2021年7月7日

# 量子情報数理特論
# （第12回）Positive Map，トレース距離，量子仮説検定

電気通信大学 大学院情報理工学研究科

小川朋宏

# 11　Positive Map，トレース距離，量子仮説検定

(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) 仮説検定問題における，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 Map

**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，

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

を満たす $\mathcal{E}^* : B \in \mathcal{L}(\mathcal{K}) \mapsto \mathcal{E}^*(B) \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ が一意に定まる．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, unital）（ユニタリではなくユニタル）

（証明）

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

## 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) を

$$A_+ := \sum_{k:a_k>0} a_k E_k, \quad A_- := \sum_{k:a_k\leq 0} (-a_k) E_k \tag{1}$$

で定義する．$A_+ \geq 0,\ A_- \geq 0$ に注意する．正部分への射影子，負部分への射影子は

$$\{A>0\} := \sum_{k:a_k>0} E_k, \quad \{A\leq 0\} := \sum_{k:a_k\leq 0} E_k \tag{2}$$

で定義される．$\{A>0\}+\{A\leq 0\} = I$, $0\leq \{A>0\}\leq I$, $0\leq\{A\leq 0\}\leq I$ に注意．

エルミート作用素 $A$ について，

$$A = A_+ - A_-, \quad A_+ = A\{A>0\}, \quad A_- = -A\{A\leq 0\} \tag{3}$$

$A$ の絶対値作用素は $|A| := \sqrt{A^* A}$ で定義されていた．$A$ がエルミート作用素の場合，

$$|A| = \sum_k |a_k| E_k = A_+ + A_- \tag{4}$$

**Lemma 2** (大事な補題).

$$\operatorname{Tr} A_+ = \operatorname{Tr} A\{A > 0\} = \max_{0 \le T \le I} \operatorname{Tr} AT$$

（証明） 最初の等式は(3)の第2式である．任意の $0 \le T \le I$ について，(3)の第1式より，

$$\operatorname{Tr} AT = \operatorname{Tr} A_+ T - \operatorname{Tr} A_- T \le \operatorname{Tr} A_+ T \le \operatorname{Tr} A_+$$

ここで，最初の不等式は$T \ge 0$より$\operatorname{Tr} A_- T \ge 0$を，二番目の不等式は$T \le I$を用いた．
$T = \{A > 0\}$で等号が達成されることから主張が示される． □

**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，

$$\operatorname{Tr} A_+ \ge \operatorname{Tr} \mathcal{E}(A)_+$$

（証明）

$$\begin{aligned} \operatorname{Tr} \mathcal{E}(A)_+ = \operatorname{Tr}\big[\mathcal{E}(A) \cdot \{\mathcal{E}(A) > 0\}\big] &= \operatorname{Tr}\big[A \cdot \mathcal{E}^*\big(\{\mathcal{E}(A) > 0\}\big)\big] \\ &\le \operatorname{Tr} A\{A > 0\} \qquad (5) \\ &= \operatorname{Tr} A_+ \qquad (6) \end{aligned}$$

ただし，(5)において，$0 \le \{\mathcal{E}(A) > 0\} \le I$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,

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

(証明)

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

□

## 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，

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

**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．

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

**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を測定として考えると，「$\rho$が真」または「$\sigma$が真」という結果に対応する二値の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$\rho$であるときに，誤って$\sigma$であると判定する確率（第一種誤り確率）は

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

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

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

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．

**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，

$$\rho^{\otimes n} = \underbrace{\rho \otimes \rho \otimes \cdots \otimes \rho}_{n}, \quad \sigma^{\otimes n} = \underbrace{\sigma \otimes \sigma \otimes \cdots \otimes \sigma}_{n}. \tag{7}$$

  のどちらかである．
- 検定 (test) は$0 \le T_n \le I_n$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$\rho$であるときに，誤って$\sigma$であると判定する確率（第一種誤り確率）は

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

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

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

## 11.7 量子Steinの補題：定数制約のトレードオフ

第一種誤り確率に$\alpha_n(T_n) \le \varepsilon$ $(0 < \varepsilon < 1)$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．

$$\beta_n^*(\varepsilon) = \min \{ \beta_n(T_n) \mid T_n : \text{test}, \alpha_n(T_n) \le \varepsilon \} \tag{8}$$

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

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log \beta_n^*(\varepsilon) = -D(\rho||\sigma) \tag{9}$$

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

（意味）$n$が十分大きいとき，第二種誤りの最適な減衰レートが量子相対エントロピーで与えられる．

$$\beta_n^*(\varepsilon) \simeq e^{-nD(\rho||\sigma)} \tag{10}$$

（講義の目標）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．

$$\limsup_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log \beta_n^*(\varepsilon) \le -D(\rho||\sigma), \tag{11}$$

$$\liminf_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log \beta_n^*(\varepsilon) \ge -D(\rho||\sigma). \tag{12}$$

## 11.8　ベイズ重み付きエラーの最適化

- 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（ベイズエラー）の最小化を考える.

$$w_1 \cdot \alpha(T) + w_2 \cdot \beta(T) = w_1 \operatorname{Tr} \rho\,(I-T) + w_2 \operatorname{Tr} \sigma\, T, \tag{13}$$

- 以降，記法を簡略化するため $A = w_1\rho$, $B = w_2\sigma$ とし，より一般的な状況での最小化を考える.

**Lemma 6.** 任意のエルミート作用素 $A$, $B$ について，

$$\max_{\substack{X \le A \\ X \le B}} \operatorname{Tr} X = \min_{0 \le T \le I} \{\operatorname{Tr} A(I-T) + \operatorname{Tr} BT\} \tag{14}$$

$$= \operatorname{Tr} A - \operatorname{Tr}(A-B)_+ = \operatorname{Tr} B - \operatorname{Tr}(A-B)_- \tag{15}$$

$$= \frac{1}{2}\operatorname{Tr}(A+B) - \frac{1}{2}\operatorname{Tr}|A-B| \tag{16}$$

さらに，(14) の最小化は $S := \{A - B > 0\}$ で達成される.

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

$$\operatorname{Tr} X = \operatorname{Tr} XT + \operatorname{Tr} X(I-T) \le \operatorname{Tr} AT + \operatorname{Tr} B(I-T) \tag{17}$$

がなりたつ．よって，(14) の $\max$ と $\min$ について次の大小関係が成立する.

$$\max_{\substack{X \le A \\ X \le B}} \operatorname{Tr} X \le \min_{0 \le T \le I} \{\operatorname{Tr} A(I-T) + \operatorname{Tr} BT\} \tag{18}$$

ここで，特に$S = \{A - B > 0\}$, $Y = A(I - S) + BS$とおくと，(18)の等号が達成されることを示す．

$$Y = A - (A - B)S = A - (A - B)_+ \leq A \tag{19}$$

$$Y = B + (A - B)(I - S) = B - (A - B)_- \leq B \tag{20}$$

であるから，$Y$が$Y \leq A$, $Y \leq B$を満たす．また，$S$は射影子で$0 \leq S \leq I$を満たすことから，

$$\max_{\substack{X \leq A \\ X \leq B}} \operatorname{Tr} X \geq \operatorname{Tr} Y = \operatorname{Tr} A(I - S) + \operatorname{Tr} BS \geq \min_{0 \leq T \leq I} \{\operatorname{Tr} A(I - T) + \operatorname{Tr} BT\} \tag{21}$$

(18)と(21)を合わせることで(14)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．ここで(19) (20)より，

$$Y = A - (A - B)_+ \tag{22}$$

$$Y = B - (A - B)_- \tag{23}$$

であるから，両辺のトレースをとると(15)が得られる．また，上式の辺々足すことで，

$$\begin{aligned} 2Y &= A + B - \{(A - B)_+ + (A - B)_-\} \\ &= A + B - |A - B| \end{aligned} \tag{24}$$

両辺のトレースをとると(16)が得られる． □

**Lemma 7** (復習 Lemma 2)**.** 任意のエルミート作用素 $A$ について，

$$\operatorname{Tr} A_+ = \operatorname{Tr} A\{A > 0\} = \max_{0 \le T \le I} \operatorname{Tr} AT \tag{25}$$

**Lemma 8** (復習 Lemma 6)**.** 任意のエルミート作用素 $A$, $B$ について，

$$\min_{0 \le T \le I} \{\operatorname{Tr} A(I - T) + \operatorname{Tr} BT\} = \operatorname{Tr} A - \operatorname{Tr}(A - B)_+ \tag{26}$$

ここで，最小化は $S := \{A - B > 0\}$ で達成される．

（別証明）$\operatorname{Tr} A(I - T) + \operatorname{Tr} BT = \operatorname{Tr} A - \operatorname{Tr}(A - B)T$ より，

$$（左辺）= \operatorname{Tr} A - \max_{0 \le T \le I} \operatorname{Tr}(A - B)T = （右辺）$$

**Lemma 9.** 上記を $\rho, \sigma \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ の仮説検定問題に適用（$A = \rho$, $B = e^a \sigma$ $(a \in \mathbb{R})$ とおく）

$$\min_{0 \le T \le I} \{\alpha(T) + e^a \beta(T)\} = \min_{0 \le T \le I} \{\operatorname{Tr} \rho\,(I - T) + e^a \operatorname{Tr} \sigma T\} = 1 - \operatorname{Tr}(\rho - e^a \sigma)_+ \tag{27}$$

最小化は $S(a) := \{\rho - e^a \sigma > 0\}$（量子 Neyman-Pearson 検定）で達成される．

**Lemma 10.** 量子Neyman-Pearson検定 $S(a) := \{\rho - e^a\sigma > 0\}$ $(a \in \mathbb{R})$と，
任意の検定 $0 \le T \le I$ について，

$$\alpha(T) \le \alpha(S(a)) \implies \beta(T) \ge \beta(S(a))$$

（意味：第一種誤りでNeyman-Pearson検定より性能が良いと，第二種誤りでは性能が悪くなる）

（証明） Lemma 9より，任意の検定 $0 \le T \le I$ について，

$$\alpha(S(a)) + e^a\beta(S(a)) \le \alpha(T) + e^a\beta(T) \tag{28}$$

これを移項することで，

$$0 \overset{\text{仮定}}{\le} \alpha(S(a)) - \alpha(T) \le e^a\{\beta(T) - \beta(S(a))\} \tag{29}$$

□

**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，

$$\min_{0 \leq T \leq I} \{\mathrm{Tr}\, A(I-T) + \mathrm{Tr}\, BT\} = \mathrm{Tr}\, A - \mathrm{Tr}(A-B)_+ \leq \mathrm{Tr}\, A^{1-s} B^s. \tag{30}$$

（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，

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\, A - \mathrm{Tr}\, A^{1-s} B^s &= \mathrm{Tr}\, A^{1-s} \{A^s - B^s\} \\
&\leq \mathrm{Tr}\, A^{1-s} \{(B + (A-B)_+)^s - B^s\} && (31) \\
&\leq \mathrm{Tr}(B + (A-B)_+)^{1-s} \{(B + (A-B)_+)^s - B^s\} && (32) \\
&= \mathrm{Tr}(B + (A-B)_+) - \mathrm{Tr}(B + (A-B)_+)^{1-s} B^s \\
&\leq \mathrm{Tr}(B + (A-B)_+) - \mathrm{Tr}\, B^{1-s} B^s && (33) \\
&= \mathrm{Tr}\, B + \mathrm{Tr}(A-B)_+ - \mathrm{Tr}\, B, && (34)
\end{aligned}$$

- (31) では，$A^{1-s} \leq (B + (A-B)_+)^{1-s}$ を用いた．
- (32) 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．
- (33) では，$(B + (A-B)_+)^{1-s} \geq B^{1-s}$ を用いた．

上式と (19) により，

$$\mathrm{Tr}\, Y = \mathrm{Tr}\, A(I-S) + \mathrm{Tr}\, BS = \mathrm{Tr}\, A - \mathrm{Tr}(A-B)_+ \leq \mathrm{Tr}\, A^{1-s} B^s. \tag{35}$$