、ネットワークを進化させると、上述のトレードオフ関係は側方効率性が大きな重みを持つエネルギー関数の下での最適化により出現することが見出された。さらに、無向化したネットワークの性質を標準的な複雑ネットワーク解析の手法により調べることで、最適化ネットワークはスモールワールド性、モジュール性、負の次数相関といった実際の生物ネットワークでよくみられる性質を持つことが分かった。また、次数分布のスケールフリー性について、エネルギー関数の側方効率性への重みが大きい一定の範囲内で、最適化ネットワークの次数分布の冪則は実際のデータで冪分布の場合にしばしば観測される 2 から 3 程度という指数の値をとることが分

かった。以上の結果は、生物ネットワークにおいては (B) の機能的-動的な在り方がより重要であることを示唆していると考えられよう。

最後に、本稿を終えるにあたって、今後応用が期待される話題としてネットワークの頑健性とコミュニティ抽出について触れたい。有向ネットワークのコンフィギュレーションモデル (与えられた次数分布を持つランダムネットワーク) に対しては、母函数法 [25] を用いて側方連結成分に関するジャイアントコンポーネント (ネットワーク全体で正の割合を占める連結成分、有限ネットワークでは最大連結成分で近似する) のサイズや出現条件などについて計算することができる。確率 p で矢印を取り除いたときジャイアントコンポーネントのサイズ S_{GC} がどう変化するかというパーコレーション問題を考える。 S_{GC} を p の函数としてグラフを描いたときの p 軸との間の面積はネットワーク頑健性の指標となる [30]。現実世界のネットワーク上で考えた場合と対応するコンフィギュレーションモデルで考えた場合とで比較することにより側方連結性に関するネットワークの頑健性に次数分布以外の構造がどのように寄与しているか定量することができ、また強連結性や弱連結性の場合とどのように寄与の仕方が異なるのか議論することができる。

コミュニティ抽出 [11] に関しては、例えば、Girvan-Newman のアルゴリズム [13] の側方経路版が考えられる。側方媒介中心性の値が大きい矢印はコミュニティ間にあると考え、側方媒介中心性の値が最も大きい矢印をその都度再計算しながら順次取り除いていく。この過程でもともと一つであった側方連結成分が分裂すれば、二つのコミュニティに分けられると解釈される。どの程度矢印を取り除くべきかを評価するために品質函数と呼ばれる指標が必要であるが、このときに第 2 節の標準表現 M_0 に関する安定性の条件を用いて、無向ネットワークの場合の辺密度 [1] の側方経路版を考えることができる。その他のコミュニティ抽出アルゴリズムとして、矢印上のランダムウォーク [9] を側方経路で考えて新たな modularity を導入することもできよう。以上の応用に関して詳述することは別の機会に譲ることとしたい。

謝辞

本研究は、JST 戦略的創造研究推進事業さきがけの一環として行われたものである。また、基礎物理学研究所研究会「物理と情報の階層構造 - 情報を接点とした諸階層の制御と創発 -」における議論は本研究を完成させるに当たり有益であった。ここに京都大学基礎物理学研究所への謝意を表す。最後に、本研究に関して多くの方にご助言を頂いたり議論をして頂いたりした。全ての方のお名前を列挙することはできないが、とりわけ、郡司幸夫先生、辻下徹先生、小嶋泉先生、塩谷賢博士、Igor Balaz 博士、西川アサキ博士、蓮尾一郎博士には格別の謝意を表したい。

参考文献

- [1] Y.-Y. Ahn, J. P. Bagrow, and S. Lehmann. Link communities reveal multiscale complexity in networks. *Nature*, 466:761–764, 2010.
- [2] R. Albert and A.-L. Barabási. Statistical mechanics of complex networks. *Rev. Mod. Phys.*, 74:47–97, 2002.
- [3] M. Arita. The metabolic world of *Escherichia coli* is not small. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 101:1543–1547, 2004.
- [4] S. Boccaletti, V. Latora, Y. Moreno, M. Chavez, and D.-U. Hwang. Complex networks: Structure and dynamics. *Phys. Rep.*, 424:175–308, 2006.
- [5] M. Brede. Growth and optimality in network evolution. *Artificial Life*, 17:281–291, 2011.

- [6] M. Brede and B. J. M. de Vries. Networks that optimize a trade-off between efficiency and dynamical resilience. *Physics Letters A*, 373:3910–3914, 2009.
- [7] A. Clauset, C. R. Shalizi, and M. E. J. Newman. Power-law distributions in empirical data. *SIAM Review*, 51:661–703, 2009.
- [8] A. C. Ehresmann and J.-P. Vanbreemsch. Hierarchical evolutive systems: a mathematical model for complex systems. *Bull. Math. Biol.*, 49:13–50, 1987.
- [9] T. S. Evans and R. Lambiotte. Line graphs, link partitions, and overlapping communities. *Phys. Rev. E*, 80:016105, 2009.
- [10] R. Ferrer i Cancho and R. V. Solé. Optimization in complex networks. In R. Pastor-Satorras et al., editor, *Statistical Mechanics of Complex Networks, No. 625 in Lecture Notes in Physics*, pages 114–125. Springer, Berlin, 2003.
- [11] S. Fortunato. Community detection in graphs. *Phys. Rep.*, 486:75–174, 2010.
- [12] L. C. Freeman. A set of measures of centrality based upon betweenness. *Sociometry*, 40:35–41, 1977.
- [13] M. Girvan and M. E. J. Newman. Community structure in social and biological networks. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 99:7821–7826, 2002.
- [14] T. Haruna. *Algebraic Theory of Biological Organization*. Doctoral Dissertation, Kobe University, 2008.
- [15] T. Haruna. An application of category theory to the study of complex networks. *International Journal of Computing Anticipatory Systems*, 23:146–157, 2010.
- [16] T. Haruna. Global structure of directed networks emerging from a category theoretical formulation of the idea “ objects as processes, interactions as interfaces ”. In T. Lenaerts et al., editor, *Advances in Artificial Life, ECAL 2011, Proceedings of the Eleventh European Conference on the Synthesis and Simulation of Living Systems*, pages 310–317, 2011.
- [17] T. Haruna and Y.-P. Gunji. Duality between decomposition and gluing: A theoretical biology via adjoint functors. *BioSystems*, 90:716–727, 2007.
- [18] T. Haruna and Y.-P. Gunji. Wholeness and information processing in biological networks: an algebraic study of network motifs. In Y. Suzuki et al., editor, *Natural Computing, 2nd International Workshop on Natural Computing*, pages 70–80, 2009.
- [19] M. D. Humphries and K. Gurney. Network ‘small-world-ness’: a quantitative method for determining canonical network equivalence. *PLoS ONE*, 3:e0002051, 2008.
- [20] V. Latora and M. Marchiori. Efficient behavior of small-world networks. *Phys. Rev. Lett.*, 87:198701, 2001.
- [21] S. MacLane. *Categories for the Working Mathematician, 2nd edition*. Springer-Verlag, New York, 1998.
- [22] M. E. J. Newman. Assortative mixing in networks. *Phys. Rev. Lett.*, 89:208701, 2002.
- [23] M. E. J. Newman. The structure and function of complex networks. *SIAM Review*, 45:167–256, 2003.

- [24] M. E. J. Newman. *Networks: An Introduction*. Oxford University Press Inc., New York, 2010.
- [25] M. E. J. Newman, S. H. Strogatz, and D. J. Watts. Random graphs with arbitrary degree distributions and their applications. *Phys. Rev. E*, 64:026118, 2001.
- [26] A. Pultr. On linear representations of graphs. In *Fundamentals of computation theory (Proc. Conf. Algebraic, Arith. And Categorical Methods in Comput. Theory, Berlin/Wendisch-Riets, 1979)*, *Math. Res. 2*, pages 362–369, 1979.
- [27] E. Ravasz and A.-L. Barabási. Hierarchical organization in complex networks. *Phys. Rev. E*, 67:026112, 2003.
- [28] R. Rosen. A relational theory of biological systems. *Bull. Math. Biophys.*, 20:245–260, 1958.
- [29] R. Rosen. The representation of biological systems from the standpoint of the theory of categories. *Bull. Math. Biophys.*, 20:317–341, 1958.
- [30] C. M. Schneider, A. A. Moreira, Jr. J. S. Andrade, S. Havlin, and H. J. Herrmann. Mitigation of malicious attacks on networks. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 108:3838–3841, 2011.
- [31] S. Shen-Orr, R. Milo, S. Mangan, and U. Alon. Network motifs in the transcriptional regulation network of escherichia coli. *Nature Genetics*, 31:64–68, 2002.
- [32] R.E. Ulanowicz, C. Bondavalli, and M.S. Egnotovich. Network analysis of trophic dynamics in south florida ecosystem, fy 97: The florida bay ecosystem. *Ref. No. [UMCES]CBL 98-123. Chesapeake Biological Laboratory, Solomons, MD 20688-0038 USA*, 1998.
- [33] L. R. Varshney, B. L. Chen, E. Paniagua, D. H. Hall, and D. B. Chklovskii. Structural properties of the caenorhabditis elegans neuronal network. *PLoS computational biology*, 7:e1001066, 2011.
- [34] D. J. Watts and S. H. Strogatz. Collective dynamics of ‘small-world’ networks. *Nature*, 393:440–442, 1998.
- [35] J. G. White, E. Southgate, J. N. Thomson, and S. Brenner. The structure of the nervous system of the nematode caenorhabditis elegans. *Phil. Trans. R. Soc. London B*, 314:1–340, 1986.
- [36] O. Wolkenhauer and J.-H. S. Hofmeyr. An abstract cell model that describes the self-organization of cell function in living systems. *J. Theor. Biol.*, 246:461–476, 2007.

量子相互エントロピーと量子相関

諏訪東京理科大学・経営情報学部 松岡隆志 (Takashi Matsuoka)

Department of Business Administration and Information

Tokyo University of Science, Suwa

1. 始めに

二つ以上の系の中に存在する、量子系特有の強い干渉性を有する状態は、量子エンタングルド状態と呼ばれ、その干渉性故に、量子情報分野の中核的な役割を担うものとして、近年頃にその重要性が指摘され、多くの研究がなされている。

ところで、古典系の合成系の状態は、その部分系の確率分布を周辺分布として持つような同時(結合) 確率分布によって表現され、部分系間の相関の度合いを測る指標の一つに相互エントロピーがある。その定義は、合成系の同時確率分布と、その部分系が互いに独立としたときの周辺分布の積による同時確率分布との相対エントロピーとして与えられる。よく知られているように、この相互エントロピーは、通信路への適用という視点に立てば、部分系の一方を入力系、他方を出力系として、通信路を推移確率行列(あるいはマルコフ核)として与えた場合、その通信路によって入力系から出力系に伝送される情報量とみなすことができる。このスキームを量子系に拡張しようとするときの困難は、量子確率論(非可換確率論)においては、一般に、測度論的確率論における同時確率分布と同様の性質(一種の分配則)を持つような合成状態を構成できないことに因る(詳細な議論は[19, 22]を参照)。よって、量子合成系の相関の度合いや量子通信路によって伝達される情報量を測る指標としての相互エントロピーを導入するには、まず、適切な合成状態をどのように構成するかが問題となる。その一つの答えが、Ohyaによって与えられている[17,18]が、現在の量子情報理論の多くの文脈では、上記の問題点に関する注意は、あまり払われずに議論が展開しているように筆者には思える。

さて、エンタングルド状態の数学的な定義は、合成系の可分割(分離可能)な状態を定義することで、可分割ではない状態として与えられる。いま、二つの Hilbert 空間 h 、 k からなる量子合成系を考えれば、その合成状態がテンソル積 $h \otimes k$ 上の密度作用素で与えられるとすると、それが可分割であるとは、 h 、 k 上の密度作用素 ρ_i 、 σ_j ($i, j = 1, 2, \dots$) が存在して、

$$\sum p_{ij} \rho_i \otimes \sigma_j, \quad p_{ij} \geq 0, \quad \sum p_{ij} = 1 \quad (1.1)$$

と分割できることをいう。(1.1)式における (p_{ij}) は古典離散系における同時確率分布とみなせ、よって、『可分割な状態は古典的な干渉性を有する状態に対応し、可分割ではない状態(エンタング

ルド状態) が量子系特有の干渉性を示す状態に対応する』とされる。しかし、近年の量子相関の研究によって、このことは決して自明ではない例が報告されており [7,12,20]、『何を持って量子相関と呼べるのか、という基本的かつ概念的な問いには、いまだ適切な答えは存在しない』というのが、筆者のエンタングルメント研究における現状認識である。

また、量子エンタングルメントに関する結果は有限次元に関するものが多く、無限次元の系において、エンタングルド状態の性質を厳密に解明し、分類、特徴付けることもあまりできていない。Belavkin と Ohya は従来のエンタングルド状態の定義 (i.e., 1.1 式による定義) とは別に、無限次元 Hilbert 空間上の量子合成系において、エンタングルド状態の数学的な構造を解明すべく、Hilbert-Schmidt 作用素の手法を用いたアプローチを示した [4,5]。一方、Kossakowski 達は、有限次元 Hilbert 空間上の量子合成系に量子条件付き確率作用素を導入し、古典系の同時確率分布の構成法のアナロジーとして、合成系の密度作用素を量子条件付き確率作用素で表すことによって、合成状態の分類を試みている [2]。

本稿では、Belavkin-Ohya の手法と Kossakowski 達の手法との関連性に着目し、過去に導入された量子系の二つのタイプの相互エントロピーの関連とその新しい解釈を導くことで、量子相関の在り様を考察する。本稿で報告される研究結果 [9,11] は、D.Chruscinski 教授、A.Kossakowski 教授 (両名ともコペルニクス大学)、M.Ohya 教授 (東京理科大学) との共同研究によるものである。

2. エンタングルメント写像と量子条件付き確率作用素

可分割な状態とエンタングルド状態の定義を、本稿で使用する記法に基づいて、再度、確認しておこう。 $\mathfrak{h}_1, \mathfrak{h}_2$ は、合成系を構成する部分系の可分な Hilbert 空間とし、 $\mathfrak{b}(\mathfrak{h}_i)_{i=1,2}$ は \mathfrak{h}_i 上の有界線形作用素の全体、 $\mathfrak{s}(\mathfrak{h}_i)_{i=1,2}$ を $\mathfrak{b}(\mathfrak{h}_i)$ 上の状態 (i.e., $\mathfrak{b}(\mathfrak{h}_i)$ の正規化された正値線形汎関数の全体) とする。さて、 $\mathfrak{h}_1 \otimes \mathfrak{h}_2$ 上の有界線形作用素の全体 $\mathfrak{b}(\mathfrak{h}_1 \otimes \mathfrak{h}_2)$ では、

$$\mathfrak{b}(\mathfrak{h}_1 \otimes \mathfrak{h}_2) = \mathfrak{b}(\mathfrak{h}_1) \otimes \mathfrak{b}(\mathfrak{h}_2)$$

が成立するが、状態の集合においては、この事実は成立せず、このことがエンタングルド状態の存在と対応する。合成系の可分割な状態の全体を $\mathfrak{s}(\mathfrak{h}_1 \otimes \mathfrak{h}_2)_{\text{sep}}$ とすれば、定義(1.1)から

$$\mathfrak{s}(\mathfrak{h}_1 \otimes \mathfrak{h}_2)_{\text{sep}} = \text{conv}(\mathfrak{s}(\mathfrak{h}_1) \otimes \mathfrak{s}(\mathfrak{h}_2)) \quad (\text{conv} = \text{convex combination})$$

であり、よって、エンタングルド状態の全体 $\mathfrak{s}(\mathfrak{h}_1 \otimes \mathfrak{h}_2)_{\text{ent}}$ は、 $\mathfrak{s}(\mathfrak{h}_1 \otimes \mathfrak{h}_2)$ の部分集合として、次のように与えられる。

$$\mathfrak{s}(\mathfrak{h}_1 \otimes \mathfrak{h}_2)_{\text{ent}} = \mathfrak{s}(\mathfrak{h}_1 \otimes \mathfrak{h}_2) \setminus \mathfrak{s}(\mathfrak{h}_1 \otimes \mathfrak{h}_2)_{\text{sep}}$$

2.1 エンタングルメント写像を用いた合成状態の構成

Belavkin と Ohya による合成状態の分類手法[4,5]を振り返ろう。いま、 $\omega \in \mathfrak{s}(\mathfrak{h}_1 \otimes \mathfrak{h}_2)$ を正規状態 (i.e., ω は超弱位相で連続) とすれば、ある密度作用素 θ が存在して、

$$\omega(A \otimes B) = \text{tr}_{\mathfrak{h}_1 \otimes \mathfrak{h}_2} (A \otimes B) \theta, \quad A \in \mathfrak{b}(\mathfrak{h}_1), B \in \mathfrak{b}(\mathfrak{h}_2) \quad (2.1)$$

と書ける。(以下、状態は全て正規状態を仮定する。) ここで、部分トレースを用いて、写像 ϕ 、 ϕ^* を

$$\phi(B) = \text{tr}_{\mathfrak{h}_2} \theta(I \otimes B), \quad \phi^*(A) = \text{tr}_{\mathfrak{h}_1} \theta(A \otimes I) \quad (2.2)$$

と与えると、 ϕ は、 $\mathfrak{B}(\mathfrak{h}_2)$ から $\mathfrak{B}(\mathfrak{h}_1)_*$ ($\equiv \{A \in \mathfrak{B}(\mathfrak{h}_1); \text{tr} \sqrt{A^* A} < \infty\}$) への線形写像であり、

ϕ の共役写像 ϕ^* は $\mathfrak{B}(\mathfrak{h}_1)$ から $\mathfrak{B}(\mathfrak{h}_2)_*$ への線形写像となるが、この ϕ 、 ϕ^* を用いれば、合成状態 ω は、次のように表現できる。

$$\omega(A \otimes B) = \text{tr}_{\mathfrak{h}_1} A \phi(B) = \text{tr}_{\mathfrak{h}_2} \phi^*(A) B \quad (2.3)$$

このとき、(2.2)式から $\rho_1 = \text{tr}_2 \theta (\equiv \text{tr}_{\mathfrak{h}_2} \theta)$ 、 $\rho_2 = \text{tr}_1 \theta (\equiv \text{tr}_{\mathfrak{h}_1} \theta)$ とすれば、 $\rho_1 = \phi(I)$ 、 $\rho_2 = \phi^*(I)$ であることが分かる。(2.2)式で与えられる ϕ 、 ϕ^* をエンタングルメント写像、あるいは単にエンタングルメントと呼ぶ。このエンタングルメント写像の正值性が、合成状態の分類を与える。

写像 $\Lambda : \mathfrak{B}(\mathfrak{h}_1) \mapsto \mathfrak{B}(\mathfrak{h}_2)$ が完全正 (complete positive、以下 CP と略) (resp. 完全共正 (complete co-positive、以下 CCP と略)) であるとは、任意の $n \in \mathbf{N}$ において、 $n \times n$ の正定値作用素行列 $[A_{ij}]$ ($A_{ij} \in \mathfrak{B}(\mathfrak{h}_1)$) に対し、常に $[\Lambda(A_{ij})] > 0$ (resp. $[\Lambda(A_{ji})] > 0$) が成立することをいう。これらの写像の正值性に対して、一般に、 ϕ 、 ϕ^* は常に CCP ではあるが、CP とは限らないことが示せる。加えて、次の定理が成立する[4,5,16]。

定理 1 (1) 状態 ω が純粋状態のとき、次が成立。

$$\omega \in \mathfrak{s}_{\text{sep}} \Leftrightarrow \phi \text{ は CP。} (\omega \in \mathfrak{s}_{\text{ent}} \Leftrightarrow \phi \text{ は CP ではない。)}$$

(2) $\mathfrak{h}_1 \otimes \mathfrak{h}_2 \cong \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ or $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^3$ or $\mathbb{C}^3 \otimes \mathbb{C}^2$ のとき、次が成立。

$$\omega \in \mathfrak{s}_{\text{sep}} \Leftrightarrow \phi \text{ は CP。} (\omega \in \mathfrak{s}_{\text{ent}} \Leftrightarrow \phi \text{ は CP ではない。)}$$

(3) (1)と(2)以外の場合において、次が成立。

$$\omega \in \mathfrak{s}_{\text{sep}} \Rightarrow \phi \text{ は CP。} (\phi \text{ は CP でない。} \Rightarrow \omega \in \mathfrak{s}_{\text{ent}}) \text{ 逆は、一般に成立しない。}$$

定理1の(2)は、HorodeckisがPPT(Partial Positive Transposition)条件と呼ばれる指標を用いて示した可分割状態の特徴づけと同じ条件で成立する結果だが、上記の結果は、PPT条件が ϕ のCP性によって特徴づけられることに因っている[16]。

さて、(2.2)の ϕ は、簡単な計算から、 h_2 の任意の直交規定 $\{e_i\}$ において、 θ を次のように再構成することが分かる。

$$\theta = \sum \phi(|e_i\rangle\langle e_j|^*) \otimes |e_i\rangle\langle e_j| \quad (2.4)$$

BelavkinとOhyaは、上記の考察を踏まえ、一般化されたエンタングルメントの概念を次のように導入し、一般の合成状態の構成法を与えた。

定義1 正規化されたCCP写像

$$\phi: b(h_2) \rightarrow b(h_1)_* \quad (\text{i.e., } \text{tr}_1 \phi(I) = 1) \quad (2.5)$$

を、状態 $\rho_2 = \phi^*(I)$ から状態 $\rho_1 = \phi(I)$ への(一般化された)エンタングルメントと呼び、その全体を \mathbf{e} と表記する。

エンタングルメント $\phi \in \mathbf{e}$ が与えられれば、合成状態 ω_ϕ を、次のように構成できる。

$$\omega_\phi(A \otimes B) \equiv \text{tr}_{12}(A \otimes B)\theta_\phi \quad (2.6)$$

$$\theta_\phi \equiv \sum \phi(|e_i\rangle\langle e_j|^*) \otimes |e_i\rangle\langle e_j| \quad (2.7)$$

いま、 \mathbf{e} の部分集合として、次を定義しよう。

定義2 $\phi \in \mathbf{e}$ がCP写像でないとき、 ϕ をq-entanglementと呼び、その集合を \mathbf{e}_q と表記する。

定理1の(3)から、 $\phi \in \mathbf{e}_q$ をとれば、我々はいつでもエンタングルド状態 $\omega_\phi \in \mathbf{s}_{\text{ent}}$ を構成できることが分かる。

BelavkinとOhyaは、エンタングルメント ϕ, ϕ^* がHilbert-Schmidt作用素を用いて構成可能なことを示し、合成状態の数学的構造の厳密な議論を展開している[4,5]が、その詳細は、本稿では割愛する。

2.2 量子条件付き確率作用素を用いた合成状態の構成

古典系における同時確率分布は条件付き確率分布を用いて構成されるが、Asorey, Kossakowski, Marmo, Sudarshanは、そのスキームを量子系に拡張するために、量子条件付き確率作用素(Quantum Conditional Probability Operator)を有限次元の量子系に導入した[2]。

以降、本稿の議論は全て $\dim \mathfrak{h}_i < \infty (i=1,2)$ を仮定する。議論を進める前に、有限次元の量子系に関する必要な要点を簡単にまとめておこう。 $\dim \mathfrak{h}_i = n$ とすれば、 $\mathfrak{h}_i \cong \mathbb{C}^n$ かつ

$\mathfrak{b}(\mathfrak{h}_i) \cong M_n = M_n(\mathbb{C})$ ($n \times n$ 複素行列代数) であり、 $\mathfrak{b}(\mathfrak{h}_i)$ 上の全ての位相は一致する。また、各々の状態 $\psi \in \mathfrak{s}(\mathfrak{h}_i)$ に対して、密度行列 $\rho \in \mathfrak{s}_n \equiv \{\rho \in M_n; \rho \geq 0, \text{tr} \rho = 1\}$ が一意に存在して、 $\psi(A) = \text{tr} \rho A (A \in \mathfrak{b}(\mathfrak{h}_i) = M_n)$ が成立するから、 $\mathfrak{s}(\mathfrak{h}_i)$ は \mathfrak{s}_n と同一視できる。さらに、写像 $\Lambda: M_n \mapsto M_n$ が $n \times n$ の正定値作用素行列 $[A_{ij}] (A_{ij} \in M_n)$ に対し、常に $[\Lambda(A_{ij})] > 0$ (resp. $[\Lambda(A_{ji})] > 0$) が成立すれば、 Λ は CP (resp. CCP) であることが示される。以上を踏まえて、以降、 $\mathfrak{h}_i = \mathbb{C}^n$ 、 $\mathfrak{b}(\mathfrak{h}_i) = M_n$ 、 $\mathfrak{s}(\mathfrak{h}_i) = \mathfrak{s}_n$ として議論を進める。

合成状態 $\theta \in \mathfrak{s}(\mathfrak{h}_1 \otimes \mathfrak{h}_2) = \mathfrak{s}_{n \times n}$ の周辺状態 $\rho_1 = \text{tr}_2 \theta$ が忠実な状態 (i.e., $\ker \rho = \{0\}$) で与えられるとして、作用素 $\pi_\theta \in \mathfrak{b}(\mathfrak{h}_1 \otimes \mathfrak{h}_2) = M_{n \times n}$ を次の様に定義する []。

$$\pi_\theta \equiv \left(\rho_1^{-1/2} \otimes I \right) \theta \left(\rho_1^{-1/2} \otimes I \right) \quad (2.8)$$

このとき、 π_θ は、次の性質を持つ。

$$\pi_\theta \geq 0 \quad (2.9)$$

$$\text{tr}_2 \pi_\theta = I \quad (2.10)$$

条件(2.7)、(2.8)は、古典系の条件付き確率を与える性質の量子版と解釈できるとして、Kossakowski 達は、次の定義を与えた。

定義 3 $\pi \in \mathfrak{b}(\mathfrak{h}_1 \otimes \mathfrak{h}_2)$ が、条件(2.7)、(2.8)を満たすとき、 π を量子条件付き確率作用素(以下、QCPOと略。)と呼ぶ。

1節で指摘したように、量子系においては、一般に同時確率分布は存在しないが、この事実は条件付き確率に対しても成立する。この状況を踏まえれば、条件(2.7)、(2.8)を満たすからといってその作用素に“条件付き確率”の名前を冠することが適切かどうかは、一考を要すると思えるが、いまは、話を進めよう。

QCPO π から、合成状態 θ_π を構成する。忠実な状態の集合を $\mathfrak{d}(\mathfrak{h}_i) = \{\rho \in \mathfrak{s}_n; \ker \rho = \{0\}\}$ とし、QCPO π と状態 $\rho \in \mathfrak{d}(\mathfrak{h}_1)$ を用いれば、 θ_π は次のように与えられる。

$$\theta_\pi = \left(\rho^{\frac{1}{2}} \otimes I \right) \pi \left(\rho^{\frac{1}{2}} \otimes I \right) \quad (2.11)$$

ここで、 θ_π の $\mathfrak{b}(\mathfrak{h}_1)$ 上の周辺状態 ρ_1 は $\rho_1 \equiv \text{tr}_2 \theta_\pi = \rho$ であり、 θ_π の $\mathfrak{b}(\mathfrak{h}_2)$ 上の周辺状態 ρ_2 は $\rho_2 \equiv \text{tr}_1 \theta_\pi$ と与えられる。

エンタングルメント ϕ (i.e., 正規化されたCCP写像) が合成状態 θ_ϕ を構成したように、正規化さ

れたCP写像 $\varphi: \mathfrak{b}(\mathfrak{h}_2) \rightarrow \mathfrak{b}(\mathfrak{h}_1)$ (i.e., $\varphi(I) = I$) を用いれば、QCPO π_φ を次のように構成できる。

$$\pi_\varphi \equiv \sum \varphi(|e_i\rangle\langle e_j|) \otimes |e_i\rangle\langle e_j| \quad (2.12)$$

ここで、 $\{e_i\}$ は \mathfrak{h}_2 の適当な直交基底であり、 π_φ は条件(2.7)、(2.8)を満たすことが容易に示せる。このとき、 $\rho_1 \in \mathfrak{d}(\mathfrak{h}_1)$ が与えられれば、 φ から構成される合成状態 θ_φ を π_φ を介して、次のように定めることができる。

$$\begin{aligned} \theta_\varphi &\equiv (\rho_1^{1/2} \otimes I) \pi_\varphi (\rho_1^{1/2} \otimes I) \\ &= \sum \rho_1^{1/2} \varphi(|e_i\rangle\langle e_j|) \rho_1^{1/2} \otimes |e_i\rangle\langle e_j| \end{aligned} \quad (2.13)$$

このとき、次の定理が成立する[2]。

定理 2 $\theta_\varphi \in \mathfrak{s}_{\text{sep}} \Rightarrow \varphi$ は CCP。(φ は CCP でない。 $\Rightarrow \theta_\varphi \in \mathfrak{s}_{\text{ent}}$) (逆は、一般に成立しない。)

2.3 エンタングルメント ϕ を用いた合成状態の構成法と QCPO π_ϕ による構成法の同源性

θ_φ (2.7式) と θ_ϕ (2.13式) の関連を示そう。そのkeyとなるのは、Belavkin と Dai によるエンタングルメント $\phi \in \mathfrak{e}$ の分解性に関する次の定理である[3]。

定理 3 周辺状態 $\phi(I) = \rho_1 \in \mathfrak{d}$ を持つエンタングルメント $\phi \in \mathfrak{e}$ に対して、正規化された CP 写像 φ (i.e., $\varphi(I) = I$) が一意に存在して、 ϕ は次のように分解される。

$$\phi(\bullet) = \rho_1^{1/2} (\varphi \circ \tau(\bullet)) \rho_1^{1/2} \quad (2.14)$$

ここで、 τ は転置を与えるオペレーションであり、(2.14)の φ は、次の解を持つ。

$$\varphi(\bullet) = \rho_1^{-1/2} (\phi \circ \tau(\bullet)) \rho_1^{-1/2} \quad (2.15)$$

定理 3 から、 θ_ϕ は(2.15)の φ から構成される QCPO を用いて、次のように書き直すことができる[9]。

$$\theta_\phi = (\rho_1^{1/2} \otimes I) \pi_\phi (\rho_1^{1/2} \otimes I) \quad (2.16)$$

ここで、 τ を直交基底 $\{e_j\}$ 上での転置とすれば、 π_ϕ は、

$$\pi_\phi \equiv \pi_\varphi = \sum \varphi(|e_i\rangle\langle e_j|) \otimes |e_i\rangle\langle e_j| = \sum \rho_1^{-1/2} (\phi \circ \tau(|e_i\rangle\langle e_j|)) \rho_1^{-1/2} \otimes |e_i\rangle\langle e_j| \quad (2.17)$$

と与えられる。

(2.16)は、 $\phi \in \mathfrak{e}$ から構成される一般の合成状態 θ_ϕ が、エンタングルメント ϕ を介して、QCPO π_ϕ と周辺状態 $\rho_1 \in \mathfrak{s}(\mathfrak{h}_1)$ との積に分解できることを示しており、古典系の同時確率分布 $p(i, j)$ と条件付き確率分布 $p(j|i)$ との間に成立する基本等式 (i.e., $p(i, j) = p(i) p(j|i)$ 、 $p(i)$ は j で和を取ったときの $p(i, j)$ の周辺分布) の量子系への拡張版とみなすことができる。

我々は、合成状態 θ_ϕ の分解(2.16)を土台において、 θ_ϕ が有する相関を、量子相互エントロピーを用いて解析する。その本題に入る前に、次節において、古典相互エントロピーが評価する古典系の相関の要点を簡単に振り返っておこう。

3. 古典系の相互エントロピーの基本性質と古典相関

$X = \{x_i\}_{i=1, \dots, n}$ 、 $Y = \{y_j\}_{j=1, \dots, n}$ を夫々、確率分布 $P = (p_i)$ 、 $Q = (q_j)$ を持つ確率変数とし、その合成系を $(X \otimes Y = \{(x_i, y_j)\}, R = (r_{ij}))$ ($\sum_{i,j} r_{ij} = 1, \sum_j r_{ij} = p_i, \sum_i r_{ij} = q_j$) と定めよう。このとき、同時確率 r_{ij} は、条件付き確率 $p(i|j)$ (Y の観測のもとでの X の条件付き確率)、あるいは $p(j|i)$ (X の観測のもとでの Y の条件付き確率) を用いて、次のように表される。

$$r_{ij} = p(i|j)q_j = p(j|i)p_i \quad (3.1)$$

このとき、 X と Y のエントロピー $S(X)$ 、 $S(Y)$ 、相互エントロピー $I(X, Y)$ は、それぞれ、次で定義される。

$$S(X) = -\sum p_i \log p_i, \quad S(Y) = -\sum q_j \log q_j \quad (3.2)$$

$$I(X, Y) = \sum_{i,j} r_{ij} \log \frac{r_{ij}}{p_i q_j} \quad (3.3)$$

$$= S(X) + S(Y) - S(X \otimes Y) \quad (3.4)$$

(3.4)より、 $I(X, Y)$ は X と Y の間の相関を通して互いに共有される情報量だと解釈できる。特に、次が成立する。

$$I(X, Y) = S(X) = S(Y) \Leftrightarrow r_{ij} = \begin{cases} p_i = q_j & \Leftrightarrow i = j \\ 0 & \Leftrightarrow i \neq j \end{cases} \Leftrightarrow p(i|j) = p(j|i) = \delta_{i,j} \quad (3.5)$$

$$I(X, Y) = 0 \Leftrightarrow r_{ij} = p_i q_j \Leftrightarrow p_i = p(i|j), q_j = p(j|i) \quad (3.6)$$

(3.5)は、 X (resp. Y)を観測することで Y (resp. X)の情報を完全に取得できることを示しており、そのことをして、完全な相関が存在すると了解する。それに反して、(3.5)は、 X (resp. Y)を観測しても Y (resp. X)の情報を全く取得できない状況に対応し、よって、我々は X と Y の間は無相関と了解する。確率の言葉でいえば、独立な場合に対応する。

さて、(3.3)で定義される相互エントロピーは、古典情報理論においては、通信路を介して入力系から出力系に伝送される情報量としての側面を持つ。いま、 (X, P) を入力系、 (Y, Q) を出力系、条件付き確率分布 $(p(j|i))$ を推移確率行列(i.e., $q_j = \sum_i p(j|i)p_i$)として、入力系から出力系への通信路 Λ^* としてとらえれば、相互エントロピー $I(X, Y)$ は次の式変形によって、入力系から出力系への通信路 Λ^* を介した伝送情報量 $I(P; \Lambda^*)$ と了解される。

$$\begin{aligned} I(X, Y) &= \sum_{i,j} r_{ij} \log \frac{r_{ij}}{p_i q_j} \\ &= \sum_{i,j} p(j|i) p_i \log \frac{p(j|i) p_i}{p_i q_j} \\ &= \sum_{i,j} p(j|i) p_i \log \frac{p(j|i)}{\sum_k p(j|k) p_k} \equiv I(P; \Lambda^*) \quad (3.7) \end{aligned}$$

すなわち、相互エントロピーが計量する古典系の相関は、周辺分布から周辺分布へ伝送され得る

情報量と等価であると解釈することが可能である。このとき、次の基本不等式が成立する。

$$0 \leq I(P; \Lambda^*) \leq \min \{S(P), S(\Lambda^*(P))\} \quad (3.8)$$

ここで、 $S(P) \equiv S(X)$, $S(\Lambda^*(P)) \equiv S(Y)$ 。

次節において、我々は、上記の古典情報理論のスキームが量子系においてどのように拡張され得るか、合成状態 θ_ϕ の分解(2.16)を土台にして議論する。

4. 量子相関・再考

4.1 量子相互エントロピーと量子相関

古典系の相互エントロピーの定義(3.3)に準じて、量子系においてもUmegakiの相対エントロピー[20]を用いて、量子系への拡張版を次のように定義する[4,5]。

$$\begin{aligned} I_\phi(\rho_1, \rho_2) &\equiv S(\theta_\phi, \rho_1 \otimes \rho_2) \\ &= \text{tr} \theta_\phi (\log \theta_\phi - \log \rho_1 \otimes \rho_2) \end{aligned} \quad (4.1)$$

ここで、 $\rho_1 = \phi(I)$, $\rho_2 = \phi^*(I)$ 。上記のエンタングルメント ϕ を明示した量子相互エントロピー $I_\phi(\rho_1, \rho_2)$ はBelavkinとOhyaによって与えられたが、有限次元合成系上の密度行列 θ に対する量子相互エントロピーは(4.1)と同様の定義で、他の研究者達によっても与えられており、量子エンタングルメント、量子相関の文脈で多くの研究がなされている。(例えば、Cref & Adami[6], Groisman et al[11], Henderson & Vedral[12], Horodeckies[14], etc.)

さて、(4.1)は、次のようにvon Neumann エントロピー $S(\rho) (\equiv -\text{tr} \rho \log \rho)$ の和に分解できる。

$$\begin{aligned} I_\phi(\rho_1, \rho_2) &= \text{tr} \theta_\phi (\log \theta_\phi - \log \rho_1 \otimes \rho_2) \\ &= \text{tr} \theta_\phi (\log \theta_\phi - \log \rho_1 \otimes I - \log I \otimes \rho_2) \\ &= -S(\theta_\phi) - \text{tr}_2 \theta_\phi \log \rho_1 \otimes I - \text{tr}_1 \theta_\phi \log I \otimes \rho_2 \\ &= S(\rho_1) + S(\rho_2) - S(\theta_\phi) \end{aligned} \quad (4.2)$$

(4.2)は、古典系の相互エントロピーの分解(3.4)と同様であり、よって、 $I_\phi(\rho_1, \rho_2)$ も部分系間の相関を通して共有できる情報量との解釈が一見成立するかに思えるが、 $I_\phi(\rho_1, \rho_2)$ は古典系にはない相関の在り様を計量する。このことを、以下、いくつかの具体的なエンタングルメント ϕ の相互エントロピー $I_\phi(\rho_1, \rho_2)$ を計算することで見ていこう。

例1 : -直積状態(Product state)-

$$\phi(B) \equiv \rho_1 \text{tr} \rho_2 B, \quad \phi^*(A) \equiv \rho_2 \text{tr} \rho_1 A \quad \Rightarrow \quad \theta_\phi = \rho_1 \otimes \rho_2$$

$$I_\phi(\rho_1, \rho_2) = S(\rho_1) + S(\rho_2) - S(\theta_\phi) = 0 \quad (4.3)$$

ここで、(4.3)は、 $S(\theta_\phi) = S(\rho_1) + S(\rho_2)$ と分解できることに因る。直積状態の相関は0であり、

これは我々の直観とも対応する自然な結果である。また、後述するが、相対エントロピーの性質から $I_\phi(\rho_1, \rho_2) = 0$ の必要十分条件は、 $\theta_\phi = \rho_1 \otimes \rho_2$ であることが示せる。そこで、次のように合成系の分類を与える。

定義 4 直積状態ではない合成状態を相関状態と呼ぶ。直積状態の全体を \mathbf{s}_p 、相関状態の全体を \mathbf{s}_c 、可分割な相関状態の全体を \mathbf{s}_{sc} 、非可分割な状態(エンタングルド状態)の相関状態の全体を \mathbf{s}_{ec} と表記する。

いま、 $\mathbf{s}_{ec} = \mathbf{s}_{ent}$ であることに注意して、定義4に準じれば、合成状態の全体は次のように大別される。

$$\mathbf{s}(\mathbf{h}_1 \otimes \mathbf{h}_2) = \mathbf{s}_p \cup \mathbf{s}_c = \mathbf{s}_p \cup \mathbf{s}_{sc} \cup \mathbf{s}_{ent} \quad (4.4)$$

例 2 : -可分割な相関状態(\mathbf{s}_{sc})-

$$\phi(B) = \sum p_i \rho_1(i) \text{tr} \rho_2(i) B, \quad \phi(A) = \sum p_i \rho_2(i) \text{tr} \rho_1(i) A \Rightarrow \theta_\phi = \sum p_i \rho_1(i) \otimes \rho_2(i)$$

ここで、 $p_i \geq 0, \sum p_i = 1$ であり、周辺状態は $\rho_1 = \sum p_i \rho_1(i), \rho_2 = \sum p_i \rho_2(i)$ となる。このとき、可分割な相関状態 $\theta_\phi \in \mathbf{s}_{sc}$ に対して、次の不等式が成立する[1,4,5]。

$$0 < I_\phi(\rho_1, \rho_2) \leq \min\{S(\rho_1), S(\rho_2)\} \quad (4.5)$$

不等式(4.5)は、古典系の相互エントロピーが満たす基本不等式(3.8)に対応する。この意味で、可分割な相関状態は古典系と同様の相関を有している。ただし、だからと言って、可分割な状態が示す相関を古典相関と呼ぶことが適切かどうかは、考察を要する。また、(4.5)は、可分割な相関状態の必要条件であって、十分条件とはならない。すなわち、(4.5)を満たすエンタングルド状態が存在する。ここで、可分割な相関状態の中で、次のような特殊なクラスを考えてみよう。

例 3 : -可分割な完全相関状態-

$$\phi(B) = \sum p_i |e_i\rangle\langle e_i| \langle f_i, B f_i\rangle, \quad \phi^*(B) = \sum p_i |f_i\rangle\langle f_i| \langle e_i, A e_i\rangle \Rightarrow \theta_\phi = \sum p_i |e_i\rangle\langle e_i| \otimes |f_i\rangle\langle f_i|$$

ここで、 $\{e_i\}, \{f_j\}$ は、 $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2$ の直交基底であり、 $\rho_1 = \sum p_i |e_i\rangle\langle e_i|, \rho_2 = \sum p_i |f_i\rangle\langle f_i|$ である。

$$I_\phi(\rho_1, \rho_2) = S(\rho_1) + S(\rho_2) - S(\theta_\phi) = S(\rho_1) \quad (4.6)$$

(4.6)は $S(\rho_1) = S(\rho_2) = S(\theta_\phi) = -\sum p_i \log p_i$ であることに因る。(4.6)は、古典系の完全な相関を持つ合成系(3.5)に対応する。いま、 $\mathbf{h}_1 = \mathbf{h}_2, \rho_1 \rho_2 = \rho_2 \rho_1$ とすれば、例3は古典系(3.5)の代数的表現であり、よって、(4.6)が計量しているものは、古典系の相関そのものである。

例 4 : -純粋エンタングルド状態-

$$\phi(B) = \sum \lambda_i \bar{\lambda}_j |e_i\rangle \langle e_j| \langle f_j, Bf_i\rangle, \quad \phi^*(B) = \sum \lambda_i \bar{\lambda}_j |f_i\rangle \langle f_j| \langle e_j, Ae_i\rangle$$

$$\Rightarrow \theta_\phi = \sum \lambda_i \bar{\lambda}_j |e_i\rangle \langle e_j| \otimes |f_i\rangle \langle f_j| = |\Phi\rangle \langle \Phi|$$

ここで、 $\lambda_i \in \mathbb{C}$, $\sum |\lambda_i|^2 = 1$, $\Phi = \sum \lambda_i e_i \otimes f_i$ であり、 $\rho_1 = \sum |\lambda_i|^2 |e_i\rangle \langle e_i|$, $\rho_2 = \sum |\lambda_i|^2 |f_i\rangle \langle f_i|$ となる。

$$I_\phi(\rho_1, \rho_2) = S(\rho_1) + S(\rho_2) - S(\theta_\phi) = 2S(\rho_1) \quad (4.7)$$

(4.7)は、 $S(\rho_1) = S(\rho_2) = -\sum |\lambda_i|^2 \log |\lambda_i|^2$, $S(\theta_\phi) = 0$ であることに因る。(4.7)式から明らかなように、純粋エンタングルド状態の相互エントロピー $I_\phi(\rho_1, \rho_2)$ は、古典系で相互エントロピーが満たすべき基本不等式(3.8)を満たしていない。この意味において、純粋エンタングルド状態は古典系には見られない(強い)相関を有していると言える。 $I_\phi(\rho_1, \rho_2)$ において、基本不等式が成立するか、否かという条件は、次の定理から、 q -entanglementの十分条件を与えることが分かる[8]。

定理 4 $\phi \notin \mathbf{e}_q \Rightarrow 0 \leq I_\phi(\rho_1, \rho_2) \leq \min\{S(\rho_1), S(\rho_2)\}$ (4.8)

$$I_\phi(\rho_1, \rho_2) > \min\{S(\rho_1), S(\rho_2)\} \Rightarrow \phi \in \mathbf{e}_q \quad (4.9)$$

逆は、一般に成立しない。

以上の4つの例についての相互エントロピー $I_\phi(\rho_1, \rho_2)$ の考察を踏まえると、 $I_\phi(\rho_1, \rho_2)$ は二つの量子部分系間に存在する相関の度合いを計量する指標の一つとして、その可能性を有していると思えるが、基本不等式を満たす可分割な状態においても、相互エントロピー $I_\phi(\rho_1, \rho_2)$ が計量するものを、古典系のように部分系間の相関を通して互いに共有される情報量と解釈することは難しい。とすると、

問 1 : $I_\phi(\rho_1, \rho_2)$ が計量する相関をどのように解釈することができるだろうか？

ところで、古典系の相互エントロピー $I(X, Y)$ は、通信路 Λ^* を明示した表現 $I(P; \Lambda^*)$ に変形することができたが $I_\phi(\rho_1, \rho_2)$ に対してはどうであろうか？

いま、 $\mathbf{s}(h_1)$ を入力系の状態の集合、 $\mathbf{s}(h_2)$ を出力系の状態の集合としたとき、QCPO π を用いて、 $\mathbf{s}(h_1)$ から $\mathbf{s}(h_2)$ へ量子チャンネル Λ_π^* を次のように構成できる。

$$\rho_{\text{out}} = \Lambda_\pi^*(\rho_{\text{in}}) \equiv \text{tr}_1 \left(\rho_{\text{in}}^{1/2} \otimes I \right) \pi \left(\rho_{\text{in}}^{1/2} \otimes I \right) = \text{tr}_1 \theta_\pi \in \mathbf{s}(h_2) \quad (4.10)$$

古典系において、条件付き確率分布を通信路と呼んだように、(4.10)における π を、我々は量子チャンネル密度と呼ぶ。(この命名は、V.P.Velavkin教授の指摘による。)

(4.10)を、エンタングルメント ϕ の合成状態 θ_ϕ の分解(2.16)に適用すると、 $I_\phi(\rho_1, \rho_2)$ は次のように変形することができる。

$$\begin{aligned} I_\phi(\rho_1, \rho_2) &= \text{tr} \theta_\phi (\log \theta_\phi - \log \rho_1 \otimes \rho_2) \\ &= \text{tr} \left(\rho_1^{1/2} \otimes I \right) \pi_\phi \left(\rho_1^{1/2} \otimes I \right) \left(\log \left(\rho_1^{1/2} \otimes I \right) \pi_\phi \left(\rho_1^{1/2} \otimes I \right) - \log \Lambda_\phi^*(\rho_1) \right) \\ &\equiv I_\phi(\rho_1; \Lambda_\phi^*) \end{aligned} \quad (4.11)$$

ここで、 $\Lambda_\phi^*(\rho_1) \equiv \text{tr}_1 \theta_\phi = \rho_2$ であり、 Λ_ϕ^* をエンタングルメント ϕ のエンタングルメント・チャンネルと呼ぶ。(4.11)の表示は、形式的には、古典相互エントロピーの(3.7)に対応するが、例4でも示したように、 $I_\phi(\rho_1; \Lambda_\phi^*)$ は基本不等式を満たさないケースが存在するので、エンタングルメント・チャンネル Λ_ϕ^* を介して ρ_1 から ρ_2 に伝送される情報量と解釈することはできない。それでは、

問2：エンタングルメント・チャンネル Λ_ϕ^* を介して伝送される情報量は、どのように評価できるであろうか？

問1、**問2**に対する答えを、次節で考察する。

4.2 Ohya 相互エントロピーを用いた $I_\phi(\rho_1, \rho_2)$ の分解

エンタングルメント・チャンネル Λ_ϕ^* は、量子系から量子系へのチャンネル(以下、 q - q チャンネルと略)とみなせるが、Ohyaは、 q - q チャンネル Λ^* に対して、基本不等式を満たす量子相互エントロピー(以下、 O -相互エントロピーと呼ぶ。)を導入した[17,18]。入力状態 ρ_{in} 、 q - q チャンネル Λ^* に対して、 O -相互エントロピー $I_O(\rho_{\text{in}}; \Lambda^*)$ は、次で与えられる[18]。

$$I_O(\rho_{\text{in}}; \Lambda^*) \equiv \sup_{E=\{E_i\}} \left\{ S(\theta_E, \rho_{\text{in}} \otimes \Lambda^*(\rho_{\text{in}})); \rho_{\text{in}} = \sum \lambda_i E_i \right\} \quad (4.12)$$

ここで、 $S(\square, \square)$ は、Umegakiの相対エントロピー、 $E = \{E_i\}$ は、 ρ_{in} の固有値 λ_i に対応する1次元の射影作用素 E_i の集合(i.e., $\rho_{\text{in}} = \sum \lambda_i E_i$)であり、 ρ_{in} の固有値に一つでも縮退しているものがあれば、 ρ_{in} の固有値分解を与える $E = \{E_i\}$ の取り方は一意にはならず、よって、(4.12)では、相対エントロピーのsupを与える $E = \{E_i\}$ で相互エントロピーを定義している。また、 θ_E は、 q - q チャンネル Λ^* を介して、入力状態と出力状態の相関を表現する合成状態として、Ohyaにより導入された合成状態(以下、 O -合成状態と呼ぶ。)で、次のように定義される[17]。

$$\theta_E = \sum \lambda_i E_i \otimes \Lambda^*(E_i) \quad (4.13)$$

$I_O(\rho_{\text{in}}; \Lambda^*)$ は、量子状態 ρ_{in} の情報量が、量子チャンネル Λ^* を介して、出力状態 $\rho_{\text{out}} = \Lambda^*(\rho_{\text{in}})$ にどれだけ正確に伝送されるかを計量する指標とみなすことが出来て、実際、それは相互エントロピーの基本不等式を満たしている[18]。

$$\text{定理5} \quad 0 \leq I_O(\rho_{\text{in}} : \Lambda^*) \leq \min \{S(\rho_{\text{in}}), S(\Lambda^*(\rho_{\text{in}}))\} \quad (4.14)$$

O-相互エントロピーをエンタングルメント・チャンネル Λ_ϕ^* に適用すれば、 Λ_ϕ^* を介した情報伝送量を計量可能であり、よって、 θ_ϕ が有していると考えられる、 Λ_ϕ^* を介して伝送される情報量としての相関を計量できるとするのは自然であろう。

エンタングルメント ϕ の合成状態 θ_ϕ においては、 $\rho_{\text{in}} = \rho_1 = \phi(I)$, $\rho_{\text{out}} = \Lambda_\phi^*(\rho_1) = \rho_2 = \phi^*(I)$ であり、O-合成状態 θ_E^ϕ は、 ρ_1 の1次元の射影作用素への固有値分解 $\rho_1 = \sum \lambda_i E_i$ に対して、

$$\theta_E^\phi = \sum \lambda_i E_i \otimes \Lambda_\phi^*(E_i) \quad (4.15)$$

と求まる。いま、 Λ_ϕ^* のO-相互エントロピーを次のように定義する。

$$I_\phi^T(\rho_1, \rho_2) \equiv I_O(\rho_1 : \Lambda_\phi^*) = \sup_{E=\{E_i\}} \{S(\theta_E^\phi, \rho_1 \otimes \rho_2); \rho_1 = \sum \lambda_i E_i\} \quad (4.16)$$

$I_\phi^T(\rho_1, \rho_2)$ は、前述したように、 Λ_ϕ^* を介して伝送される情報量と了解できるが、それは、 θ_ϕ の二つの周辺状態の間の相関に準じて伝送される情報量との解釈が可能であり、この意味で、

$I_\phi^T(\rho_1, \rho_2)$ を、 θ_ϕ^* が有する伝送相関(T-correlation)と呼ぶ。この時、次の定理が成立する[10]。

$$\text{定理6} \quad I_\phi(\rho_1, \rho_2) = I_\phi^Q(\rho_1, \rho_2) + I_\phi^T(\rho_1, \rho_2) \quad (4.17)$$

ここで、

$$I_\phi^Q(\rho_1 + \rho_2) \equiv \inf_{E=\{E_i\}} \{S(\theta_\phi, \theta_E^\phi); \rho_1 = \sum \lambda_i E_i\} \quad (4.18)$$

$I_\phi^Q(\rho_1, \rho_2)$ は、合成状態 θ_ϕ とO-合成状態 θ_E^ϕ との差(or 距離)を相対エントロピーの意味で評価することで、 $I_\phi^T(\rho_1, \rho_2)$ が計量しない合成系の相関を示していると解釈できる。古典相互エントロピーの等式 $I(X, Y) = I(P : \Lambda^*)$ と比較すると、 $I_\phi^Q(\rho_1, \rho_2) > 0$ は非古典的な相関と言える。よって、 $I_\phi^Q(\rho_1, \rho_2)$ をとりあえず量子相関(Q-correlation)と呼ぶことにしよう。ただし、このネーミングが適切かどうかは一考を要する。というのは、 $I_\phi^T(\rho_1, \rho_2)$ もまた量子的な相関と考えられるからである。エンタングルメント・チャンネル Λ_ϕ^* を古典的な相関に対応するチャンネルと考えることは不自然であろうし、古典的な相関を有していないチャンネルを通して伝送される情報量を古典相関に対応すると考えることもまた不自然である。いずれにしても、(4.17)より、量子相互エントロピー $I_\phi(\rho_1, \rho_2)$ は、O-合成状態を介して、Q-相関 $I_\phi^Q(\rho_1, \rho_2)$ とT-相関 $I_\phi^T(\rho_1, \rho_2)$ の二つのタイプの相関に分解されることが分かる。

次に、 $I_\phi^Q(\rho_1, \rho_2) = 0$ となる条件を見よう。まず、次の補題が成立する。

補題 1 $S(\theta_\phi, \theta_E^\phi) = 0 \Leftrightarrow \theta_\phi = \theta_E^\phi$

証明：一般に、量子状態 $\rho, \sigma \in \mathfrak{s}$ に対して、次の不等式が成立する[13]。

$$\|\rho - \sigma\| \leq \sqrt{2S(\rho, \sigma)}$$

この不等式から、補題の命題が成立することは明らか。■

補題 1 より、次の系が直ちに導かれる。

系 1 $\phi \in S_{\text{ent}} \Rightarrow I_\phi^Q(\rho_1, \rho_2) > 0$

よって、エンタングルド状態は、**Q**-相関を常に有するという意味において、非古典的な相関を持つ状態と言うことが出来る。

また、補題1から、可分割な状態において**Q**-相関が0になるには、合成状態が**O**-合成状態に書き直せることが必要十分となるが、可分割な状態は、一般には、**O**-合成状態に書き直すことはできない。このとき、次の定理が成立する[10]。

定理 7 $\theta_\phi = \sum p_i \rho_1(i) \otimes \rho_2(i)$ に対して次が成立。任意の i, j に対して、

$$I_\phi^Q(\rho_1, \rho_2) = 0 \Leftrightarrow \rho_i \rho_j = \rho_j \rho_i \quad (4.19)$$

定理7から、合成系を構成する部分系の両方ともに可換な場合(ケース1)か、どちらかが可換な場合(ケース2)においてのみ、**Q**-相関は消失し、次の等式が成立する。

$$I_\phi(\rho_1, \rho_2) = I_\phi^T(\rho_1, \rho_2) \quad (4.20)$$

ケース 1 は、古典系の代数的表現といえるので、(4.20)は $I(X, Y) = I(P: \Lambda^*)$ と等価である。ケース 2 は、古典-量子合成系とみなすことが出来て、例えば、観測理論などを論じるときのスキームに対応する。一般の量子系においては、可分割な合成状態であっても、量子相互エントロピー $I_\phi(\rho_1, \rho_2)$ が計量する相関には、**Q**-相関が含まれることになる。この意味において、可分割な状態も非古典的な相関を有しているということが出来よう。

本稿では、相互エントロピーの観点から量子相関について考察を行ったが、1節で述べたように、「何を持って量子相関と呼ぶのか？」という問いへの答えは、複数の視点からの考察が必要であり、例えば、定理6, 7の結果を、量子古典対応の文脈で論じることなどは、量子相関の理解を深めるうえで興味あることのように思える。

参考文献

1. L. Accardi, T. Matsuoka, M. Ohya, "Entangled Quantum Markov Chains satisfying entanglement condition", RIMS **1658**, 84-94 (2009)
2. M. Asorey, A. Kossakowski, G. Marmo and E. C. G. Sudarshan, "Relation between quantum maps and quantum state", Open Syst. Info. Dyn. **12**, 319-329 (2006)
3. V. P. Belavkin, X. Dai, "An operational algebraic approach to quantum channel capacity", Int. J. Quantum Info. **6**, 981-998 (2008)
4. V. P. Belavkin, M. Ohya, "Quantum entropy and Information in discrete entangled state", Infin. Dim. Anal. Quantum Probab. Relat. Top. **4**, 33-59 (2001).
5. V. P. Belavkin, M. Ohya, "Entanglement, quantum entropy and mutual information", Proc. R. Soc. London A **458**, 209-231 (2002).
6. N. J. Cref and C. Aami, "Negative entropy and information in quantum mechanics", Phys. Rev. Lett. **79**, 5194-5197 (1997)
7. D. Chruscinski, Y. Hiraota, T. Matsuoka, M. Ohya, "Remarks on the degree of entanglement", QP-PQ Quantum Probab. & White Noise Anal. **28**, 145-156 (2011)
8. D. Chruscinski, Y. Hiraota, T. Matsuoka, M. Ohya, "Quantum correlation in circulant state", in preparation.
9. D. Chruscinski, A. Kossakowski, T. Matsuoka, M. Ohya, "Entanglement mappings vs quantum conditional probability operator", QP-PQ Quantum Probab. & White Noise Anal. **28**, 223-236 (2011)
10. D. Chruscinski, A. Kossakowski, T. Matsuoka, M. Ohya, "Mutual entropy and quantum correlation", in preparation.
11. B. Groisman, S. Popescu and A. Winter, "Quantum, classical, and total amount of correlations in a quantum state", Phys. Rev. A **72** 0323187 (2005)
12. L. Henderson and V. Vedral, "Classical, quantum and total correlation", J. Phys. A **34** 6913 (2001)
13. F. Hiai, M. Ohya, M. Tsukada, "Sufficiency, KMS condition and relative entropy in von Neumann algebras", Pacific J. Math. **96**, 99-109 (1981)
14. M. Horodecki and R. Horodecki, "Information-theoretic aspect of quantum inseparability of mixed states", Phys. Rev. A **54**, 1838-1843 (1996)
15. M. Horodecki, P. Horodecki and R. Horodecki, "Separability and mixed states: necessary and sufficient condition", Phys. Lett. A **223**, 1-8 (1996)
16. W. A. Majewski, T. Matsuoka, M. Ohya, "Characterization of partial positive transposition states and measures of entanglement", J. Math. Phys. **50** 113509 (2009)
17. M. Ohya, "On compound state and mutual information in quantum information theory", IEEE Info. Theory **29**, 770-774 (1983)
18. M. Ohya, "Note on quantum probability", Nuovo Cimento **38**, 402-406 (1983)

19. M. Ohya and V. Volovich, *Mathematical Foundations of Quantum Information and Computation and Its Application to Nano- and Bio-systems* (Springer, New York, 2011)
20. H. Ollivier and W. Z. Zurek, "Quantum discord: A measure of the quantumness of correlations", *Phys. Rev. Lett.* **88** 017901 (2002)
21. H. Umegaki, "Conditional expectation in an operator algebras IV", *Kodai Math. Sem. Rep.* **14**, 59-85 (1962)
22. K. Urbanik, "Joint probability distribution of observable in quantum mechanics", *Stud. Math. T.* **21**, 317-323 (1961)

非線形輸送現象におけるエントロピー生成速度最小の原理 — Principle of Minimum Entropy Production in Nonlinear Transport Phenomena

東京理科大学 鈴木増雄 (Masuo Suzuki)
現：理化学研究所

自然法則を変分原理で大局的に捉えることは、その現象の本質的な深い理解になる。光学、力学などは時間積分に基づく変分原理でそれらの基本法則が導かれることはよく知られている。これらはすべて時間反転対称性を満たす可逆過程であるが、現実の現象は、一般に不可逆である。それを特徴付けるのがエントロピー生成である。最近、ブラックホールのエントロピー生成の問題も多くの人々によって議論されている。物性物理の分野では、オンサーガーやプリゴジンなどの理論に見られるように、線形の輸送現象（電気伝導や熱伝導）は瞬間的なエントロピー生成最小の原理で記述される。しかし、この原理は非線形の場合には成立しない。これは長い間の大問題であった。最近、この問題に新しい光がさしてきた。すなわち、エントロピー生成最小の新しい原理の発見である。

それは、今までのように瞬間的なエントロピー生成を最小にするのではなく、時間積分された量を最小にする変分原理である。定常状態を記述する法則であるにもかかわらず、積分された量を問題にするところが革新的であり現代的であると言える。今風に言えば、それは、エネルギーの蓄積された無駄を最小にするということである。

詳しくは、次の論文を参照して欲しい。

参考文献：

M.Suzuki, *Physica A* **390**(2011)1094; **391**(2012)1074 and Paper III (*ibid*, 2012); *Prog.Theor.Phys.Suppl. No. 195 (2012) 114.*

鈴木増雄, 手順の分離と統合一指数積分分解, 秩序生成およびエントロピー生成, 『数理物理私の研究』(荒木・江口・大矢編集, 丸善, 2012年) 225—233.

Topics on stochastic analysis

飛田 武幸

名古屋大学・名城大学名誉教授

Si Si

愛知県立大学

January 7, 2012

概要

偶然現象の解明は Reduction から始まる。そこでノイズが生まれる。その可能な場合を知って、ノイズの関数の解析に進む。

一般に、偶然現象の理解と解明は、その一端を知ったことから始まる。イメージあるいはデータを得て、元の現象を予想すること、すなわち J. Bernoulli の Conjectandi の思想の実現にいたる。実例を紹介たい。

1 はじめに

偶然現象の数学的取扱いのロードマップは
Random system \rightarrow Reduction \rightarrow Synthesis
 \rightarrow Analysis

である。

1. 偶然現象の主要な具体例は、確率過程を代表とする確率変数のなす複雑系である。

2. 目標はその系の構造（確率空間、確率分布など）が与えられて、事象の「確率を計算しよう」という、いわば演習問題ではない。

3. J. Bernoulli の立場に立って、対象とする偶然現象から得られるイメージとかデータ

によって、元の現象のありうる最良の確率空間を予測し、そこにおける Reduction を行う。

4. その結果ノイズを得るであろう。ノイズの関数の解析を行い、予測などの応用にも資する。

これが Stochasticity の立場である。

例 1. 線型構造とガウス分布。ガウス過程の表現。

ガウス系なら平均と共分散関数を知れば、ガウス過程がきまる。無限次元分布、すなわち全システムがきまる。

例 2. ベキ分布と安定過程、その「素」なものへの分解。

いわゆるベキ分布（安定分布）が与えられて、環境に対する知識を得て、安定過程への「埋め込み」の可能性をみる。

例 3. Meixner 分布と Stochastic area は今回扱ってみたい。

例 4. Mumford の image とか pattern の理論：現在の課題である。

2 Reduction, ノイズ

Reduction の方法とその可能な実体について

例。Lévy の infinitesimal equation. (連続パラメータの場合)

$$\delta X(t) = \Phi(X(s), s \leq t; Y(t), t, dt)$$

$Y(t)$ は innovation (新生過程) であり、ノイズとしたい。

ノイズとは idealized elemental random variables (この言葉は John R. Klauder 氏の助言) のことである。それは Z とか R などの順序集合によりパラメータ付けられる。

パラメータの種類は「時間」と「空間」がある。

Raum・Zeit・Materie というより Raum・Zeit・Rauschen である。

パラメータ空間は、位相により「デジタル」と「アナログ」がある。デジタルは、その解析に non-random な場合の類似が多い。

アナログが重要で、我々はそれに着目する。アナログは時間発展する現象、量子場の理論、量子情報など、その存在にも意義があり、研究の主題である。

これらは レヴィ過程 の分解に対応した具体化の道を辿る。

ノイズ構成の実際

1) 離散パラメータのとき。代表的に自然数の集合 N とする。そのとき ノイズは i.i.d. $Y = \{Y(n), n \in N\}$ である。分布は任意に選べる。関数は $F(Y(n), n \in N)$ と表わされ、解析は、ランダムでないものと余り違わない。

2) 連続パラメータの場合。i.i.d. の連続への移行となる。

直接の類似は不可能である。各 $Y(t)$ を通常の変数で $\{Y(t), t \in R^1\}$ を独立な系としたとき、分布は R^R 上の直積測度になるが、それは抽象的ルベグ空間にはならない。

デジタルの例がヒントになる。

$$Y(n) \leftrightarrow S(n) = \sum_1^n Y(k)$$

$S(n)$ の代わりに独立増分である加法過程 $Z(t)$ とすればよい。定差 $Y(n)$ に相当するのは t についての微分である。

$$\dot{Z}(t) \leftrightarrow Z(t)$$

$Z(t)$ は加法過程で、その微分がノイズの候補である素なものを選ぶなら、レヴィ過程の分解に訴えることになる。

ノイズの発生

ここでは標準的なものを考える。[10] 参照。

ノイズの標準的なものを取り上げることにして、パラメータ空間は $I = [0, 1]$ とする。

i) 抽象ルベグ空間の上にノイズを構成する。

[註] ノイズの関数の解析を行うにはルベグ式解析になる。上の仮定はそのためにおいた。

ii) 構成したいのは idealized elemental random variables のシステムである。

iii) 逐次近似で、離散変数で個数を逐次ふやしていく連続無限量の近似は、実数の2進法展開をモデルとする。

iv) 独立を独立増分に代える。

v) 第 n -step での近似を $Z_n(k) = \sum_1^k X_j^n$ とする。一様近似の要請から各 n について $\{X_j^n\}$ は i.i.d. である。

vi) これらの要請のもとで、ノイズの構成には、二つの場合のみが可能である。(1) と (2).

(1) 区間 I を 2^n 個の等区間 $\Delta_k^n, 1 \leq k \leq 2^n$ に分割する。

各小区間に i.i.d. の要素 X_k^n を対応させる。 $E(X_k^n) = 0$ とするが、分散の和を一定 ($= 1$) にするため、

$$V(X_k^n) = 2^{-n}$$

とする。

各確率変数の標準偏差 (スケールを表す) は $2^{-n/2}$ である。スケールあたりの確率変数としては $\frac{X_k^n}{2^{-n}}$ である。 $n \rightarrow \infty$ のとき長さは無限大になる。

一方、和 $\sum_1^n X_k^n$ は規格化されているので、その分布は標準ガウス分布に近づく。

この操作は local にも行うことができ $\{X_k^n\}$ はブラウン運動 $B(t), t \in [0, 1]$ を近似して

いる。

また、 X_k^n はホワイトノイズ $\dot{B}(t)$ を近似する。

上の近似で各変数 $\frac{X_k^n}{2^{-n}}$ は分散有限（任意でよい）とした。ガウス分布はすべて同じタイプだから、理想的なノイズは、この状況で、ただ一種類しかないとしてよい。

(2) I の分割は (1) と同じとする。ただし (1) では分散に着目したが、今は同じく加法性をもつ平均値に注目する。さらに X_k^n は、とる値が最も単純な場合（素であることの要求から）すなわち、二つの値のみ、たとえば 1 と 0 とし、それぞれの値をとる確率を p_n と $1 - p_n$ とする。ここでは、和 $S(n) = \sum_1^{2^n} X_k^n$ の平均値 np_n を n に無関係な値 $\lambda (> 0)$ となることを要求する。これもスケールに対する要請から来る。

周知のことであるが、 $n \rightarrow \infty$ のとき、 $S(n)$ の分布は平均値（強度, intensity である） λ のポアソン分布に収束する（小確率の法則）。

ここでも (1) のように $S(n)$ の部分和も考えて、 $S(n)$ は強度が λ のポアソン過程 $P(t) = P(t, \lambda)$ を近似していることがわかる。

このとき、ノイズ $\dot{P}(t)$ の近似は X_k^n ではなく、微小区間 Δ をとり $\sum_{\Delta_k^n \subset \Delta} X_k^n$ を $|\Delta|$ で割った極限で、近似的に $\frac{X_k^n}{2^{-n}}$ で長さ無限大

のベクトルに近づく。

ここで重要な注意がある。上の極限を考えると、強度 λ を選択する自由があった。これに関し、一つの命題がある。

命題 二つのポアソン型の分布は、強度が違えば、それらのタイプは異なる。

証明。ポアソン型の場合の特性関数は

$$e^{imz + \lambda(e^{iaz} - 1)}$$

である。 λ が異なれば a をかえても、特性関数は、 z の関数として同じものにならない。すなわちタイプは異なる。

ノイズの構成にもどり、我々は、 $\lambda > 0$ をいろいろ変えて違ったタイプのポアソン型ノイズで、連続無限個の違ったタイプの要素を得た。それらの各要素は素である。

本質的にはこれら二種類で尽きることは、加法過程とくにレヴィ過程を取り上げて、独立変数列に代えたことから来る。すなわち。レヴィ過程の分解から、ガウス過程及び強度を種々に変化させたポアソン型過程で尽きる事から導かれる。

参考：[2], [14].

3 Meixner 分布と Stochastic Area

Stochastic area $S(t), t \geq 0$ は ホワイトノイズの regular quadratic form であり、その分布は Meixner 分布である。

この分布の重要な位置づけは 久保 泉 氏による [9]。

$B(t) = (B_1(t), B_2(t)), t \geq 0$ を 2次元ブラウン運動とする。すなわち $B_1(t)$ と $B_2(t)$ は独立なブラウン運動である。

滑らかな曲線の囲む面積の公式にならう。: 曲線 $B(t); 0 \leq t \leq T$ および 原点と $B(T)$ を結ぶ弦とで囲まれた面積 $S(T)$ は

$$\frac{1}{2} \int_0^T (B_1(t)\dot{B}_2(t) - B_2(t)\dot{B}_1(t))dt$$

となるであろう。ホワイトノイズ超汎関数論で正確に定義できる。これを $S(T)$ と書いて Stochastic area または 確率面積 と呼ぶ。(P.Lévy.)

ここで $T = 1$ とおく。それは対称な $L^2(R^2)$ 関数 $F(u, v)$ で表現される。その具体的な関数形はで [13] で図示したように

$$F(u, v) = \begin{cases} -\frac{1}{4} & uv \leq 0, u, v \leq T, -v < u, \\ \frac{1}{4} & uv \leq 0, u, v \geq T, -v > u, \\ 0 & \text{その他} \end{cases}$$

この $F(u, v)$ は対称 $F(u, v) = F(v, u)$ で

あるが、他に関係式

$$F(-u, -v) = -F(u, v)$$

をみたす。このような場合には次の命題が証明される。

命題 F が上の性質を持てば

i) λ が F の固有値ならば $-\lambda$ も固有値である。

ii) F で表現される \mathcal{H}_2 の要素 φ の分布は 0 に関して対称である。その半不変係数 γ_n は、固有値を λ_n と書くとき、次式で与えられる。

$$\begin{aligned} \gamma_{2p+1} &= 0, \quad p \geq 0, \\ \gamma_{2p} &= 2^{2p}(2p-1)! \sum_{\lambda_n > 0} \lambda_n^{-2p}, \quad p \geq 1. \end{aligned}$$

iii) φ の特性関数 $\chi(z)$ は

$$\chi(z) = \left[\prod_{\lambda_n > 0} (1 + 4z^2 \lambda_n^{-2}) \right]^{-1/2}$$

である。それは、また

$$\chi(z) = \delta(2iz; F)^{-1/2}$$

と表わされる。

確率面積 $S(1)$ にもどり、それを表現する核関数 $F(u, v)$ について、上の命題で仮定する性質を持つことを確かめ、次に固有値を具体的に計算して、次の定理に至る。

定理 確率面積 $S(1)$ の特性関数 $\chi(z)$ および

半不変係数 γ_n は次式で与えられる。

$$\chi(z) = [\cosh(z/2)]^{-1}$$

$$\gamma_{2p+1} = 0, p \geq 0.$$

$$\gamma_{2p} = (2^{2p} - 1)B_p(4p), p \geq 1.$$

確率変数 $S(1)$ の確率分布は Meixner 分布として知られている。

Meixner 分布は

1. 代表的な分布である、[9] 参照。
2. 直交増分過程 stochastic area の分布である。独立増分ではないが。
3. tail の部分がガウス分布よりはゆっくり、ベキ分布よりは早く 0 に近づく。その近似的なオーダーは知られている。

など、Meixner 分布は stochastic area (ホワイトノイズの代表的な 2 次形式) を underlying process として持つ、あるいはそれに embed されるものである。このような観点からの考察は Stochasticity 理論の興味深い一つのトピックとなろう。

4 補足

我々は Lévy の $N(t, u)$ 過程を参考にしてラドン確率測度 $Z(A)$, $A \in \mathbf{B}(R_+^2)$, を導入する。その密度関数を $z(t, u)$, と書く。特性汎関数 $C(\xi)$, $\xi \in E_1(R_+^2)$, $R_+^2 = \{(t, u); t \in R^1, u \in$

$(0, \infty)$ }, を取り上げる。それは各点独立な超過程を定義するものとする。 (t, u) がパラメータ空間である。 t は R^1 を動き, u は空間パラメータとして $(0, \infty)$ を動くが、それは一定時間に偶然量がどれだけ移動したかを表すものとする。 $C(\xi)$ が

$$C(\xi) = \exp\left[\int_{R_+^2} f(\xi(t, u)) dt du\right]$$

の形をしているとしよう (Gelfand-Vilenkin Vol. 4 Chp.3 参照)。さらに、それが空間 $E_1(R_+^2)\{(t, u), t \in R^1, u \in (0, \infty)\}$ で連続な特性汎関数列 $C_n(\xi)$ で近似されたとする。そのとき、 $C(\xi)$ は $E_1^*(R_+^2)$ 上のラドン確率測度を定義する。

$C(\xi)$ が shift-invariant in t かつ dilation-invariant in u . 等を仮定しよう。そうすれば、結局、ホワイトノイズと安定ノイズとの組み合わせとして表され、reduction のロードマップをたどることになる。[18] 参照。

参考文献

- [1] J. Bernoulli, Ars Conjectandi. 1713.
- [2] H. Araki, Factorizable representation of current algebra. - Non commutative extension of the Lévy- Khinchin formula and cohomology of a solvable group with values in a Hilbert space -. Pub. RIMS 5 (1969/70), 361-422.

- [3] T. Hida, Stationary stochastic processes. Princeton University Press. 1970.
- [4] T. Hida, Quadratic functionals of Brownian motion. J. Multivariate Analysis. 1 (1971), 58-69.
- [5] T. Hida, Analysis of Brownian functionals, Carleton Math. Notes no.13, Carleton University. 1975.
- [6] 飛田武幸、ブラウン運動、岩波書店、1975, 第3刷 2007. 英訳 Springer-Verlag 1980.
- [7] 飛田武幸、確率論の基礎と発展 共立出版、2011,
- [8] T. Hida and Si Si, Lectures on white noise functionals. World Scientific Pub. Co. 2008.
- [9] 久保泉、Multiplicative renormalization method 適用可能な測度の決定 III。2010 日本数学会特別講演。
- [10] P. Lévy, Sur les intégrales dont les éléments sont des variables aléatoires indépendantes. Ann. della R. Scuola Normale Superiore di Pisa. ser II, (1934), 337-366.
- [11] P. Lévy, Problèmes concrets d'analyse fonctionnelle. Gauthier-Villars, 1951.
- [12] D. Mumford and A. Desolneux, Pattern theory. The stochastic analysis of real world signals A K Peters, 2010.
- [13] Si Si, Introduction to Hida distribu-

tions. World Sci. Pub. Co. 2011.

[14] Si Si, Representation of $SL_2(R)$ using a noise, 本研究会報告。

[15] 朝永振一郎、スピンはめぐる。第3話、中央公論社、1974:

[16] 梅垣寿春、大矢雅則、日合文雄、作用素代数入門、共立出版,1985,

[17] Stochasticity 序論 2011 Dec. 東京理科大 講義録

[18] Si Si, Some developments on Lévy's $N(t, u)$ process, preprint. 2012.

Automatic Hermiticity

永尾 敬一¹

茨城大学教育学部

310-8512 茨城県水戸市文京 2 - 1 - 1

概要²

非エルミートで対角化可能なハミルトニアン H で記述される系を調べる。まず、 H の固有状態が直交するような適切な内積を定義し、次に、状態の長い時間発展を考える。ここで、 H の固有値の虚数成分が上からバウンドされていると仮定すると、固有状態のうち、 H の固有値の虚数成分が最大値をとるような状態だけが有効的に生き残り、この部分空間上では H の反エルミートな成分の効果が抑制されることを示す。すなわち、 H が自動的にエルミートになる。これは、基礎的な理論においては、ハミルトニアンはエルミートなものに限定する必要が無いことを示唆している。また、もし、有効的に得られるハミルトニアンが局所的な形で与えられるならば、保存する確率の流れの密度が構成できることを示す。さらに、現在のエルミートなハミルトニアンを使って過去の状態を調べると、過去の状態を誤って評価し得るということも指摘する。

1 はじめに

通常、作用 S は実数であるが、もし、量子論では、経路積分の被積分関数 $\exp(\frac{i}{\hbar}S)$ が S よりも基本的な量であったとするならば、 $\exp(\frac{i}{\hbar}S)$ が複素数であることから、 S も複素数であり得ることになる。この仮定に基づいて、作用が複素数である理論（複素作用理論）が、Nielsen・二宮の両氏によって、近年精力的に調べられてきた [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]。この講演では、非エルミートなハミルトニアン H で記述される系を考える。この場合、時間発展演算子が非ユニタリーになるため、確率保存則が成り立たなくなる。また、ハミルトニアンの固有値は一般に実数ではなくなる。さらに、ハミルトニアンの固有状態が直交していないため、禁止されるべき状態間の遷移が観測され得ることになる。これらの事実から、物理的に意味のある理論は得られないように見える。しかし、この講演では、次の二つのス

¹e-mail address: nagao@mx.ibaraki.ac.jp

²基研研究会「物理と情報の階層構造 情報を接点とした諸階層の制御と創発」(2012年1月5-7日)で行なった本講演は、Niels Bohr Institute の Holger Bech Nielsen 氏との共同研究 [1] に基づいている。

テップを経れば、物理的に意味のある理論が有効的に得られるということを示す。第一のステップは、ハミルトニアン固有状態が直交するような適切な内積 I_Q を定義することである。この適切な内積 I_Q は、ハミルトニアンがノーマルになるように定義され、この内積下でのエルミート性 (Q -エルミート性) も定義する。第二のステップは、長い時間発展である。これによって、 H の反エルミートな部分の効果が抑制され、エルミートなハミルトニアンが有効的に得られる。本講演では、適切な内積 I_Q と長い時間発展を用いて H の反エルミートな部分の効果を抑制するというこの機構を明白に示す。なお、これは [9] で着想されている。

2 適切な内積とエルミート共役

ハミルトニアンの固有状態が互いに直交していないと、物理的に禁止されるべき状態間の遷移が起き得る。そこで、それらが直交するような適切な内積を定義する。まず、ハミルトニアン H を対角化する演算子を P 、 H が対角化された演算子を D とすると、 H は

$$H = PDP^{-1} \quad (2.1)$$

と書ける。 $\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij}$ を満たすような直交基底 $|e_i\rangle (i = 1, \dots)$ を $D|e_i\rangle = \lambda_i|e_i\rangle$ によって導入する。ここで、 $\lambda_i (i = 1, \dots)$ は一般に複素数である。また、 H の固有状態 $|\lambda_i\rangle = P|e_i\rangle$ を導入すると、

$$H|\lambda_i\rangle = \lambda_i|\lambda_i\rangle \quad (2.2)$$

である。ここで、 $|\lambda_i\rangle$ は互いに直交しておらず、 $\langle \lambda_i | \lambda_j \rangle \neq \delta_{ij}$ である。そこで、適切な内積 $I_Q(|f\rangle, |i\rangle) \equiv \langle f |_Q |i\rangle$ をそれらが互いに直交するように

$$I_Q(|\lambda_i\rangle, |\lambda_j\rangle) = \delta_{ij} \quad (2.3)$$

で定義する。また、通常の内積が満たす性質 $\langle \psi_1(t) | \psi_2(t) \rangle = \langle \psi_2(t) | \psi_1(t) \rangle^*$ に対応して、 I_Q に次の関係式

$$\langle \psi_1(t) |_Q \psi_2(t) \rangle = \langle \psi_2(t) |_Q \psi_1(t) \rangle^* \quad (2.4)$$

を課す。すると、 Q はエルミートでなければならないことがわかる。さらに、 I_Q の下での任意の演算子 A に対するエルミート共役 \dagger_Q を

$$\langle \psi_2 |_Q A | \psi_1 \rangle^* = \langle \psi_1 |_Q A^{\dagger_Q} | \psi_2 \rangle \quad (2.5)$$

で定義する。すると、 A^{\dagger_Q} は、

$$A^{\dagger_Q} = Q^{-1} A^{\dagger} Q \quad (2.6)$$

と表される。 \dagger_Q をケットやブラに対しても、 $|\psi_1\rangle^{\dagger_Q} \equiv \langle \psi_1 |_Q$ 、 $(\langle \psi_2 |_Q)^{\dagger_Q} \equiv |\psi_2\rangle$ と定義する。 A が、 $A^{\dagger_Q} = A$ を満たす時、 A を Q -エルミートと呼ぶことにする。なお、このような内積の定義は、[10] においても調べられている。もし、 A が、 $A = P_A D_A P_A^{-1}$ のように対角化されたならば、 A^{\dagger_Q} は、 $A^{\dagger_Q} = Q^{-1} (P_A^{\dagger})^{-1} D_A^{\dagger} P_A^{\dagger} Q$

と表される。もし、 Q を $Q = (P_A^\dagger)^{-1}P_A^{-1}$ と定義すれば、 $A^{\dagger Q} = P_A D_A^\dagger P_A^{-1}$ である。そのため、 D_A の対角成分が実数、つまり、 $D_A^\dagger = D_A$ ならば、 A は Q -エルミートである。そこで、以下では、 Q を

$$Q = (P^\dagger)^{-1}P^{-1} \quad (2.7)$$

と定義して用いることにする。

3 ハミルトニアン H の Q -ノーマル性

ハミルトニアン H が I_Q の下でノーマル (Q -ノーマル) であることを示す。まず、 H の対角化演算子 $P = (|\lambda_1\rangle, |\lambda_2\rangle, \dots)$ に対して、

$$“P^{\dagger Q}” \equiv \begin{pmatrix} \langle \lambda_1 |_Q \\ \langle \lambda_2 |_Q \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

を定義する。次に、“ $P^{\dagger Q}$ ” $HP = D$ について考える。 $|\lambda_i\rangle$ 基底での (i, j) -成分は、 $\langle \lambda_i |_Q H | \lambda_j \rangle = \lambda_i \delta_{ij}$ と書ける。複素共役をとれば、 $\langle \lambda_j |_Q H^{\dagger Q} | \lambda_i \rangle = \lambda_i^* \delta_{ij}$ 、つまり、 $\langle \lambda_i |_Q H^{\dagger Q} | \lambda_j \rangle = \lambda_i^* \delta_{ij}$ を得る。これは、“ $P^{\dagger Q}$ ” $H^{\dagger Q} P = D^\dagger$ と表されることから、

$$[H, H^{\dagger Q}] = P[D, D^\dagger]P^{-1} = 0 \quad (3.9)$$

である。よって、 H は Q -ノーマルである。

さらに、 H を $H = H_{Qh} + H_{Qa}$ と分解しておく。ここで、 $H_{Qh} = \frac{H+H^{\dagger Q}}{2}$ と $H_{Qa} = \frac{H-H^{\dagger Q}}{2}$ は、それぞれ、 H の Q -エルミート、反 Q -エルミートな部分である。 D を $D = D_R + iD_I$ のように、 D_R と D_I の対角成分が D の実数部分と虚数部分に対応するように分解すれば、 H_{Qh} と H_{Qa} は、 $H_{Qh} = PD_R P^{-1}$ 、 $H_{Qa} = iPD_I P^{-1}$ と表される。

4 状態 $|\psi\rangle$ の規格化と期待値

シュレディンガー方程式 $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$ に従うある状態 $|\psi(t)\rangle$ を考える。これを

$$|\psi(t)\rangle_N \equiv \frac{1}{\sqrt{\langle \psi(t) |_Q \psi(t) \rangle}} |\psi(t)\rangle \quad (4.10)$$

のように規格化して、演算子 \mathcal{O} の期待値を

$$\bar{\mathcal{O}}_Q(t) \equiv {}_N \langle \psi(t) |_Q \mathcal{O} | \psi(t) \rangle_N = {}_N \langle \psi(t_0) |_Q \mathcal{O}_{QH}(t-t_0) | \psi(t_0) \rangle_N \quad (4.11)$$

で定義する。ここで、 $\mathcal{O}_{QH}(t-t_0) \equiv \frac{\langle \psi(t_0) |_Q \psi(t_0) \rangle}{\langle \psi(t) |_Q \psi(t) \rangle} e^{\frac{i}{\hbar} H^{\dagger Q}(t-t_0)} \mathcal{O} e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)}$ は、ハイゼンベルグ描像における時間依存する演算子である。また、 $|\psi(t)\rangle_N$ と \mathcal{O}_{QH} は、それぞれ、修正されたシュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_N = H_{Qh} |\psi(t)\rangle_N + (H_{Qa} - {}_N \langle \psi(t) |_Q H_{Qa} | \psi(t) \rangle_N) |\psi(t)\rangle_N \quad (4.12)$$

と、修正されたハイゼンベルグ方程式

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{O}_{QH} = [\mathcal{O}_{QH}, H_{Qh}] + \{\mathcal{O}_{QH}, H_{Qa} - {}_N\langle \psi(t) | Q H_{Qa} | \psi(t) \rangle_N\} \quad (4.13)$$

に従う。両式において、 H_{Qa} 、すなわち、 H の反 Q -エルミートな部分の寄与が見られるが、次に説明する第二のステップでそれらは消える。

5 H の反 Q -エルミートな成分を抑制する機構

H の反 Q -エルミートな部分 H_{Qa} の効果を抑制する機構を示すべく、 $|\psi(t)\rangle$ の時間発展を調べる。 $|\psi'(t)\rangle = P^{-1}|\psi(t)\rangle$ を導入して、それを、 $|\psi'(t)\rangle = \sum_i a_i(t)|e_i\rangle$ のように展開すると、 $|\psi(t)\rangle = \sum_i a_i(t)|\lambda_i\rangle$ と表せる。 $|\psi'(t)\rangle$ が $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi'(t)\rangle = D|\psi'(t)\rangle$ に従うので、 $|\psi(t)\rangle$ の最初の時刻 t_0 からの時間発展は、

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= P e^{-\frac{i}{\hbar} D(t-t_0)} |\psi'(t_0)\rangle \\ &= \sum_i a_i(t_0) e^{\frac{1}{\hbar} (\text{Im}\lambda_i - i\text{Re}\lambda_i)(t-t_0)} |\lambda_i\rangle \end{aligned} \quad (5.14)$$

で与えられる。 $\text{Im}\lambda_i$ は H の反 Q -エルミートな成分に対応している。ここで、我々は、 H の固有値の虚数成分が上からバウンドされていて、 $\text{Im}\lambda_i$ のいくつかが最大値 B をとっているという場合を考え、このような $\{i\}$ の部分集合を A と表すことにする。そうすると、十分に長い時間が経過すれば、 A に属する状態が最も寄与して生き残ることがわかる。対角化されたハミルトニアン \tilde{D}_R を

$$\langle e_i | \tilde{D}_R | e_j \rangle \equiv \begin{cases} \langle e_i | D_R | e_j \rangle = \delta_{ij} \text{Re}\lambda_i & \text{for } i \in A, \\ 0 & \text{for } i \notin A \end{cases} \quad (5.15)$$

のように定義し、それを用いて、 $H_{\text{eff}} \equiv P \tilde{D}_R P^{-1}$ を定義する。 H_{eff} は Q -エルミート $H_{\text{eff}}^\dagger = H_{\text{eff}}$ で、 $H_{\text{eff}} |\lambda_i\rangle = \text{Re}\lambda_i |\lambda_i\rangle$ を満たす。さらに、 $|\tilde{\psi}(t)\rangle \equiv \sum_{i \in A} a_i(t) |\lambda_i\rangle$ も導入する。すると、 $|\psi(t)\rangle$ は、

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &\simeq e^{\frac{1}{\hbar} B(t-t_0)} \sum_{i \in A} a_i(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} \text{Re}\lambda_i(t-t_0)} |\lambda_i\rangle \\ &= e^{\frac{1}{\hbar} B(t-t_0)} e^{-\frac{i}{\hbar} H_{\text{eff}}(t-t_0)} |\tilde{\psi}(t_0)\rangle = |\tilde{\psi}(t)\rangle \end{aligned} \quad (5.16)$$

のように表せる。ここで、因子 $e^{\frac{1}{\hbar} B(t-t_0)}$ は、規格化で落とせる。こうして、我々は、非エルミートなハミルトニアンで記述された系から、長い時間が経過した後に、有効的に Q -エルミートなハミルトニアン H_{eff} を得ることができた。

実際、規格化された状態

$$|\psi(t)\rangle_N \simeq \frac{1}{\sqrt{\langle \tilde{\psi}(t) | Q | \tilde{\psi}(t) \rangle}} |\tilde{\psi}(t)\rangle \equiv |\tilde{\psi}(t)\rangle_N$$

は、シュレディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\psi}(t)\rangle_N = H_{\text{eff}} |\tilde{\psi}(t)\rangle_N \quad (5.17)$$

に従う。また、ハイゼンベルグ描像における時間依存する演算子 $\tilde{O}_{QH}(t - t_0) \equiv e^{\frac{i}{\hbar}H_{\text{eff}}(t-t_0)} O e^{-\frac{i}{\hbar}H_{\text{eff}}(t-t_0)}$ を用いて、期待値は

$$\bar{O}_Q(t) \simeq_N \langle \tilde{\psi}(t) | O | \tilde{\psi}(t) \rangle_N = \langle \tilde{\psi}(t_0) | \tilde{O}_{QH}(t - t_0) | \tilde{\psi}(t_0) \rangle_N \quad (5.18)$$

で与えられる。 \tilde{O}_{QH} は、ハイゼンベルグ方程式

$$\frac{d}{dt} \tilde{O}_{QH}(t - t_0) = \frac{i}{\hbar} [H_{\text{eff}}, \tilde{O}_{QH}(t - t_0)] \quad (5.19)$$

に従う。

6 議論

以上では、非エルミートなハミルトニアン H が、適切な内積の定義と長い時間発展によって、自動的にエルミートなハミルトニアン H_{eff} になることを示した。もし、 H が、 $H = \frac{1}{2m}p^2 + V(q)$ のように局所的な形で表されていれば、 H がエルミートになった後でも、局所性は保たれるであろうか？これは非自明ではあるが、今、 H_{eff} が $H_{\text{eff}} \simeq \frac{1}{2m_{\text{eff}}}p_{\text{eff}}^2 + V_{\text{eff}}(q_{\text{eff}})$ のように局所的な形で書けると仮定して、確率の保存について考えてみよう。

状態 $|\tilde{\psi}(t)\rangle_N$ の通常の q_{eff} -表現、 $\tilde{\psi}(q_{\text{eff}}) \equiv \langle q_{\text{eff}} | \tilde{\psi}(t) \rangle_N$ に加えて、 $\tilde{\psi}_Q(q_{\text{eff}}) \equiv \langle q_{\text{eff}} | O | \tilde{\psi}(t) \rangle_N$ を導入し、確率密度を

$$\rho_{\text{eff}} = \tilde{\psi}_Q(q_{\text{eff}})^* \tilde{\psi}(q_{\text{eff}}) = \langle \tilde{\psi}(t) | O | q_{\text{eff}} \rangle \langle q_{\text{eff}} | \tilde{\psi}(t) \rangle_N \quad (6.20)$$

で定義する。すると、 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(q_{\text{eff}}) = H_{\text{eff}} \tilde{\psi}(q_{\text{eff}})$ 、 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}_Q(q_{\text{eff}}) = H_{\text{eff}}^* \tilde{\psi}_Q(q_{\text{eff}})$ であることから、連続の方程式

$$\frac{\partial \rho_{\text{eff}}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q_{\text{eff}}} j_{\text{eff}}(q_{\text{eff}}, t) = 0 \quad (6.21)$$

が得られる。ここで、 $j_{\text{eff}}(q_{\text{eff}}, t)$ は、確率の流れの密度

$$j_{\text{eff}}(q_{\text{eff}}, t) = \frac{i\hbar}{2m_{\text{eff}}} \left(\frac{\partial}{\partial q_{\text{eff}}} \tilde{\psi}_Q^* \tilde{\psi} - \tilde{\psi}_Q^* \frac{\partial}{\partial q_{\text{eff}}} \tilde{\psi} \right) \quad (6.22)$$

である。よって、もし、 H_{eff} が局所的にかけていれば、二種類の波動関数 $\tilde{\psi}(q_{\text{eff}})$ と $\tilde{\psi}_Q(q_{\text{eff}})$ を用いることで、確率保存則 $\frac{d}{dt} \int \rho_{\text{eff}} dq_{\text{eff}} = 0$ が成立することがわかった。

次に、最初の時刻 t_0 からあまり時間が経っていない初期の頃の時刻 t_1 の状態の評価について議論しよう。それは、

$$|\psi_{\text{true}}(t_1)\rangle_N = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_1-t_0)} \sqrt{\frac{\langle \psi(t_0) | O | \psi(t_0) \rangle}{\langle \psi(t_1) | O | \psi(t_1) \rangle}} |\psi(t_0)\rangle_N \quad (6.23)$$

と表される。しかし、かなり後の時刻 t における観測者は、基礎的なハミルトニアン H ではなく、ハミルトニアン H_{eff} を使って、過去の時刻 t_1 の状態を

$$|\psi_{\text{historian}}(t_1)\rangle_N = e^{-\frac{i}{\hbar}H_{\text{eff}}(t_1-t)} e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \sqrt{\frac{\langle \psi(t_0) | O | \psi(t_0) \rangle}{\langle \psi(t) | O | \psi(t) \rangle}} |\psi(t_0)\rangle_N \quad (6.24)$$

のように見積もるだろう。しかし、これは、 $H_{\text{eff}} \neq H$ であることから、見せかけの状態であり、 $|\psi_{\text{true}}(t_1)\rangle_N$ とは違うものである。実際、5章で与えた部分集合 A は、 H の固有状態全体の集合よりもずっと小さいため、見せかけの状態 $|\psi_{\text{historian}}(t_1)\rangle_N$ は、元々の基礎的な理論でのヒルベルト空間のうち特別なごく一部の部分から来ているように見えるだろう。こうして、最初の状態 $|\psi(t_0)\rangle_N$ は、観測者が存在する時刻が後になれば後になるほど、隠されることになる。これは、もし、我々の宇宙が何らかの基礎的な理論において非エルミートなハミルトニアンで記述されたならば、我々は過去の状態をエルミートなハミルトニアンを使って評価するため、間違った評価をしてしまう可能性があることを示唆している。

では、もしハミルトニアンが非エルミートであったとしたら、その効果を見ることは出来るだろうか？経路積分において、作用の複素成分 S_I が最小になるような経路では $\delta S_I \simeq 0$ であるため、その近傍の経路で S_I はほぼ定数であり、その効果を見ることは難しいと思われる。その効果をいかにして見るか、また、複素作用理論の古典的な振る舞いの検証が今後の課題である。

参考文献

- [1] K. Nagao and H. B. Nielsen, Prog. Theor. Phys. **125** No. 3, 633 (2011).
- [2] H. B. Nielsen and M. Ninomiya, the proceedings of Bled 2006 -What Comes Beyond the Standard Models-, p.87-124, arXiv:hep-ph/0612250.
- [3] H. B. Nielsen and M. Ninomiya, arXiv:0802.2991; Int. J. Mod. Phys. A **23** (2008), 919; Prog. Theor. Phys. **116** (2007), 851.
- [4] H. B. Nielsen and M. Ninomiya, *the proceedings of Bled 2007*, p. 144, arXiv:0711.3080.
- [5] H. B. Nielsen and M. Ninomiya, arXiv:0910.0359; arXiv:1008.0464, to be published in *the proceedings of Bled 2010*.
- [6] H. B. Nielsen, arXiv:1006.2455.
- [7] H. B. Nielsen and M. Ninomiya, hep-th/0701018.
- [8] H. B. Nielsen, arXiv:0911.3859.
- [9] S. Chadha, C. Litwin and H. B. Nielsen, unpublished.
See Section 7.2.2.A. “Quantum Mechanics”, p. 143 of C. D. Froggatt and H. B. Nielsen, *Origin of Symmetries* (World Scientific Pub. Co. Inc., 1985).
- [10] F. G. Scholtz, H. B. Geyer and F. J. W. Hahne, Ann. of Phys. **213** (1992), 74.

Representation of $SL_2(R)$ using a noise

Si Si

Faculty of Information Science and Technology
Aichi Prefectural University, Japan

2000AMS Subject Classification 60H40 White Noise Theory

Abstract

We introduce a new noise $P'(u, \lambda)$, with a space parameter u and the intensity λ , noting that the characteristic of Poisson type process depends on the intensity. A new noise $P'(u, \lambda)$ is different with the time derivative $\dot{P}(t)$ of Poisson process $P(t)$. In this paper, the invariance of the intensity λ under the transformations : dilation and reflection is discussed. In addition, it is interesting to see how the intensity changes when the exponent of a stable process changes to its reciprocal.

1 Introduction

A noise is a system of idealized elemental random variables which is a system of idealized (or generalized), independent, identically distributed (i.i.d) random variables parametrized by an ordered set.

If the parameter set is discrete, say \mathbf{Z} , then we simply have i.i.d. random variables $\{X_n, n \in \mathbf{Z}\}$, which can be easily dealt with. While the parameter set is continuous, say R^1 , then we have to be careful with the definition and analysis of functionals of the noise.

In this paper, we shall discuss possible noises and give a classification of them.

We consider only noises depending on the continuous parameter. They are classified by the type. It is noted that two noises are said to be the same type if and only if the probability distributions are the same type.

1. Two classes of noise

We classify the well-known noises according to the choice of parameter. A noise usually consists of continuously many *idealized* random variables, and they are parametrized by an ordered set. There are time dependent noises and space dependent noises.

a) Time dependent noises

They are (Gaussian) White Noise $\dot{B}(t)$ and Poisson Noise $\dot{P}(t)$, which are well known.

b) Space dependent noise

It is $P'(u)$, $u > 0$, which is the system what we are going to discuss in this paper.

2 The birth of noises

We wish to find possible noises by approximation under reasonable assumptions. We take unit interval I as a representative of continuous parameter set. Approximation should be uniform in $u \in I$, and the idealized variables should be i.i.d, so is for the approximating variables. There are two cases that one is that approximating variables are having a finite variance, and another one is that they are atomic.

Consider a linear parameter. To fix the idea we take the unit interval $I = [0, 1]$. Let $\Delta^n = \{\Delta_j^n, 1 \leq j \leq 2^n\}$ be the partition of I . To fix the idea, we assume that $|\Delta_j^n| = 2^{-n}$. Associate a random variable X_j^n to each subinterval Δ_j^n . Assume that $\{X_j^n\}$ are independent identically distributed (i.i.d.).

Case I. Assume that $\{X_j^n\}$ has mean 0 and finite variance v . Let n be large. Then, we can appeal to the central limit theorem to have a standard Gaussian distribution $N(0, 1)$ as the limit of the distribution of

$$S_n = \frac{\sum_1^{2^n} X_j^n}{\sqrt{2^n v}}.$$

If we take subinterval $[a, b]$ of I , then the same trick gives us a Gaussian distribution $N(0, b-a)$, which is, for the later purpose, denoted by $N(a, b)$. The family

$$\mathcal{N} = \{N(a, b); 0 \leq a, b \leq 1\}$$

forms a consistent system of distributions, so that the family \mathcal{N} defines a stochastic process. In reality it is a Brownian motion $B(t)$, $t \in [0, 1]$.

Case II. Let X_j^n be subject to a simple probability distribution such that

$$P(X_j^n = 1) = p_n, \quad P(X_j^n = 0) = 1 - p_n.$$

Let p_n be smaller as n is getting larger keeping the relation

$$2^n p_n = \lambda,$$

for some positive constant $\lambda > 0$. Then, by the *law of small probabilities of Poisson* (this term comes from Lévy[?]) we are given the Poisson distribution $P(\lambda)$ with intensity λ .

Take a sub-interval $[a, b]$ of I . As in the case I, we can define a Poisson distribution with intensity $(b-a)\lambda$, denoted by $P([a, b], \lambda)$. We, therefore, have a consistent family of Poisson distributions $\mathcal{P} = \{P([a, b], \lambda)\}$. Hence \mathcal{P} determines a Poisson process with intensity λ .

Here are important notes.

- 1) We have a freedom to choose the constant λ whatever we wish, so far as it is positive.
- 2) The positive constant λ is the expectation of a random variable $P(\lambda) = P([0, 1], \lambda)$. It can be viewed as *scale* or *space* variable.

We now understand that a noise, which is taken to be a realization of the randomness due to reduction, can be eventually created as a space variable.

Case III. Next step of our study is concerned with a general new noise depending on a space parameter. Keep random variables X_i^n as above and divide the sum S_n into partial sums :

$$S_n = \sum_j S_n^j,$$

where

$$S_n^j = \sum_{k_j+1}^{k_{j+1}} X_j^n,$$

with

$$1 = k_0 < k_1 < k_2 < \dots < k_m = 2^n.$$

We assume that $k_{j+1} - k_j \rightarrow \infty$ as $n \rightarrow \infty$ for every j and that each ratio $\frac{k_{j+1} - k_j}{2^n}$ converges to $\frac{\lambda_j}{\lambda}$, respectively.

Theorem 2.1 *Let S_n , S_n^j and λ be as above. Let $P(\lambda_j)$, $1 \leq j \leq m$ be mutually independent Poisson random variables with intensity λ_j , respectively. Then,*

- i) S_n and S_n^j converges to $P(\lambda)$ and $P(\lambda_j)$ in law, respectively.
- ii) $P(\lambda_j)$ is a realization, in terms of distribution, of the limit (in law) of the S_n^j . Let the u_j 's be linearly independent real numbers over Z , and let $P = \sum_j u_j P(\lambda_j)$. Then, if we know the values of P , we can determine the values of each $P(\lambda_j)$ which can be approximated in law by S_n^j .

Proof. It is easy by observing the characteristic functions $\varphi_n^j(z)$ and $\varphi(\mathbf{z}_n)$ of S_n^j and S_n , respectively. The evaluation gives

$$\varphi_n^j(z_j) = \left(1 + \frac{\lambda_j}{(k_{j+1} - k_j)} (e^{iz_j u_j} - 1) \right)^{n_j}, \quad (1)$$

and

$$\varphi_n(z) = \prod_{j=1}^m \left(1 + \frac{\lambda_j}{(k_{j+1} - k_j)} (e^{iz_j u_j} - 1) \right)^{n_j}. \quad (2)$$

Thus, $\varphi_n^j(z)$ tends to $e^{\lambda_j (e^{iz_j u_j} - 1)}$ which is the characteristic function of $P(\lambda_j)$ and $\varphi(z_n)$ tends to

$$\varphi(\mathbf{z}) = \prod_{j=1}^m e^{\lambda_j (e^{iz_j} - 1)}, \quad (3)$$

which is the characteristic function of $P(\lambda)$.

This proves the assertion.

Corollary 2.1 *The characteristic function $\varphi(z)$ of P given by the above theorem is expressed in the form*

$$\varphi(\mathbf{z}) = e^{\sum_k \lambda_k (e^{i u_k z_k} - 1)}.$$

Before we come to the next topic, we pause to see the following facts. (The type of probability distributions)

Definition 1 *If X and $cX, c > 0$ are having the same probability distributions then their distributions are called the same type of distribution.*

All the Gaussian distributions are the same type (the exceptional Gaussian variable is excluded. It is just excluded in Case I).

On the other hand, Poisson type distributions with different intensities are not the same type. This can be proved by the formula of characteristic function. Poisson type distribution means a distribution of $uP(\lambda) + c$, c may be ignored. Namely, we can compare two characteristic functions :

$$\begin{aligned} \varphi_1(z) &= e^{\lambda_1 (e^{iz} - 1)}, \\ \varphi_2(z) &= e^{\lambda_2 (e^{iz} - 1)}. \end{aligned}$$

These two functions of z can not be exchanged by any affine transformation of z if $\lambda_1 \neq \lambda_2$.

We can say that, concerning the Poisson type,

- 1) We have a freedom to choose intensity arbitrary. Hence we can form, by the sum of i.i.d.random variables, continuously many Poisson type random variables with different type.
- 2) The intensity is a parameter, different from the time parameter, to be remarkable. The intensity is viewed as a space parameter. The above construction shows that it is additive in λ .
- 3) Multiplication by a constant to Poisson type variable keeps the type. The constant, however, can play the role of a *label*. So, take a constant $u = u(\lambda)$ as a *label* of the intensity λ . The function $u(\lambda)$ is therefore univalent. In view of this fact, we can form an inverse function $\lambda = \lambda(u)$ which is to be monotone.

With the remark made above, we change our eyes towards multi-dimensional view. We consider a vector consisting independent components

$$P(\lambda) = (P(\lambda_1), P(\lambda_2), \dots, P(\lambda_n))$$

and its characteristic function

$$\varphi(\mathbf{z}) = \prod_{k=1}^n e^{\lambda_k (e^{iz_k u_k} - 1)},$$

where $\mathbf{z} = (z_k)$.

We now wish to identify every component $P(\lambda_k)$, so that we give a label to each $P(\lambda_k)$, say different real number u_k . Now let us have passage from digital $\{k\}$ to real $u > 0$. The characteristic function $\varphi(\mathbf{z})$ turns into a functional of ξ in some function space E , expressed in the form

$$C(\xi) = \exp\left[\int \lambda(u)(e^{iu\xi(u)} - 1)du\right].$$

What we have done is that starting from a higher dimensional characteristic function of Poisson type distribution, we have its limit $C(\xi)$.

We now claim

Theorem 2.2 *Let E be a nuclear space which is a dense subspace of $L^2([0, \infty))$. Then, $C(\xi)$ obtained above is a characteristic functional of a generalized stochastic process with parameter set $[0, \infty)$.*

The proof comes from the monograph[?] chap. III, §4.

3 A noise of new type

We have found a new noise which we shall call the new noise. It is, of course, in line with the study of random functions using i.e.r.v.'s.

The idea is to choose another kind of parameter, say space variable, instead of time. Motivation comes from the decomposition of a compound Poisson process .

By discussions in the previous section lead us to consider a functional $C^P(\xi)$, where the variable ξ runs through a certain nuclear space $E \subset C^\infty((0, \infty))$, say isomorphic to the Schwartz space \mathcal{S} ;

$$C^P(\xi) = \exp\left[\int_{R^+} (e^{iu\xi(u)} - 1)\lambda(u)du\right], \quad (4)$$

where $R^+ = (0, \infty)$ and where $dn(u)$ is a measure on $(0, \infty)$ to be specified.

We assume that $dn(u) = \lambda(u)du$ with $\lambda(u)$ positive almost everywhere and $\frac{u^2}{1+u^2}\lambda(u)$ is integrable.

Theorem 3.1 *Under these assumptions, the functional $C^P(\xi)$ is a characteristic functional. That is*

- i) $C^P(\xi)$ is continuous in ξ , with a suitable choice of a nuclear space E .
- ii) $C^P(0) = 1$.
- iii) $C^P(\xi)$ is positive definite.

Applying the Bochner-Minlos theorem, we can see that there exists a probability measure ν^P on E^* such that

$$C^P(\xi) = \int_{E^*} e^{i\langle x, \xi \rangle} d\nu^P(x). \quad (5)$$

We introduce a notation $P'(u, \lambda(u))$ or write it simply $P'(u)$. We understand that ν^P -almost all $x \in E^*$, $x = x(u)$, $u \in R^1$ is a sample function of a generalized stochastic process $P'(u)$, $u \in R^+$.

Theorem 3.2 *The $\{P'(u), u \in R^+\}$ defines a system of i.e.r.v., that is a noise.*

Proof. Suppose ξ_1 and ξ_2 have disjoint support; let them be denoted by A_1 and A_2 . Then, the integral in the expression (4) can be expressed as a sum

$$\int_{A_1} (e^{iu\xi(u)} - 1)dn(u) + \int_{A_2} (e^{iu\xi(u)} - 1)dn(u).$$

This proves the equality

$$C^P(\xi_1 + \xi_2) = C^P(\xi_1)C^P(\xi_2).$$

This shows that $P'(u)$ has independent value at every point u . Also follow the atomic property and others.

The bilinear form $\langle P', \xi \rangle$, $\xi \in E$ is a random variable with mean

$$\int u\xi(u)\lambda(u)du.$$

It is, of course, not permitted to put $\xi = \delta(u_0)$ to say $E(P'(u_0)) = u_0\lambda(u_0)$.

The variance of $\langle P', \xi \rangle$ is

$$\int u^2\xi(u)^2\lambda(u)du.$$

Hence $\langle P', \xi \rangle$ extends to $\langle P', f \rangle$ under the condition $uf(u) \in L^2((0, \infty), \lambda(u)du)$.

If $uf(u)$ and $ug(u)$ are orthogonal in $L^2(\lambda(u)du)$, then $\langle P', f \rangle$ and $\langle P', g \rangle$ are uncorrelated. Thus, we can form a random measure and hence, we can define the space $\mathcal{H}_1(P)$ like \mathcal{H}_1 in the case of Gaussian white noise. The space $\mathcal{H}_1(P)$ can also be extended to a space $\mathcal{H}_1^{(-1)}(P)$ of generalized linear functionals of $P'(u)$'s. Note that there we can give an *identity* to $P'(u)$ for any u .

Our conclusion is that single noise $P'(u)$ with the parameter u can be found in $\mathcal{H}_1^{(-1)}(P)$.

Remark 3.1 *The case where the parameter u runs through the negative interval $(-\infty, 0)$ can be discussed in the similar manner. It is, however, noted that the single point mass at $u = 0$ is omitted.*

We now focus our attention to the intensity $\lambda(u)$. There is an obvious assertion.

Remark 3.2 *Let $X(\lambda)$ be subject to a Poisson distribution with intensity λ . Then the probability distribution of $X(\lambda)$ and $uX(\lambda), u > 0$ are the same type, while $X(\lambda)$ and $X(\lambda')$ have distribution of different type.*

Proof comes from the formulas of characteristic functions.

We now come to next topic. Since u is supposed to be the space variable running through R_+ , it is natural to consider the dilation of u

$$u \rightarrow au,$$

in place of the shift in the time parameter case, $t \in R$.

The $P'(u)$ is said to be self-similar if for any $\alpha > 0$ there exists $d(a)$ such that

$$P'(au) \sim d(a)P'(u),$$

where \sim means the same distribution.

Theorem 3.3 *If $P'(u)$ is self similar, then*

$$\lambda(u) = \frac{c}{u^{1+\alpha}},$$

where c is a positive constant and $0 < \alpha < 1$.

The above case corresponds to the stable noise and α is the exponent of the noise.

Since we exclude $u = 0$, and since we may restrict our attention to the positive parameter set, i.e. $(0, \infty)$. We now consider the one-parameter group

$$\mathcal{G} = \{g_t, t \in R^1\}$$

of dilations, where

$$g_t : u \rightarrow g_t u = e^{at} u, \quad a > 0.$$

There, we have

$$g_t g_s = g_{t+s}.$$

Remark 3.3 *1) We can claim the same result for the case $1 \leq \alpha < 2$ by a slight modification of the characteristic functional.*

2) The group \mathcal{G} characterizes the class of the stable noises. More details shall be discussed in the forthcoming paper.

4 Invariance

Like white noise, we can see invariance with respect to dilation and reflection here too.

1) Isotropic dilation

Since the parameter u runs through R_+ , the dilation is the basic transformation.

Let

$$\mathcal{G} = \{g_a, g_a u = au\}.$$

There, we have

$$g_a g_b = g_{a+b},$$

so \mathcal{G} is the group of dilations.

Remark 4.1 *The group \mathcal{G} characterizes the class of the stable noises.*

2) Reflection with respect to the unit sphere S^1

Consider the reflection

$$u \mapsto \frac{1}{u},$$

then

$$\lambda(u) = \frac{1}{u^{\alpha+1}} \mapsto \lambda\left(\frac{1}{u}\right) = u^{\alpha+1}.$$

The following (modified) reflection changes the intensity for a stable process as follows :

$$\lambda(u) \mapsto \lambda\left(\frac{1}{u}\right) \cdot \frac{1}{u^3} = \frac{1}{u^{2-\alpha}} = \frac{1}{u^{(1-\alpha)+1}}.$$

That is, when α changes to $1 - \alpha$, the range of α changes as

$$0 < \alpha < 1 \quad \longleftrightarrow \quad 1 > 1 - \alpha > 0.$$

Theorem 4.1 *The family $\{P'_\alpha(\lambda, u), 0 < \alpha < 1\}$ is invariant under the reflection*

$$\lambda(u) \mapsto \lambda\left(\frac{1}{u}\right) \cdot \frac{1}{u^3},$$

where $\alpha \rightarrow 1 - \alpha$.

3) Reciprocal transformation of exponent

We first discuss the motivation of discussing this transformation. That is the inverse transform of Brownian motion. Let

$B(t)$: Brownian motion

$M(t)$: maximum of Brownian motion

$T(y)$: inverse of $M(t)$

$$B(t) \mapsto M(t) \mapsto T(y)$$

Then, the exponent α of $B(t)$ is 2 and the exponent α of $T(y)$ is $\frac{1}{2}$. That is, α changes to $\frac{1}{\alpha}$.

Proposition 4.1 *By changing the exponent α of a new noise to its reciprocal $\frac{1}{\alpha}$, then the corresponding intensity is*

$$\lambda_{\frac{1}{\alpha}}(u) = (\lambda_{\alpha}(u))^{\frac{1}{\alpha}}.$$

Proof Change α to $\frac{1}{\alpha}$ then the intensity changes λ_{α} to $\lambda_{\frac{1}{\alpha}}$.

Then we have

$$\lambda_{\alpha}(u) = \frac{1}{u^{\alpha+1}} \mapsto \lambda_{\frac{1}{\alpha}}(u) = \frac{1}{u^{\frac{1}{\alpha}+1}} = \left(\frac{1}{u^{\alpha+1}}\right)^{\frac{1}{\alpha}}$$

Thus, we have

$$\lambda_{\frac{1}{\alpha}}(u) = (\lambda_{\alpha}(u))^{\frac{1}{\alpha}}.$$

We now generalize this mapping $\alpha \mapsto \frac{1}{\alpha}$ where α is the exponent of stable distribution.

Let $X_{\alpha}(t)$ be a stable process with exponent α and $T(y)$ be the inverse function of $M_{\alpha}(t) = \max_{s \leq t} X_{\alpha}(s)$.

Theorem 4.2 *The probability distribution of $y^{-\alpha}T(y)$ is independent of y .*

Proof is given by Lévy(1939).

The above theorem gives $y^{-\alpha}T(y)$ and $T(1)$ has the same distribution. The characteristic function of $T(1)$ is

$$\varphi(z) = E(e^{izT(1)}) = e^{\psi(z)}.$$

On the other hand, the characteristic function of $y^{-\alpha}T(y)$ is

$$E(e^{izy^{-\alpha}T(y)}) = e^{\psi(zy^{-\alpha})y},$$

since $T(y)$ is a Lévy process. Thus, we have

$$\psi(z) = \psi(zy^{-\alpha})y.$$

Letting $z = y^{\alpha}$,

$$\psi(y^{\alpha}) = \psi(1)y.$$

That is,

$$\psi(x) = \psi(1)x^{\frac{1}{\alpha}}.$$

In other words

$$\varphi(z) = e^{cz^{\frac{1}{\alpha}}}.$$

Hence we have a stable process $T_{\alpha}(y)$ of exponent $\frac{1}{\alpha}$.

Theorem 4.3 *Let X_{α} be a stable process with exponent α and $T(y)$ be the inverse function of $M_{\alpha}(t) = \max_{s \leq t} X_{\alpha}(s)$. Then, $T(y)$ is the stable process with exponent $\frac{1}{\alpha}$.*

We say that α stable distribution and $\frac{1}{\alpha}$ stable distribution are α conjugate.

Remark 4.2 *Cauchy distribution is self conjugate. Intensity does not change for every label.*

References

- [1] I. M. Gelgand and N. Ya Vilenkin, Generalized functions Vol.4. Academic Press 1964.
- [2] T. Hida, Stationary stochastic processes. Princeton Univ. Press, 1970.
- [3] T. Hida, White noise approach to some statistical problems. (to appear in Professor Louis Chen's Volume.)
- [4] T. Hida and Si Si, Lectures on white noise functionals. World Sci. Pub. Co. 2008.
- [5] T. Hida, Si Si and Win Win Htay, A noise of new type and its application (in press)
- [6] P. Lévy, Notice sur les Travaux Scientifiques.
- [7] P. Lévy, Sur les exponentiales de polynômes et sur l'arithmétique des products de lois de Poisson. Ann. Ecole Normale Sup. 54 (1937), 231-292. (in particular Chap. 2).
- [8] P. Lévy, Théorie de l'addition des variables aléatoires. Gauthier-Villars, 1938. 2éme éd. 1954.
- [9] P. Lévy, Sur certains processus stochastiques homogènes, Compositio mathematica, Noordhoff-Groningen.-7, fasc.2, 1939, P283à339.
- [10] P. Lévy, Problèmes concrets d'analyse fonctionnelle. Gauthier-Villars, 1951.
- [11] Sidney I. Resnick, Heavy-tail phenomena. Probabilistic and Statistical modeling. Springer, 2007.
- [12] Si Si, Introduction to Hida distributions. World Sci. Pub. Co. 2001.
- [13] Si Si, A.H. Tsoi and Win Win Htay, Jump finding of a stable process. Quantum Information. vol. V, World Sci. Pub. Co. (2000), 193-201.

Quasi-stability: revealing qualitatively the super-magic numbers common to subatomic, biological, and cosmic systems

Ken Naitoh

Faculty of Science and Engineering, Waseda University,

3-4-1 Ookubo, Shinjuku, Tokyo 169-8555, Japan

E-mail: k-naito@waseda.jp

Abstract. The present report presents a starting point for hyper-interdisciplinary mechanics, which synthetically reveals masses and sizes as well as frequencies of various particles of quarks, leptons, hadrons, atoms, biological molecules, liquid droplets of fossil fuel and water, living cells, biological organs, and stars. This is possible because each flexible particle is commonly generated by a mode in which a larger particle breaks up into two smaller ones through a gourd shape (fracton) with two lumps rather than superstrings and spheres. These masses, sizes, and frequencies dominated by the super-magic numbers, including those between the golden and yamato ratios in fractal nature, can be derived by a quasi-stability principle defined between absolute instability and neutral stability. An important point is that this quasi-stability principle, which reveals mysteries heretofore unsolved, is applied as a momentum conservation law, while the analytical results obtained with this principle are also consistent with the variational methods traditionally applied as an energy conservation law.

Key Words: quasi-stability, quark, lepton, hadron, biological, cosmic, interdisciplinary.

1. Introduction

First, let us consider a spatial aspect related to the golden, silver, and yamato ratios. A neutron impacting uranium 235 produces smaller child atoms that often have an asymmetric weight ratio of about 2:3 between the golden and silver ratios. In contrast, varying the impact speed of neutrons results in a nearly symmetric division of uranium 235, which has the yamato ratio of 1:1. [1] Purines and pyrimidines in biological pairs of hydrated nitrogenous bases, biological cells after divisions, liquid droplets, and stars in the cosmos also have a fusion of symmetry of 1:1 and asymmetry of around 2:3. [2, 3] There are also mesons with “two” quarks and baryons with “three”. [4]

These ratios could not be revealed by the dissipation theory of Prigogine [5].

The physics underlying the fractal features must be revealed. A physical model we developed previously based on fluid dynamics and extended by a new stability principle has revealed the reason for the fusion of symmetry of 1:1 and asymmetry of around 2:3 in the fractals found in nature. [2, 3] Our previous studies [2, 3] also offered a hypothesis (and prediction) that this fusion of symmetry and asymmetry is in

the brain system as well. Later, some experimental investigations done by other people verified our hypothesis and prediction [6]. This provides more evidence for the effectiveness of the model.

It can also be said that this fusion of symmetry and asymmetry appears in various systems from atoms to stars because each system is commonly related to a “breakup of flexible particles deformed”. [2, 3, 7-10]

A higher order of analysis clarifies the reason why size ratios over 2.0, the magic numbers, are also seen in the number ratios of other biological molecules such as amino acids as well as liquid droplets [7-10] and in the ratios of neutrons and protons in the halo structures such as H10 and M32 [11].

In this report, we mainly reveal the mysteries related to subatomic systems more intensively and extensively: specifically, masses and sizes, and frequencies of various particles for quarks, leptons, and hadrons. The relative forces between particles such as atoms, hadrons, quarks, and leptons at the rate-determining timing of breakups are also revealed in the present report.

The proposed theory describing gourd shapes (fractons) of particle pairs only at rate-determining and transient stages posits a starting point of new hyper-interdisciplinary physics that explains a very wide range of scales, while each of the Newton, Schrodinger, and Boltzmann equations [12, 13] and superstring theories describes only a narrow range of scales.

2. Quasi-stability and indeterminacy

2.1 Quasi-stability principle [3, 7-10]

Natural systems are essentially discontinuous in three-dimensional space, but relatively continuous in time because from the subatomic to the cosmic scale they consist of particles such as quarks and hadrons, atoms, molecules, fluid particles, cells, and stars. Accordingly, various natural processes for non-living and living systems can approximately be described by the following momentum equation systems:

$$\frac{d^{(n)}}{dt^{(n)}} y_i(t) = \sum_j f_{ij}(y_i, y_j) + \varphi_i \text{ or } \frac{\partial^{(n)}}{\partial t^{(n)}} y_i(t, x_k) = \sum_j f_{ij}(y_i, y_j) + \varphi_i \quad (1)$$

where y_i, x_k, t, n, f_{ij} , and φ_i denote physical quantities of particles such as their velocity, deformation rate, deformation speed, density, and pressure, spatial coordinates, time, order of derivative, function of y_i and y_j , and random disturbance related to indeterminacy (statistical indeterminacy) coming from the small number of particles, respectively. [3, 7-10]

Quasi-stability is defined as a principle in which one part (one term) on the right-hand side of Eq. 1 is zero, when disturbance of φ_i enters the system. When at least one of the various terms of i or j for f_{ij} is zero, the system is also quasi-stable against the disturbance. Quasi-stability as it is used here lies between neutral stability and an absolutely unstable condition. This quasi-stability is different from

meta-stability denoted in thermo-physics because it is also weaker than the meta-stability for energy conservation.

The first example of evidence for quasi-stability is in the population model on the evolutionary process [14]. The population model shows that only one variable undergoes no change at the time of a drastic phase transition. The second example is the model of six molecular groups as the standard clock for various stages of living systems [10, 15, 16], which often demonstrates no change for one group. The third example is that the elimination of only one term among various numerical errors in a finite difference equation derived with the Taylor series yields an approximate solution for a physical phenomenon such as the transition to turbulence [17, 18].

2.2 Indeterminacy: statistical indeterminacy and quantum indeterminacy

There are two types of indeterminacies, i.e., those appearing in quantum mechanics related to Kennard's consideration [19, 20] and those in statistical mechanics related to the Liouville equation [12]. The discontinuity of particles essentially leads to statistical indeterminacy for several stages of phenomena from subatomic to cosmic, whereas very small particles such as electron particles described by the Schrodinger and Klein-Gordon equations [13] have the other type of indeterminacy indicated by quantum mechanics (quantum indeterminacy).

An important point is that the level of statistical indeterminacy, i.e., degree of variation, varies according to the window scales used for averaging (stochastic determinism window) and the number of particles involved. Statistical mechanics based on the Liouville and Boltzmann equations [12] tells us that a very large window for averaging the aggregation of a huge number of particles results in deterministic continuum mechanics, whereas a small window for a small number of particles leads to a stochastic differential equation. [8, 10, 18] When a small window is used for averaging, physical quantities such as mass, size, and velocity are defined with indeterminacy, i.e., vagueness.

Baryons and mesons are constructed of only three and two quarks, respectively. There are only two electrons inside the smallest orbit around an atom. The number of carbon, oxygen, and nitrogen particles inside a nitrogenous base is not enough for a continuum, even if the nitrogenous base is hydrated, because of the order of ten or one hundred. These small numbers of particles will lead to statistical indeterminacy in the governing equations, even in cases where the indeterminacy in quantum mechanics does not work. On the other hand, a biological cell or a liquid droplet of over one millimeter in size includes a lot of molecular particles that result in deterministic governing equations. The most important point is that a system of only one particle is also deterministic, although such systems are of an infinitely small number.

3. Model [2, 3, 10]

Basically, we define a parcel as a flexible liquid-like spheroid having two long and short radii $a(t)$ and $b(t)$ dependent on time t , for a lepton, a quark, a hadron, a neutron, a proton, an aggregation of some quarks, leptons, and hadrons generated by a high energy experiment, an aggregation of neutrons and protons in each child atom resulting from the fission of a mother atom such as a uranium 235 atom, a

nitrogenous base in biological base pairs of nucleic acids hydrated with a lot of water molecules, a hydrated amino acid hydrated, a biological macromolecule such as protein and RNA hydrated, a biological cell just before division, and a star at breakup in the cosmos. The parcel becomes a sphere of the radius $r_d (= [ab^2]^{1/3})$ under an equilibrium condition. The deformation rate $\gamma(t)$ is defined as $a(t)/b(t)$, while a sphere without deformation corresponds to $\gamma = 1$.

Then, we consider the form of two spheroid parcels connected in a line at the time of the breakup processes of quarks, leptons, hadrons, and atoms such as uranium 235, at the replication stage of a biological base pair, at cell division, and at the division of a star. This is because subatomic particles, atoms, nitrogenous bases, cells, and stars will commonly have the shape of a gourd with two kinks at the later stage of breakup or at the first stage of coalescence, i.e., a fracton.

Existing experimental data on breakup processes of liquid droplets of water and oil and biological cells show spheroid and gourd shapes at the time of breakup or in the later stage of breakup, which is the rate-determining stage. This also leads to a possibility that, for several levels of parcel breakups from subatomic to cosmic ones, the parcels will take an approximately spheroid shape at the later stage after deformation.

We also assume that the convection flow inside the parcels is irrotational and also that the interfacial force is evaluated in the form of σ/r^m where m and σ are constants and r is the curvature of the parcel surface. Several types of forces such as nuclear force, van der Waals force, surface tension, coulomb force, and gravity can be explained by varying m .

Then, we derive a statistic fluid-dynamic theory for describing the deformation and motions of the two connected spheroid parcels having two radii of r_{d1} and r_{d2} under equilibrium conditions and two deformation rates of γ_k [$k = 1, 2$], while the size ratio of the two parcels is defined by $\varepsilon = r_{d1}/r_{d2}$. [2, 3, 10]

We then define the deviation from a sphere as y_i , which is equal to $\gamma_i - 1$. Taking the first order of approximation in the Taylor series for the governing equation leads to

$$\begin{aligned} \frac{d^2 y_i}{d\bar{t}_i^2} = & \left[-\frac{2}{3}(3 - \varepsilon^3 - 2\varepsilon^{2+m}) \left(\frac{dy_i}{d\bar{t}_i} \right)^2 + 3(3 - \varepsilon^3) m y_i - 4\varepsilon^{1+m} \left(\frac{dy_j}{d\bar{t}_j} \right)^2 + 12\varepsilon^{1+m} m y_j \right] / [3(\varepsilon^3 + 1)] \\ & + \delta'_{st}, \end{aligned} \quad (2)$$

where the parameter δ'_{st} denotes random fluctuation coming from the statistical indeterminacy. It should strongly be stressed that the indeterminacy caused by the small number of sub-particles inside a parcel implies a slightly indeterminate (vague) parcel shape, which is somewhat different from that of a spheroid. Thus, the present theory based on Eq. 2 also explains breakup processes of various shapes of parcels. [See Refs. 3 and 10 on the details of the derivation.]

4. Size (representative length) revealed by the first order of analysis for $m = 1$

Equation 2 shows that a symmetric ratio of 1.0 ($\varepsilon = 1$) makes the first term on the right-hand side of the equation zero, while an asymmetric ratio of $\sqrt[3]{3}$ around 1.5 makes the second term zero for each value of m . The size ratios of 1.00 ($\varepsilon = 1$) and approximately 1.50 ($\varepsilon^3 = 3$) can be described by the unified number of the n -th root of n .

As shown above, we define a system as being quasi-stable when only one term on the right-hand side of the differential equation system governing the phenomenon is zero. Thus, the system of two connected parcels shown above is relatively quasi-stable because d^2x/dt^2 becomes smaller when the size ratio of connected parcels takes the values of $\varepsilon = 1$ or $\varepsilon^3 = 3$.

Quasi-stability is weaker than neutral stability. [3, 7-10] The concept of quasi-stability is necessary for living beings because stronger stability cannot bring variations, i.e., adaption to environmental change and evolution. This quasi-stability is also possible for nonliving systems such as atoms because atomic systems also vary over time.

Let us look at biological systems containing water flows. We can classify the five bases of adenines (A), guanines (G), cytosines (C), thymines (T), and uracils (U) into two groups: purines and pyrimidines. Purines, i.e., A and G, have a relatively large size, while pyrimidines, i.e., C, T, and U, are small. This grouping specifically refers to the asymmetric size ratio of purines and pyrimidines of around 1.50 in their hydrogen bonds within DNA and RNA, although a symmetric size ratio of 1.00 is often observed in RNA. [3, 7, 8] These ratios correspond to the quasi-stable ones derived from Eq. 2. Symmetric and asymmetric size ratios are also observed at the cell level of microorganisms such as yeast. [2, 3]

These size ratios of 1:1 and about 1:1.5 also correspond to those of child atoms generated by the breakup of uranium 235. This means that the probabilities of the size ratios of 1:1 and about 2:3 are relatively high.

The quasi-stable ratios of 1: $\sqrt[n]{n}$ for $n=1$ and 3 appear for each m (see Eq. 2). This universality also leads to the possibility that the present model can be applied to several levels of parcels from baryons to stars in the cosmos [2, 3, 7-10, 24-26]: specifically, at the level of nuclear force, coulomb force, van der Waals force, surface tension, and force of gravity. [It is stressed that a weight ratio of about 2:3 is also observed in dark matter [24-26].]

As Eq. 2 shows a slightly vague solution for the phenomenon, this indeterminacy also implies that size variations of ε are possible in a limited range. This indeterminacy permits the possibility of sizes around 1:1 and also around 1: $\sqrt[3]{3}$, i.e., between 1:1 and about 2:3, although 1:1 and about 2:3 are more numerous.

Let us consider the reason why the energy conservation law and variational principle such as the Bohr model and some extensions [4] do not explain the fusion of symmetry of 1:1 and asymmetry of around

2:3 in size and density (number density). The reason is that previous models based on energy conservation have tended to eliminate the relative motion between parcels, whereas the momentum conservation in Eq. 2 models all of the relative motion between two parcels, nonlinear convections inside the parcels, interfacial forces at the parcel surfaces, and collisions with smaller molecules. A second reason is that the quasi-stability principle was adopted instead of the variational principle.

Another important point is that natural systems should be explained in terms of four conservation concepts regarding mass, momentum, moment, and energy, as is seen in thermo-fluid dynamics. Conserved quantities are not limited to energy. Thus, the present new explanation for two-particle systems is also necessary. Additionally, the following section shows the importance of the mass conservation law as well.

5. Number ratio

Here, let us examine the reason why larger atoms have larger number ratios close to 2:3 for protons and neutrons.

The first and second terms on the right-hand side of Eq. 2 show that symmetric ($\varepsilon=1$) and asymmetric ($\varepsilon^3=3$) parcel divisions are more stable for disturbances of motion (dx/dt) and parcel deformation x , respectively (Fig. 1).

Let us separate baryon aggregation into two parts: the internal side around the center of the aggregation and the external side close to the surface. External baryons close to the surface move relatively easily because one part of these baryons is free without any connection to other baryons. However, internal baryons often receive forces from many directions due to the presence of other ones, making it relatively difficult for them to move relative to the origin on the earth. Thus, inner baryons deform relatively easily without any translational motion of the gravity center. As a result, the inner or outer positions of baryons determine whether they are asymmetric or symmetric, respectively. [7, 8, 10] An important point is that the concept of inner asymmetry and outer symmetry can be seen here.

Larger aggregations of parcels such as thorium (Th), which contains more baryons than helium (He), have more inner baryons because the surface/volume ratio of the aggregation becomes smaller as the size increases. More inner baryons for larger atoms results in a more asymmetric number ratio of protons and neutrons, as larger nucleic acids such as rRNA also have more asymmetric number ratios of purines and pyrimidines close to 2:3 (Fig. 2).

This asymmetry of density is also because of the mass conservation law, i.e., because heavier particles such as purines and protons can be generated with fewer numbers. [7, 8]

A mysterious thing is that the masses of stable protons and neutrons are almost the same, while child atoms generated by the fission of uranium 235 and nitrogenous bases (pyrimidines and purines) have different weight ratios around 2:3. Qualitatively, protons are a little heavier than neutrons. Thus, relatively heavy protons can be fewer in number in the atomic core because of the mass conservation law.

We may quantitatively be able to explain this mystery by the fact that the mass ratio of protons and neutrons is around 2:3 as the forms such as lambda particles before the atomic cores are stabilized because the up and down quarks have a weight ratio between 1:1 and 1:2. Thus, the present theory can describe the later stage of the fission process for generating atomic cores, whereas the final or post-fission stage generates atomic cores of stable protons and neutrons. This explanation is also possible by the analogy with biological systems because nitrogenous bases are also connected with heavy molecules such as ribose or deoxyribose, which lead to nucleic acids. The weight ratio of purine-deoxyribose and pyrimidine-deoxyribose is close to 1:1, i.e., a symmetric value.

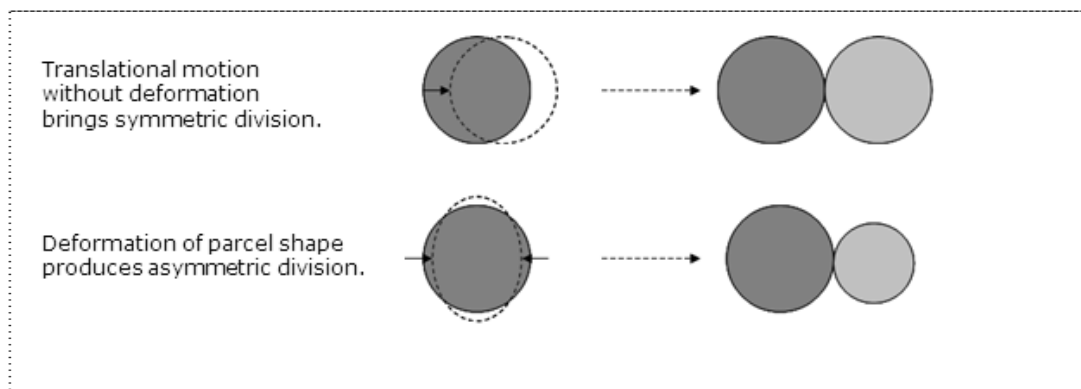


Fig. 1 Concept of inner asymmetry and outer symmetry. An asymmetric division occurs due to parcel deformation, while a symmetric division appears in the absence of deformation.

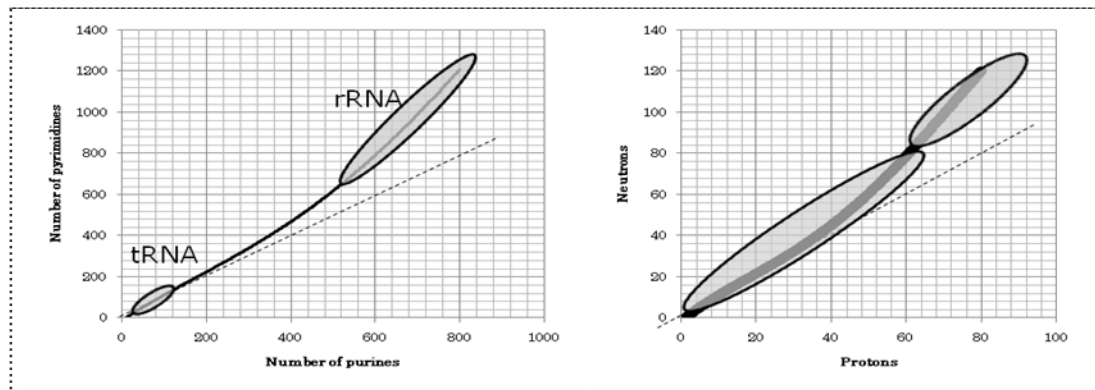


Fig. 2 Density ratio of purines and pyrimidines in RNAs, which is similar to the density ratio of protons and neutrons in stable atom cores. (mRNAs are between tRNAs and rRNAs, which are relatively unstable.) Left: RNAs; Right: Atoms.

The present theory also indicates that number ratios around 1:1.3, i.e., around the center between 1:1 and about 1:1.5, will be relatively unstable (Fig. 2). This can also be understood by the fact that both fluctuations of deformation and velocity enter into the parcels connected with medium number ratios of

about 1:1.3, whereas only velocity fluctuations enter into small parcels such as those of He and only deformations occur for large atoms such as Th. Actually, atoms, which are a little larger than lead (Pb), are unstable.

[The quasi-stability concept applied to the momentum conservation law and the mass conservation law is compatible with Bohr's drop model based on a variational principle for the energy conservation law and also explains further the physics underlying the Shell model related to the magic numbers.]

6. Higher-order of analysis

Next, we will consider a higher order of the Taylor series, instead of Eq. 2. For various values of m , the higher order of the Taylor series for parcel 1 results in

$$\frac{d^2}{d\tau_1^2} y_1 = \sum_{k=1-\infty} a_k(\varepsilon, m) y_1^{k-1} \left[\frac{dy_1}{d\tau_1} \right]^2 + \sum_{k=1-\infty} b_k(\varepsilon, m) y_1^k + \sum_{k=1-\infty} c_k(\varepsilon, m) y_2^{k-1} \left[\frac{dy_2}{d\tau_1} \right]^2 + \sum_{k=1-\infty} d_k(\varepsilon, m) y_2^k + \delta_{st}'' \quad (3)$$

where the last term on the right-hand side δ_{st}'' is the stochastic one due to random fluctuation, while

$$a_k(\varepsilon, m), b_k(\varepsilon, m), c_k(\varepsilon, m), \text{ and } d_k(\varepsilon, m)$$

are four coefficients related to the size ratio \mathcal{E} and m .

First, let us set $m = 1$. The second term in the Taylor series results in a quasi-stable ratio of about 1.27, the third term in ratios of about 3.5 and 1.35, the fourth term in a ratio of about 1.39, the fifth term in ratios of about 2.5, 2.1, and 1.4, the sixth term in a ratio of about 1.41, and the seventh in ratios of about 1.78 and 1.42. An important point is that the terms of orders higher than the ninth may be absolutely unstable, which leads to the existence of the maximum size limit of atoms (Table 1).

It is stressed that liquid fuel droplets generated by fuel injectors and child atoms derived from the fission of uranium 235 have a threefold variation of sizes at the maximum and also that the molecular weights of the twenty types of amino acids show a threefold variation between 240 of cysteine as the maximum and 75 of glycine as the minimum. [2, 3, 10, 24-26] The halo structures such as H10 and M32 have number ratios of neutrons and protons of about 1:3.5. [11] The higher-order analysis for $m = 1$ clarifies the ratios over 2:3 in several systems (Table 1). Table 1 also reveals the magic numbers appearing in the weight ratios in various atoms generated by cold fusion: about 3.6, 2.1, and 1.8 [10, 24-26].

Free atoms in the atmosphere and molecules outside living beings do not have special ratios such as 1:1, about 2:3, and 3.5 because it is relatively difficult for them to interact with each other, while subatomic particles such as baryons and biological molecules like bases, nucleic acids, amino acids, proteins are strongly interactional inside closed regions.

Table 1 Quasi-stable ratios observed in atoms and biological systems. (for $m = 1$)

n-th term in Taylor series	Quasi-stable ratio	Atoms	Biological molecules
1	1:1 & about 1.1.5	Main size ratios of child atoms separated from uranium 235. Number ratios of neutrons and protons in atoms	Nitrogenous bases in DNAs and RNAs (Purines:Pyrimidines). DNA polymerases I, II, and III (I:II, I:III)
2	1:1.27	Number ratios of neutrons and protons in atoms	Nitrogenous bases in DNAs and RNAs (Purines:Pyrimidines).
3	about 1:3.5, about 1:1.35	Higher limit of size ratios of child atoms separated from uranium. Number ratio of protons and neutrons in He 10	Amino acids
4	1:1.39	Number ratios of neutrons and protons in atoms	Nitrogenous bases in DNAs and RNAs (Purines:Pyrimidines).
5	about 1:2.5 & about 1:2.1 & about 1:1.4	The intermediate size ratios of child atoms separated from uranium. Number ratio of protons and neutrons in Mg 32	rRNA (23S:16S)
6	1:1.41	Number ratios of neutrons and protons in atoms	Nitrogenous bases in DNAs and RNAs (Purines:Pyrimidines).
7	about 1:1.78 & about 1:1.42	The intermediate size ratios of child atoms separated from uranium.	Ribosome (50S:30S)
8	1:1.43	Number ratios of neutrons and protons in atoms	Nitrogenous bases in DNAs and RNAs (Purines:Pyrimidines).
9, 11	Unstable	-	-

If we redefine a parcel as an electron cloud, Eq. 3 and Table 1 may also explain the mysterious electron orbits such as why 4f is more unstable than 5p and 6s. This is because quasi-stable ratios do not increase monotonously according to the increase in the orders of the Taylor series, while they are related to the energy levels of orbits. For example, the 3rd and 8th orders of the terms result in relatively large quasi-stable size ratios of about 3.58 and 4.54, whereas the 4th and 5th orders lead to relatively small ones of about 2.47 and 2.10. It will also be stressed that both the numbers of electron orbits and the orders of the Taylor series inducing various quasi-stable size ratios are about seven or eight.

Next, let us examine the elementary particle systems further by varying m . The constant m will often have values of 1.0 or larger for subatomic forces such as those of nuclear force because subatomic forces are proportional to the exponential of distance.

The higher order of terms of the Taylor series for various values of m obtained with the statistical fluid dynamics model (Eq. 3) reveals the extremely various super-magic numbers for size ratios over 1:4 (Table 2). When constant m has a value between 1.01 and 3.0, the quasi-stable ratios of ε are between 1.0 and about 10^{30} . Such ratios may correspond to the mass ratios in very small particles, including quarks and leptons, or those in the hadron classes of baryons and mesons because the databases of subatomic particles also show size ratios over 100.

Before going further, we should think about the reason why discontinuous jumps of quasi-stable size ratios in Table 2 can appear around $m = 1$. Taking the r-integral of $1/r^m$ as the potential, the potential function discontinuously changes for m around 1.0. This may be the reason why values of m a little larger than 1.0 discontinuously induce extremely large size ratios.

Figures 3 and 4 show mass ratios of relatively stable baryons and mesons and also the corresponding theoretical values based on Eq. 3 and Table 2 for $m = 1$ and 2. The double system of $m = 1$ and 2 is possible because the nuclear force is not described only by one value of m or because strong and weak forces work for subatomic systems. [4] [Two values of m for the predictions may also correspond to those for attractive and repulsive forces at the breakup stage of particles.]

It can be said that the theoretical predictions agree fairly well with the experimental data because the statistical indeterminacy due to the lower level of small particles permits a possible range of particle sizes.

Next, if forces working on the levels of quarks and leptons have a value of m between 1.1 and 1.5 at the breakup stage, the theoretical predictions will agree well with the natural data.

The results shown above may also predict variations of m at the breakup time (rate-determining stage), which change according to the levels of particles such as hadrons, quarks, and leptons. [Baryons, mesons and quarks are shown separately in Figs. 3 and 4, respectively, because the quantity of electrons conserved, including strangeness, is important and also because the mass of electrons is close to that of subatomic particles such as quarks.]

There are extremely large size ratios over 10^{30} in Table 2 for $1.0 < m < 1.1$. The very large or infinite ratios for $1.0 < m < 1.1$ may also explain the interaction between particles at an infinite distance, i.e., the quantum entanglement.

The ratios of chromosomes in human beings are about six times at maximum, which may be seen as 4.54 in the higher order of the Taylor series for $m = 1$ and as 6.11 for $m = -1$, or the ratios over 4.0 for $m > 1$. This is because chromosomes are related to covalent bond connection. [24-26]

Table 2 Super-magic numbers [Values outside parentheses () indicate the quasi-stable size ratios of parcels, whereas values inside parentheses () indicate the orders of the Taylor series.]

convection

m=-1	m=1	m=1.04	m=1.1	m=1.2	m=1.3	m=1.5	m=2	m=3
convection								
1	1(1)	1 (1)	1 (1)	1 (1)	1 (1)	1 (1)	1 (1)	1 (1)
1.34	1.27(2)	1.27	1.27(2)	1.26 (2)	1.26 (2)	1.25	1.24 (2)	1.21
1.4	1.35(3)	1.35	1.35(3)	1.34 (3)	1.34 (3)	1.34	1.32 (3)	1.29(3)
1.42	1.39(4)	1.27×10^{30}	1.10×10^{12}	1.05×10	10321	256 (3)	16.1 (3)	4.36(3)
1.43	1.4(5)	1.38	1.38 (4)	1.38 (4)	1.38 (4)	1.37	1.36 (4)	1.33(4)
	1.41(6)	9.08×10^{22}	$1.53 \times 10^9(4)$	39052.6	1151 (4)	68.7	8.33 (4)	3.07(4)
	1.42(7)	1.4	1.4 (5)	1.4 (5)	1.4 (5)	1.4 (5)	1.39 (5)	1.36(5)
	1.43(8)	4.06×10^{22}	$1.10 \times 10^9(5)$	33236.1	1033 (5)	64.4	8.02 (5)	2.86(5)
	1.43(9)	1.41	1.41 (6)	1.41 (6)	1.41 (6)	1.41	1.4 (6)	1.38(6)
		2.82×10^{25}	1.51×10^{10}	123070	2472 (6)	108.7	10.4 (6)	2.99(6)
		1.42	1.42 (7)	1.42 (7)	1.42 (7)	1.42(7)	1.41 (7)	1.39(7)
		1.95×10^{34}	5.2×10^{13}	7.21×10	37325	553.6	23.5 (7)	4.25(7)
		1.43	1.43 (8,9)	1.43 (8,	1.43 (8 ,	1.43(8,	1.42 (8,	1.4 (8)
Surface								
1.44	1.44	1.44 (1-9)	1.44 (1-9)	1.44 (1-	1.44 (1-	1.44 (1	1.44 (1-	1.44 (1
1.8	3.58(3)	4.57	2.19 (6)	2.14 (8)				3.14
1.7	2.47(4)	1.99	1.95 (7)	2.59 (8)				
1.63	2.1(5)	1.84	1.82 (8)	1.88 (9)				
1.59	1.79(7)	1.74	3.88 (8)	2.58 (9)				
6.11	1.71(8)	4.42	1.73 (9)					
	4.54(8)	1.68	2.94 (9)					
		2.97						

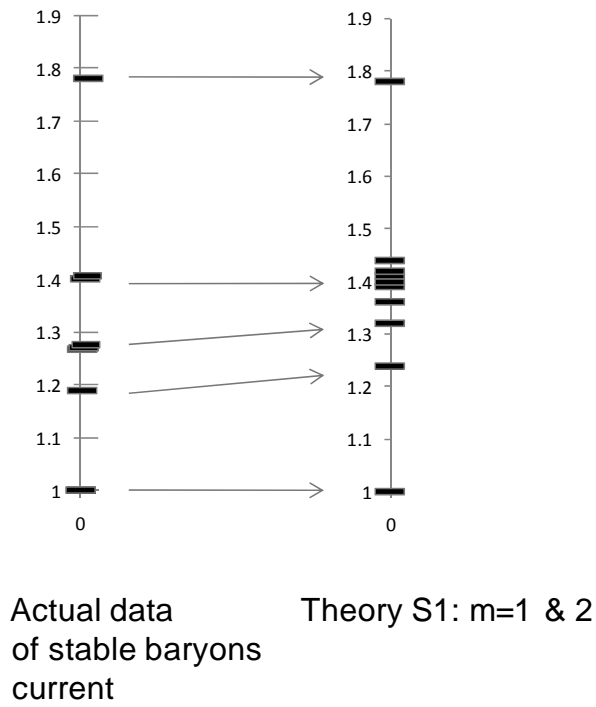


Fig. 3 Relatively stable baryons (current) and the corresponding theoretical predictions of size ratios of ε .

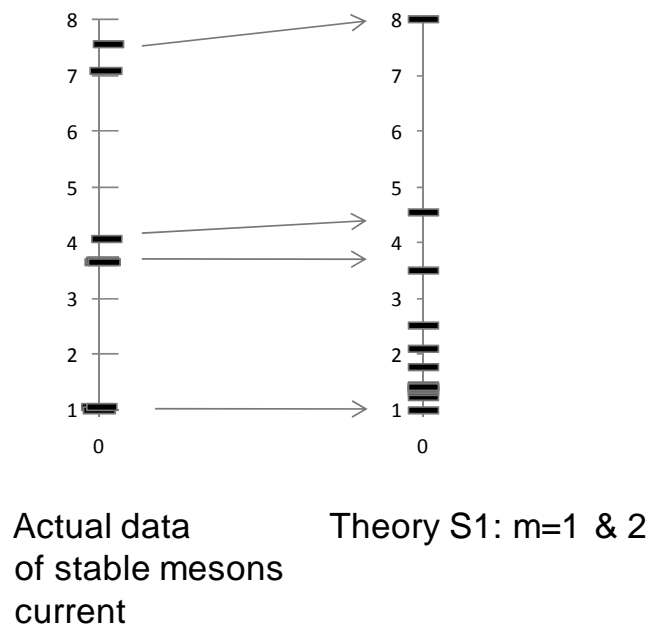


Fig. 4 Relatively stable mesons (current) and the corresponding theoretical predictions of size ratios of ε .

The potential flow assumption, irrotational flow without viscosity, is applicable even for very small subatomic and molecular systems because very high energy, i.e., very high speed (in a very short period), is put into the particles. Actually, energy at the level of the speed of sound is put into the molecular system, while energy at the level of the speed of light is put into the subatomic experiment, although the period is very short.

We should recall that various values of m produce the same quasi-stable ratios of 1.0 and about 1.44 for the first order of the Taylor series. Emphasis is placed on the fact that the fractional Taylor series also show quasi-stable ratios including about 1.44 and 1.0 in Tables 1 and 2.

Sizes of non-living molecules and stars existing in nature may be more various because coulomb and gravity forces also work over far distances. Further research will be necessary to clarify this point.

7. Time-dependent processes in four-dimensional space

7.1 Quasi-stability and neutral stability

Let us think about the asymmetric pattern of the Karman vortex streets [22] generated downstream of a bluff body. Emphasis is placed on the fact that Karman's theoretical analysis based on the neutral stability principle clarifies only the instantaneous stability of the vortex array in space, but it does not show the temporal development of the vortices. Many researchers have confirmed that an analysis based on neutral stability at the instantaneous stage has a high probability of showing the specific pattern of vortices over a long period in a natural observation.

Thus, this precedent set by Karman is also further evidence that the quasi-stability principle, which is a little weaker than neutral stability, can explain why parcels of subatomic and biological systems are connected by size ratios such as 1:1, about 2:3 or about 1:3.5.

7.2 Oval and parabola

The analytical solution for the two-parcel system shows that increasing the initial disturbance leads to a transition from a trajectory of oval oscillation to parabolic explosion. [2, 3, 10] This transition implies that variation of the input energy produces two types of modes (oval or parabolic), which make possible both stable sustainment such as information storage in DNA and fast replication of DNA. This tendency of stability against a small disturbance and fast breakup due to a large disturbance is also confirmed by a numerical analysis, when the size ratios of parcels are 1:1 and about 2:3. [3] This corresponds to the fact that a large energy input in the mitotic phase leads to fast breakup of DNA with base pairs having a size ratio of 1:1: and about 2:3 and more cells, while the size ratios are relatively stable for small disturbances during the silent period without any large energy input.

7.3 Information, structures, and functions of various biological molecules and organs

There is also a 2:3 ratio in immune globulin (IgX). Two types of large immune globulines (IgM and IgE) and three small ones (IgG, IgD, and IgA) are naturally selected, while the weight ratio of the small and large heavy chains is also 2:3. IgXs [7, 31, 32]

The other large molecule, ribosome, includes ribosomal RNA (rRNA). The average frequency ratio of purines and pyrimidines in lots of types of rRNA sequences is actually about between 1.0 and 1.5.

Both hydrophilic and hydrophobic amino acids exist in proteins. If we employ the classification of R-side chain grouping, the frequency ratios of hydrophilic and hydrophobic amino acids in proteins are also asymmetric in many cases, between 1:1 and approximately 2:3. [7, 8, 10] This asymmetric symbiosis of hydrophilic and hydrophobic molecules also produces the complex convexoconcave shapes of proteins, as hydrophobic parts are often folded inside proteins. [7, 8, 10, 31, 32]

How are biological functions generated from the fundamental information represented by the asymmetric and symmetric ratios of 2:3 and 1:1 described in the previous sections?

Purine and pyrimidine pairs do not form in the presence of only one type of base. An extremely large frequency ratio of purines and pyrimidines, say, far larger than 1.5, cannot produce the stem in tRNA. The fact that tRNA has a weakly asymmetric density ratio of purines and pyrimidines between 1:1 and about 2:3 produces the clover structure with both of loops (leaves) and stems because the loci inside the leaves (loops) are free from hydrogen-bonded connections. [7, 8, 31, 32] This clover structure is constructed with three leaves similar to fingers, which can catch other molecules and also carry them to ribosome. "Catching" is an important function for living beings. As larger molecules like rRNA and some enzymes are also with repeats of the leaves such as those in tRNA, the fingers catch mRNAs.

The above-mentioned asymmetric ratio around 2:3 reveals the relation between the three-dimensional structure and one-dimensional information, i.e., the reason why RNA such as tRNA and rRNA have clover structures with fingers, while DNA has a simple spiral. An important point is that the combination of a string (stem) and a ring (loop) in RNA results in a function, although a string such as DNA with information alone cannot generate a function. Fusion of about 2:3 and 1:1 in non-living systems will induce living beings.

There is another important mechanism of the self-organizing process in living beings. It is well known that the electron cloud is not spherical around an atom heavier than helium (He). A non-spherical electron cloud induces string-like and ring-like molecules in amino acids and nitrogenous bases, without any spherical connections of carbons. Nitrogenous bases without a spherical electron cloud generate string-like DNA and RNA. This is an essential principle of chemistry.

Moreover, let us consider a rotating spheroid that is generated by deformation of a parcel such as a cell further. The spheroid is geometrically asymmetric due to its rotating axis. The discrepancy from a complete sphere, i.e., its scabrous shape, induces a string-like connection of deformed parcels, although parcels with less deformation such as relatively small atoms and biological cells at the early stage of morphogenetic process are connected as a spherical aggregation or a spherical surface aggregation in two- or three-dimensional space. Thus, repeats of strings and spheres can also be observed in larger scales. [7, 8, 24, 34] Although oospheres still maintain a three-dimensional spherical shape overall during several divisions after being fertilized by antherozoids, the sphere gradually comes closer to being a

one-dimensional string due to asymmetric divisions. The string will be close to the next larger sphere like yarn waste because of its flexibility. [8, 32]

In our previous reports, we also simulated the morphogenetic process of the complex cerebral shape in the brain, including its main blood vessels, as well as that of asymmetric inner organs such as the liver and symmetric outer organs like the arms and legs. [7, 8, 33, 34] These results are also related to the principle of inner asymmetry and outer symmetry discussed above.

8. Conclusion

A quasi-stability analysis applied for the momentum conservation law shows that, when a subatomic particle, a pair of two nitrogenous bases, a cell just before division, or an atom at breakup has the shape of a gourd with two kinks such as what occur at the later stage of breakup or at the first stage of coalescence of two parcels, the probabilities are relatively high for size ratios of the super-magic numbers including 1:1, about 2:3, and also 1:3.5. In the near future, Eq. 3 and Table 2 may also reveal the inevitability of other particles and energy related to Higgs mechanism.

The multiplicative inverse of the asymmetric number of types (of two purines and three pyrimidines) is size asymmetry. This can be easily understood from the mass conservation law, that is, from the fact that the main rings of large purines have “nine” molecules of carbon and nitrogen, while “six” molecules of carbon and nitrogen form the main rings of small pyrimidines. Accordingly, the number of base types is proportional to the frequency of bases inside RNA [7, 8]. In qualitative terms, the sizes and molecular weights of the twenty types of amino acids are also inversely proportional to the frequencies.

Natural systems should be explained in terms of four conservation concepts regarding mass, momentum, moment, and energy, as is seen in thermo-fluid dynamics.

It should be stressed that there are three types of indeterminacy, respectively related to statistical mechanics, quantum mechanics (of Kennard), and measurement (of Heiserberg). Indeterminacy related to measurement should also be considered in order to evaluate physical quantities quantitatively.

Appendix: Volume with tentative component and weight due to permanent part

In biological molecular systems, the above magic numbers of ϵ such as 1.0, about 1.44, and about 3.5 explain those for biological molecules of one-dimensional strings and rings such as nitrogenous bases, amino acids, and proteins, whereas the values of ϵ^3 correspond to biological molecules hydrated by water molecules.

The weight and size (representative length) ratios of purines and pyrimidines are about 1.5. The asymmetric pair of flexible spheroid parcels of “purines surrounded by water molecules” and “pyrimidines surrounded by water molecules” will also have the size (length) ratio of about 1.5. The weight and size (length) ratios of nitrogenous bases are proportional to the parcel size ratio (parcel length ratio). However, the weight and volume ratios of the two spheroid parcels are 3.0. The difference between

the weight ratios of parcels and pure nitrogenous bases, i.e., about 1.5 for the weight ratio of pure bases and 3.0 for the weight ratio of parcels, is possible because the molecular weight ratio of the parcels containing water is larger than that of the purine-pyrimidine bases and also because the electric density distribution of pi electrons is three-dimensional, while the nitrogenous bases have a one-dimensional string (ring).

Another possibility of water molecules attached on nitrogenous bases is related to the fluid dynamic effect in which impulsive deformation motion is accompanied with tentative added mass [21]. This added mass produces a weight ratio of 3.0 for the parcels, although the weight ratio of permanent child nitrogenous bases is about 1.5.

Let us think about the difference between the weight ratio of two permanent child atoms separated from uranium 235 and the weight ratio of the parcels including the child atoms and tentative mass. It is possible that the weight ratio of parcels in subatomic systems will also be larger than that of protons and neutrons in atom or child atoms split from uranium 235 because of the tentative added mass including gluons, quark condensation, Higgs process, and the relativity theory effect. In subatomic processes, the aggregation of baryons as a permanent part is one-dimensional, while the total mass, including baryons, gluons, and the quark condensation effect as tentative parts, is three-dimensional. This tentative added mass proportional to the parcel weight only appears when deformation and breakup occur. This tentative mass can also be understood analogically from the fluid dynamic effect in which impulsive deformation motion is accompanied with added mass [21].

The weight ratios of liquid droplets, biological cells, and stars will be equal to those of parcels.

Thus, parcels can essentially include two types of components, which are permanent and tentative ones. The permanent part exists both before and after the breakup process, i.e., during the entire process including the breakup timing, while the tentative part appears and shows important features only at the time of breakup, which is related to the input energy for breakup. In several cases of natural phenomena, the permanent part is a one-dimensional string or ring, having a mass proportional to the parcel size ε . Parcels including both tentative and permanent parts have a mass proportional to ε^3 . Some natural phenomena have no tentative part, in which case only the permanent part is proportional to ε^3 .

The group theory shows that one- and three-dimensional spheres are in a group. This may support the idea that ε and ε^3 repeatedly appear in various natural particles (parcels), while two-dimensional spheres ε^2 are relatively rare in nature.

Acknowledgement

This article presents part of the outcome of research conducted under a Waseda University grant for special research projects (2010B-155). The author thanks Mr. Hiromi Inoue and Mr. Kenji Hashimoto of Waseda University for their help on this study. Thanks are also due the Yukawa Institute for Theoretical

Physics at Kyoto University because discussions during the YITP workshop YITP-W-11-25 on "Hierarchy in Physics through Information -- Its Control and Emergence --" were useful.

References

- [1] EL-WAKIL M M 1971 Nuclear Heat Transport, DoubunShoin.
- [2] Naitoh K 1999 Cyto-fluid dynamic theory. Oil & Gas Science and Technology 54 205.
- [3] Naitoh K 2001 Cyto-fluid dynamic theory. Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics 18-1 75.
- [4] Henley E M and Garcia A 2007 Subatomic physics. World Scientific.
- [5] Prigogine I and Kondepudi D 1999 Thermodynamique, Editions Odile Jacob. (also in Prigogine I, Etude Thermodynamique des phenomenes irreversible, Bull. Acad. Roy. Blg. Cl. Sci. Vol. 31, 600-606, 1945)
- [6] Aizawa H, Bianco IH, Hamaoka T, Miyashita T, Uemura O, Concha ML, Russell C, Wilson SW and Okamoto H, 2005 Laterotopic representation of left-right information onto the dorso-ventral axis of a zebrafish midbrain target nucleus. Current Biology Vol.15, 8, Pp 238-243.
- [7] Naitoh K 2008 Stochastic determinism Artificial Life and Robotics 13 10-17.
- [8] Naitoh K 2010 Onto-biology. Artificial Life and Robotics 15 117.
- [9] Naitoh K, Hashimoto K, and Inoue 2010 Topo-embryology: DNA evolution from ring to string brings the multi-cellular system. Proceedings of 6th WCB, Singapore, 1163-1168.
- [10] Naitoh K, 2012. Spatiotemporal structure: common to subatomic systems, biological processes, and economic cycles. J. of Physics, C. S. 344, 2012.
- [11] Nakamura T et al. 2009 Halo Structure of the Island of Inversion Nucleus ^{31}Ne . Phys. Rev. Lett. 103 262501.
- [12] Hirschfelder J.O., Curtiss C.F., and Bird R.B., Molecular Theory of Gases and Liquids, (John Willey & Sons, Inc. New York 1964).
- [13] Landau E. and Lifshitz, Quantum mechanics. 3rd edition (Butterworth-Heinemann Elsevier, Oxford 1981).
- [14] Naitoh K 1998 Macroscopic Kinetic Equation for a Genetic Algorithm. Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics 15-1 87.
- [15] Naitoh K 2011 Morphogenic economics. Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics. Vol. 28, No.1.
- [16] Naitoh K 2009 Onto-biology. Proceedings of the 2009 Conference on Chemical, Biological, and Environmental Engineering (CBEE), Singapore.

- [17] Naitoh K and Kuwahara K. 1992 Large eddy simulation and direct simulation of compressible turbulence and combusting flows in engines based on the BI-SCALES method, *Fluid Dynamics Research* 10, pp.299-325.
- [18] Naitoh K. and Shimiya H. 2011 Stochastic determinism capturing the transition point from laminar flow to turbulence. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, Vol.28, No.1, pp.3-14. (also in Naitoh K., Nakagawa Y., and Shimiya H. in *Computational Fluid Dynamics 2008*, Springer-Verlag, 2008 and *Proc. of 6th Int. Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP6)*, 2009).
- [19] Kennard, E. H. 1927, "ZurQuantenmechanikeinfacherBewegungstypen", *ZeitschriftfürPhysik* 44 (4–5): 326.
- [20] Robertson H P. 1929 'The uncertainty principle'. *Physical Review* 34, 573-574.
- [21] Lamb H 1945 *Hydrodynamics*, 6th ed. New York: Dover.
- [22] Tatsumi T 1982 *Fluid dynamics*, Baifukan, Tokyo.
- [23] Landau, E.D. and Lifshitz, E.M., *Fluid Mechanics*. 2nd Edition, (Butterworth-Heinemann Elsevier, Oxford 2004).
- [24] Naitoh K, 2012 *Proc. of 17th International Symposium on Artificial Life and Robotics*.
- [25] Naitoh K. 2011 Quasi-stability theory: explaining the inevitability of the Magic numbers at various stages from subatomic to biological, *Proc. of 15th Nordic and Baltic Conf. on Biomedical Engineering and Biophysics*, IFMBE proceedings 34, Denmark. pp.211-214. (Also in K. Naitoh. *Quasi-stability theory: explaining the inevitability of the Magic numbers at various stages*, *Proc. of ISB2011*, Brussels. 2011.)
- [26] Naitoh K. 2011 The inevitability of biological molecules connected by covalent and hydrogen bonds. *Proc. of European IFMBE Conference*, IFMBE Proceedings 37, Pp. 251-254.
- [27] Naitoh K. 2011 The universal bio-circuit: underlying normal and abnormal reaction networks including cancer, *Proc. of European IFMBE Conference*, IFMBE Proceedings 37, pp.247-250, Budapest.
- [28] Naitoh K. 2011 *Onto-oncology: a mathematical physics underlying the proliferation, differentiation, apoptosis, and homeostasis in normal and abnormal morphogenesis and neural system*. *Proc. of 15th Nordic and Baltic Conf. on Biomedical Engineering and Biophysics*, IFMBE proceedings 34, Denmark.Pp.29-32.
- [29] Naitoh K. 2011 *Onto-neurology*.*Proc. of JSST2011, Int. Conf. Modeling and Simulation Technology*, Tokyo, pp.322-327.
- [30] Naitoh K 2006 *Gene Engine and Machine Engine*, Springer-Japan, Tokyo.
- [31] Naitoh K. 2008 *Onto-biology: Inevitability of Five Bases and Twenty Amino-acids*. *Proc. of 13th Int. Conf. on BioMedial Engineering, (ICBME)*, Singapore.Springer-Verlag.

[32] Naitoh K. 2010 Onto-biology: A Design Diagram of Life, Rather Than Its Birthplace in the Cosmos. *J. of Cosmology*, Vol 5, 999-1007.

[33] Naitoh K. 2008 Engine for cerebral development. *Artificial Life Robotics*, Springer, 13 pp 18.

[34] Naitoh K and Kawanobe H, 2012 Engine for brain development, *Artificial Life Robotics*. 16, 482-485.

フィードバックによる冷却と情報熱力学¹

東京大学 理学系研究科 伊藤 創祐²

1 はじめに

コロイド粒子系におけるフィードバック制御による冷却技術は、重力波検出のためのノイズキャンセレーション [1] や、レーザー冷却に代わる量子効果実現のためのデバイス [2] などを目的として研究が進められている。このフィードバックによる冷却は Brown 粒子の速度と逆向きのフィードバック力を加え続けることで達成され、特に近年になって Brown 粒子の瞬間的な速度の測定が可能になったことより、レーザーピンセットを用いて、コロイド粒子の速度揺らぎをミリケルビン領域まで下げることが可能となった [2]。一方で、実験系では常にフィードバック装置の測定誤差などによってコロイド粒子の冷却限界が存在するが、この冷却限界に対する”一般的”な定量的議論は行われてこなかった。この問題に対し、Maxwell の悪魔の研究の文脈で得られた、フィードバック制御下における”情報”と熱力学第二法則同様の構造 [3] の議論から、我々は緩和時間当たりフィードバックのために測定した際に、得られる”情報”（系の状態と測定結果の間の相互情報量）によって、冷却限界が決定されるという式を導出した [4]。本原稿は論文 [4] の内容の一部および『物理と情報の階層構造 情報を接点とした諸階層の制御と創発』で発表した研究の進展の一部をまとめたものである。

2 設定

ここでは我々が議論した設定 [4] を説明しよう。 N 次元の Langevin 系でも拡張は可能であるが、ここでは簡単のため論文 [4] のように 1 次元 Langevin 系で議論を行おう。まず、次のような Langevin 方程式を考える。

$$m\ddot{x}(t) = -\gamma\dot{x}(t) + F(x(t), \lambda(t, y)) + \xi(t). \quad (1)$$

ここで m はコロイド粒子の質量、 γ は摩擦係数、 $\xi(t)$ は平均 0、分散 $2\gamma k_B T$ のホワイトガウスノイズ、 $F(x(t), \lambda(t, y))$ はフィードバック効果を含む外力で、フィードバック効果はコントロールパラメータ $\lambda(t, y)$ の測定結果 $y = \{y_i\} (i = 1, \dots, n)$ の依存性によって導入している。

¹本研究は東京大学理学系研究科の佐野雅己教授との共同研究である。

²E-mail: sosuke@daisy.phys.s.u-tokyo.ac.jp

フィードバックのための測定は次のようなものを考えている。 i 回目の測定を時刻 $t_i (0 \leq t_1 < t_2 < \dots < t_n \leq \tau = t_{n+1})$ に行うとし、そのときのコロイド粒子系の状態 $\Gamma(t_i) = \{x(t_i), \dot{x}(t_i)\}$ に対して、測定結果 y_i が条件付き確率 $p_i(y_i|\Gamma(t_i))$ によって与えられるとする。この条件付き確率 $p_i(y_i|\Gamma(t_i))$ は y_i と $\Gamma(t_i)$ を引数に持つ関数 $p_i(y_i|\Gamma(t_i)) = f_i(y_i, \Gamma(t_i))$ であり、他の時刻の測定結果や系の状態 $y_j, \Gamma(t_j) (j \neq i)$ によらないとする。

このような系で”情報”、つまり i 回目の測定結果と i 回目の測定時刻での系の状態の間の相互情報量 $\langle I_i \rangle$ という量は、時刻 t_i で系の状態 $\Gamma(t_i)$ をとる確率 $\rho_{t_i}(\Gamma(t_i))$ 、測定結果 y_i を得る確率 $p_i(y_i) = \int d\Gamma(t_i) \rho_{t_i}(\Gamma(t_i)) p_i(y_i|\Gamma(t_i))$ 、また同時分布関数 $p_i(y_i, \Gamma(t_i)) = p_i(y_i|\Gamma(t_i)) \rho_{t_i}(\Gamma(t_i))$ を用いて次のように定義される量である。

$$\langle I_i \rangle = \int d\Gamma(t_i) dy_i p_i(y_i, \Gamma(t_i)) [\ln \rho_{t_i}(\Gamma(t_i)) + \ln p_i(y_i) - \ln p_i(y_i, \Gamma(t_i))]. \quad (2)$$

この相互情報量 $\langle I_i \rangle$ という量は、系の状態 $\Gamma(t_i)$ と、測定結果 y_i が独立 ($p_i(y_i, \Gamma(t_i)) = p_i(y_i) \rho_{t_i}(\Gamma(t_i))$) であれば 0 になる非負の値であり、系の状態 $\Gamma(t_i)$ と、測定結果 y_i の相互依存性の尺度となる量である。

我々はこの相互情報量 $\langle I_i \rangle$ が与えられた Langevin 系の測度揺らぎ $\langle \dot{x}^2(t) \rangle$ に与える影響を調べ ($\langle \dots \rangle$ はアンサンブル平均)、得られた結果を用いて測定誤差が存在するときの冷却限界を議論した。

3 緩和と情報による冷却限界

ここでは得られた結果について説明する。具体的な導出は [4] を参考にさせていただきたい。まず、揺動応答関係の破れと相互情報量の関係として次の式が成り立つ。

$$\frac{1}{k_B T} \int_0^\tau dt \gamma [\langle \dot{x}^2(t) \rangle - 2k_B T R(t; t)] \geq \langle \ln \rho_0(\Gamma(0)) - \ln \rho_\tau(\Gamma(\tau)) \rangle - \sum_i \langle I_i \rangle. \quad (3)$$

ここで、 $R(t; t')$ は応答関数であり、 $R(t; t') = \delta \langle \dot{x}(t) \rangle / \delta F(x(t'), \lambda(t'), y)$ を意味する。式 (3) の左辺は同時刻での速度に関する揺動応答関係の破れを意味しており、この量の下限が実質的に相互情報量の和 $\sum_i \langle I_i \rangle$ で抑えられていることになる。

この式は、フィードバックによって粒子の速度揺らぎ $\langle \dot{x}^2(t) \rangle$ が、熱浴 (媒質) からくる揺動力の応答 $R(t; t)$ よりも低くできる限界が、フィードバックに用いたときの”情報”で決まっているということを意味している。この事実は次のような時間粗視化を導入することでより鮮明になるだろう。十分長い τ に対して、時間粗視化 $E_\tau[\cdot(t)]$ を $E_\tau[\cdot(t)] = (1/\tau) \int_0^\tau dt \cdot(t)$ のように定義する。時間粗視化で系が定常状態に落ち着いてるとみなせる場合、コロイド粒子の温度 T_{eff} は時間粗視化を用いて、 $T_{\text{eff}} = E_\tau[\langle m \dot{x}^2(t) \rangle / k_B]$ と定義できるだろう。またこの温度 T_{eff} で揺動散逸定理を満たす ($E_\tau[\langle \dot{x}^2(t) \rangle - 2k_B T_{\text{eff}} R(t; t)] = 0$) ように $R(t; t) = 1/(2m)$ を仮定すると、十分長い時間 τ で時間粗視化で定常状態を導入できること ($\langle \ln \rho_0(\Gamma(0)) - \ln \rho_\tau(\Gamma(\tau)) \rangle \simeq 0$) から、

$$\frac{T - T_{\text{eff}}}{T} \leq \frac{\sum_i \langle I_i \rangle}{\tau} t_r, \quad (4)$$

という不等式が成り立つ。ここで t_r は系の速度に関する緩和時間 $t_r = m/\gamma$ であり、不等式 (4) の右辺は緩和時間当たりの相互情報量という量になっている。不等式 (4) はフィードバック制御下での粒子の温度 T_{eff} の冷却限界を与える不等式であり、この式は緩和時間という粒子の速度の情報を忘れる時間スケールで、どれだけの”情報”をフィードバックに活用可能かという値だけで、粒子の温度の下限が決まるといういわば、緩和と情報による冷却限界、となっている。

4 具体的な系での応用

ここでは不等式 (4) の具体的な応用を考え、実際の実験系での冷却限界を与える式を考えよう。

測定間隔 $\Delta t_i = t_{i+1} - t_i$ やフィードバックのプロトコルが時間に依存しない場合を考える。ここで、時間に依存しない、とは測定間隔が一定 ($\Delta t_1 = \Delta t_2 = \dots = \Delta t_n \equiv \Delta t$) で、各相互情報量が一定の場合を考えよう。各相互情報量が一定 ($\langle I_1 \rangle = \langle I_2 \rangle = \dots = \langle I_n \rangle \equiv \langle I \rangle$) というのは例えば次のような場合が考えられる。測定誤差の関数 f_i が i によらず ($f_1 = f_2 = \dots = f_n \equiv f$)、コントロールパラメータ $\lambda(t, y)$ の y_i 依存性が、時刻 $t_i \leq t \leq t_{i+1}$ でのみ依存し、 i によらず一定な場合が考えられるだろう。このとき系は周期的な定常状態が実現される。よって周期的定常状態では測定時刻 t_i での分布は i によらず $\rho_{t_i} \equiv \rho$ となり、各相互情報量は一定になる。

十分長い時間 τ をとると、不等式 (4) はさらに

$$\frac{T - T_{\text{eff}}}{T} \leq \frac{t_r}{\Delta t} \langle I \rangle, \quad (5)$$

と変形でき、測定間隔と緩和時間の比が冷却限界を決定しているという描像が得られる。一般に $\langle I \rangle$ は ρ から計算されるので粒子の温度 T_{eff} の関数であり、この後の Gaussian の測定誤差の場合のように $\langle I \rangle (T_{\text{eff}})$ が T_{eff} の単調非減少関数であれば、 $\langle I \rangle$ 、 $t_r/\Delta t$ 、 T の非負性から次の自己無撞着方程式で粒子温度の下限 T_{eff}^* が決定される。

$$T_{\text{eff}}^* = T - T \frac{t_r}{\Delta t} \langle I \rangle (T_{\text{eff}}^*). \quad (6)$$

これにより、粒子の温度の下限は、熱浴の温度 T と緩和時間と測定時間の比 $t_r/\Delta t$ と相互情報量 $\langle I \rangle$ だけで決定されることになる。

具体的な場合として、粒子の速度に関する測定を行い、Gaussian の測定誤差がある場合を考えよう (論文 [4] の Case1 に相当)。条件付き確率 $p_i(y_i | \dot{x}(t_i)) = f(y_i, \dot{x}(t_i))$ は

$$f(y_i, \dot{x}(t_i)) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\sigma_{\text{err}}^2}} \exp\left[-\frac{(y_i - \dot{x}(t_i))^2}{2\sigma_{\text{err}}^2}\right] \quad (7)$$

のように与えられて、時刻 t_i での分布 $\rho(\dot{x}(t_i))$ が温度 $T'_{\text{eff}} (\simeq T_{\text{eff}})$ の Maxwell-Boltzmann 分布で与えられるとき、相互情報量 $\langle I \rangle$ は

$$\begin{aligned} \langle I \rangle (T_{\text{eff}}) &= \int dy d\dot{x} f(y, \dot{x}) \rho(\dot{x}) \ln \frac{f(y, \dot{x})}{\int d\dot{x} \rho(\dot{x}) f(y, \dot{x})} \\ &= \frac{1}{2} \ln \left[1 + \frac{k_B T_{\text{eff}}}{m\sigma_{\text{err}}^2} \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

と与えられる。この相互情報量が与える粒子の温度の下限 T_{eff}^* は自己無撞着方程式 (6) で与えられ、

$$\frac{\Delta t}{t_r} = \frac{1}{2} \frac{T}{T - T_{\text{eff}}^*} \ln \left[1 + \frac{k_B T_{\text{eff}}^*}{m \sigma_{\text{err}}^2} \right], \quad (9)$$

となる。この式 (9) は、測定誤差 σ_{err} の影響が粒子の温度の下限に与える影響を評価できる式となっている。またこの式 (9) から、 $\Delta t \rightarrow \infty$ の極限では $T_{\text{eff}}^* \rightarrow T$ となることと、 $\Delta t \rightarrow 0$ の極限でのみ $T_{\text{eff}}^* \rightarrow 0$ となることがいえる。前者の極限はフィードバックのない場合に相当し、通常の熱力学第二法則同様、系に外力を加えても粒子の温度は下がらないこと ($T_{\text{eff}} \geq T$) を主張している。また後者の極限は無限回測定によるフィードバックに対応しており、これは有限回操作では絶対零度に到達できないとする、熱力学第三法則と矛盾しない事実を主張している。

研究会では実際にフィードバックの仕方 $F(x(t), \lambda(t, y))$ を指定して、その数値計算結果と、式 (9) の比較を行い、式 (9) が冷却限界を与えていることを確認した。また実験のセットアップ [2] で物理量を用いて、式 (9) が与える下限との比較を行った。また、 N 次元 Langevin 系でも、同様の緩和と情報による冷却限界の式 (4) が導出できることを示した。これらの内容は現在論文準備中である。

謝辞

本研究に関して特に有益な議論をしていただきました、京都大学次世代研究者育成センター特定助教の沙川貴大氏、東京大学大学院総合文化研究科の佐々真一教授に感謝いたします。

参考文献

- [1] A. Vinante et al., Phys. Rev. Lett. **101**, 033601 (2008)
- [2] T. Li, S. Kheifets and M. G. Raizen, Nature Phys. **7**, 527 (2011).
- [3] T. Sagawa and M. Ueda, Phys. Rev. Lett. **104**, 090602 (2010).
- [4] S. Ito and M. Sano, Phys. Rev. E **84**, 021123 (2011).

孤立量子系でミクロカノニカル分布が適用出来るための 十分条件とその数値的検証

Sufficient conditions and their numerical verifications
for the applicability of the microcanonical ensemble in
isolated quantum systems

池田 達彦*, 渡辺 優, 上田 正仁
東京大学大学院 理学系研究科 物理学専攻

概要

孤立量子系における物理量の期待値の長時間平均とミクロカノニカル平均が等しくなるための2つの仮説, Eigenstate Thermalization Hypothesis (ETH) および Eigenstate Randomization Hypothesis (ERH), を1次元ボース気体についての Lieb-Liniger 模型を用いて検証する. その結果, 両者はともに成立するが, 熱平衡化への寄与としては ETH は ERH に比べて系の自由度について高々対数補正でしかないことを議論する.

1 序論

近年, レーザー技術の著しい進展により冷却原子気体を用いて孤立量子系が実験的に実現されるようになった [1]. 冷却された原子気体はレーザーにより捕獲され, 高真空中に留まっており, 系外の力学的自由度との相互作用が極めて小さい. この意味で系は孤立しており, 熱浴と呼ぶべき環境が存在しないにも拘わらず, 熱平衡化が観察される. さらに系の初期状態を恣意的に非平衡状態に用意し, コヒーレントな時間発展を測定することも可能になっており, 系が如何にして熱平衡化するかを直接調べることが出来る [2, 3]. このような著しい実験の進展と平行して理論的な研究も盛んに行われ, 量子状態の典型性 [4, 5, 6, 7] や緩和の位相ランダム化描像 [8, 9] など重要な結果が得られている. 興味深いことに, これらの研究

*e-mail: ikeda@cat.phys.s.u-tokyo.ac.jp

の中で約 80 年前に von Neumann によって成された非常に関連の深い研究が再発見された [10]. 量子統計力学の基礎付けと密接に関わる孤立量子系の熱平衡化の問題は 80 年の時を超え, 極めて高い実験技術を手にした人類の前で新しい展開を見せている.

2 熱平衡化

孤立量子系の熱平衡化という現象は物理量*の期待値が十分時間が経つと平衡統計力学の予言する値に収束するものと定義される. よって熱平衡化を理解するためにはまず, 時間変化する物理量の期待値がある値に収束するのは何故かという問題に答える必要があるが, これは位相のランダム化描像によって比較的良く理解されている [9]. 本節ではまずその先行研究を簡単に確認する. それを踏まえた上で孤立量子系の熱平衡化の問題を定式化し, それを解決するための 2 つの仮説, Eigenstate Thermalization Hypothesis (ETH) および Eigenstate Randomization Hypothesis (ERH) を導入する.

2.1 問題設定と仮定

系のハミルトニアンを H とし, それを対角化する基底 $\{|E_i\rangle\}_i$ は次を満たす:

$$H|E_i\rangle = E_i|E_i\rangle \quad (E_i < E_{i+1}). \quad (1)$$

ここで, エネルギースペクトルに縮退が無いことを仮定したが, さらに無共鳴条件と呼ばれるより強い仮定を課す:

$$E_{i_1} - E_{i_2} = E_{j_1} - E_{j_2} \neq 0 \Rightarrow i_1 = j_1 \text{ かつ } i_2 = j_2. \quad (2)$$

この条件は 2 つの異なるエネルギー固有値の差は全て異なることを主張している. なおこれは無縮退エネルギーギャップ条件としてエネルギースペクトルに縮退がある場合に拡張出来ることが知られている [11].

次に初期状態についての仮定を述べる. 記述の簡単化のため状態は純粋であるとするが, 以下の議論は直ちに混合状態の場合に拡張出来る. 初期状態 $|\psi(0)\rangle$ は

* 「マクロな」物理量を想定するが, その定義はまだ共通理解が得られていない

上述のエネルギー固有基底を用いて展開出来る:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_i c_i |E_i\rangle. \quad (3)$$

ここで2つの整数 m_1 および m_2 が存在して次を満たすとする: $c_{m_i} \neq 0$ ($i = 1, 2$) および

$$c_i \neq 0 \quad \text{only if} \quad m_1 \leq i \leq m_2. \quad (4)$$

ここで E_{m_1} と E_{m_2} はマクロに見て区別出来ないと仮定する. ここまでの仮定は, マクロに異なるエネルギーの重ね合わせを排除しており, 言い換えると我々が考える状態はマクロに見てエネルギーが確定しているということを要請する. さらに次を仮定する:

$$Q \equiv \sum_{i=m_1}^{m_2} |c_i|^4 \ll 1. \quad (5)$$

ここで Q の逆数は inverse participation ratio (IPR) と呼ばれ, 初期状態が実効的にいくつのエネルギー固有状態の重ね合わせであるかを表す指標となる. 以下で見るように初期状態が多数のエネルギー固有状態の重ね合わせとなることを要請し, これらの相対位相が時間とともにランダム化することが本質的な役割を果たし, 物理量の期待値が実効的に時間依存しなくなる.

2.2 長時間平均と長時間分散

注目する物理量を A とし, その時間発展を考察する. 時刻 t における A の期待値は

$$\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \sum_{i,j} c_i^* c_j e^{i(E_i - E_j)t} \langle E_i | A | E_j \rangle \quad (6)$$

で与えられる. ただし $\hbar = 1$ とした. 従ってこの期待値の長時間平均 $\langle A \rangle^{\text{LT}}$ は次のようになる:

$$\langle A \rangle^{\text{LT}} \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T \frac{dt}{T} \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \sum_i |c_i|^2 \langle E_i | A | E_i \rangle. \quad (7)$$

さらに, 時間依存する期待値の長時間に渡る分散に対して次のような上限を設けることが出来る [9]:

$$V_A^{\text{LT}} \equiv \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T \frac{dt}{T} (\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle - \langle A \rangle^{\text{LT}})^2 \leq Q \Delta(A)^2. \quad (8)$$

ここで $\Delta(A)$ は A の最大固有値と最小固有値の差を表す. 典型的に, 系の自由度に対して Q が指数関数的に小さくなるのに対し, $\Delta(A)$ は冪的にしか大きくなるため, V_A^{LT} は多自由度系において極めて小さくなる. これは

$$\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \sim \langle A \rangle^{\text{LT}} \quad \text{for almost every } t \quad (9)$$

を意味する. つまり, たとえ初期条件を非平衡にしたとしても, 時間が経てば実効的に時間依存しない振る舞いが現れる. ただしこの議論は時間依存しない振る舞いが存在し得ることを主張するだけであって, 必要な時間スケールを正しく与えないという不十分な点がある. 極限操作 $T \rightarrow \infty$ が要求するのは, T が最小のエネルギー差 $\epsilon_i - \epsilon_j$ の逆数よりも十分大きいということであるが, これは系の自由度に関して指数関数的に大きくなり現実の系の熱平衡化の時間スケールに比べて大きすぎる.

2.3 熱平衡化の問題

物理量の期待値は時間が経てば長時間平均 (7) に実効的に収束することを見た. よって熱平衡化の問題は, なぜ長時間平均 (7) とミクロカノニカル平均が等しくなるのかという問題に還元することが出来る. ミクロカノニカル平均は次で定義される:

$$\langle A \rangle^{\text{ME}} \equiv N_{\text{state}}^{-1} \sum_{|E_i - E| \leq \delta} \langle E_i | A | E_i \rangle, \quad (10)$$

ここで $E \equiv \langle \psi(0) | H | \psi(0) \rangle$ は系の全エネルギー, δ はマクロに見て小さなエネルギー幅, N_{state} はエネルギー区間 $[E - \delta, E + \delta]$ の中に存在するエネルギー固有状態の数を表す (以下ではエネルギー区間 $[E - \delta, E + \delta]$ の中に存在するエネルギー固有値は $E_{m_1}, E_{m_1+1}, \dots, E_{m_2}$ であるとする). このように, ミクロカノニカル平均は E と δ にしか依存しないが, 長時間平均 (7) は初期状態の詳細, すなわち $\{|c_i|^2\}_i$ に依存するため, 熱平衡化の問題は非自明である. また, この問題は量子系でのエルゴード性の表現と見なすことが出来る. 以下で, 熱平衡化の問題を解決する2つのシナリオを見る.

Eigenstate Thermalization Hypothesis (ETH)

熱平衡化の問題を解決する1つの十分条件として Eigenstate Thermalization Hypothesis (ETH) という仮説が提示されている。その主張は、熱力学極限において $\langle E_i|A|E_i \rangle$ は i に依らず一定値をとるというものである。有限系では厳密に定数とはならず有限のゆらぎが存在する。仮にこの仮説が成り立てば直ちに熱平衡化の問題が解決するという点で、ETH は熱平衡化のための十分条件である。ETH はランダム行列 [12] や半古典的解析 [13] を用いて示唆されたが、近年完全に量子力学的な数値検証が進められている [14]。数値検証はハミルトニアンの厳密対角化を用いて行われるが、数値計算コストが系の自由度に関して指数関数的に増大するため、 $\langle E_i|A|E_i \rangle$ のゆらぎが系のサイズにどのように依存するかは十分に調べられていない。本論文の後半で、主要な結果の1つとして ETH の有限サイズスケールリングの研究結果を報告する。

Eigenstate Randomization Hypothesis (ERH)

我々は以前の研究で、 $\langle E_i|A|E_i \rangle$ のゆらぎの内部構造にランダムな振る舞いを発見し、これを Eigenstate Randomization Hypothesis (ERH) と名付けた [15]。ここで言うランダムとは以下のように定義される。数列 $\{\langle E_i|A|E_i \rangle\}_{i=m_1}^{m_2}$ の要素を前から順に m 個ずつ組にし、それぞれを平均値で置き換えることにより新しい数列を得る。この手続きを数列の粗視化と呼ぶ。こうして得られた粗視化された数列の標準偏差 $\sigma(m)$ が m の増加に伴い、冪的に減衰する、すなわちある定数 γ が存在して $\sigma(m) = \sigma(1)m^{-\gamma}$ が成り立つとき、数列 $\{\langle E_i|A|E_i \rangle\}_{i=m_1}^{m_2}$ はランダムであると言う。たとえば、独立な確率変数で生成した十分に長い数列はランダムで $\gamma = 1/2$ である。ERH が成り立つとき、初期状態の各エネルギー固有状態への重み $\{|c_i|^2\}_i$ が滑らかに変化することを仮定すれば、熱平衡化の問題が解決出来る。より正確には、

$$| |c_{i+1}|^2 - |c_i|^2 | \leq D/N_{\text{state}}^2 \quad \text{for all } i \quad (11)$$

を満たす(最小の) D を定義し、 $D = O(N_{\text{state}}^0)$ という条件を課す(実際にはもう少し条件を弱められる [15])。すると以下の不等式が成り立つ:

$$| \langle A \rangle^{\text{LT}} - \langle A \rangle^{\text{ME}} | \leq \sigma_A D' N_{\text{state}}^{-\frac{\gamma}{\gamma+1}}, \quad (12)$$

ここで $D' = \gamma^{1/(\gamma+1)}(1 + \gamma^{-1})D$ であり, $\sigma_A \equiv \sigma(1)$ は $\langle E_i|A|E_i \rangle$ のゆらぎの大きさを表す. σ_A が熱力学極限でゼロになるというのが ETH の主張であったが, これに加えて $N_{\text{state}}^{-\frac{\gamma}{\gamma+1}}$ という余剰の収束因子が現れる. このため, ERH が成立すれば (上述の初期状態に関する仮定の下で) 仮に ETH が成立しなくても熱平衡化の問題が解決出来る. さらに ETH が成立したとしても σ_A がゼロに収束する速さと $N_{\text{state}}^{-\frac{\gamma}{\gamma+1}}$ がゼロに収束する速さの相対的な大きさにより, ETH と ERH のどちらが熱平衡化に対して主要な寄与をするかが議論出来る. 実際 ETH は ERH に対して高々対数補正でしかないことを後ほど議論する.

3 ETH と ERH の検証

我々は Lieb-Liniger 模型と呼ばれる, 接触相互作用する 1 次元ボース気体の模型を用いて, ETH と ERH の検証を行った [16]. この模型ではベータ仮設法を用いることでエネルギー固有状態が厳密に求まるため, ハミルトニアンの厳密対角化に掛かる膨大な数値コストを回避し, ETH の有限サイズスケーリングの検証が可能であるという利点がある.

3.1 Lieb-Liniger 模型

Lieb-Liniger 模型 [17, 18] は 1 次元空間上のボソン場 $\Psi(x)$ の理論で, そのハミルトニアンは次のように与えられる (ただし $\hbar = 2m = 1$):

$$H = \int_0^L dx [\partial_x \Psi(x) \partial_x \Psi(x) + c \Psi^\dagger(x) \Psi^\dagger(x) \Psi(x) \Psi(x)]. \quad (13)$$

ここで L は 1 次元空間の大きさを表し, $x = 0, L$ は周期境界条件により同一視される. 第一項が運動エネルギー, 第二項がデルタ関数型接触相互作用を表し, c が相互作用の大きさを特徴付けるパラメタである. N 粒子のエネルギー固有関数はベータ方程式

$$e^{i\lambda_j L} = - \prod_{k=1}^N \frac{\lambda_j - \lambda_k + ic}{\lambda_j - \lambda_k - ic} \quad (j = 1, 2, \dots, N) \quad (14)$$

を満たすパラメタの組 $\{\lambda_j\}_{j=1}^N$ に対して

$$\chi_N(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N | x_1, x_2, \dots, x_N) = \left[\prod_{1 \leq k < j \leq N} (\partial_j - \partial_k + c) \right] \det_{j^k} e^{i\lambda_j x_k} \quad (15)$$

と与えられる. しかしながら, これを用いて各固有状態における物理量の期待値を計算するためには全空間に渡る N 重積分を実行する必要がある, これは膨大な数値コストのために実現不可能である. より洗練された代数的ベータ仮設と呼ばれる手法を用いることでこの計算が可能となる. モノドロミー行列 [19] と呼ばれる行列を以下で定義する:

$$T(\lambda) \equiv \begin{pmatrix} A(\lambda) & B(\lambda) \\ C(\lambda) & D(\lambda) \end{pmatrix} \quad (16)$$

$$= : \mathcal{P} \exp \left[-i \int_0^L dx \begin{pmatrix} \lambda/2 & \sqrt{c}\Psi^\dagger(x) \\ -\sqrt{c}\Psi(x) & -\lambda/2 \end{pmatrix} \right] : \quad (17)$$

ただし, $:\dots:$ は場の生成消滅演算子の正規順序を表し, \mathcal{P} は積分の経路順序を表す. パラメタの組 $\{\lambda_j\}_{j=1}^N$ がベータ方程式 (14) を満たすとき,

$$|\{\lambda_j\}\rangle = \prod_{j=1}^N B(\lambda_j) |0\rangle \quad (18)$$

がエネルギー固有状態となる, ただし $|0\rangle$ は Fock 真空である.

3.2 相関関数の公式

2つのベータ状態の内積 $\langle\{\mu_j\}|\{\lambda_j\}\rangle$ の閉じた公式を与える Slavnov 公式 [20] を用いると, 相関関数に対する以下の公式が示せる [21]:

$$\begin{aligned} & \langle\{\mu_j\}|\Psi^\dagger(x)\Psi(0)|\{\mu_j\}\rangle \\ &= c^{-2N+2} \frac{\prod_{m,j=1}^N h(\mu_m, \mu_j)}{\det_N \frac{\partial \varphi_j(\mu)}{\partial \mu_k}} \\ & \times \sum_{\{\lambda_j\}_{N-1}} \frac{e^{-ix[\sum_{j=1}^N \mu_j - \sum_{k=1}^{N-1} \lambda_k]} |\mathcal{M}(\{\lambda\}, \{\mu\})|^2}{\det_{N-1} \frac{\partial \varphi_j(\lambda)}{\partial \lambda_k} \prod_{m,j=1}^{N-1} h(\lambda_m, \lambda_j)} \end{aligned} \quad (19)$$

ただし

$$h(\lambda, \mu) = \frac{\lambda - \mu + ic}{ic},$$

$$\frac{\partial \varphi_j(\mu)}{\partial \mu_k} = \delta_{jk} \left[L + \sum_{l=1}^N K(\mu_j, \mu_l) \right] - K(\mu_j, \mu_k) \quad (20)$$

$$K(\lambda, \mu) = \frac{2c}{c^2 + (\lambda - \mu)^2} \quad (21)$$

$$\mathcal{M}(\{\lambda_j\}_{N-1} | \{\mu_j\}_N) = \sum_{l=1}^N (-1)^{l+1} \det_{N-1} S^{(l)} \quad (22)$$

$$S_{jk} = t(\lambda_k, \mu_j) \frac{\prod_{m=1}^{N-1} h(\lambda_m, \mu_j)}{\prod_{p=1}^N h(\mu_p, \mu_j)} - t(\mu_j, \lambda_k) \frac{\prod_{m=1}^{N-1} h(\mu_j, \lambda_m)}{\prod_{p=1}^N h(\mu_j, \mu_p)} \quad (23)$$

$$t(\lambda, \mu) = \frac{(ic)^2}{(\lambda - \mu)(\lambda - \mu + ic)} \quad (24)$$

であり, $\sum_{\{\lambda_j\}_{N-1}}$ は全ての $(N-1)$ 粒子ベータ状態についての和を表す.

3.3 相関関数の計算結果

パラメタを $c = 10, N/L = 1, x = 1/2$ とし, $N = 5, 10, 15$ に対して相関関数の実部と虚部を計算した結果を Fig. 1 に示す. 各粒子数に対し, エネルギー区間 $[E_g, E_g + 10]$ の中にある全ての固有状態に対して相関関数の実部と虚部をプロットしたが, データ点のばらつきは粒子数が大きくなるにつれて小さくなっており, ETH が成立するよう見える. ここでのデータ点のばらつきは各データの線形な系統変化を差し引いたものの平均自乗和 (RMS) で定義出来る. なお, この系統変化は最小自乗フィットで求めた. $N = 5, 6, \dots, 15$ に対して平均自乗和を粒子数 N の関数としてプロットしたものが Fig. 2 であり, 粒子数に対して冪的に減衰することが分かる. これは ETH が Lieb-Liniger 模型の相関関数に対して成立することを示す. また ERH の解析はより多くのデータ点を利用するために $N = 15$ を用いて行った. Figure 3 ではデータ列の粗視化に伴い分散が冪減衰する ERH の振る舞いが見られる.

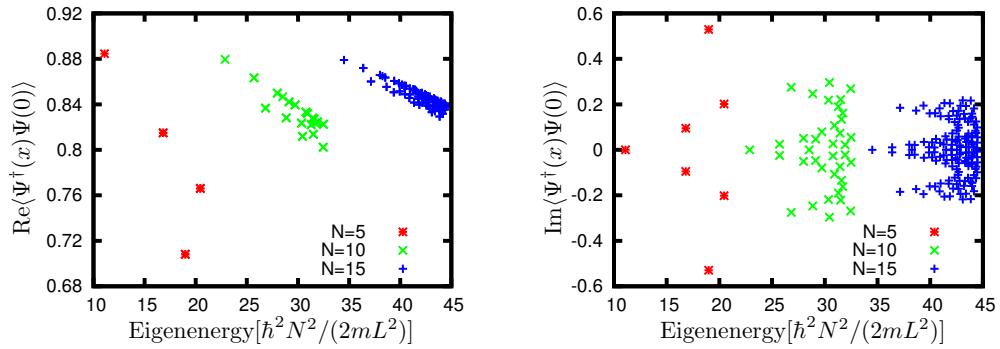


Figure 1: 固有状態における相関関数 ($c = 10, N/L = 1, x = 1/2$) の実部 (左図) および虚部 (右図). 横軸はエネルギー固有値を表す. 各粒子数に対し, エネルギー区間 $[E_g, E_g + 10]$ (E_g は基底状態エネルギー) 中にある全ての固有状態が示されている. ただし E_g は基底状態のエネルギーである. データ点のばらつきは粒子数が大きくなるにつれて小さくなっており, ETH が成立するように見える. またデータ点はランダムに振動しており, ERH も成立するように見える.

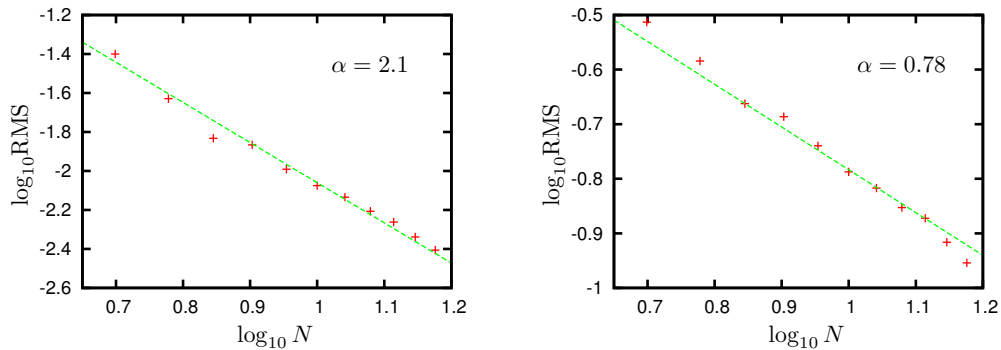


Figure 2: 固有状態における相関関数のゆらぎの粒子数依存性. Fig. 1 の各データ列を直線で最小自乗フィットし, それを差し引いたデータ列の平均自乗和 (RMS) をゆらぎと見なしている. 粒子数が大きくなるにつれてゆらぎはその冪で減衰することが分かる ($\sigma_A \propto N^{-\alpha}$). 冪指数は実部と虚部それぞれに対して $\alpha = 2.1, 0.78$.

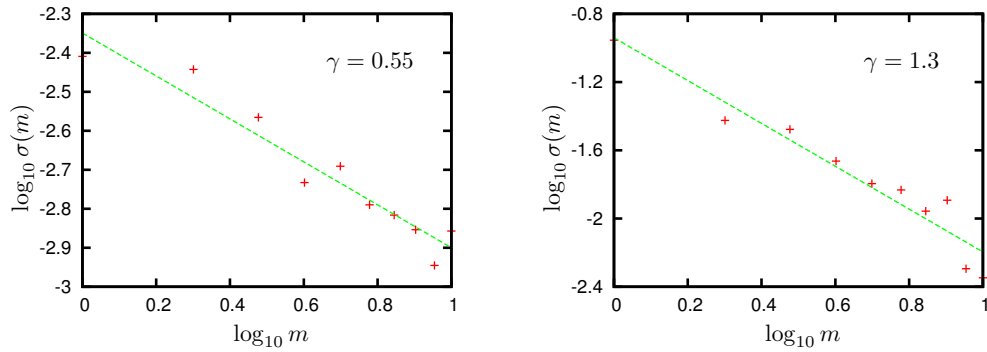


Figure 3: 粗視化されたデータ列の分散 ($N = 15$). 実部虚部ともに粗視化の度合い m に関して冪的に減衰しており, ERH が成立している ($\sigma(m) = \sigma(1)m^{-\gamma}$). 冪指数はそれぞれ $\gamma = 0.55, 1.3$.

4 まとめと議論

熱平衡化の問題を解決する2つのシナリオ ETH と ERH は Lieb-Liniger 模型の相関関数においてともに成立することが分かった. さらに ETH に関しては有限サイズスケリングの観点からの解析を行った結果, 固有状態における相関関数のゆらぎが系の自由度に関して冪減衰することが判明した. この結果を用いれば ETH と ERH の熱平衡化への寄与の相対的な大きさを議論出来る. 長時間平均とミクロカノニカル平均の差の上限を与える不等式 (12) の有限スケリングは, $N_{\text{state}} \propto e^N$ という関係式より,

$$\sigma_A D' N_{\text{state}}^{-\frac{\gamma}{\gamma+1}} \propto \exp \left[-\frac{\gamma}{\gamma+1} N - \alpha \ln N \right]. \quad (25)$$

指数関数の中の第一項が ERH 起源, 第二項が ETH 起源の収束因子である. ゆえに, ETH の寄与は ERH に比べて高々対数補正でしかないことが分かる.

ERH が収束因子として役割を果たすためには初期状態の各固有状態への重み $\{|c_i|^2\}_i$ が滑らかであるという仮定が満足されなければならない. この仮定は幾分弱められるが, 物理的にこの条件を正当化するのは今後の課題である. また, 今回の解析は特定の模型の特定の物理量に対するものであったため, どのような系のどの物理量に対して議論が成立するのか, その適用範囲を明らかにしなければならない.

参考文献

- [1] C. J. Pethick and H. Smith, “*BOSE-EINSTEIN CONDENSATION IN DILUTE GASES*”, Cambridge (2001).
- [2] T. Kinoshita *et al.*, Nature (London) **440**, 900 (2006).
- [3] S. Trotzky *et al.*, Nature Physics **8**, 325 (2012).
- [4] A. Sugita, RIMS Kokyuroku (in Japanese) **1507**, 147 (2006).
- [5] P. Reimann, Phys. Rev. Lett. **99**, 160404 (2007).
- [6] S. Goldstein, J. L. Lebowitz, R. Tumulka, and N. Zanghi, Phys. Rev. Lett. **96**, 050403 (2006).
- [7] S. Popescu, A. J. Short, and A. Winter, Nature Physics **2**, 754 (2006).
- [8] H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **80**, 1373 (1998).
- [9] P. Reimann, Phys. Rev. Lett. **101**, 190403 (2008).
- [10] J. von Neumann, Zeitschrift für Physik **57**, 30-70 (1929). (English translation by R. Tumulka, Eur. Phys. J. H **35**, 201-237 (2010)).
- [11] A. J. Short, New J. Phys. **13**, 053009 (2011).
- [12] J. M. Deutsch, Phys. Rev. A **43**, 2046 (1991).
- [13] M. Srednicki, Phys. Rev. E **50**, 888 (1994).
- [14] M. Rigol, V. Dunjko, and M. Olshanii, Nature (London) **452**, 854 (2008).
- [15] T. N. Ikeda, Y. Watanabe, and M. Ueda, Phys. Rev. E **84**, 021130 (2011).
- [16] T. N. Ikeda, Y. Watanabe, and M. Ueda, arXiv: 1202.1965.
- [17] E. H. Lieb and W. Liniger, Phys. Rev. **130**, 1605-1616 (1963).
- [18] E. H. Lieb, Phys. Rev. **130**, 1616-1624 (1963).

- [19] V. E. Korepin, N. M. Bogoliubov, and A. G. Izergin, *Quantum inverse scattering method and correlation functions*, Cambridge (1997).
- [20] N. A. Slavnov, *Theor. Math. Phys.* **79**, 502-508 (1989).
- [21] T. Kojima, V. E. Korepin, and N. A. Slavnov, *Commun. Math. Phys.* **188**, 657-689 (1997).