

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

坂下 達哉^{†1} 片桐 孝洋^{†2} 長岡 浩司^{†1}

本論文ではテンソル積の既約分解を用いた 2×2 サイズの密度行列の量子 i.i.d. 状態に対する仮説検定問題の数値的手法を扱う。特に、誤り確率の計算に現れる数値誤差について分析を行った。その結果、既約成分ごとの寄与の相対関係が重要であることを見出した。また、多倍長桁数と固有値分解の収束判定に用いる ϵ を変えたときに、数値誤差がどのように現れるかを考察した。

A Numerical Method for Hypothesis Testing of Quantum i.i.d. States and Its Error Analysis

TATSUYA SAKASHITA,^{†1} TAKAHIRO KATAGIRI^{†2}
and HIROSHI NAGAOKA^{†1}

In this paper, we deal with a numerical method for hypothesis testing of quantum i.i.d. states for 2×2 density matrices based on the irreducible decomposition of tensor products. Especially, we analyze numerical errors appearing in computation of the error probability. As a result, we found out that the mutual relation among the contributions of irreducible elements is important. In addition, we studied how numerical error appears for different settings of multiple-precision and the convergence criterion ϵ of eigenvalue routine.

^{†1} 電気通信大学
The University of Electro-Communications

^{†2} 東京大学
The University of Tokyo

1. はじめに

複数のデータが独立に同じ分布に従って生成されるという状況は i.i.d. (independent and identically distributed) と呼ばれ、統計学や情報理論などにおいて基本的な仮定として想定されることが多い。特に、データの個数 (i.i.d. の次数とも呼ばれる) n を大きくしていったときの極限 $n \rightarrow \infty$ における漸近的性質は、理論・応用の双方にとって重要である。そのような性質を研究する際、理論的・数学的手法と並んで、計算機を用いた数値シミュレーション手法はきわめて有効かつ不可欠な手段となっている。近年、量子情報理論においても、 n 個の量子系が互いに独立に同じ状態に置かれているという量子 i.i.d. 状態に関してさまざまな問題設定がなされ、その漸近的性質が研究されている。その際、測定についても状態と同様の独立性を仮定すると、ほぼ通常確率論的問題に帰着されてしまい、量子系固有のおもしろさは失われてしまう。そのため、通例はそのような仮定を排し、 n 個の量子系からなる全系に対して原理的に可能なあらゆる測定を考察の対象とする。このような一般的測定のもとでの測定値の分布は多くの場合 i.i.d. とはほど遠い性質を持つ。この事実は量子情報理論特有の数学的困難の源の一つであると同時に、 n を大きくしていったときの数値シミュレーションを著しく困難にする。たとえば、本論文で扱うような 2×2 密度行列からなる量子 i.i.d. 状態の仮説検定問題を直接的な方法で計算しようとする、 $2^n \times 2^n$ という非常に大きなサイズの行列の固有値問題を解く必要が生じる。しかし、テンソル積の既約分解^{1),2)} という数学的概念に基づいた計算手法を用いると、最大サイズ $(n+1) \times (n+1)$ までのいくつかの行列の固有値問題を解くことによって同じ計算が可能になる。

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、Hayashi³⁾ 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。Nagaoka⁴⁾ 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出し、文献 4) 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⁵⁾、堂嶋ら⁶⁾ 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。これらの予備的先行研究を受け、我々は、量子 i.i.d. 状態に関する数値的計算手法の確立に向けて、本手法の計算速度や精度に関する基礎的知見を得るための研究を開始した。これまでに、MPI で並列化しスーパーコンピュータ上で多倍長演算を用いることにより、 $n = 1,200$ 程度までの誤り確率の計算が可能であることを示すとともに^{7),8)}、新種の量子中心極限定理という数学的予想の検証に応用した⁷⁾。本論文では、この

手法によって誤り確率を計算する際に典型的に現れる数値誤差の問題に焦点を当て、その要因を分析する。

本論文で扱う問題の $n \rightarrow \infty$ における極限は量子 Hoeffding の定理としてすでに明らかにされている^{9),10)}。そのため、数値計算によって示された結果自体の量子情報理論における意義は薄いですが、逆に、数値計算の信頼性を議論するうえでは理論的極限式が分かっていることは大きな利点となる。理論的に既知の問題を通して本手法の信頼性についての知見を蓄積しておくことは、今後、同手法をさまざまな未知の問題に適用していくうえで大きな意義を有するものと考えられる。

本論文の構成は以下のとおりである。まず、2 章では計算例を紹介するとともに、以降の議論の動機付けを行う。3 章では量子仮説検定について必要最小限の事柄を記述する。4 章では、テンソル積の既約分解を紹介し、誤り確率の計算に適用する。5 章では、使用する計算機環境と数値計算ライブラリについて述べる。6 章でテンソル積の直接計算を行った場合と既約分解を用いた場合の計算時間を比較する。7 章において、扱う行列の固有値分布について述べ条件数を調べる。8 章で QR 法の収束速度について議論する。9 章では誤り指数の計算における数値誤差の現れ方を紹介する。10 章で数値誤差の原因として考えられる原因を列挙し、11 章では誤り指数の数値誤差を既約成分ごとの寄与の観点から論じる。12.1 節では、固有値分解の数値誤差が純粋に各既約成分に与える影響を観察し、12.2 節、12.3 節でそれぞれ桁数と ε が不足している場合について数値誤差の原因を調べる。13 章では、既約成分ごとに固有値分解によらない上界・下界を導出し、数値誤差を理論的に評価する。14 章でまとめを行う。

2. 本論文で扱う問題と計算例

本章では、本論文で扱う問題とその計算例を紹介し、以降の考察の動機付けを行う。問題の物理的意味および我々が用いたアルゴリズムについては後章で述べる。

最初いくつかの準備を行う。まず、行列 $A : d \times d$ サイズと $B : d' \times d'$ サイズのテンソル積を

$$A \otimes B := \begin{bmatrix} a_{11}B & \cdots & a_{1d}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{d1}B & \cdots & a_{dd}B \end{bmatrix} : dd' \times dd' \text{ サイズ}$$

と定義する。また、 A の n 次テンソル積を

$$A^{\otimes n} := A \otimes \cdots \otimes A : d^n \times d^n \text{ サイズ}$$

と定める。次に、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なる正規直交基底をそれぞれ $\{\lambda_i\}, \{x_i\}$ (縦ベクトル) とおくと、 A のスペクトル分解

$$A = \sum_i \lambda_i x_i x_i^* \tag{1}$$

が得られる。ただし、 $*$ はエルミート共役 (共役転置) を表す。これに対し、

$$\{A > 0\} := \sum_{\lambda_i > 0} x_i x_i^* \tag{2}$$

と定義する。 $\{A > 0\}$ 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。

半正定値かつトレースが 1 であるような 2 つの 2×2 エルミート行列 ρ, σ が与えられたとする。ここでは一例として、

$$\rho = U \left(\frac{\pi}{4} \right)^* \begin{bmatrix} 0.1 & 0 \\ 0 & 0.9 \end{bmatrix} U \left(\frac{\pi}{4} \right), \quad \sigma = U \left(\frac{\pi}{6} \right)^* \begin{bmatrix} 0.95 & 0 \\ 0 & 0.05 \end{bmatrix} U \left(\frac{\pi}{6} \right) \tag{3}$$

を考える。ただし、

$$U(\theta) := \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \tag{4}$$

とする。このとき、任意の実数 a および自然数 n に対し

$$\beta_n(a) := \text{Tr}[\sigma^{\otimes n} \{\rho^{\otimes n} - e^{na} \sigma^{\otimes n} > 0\}] \tag{5}$$

$$r_n(a) := -\frac{1}{n} \log \beta_n(a) \tag{6}$$

とおく。我々の関心は、 n を大きくしていったときのこれらの量の漸近的挙動にある。

図 1 にいくつかの n に対する計算結果を示す。図中、「 \cdots 桁」とあるのは多倍長計算¹¹⁾を行った際の仮数部桁数の十進数表示であり、 ε は QR 法によって固有値計算を行った際の収束判定条件を表すパラメータである (5 章参照)。また $r(a)$ は

$$r(a) = \max_{s \in \mathbb{R}} \{sa - \psi(s)\}, \quad \text{where } \psi(s) = \log \text{Tr}[\rho^s \sigma^{1-s}] \tag{7}$$

という計算式に従って描いた曲線である。 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。

*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⁴⁾。

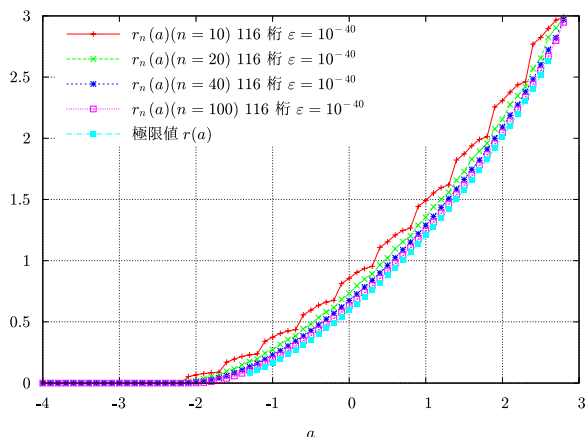


図 1 誤り指数 $r_n(a)$ が極限值 $r(a)$ に近づいていく様子
Fig.1 Convergence of $r_n(a)$ to $r(a)$.

実は、極限式

$$r(a) = \lim_{n \rightarrow \infty} r_n(a) \quad (8)$$

が一般的に成立することは数学的に証明されている(3章参照). ただし, その証明は決してやさしいものではなく, 極限式は永年にわたって量子情報理論における未解決問題の1つとして知られていた. このような問題に対して, 数学的な証明あるいは反証が容易に見つからない場合, 数値計算を用いて問題に対する見通しを得ることは大きな意義があると考えられるが, これまで, そのような試みはほとんどなされてこなかった. その一番の理由は, この種の問題を数値的に扱うには, n の指数オーダーのサイズの行列に対する固有値分解や各種の演算が必要となるからである. 我々の場合も $\rho^{\otimes n} - e^{na}\sigma^{\otimes n}$ という $2^n \times 2^n$ 行列の固有値分解が必要になる. しかし, この行列がテンソル積 $\rho^{\otimes n}, \sigma^{\otimes n}$ の線形結合で表されているという特殊事情により, 同じ計算を, 最大 $(n+1) \times (n+1)$ のいくつかの行列の固有値分解に帰着することができる(4章参照). ただし, それらの行列の固有値は指数的なばらつきを有するため(7章参照), 固有値分解を行う際には桁数や停止条件に関して特に注意が必要となる. 図1では十分な余裕を持った設定のもとでの計算結果を示したが, これをより甘い設定にしたときにどのような現象が起きるかということをも9章以降で調べていく.

3. 量子仮説検定

本章では, 前章で述べた問題の意味を明らかにするために, 量子仮説検定に関する必要最小限の基本的事項を紹介する^{(3),(4),(9),(10),(12),(13)}.

量子力学では一般に, 量子状態はトレースが1の半正定値行列(密度行列と呼ばれる) ρ で表される. 測定は半正定値行列の集合 $M = \{M_j\}_{j=0}^K$ で, $\sum_{j=0}^K M_j = I$ (単位行列) を満たすもの(POVMと呼ばれる)で表される. ここで添字 j は測定値を表す. 状態 ρ のもとで測定 M を行ったとき, 測定値 j が得られる確率は

$$P_\rho^M(j) := \text{Tr}[\rho M_j]$$

で表される. 我々の関心は, n 個の量子系が独立に同じ状態 ρ におかれているという量子 i.i.d. 系にある. この場合, 全系の状態は ρ の n 次テンソル積 $\rho^{\otimes n} = \rho \otimes \dots \otimes \rho$ で表される.

今, 2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. これは通常の統計学における2つの i.i.d. 単純仮説の検定問題に相当する. 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で表すことにすると, 判定のプロセスは2値測定 $M = \{M_0, M_1\}$ で表される. ただし M_0, M_1 は, $\rho^{\otimes n}, \sigma^{\otimes n}$ と同じサイズの半正定値行列である. ここで $M_0 + M_1 = I$ が成り立つので, M を1つの行列 T で指定することができる. この T を検定と呼ぶ. 特に, 任意の実数 a に対して $T = \{\rho^{\otimes n} - e^{na}\sigma^{\otimes n} > 0\}$ と表される検定は古典的な尤度比検定に相当し, 統計学におけるネイマン・ピアソンの定理に対応する事実として, 誤り確率の最小化を議論する際にはこの形の検定だけを考えれば十分であることが知られている. この検定を用いるとき, $\rho^{\otimes n}$ が真であるが $\sigma^{\otimes n}$ が真と判定する誤り確率と, $\sigma^{\otimes n}$ が真であるが $\rho^{\otimes n}$ が真と判定する誤り確率はそれぞれ

$$\alpha_n(a) := \text{Tr}[\rho^{\otimes n} \{\rho^{\otimes n} - e^{na}\sigma^{\otimes n} \leq 0\}] = 1 - \text{Tr}[\rho^{\otimes n} \{\rho^{\otimes n} - e^{na}\sigma^{\otimes n} > 0\}] \quad (9)$$

$$\beta_n(a) := \text{Tr}[\sigma^{\otimes n} \{\rho^{\otimes n} - e^{na}\sigma^{\otimes n} > 0\}] \quad (10)$$

と表される. この $\beta_n(a)$ が式(5)で導入したものにほかならない. $\alpha_n(a), \beta_n(a)$ はそれぞれ第1種, 第2種誤り確率と呼ばれるが, 以降は主として $\beta_n(a)$ についてのみ議論するので, これを単に誤り確率と呼ぶことにする.

誤り確率 $\beta_n(a)$ の $n \rightarrow \infty$ における漸近的挙動に関して以下のことが知られている. まず,

$$D(\sigma \parallel \rho) := \text{Tr}[\sigma(\log \sigma - \log \rho)] \quad (11)$$

という量(量子相対エントロピーと呼ばれる)を考えると, $a > -D(\sigma \parallel \rho)$ のもとで $\beta_n(a)$ は0に収束する. さらに, このときの収束速度に関して

に、既約成分 A_k の固有ベクトル $\{u_{n,k,j}\}_j$ は、 $U^{\otimes n}$ の既約成分

$$U_k = [u_{n,k,0}, u_{n,k,1}, \dots, u_{n,k,r}] \quad (22)$$

として求められる。

既約分解 (18) を用いることで、誤り確率 $\beta_n(a)$ は

$$\beta_n(a) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} m_k \beta_{n,k}(a) \quad (23)$$

と表される。ただし、

$$\beta_{n,k}(a) := \text{Tr}[\sigma_k \{\rho_k - e^{na} \sigma_k > 0\}] \quad (24)$$

$$= \sum_{\lambda_{n,k,i} > 0} v_{n,k,i}^* \sigma_k v_{n,k,i} \quad (25)$$

である。ここで、 $\{\rho_k\}$ と $\{\sigma_k\}$ はそれぞれ $\rho^{\otimes n}$ と $\sigma^{\otimes n}$ の既約成分であり、 $\{\lambda_{n,k,i}\}_i$ と $\{v_{n,k,i}\}_i$ はそれぞれ $\rho_k - e^{na} \sigma_k$ の固有値と正規直交化された固有ベクトルである。以降では、 $m_k \beta_{n,k}(a)$ を $\beta_n(a)$ の既約成分 k の寄与と呼ぶことにする。

式 (25) は、既約成分 σ_k のスペクトル分解を

$$\sigma_k = \sum_j \gamma_{n,k,j} u_{n,k,j} u_{n,k,j}^* \quad (26)$$

とすると、

$$\beta_{n,k}(a) = \sum_{\lambda_{n,k,i} > 0} \sum_j \gamma_{n,k,j} |u_{n,k,j}^* v_{n,k,i}|^2 \quad (27)$$

と表せる。 σ_k のスペクトル分解は式 (21), (22) から容易に計算でき、数値精度の面でも、式 (25) を直接計算するより式 (27) を用いる方が有利である。

図 2 で式 (23), (27) の計算手順を与える。ここで、 ρ_k と σ_k の固有値・固有ベクトルは式 (21), (22) から計算できるが、行列 $\rho_k - e^{na} \sigma_k$ の固有値・固有ベクトルは既約分解の理論からは分からないので、図 2 のステップ (1)(d) では固有値ルーチンを用いて求めていることに注意を要する。図 2 において、既約成分 $\{\rho_k\}$, $\{\sigma_k\}$ と $\{\sigma_k\}$ の固有値 $\{\gamma_{n,k,j}\}_j$ および固有ベクトル $\{U_k\}$ はすべての a について共通なので、1 度だけ計算すればよいことに留意する。図 2 の手順において、 k に対する処理は独立なので、並列化を施している。並列化についての詳細は他の機会に譲る。

この問題では、 ρ , σ は実対称行列に限っても一般性を失わないことが知られているので、実際の計算では ρ , σ は実対称行列のみを扱う。したがって、固有値分解にも実対称行列向

- (1) 各 k について、以下を行う。
- (a) 式 (19), (20) を用いて ρ_k, σ_k を計算する。
 - (b) 式 (21) を用いて σ_k の固有値 $\{\gamma_{n,k,j}\}_j$ を計算する。
 - (c) 式 (22) に基づき式 (19), (20) を用いて、 σ_k の固有ベクトルからなる行列 $U_k = [u_{n,k,0}, u_{n,k,1}, \dots, u_{n,k,r}]$ を計算する。
 - (d) 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 $\{v_{n,k,i}\}_i$ を固有値ルーチンで求める。
 - (e) $\beta_{n,k}(a) = \sum_{\lambda_{n,k,i} > 0} \sum_j \gamma_{n,k,j} |u_{n,k,j}^* v_{n,k,i}|^2$ を求める。
- (2) $\beta_n(a) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} m_k \beta_{n,k}(a)$ を求める。

図 2 $\beta_n(a)$ の計算手順

Fig. 2 The calculation procedure of $\beta_n(a)$.

けのルーチンを用いる。なお、式 (19), (20) による既約成分の計算は計算時間・精度ともに問題にならない。双方でボトルネックになるのは固有値解法である。

5. 計算機環境と数値計算ライブラリ

使用した計算機環境は以下のとおりである。

- 計算機：Power Edge T410 (Intel Xeon E5530 2.40 GHz)
- コンパイラ：Intel C++ compiler (version 11.1)
- コンパイラオプション：-xSSE -O -ipo -parallel
- C++テンプレート線形代数ライブラリ：Eigen2¹⁵⁾
- 多倍長演算ライブラリ：Exflib¹¹⁾
- 固有値分解ルーチン (Householder QR 法): LAPACK (Intel MKL) dsyev 関数 (倍精度の場合), Eigen2 の SelfAdjointEigenSolver クラス (多倍長の場合)

ここで、Eigen2 には Exflib の多倍長型を追加し、多倍長型を成分に持つ行列を扱えるようにした。

Eigen2 の SelfAdjointEigenSolver クラスについて述べる。まず、多倍長化すると動かなかったため、三重対角化関数を行う Tridiagonalization クラスを文献 16) のルーチンに置き換えた。次に、三重対角化を行う前に行列をその最大絶対値成分で正規化することにした。また、Eigen2 の QR 法の収束判定は次のような標準的な方法で行っている¹⁷⁾。三重対

角化した行列の対角成分を $[d_1, \dots, d_N]$, 副対角成分を $[e_1, \dots, e_{N-1}]$ とすると, 右下隅は

$$\begin{bmatrix} d_{N-1} & e_{N-1} \\ e_{N-1} & d_N \end{bmatrix} \quad (28)$$

のようになる. このとき, ε をあらかじめ決めておき, 次のように収束判定を行う.

```

if  $|e_{N-1}| < (|d_{N-1}| + |d_N|)\varepsilon$  then
     $N \leftarrow N - 1.$     減次
end if
    
```

さらに, 原点シフトには標準的な Wilkinson implicit shift^{17),18)} を用いている.

6. テンソル積の直接計算と既約分解による計算時間の比較

本章では, テンソル積を直接計算した場合と既約分解を用いた場合の計算時間を比較する. $a = 0$ の場合について 2 つの場合の計算時間を図 3 に示す. ここで, 計算は 116 桁, $\varepsilon = 10^{-40}$ で行った. なお, 双方とも並列化は施さず, 計算時間の計測は clock 関数を用いて行った. 図 3 を見ると, 赤色のグラフは n の増加とともに指数的に上昇する一方, 緑色のグラフは多項式オーダであることが分かる. 以上より, 既約分解を用いた計算法は計算時間を削減するうえできわめて有効であることが分かる.

7. 既約成分の固有値分布と条件数

本章では, 固有値分解を行う行列 $\rho_k - e^{na}\sigma_k$ の固有値分布について述べ, 条件数を計算して多倍長演算が必要であることを示す.

まず, 既約成分 ρ_k の固有値分布に基づいた予備的考察を行い, 行列 $\rho_k - e^{na}\sigma_k$ の固有値分布に関する大雑把な見通しを示しておく. 密度行列 ρ の固有値を λ, μ とすると, $\text{Tr} \rho = \lambda + \mu = 1$ であるから $\mu = 1 - \lambda$ である. 式 (21) より, 既約成分 ρ_k の固有値は

$$\begin{aligned} & \lambda^{n-k-j}(1-\lambda)^{k+j} \\ & = \lambda^{n-k}(1-\lambda)^k \left(\frac{1-\lambda}{\lambda}\right)^j \quad (j = 0, 1, \dots, r = n - 2k) \end{aligned} \quad (29)$$

である. 式 (29) より, $\lambda = 0.5$ の場合を除いて, 既約成分 ρ_k は指数的にばらついた単純固有値を持つことが分かる.

密度行列 ρ と σ が可換のとき, 行列 $\rho_k - e^{na}\sigma_k$ の固有値分布について述べる. このとき, $\rho^{\otimes n}$ と $\sigma^{\otimes n}$ も可換なので既約成分 ρ_k と σ_k も可換であるため, $\rho_k - e^{na}\sigma_k$ の固有値

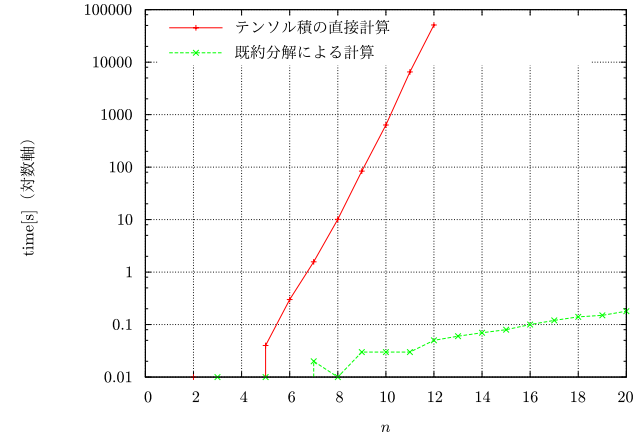


図 3 計算時間: テンソル積の直接計算 vs. 既約分解による計算 ($a = 0$)
 Fig. 3 Computation time: The direct calculation for tensor product vs. the calculation by irreducible decomposition ($a = 0$).

は, ρ_k の固有値と σ_k の固有値の e^{na} 倍の差である. ここで, この差は ρ_k の固有値と σ_k の対応する固有値でとることに注意が必要である. よって, 単独の ρ_k の場合と同様に, 行列 $\rho_k - e^{na}\sigma_k$ の固有値は単純固有値で, その絶対値は指数的にばらついていることが分かる.

非可換の一般の ρ, σ に対して, 理論的に分かっていることは少ないが, 可換の場合と同様に $\rho_k - e^{na}\sigma_k$ は指数的にばらついた単純固有値を持つことが予想される. このように指数的に固有値がばらついた行列の固有値・固有ベクトルの計算では, 絶対値の小さな固有値とその固有ベクトルに数値誤差が起こりやすいことが知られている.

次に, 行列 $\rho_k - e^{na}\sigma_k$ の条件数を計算し, 固有値問題の数値的難易度について検討する. 条件数の定義は, N 次元エルミート行列 A に対して, A の固有値 $\{\nu_i\}$ を

$$|\nu_1| \geq \dots \geq |\nu_N|$$

となるように並べたときに,

$$\text{cond}(A) := |\nu_1|/|\nu_N|$$

である. 計算に用いる密度行列は

$$\rho = U\left(\frac{\pi}{4}\right)^* \begin{bmatrix} r & 0 \\ 0 & 1-r \end{bmatrix} U\left(\frac{\pi}{4}\right), \quad \sigma = U\left(\frac{\pi}{6}\right)^* \begin{bmatrix} 0.75 & 0 \\ 0 & 0.25 \end{bmatrix} U\left(\frac{\pi}{6}\right) \quad (30)$$

である. ここで, $U(\theta)$ の定義は式 (4) による. 乱数行列 (rand 関数を用いて $-1 \sim 1$ の乱

数で各成分を生成した実対称行列)と最大既約成分 $\rho_0 - e^{n\alpha}\sigma_0$ の条件数を図 4 に掲げる。ただし、横軸をテンソル次数 n にとっているがそれは次のような意味である。たとえば、 $n = 100$ の場合には最大既約成分のサイズは 101 次元であるので、乱数行列のサイズも 101 次元とする。ここで、計算は 212 桁、 $\varepsilon = 10^{-211}$ で行った。図 4 より、以下の考察結果を得た。

- 乱数行列の場合 (水色のグラフ) と違って、最大既約成分の場合 (水色以外のグラフ) は n が大きくなるほど条件数が指数的に増加していることが分かる。

以上の考察より、テンソル次数 n が増加すると倍精度演算で保証される精度を条件数の観点から超えることが予想できるため、我々の問題では多倍長演算が必要である。また、テンソル次数 n が大きくなるほど多倍長桁数を多くとらなければならないことが分かる。図 4 において、最大既約成分の場合どうしを比較すると次のことが分かる。

- $a = -1$ のとき、条件数は $r = 0.9$ と固有値の比が大きい場合 (緑色のグラフ) の方が $r = 0.6$ と固有値の比が小さい場合 (赤色のグラフ) より大きい。このように、 r による違いがはっきり現れるのは、 $a = -1$ のときは $\rho_0 - e^{n\alpha}\sigma_0$ のうち ρ_0 が優勢であるからと思われる。
- $a = 1$ のとき、条件数は $r = 0.6$ の場合 (青色のグラフ) と $r = 0.9$ の場合 (桃色のグラフ) のグラフは重なっており違いはみられない。これは、 $a = 1$ のときは、 $\rho_0 - e^{n\alpha}\sigma_0$ のうち $-e^{n\alpha}\sigma_0$ が優勢であるからと思われる。

次章では、QR 法の繰返し回数についてはこの結果が逆に現れることをみる。

8. QR 法の収束速度について

前章で述べたように、実対称行列 $\rho_k - e^{n\alpha}\sigma_k$ の固有値が指数的にばらついていることは精度の面では不利である。だが、これは QR 法を用いたときの収束速度には有利に働く。本章では、この根拠を述べ QR 法の収束速度に関する実験を行う。

まず、原点シフトを用いない QR 法では、絶対値で降順に並べたときに隣り合う固有値の絶対値の比の最大値に収束速度が比例する¹⁹⁾ ということが知られている。これより、実対称行列 $\rho_k - e^{n\alpha}\sigma_k$ の固有値が指数的にばらついているほど収束速度は速くなること分かる。

次に、この収束速度の議論が原点シフトとして Wilkinson implicit shift を用いた場合にも成り立っているかを調べる実験を試みる。

そのため、図 5 に横軸にテンソル次数 n をとって描いた QR 法の繰返し回数のグラフを

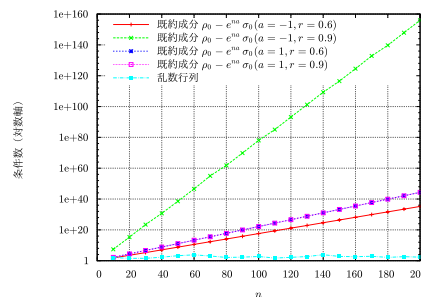


図 4 乱数行列と行列 $\rho_0 - e^{n\alpha}\sigma_0$ の条件数
Fig. 4 Condition numbers for the random matrix and the irreducible element $\rho_0 - e^{n\alpha}\sigma_0$.

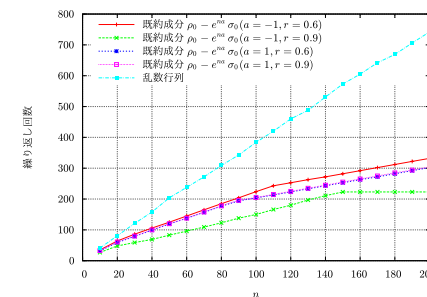


図 5 乱数行列と行列 $\rho_0 - e^{n\alpha}\sigma_0$ の QR 法の繰返し回数
Fig. 5 Iteration numbers of the QR method for the random matrix and the irreducible element $\rho_0 - e^{n\alpha}\sigma_0$.

示す。ここで、用いる行列や桁数、 ε は前章と同じである (密度行列は式 (30) を用い、212 桁、 $\varepsilon = 10^{-211}$ である)。図 5 より、以下の考察結果を得た。

- 乱数行列の場合 (水色のグラフ) は最大既約成分の場合 (水色以外のグラフ) よりも繰返し回数が多いことが分かる。
- この観察から、計算速度の面で指数的にばらついた固有値を持つ行列を扱う我々の問題には QR 法が適しているといえる。
- $a = -1$ のとき、繰返し回数は $r = 0.9$ と固有値の比が大きい場合 (緑色のグラフ) の方が $r = 0.6$ と固有値の比が小さい場合 (赤色のグラフ) より少ない。
- $a = 1$ のとき、繰返し回数は $r = 0.6$ の場合 (青色のグラフ) と $r = 0.9$ の場合 (桃色のグラフ) のグラフは重なっており違いはみられない。

このように、前章の条件数の考察とは逆に、 ρ の固有値の比が大きくなるほど、QR 法の収束速度については有利に働くことが分かる。また、以上の考察から、前段の収束速度の議論は Wilkinson implicit shift を用いた場合にも成り立つと考えられる。

9. 誤り指数 $r_n(a)$ の計算における数値誤差の現れ方

本章では、誤り指数 $r_n(a)$ の計算における数値誤差の現れ方についてみる。

まず、 $n = 100$ の場合の $r_n(a)$ を桁数と ε を変えて計算した結果を図 6 に掲載する。図 6 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 $a = 1.3$,

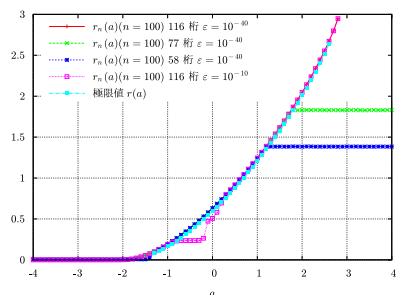


図 6 桁数や ε を変えたときの誤り指数 $r_n(a)$ ($n = 100$)
Fig. 6 The error exponent $r_n(a)$ ($n = 100$) for different precision and ε .

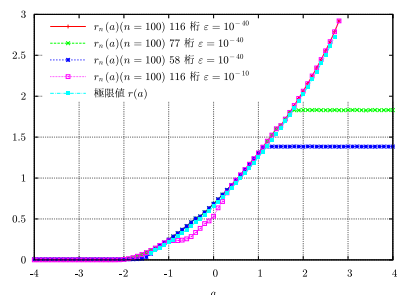


図 7 誤り指数 $r_n(a)$ (可換の場合, $n = 100$)
Fig. 7 The error exponent $r_n(a)$ (a commutative case, $n = 100$).

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 が $-0.8 \sim 0.2$ あたりで乱れている。式 (13) より $r(a) < r_n(a)$ が分かるので、 $r_n(a)$ 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。これらの誤差の原因は、7 章で述べたように、我々が扱う行列の固有値が指数的にばらついており、精度が悪くなりやすいためである。

次に、

$$\rho = U\left(\frac{\pi}{6}\right)^* \begin{bmatrix} 0.1 & 0 \\ 0 & 0.9 \end{bmatrix} U\left(\frac{\pi}{6}\right), \quad \sigma = U\left(\frac{\pi}{6}\right)^* \begin{bmatrix} 0.95 & 0 \\ 0 & 0.05 \end{bmatrix} U\left(\frac{\pi}{6}\right) \quad (31)$$

の場合について、桁数や ε を変えたときの $r_n(a)$ と極限值 $r(a)$ を図 7 に掲載する。ただし、 $U(\theta)$ の定義は式 (4) による。ここで、式 (31) の ρ, σ では固有ベクトルが共通であることに注意する。このような状況を ρ と σ は可換であるという（式 (3) においては固有ベクトルが共通ではないので、 ρ と σ は非可換であると呼ばれる）。図 7 は図 6 と同様の誤差の現れ方をしていることが分かる。また、他の ρ, σ でも同様のグラフの乱れが起きることを確認している。そこで、次章以降では対象を図 6 の場合に絞って、桁数が足りないときや ε が甘いときの誤差の出方を考察する。

10. 数値誤差の要因

9 章の図 6 において、誤り指数 $r_n(a)$ は計算桁数が足りない場合や ε が甘い場合に数値誤差が生じることを観察した。以降の章でそれらの誤差の要因について分析していくが、そ

れに先だって本章では、図 2 で掲げた $\beta_n(a)$ の計算手順においてどのステップが数値誤差の要因になりうるかを検討する。

- (1) ステップ (1)(a) の既約成分の計算精度は問題なかった（たとえば、既約成分 ρ_k のトレースは式 (21) で述べた固有値の和に計算桁数の分だけ一致することを確認した）。
- (2) ステップ (1)(d) の固有値分解で数値誤差が生じていることが分かっている。
- (3) ステップ (1)(e)、ステップ (2) ではステップ (1)(d) の固有値分解の数値誤差に起因する数値誤差が生じることになる。これを 12 章で論じる。
- (4) ある k について既約成分の寄与 $m_k \beta_{n,k}(a)$ に数値誤差が生じた場合に、誤り指数 $r_n(a)$ に数値誤差が生じるかどうかは、それが支配的な既約成分の寄与に影響を及ぼすかどうかによる。このことを 11 章でみる。

なお、ステップ (1)(e) における内積に含まれる総和および正固有値 $\lambda_{n,k,i} > 0$ についての総和、ステップ (2) における各既約成分 k の寄与に対する総和については情報落ちは起こりにくい。なぜなら、後でみるように、総和をとる数値の指数オーダがすべて異なりわずかな項のみが寄与するためである。よって、ソートして絶対値の小さなものから足し上げるなどの工夫をする必要はない。

11. 既約成分の寄与 $m_k \beta_{n,k}(a)$ の数値誤差が $r_n(a)$ に与える影響

本章では、既約成分ごとの寄与 $m_k \beta_{n,k}(a)$ の数値誤差とその総和である誤り確率 $\beta_n(a)$ の数値誤差との関係について考察する。

まず、本章を理解するうえでポイントになる支配的な既約成分という概念を導入する。そのため、式 (3), (4) の ρ, σ に対して、横軸に既約成分の番号 k をテンソル次数 n で正規化した値をとって、

$$r_{n,k}(a) := -\frac{1}{n} \log\{m_k \beta_{n,k}(a)\} \quad (32)$$

の $a = 0$ に対する計算結果を図 8 に掲げる。以後、式 (32) の $r_{n,k}(a)$ を誤り指数 $r_n(a)$ の部分指数と呼ぶ。ここで、以下の点に注意する。

- $\dim A_k = n + 1 - 2k$ であるから、図 8 では左側ほど大きな既約成分になっている。
- 負の符号をとっているため、 $r_{n,k}(a)$ が小さいと $\beta_{n,k}(a)$ が大きくなる。
- n を大きくしていくにつれて $r_{n,k}(a)$ は、 k/n を連続変数とする関数に収束していくことが予想される。

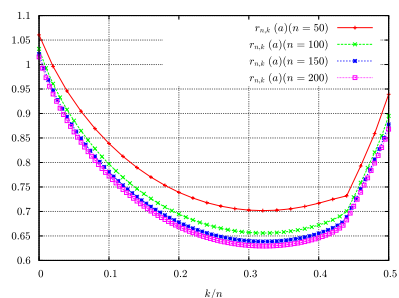


図 8 n を大きくしたときの部分指数 $r_{n,k}(a)$ ($a = 0$)
Fig. 8 The partial exponent $r_{n,k}(a)$ for different n 's ($a = 0$).

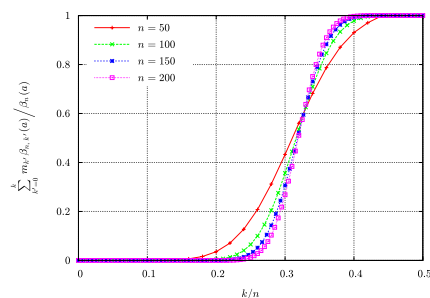


図 9 既約成分ごとの寄与 $m_k \beta_{n,k}(a)$ を正規化した累積分布 ($a = 0$)
Fig. 9 The cumulative distribution of normalized contribution of irreducible elements $r_{n,k}(a)$ ($a = 0$).

- 式 (23), (32) より,

$$\beta_n(a) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} m_k \beta_{n,k}(a) = \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} e^{-nr_{n,k}(a)} \quad (33)$$

であるから、特に n を大きくしていったとき、実質上、一番小さな $r_{n,k}(a)$ およびその周辺の項だけが $\beta_n(a)$ に寄与することが分かる。そこで、このような最小あるいはそれに近い $r_{n,k}(a)$ を与える既約成分を支配的な既約成分と呼ぶことにする。

支配的な既約成分について考察するために、 $\beta_n(a)$ で正規化した累積分布

$$\sum_{k'=0}^k m_{k'} \beta_{n,k'}(a) / \beta_n(a) \quad (34)$$

を大きな n について計算した結果を図 9 に示す。図 9 において、 n が大きくなるほど、グラフはステップ関数に近づいていき $k/n = 0.34$ 近辺の狭い範囲の既約成分に集中していくのが分かる。これは上記の考察を裏付けている。支配的な既約成分という概念は量子 i.i.d. 状態の理論的課題としても興味深い。

次に、数値誤差を支配的な既約成分の観点から考察する。以降は、116 桁、 $\varepsilon = 10^{-40}$ で計算した結果を信頼できる値として、計算桁数が足りない場合や ε が甘い場合の数値誤差について調べる。つまり、多倍長 116 桁、 $\varepsilon = 10^{-40}$ の場合からのずれを数値誤差と見なすことにする。図 6 に対応する桁数や ε に対して $a = 1.6$ の場合について描いた部分指数

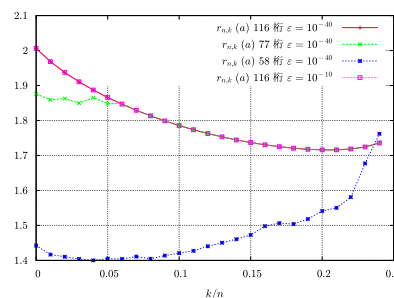


図 10 部分指数 $r_{n,k}(a)$ ($n = 100, a = 1.6$)
Fig. 10 The partial exponent $r_{n,k}(a)$ ($n = 100, a = 1.6$).

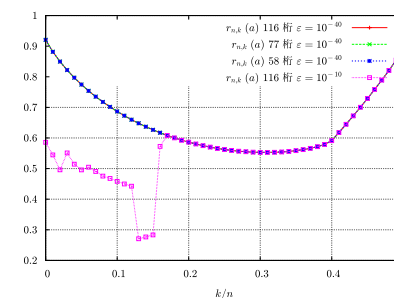


図 11 部分指数 $r_{n,k}(a)$ ($n = 100, a = -0.2$)
Fig. 11 The partial exponent $r_{n,k}(a)$ ($n = 100, a = -0.2$).

$r_{n,k}(a)$ のグラフを図 10 に掲げる (図 6 とグラフの色も対応している)。図 10 において、 $k/n = 0 \sim 0.05$ で桃色と赤色のグラフが重なっており、 $k/n = 0.06 \sim 0.24$ で桃色と赤色と緑色のグラフが重なっていることに注意を要する。以下で、図 10 を用いて図 6 の $r_n(a)$ の乱れを考察する。

- (1) 図 10 において信頼できる赤色のグラフを見ると、支配的な既約成分は $k/n = 0.2$ 付近であることが分かる。
- (2) 図 10 において、58 桁の場合 (青色のグラフ) はすべての既約成分で支配的な既約成分を上回る (グラフの上では下回る) ほどの数値誤差が起こっているため、図 6 において対応する $a = 1.6$ で誤り指数 $r_n(a)$ に数値誤差が生じている。
- (3) 項目 (2) とは反対に、図 10 において 77 桁の場合 (緑色のグラフ), 数値誤差は既約成分 ($k/n = 0 \sim 0.05$) で起こっているが支配的な既約成分を上回るほどではないため、図 6 で対応する $a = 1.6$ で $r_n(a)$ に数値誤差が生じていない。

次に、 ε が甘い場合について考察を行うために、図 6 で誤り指数 $r_n(a)$ が乱れていた $a = -0.2$ について部分指数 $r_{n,k}(a)$ を図 11 に掲げる。図 11 において、 $k/n = 0 \sim 0.16$ で桃色以外のグラフがすべて重なっており、 $k/n = 0.17$ 以降ですべてのグラフが重なっていることに注意を要する。以下で、図 10 と図 11 において $\varepsilon = 10^{-10}$ の場合 (桃色のグラフ) を比較し考察する。

- (1) 図 11 において信頼できる赤色のグラフを見ると、支配的な既約成分は $k/n = 0.31$ 付近であることが分かる。
- (2) 図 11 において、桃色のグラフは大きな既約成分 ($k/n = 0 \sim 0.16$) で支配的な既約

成分を上回る (グラフでは下回る) ほどの数値誤差が起こっているため, 図 6 において対応する $a = -0.2$ で誤り指数 $r_n(a)$ に数値誤差が生じている.

- (3) 項目 (2) とは反対に, 図 10 において桃色のグラフには数値誤差がまったく起こっていないため, 図 6 で対応する $a = 1.6$ で $r_n(a)$ にも数値誤差が生じていない.

以上の観察から, 既約成分 k の寄与 $m_k \beta_{n,k}(a)$ に数値誤差が生じた場合に, 誤り指数 $r_n(a)$ が乱れるかどうかは, それが支配的な既約成分の寄与を上回るかどうかによって分かる.

12. 固有値分解の数値誤差が $\beta_{n,k}(a)$ にもたらす影響について

12.1 $\beta_{n,k}(a)$ の数値誤差について

まず, 純粋に固有値分解の数値誤差の影響を調べるために, 重複度 m_k を掛けない $\beta_{n,k}(a)$ そのものを

$$\tilde{r}_{n,k}(a) := -\frac{1}{n} \log \beta_{n,k}(a)$$

として, 式 (3), (4) の ρ, σ とテンソル次数 $n = 100$ に対して, $a = 1.6, -0.2$ の場合について計算した結果をそれぞれ図 12, 図 13 に掲げる. これらの図より以下のことが分かる.

- (1) 図 12 において, 77 桁の場合 (緑色のグラフ) および 58 桁の場合 (青色のグラフ) はともに 116 桁の信頼できる場合 (赤色のグラフ) を上回る (グラフでは下回る) 数値誤差が生じている. 一方, 11 章において図 10 で, 緑色のグラフは支配的な既約成分の寄与を上回らないが, 青色のグラフは上回っていた. これより, 図 6 におい

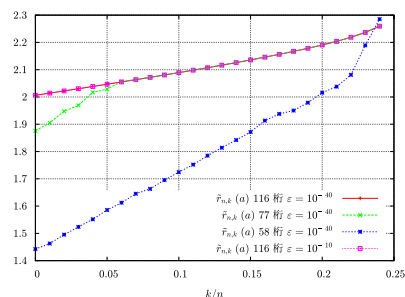


図 12 $\tilde{r}_{n,k}(a)$ ($n = 100, a = 1.6$)
Fig. 12 $\tilde{r}_{n,k}(a)$ ($n = 100, a = 1.6$).

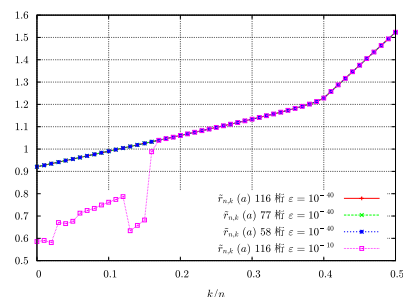


図 13 $\tilde{r}_{n,k}(a)$ ($n = 100, a = -0.2$)
Fig. 13 $\tilde{r}_{n,k}(a)$ ($n = 100, a = -0.2$).

て $a = 1.6$ 付近で, 緑色のグラフは誤り指数 $r_n(a)$ に乱れが生じず, 青色のグラフは $r_n(a)$ に乱れが生じていた. つまり, $\beta_{n,k}(a)$ そのものではなく, それに重複度 m_k を掛けた $m_k \beta_{n,k}(a)$ と支配的な既約成分の寄与との大小関係が $r_n(a)$ の数値誤差において問題となる.

- (2) 図 12 において, 桁数が足りない場合の緑色と青色のグラフは既約成分のサイズが大きくなるに従って, 数値誤差が大きくなるという自然な関係になっている.
- (3) 図 12 において, 58 桁と桁数が一番少ない場合 (青色のグラフ) の方が 77 桁の場合 (緑色のグラフ) よりも数値誤差が大きいことが分かる.
- (4) 図 13 において, $\epsilon = 10^{-10}$ の場合 (桃色のグラフ) に $\tilde{r}_{n,k}(a)$ が乱れている. 乱れ方は, 図 11 の $r_{n,k}(a)$ と同様である.

項目 (2) でも述べたように, k が小さくなるほど行列のサイズは大きくなり, それに対応して, 一般に $\beta_{n,k}(a)$ の数値誤差は大きくなる. そこで, 12.2 節および 12.3 節では最大既約成分に絞って考察を行うことにする.

12.2 計算桁数の不足時に $\beta_{n,k}(a)$ に生じる数値誤差

本節では, 計算桁数が不足しているときに最大既約成分に対する $\beta_{n,0}(a)$ に生じる数値誤差を分析する.

最初に, 式 (3), (4) の ρ, σ とテンソル次数 $n = 100$ に対して, 桁数を変えて計算した最大既約成分の $\tilde{r}_{n,0}(a)$ を図 14 に掲げる. 図 14 をみると, 最大既約成分の $\tilde{r}_{n,0}(a)$ についても図 6 の誤り指数 $r_n(a)$ と同様に, 桁数が足りない場合の緑色や青色のグラフでは a が大きくなると飽和のような現象が現れている. また, 赤色のグラフは $a = 2.8$ で途切れているが, その理由は以下のとおりである. 一般に, a をどんどん大きくしていくと行列 $\rho_k - e^{na} \sigma_k$ が負定値となる. このとき, 式 (27) で足すべき項がないため, $\beta_{n,k}(a) = 0$ となり, $\tilde{r}_{n,k}(a)$ が定義できないことがグラフが途切れている理由である. 実際, $a \geq 2.9$ のとき, 116 桁で計算した場合について $\rho_0 - e^{na} \sigma_0$ は負定値になっていた.

桁数が少ないときに観察される飽和現象は以下のように生じると考えられる.

- (1) a が大きくなると, 最大既約成分 $\rho_0 - e^{na} \sigma_0$ のうち ρ_0 が数値的に埋没して, $\rho_0 - e^{na} \sigma_0 \approx -e^{na} \sigma_0$ は近似的あるいは正確に負定値行列になる. このとき, 使用する固有値計算ルーチンは, まず固有値分解する行列をその最大絶対値成分で正規化するので,

$$\beta_{n,0}(a) \approx \text{Tr}[\sigma_0 \{-\sigma_0 > 0\}] =: \beta_{n,0}(\infty) \quad (35)$$

となり, $\beta_{n,0}(a)$ は a によらずほぼ一定値になる.

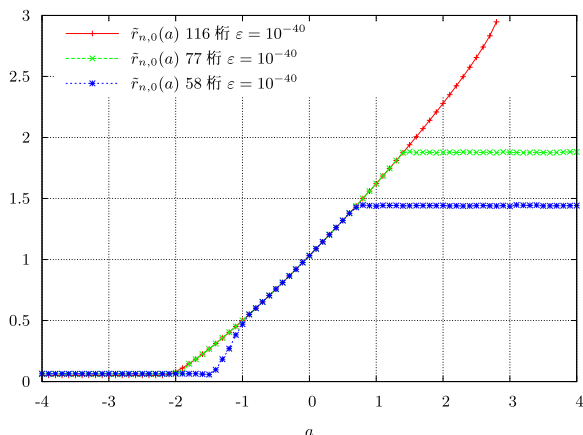


図 14 桁数を変えて計算した最大既約成分の $\tilde{r}_{n,0}(a)$ ($n = 100$)

Fig. 14 $\tilde{r}_{n,0}(a)$ of the maximal size irreducible element by different precision ($n = 100$).

(2) $\rho_0 - e^{na}\sigma_0 \approx -e^{na}\sigma_0$ のとき、負固有値の絶対値に比べて正固有値が非常に小さくなったり正固有値が 1 つもなくなったりするので、そのような状況において、固有値分解時に数値誤差により偽の正固有値が現れる。そのため、 $\beta_{n,0}(a) \approx 0$ とならない。

まず、項目 (2) の妥当性を確かめるために、最大既約成分 $\rho_0 - e^{na}\sigma_0$ の最小の正固有値を正規化した値を桁数を変えて計算した結果を図 15 に図示する。図 15 において、赤色のグラフが $a = 2.8$ のところで途切れているのは、 $a \geq 2.9$ で 1 つも正固有値が存在しないことを意味している。一方、緑色や青色のグラフでは、 $a \geq 2.9$ においても数値誤差により偽の正固有値が現れていることが分かる。以上から、上記の項目 (2) が裏付けられた。なお、図 15 において、信頼できる赤色のグラフからずれ始めるのは、緑色のグラフでは $a = 1.3$ 付近、青色のグラフでは $a = 0.4$ 付近である。これは、図 14 において、それぞれのグラフで $\tilde{r}_{n,0}(a)$ に飽和が始まる値とほぼ対応している。また、ずれ始めた後、最小の正固有値は青色のグラフの方が緑色のグラフよりも大きい。これより、桁数が少ないほど、正固有値に及ぼす数値誤差が大きいことが分かる。

次に、上記の項目 (1) の妥当性を確かめる。図 14 において、緑色のグラフと青色のグラフの両方で飽和が起こっている a の値として、たとえば $a_0 := 1.5$ をとる。 $\tilde{r}_{n,0}(a_0)$ と式 (35) の定義による $\tilde{r}_{n,0}(\infty) := -\log \beta_{n,0}(\infty)/n$ とが大体一致しているかを見る：58桁のとき、 $\tilde{r}_{n,0}(a_0) = 1.4409$, $\tilde{r}_{n,0}(\infty) = 1.4427$ でほぼ一致しており、77桁のときも、

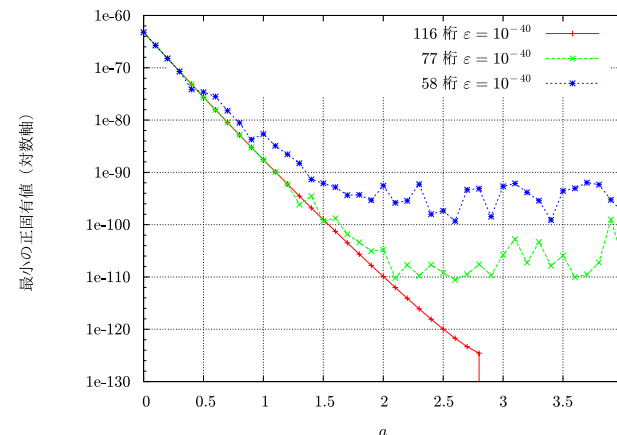


図 15 桁数を変えて計算した最大既約成分 $\rho_0 - e^{na}\sigma_0$ の正規化した最小の正固有値 ($n = 100$)

Fig. 15 The normalized minimum eigenvalue of the maximal size irreducible element $\rho_0 - e^{na}\sigma_0$ by different precision ($n = 100$).

$\tilde{r}_{n,0}(a_0) = 1.8842$, $\tilde{r}_{n,0}(\infty) = 1.8803$ でほぼ等しい。以上から、項目 (1) の妥当性が裏付けられた。

12.3 ϵ が甘いときに $\beta_{n,k}(a)$ に生じる数値誤差

Householder QR 法では、三重対角化に要する計算時間に比べて QR 法の収束時間は小さい。しかし、我々の問題において、 n を大きくし多倍長桁数を多くとったときこの収束時間は無視できなくなるため、 ϵ を適切に決める必要がある。そこで、本節では ϵ が甘いとき $\beta_{n,k}(a)$ に生じる数値誤差の原因を分析する。

$\beta_{n,k}(a)$ の数値誤差の原因としては、固有値分解で生じる以下の 2 つの要因が考えられる。

- (1) 固有値の符号の間違い
- (2) 固有ベクトルの数値誤差

これらが実際に計算精度に効いているかを調べるための手順を述べる。まず、 $\epsilon = 10^{-40}$, 10^{-10} の 2 通りで、固有値・固有ベクトルを 1 組ずつ計算する。次に、これらを用いて $\beta_{n,0}(a)$ を計算する方法は、固有値として $\epsilon = 10^{-40}$ または 10^{-10} で計算した値、固有ベクトルとして $\epsilon = 10^{-40}$ または 10^{-10} で計算した値を用いる方法の計 4 通りが考えられる。ここで、 $\epsilon = 10^{-40}$ で求めた固有値・固有ベクトルと $\epsilon = 10^{-10}$ で求めた固有値・固有ベクトルは、固有値をソートして対応させることにする。式 (3), (4) の ρ, σ とテンソル次数 $n = 100$ に

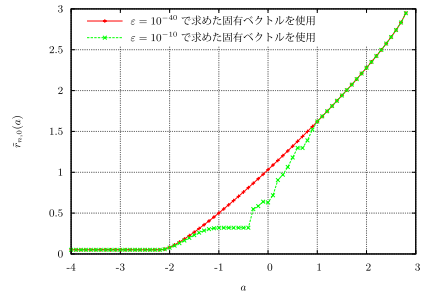


図 16 最大既約成分の $\tilde{r}_{n,0}(a)$ ($\varepsilon = 10^{-40}$ で求めた固有値を用いた場合, $n = 100$)
 Fig. 16 $\tilde{r}_{n,0}(a)$ of the maximal irreducible element calculated by eigenvalues when $\varepsilon = 10^{-40}$ ($n = 100$).

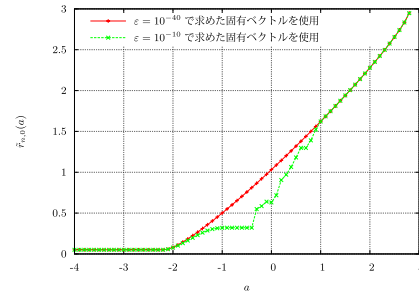


図 17 最大既約成分の $\tilde{r}_{n,0}(a)$ ($\varepsilon = 10^{-10}$ で求めた固有値を用いた場合, $n = 100$)
 Fig. 17 $\tilde{r}_{n,0}(a)$ of the maximal irreducible element calculated by eigenvalues when $\varepsilon = 10^{-10}$ ($n = 100$).

対して, 固有値として $\varepsilon = 10^{-40}, 10^{-10}$ で求めた値を用いた場合の最大既約成分の $\tilde{r}_{n,0}(a)$ をそれぞれ図 16, 図 17 に掲げる. ただし, 図 16, 図 17 において, 固有ベクトルとしてそれぞれ赤色のグラフでは $\varepsilon = 10^{-40}$, 緑色のグラフでは $\varepsilon = 10^{-10}$ で求めた値を用いている. 図 16, 図 17 より, 以下のことが分かる.

- 双方の図では, 固有ベクトルとして甘い $\varepsilon = 10^{-10}$ で求めた値を用いた場合の緑色のグラフが乱れている.
- 一方, 固有値として異なる ε で求めた値を用いた図 16 と図 17 の違いは見られない. また, $\varepsilon = 10^{-40}$ と $\varepsilon = 10^{-10}$ の場合で正固有値の数を調べたところ, ほとんど違いが見られず $a = -0.3$ で 1 個異なるだけであった. 以上より, この ρ, σ に関しては, ε が甘い場合, 項目 (2) の固有ベクトルの数値誤差が $\beta_{n,k}(a)$ に影響を与えることが分かった. なお, 10 章で図 2 の計算手順においてステップ (2) の既約成分 k に対する総和に対して支配的な既約成分だけが寄与するという分析をしたが, この分析はステップ (1)(e) における正固有値 $\lambda_{n,k,i} > 0$ に対する総和に対しても成り立つ. つまり, 正固有値 $\lambda_{n,k,i} > 0$ に対する各項も指数的にばらついており, 大きな数項 (支配的な項と呼ぶ) だけが $\beta_{n,k}(a)$ に寄与し他の項は無視できる. しかし, ε が甘いとき, 無視できる項に数値誤差が生じ, それが支配的な項を上回るため $\beta_{n,k}(a)$ に数値誤差が現れるということである.

13. 既約成分ごとの理論的な上界・下界

11 章, 12 章では, 116 桁, $\varepsilon = 10^{-40}$ の場合の計算結果を信頼できる値として扱ってきたが, この場合の計算精度が良いかどうかを調べる方法がある. そこで, 本章では各既約成分 k について $\beta_{n,k}(a)$ に関する量に対して固有値計算を必要としない上界と下界を導き, この場合の精度が良いかどうかを調べる.

まず, 上界と下界を導出する. 式 (9) で導入した第 1 種誤り確率 $\alpha_n(a)$ に対して, 既約成分 k について

$$\alpha_{n,k}(a) := \text{Tr}[\rho_k \{ \rho_k - e^{na} \sigma_k < 0 \}]$$

を定義し,

$$g_{n,k}(a) := -\frac{1}{n} \log \left(e^{-na} \alpha_{n,k}(a) + \beta_{n,k}(a) \right)$$

とおく. このとき, 不等式 (13), (16) において $A = e^{-na} \rho_k, B = \sigma_k$ とし, 対数をとって n で割って負号をつけると, $g_{n,k}(a)$ に対する上界と下界が得られる:

$$\max_{0 \leq s \leq 1} \{ as - \psi_{n,k}(s) \} \leq g_{n,k}(a) \leq -\frac{1}{n} \log \left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} \min\{p(i,j), q(i,j)\} \right). \quad (36)$$

ここで,

$$\psi_{n,k}(s) := \frac{1}{n} \log \text{Tr}[\rho_k^s \sigma_k^{1-s}]$$

である. また, 式 (36) における $p(i,j), q(i,j)$ の定義は式 (14), (15) による.

次に, 式 (36) の上界と下界を用いて, 9 章の図 6 で示した誤り指数 $r_n(a)$ の計算精度を検証する. 式 (3), (4) の ρ, σ に対して, $a = 0$ における $g_{n,k}(a)$ (116 桁, $\varepsilon = 10^{-40}$ で計算) および上界・下界を図 18 に示す. なお, 下界の最大値の計算には割線法を用いた. 図 18 において, $g_{n,k}(a)$ (赤色のグラフ) は上界 (灰色のグラフ) と下界 (橙色のグラフ) の間に収まっており, 計算精度は良いといえる. よって, これまで 116 桁, $\varepsilon = 10^{-40}$ の場合の計算結果を信頼できる値として扱ってきたのは妥当であったといえる.

14. ま と め

仮説検定を題材として既約分解を援用した量子 i.i.d. 状態のシミュレーションを実行し, 数値誤差の要因について分析を行った. その結果, 次のことが分かった.

- (1) 数値誤差の主因は, 既約成分の計算ではなく固有値分解にある.

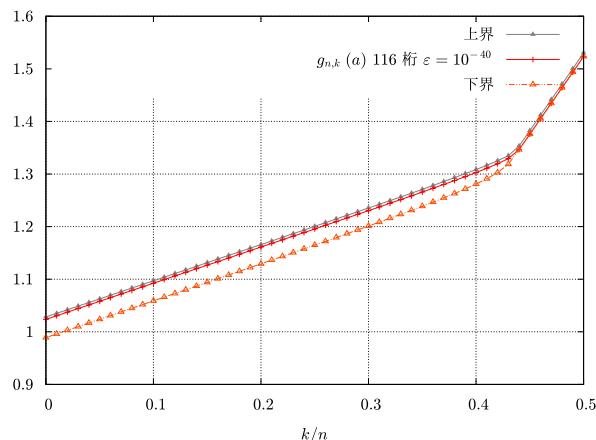


図 18 理論的な上界と下界による既約成分ごとの評価 ($n = 100, a = 0$)

Fig. 18 The evaluation of the contribution of irreducible elements by theoretical upper and lower bounds ($n = 100, a = 0$).

- (2) 誤り確率 $\beta_n(a)$ に寄与するのはごく一部の既約成分 (支配的な既約成分) である。
- (3) 他の既約成分の寄与に支配的な既約成分の寄与を上回るような数値誤差が生じたときに、誤り確率 $\beta_n(a)$ に数値誤差が現れる。
- (4) 既約成分レベルでは、桁数が少ない場合、 ε が甘い場合について、それぞれの数値誤差の出方とその原因に違いがある。特に、桁数が少ない場合、飽和のような現象が現れるが、その主因は以下のように考えられる： a を大きくしていくと、負固有値の絶対値に比べて正固有値の絶対値が非常に小さくなったり、正固有値が 1 つもなくなったりする。このとき、数値誤差により偽の正固有値が現れてしまうことにより飽和現象は生じる。
- (5) 桁数を十分にとり ε をきつくした場合について、精度の良い計算が行われていることを理論的な不等式を用いて確認した。

以上の考察はある特定の ρ, σ について行ったが、他の多くの ρ, σ でも同様であることを確認した。

今後の課題としては、上記の項目 (2) を考慮し不要な既約成分の計算を省略する実装があげられる。また、既約成分のサイズが小さいほど ε を甘くするといった工夫も考えられる。さらに、以下のような課題も考えられる。

- (6) 本論文では 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
- (7) 本論文では 2 つの量子状態に関する仮説検定問題を扱ったが、3 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

最後に、本論文における数値誤差の分析の一般性について述べる。上記の課題 (6), (7) や新種の量子中心極限定理⁷⁾ などの他の問題に応用した場合も、扱う行列の条件数は、テンソル次数 n が大きくなるほど固有値が指数的にばらつくことに起因して増加することが予想される。そのため、この固有値分解には計算桁数や ε に注意が必要であると考えられる。

一方、項目 (2) の支配的な既約成分といった考え方は Hoeffding 型の極限のとり方に本質的に依存している可能性がある。そのため、新種の量子中心極限定理のような極限のとり方が異なる問題でも同様の現象が見い出されるかは現時点では不明である。

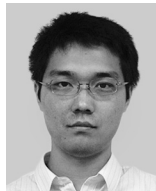
参考文献

- 1) 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).
- 2) Goodman, R. and Wallach, N.R.: *Representations and Invariants of the Classical Groups*, Cambridge University Press (1998).
- 3) Hayashi, M.: Asymptotics of quantum relative entropy from a representation theoretical viewpoint, *J. Phys. A: Math. Gen.*, Vol.34, No.16, pp.3413–3419 (2001).
- 4) Nagaoka, H. and Hayashi, M.: 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).
- 5) 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, 修士論文, 電気通信大学情報システム学研究科 (2006).
- 6) 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).
- 7) Sakashita, T. and Nagaoka, H.: A numerical study of hypothesis testing for quantum i.i.d. states, *Asian Conference on Quantum Information Science*, pp.213–214 (2010).
- 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) Hayashi, M.: 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).
- 10) Nagaoka, H.: The converse part of the theorem for quantum Hoeffding bound, *arXiv:quant-ph/0611289v1* (2006).

- 11) 藤原宏志：並列化対応多倍長ライブラリ Exflib，入手先(<http://www-an.acs.i.kyoto-u.ac.jp/~fujiwara/exflib/>) .
- 12) Audenaert, K.M.R., Calsamiglia, J., Muñoz-Tapia, R., Bagan, E., Masanes, L., Acin, A. and Verstraete, F.: Discriminating states: The quantum Chernoff bound, *Phys. Rev. Lett.*, Vol.98, No.16, pp.160501-1, 160501-4 (2007).
- 13) Nussbaum, M. and Szkoła, A.: The Chernoff lower bound for symmetric quantum hypothesis testing, *Ann. Statist.*, Vol.37, No.2, pp.1040-1057 (2009).
- 14) 山内恭彦，杉浦光夫：連続群論入門（新数学シリーズ），培風館（2010）.
- 15) Jacob, B., Guennebaud, G., et al.: 線形代数計算用 C++テンプレートライブラリ Eigen2，入手先(http://eigen.tuxfamily.org/index.php?title=Main_Page) .
- 16) 奥村晴彦：C 言語による最新アルゴリズム事典（ソフトウェアテクノロジー），技術評論社（1991）.
- 17) Stewart, G.W.: *Matrix Algorithms: Volume 2, Eigensystems*, Society for Industrial Mathematics (2001).
- 18) Golub, G.H. and Loan, C.F.V.: *Matrix Computation*, 3rd edition, The Johns Hopkins University Press (1996).
- 19) Trefethen, L.N. and Bau, D.: *Numerical Linear Algebra*, SIAM: Society for Industrial and Applied Mathematics (1997).

(平成 23 年 1 月 28 日受付)

(平成 23 年 6 月 16 日採録)



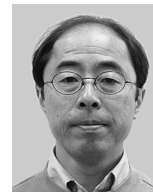
坂下 達哉

2003 年釧路工業高等専門学校電子工学科卒業．2005 年広島大学理学部数学科卒業．2007 年 3 月大阪大学大学院理学研究科数学専攻博士前期課程修了．2007 年 4 月より電気通信大学大学院情報システム学研究科博士後期課程在学中．量子情報理論の研究に従事．



片桐 孝洋（正会員）

東京大学情報基盤センター特任准教授．1994 年豊田工業高等専門学校情報工学科卒業．1996 年京都大学工学部情報工学科卒業．2001 年東京大学大学院理学系研究科情報科学専攻博士課程修了．博士（理学）．2001 年 4 月日本学術振興会特別研究員 PD，12 月科学技術振興機構研究者，2002 年 6 月電気通信大学大学院情報システム学研究科助手，2005 年 3 月から 2006 年 1 月米国カリフォルニア大学バークレー校コンピュータサイエンス学科訪問学者を経て，2007 年 4 月より現職．超並列数値計算アルゴリズム，およびソフトウェア自動チューニングの研究に従事．2002 年情報処理学会山下記念研究賞受賞．2011 年文部科学大臣表彰若手科学者賞受賞．日本応用数理学会，ACM，IEEE-CS，SIAM 等各会員．



長岡 浩司

1982 年 3 月東京大学大学院工学系研究科修士課程修了．1986 年 3 月大阪大学大学院基礎工学研究科博士後期課程退学．工学博士．東京工科大学，北海道大学を経て，現在，電気通信大学大学院情報システム学研究科教授．情報理論，量子情報理論，情報幾何学等の研究に従事．電子情報通信学会，IEEE 各会員．