

2020年7月29日

量子情報数理特論

(第12回) Positive Maps, トレース距離, 量子仮説検定, 量子Steinの補題

電気通信大学 大学院情報理工学研究科

小川朋宏

11 Positive Maps, トレース距離, 量子仮説検定, 量子 Stein の補題

(課題)

- (1) positive map の定義を述べよ.
- (2) super operator に関するトレース保存条件と同値な条件を述べよ.
- (3) エルミート作用素 A, B のトレース距離を, 正部分, 負部分を用いて表わせ.
- (4) 仮説検定理論における, 第一種誤り確率と第二種誤り確率について, 帰無仮説, 対立仮説という用語を用いて述べよ.
- (5) 量子相対エントロピーの操作的な意味について考察せよ.

11.1 Positive Maps

Definition 1. 線形写像 (super operator) $\mathcal{E} : A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \mapsto \mathcal{E}(A) \in \mathcal{L}(\mathcal{K})$ について,

$$A \geq 0 \implies \mathcal{E}(A) \geq 0$$

が成り立つとき, positive map であるという.

Definition 2. 線形写像 (super operator) $\mathcal{E} : A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \mapsto \mathcal{E}(A) \in \mathcal{L}(\mathcal{K})$ について,

$$\text{Tr } B \mathcal{E}(A) = \text{Tr } \mathcal{E}^*(B) A \quad (\forall A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}), \forall B \in \mathcal{L}(\mathcal{K}))$$

を満たす写像 $\mathcal{E}^* : B \in \mathcal{L}(\mathcal{K}) \mapsto \mathcal{E}^*(B) \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ が一意に定まり, これを $\mathcal{E}$ の dual という.

Lemma 1. 線形写像 (super operator) $\mathcal{E} : A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}) \mapsto \mathcal{E}(A) \in \mathcal{L}(\mathcal{K})$ について以下は同値.

- (i) $\mathcal{E}$ はトレースを保存する (trace preserving)
- (ii) $\mathcal{E}^*(I_{\mathcal{K}}) = I_{\mathcal{H}}$ (単位作用素を保存)

(証明)

$$\begin{aligned} \text{(i)} &\Leftrightarrow \forall A, \text{Tr } \mathcal{E}^*(I) A = \text{Tr } \mathcal{E}(A) = \text{Tr } A \\ &\Leftrightarrow \forall A, \langle \{\mathcal{E}^*(I) - I\}^*, A \rangle = 0 \Leftrightarrow I - \mathcal{E}^*(I) = 0 \Leftrightarrow \text{(ii)} \end{aligned}$$

11.2 エルミート作用素の正部分 (positive part) と負部分 (negative part)

Definition 3. エルミート作用素 A について、スペクトル分解を

$$A = \sum_{k=1}^m a_k E_k$$

とするとき、 A の正部分 (positive part)、負部分 (negative part)、正部分への射影子を

$$A_+ := \sum_{k:a_k>0} a_k E_k, \quad A_- := \sum_{k:a_k\leq 0} (-a_k) E_k, \quad \{A > 0\} := \sum_{k:a_k>0} E_k$$

で定義する.

(注意) エルミート作用素 A について,

$$A = A_+ - A_- \tag{1}$$

$$|A| \left(:= \sqrt{A^* A} \right) = A_+ + A_- \tag{2}$$

$$A_+ = A \{A > 0\} \tag{3}$$

11.3 Positive Mapに関する単調性

Lemma 2 (大事な補題).

$$\mathrm{Tr} A_+ = \mathrm{Tr} A\{A > 0\} = \max_{0 \leq T \leq I} \mathrm{Tr} AT$$

(証明) 最初の等式は(3)である. 任意の $0 \leq T \leq I$ について,

$$\mathrm{Tr} AT = \mathrm{Tr} A_+ T - \mathrm{Tr} A_- T \leq \mathrm{Tr} A_+ T \leq \mathrm{Tr} A_+$$

ここで, 最初の不等式は $T \geq 0$ を, 二番目の不等式は $T \leq I$ を用いた. $T = \{A > 0\}$ で等号が達成される. □

Lemma 3 (単調性). $\mathcal{E}$ をトレースを保存する (trace preserving) positive map とするとき,

$$\mathrm{Tr} A_+ \geq \mathrm{Tr} \mathcal{E}(A)_+$$

(証明)

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr} \mathcal{E}(A)_+ &= \mathrm{Tr} [\mathcal{E}(A) \cdot \{\mathcal{E}(A) > 0\}] = \mathrm{Tr} [A \cdot \mathcal{E}^*(\{\mathcal{E}(A) > 0\})] \\ &\leq \mathrm{Tr} A\{A > 0\} \end{aligned} \tag{4}$$

$$= \mathrm{Tr} A_+ \tag{5}$$

ただし, (4)において, $0 \leq \{\mathcal{E}(A) > 0\} \leq I$ と, $\mathcal{E}$ が positive かつ trace preserving であることから,

$\mathcal{E}^*$ は unital で,

$$0 \leq \mathcal{E}^*(\{\mathcal{E}(A) > 0\}) \leq \mathcal{E}^*(I) = I$$

となることを用いた.

□

Lemma 4 (単調性). $\mathcal{E}$ をトレースを保存する (trace preserving) positive map とするとき,

$$\mathrm{Tr} A_- \geq \mathrm{Tr} \mathcal{E}(A)_-$$

(証明)

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr} A_- &= \mathrm{Tr}(-A)_+ \geq \mathrm{Tr} \mathcal{E}(-A)_+ \\ &= \mathrm{Tr}[-\mathcal{E}(A)]_+ = \mathrm{Tr} \mathcal{E}(A)_- \end{aligned}$$

□

11.4 トレースノルムとトレース距離

Definition 4 (トレースノルム). $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ (エルミートとは限らない) に対して,

$$\|A\|_1 = \operatorname{Tr} |A| = \operatorname{Tr} \sqrt{A^* A}$$

Lemma 5 (トレースノルムの単調性). $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ (エルミートとは限らない) とトレースを保存する positive map $\mathcal{E}$ に対して,

$$\|A\|_1 \geq \|\mathcal{E}(A)\|_1$$

(証明) 簡単のため, A がエルミートのときのみ証明を与える.

$$\|A\|_1 = \operatorname{Tr} |A| = \operatorname{Tr} A_+ + \operatorname{Tr} A_- \geq \operatorname{Tr} \mathcal{E}(A)_+ + \operatorname{Tr} \mathcal{E}(A)_- = \|\mathcal{E}(A)\|_1$$

Definition 5 (トレース距離). $A, B \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ (エルミートとは限らない) について,

$$d_1(A, B) := \|A - B\|_1$$

- トレースを保存する positive map $\mathcal{E}$ に対して, 単調性が成立する: $d_1(A, B) \geq d_1(\mathcal{E}(A), \mathcal{E}(B))$
- トレース距離は主に密度作用素 $\rho, \sigma \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ について用いられる: $d_1(\rho, \sigma) := \|\rho - \sigma\|_1$
- トレースを保存する positive map についての単調性が成立: $d_1(\rho, \sigma) \geq d_1(\mathcal{E}(\rho), \mathcal{E}(\sigma))$

11.5 量子仮説検定

量子仮説検定問題

- 量子状態 $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ (帰無仮説) または $\sigma \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ (対立仮説) のどちらかが発生する状況を考える
- どちらの状態が発生したか, $\mathcal{H}$ 上の量子測定 (POVM) によって判定したい.
- 最終的な判定結果まで考えると, 「 ρ が真」または「 σ が真」に対応する二値の POVM $\{T_1, T_2\}$ を考えればよい.
- $T_1 = T$ とおけば, $T_2 = I - T$ である. $T_1, T_2 \geq 0$ より $0 \leq T \leq I$ である.
- $0 \leq T \leq I$ を検定 (test) とよび, 二値 POVM $\{T, I - T\}$ と同一視する.

- 真の状態が ρ であるときに, 誤って σ であると判定する確率 (第一種誤り確率) は

$$\alpha(T) := \text{Tr } \rho (I - T)$$

- 真の状態が σ であるときに, 誤って ρ であると判定する確率 (第二種誤り確率) は

$$\beta(T) := \text{Tr } \sigma T$$

両者を無制限に小さくすることは一般的に不可能であり, 何らかのトレードオフを考慮する必要がある.

11.6 漸近理論

漸近論の設定

- 量子状態 $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ または $\sigma \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ のどちらかに準備された系を、(同一の準備状況で) n 回利用できるとする.
- この状況で得られる量子状態は、Hilbert 空間 $\mathcal{H}^{\otimes n} = \underbrace{\mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}}_n$ において,

$$\rho^{\otimes n} = \underbrace{\rho \otimes \rho \otimes \cdots \otimes \rho}_n, \quad \sigma^{\otimes n} = \underbrace{\sigma \otimes \sigma \otimes \cdots \otimes \sigma}_n. \quad (6)$$

のどちらかである.

- 検定 (test) は $0 \leq T_n \leq I_n$ を満たす $\mathcal{H}^{\otimes n}$ 上の作用素 T_n で与えられ, POVM $\{T_n, I_n - T_n\}$ と同一視される.

以降, $\mathcal{H}_n = \mathcal{H}^{\otimes n}$, $\rho_n := \rho^{\otimes n}$, $\sigma_n := \sigma^{\otimes n}$ などと書く.

- 真の状態が ρ であるときに, 誤って σ であると判定する確率 (第一種誤り確率) は

$$\alpha_n(T_n) := \text{Tr } \rho_n(I_n - T_n)$$

- 真の状態が σ であるときに, 誤って ρ であると判定する確率 (第二種誤り確率) は

$$\beta_n(T_n) := \text{Tr } \sigma_n T_n$$

11.7 定数制約のトレードオフ

第一種誤り確率に $\alpha_n(T_n) \leq \varepsilon$ ($0 < \varepsilon < 1$) の定数制約を課した上で、第二種誤り確率を可能な限り小さくする問題を考える.

$$\beta_n^*(\varepsilon) = \min \{ \beta_n(T_n) \mid T_n : \text{test}, \alpha_n(T_n) \leq \varepsilon \}. \quad (7)$$

Theorem 1 (量子 Stein の補題). 任意の $0 < \forall \varepsilon < 1$ について,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \beta_n^*(\varepsilon) = -D(\rho \parallel \sigma) \quad (8)$$

ただし, $D(\rho \parallel \sigma) = \text{Tr } \rho(\log \rho - \log \sigma)$ は量子相対エントロピーである.

この定理を証明するため, 順次, 次の不等式の証明を与える.

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \beta_n^*(\varepsilon) \leq -D(\rho \parallel \sigma), \quad (9)$$

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log \beta_n^*(\varepsilon) \geq -D(\rho \parallel \sigma). \quad (10)$$

11.8 トレース不等式

- 先の問題設定では $\alpha(T)$, $\beta(T)$ の二つの量の最適化を同時に考える必要があった.
- 大変なので, 実数 w_1, w_2 による, エラーの重み付き和 (ベイズ和) の最小化を考える.

$$w_1 \cdot \alpha(T) + w_2 \cdot \beta(T) = w_1 \operatorname{Tr} \rho(I - T) + w_2 \operatorname{Tr} \sigma T, \quad (11)$$

- さらに記法を簡略化するため, $A = w_1 \rho$, $B = w_2 \sigma$ として考える

Lemma 6. 任意の非負作用素 A, B について,

$$\max_{\substack{X \leq A \\ X \leq B}} \operatorname{Tr} X = \min_{0 \leq T \leq I} \{ \operatorname{Tr} A(I - T) + \operatorname{Tr} BT \} \quad (12)$$

$$= \frac{1}{2} \operatorname{Tr}(A + B) - \frac{1}{2} \operatorname{Tr} |A - B| \quad (13)$$

さらに, (12) の最小化は $S := \{A - B > 0\}$ で達成される.

(証明) $X \leq A$, $X \leq B$ を満たす任意の作用素 X と, $0 \leq T \leq I$ を満たす任意の作用素 T について,

$$\operatorname{Tr} X = \operatorname{Tr} XT + \operatorname{Tr} X(I - T) \leq \operatorname{Tr} AT + \operatorname{Tr} B(I - T). \quad (14)$$

がなりたつ. よって,

$$\max_{\substack{X \leq A \\ X \leq B}} \operatorname{Tr} X \leq \min_{0 \leq T \leq I} \{ \operatorname{Tr} A(I - T) + \operatorname{Tr} BT \}. \quad (15)$$

ここで, $S = \{A - B > 0\}$, $Y = A(I - S) + BS$ とおくと,

$$Y = A - (A - B)S = A - (A - B)_+ \leq A, \quad (16)$$

$$Y = B + (A - B)(I - S) = B - (A - B)_- \leq B, \quad (17)$$

Y が $Y \leq A$, $Y \leq B$ を満たし, S が $0 \leq S \leq I$ を満たすことから,

$$\begin{aligned} \max_{\substack{X \leq A \\ X \leq B}} \text{Tr } X &\geq \text{Tr } Y = \text{Tr } A(I - S) + \text{Tr } BS \\ &\geq \min_{0 \leq T \leq I} \{\text{Tr } A(I - T) + \text{Tr } BT\}. \end{aligned} \quad (18)$$

(15)と(18)を合わせることで, (12)が成立し, Y によって $\max$ が, $S = \{A - B > 0\}$ によって $\min$ が達成されることが分かる. (16)と(17)の両辺足すことで,

$$\begin{aligned} 2\{A(I - S) + BS\} &= 2Y = A + B - \{(A - B)_+ + (A - B)_-\} \\ &= A + B - |A - B|. \end{aligned} \quad (19)$$

両辺のトレースをとると(13)が得られる. □

11.9 Audenaert *et al.* のトレース不等式

Theorem 2 (Audenaert *et al.*). 任意の非負定値作用素 A, B と, $0 \leq \forall s \leq 1$ について,

$$\mathrm{Tr} Y = \mathrm{Tr} A(I - S) + \mathrm{Tr} BS = \frac{1}{2} \mathrm{Tr}(A + B) - \frac{1}{2} \mathrm{Tr} |A - B| \leq \mathrm{Tr} A^{1-s} B^s. \quad (20)$$

(小澤登高による証明) $A - B \leq (A - B)_+$ より $A \leq B + (A - B)_+$ であるから, $f(x) = x^s$ の作用素単調性により, $A^s \leq (B + (A - B)_+)^s$ ($0 \leq s \leq 1$) が成り立つ. よって,

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr} A - \mathrm{Tr} A^{1-s} B^s &= \mathrm{Tr} A^{1-s} \{A^s - B^s\} \\ &\leq \mathrm{Tr} A^{1-s} \{(B + (A - B)_+)^s - B^s\} \end{aligned} \quad (21)$$

$$\leq \mathrm{Tr}(B + (A - B)_+)^{1-s} \{(B + (A - B)_+)^s - B^s\} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} &= \mathrm{Tr}(B + (A - B)_+) - \mathrm{Tr}(B + (A - B)_+)^{1-s} B^s \\ &\leq \mathrm{Tr}(B + (A - B)_+) - \mathrm{Tr} B^{1-s} B^s \end{aligned} \quad (23)$$

$$= \mathrm{Tr} B + \mathrm{Tr}(A - B)_+ - \mathrm{Tr} B, \quad (24)$$

- (21)では, $A^{1-s} \leq (B + (A - B)_+)^{1-s}$ を用いた.
- (22)では, $B + (A - B)_+ \geq B$ より $(B + (A - B)_+)^s - B^s \geq 0$ であることを用いた.
- (23)では, $(B + (A - B)_+)^{1-s} \geq B^{1-s}$ を用いた.

上式と(16)により,

$$\mathrm{Tr} Y = \mathrm{Tr} A(I - S) + \mathrm{Tr} BS = \mathrm{Tr} A - \mathrm{Tr}(A - B)_+ \leq \mathrm{Tr} A^{1-s} B^s. \quad (25)$$