数理解析研究所講究録
第 1820 巻 2012 年 102-113

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-

京都大学数理解析研究所
岡村 和弥[1]

1 導入

相対エントロピーは確率論，統計学，情報理論，統計力学をはじめとする諸分野で基本的な量であり，系の構造を解析する上でとても重要な確率分布や“状態”の指定や推定を行うために主に用いられる。本稿では相対エントロピーの量子版である量子相対エントロピーに相対エントロピー同様の位置づけを与えることを第一の目的とする。そのために，相対エントロピーを2次形式の立場から定義を行う。状態が非可換代数上の正値線型汎関数であることからの自然な帰結である。具体的には，2次形式の補間理論が用いられており，2つの2次形式をつなぐ1パラメータをもつ2次形式を値とする関数の構成を用いて相対エントロピーが定義される。冨田竹崎理論を包括する非可換 L^p 空間論を背景にもつ関数空間論としても興味深いものである。その次にセクターおよび中心測度を定義し，これらの活用により量子相対エントロピーが測度論的な相対エントロピーと一致することを示す定理を紹介する。最後に，量子大偏差原理について説明を加える。大偏差原理のレート関数としての位置づけが量子相対エントロピーに与えられる。そして，仮説検定においても量子相対エントロピーが登場し，モデル選択では量子相対エントロピーを積極的に活用することになり，情報量規準の定義につながる。最後に，測定過程を考慮することで幅広い枠組みで本稿の議論が活用できることを示す。詳細は [29] をご覧になって頂きたい。

2 C*-代数と状態

C*-代数 $\mathfrak{A}$ とは対合 $* : \mathfrak{A} \ni A \mapsto A^* \in \mathfrak{A}$ をもつ代数であって，$\|A^*A\| = \|A\|^2$ をみたすノルム $\|\cdot\|$ をもつ Banach 空間のことを意味する。本稿では単位元 1 を持つことを仮定する。

そして，$\mathfrak{A}$ 上の状態 ω とは，ω は線型汎関数であって，$\omega(A^*A) \geq 0$ および $\omega(1) = 1$ を満たすもののことである。$E_{\mathfrak{A}}$ で $\mathfrak{A}$ 上の状態全体を表す。状態とは，非可換代数上に一般化された期待値を与える汎関数 (期待値汎関数) である，と了解できる。

任意の $\omega \in E_{\mathfrak{A}}$ に対し，Hilbert 空間 $\mathfrak{H}_\omega$, 単位ベクトル $\Omega_\omega \in \mathfrak{H}_\omega$ と $\mathfrak{A}$ から $\boldsymbol{B}(\mathfrak{H}_\omega)$ への表現 π_ω で $\omega(A) = \langle \Omega_\omega, \pi_\omega(A)\Omega_\omega \rangle$, $\mathfrak{H}_\omega = \overline{\pi_\omega(\mathfrak{A})\Omega_\omega}$ を満たす3つ組 $\{\pi_\omega, \mathfrak{H}_\omega, \Omega_\omega\}$ を $\mathfrak{A}$ の ω に伴う GNS 表現と呼ぶ。GNS 表現は状態に対してユニタリー同値を除いて一意に定まる。このとき，$\mathfrak{Z}_\omega(\mathfrak{A}) = \pi_\omega(\mathfrak{A})'' \cap \pi_\omega(\mathfrak{A})'$ [2]を von Neumann 代数[3] $\pi_\omega(\mathfrak{A})''$ の中心と呼ぶ。状態 ω は自明な中心 $\mathfrak{Z}_\omega(\mathfrak{A}) = \mathbb{C}1$ をもつとき，ファクターと呼ばれる。ファクター状態の全体を $F_{\mathfrak{A}}$ で表す。2つの状態 π_1, π_2 は (直和による) 多重度を無視したユニタリー同値に

---

[1] 連絡先 kazuqi@kurims.kyoto-u.ac.jp

[2] ある Hilbert 空間 $\mathfrak{H}$ 上の有界線型作用素の全体 $\boldsymbol{B}(\mathfrak{H})$ の部分集合 S に対し，その可換子 S' を $S' = \{A \in \boldsymbol{B}(\mathfrak{H}) | AB = BA, B \in S\}$ で定める。また，$S'' := (S')'$ を S の再可換子と呼ぶ。

[3] ある Hilbert 空間 $\mathfrak{H}$ 上の von Neumann 代数 $\mathcal{M}$ とは，$\mathcal{M}$ は有界線型作用素の全体 $\boldsymbol{B}(\mathfrak{H})$ の共役演算で閉じた部分代数であって，$\mathcal{M} = \mathcal{M}''$ を満たすものである。

あるとき準同値であると呼ばれ，$\pi_1 \approx \pi_2$ と表す。ファクター状態の準同値類をセクター [16, 17, 18] と呼ぶ。各々のセクターはそれぞれ1つの表現を単位としてつくられる直和表現によって構成されており，セクターが異なればそこには intertwiner(繋絡作用素) が存在しない。

量子論においてセクターはマクロに見て異なる構造の分類指標の一単位として用いられる。一般化された純粋相および根源事象の統合概念であって，ミクロから創発する動的な背景を持ちながら熱力学的な安定性に支えられており，マクロな一単位でありながら内部にミクロな動的構造を含んでいる。

3 相対エントロピーの定義

$M_1(\Omega)$ によって $(\Omega, \mathcal{F})$ 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

$$D(\nu\|\mu) = \begin{cases} \displaystyle\int d\nu(\rho) \log \frac{d\nu}{d\mu}(\rho) & (\nu \ll \mu) \\ +\infty & (\text{otherwise}). \end{cases} \tag{1}$$

で定める。$\nu, \mu \ll \sigma$ となる Ω 上の測度 σ が存在するとき，$D(\nu\|\mu)$ のかわりに $D(q\|p)$ で表す。ただし，$q := \dfrac{d\nu}{d\sigma}$ and $p := \dfrac{d\mu}{d\sigma}$ である。

これから，荒木と Uhlmann による相対エントロピーを定義しよう [3, 26, 11, 28]。$(\mathcal{M}, \mathcal{H}, J, \mathcal{P})$ を von Neumann 代数 $\mathcal{M}$ の標準形[4]とし，φ, ψ を $\mathcal{M}$ 上の正規状態とする。任意の $A \in \mathcal{A}$ 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

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

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，$\Delta_{\Phi,\Psi} = \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE_{\Phi,\Psi}(\lambda)$ 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は $S(\varphi\|\psi)_{\text{Araki}}$ を

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

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

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

[4] Hilbert 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) $J\mathcal{M}J = \mathcal{M}'$; (ii) $JAJ = A^*$, $A \in \mathfrak{Z}(\mathcal{M})$; (iii) $J\xi = \xi$, $\xi \in \mathcal{P}$; (iv) $AJAJ\mathcal{P} \subset \mathcal{P}$, $A \in \mathcal{M}$. 詳しくは [25] を参照して頂きたい。

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 $|\alpha(x,y)|\le p(x)q(y)$ 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；

$$\begin{aligned} p_t &= QM(p_{t_1},p_{t_2}),\ t=\frac{t_1+t_2}{2}, t_1,t_2\in[0,1],\\ p_{\frac12} &= QM(p,q),\\ p_{\frac t2} &= QM(p,p_t),\ t\in[0,1],\\ p_{\frac{1+t}{2}} &= QM(p_t,q),\ t\in[0,1]. \end{aligned}$$

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 $p_t(x)=QF_t(\alpha,\beta)(x,x)^{\frac12}$ によって定められる関数 p_t は $\alpha(x,x)^{\frac12}$ から $\beta(x,x)^{\frac12}$ 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) $S(\alpha\|\beta)(x)$ を

$$\begin{aligned} & S(\alpha\|\beta)(x)\\ =& -\liminf_{t\to+0}\frac{QF_t(\alpha,\beta)(x,x)-\alpha(x,x)}{t}. \end{aligned}$$

で定める。

$\mathcal{A}$ を *-代数[5]とし，φ,ψ を $\mathcal{A}$ 上の正値線型汎関数とする。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 $\mathcal{A}$ 上の正値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 1. *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しない。

定理 2. φ,ψ を C^*-代数 $\mathfrak{A}$ の状態とし，π をある *Hilbert* 空間上の $\mathfrak{A}$ の非縮退表現[6]とする。φ,ψ の $\pi(\mathfrak{A})''$ 上への正規拡張 $\tilde\varphi,\tilde\psi$ $\varphi(A)=\tilde\varphi(\pi(A)),\psi(A)=\tilde\psi(\pi(A))$ 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。

3 α-ダイバージェンスの定義と性質

[5]対合演算 $^*: A\mapsto A^*$ で閉じた代数。
[6]非自明な固有空間がない表現のこと。

続いて α-ダイバージェンスについて議論する。測度空間 $(\Omega, \mathcal{F})$ においてある測度 m に対し絶対連続な確率測度 μ, ν に対し，α-ダイバージェンスを

$$D^{(\alpha)}(\mu\|\nu) = \begin{cases} D(\nu\|\mu), & (\alpha = +1), \\ \dfrac{4}{1-\alpha^2}\left(1 - \displaystyle\int dm \left(\frac{d\mu}{dm}\right)^{\frac{1-\alpha}{2}} \left(\frac{d\nu}{dm}\right)^{\frac{1+\alpha}{2}}\right), & (|\alpha| < 1), \\ D(\mu\|\nu), & (\alpha = -1), \end{cases}$$

で定める。Uhlmann の α-ダイバージェンス[7]を $*$-代数上の状態 φ, ψ に対し，

$$S^{(\alpha)}(\varphi\|\psi)_{\mathrm{Uhlmann}} = \begin{cases} S(\psi\|\varphi)_{\mathrm{Uhlmann}}, & (\alpha = +1), \\ \dfrac{4}{1-\alpha^2}(1 - QF_{\frac{1+\alpha}{2}}(\varphi^R, \psi^L)(1,1)), & (|\alpha| < 1), \\ S(\varphi\|\psi)_{\mathrm{Uhlmann}}, & (\alpha = -1), \end{cases}$$

で定める。そして，σ-有限 von Neumann 代数 $\mathcal{M}$ 上の正規状態 $\varphi = \langle \Phi, \cdot\, \Phi \rangle, \psi = \langle \Psi, \cdot\, \Psi \rangle$ に対し，荒木の α-ダイバージェンスを

$$S^{(\alpha)}(\varphi\|\psi)_{\mathrm{Araki}} = \begin{cases} S(\psi\|\varphi)_{\mathrm{Araki}}, & (\alpha = +1), \\ \dfrac{4}{1-\alpha^2}(1 - \langle \Psi, \Delta_{\Phi,\Psi}^{1-\frac{1+\alpha}{2}} \Psi \rangle), & (|\alpha| < 1), \\ S(\varphi\|\psi)_{\mathrm{Araki}}, & (\alpha = -1), \end{cases}$$

で定める。ここで，Φ, Ψ はある標準形の自己双対錐の元である。von Neumann 代数 $L^\infty(\Omega, m)$ 上の状態 (確率測度)$\mu, \nu \ll m$ に対しては

$$S^{(\alpha)}(\mu\|\nu)_{\mathrm{Araki}} = D^{(\alpha)}(\mu\|\nu),$$

であることは容易にわかる。定理 1 の α-版も成立し，von Neumann 代数においては $S(\psi\|\varphi)_{\mathrm{Uhlmann}}$ と $S(\psi\|\varphi)_{\mathrm{Araki}}$ を区別する必要はない。

4 セクターと中心分解

任意の状態はセクターに (積分) 分解できることが知られており，セクターによる分類はあらゆる量子系の振舞いの記述に出現し，次の定理の特別な場合（中心測度）の適用にあたる。

定理 3 (冨田分解定理 [4]). *任意の状態 $\omega \in E_{\mathfrak{A}}$ に対し，次の 3 つは一対一対応する：*
(a) $\omega = \displaystyle\int_{E_{\mathfrak{A}}} \rho \, d\mu(\rho)$ *となる $E_{\mathfrak{A}}$ 上の直交測度 μ.*
(b) 可換 von Neumann 代数 $\mathfrak{B} \subseteq \pi_\omega(\mathfrak{A})'$.
(c) 次を満たす $\mathfrak{H}_\omega$ 上の射影作用素 P： $P\Omega_\omega = \Omega_\omega, P\pi_\omega(\mathfrak{A})P \subseteq \{P\pi_\omega(\mathfrak{A})P\}'$.
$\mu, \mathfrak{B}, P$ *は上の対応をもつとき次の関係が成り立つ：*
(1) $\mathfrak{B} = \{\pi_\omega(\mathfrak{A}) \cup P\}'$; (2) $P = [\mathfrak{B}\Omega_\omega]$;

---

[7] Uhlmann 本人が定義したわけではないが，区別のためにこのように名づけた。荒木の α-ダイバージェンスについても同様。

(3) $\mu(\widehat{A}_1\widehat{A}_2\cdots\widehat{A}_n) = \langle\Omega_\omega, \pi_\omega(A_1)P\pi_\omega(A_2)P\cdots P\pi_\omega(A_n)\Omega_\omega\rangle$;
(4) $\mathfrak{B}$ は

$$\langle\Omega_\omega, \kappa_\mu(f)\pi_\omega(A)\Omega_\omega\rangle = \int d\mu(\rho)f(\rho)\widehat{A}(\rho)$$

で定められる写像 $L^\infty(\mu) := L^\infty(E_\mathfrak{A}, \mu) \ni f \mapsto \kappa_\mu(f) \in \pi_\omega(\mathfrak{A})'$ の値域に $*$-同型であり，$A, B \in \mathfrak{A}$ に対し次が成り立つ：

$$\kappa_\mu(\widehat{A})\pi_\omega(B)\Omega_\omega = \pi_\omega(B)P\pi_\omega(A)\Omega_\omega.$$

定理中にある直交測度とは任意の $\Delta \in \mathcal{B}(E_\mathfrak{A})$ に対し

$$\left(\int_\Delta \rho\, d\mu(\rho)\right) \perp \left(\int_{E_\mathfrak{A}\setminus\Delta} \rho\, d\mu(\rho)\right)$$

となる正則Borel測度のことである。$\mathfrak{B} = \mathfrak{Z}_\omega(\mathfrak{A})$ に対応する測度 μ を中心測度と呼び，μ_ω と表す。そして $\mathfrak{B}$ がある測度 ψ の中心 $\mathfrak{Z}_\psi(\mathfrak{A})$ の部分代数であるとき，μ は準中心測度と呼ばれる。中心測度は $F_\mathfrak{A}$ に準台をもち，中心測度によって状態のセクターへの分解がなされる。物理的には中心 $\mathfrak{Z}_\omega(\mathfrak{A})$ があらゆる物理量と可換な物理量の極大系であり，これを用いることにより全ての実験 (測定) 状況で共通のパラメータで状態を分解できるということを意味している。今後のために用語を準備する。$E_\mathfrak{A}$ 上の直交測度 μ に対し，

$$b(\mu) = \int_{E_\mathfrak{A}} \rho\, d\mu(\rho)$$

を μ の重心と呼ぶ。一方で，冨田分解定理の測度 μ を状態 ω の重心測度といい，この測度による状態の積分分解を重心分解と呼ぶ。この重心分解を用いる利点は次の定理にある。

定理 4 ([11, 28]). *μ, ν を $\psi, \omega \in E_\mathfrak{A}$ を重心とする $E_\mathfrak{A}$ 上の正則 Borel測度とする。$\mu, \nu \ll m$ となる $E_\mathfrak{A}$ 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，中心分解は物理的にもその意味が保障されており，状態の分解としても常に一意に存在する。その亜種としての準中心測度が量子測定理論の文脈から重要になる。当然ながら，同様の定理が量子 α-ダイバージェンスに対しても成立する：

定理 5. *φ, ψ を $\mathfrak{A}$ 上の状態で，それぞれ重心測度 μ, ν を持つとする。ある準中心測度 m で $\mu, \nu \ll m$ となるものが存在するとき，$S^{(\alpha)}(\varphi\|\psi) = D^{(\alpha)}(\mu\|\nu)$ が成り立つ。*

本来ならば，測定過程を正確に記述して実験的状況にあわせた議論を本来はすべきであるが，ひとまずはセクター理論に基づいて次節以降は確率論や統計学の基本的概念の量子版のあり方について議論を行う。

5 量子系での大偏差原理と仮説検定

統計学・情報理論および学習理論の多くの解析の出発点は大偏差原理 [5, 6, 7, 27] 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 $\psi \in E_\mathfrak{A}$ の中心測度 μ_ψ を用いる。

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

$$Y_j(\tilde{\rho})=\rho_j,\quad L_n(\tilde{\rho},A)=\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\delta_{Y_j(\tilde{\rho})}(A),\quad Q_n^{(2)}(\Gamma)=P_{\mu_\psi}(L_n\in\Gamma)$$

と定める。ただし，P_{μ_ψ} 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。

定理 6. $Q_n^{(2)}$ は $S(\cdot\|\psi)$ 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 $\Gamma\in B^w(M_1(E_{\mathcal{A}}))$ に対し，

$$-\inf\left\{S(b(\mu)\|\psi)|\ \mu\in\Gamma^o,\mu\ll\mu_\psi\right\}\le\liminf_{n\to\infty}\frac{1}{n}\log Q_n^{(2)}(\Gamma)$$
$$\le\limsup_{n\to\infty}\frac{1}{n}\log Q_n^{(2)}(\Gamma)\le-\inf\left\{S(b(\mu)\|\psi)|\ \mu\in\overline{\Gamma},\mu\ll\mu_\psi\right\}.$$

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。

$\mathfrak{A}$ は可分と仮定する。このとき，$E_{\mathcal{A}}$ 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：

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

ただし，集合 $\{A_j|A_j\neq 0,j=1,2,\cdots\}$ は $\mathfrak{A}$ の稠密な部分集合である。加えて，$B^{cy}(M_1(E_{\mathcal{A}}))$ ($M_1(E_{\mathcal{A}})$ 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 $B^w(M_1(E_{\mathcal{A}}))$ と一致する。故に，$\mathfrak{A}$ が可分なときは任意の $\{L_n\in\Gamma\}$ が可測集合になる。

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，詳しくはを参照して頂きたい。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 1. 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 $T_n:(\mathrm{supp}\,\mu_{\omega_2})^n\to\{0,1\}$ で，解釈 $\{T_n=0\}=\{H_0$ を採用 $\}=\{H_1$ を棄却 $\}$ と $\{T_n=1\}=\{H_1$ を採用 $\}=\{H_0$ 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，

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

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，常に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 7. 任意の $\varepsilon < 1$ に対し，

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

次に Chernoff 限界を考える。$\mathcal{R}_n^\pi(T_n) = \pi_1\alpha_n(T_n) + \pi_2\beta_n(T_n)$ 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 8 (Chernoff 限界).

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

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て証明ができ，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 [22].

6 量子モデル選択

本節の議論は [29] における議論とほぼ同じである。まずはモデルを定義しよう。

定義 2. $\mathbb{R}^d$ のコンパクト部分集合 Θ で添え字づけられた状態の族 $\{\omega_\theta | \theta \in \Theta\}$ は次の *3* 条件を満たすとき（統計的）モデルであると呼ばれる：

(*i*) $\theta \in \Theta$ に対し，$\mu_{\omega_\theta} \ll m$ となる $E_{\mathfrak{A}}$ 上の準中心測度 m が存在する。

(*ii*) 集合 $\left\{\rho \in E_{\mathfrak{A}} \middle| p_\theta := \dfrac{d\mu_{\omega_\theta}}{dm}(\rho) > 0\right\}$ は $\theta \in \Theta$ に依らない。

(*iii*) ω_θ は *Bochner* 可積分である。

状態の指定により様々な物理量のスペクトルと確率分布が考察可能になることがある一方，状態の指定なしに特定の確率分布の指定だけでは系を記述し切れないのが量子系特有の事例である。けれども，一切の仮定なく状態を指定することは不可能なので，望まれる性質を満たす (有限次元の) パラメータつきの状態族を想定し，パラメータの推定・調整を通じて状態を指定するという過程を経ることが必要になる。

$\rho^n = \{\rho_1, \cdots, \rho_n\}$ をデータ，$\pi(\theta)$ を Θ 上の確率密度関数，そして，$0 < \beta < \infty$ とする。

定義 3. 与えられたモデル $\{\omega_\theta\}_{\theta\in\Theta}$ に対し，

$$\omega^n_{\pi,\beta} := \frac{\displaystyle\int \omega_\theta \prod_{j=1}^{n} p_\theta(\rho_j)^\beta \pi(\theta)d\theta}{\displaystyle\int \prod_{j=1}^{n} p_\theta(\rho_j)^\beta \pi(\theta)d\theta} \tag{3}$$

で定義される状態 $\omega^n_{\pi,\beta}$ を *Bayes* エスコート予測状態と呼ぶ。

このBayesエスコート予測状態がBayesエスコート予測分布の一般化であることは容易にわかる。

Θ 上の与えられた可測関数 $G(\theta)$ に対し，$G(\theta)$ の事後平均を次で定める。

$$\langle G(\theta)\rangle^{\rho^n}_{\pi,\beta} = \frac{\displaystyle\int G(\theta) \prod_{j=1}^{n} p(\rho_j|\theta)^\beta \pi(\theta)d\theta}{\displaystyle\int \prod_{j=1}^{n} p(\rho_j|\theta)^\beta \pi(\theta)d\theta}. \tag{4}$$

ただし，$0<\beta<\infty$ である。このとき，次の等式が成り立つ：

$$\omega^n_{\pi,\beta} = \int \rho \, \langle p(\rho|\theta)\rangle^{\rho^n}_{\pi,\beta} \, dm(\rho). \tag{5}$$

ここで2つの期待値 E_ρ および E_{ρ^n} を定義する：$E_{\mathfrak{A}}$ 上の可測関数 $F(\rho)$ に対し，

$$E_\rho[F(\rho)] = \int H(\rho)q(\rho)dm(\rho). \tag{6}$$

$(E_{\mathfrak{A}})^n$ 上の可測関数 $G(\rho_1,\cdots,\rho_n)$ に対し，

$$E_{\rho^n}[G(\rho_1,\cdots,\rho_n)] = \int G(\rho_1,\cdots,\rho_n)\prod_{j=1}^{n} q(\rho_j)dm(\rho_j). \tag{7}$$

統計学及び学習理論の主要な計算及び推定の対象である概念を次に定義する。

定義 4.

(1) *Bayes* 汎化誤差 $\mathcal{E}_{bg}$ および *Bayes* 汎化損失 $\mathcal{L}_{bg}$ を以下で定める：

$$\mathcal{E}_{bg} = E_\rho\left[\log\frac{q(\rho)}{\langle p(\rho|\theta)\rangle^{\rho^n}_{\pi,\beta}}\right], \qquad \mathcal{L}_{bg} = E_\rho\left[-\log\langle p(\rho|\theta)\rangle^{\rho^n}_{\pi,\beta}\right]. \tag{8}$$

(2) *Bayes* 訓練誤差 $\mathcal{E}_{bt}$ および *Bayes* 訓練損失 $\mathcal{L}_{bt}$ を以下で定める：

$$\mathcal{E}_{bt} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\left[\log\frac{q(\rho_j)}{\langle p(\rho_j|\theta)\rangle^{\rho^n}_{\pi,\beta}}\right], \qquad \mathcal{L}_{bt} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\left[-\log\langle p(\rho_j|\theta)\rangle^{\rho^n}_{\pi,\beta}\right]. \tag{9}$$

(3) 汎関数分散 $\mathcal{V}$ を以下で定める：

$$\mathcal{V} = \sum_{j=1}^{n}\left\{\langle(\log p(\rho_j|\theta))^2\rangle^{\rho^n}_{\pi,\beta} - (\langle\log p(\rho_j|\theta)\rangle^{\rho^n}_{\pi,\beta})^2\right\}. \tag{10}$$

次の関係は容易にわかる：

$$\mathcal{E}_{bg} = \mathcal{L}_{bg} + E_\rho\left[\log q(\rho_j)\right] = D(q\|\langle p(\cdot|\theta)\rangle^{\rho^n}_{\pi,\beta}) = S(\psi\|\omega^n_{\pi,\beta}), \tag{11}$$

$$\mathcal{E}_{bt} = \mathcal{L}_{bt} + \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\log q(\rho_j).$$

ここで，共通の測度に対する密度関数 $\langle p(\rho|\theta)\rangle^{\rho^n}_{\pi,\beta}$ と $q(\rho)$ との間の相対エントロピーを $D(q\|\langle p(\cdot|\theta)\rangle^{\rho^n}_{\pi,\beta})$ で表した。 Bayes 汎化誤差は“真”の状態 ψ と Bayes エスコート予測状態 $\omega^n_{\pi,\beta}$ の間の量子相対エントロピーであり，Bayes エスコート予測状態 $\omega^n_{\pi,\beta}$ の性能を相対エントロピーにより評価することを目的として構成された量である。しかしながら，“真” の状態 ψ を本来は知りようがなく，Bayes 汎化誤差あるいは Bayes 汎化損失は計算できない。故に，“真” の状態 ψ に依らない量を用いて Bayes 汎化誤差および Bayes 汎化損失を推定もしくは近似する必要が生じる。このとき用いるのが“真”の状態 ψ に依らず，モデルとデータ ρ^n に依存した Bayes 訓練損失であって，それに合わせ Bayes 汎化損失を Bayes 訓練損失で推定することを考える。次の定理が最も望む結果を与える定理である。

定理 9.

$$E_{\rho^n}[\mathcal{L}_{bg}] = E_{\rho^n}[\mathrm{WAIC}] + o\left(\frac{1}{n}\right), \tag{12}$$

$$\mathrm{WAIC} = \mathcal{L}_{bt} + \frac{\beta}{n}\mathcal{V}. \tag{13}$$

この定理の証明には解析性などのいくつかの重要な仮定が本来必要である。この定理の主張は，Bayes 汎化損失のデータが増えていく状況下の平均 ((12) の左辺) と Bayes 訓練損失に補正項を加えたものの平均 ((12) の右辺および (13)) が $o\left(\frac{1}{n}\right)$ のオーダーのずれの範囲内で一致する，というものである。補正項は汎関数分散 $\mathcal{V}$ の $\frac{\beta}{n}$ 倍で与えられる。(12) の右辺で平均を取っている項 (13) には WAIC，widely applicable information criteria の頭文字，と名づけられており，情報量規準の一種である。この WAIC の振る舞いが良いモデルが最も“真” の状態に近いモデルであって，β もこの WAIC の適正化を通して定められる。また，“真” の状態の明確な実体もこの段階に至ってようやく実感されるものである。[30] に非常に詳しい記述があり，興味のある方はご覧になって頂きたい。

7 合成系による測定過程の記述とその活用

測定器は自立した物理的自由度であり，測定過程とは対象とする物理系と測定器との間の相互作用に他ならない。測定によって測定器で値が出力され，一方で対象系はその影響（反作用）を被る，という事実に対応する数学的記述を構築する必要がある。スペクトル分解および Gel'fand 変換はその基礎として積極的に活用される。これまでに議論した冨田分解定理に基づくセクター理論を現実的場面で適用するための方法論としても本節の議論は助けになることと思う。

1 (測定器の物理量代数). $\mathfrak{A}$ を考察対象の系の物理量代数としての C*-代数，ω を $\mathfrak{A}$ 上の状態，そして，$(\pi_\omega, \mathcal{H}_\omega, \Omega_\omega)$ を $\mathfrak{A}$ の ω に伴う GNS 表現とする。また，測定する物

理量を $A = A^* \in \pi_\omega(\mathfrak{A})''$ とする。物理量 A のスペクトル $Sp(A) := \{\lambda \in \mathbb{C} |\ A - \lambda 1$ は可逆でない $\}(\subseteq \mathbb{R})$ $C_0(A) := \{f(A) | f \in C_0(Sp(A))\}$ 合成系の物理量代数の構成は物理系のあり方（例えば，相対論的量子場）に依存して様々なものが考えられるが，C*-テンソル積 $\mathfrak{A} \otimes C_0(A)$[8]の $\pi_\omega \otimes id$ における von Neumann 代数は

$$\{(\pi_\omega \otimes id)(\mathfrak{A} \otimes C_0(A))\}'' = \pi_\omega(\mathfrak{A})'' \otimes \mathcal{A}, \tag{14}$$

であり，その中心は $\mathfrak{Z}_{\pi_\omega \otimes id}(\mathfrak{A} \otimes C_0(A)) = \mathfrak{Z}_\omega(\mathfrak{A}) \otimes \mathcal{A}$ である。ただし，$\mathcal{A} = C_0(Sp(A))''$ は $\mathcal{H}_\omega$ 上の von Neumann 代数である。

2 (測定過程). $\pi_\omega(\mathfrak{A})'' \otimes \mathcal{A}$ 上の *-同型写像 α ：として定義される。von Neumann 代数 $\pi_\omega(\mathfrak{A})'' \otimes \mathcal{A}$ の標準形を固定すれば，標準形の Hilbert 空間上のユニタリー作用素 U で $\alpha(A) = U^*AU$ $(A \in \pi_\omega(\mathfrak{A})'' \otimes \mathcal{A})$ となるものが存在する。したがって，通常の測定理論での測定相互作用が標準形を定めることで再現される。

以下では単純化のため，対象系の状態 ω を因子状態であるとする。そして，von Neumann 代数 $\mathcal{M}$ 上の *-同型写像 α に対し，$\alpha^* : E_{\mathcal{M}} \to E_{\mathcal{M}}$ を $(\alpha^*\varphi)(B) = \varphi(\alpha(B))$ $(B \in \mathcal{M})$ で定義する。物理量 A を測定する測定器と対象系との合成系において $\pi_\omega(\mathfrak{A})'' \otimes \mathcal{A}$ の *-同型写像 α が測定相互作用として実現しているとき，次の状態 $\omega_{(A,\alpha)}$ が測定後の状態として実現し，中心測度の台 supp $\mu_{\omega_{(A,\alpha(W))}}$ は以下のようになる：$X \in \mathfrak{A} \otimes C_0(A)$ に対し，

$$\begin{aligned} \omega_{(A,\alpha)}(X) &:= \alpha^*(\tilde{\omega} \otimes m_{\mathcal{A}})((\pi_\omega \otimes id)(X)) \\ &= \int \rho(X)\, d\mu_{\omega_{(A,\alpha)}}(\rho), \\ \mathrm{supp}\, \mu_{\omega_{(A,\alpha(W))}} &= \overline{\{\omega_{\alpha,a} \otimes \delta_a | a \in Sp(A)\}}. \end{aligned} \tag{15}$$

ただし， 各 $a \in Sp(A)$ に対して，$\omega_{\alpha,a}$ は α に依存して定まる対象系の状態であり，δ_a は $\delta_a(f(A)) = f(a)$ $(f \in C_0(Sp(A)))$ を満たす $C_0(A)$ 上の状態である。もし上の状態 ω が因子状態でないとき，中心測度 $\mu_{\omega_{(A,\alpha)}}$ を用いれば，対象系のセクターと物理量 A を測定する測定器が供給するセクターの双方を測定する実験状況に対応する。物理量 A の測定のみに関心がある状況では，中心測度 $\mu_{\omega_{(A,\alpha)}}$ の代わりに可換 von Neumann 代数 $\mathbb{C}1 \otimes \mathcal{A}$ に対応した $\omega_{(A,\alpha)}$ の準中心測度を用いればよい。物理量 A の理想測定 [8] を与える測定相互作用を考察すれば，

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

$$\mathrm{M}(\omega_1 \prec \omega_2) = \bigcup_{A=A^* \in \pi_\omega(\mathfrak{A})''} \mathrm{M}(A; \omega_1 \prec \omega_2),$$

$$\begin{aligned} \mathrm{M}(A; \omega_1 \prec \omega_2) = \{(A, \alpha) \in \pi_\omega(\mathfrak{A})'' \times Aut(\pi_\omega(\mathfrak{A})'' \otimes \mathcal{A}) | \\ \mathcal{A} = C_0(A)'', \mu_{\omega_{1,(A,\alpha)}} \ll \mu_{\omega_{2,(A,\alpha)}}\}, \end{aligned}$$

ここで，合成系の C*-代数は $\mathfrak{A} \otimes C_0(A)$ であって，$i = 1, 2$ に対し $\omega_{i,(A,\alpha)}$ は

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

[8][24] を参照して頂きたい。

で定義される $\mathfrak{A}\otimes C_0(A)$ 上の状態である。$\alpha \in Aut(\mathfrak{A})$ 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，$\mathrm{M}(\omega_1 \prec \omega_2) \neq \emptyset$ であるとき，$(A,\alpha) \in \mathrm{M}(\omega_1 \prec \omega_2)$ に対して，

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

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，ω_1, ω_2 それぞれの中心測度 $\mu_{\omega_{1,(A,\alpha)}}, \mu_{\omega_{2,(A,\alpha)}}$ は測定データから特定されると結論できる。$\mathrm{M}(\omega_1 \prec \omega_2) \neq \emptyset$ 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，次の予想が思い浮かぶであろう：

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

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。$\mathrm{M}(\omega_1 \prec \omega_2) \neq \emptyset$ であれば，上の式から測定データの確率分布 (測度) 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。

参考文献

[1] H. Akaike, A new look at the statistical model identification, IEEE Trans. Automatic Control **19**, 716-723 (1974).

[2] S. Amari and H. Nagaoka, *Methods of Information Geometry*, Translations of mathematical monographs; v. 191, Amer. Math. Soc. & Oxford Univ. Press (2000).

[3] H. Araki, Relative entropy for states of von Neumann algebras II. Publ. RIMS, Kyoto Univ. **13** (1977), 173-192.

[4] O. Bratteli and D.W. Robinson, *Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics* (vol. 1), Springer-Verlag (1979).

[5] I. Csiszár, A simple proof of Sanov's theorem, 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, A unified scheme of measurement and amplification processes based on Micro-Macro Duality –Stern-Gerlach experiment as a typical example–, 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, Sufficiency and relative entropy in $*$-algebras with applications in quantum systems, Pacific J. Math. **107**, 117-140 (1983).

[12] F. Hiai and D. Petz, The proper formula for relative entropy and its asymptotics in quantum probability, Commun. Math. Phys. **143**, 99-114 (1991).

[13] S. Holevo, *Probabilistic and Statistical Aspects of Quantum Theory* (North-Holland, Amsterdam, 1982).

[14] T. Ogawa and M. Hayashi, On error exponents in quantum hypothesis testing, IEEE Trans. Inform. Theory **50**, 1368-1372 (2004)

[15] T. Ogawa and H. Nagaoka, Strong converse and Stein's lemma in quantum hypothesis testing, IEEE Trans. Inform. Theory **46**, 2428-2433 (2000).

[16] I. Ojima, Order Parameters in QFT and Large Deviation, RIMS Kokyuroku **1066** 121-132 (1998), (in Japanese), http://repository.kulib.kyoto-u.ac.jp/dspace/bitstream/2433/62481/1/1066-10.pdf.

[17] I. Ojima, A unified scheme for generalized sectors based on selection criteria -Order parameters of symmetries and of thermality and physical meanings of adjunctions-, Open Sys. Inform. Dyn. **10**, 235-279 (2003).

[18] 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.

[19] I. Ojima, Meaning of Non-Extensive Entropies in Micro-Macro Duality, J. Phys.: Conf. Ser. **201** (2010) 012017.

[20] I. Ojima and K. Okamura, Large Deviation Strategy for Inverse Problem, arXiv:1101.3690.

[21] I. Ojima, K. Okamura and H. Saigo, in preparation.

[22] K. Okamura, The Quantum Relative Entropy as a Rate Function and Information Criteria, arXiv:1202.2943.

[23] M. Ohya and D. Petz, *Qunatum Entropy and Its Use*, (Springer, Berlin, 1993).

[24] M. Takesaki, *Theory of Operator Algebras I*, (Springer, 1979).

[25] M. Takesaki, *Theory of Operator Algebras II*, (Springer, 2002).

[26] A. Uhlmann, Relative entropy and the Wigner-Yanase-Dyson-Lieb concavity in an interpolation theory, Commun. Math. Phys. **54** (1977), 21-32.

[27] S. Watanabe, *Algebraic geometry and statistical learning theory*, (Cambridge University Press, 2009).

[28] 大矢 雅則, 梅垣 寿春,『確率論的エントロピー』,『量子論的エントロピー』, 共立出版, (1983,1984).

[29] 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).

[30] 渡辺 澄夫,『ベイズ統計の理論と方法』, コロナ社, (2012).