

von Neumann による量子力学の公理系について

中部大学 工学部/AI 数理データサイエンスセンター

岡村 和弥

E-mail: k.okamura.renormalizable@gmail.com

量子力学の数学的公理化は von Neumann [1] によりはじまった。(量子力学に限らず) 量子論全般の理解に大きく貢献してきた「von Neumann の公理系」についてあれこれ短く論ずるのが本稿である。

「von Neumann の公理系」(および伝統的な教科書で) は象徴的な次の公理から出発する。

公理 1 (Hilbert 空間) 物理系 S に対し, ひとつの Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ が対応する。

実は, 伝統的な議論に従う教科書とは次の公理 2 との線引きを変えていて, 物理系の記述のために Hilbert 空間をもちだすことを独立して提示した(括弧「」をつけている理由でもある)。そして, この時点では物理的な記述との対応関係はなんら与えられていないことに注意する必要がある。この公理は圏論的な観点と相性が良い。「von Neumann の公理系」の是非に関してはおそらく次が最も重要な観点であると思われる。

疑問 1 単にひとつの Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ を用いる (あるいは指定する) だけでよいのであろうか?

この疑問には本稿の最後の方で答えることにする。Galilei 以来, 物理系の記述にとって大切な概念が物理量 (physical quantity) あるいは観測可能量 (observable) であり, 加えて, 量子力学の誕生によりその重要性が (徐々に) 認知されたのが状態 (state) である。

公理 2 (物理量と状態) S の物理量は $\mathcal{H}$ 上の自己共役作用素 (およびこれと一対一対応する $(\mathcal{H}, \mathbb{R})$ に対するスペクトル測度) によって記述される。一方, S の状態は $\mathcal{H}$ 上の密度作用素 (非負のトレースクラス作用素であってトレースが 1 の作用素) によって記述される。

このように物理量と状態を Hilbert 空間上の作用素を用いて定義したのであるが, こうして定められた状態にはっきりとした役割を与えるのが Born の統計公式である。

公理 3 (Born の統計公式) S の状態が ρ であるとき, S の互いに可換な物理量 $A_1, \dots, A_n$ がしたがう確率分布は

$$\Pr[A_1 \in \Delta_1, \dots, A_n \in \Delta_n | \rho] = \text{Tr}[E^{A_1}(\Delta_1) \cdots E^{A_n}(\Delta_n) \rho], \quad \Delta_1, \dots, \Delta_n \in \mathcal{B}(\mathbb{R})$$

で与えられる。ここで, 各 $j = 1, \dots, n$ に対し, E^{A_j} は A_j のスペクトル測度, $\mathcal{B}(\mathbb{R})$ は $\mathbb{R}$ の Borel 集合族である。

すなわち, 「von Neumann の公理系」では測度論的確率論の枠組みを通じて状態を意味づけるのである。この公理から物理量の期待値や分散など様々な統計量が定義される。それでも, 次の疑問を忘れないようにしなければならない。

疑問 2 これまでの公理系では非可換な量の間の相関関数のようなものが排除されてしまうが, はたしてそれで良いのであろうか?

量子統計力学および量子場理論での相関関数の重要性からは明らかであるが、この疑問に対する解答はまだ研究の余地があるため、本稿ではこれ以上この疑問に関する議論を行わない。次に、時間発展の記述についての公理を述べよう：

公理 4 (時間発展) $\mathbf{S}$ の時間発展は $\mathcal{H}$ 上のユニタリ作用素により記述される。ある時点から別の時点への $\mathbf{S}$ の時間発展が U で記述されるとき、物理量の時間発展 (Heisenberg 描像) は $A \mapsto U^*AU$ 、状態の時間発展 (Schroedinger 描像) は $\rho \mapsto U\rho U^*$ で与えられる。特に、連続的な時間パラメータに対し一様な時間発展は強連続 1 パラメータユニタリ群 $\{U_t\}_{t \in \mathbb{R}}$ で記述される (U_t の無限小生成子をハミルトニアンとよぶ)。

von Neumann は系の時間発展の記述のためこの公理を採用した。ただし、測定による状態変化はこの公理での時間発展と並列した項目として扱っており、この公理の枠外にあるものと捉えるのが妥当である。位置測定という特殊な場合に対し、測定過程を考えることで、この公理との整合性を議論している。

「von Neumann の公理系」の最後のひとつとして合成系に関する公理を提示する。

公理 5 (合成系) それぞれ Hilbert 空間 $\mathcal{H}$ と $\mathcal{K}$ で記述される系 $\mathbf{S}$ と $\mathbf{S}'$ に対し、それらの合成系 $\mathbf{S} + \mathbf{S}'$ にテンソル積 Hilbert 空間 $\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$ が対応する。 $\mathbf{S}$ の物理量 A は $\mathbf{S} + \mathbf{S}'$ の物理量 $A \otimes 1$ と同一視され、 $\mathbf{S}'$ の物理量 B は $\mathbf{S} + \mathbf{S}'$ の物理量 $1 \otimes B$ と同一視される。

元の系は合成系の一部として (物理量の集まりを通じて) 自然に同一視される。圏論的な文脈では、この公理はモノイダル圏の枠組みと整合的である。有限個の系の合成をする限りは、テンソル積の結合律 $\mathcal{H} \otimes (\mathcal{K} \otimes \mathcal{L}) \cong (\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}) \otimes \mathcal{L}$ から結合順序によらないことがわかり、何ら問題を生じない。

疑問 3 無限個の系の合成系、すなわち、無限個の Hilbert 空間のテンソル積は可能であろうか？

数学的には可能であることが知られている [2]。しかしながら、同時に物理的には非常に微妙な問題が生じる [3, 第 VI 部第 18 章]。このことは疑問 1 と関連していて、物理系に対応させる対象として Hilbert 空間が適切であるかという問題に突き当たる。

さて、上の 5 つの公理は、すでに提示している疑問はあっても、現在でも通用すると考えられているものである。[1] において測定について議論されているが、先述の通り上の公理系には測定については含まれていない。では [1] の議論をそのまま踏襲して測定に関する公理を加えれば良いかという、それは否である [4]。通常假定されている「von Neumann の公理系」では議論が決して閉じないのである。本稿の締めくくりとして、これまでの疑問と絡めて公理のあり方と様々なアプローチについて紹介しよう：

- (1) まず、疑問 1 に関わることで、Hilbert 空間の選び方には非常に大きな任意性がある。量子力学の伝統的な議論にしたがう教科書では、わかりやすさのためか殊更状態ベクトル ($\mathcal{H}$ の単位ベクトル) を強調し、Hilbert 空間上の自己共役作用素すべてを物理量として扱う。しかし、物理量の集まりが一旦規定されてしまえば、はじめの Hilbert 空間に固執する必要はなく、(別の Hilbert 空間をテンソル積などして) より次元が高い (大きい) Hilbert 空間を用いることで同様の記述が可能である。例えば、元の Hilbert 空間上の密度作用素は大きい Hilbert 空間において状態ベクトルとして表現でき、大きい Hilbert 空間上の自己共役作用

素の部分集合で元の Hilbert 空間の自己共役作用素の集合と対応するものが指定できる。本稿の公理系の提示に従い、本項目の事実に向き合えば、あたかも「状態ベクトル以外は状態でない」かのような不可解な理解に陥ることもない。

- (2) 代数的アプローチによれば、(1) の議論は至極当然であり、ある側面については些末だと了解される。Galilei 以来の物理量（または観測可能量）にもとづく物理理論において、物理量の集まりが代数をなしていることから物理量から生成される代数を出発点とするというのは無理のない仮説である（量子論では代数の非可換性が難しさの要因にはなる）。量子論において必要とされる代数は $*$ -代数と呼ばれるもので、行列の随伴を一般化にあたる対合 (involution) をもつ代数のことである。Hilbert 空間上の有界線型作用素のなす $*$ -代数を扱う枠組みとして C^* -代数および von Neumann 代数と呼ばれるクラスの作用素代数がある [5]。一方、状態は与えられた $*$ -代数上の規格化された正值線形汎関数として定義される。この定義は期待値のもつ性質を代数的に特徴づけ非可換代数上に一般化したものである。ちなみに、代数的アプローチにおいても Hilbert 空間は不可欠であり、「 $*$ -代数の表現」が関与するところ（例えばスペクトル解析、代数的量子場理論での局所ネット・セクター理論など）で活用される（(1) での Hilbert 空間の選択は「 $*$ -代数の表現」の同値性の問題に帰着する）。ここまでの議論 ((1) および (2)) とその先については [6] および [7] に詳しい。そして、量子論の数理を確率論として整理し誕生したのが量子確率論 (quantum probability theory) である。量子確率論は [8] で紹介されており、様々な独立性の概念が定義されるなど広がりを見せている。
- (3) (2) の代数的アプローチでは、「なぜその系の物理量の集まりが、ある $*$ -代数 $\mathcal{A}$ により記述されるのか？」という疑問が生じる。これに対する解答として圏代数 (category algebra) という考え方がある [9, 10]。圏とは合成可能な矢印（射）のなすシステムのことで、数学の至る所で登場する（色々と入門書や教科書があり、[11] にも記述がある）。物理学においてはネットワークであったり（可逆とは限らない）対称性の記述に圏はまさにぴったりの言語を提供する。可逆な対称性を記述する概念として群が知られているが、群の元をベクトル空間の元と考えその線形結合（と代数演算の導入）によって得られる代数が群環（あるいは群代数）である。圏代数とは群環をつくる操作を圏に対して同様に行ったものである。そして、圏を $\dagger$ -圏 (dagger category) と呼ばれるクラスから選べば、その圏代数は $*$ -代数となる。確率論的な枠組みは量子確率論にもとづくが、物理を深く掘り下げる枠組みとして圏および圏代数が有力な手がかりになると期待して研究が進められている。
- (4) 現在確立している量子測定理論においては、量子インストルメント (quantum instrument) という概念により量子系に対する測定が記述される。量子インストルメントは、完全正值インストルメント (completely positive instrument) とも呼ばれており、公理的に特徴づけされている。測定対象の系と測定装置（およびそのメーター）の統計的な記述で必要とされる性質から量子インストルメントが導かれる。その導入のきっかけは Davies と Lewis による反復可能性仮説 (repeatability hypothesis) の放棄にあり、同時に彼らが導入したインストルメントの概念があまりに一般的で量子力学の公理系との関係が不明確であったが、小澤が完全正值性 [5, 12] を満たすクラス（完全正值インストルメント）を導入し、完全正值インストルメントと ([1] より広く一般的に定義された) 測定過程との対応関係を証明したことによ

る（詳しくは [4, 13] およびこれらの引用文献を参照）。Heisenberg の不確定性関係の破れ・小澤の不等式の証明などの成果は、量子インストルメントを誤差および擾乱の定義に応用することで得られたものである。

「von Neuman の公理系」から一旦外に出れば、概念的な示唆に富み且つ最先端へとつながるルートが開けるのである。

参考文献

- [1] J. v. ノイマン 著, 井上 健, 広重 徹, 恒藤 敏彦 共訳, 『量子力学の数学的基礎』, (みすず書房, 1957) .
- [2] J. von Neumann, On infinite direct products, *Compositio Mathematica* **6** (1939), 1–77.
- [3] 並木 美喜雄, 位田 正邦, 豊田 利幸, 江沢 洋, 湯川 秀樹, 『量子力学 II』, (岩波書店, 2011) .
- [4] M. Ozawa, Heisenberg’s original derivation of the uncertainty principle and its universally valid reformulations, *Current Science* **109** (2015), 2006–2016. arXiv:1507.02010.
- [5] M. Takesaki, *Theory of Operator Algebras I*, (Springer, Berlin, 1979).
- [6] 小嶋 泉, 『量子場とミクロ・マクロ双対性』, (丸善出版, 2013) .
- [7] 小嶋 泉, 岡村 和弥, 『無限量子系の物理と数理』, (サイエンス社, 2013) .
- [8] 明出伊 類似, 尾畑 伸明, 『量子確率論の基礎』, (オーム社, 2021) .
- [9] H. Saigo, Category algebras and states on categories, *Symmetry* **13** (2021), 1172.
- [10] H. Saigo, Quantum fields as category algebras, *Symmetry* **13** (2021), 1727.
- [11] 大津 元一, 小嶋 泉 編著, 『ここからはじまる量子場 —ドレスト光子が開くオフショール科学—』, (朝倉書店, 2020).
- [12] V. Paulsen, *Completely bounded maps and operator algebras*, (Cambridge UP, Cambridge, 2002).
- [13] M. Ozawa, Uncertainty relations for noise and disturbance in generalized quantum measurements, *Ann. Phys. (N.Y.)* **331** (2004), 350–416.