

量子統計における弱収束に基づく局所漸近正規性

中央大学・理工学部 山形浩一
Koichi Yamagata
Faculty of Science and Engineering,
Chuo University

概要

本原稿は, [1] に基づいて FRIMS 研究集会にて発表した内容に若干の補足を加えた内容になっている. 十分に滑らかな古典的なパラメトリック統計モデルを iid 拡張すると局所漸近的に Gaussian shift model と統計的性質が酷似してくる性質が知られている. これを局所漸近正規性 (LAN) という. この LAN の量子的な対応物である, 量子 LAN の研究がこれまでさかんに行われてきた. LAN にはマルコフマップに基づく strong LAN と尤度比の弱収束に基づく weak LAN の 2 種類がある. strong LAN の量子化については, 一定の成果が上げられているが, モデルに強い制約が課せられている. 本研究では出来るだけ緩い条件下で成立する weak LAN の量子化を目指す.

1 量子推定理論

$\{\rho_\theta | \theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d\}$ を θ で十分滑らかに parameterize された量子状態 (ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上の密度作用素) の族とする. 真の θ が開集合 Θ の中であって, それを測定 (POVM) を介して出来るだけ効率的に推定したい. 推定量は POVM M と, その測定値上の Θ 値関数 $\hat{\theta}$ のペア $[M, \hat{\theta}]$ で表される. 伝統的な統計学では推定量を不偏推定量に制限して考える. $[M, \hat{\theta}]$ が不偏推定量であるとは,

$$E_\theta[M, \hat{\theta}] := \sum_x \hat{\theta}(x) \text{Tr} \rho_\theta M_x = \theta \quad (\forall \theta \in \Theta) \quad (1)$$

を満たす場合をいう. 全ての Θ で不偏という条件は強すぎて, あまり実用的ではないので, 1 点 $\theta_0 \in \Theta$ の近くで局所的に不偏な推定量を考える. 推定量 $[M, \hat{\theta}]$ が $\theta_0 \in \Theta$ で局所不偏推定量であるとは, (1) の両辺を $\theta_0 \in \Theta$ において 1 次までテイラー展開して等号が成り立つ場合, すなわち

$$E_{\theta_0}[M, \hat{\theta}^i] = \theta_0^i$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial \theta^j} E_\theta[M, \hat{\theta}^i] \right|_{\theta=\theta_0} = \delta_j^i$$

を満たす場合をいう. よい局所不偏推定量とは平均二乗誤差

$$V_{\theta_0}[M, \hat{\theta}] := \left[\sum_x \text{Tr} \rho_{\theta_0} (\hat{\theta}^i(x) - \theta_0^i) (\hat{\theta}^j(x) - \theta_0^j) M_x \right]_{1 \leq i, j \leq d} \quad (2)$$

を小さくするもののことである. この局所不偏推定量の平均二乗誤差には以下の量子クラメルラオ不等式

$$V_{\theta_0}[M, \hat{\theta}] \geq J^{-1} \quad (3)$$

が知られている。ここに

$$J := \left[\frac{1}{2} \text{Tr} \rho_{\theta_0} (L_i L_j + L_j L_i) \right]_{1 \leq i, j \leq d}$$

は SLD-Fisher 情報行列であり, $L_1, L_2, \dots, L_d$ は SLD (Symmetric Logarithmic Derivative) とよばれる

$$\left. \frac{\partial}{\partial \theta^i} \rho_{\theta} \right|_{\theta=\theta_0} = \frac{1}{2} (L_i \rho_{\theta_0} + \rho_{\theta_0} L_i)$$

を満たすエルミート作用素である。

パラメータが 1 つの場合, つまり $d = 1$ の場合, (2) はスカラーになり, 量子クラメルラオ不等式 (3) は等号が達成可能である。またこの等号を達成する最適な推定量は SLD をオプザーバブルとして測定することで実現できる。しかし, パラメータが複数ある場合, 不確定性原理より SLD たちを同時測定することはできない, ゆえに量子クラメルラオ不等式 (3) は等号達成できない。また平均二乗誤差 (2) は行列であり, 一般にこれの最小値は存在しない。そこでスカラー

$$\text{tr} G V_{\theta_0} [M, \hat{\theta}]$$

にして, これを最小化する戦略がとられる。ここに $G > 0$ は重みと呼ばれる与えられた実 $d \times d$ 正定値行列である。 G は推定の用途に応じて設定される。これで少なくとも答えは存在するようになったが, この最小値が解析的に解かれたモデルは, 現在のところ

- SLD が全て可換のとき
- 状態が pure のとき
- 量子 Gaussian shift model
- $\dim \mathcal{H} = 2$ のとき

だけである。この中で本研究において重要なのが, 量子 Gaussian shift model である。量子 Gaussian shift model では Holevo bound と呼ばれる量が最小値となる。Holevo bound は一般のモデルでも $\text{tr} G V_{\theta_0} [M, \hat{\theta}]$ の達成できるとは限らない下界 c として知られ

$$\text{tr} G V_{\theta_0} [M, \hat{\theta}] \geq c$$

が成り立つ。ここに

$$c := \min_{X \in \mathcal{X}} \left\{ \text{tr} G Z(X) + \text{tr} \left| \sqrt{G} \text{Im}(Z(X)) \sqrt{G} \right| \right\} \quad (4)$$

$$\mathcal{X} := \{ X = (X_1, X_2, \dots, X_d) \mid X_i \text{ は } \text{Re} \text{Tr} \rho_{\theta_0} L_j X_i = \delta_{ij} \text{ なるエルミート作用素} \}$$

$$Z(X) := [\text{Tr} \rho_{\theta_0} X_j X_i]_{1 \leq i, j \leq d}.$$

Holevo bound はやや複雑な形で定義されているが, たいてい解析的に求めることが可能である。Holevo bound は一般に達成できないが, 量子局所漸近正規性 (QLAN; Quantum Local Asymptotic Normality) により局所漸近的に達成可能であることが期待されている。

Holevo bound の書き換え

ここで今後のために Holevo bound の書き換えを行っておく。 $\mathcal{L}_h(\mathcal{H})$ を $\mathcal{H}$ 上のオブザーバブル全体とする。 $\mathcal{L}_h(\mathcal{H})$ 上の commutation operator $\mathcal{D}: \mathcal{L}_h(\mathcal{H}) \rightarrow \mathcal{L}_h(\mathcal{H})$ を

$$\mathcal{D}(X)\rho_{\theta_0} + \rho_{\theta_0}\mathcal{D}(X) = \sqrt{-1}(X\rho_{\theta_0} - \rho_{\theta_0}X)$$

で定義する。 $X_1, X_2, \dots, X_r \in \mathcal{L}_h(\mathcal{H})$ が以下を満たすとき、これらを SLD $L_1, L_2, \dots, L_d$ の $\mathcal{D}$ 不変拡張という。

1. $\text{Tr } \rho_{\theta_0} X_j = 0$
2. $X_1, X_2, \dots, X_r$ は線形独立。
3. $\mathcal{D}(\text{span}_{\mathbb{R}}\{X_j\}_j) \subset \text{span}_{\mathbb{R}}\{X_j\}_j$
4. $\text{span}_{\mathbb{R}}\{L_i\}_i \subset \text{span}_{\mathbb{R}}\{X_j\}_j$

この $\mathcal{D}$ 不変拡張を使って Holevo bound (4) は以下のように表すことができる。

$$c = c(G, \tau, \Sigma) := \min_F \left\{ \text{tr } GZ + \text{tr } \left| \sqrt{G} \text{Im } Z \sqrt{G} \right| \right\}$$

$$\begin{cases} Z = {}^t F \Sigma F \\ F \text{ は } {}^t F (\text{Re } \tau) = I \text{ を満たす } r \times d \text{ 実行列} \end{cases}$$

ここに

$$\begin{aligned} \Sigma_{ij} &= \text{Tr } \rho_{\theta_0} X_j X_i \\ \tau_{ij} &= \text{Tr } \rho_{\theta_0} L_j X_i \end{aligned}$$

はそれぞれサイズ $r \times r$, $r \times d$ の複素行列。

実は $c(G, \tau, \Sigma)$ はのちに登場する量子 Gaussian shift model $\{N(\text{Re}(\tau)h, \Sigma) \mid h \in \mathbb{R}^d\}$ の Holevo bound と一致する。

2 Quantum Gaussian shift model の推定 [2]

r 個のカノニカル・オブザーバブル $X_1, X_2, \dots, X_r$ が交換関係

$$[X_i, X_j] = \frac{2}{\sqrt{-1}} S_{ij}$$

($S_{ij} = -S_{ji}$ は $r \times r$ 実交代行列) を満たすとき、 $X_1, X_2, \dots, X_r$ が生成する代数空間を $CCR(S)$ と記す。(CCR 代数の厳密な定義は [2, 3] などを参照。)

$CCR(S)$ 上の量子状態はこの上の線形汎関数 ψ で表現され、特性関数が

$$\psi(\exp \sqrt{-1} \xi_i X_i) = \exp \left[\sqrt{-1} \langle h, \xi \rangle - \frac{1}{2} \langle \xi, J \xi \rangle \right]$$

となるとき、この状態を $N(h, J)$ と書き量子 Gaussian state という。ここに、 $h \in \mathbb{R}^r$, $J \geq 0$ は $\text{Im } J = S$ なる $r \times r$ 複素半正定値行列である。 $\text{Re } J \geq -\sqrt{-1} \text{Im } J$ が不確定性原理に対応する。(quantum Gaussian shift model $\{N(h, J); h \in \mathbb{R}^r\}$ について、 J は逆 RLD-Fisher 情報行列となり、 $\text{Re } J$ は逆 SLD Fisher 情報行列になる。)

命題 1 (Quantum Gaussian shift model の推定). $r \times r$ 複素半正定値行列 Σ と, $r \times d$ 実行列 τ ($d \leq r$) で定義される Quantum Gaussian shift model $\{N(\tau h, \Sigma) | h \in \mathbb{R}^d\}$ の重み G に関する Holevo bound c は

$$c = \min_F \left\{ \text{tr} GZ + \text{tr} \left| \sqrt{G} \text{Im} Z \sqrt{G} \right| \right\}$$

$$\begin{cases} Z = {}^t F \Sigma F \\ F \text{ は } {}^t F \tau = I \text{ を満たす } r \times d \text{ 実行列} \end{cases}$$

と表され, これを達成する一様に不偏な推定量が存在する.

行列 τ を介することによって部分 Gaussian shift model となっている. 古典論では部分 Gaussian shift model の推定は full Gaussian shift model の推定問題に帰着できるが, 量子的場合はこのように別に考える必要がある.

3 Quantum Local Asymptotic Normality (QLAN)

$\{\rho_\theta | \theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d\}$ を θ で十分滑らかに parameterize された量子状態の族とする. 1 点 $\theta_0 \in \Theta$ を固定する. n が十分に大きいと, $\{\rho_{\theta_0+h/\sqrt{n}}^{\otimes n} | h \in \mathbb{R}^d\}$ とある量子 Gaussian shift model との統計的性質が酷似していることが期待されている. この性質を量子局所漸近正規性 (Quantum Local Asymptotic Normality; QLAN) という. QLAN に関する先行研究として Guță et al. [5] がある. これには $\{\rho_{\theta_0+h/\sqrt{n}}^{\otimes n} | h \in \mathbb{R}^d\}$ と量子 Gaussian shift model が互いに量子 channel で移し合えるという強い性質が示されている. しかし, モデルに強い仮定を設定していて, まだ一般的な理論とは言えない状況であった. 例えば ρ_{θ_0} の固有値が縮退していればうまくいかない, ρ_{θ_0} は混合状態でないといけない, 初めから指数型分布族を仮定している, full parameter model のみで部分モデルは扱えない, などの問題があった. 古典的な LAN 理論では 2 階微分可能だけでよかったはずなので, まだまだ本来のあるべき LAN 理論とギャップがあると言わざるを得ない. 本研究では, 「量子 channel で移り合う」という強い意味での LAN ではなく, 「尤度比の分布が一致する」という弱い意味での LAN を採用し, より緩い条件でも成り立つ理論の構築を目指す.

古典論においては, LAN は以下のように定義されている. 統計モデルの列 $\{p_\theta^{(n)} | \theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d\}$ の対数尤度比が

$$\log \frac{p_{\theta_0+h/\sqrt{n}}^{(n)}}{p_{\theta_0}^{(n)}} = h^i \Delta_i^{(n)} - \frac{1}{2} h^i h^j J_{ij} + o_{p_{\theta_0}}(1) \quad (\forall h \in \mathbb{R}^d)$$

と書けるとき, $\theta_0 \in \Theta$ において LAN という. ここに J はある $d \times d$ 実正定値行列, $\Delta^{(n)} = (\Delta_1^{(n)}, \Delta_2^{(n)}, \dots, \Delta_d^{(n)})$ は $p_{\theta_0}^{(n)}$ のもとで $N(0, J)$ に分布収束する確率変数の列, $o_{p_{\theta_0}}(1)$ は 0 に確率収束する確率変数の列 (h に依存してもよい) であり, それぞれ $\Delta^{(n)} \rightsquigarrow N(0, J)$, $o_{p_{\theta_0}}(1) \rightarrow 0$ と記す.

Gaussian shift model $\{N(h, J^{-1}) | h \in \mathbb{R}^d\}$ と比較すると

$$\log \frac{dN(h, J^{-1})}{dN(0, J^{-1})} = h^i \Delta_i - \frac{1}{2} h^i h^j J_{ij} \quad (\forall h \in \mathbb{R}^d)$$

($\Delta \sim N(0, J)$) が成り立ち対数尤度比が似ているといえる. そして, これを満たしていると Gaussian shift model $\{N(h, J^{-1}) | h \in \mathbb{R}^d\}$ と統計的性質が似ていることを示すことができる [4]. LAN を利用することで, 解析が困難な統計モデルも Gaussian shift model の問題に帰着させて考えることができる. 統計的性質が似ているとは, あらゆる統計量の分布が一致せられるということを意味するからである.

i.i.d. の場合を考えてみる. $\{p_\theta | \theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d\}$ を θ で十分滑らかに parameterize された確率分布の族 (統計モデル) とする. これの n 個の i.i.d. モデルの列 $\{p_\theta^{(n)} | \theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d\}$ を考える. n が十分に大きいとする

と、固定された 1 点 $\theta_0 \in \Theta$ の近傍で統計的性質が Gaussian shift model と酷似し、 $\{p_{\theta_0+h/\sqrt{n}}^{(n)} | h \in \mathbb{R}^d\}$ と $\{N(h, J^{-1}) | h \in \mathbb{R}^d\}$ の統計的性質が似ている。ここに $\Delta^{(n)}$ は $p_{\theta_0+h/\sqrt{n}}^{(n)}$ の $h = 0$ における対数微分、 J は Fisher 情報行列である。

LAN の定義では $h = 0$ における分布収束しか決めていないにも関わらず、ここから以下のように任意の $h \in \mathbb{R}^d$ についての分布収束までもが導かれる。

命題 2 (Le Cam の第 3 補題). $\{p_{\theta}^{(n)} | \theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d\}$ が $\theta_0 \in \Theta$ において LAN とする。 $X^{(n)} = (X_1^{(n)}, X_2^{(n)}, \dots, X_r^{(n)})$ が確率変数の列で、 $p_{\theta_0}^{(n)}$ の元で

$$\begin{pmatrix} X^{(n)} \\ \Delta^{(n)} \end{pmatrix} \rightsquigarrow N \left(\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Sigma & \tau \\ t_\tau & J \end{pmatrix} \right)$$

が成り立つとき、 $p_{\theta_0+h/\sqrt{n}}^{(n)}$ の元で

$$X^{(n)} \rightsquigarrow N(\tau h, \Sigma)$$

が成り立つ ($\forall h \in \mathbb{R}^d$)。

量子対数尤度比及び絶対連続

QLAN を古典 LAN と同様に定義するには、まず量子対数尤度比を決めなければならない。我々はこれを以下のように定める。

ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上の密度作用素 ρ, σ (混合状態でなくてよい) が相互絶対連続であるとは、エルミート作用素 $\mathcal{L}$ が存在して、

$$\sigma = e^{\frac{1}{2}\mathcal{L}} \rho e^{\frac{1}{2}\mathcal{L}}$$

と書けるときをいい、 $\rho \sim \sigma$ と記す。このとき $\mathcal{L}$ を量子対数尤度比といい、 $\mathcal{L}(\sigma|\rho)$ と記す。

たとえばもし、 $\rho > 0$, $\sigma > 0$ なら $\rho \sim \sigma$ であり、

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\sigma|\rho) &= 2 \log \left(\sqrt{\rho^{-1}} \sqrt{\sqrt{\rho} \sigma \sqrt{\rho}} \sqrt{\rho^{-1}} \right) \\ &= 2 \log \left(\sqrt{\sigma} \left(\sqrt{\sqrt{\sigma} \rho \sqrt{\sigma}} \right)^{-1} \sqrt{\sigma} \right) \end{aligned}$$

である。

量子的法則収束

古典論では分布収束 (法則収束) は特性関数の収束と同等である。しかし、量子論では特性関数の収束では不十分であり、quasi-characteristic function の収束を考える必要がある。

ヒルベルト空間 $\mathcal{H}^{(n)}$ 上の状態の列 $\rho^{(n)}$ とオブザーバブルの列 $X^{(n)} = (X_1^{(n)}, X_2^{(n)}, \dots, X_d^{(n)})$ が任意の $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_r \in \mathbb{C}^d$ に対して

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \text{Tr} \rho^{(n)} \left(\prod_{t=1}^r e^{\sqrt{-1} \xi_t^i (X_i^{(n)} - h_i)} \right) = \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{t=1}^r \xi_t^i \xi_t^j J_{ji} - \sum_{t=1}^r \sum_{s=t+1}^r \xi_t^i \xi_s^j J_{ji} \right) \quad (5)$$

を満たすとき、 $(X^{(n)}, \rho^{(n)}) \rightsquigarrow N(h, J)$ と記す。ここに $h \in \mathbb{R}^d$, $J \geq 0$ は $d \times d$ 複素非負定値行列。(5) の右辺は量子 Gaussian state $N(h, J)$ の quasi-characteristic function である。

QLAN

これで準備ができたので、ようやく QLAN の話ができる。

命題 3. ヒルベルト空間 $\mathcal{H}$ 上のモデル $\{\rho_\theta | \theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d\}$ の 1 点 $\theta_0 \in \Theta$ を固定する。 $\rho_\theta \sim \rho_{\theta_0}$ ($\forall \theta \in \Theta$) と仮定し、 $\mathcal{L}(\rho_{\theta_0+h} | \rho_{\theta_0})$ が h について連続 2 階微分可能とする。 $L_1, L_2, \dots, L_d$ を θ_0 における SLD とし、さらに $X_1, X_2, \dots, X_r$ を SLD の $\mathcal{D}$ 不変拡張とする。 これらを *i.i.d.* 拡張した

$$\Delta_i^{(n)} := \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n I^{\otimes(k-1)} \otimes L_i \otimes I^{\otimes(n-k)} \quad (1 \leq i \leq d)$$

$$X_j^{(n)} := \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n I^{\otimes(k-1)} \otimes X_j \otimes I^{\otimes(n-k)} \quad (1 \leq j \leq r)$$

を使って

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\rho_{\theta_0+h/\sqrt{n}}^{\otimes n} | \rho_{\theta_0}^{\otimes n}) &= h^i \Delta_i^{(n)} - \frac{1}{2} J_{ij} h^i h^j + o_h^{(n)} \\ \left(\begin{pmatrix} X^{(n)} \\ \Delta^{(n)} \\ o_h^{(n)} \end{pmatrix}, \rho_{\theta_0}^{\otimes n} \right) &\rightsquigarrow N \left(\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \Sigma & \tau & 0 \\ t_\tau & J & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right) \end{aligned}$$

と書くことができる。 さらにこのとき任意の $h \in \mathbb{R}^d$ に対して

$$(X^{(n)}, \rho_{\theta_0+h/\sqrt{n}}^{\otimes n}) \rightsquigarrow N((\text{Re}\tau)h, \Sigma)$$

が成り立つ。

すでに述べたように $N((\text{Re}\tau)h, \Sigma)$ の Holevo bound は $\{\rho_\theta | \theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d\}$ の θ_0 での Holevo bound と一致する。 この事実と量子中心極限定理に関する結果 (Jakšić *et al.* 2010. [3]) を利用することで $\{\rho_{\theta_0+h/\sqrt{n}}^{\otimes n} | h \in \mathbb{R}^d\}$ について、漸近的に h で一様な Holevo bound の達成可能性を証明することができる。

まとめと今後の課題

本研究では、対数尤度比が 2 階可微分という緩い条件で適用できる従来法と比べてずっと易しい QLAN 理論の可能性を示した。 しかし、まだいくつかの未解決問題を残している。 例えば、*i.i.d.* でないモデルの列のより一般的な QLAN はどう定式化するか、量子 contiguity をどう定義するか (本研究では「相互絶対連続」を仮定したが本来の LAN は contiguity という絶対連続の漸近版が用いられる)、Holevo bound の漸近的な達成はいわゆる順定理であるが逆定理はどう示すか、などの問題が今後の課題として残されている。

謝辞

今回このような素晴らしい集まりで話をする機会を与えて下さった、田中冬彦先生、熊谷亘先生に感謝します。 また私をこの集會に推薦して下さった小川朋宏先生にも感謝いたします。 そして楽しい時間を共有した参加者の皆さんに感謝いたします。 本内容は藤原彰夫先生、Richard Gill 先生との共同研究に基づくものであり、先生方のお力がなければなしえなかったものであり、感謝申し上げます。

参考文献

- [1] Yamagata, K., Fujiwara, A., and Gill, R. D. "Quantum Local Asymptotic Normality based on a new Quantum Likelihood Ratio", *Annals of Statistics*, Vol. **41**, No. 4, 2197–2217 (2013).
- [2] Holevo, A. S. (2011). *Probabilistic and Statistical Aspects of Quantum Theory* (2nd English edition). Edizioni della Normale, Pisa.
- [3] Jakšić, V., Pautrat, Y., and Pillet, C.-A. (2010). "A quantum central limit theorem for sums of independent identically distributed random variables," *J. Math. Phys.*, 51, 015208.
- [4] van der Vaart, A.W. (1998). *Asymptotic Statistics*. Cambridge University Press, Cambridge.
- [5] Guță, M. and Kahn, J. (2006). "Local asymptotic normality for qubit states," *Phys. Rev. A*, **73**, 052108.