

Golden-Thompson の不等式とその逆について (Golden-Thompson type inequality and its reverse)

芝浦工業大学工学部 瀬尾祐貴 (Yuki Seo)
Faculty of Engineering, Shibaura Institute of Technology

1 始めに

複素数を成分とする $n \times n$ 行列の全体を M_n とします。 M_n 上のノルムで、任意のユニタリ行列 U, V に対して

$$\| \| UXV \| \| = \| \| X \| \|, \quad X \in M_n$$

が、常に成り立つとき、このノルムは、ユニタリ不変ノルムといいます。代表的なものに、トレースノルムや L_1 ノルムがあります。以下、 $\| \| \cdot \| \|$ は M_n 上のユニタリ不変ノルムを表すものとします。

A, B を正定値行列とし、 $\alpha \in [0, 1]$ とします。このとき、 A と B の Kubo-Ando 流の α -幾何平均 $A \#_\alpha B$ は、 A が可逆のときは、

$$A \#_\alpha B = A^{\frac{1}{2}} \left(A^{-\frac{1}{2}} B A^{-\frac{1}{2}} \right)^\alpha A^{\frac{1}{2}}$$

で、定義します [7]。特に、 $\alpha = \frac{1}{2}$ のときは、 $A \# B = A \#_{\frac{1}{2}} B$ と表します。勿論、 A と B が可換ならば、 $A \# B = \sqrt{AB}$ になります。

さて、タイトルの Golden-Thompson の不等式とは、エルミット行列 H と K に対して、

$$\text{Tr } e^{H+K} \leq \text{Tr } e^H e^K$$

がいつでも成立することをいいます [5, 10, 11]。ただし、 Tr は M_n 上のトレースとします。 H と K が交換可能であれば、 $e^{H+K} = e^H e^K$ が成立しますが、交換可能でなければ、一般的には、 e^{H+K} と e^H, e^K の間には何の代数的な関係も成り立ちません。しかし、トレースをとった「期待値」の間に、上のような関係が成り立つというのが、数学的に大変興味深いと、安藤 [1] は指摘します。多くの数学者がこの Golden-Thompson の不等式に注目し、ただちに一般のユニタリ不変ノルムに拡張しました [8, 3]。即ち、

$$\| \| e^{H+K} \| \| \leq \| \| e^H e^K \| \| \tag{1}$$

が、成立します。

Hiai-Petz[6] は、まず Lie-Trotter の公式の α -幾何平均版

$$\lim_{p \rightarrow 0} \left(e^{pH} \#_\alpha e^{pK} \right)^{\frac{1}{p}} = e^{(1-\alpha)H + \alpha K} \tag{2}$$

を示し、これを用いて、Golden-Thompson の不等式の下からの評価を次のようにより一般的な形で示しました。 $\alpha \in [0, 1]$ に対して

$$\mathrm{Tr} (e^{pH} \#_{\alpha} e^{pK})^{\frac{1}{p}} \leq \mathrm{Tr} e^{(1-\alpha)H + \alpha K} \quad (3)$$

がすべての $p > 0$ に対して成立する。このとき、彼らは、(3) 式の左辺が右辺に単調に増加して収束するのかどうかと問題を投げかけました。翌年、Ando-Hiai [2] は、この予想をより一般的な枠組みで肯定的に解決しました。即ち、

$$\| \| (e^{pH} \#_{\alpha} e^{pK})^{\frac{1}{p}} \| \| \leq \| \| e^{(1-\alpha)H + \alpha K} \| \| \quad (4)$$

が、すべての $p > 0$ に対して成立し、さらに、 $p \downarrow 0$ のとき、左辺は右辺に単調増加で収束する。特に、 $p = 1, \alpha = \frac{1}{2}$ とすれば、

$$\| \| e^{2H} \# e^{2K} \| \| \leq \| \| e^{H+K} \| \| \quad (5)$$

が、成立します。これは、(1) において、 $\| \| e^{H+K} \| \|$ の下限を幾何平均の言葉で評価していることになります。

ここで、私たちが考察する逆不等式について少し説明をします [4]。まず、(5) の右辺を左辺で割りますと、

$$1 \leq \frac{\| \| e^{H+K} \| \|}{\| \| e^{2H} \# e^{2K} \| \|}$$

となります。即ち、その商は常に 1 以上です。つまり、その商は、数直線上の区間 $[1, \infty)$ にあります。では、その上限の評価はどうなるのでしょうか。

$$1 \leq \frac{\| \| e^{H+K} \| \|}{\| \| e^{2H} \# e^{2K} \| \|} \leq \boxed{?}$$

H と K のスペクトルの取る範囲を限定したとき、その商の取る範囲は閉区間 $[1, \alpha]$ になるでしょう。そのような α の最小値を H と K のスペクトルの言葉で述べたいというのが私たちの興味に関心であり、カントロヴィッチ以来の問題意識であります。そのためには、Ando-Hiai がどのようにして、(4) の証明を完成させたのか、そこを考えなければいけません。ここで、対数的優位関係について復習をします。正定値行列 A と B の間の対数的優位関係 $A \prec_{(\log)} B$ があるとは、

$$\prod_{i=1}^k \lambda_i(A) \leq \prod_{i=1}^k \lambda_i(B), \quad k = 1, 2, \dots, n-1$$

そして、

$$\prod_{i=1}^n \lambda_i(A) = \prod_{i=1}^n \lambda_i(B)$$

が成立するときを言います。ここで、 $\lambda_1(A) \geq \dots \geq \lambda_n(A)$ と $\lambda_1(B) \geq \dots \geq \lambda_n(B)$ は、それぞれ A と B の固有値とします。勿論、 $A \prec_{(\log)} B$ ならば、 $\| \| A \| \| \leq \| \| B \| \|$ が成立します。ここで、Ando-Hiai は、

$$(A^p \#_{\alpha} B^p)^{\frac{1}{p}} \prec_{(\log)} (A^q \#_{\alpha} B^q)^{\frac{1}{q}}, \quad 0 < q \leq p$$

を示しました。よって、任意の $0 < q \leq p$ に対して、

$$\| \| (A^p \#_{\alpha} B^p)^{\frac{1}{p}} \| \| \leq \| \| (A^q \#_{\alpha} B^q)^{\frac{1}{q}} \| \| \quad (6)$$

が成り立ち、この式と (2) を組み合わせて、(4) を導きました。従って、この不等式の逆評価を得ることができれば、(2) を用いて私たちが求めたい逆不等式を得ることが出来ます。そのためには、Specht ratio といわれる定数を紹介しなければいけません。まず、正の数 x_1, \dots, x_n に対して、算術・幾何平均の不等式

$$\sqrt[n]{x_1 \cdots x_n} \leq \frac{x_1 + \cdots + x_n}{n}$$

が成り立ちます。Specht[9] は、この不等式の逆不等式を考えました。即ち、 $0 < m \leq x_1 \leq \dots \leq x_n \leq M$ に対して、

$$\frac{x_1 + \cdots + x_n}{n} \leq S(h) \sqrt[n]{x_1 \cdots x_n} \quad (7)$$

が成り立つ最良の定数 $S(h)$ を見つけました。ここで、 $h = \frac{M}{m}$ は、Turing[13] の一般化された condition number であり、これを用いて、Specht ratio $S(h)$ は、

$$S(h) = \frac{h^{\frac{1}{h-1}}}{e \log h^{\frac{1}{h-1}}} \quad (h \neq 1) \quad \text{and} \quad S(1) = 1$$

と表されます。

2 Specht ratio を用いた評価

まず、(6) の逆不等式を Specht ratio の言葉を用いて評価します。

Lemma 1. A, B を正定値行列で、 $0 < mI \leq A, B \leq MI$ を満たす。ただし、 m, M は $0 < m \leq M$ を満たす正の実数とする。 $h = \frac{M}{m}$ で、 $\alpha \in [0, 1]$ とします。このとき、 $0 < q \leq p$ に対して、

$$\| \| (A^q \#_{\alpha} B^q)^{\frac{1}{q}} \| \| \leq S(h^p)^{\frac{1}{p}} \| \| (A^p \#_{\alpha} B^p)^{\frac{1}{p}} \| \|$$

が成り立つ。

Proof. $0 < \frac{q}{p} < 1$ なので、作用素版の算術・幾何平均の不等式、富永 [12] による逆不等式、そして $y = t^{\frac{q}{p}}$ が作用素凹により、

$$\begin{aligned} A^{\frac{q}{p}} \#_{\alpha} B^{\frac{q}{p}} &\leq (1-\alpha)A^{\frac{q}{p}} + \alpha B^{\frac{q}{p}} \leq ((1-\alpha)A + \alpha B)^{\frac{q}{p}} \\ &\leq S(h)^{\frac{q}{p}} (A \#_{\alpha} B)^{\frac{q}{p}} \end{aligned}$$

を得ます。 A と B を A^p と B^p に置き換えると、

$$A^q \#_{\alpha} B^q \leq S(h^p)^{\frac{q}{p}} (A^p \#_{\alpha} B^p)^{\frac{q}{p}}.$$

$q \geq 1$ のときは、Löwner-Heinz 不等式より、

$$(A^q \#_{\alpha} B^q)^{\frac{1}{q}} \leq S(h^p)^{\frac{1}{p}} (A^p \#_{\alpha} B^p)^{\frac{1}{p}} \quad (8)$$

を得ます。また、 $0 < q < 1$ のときは、最小最大原理により、 $1 \leq k \leq n$ に対して

$$\begin{aligned} \lambda_k(A^q \#_{\alpha} B^q)^{\frac{1}{q}} &= \max_{x \in \mathcal{F}, \|x\|=1} (x, (A^q \#_{\alpha} B^q)x)^{\frac{1}{q}} \\ &\leq \max_{x \in \mathcal{F}, \|x\|=1} (S(h^p)^{\frac{q}{p}} x, (A^p \#_{\alpha} B^p)^{\frac{q}{p}} x)^{\frac{1}{q}} \\ &\leq \max_{x \in \mathcal{F}, \|x\|=1} (S(h^p)^{\frac{1}{p}} x, (A^p \#_{\alpha} B^p)^{\frac{1}{p}} x) \quad \text{by } 0 < q < 1 \\ &\leq S(h^p)^{\frac{1}{p}} \lambda_k(A^p \#_{\alpha} B^p)^{\frac{1}{p}} \end{aligned}$$

が、成り立ちます。即ち、各固有値の段階で $S(h^p)^{\frac{1}{p}}$ を乗ずることにより評価できることを示しています。だから、あるユニタリ行列 U が存在して、

$$(A^q \#_{\alpha} B^q)^{\frac{1}{q}} \leq S(h^p)^{\frac{1}{p}} U (A^p \#_{\alpha} B^p)^{\frac{1}{p}} U^*.$$

が成立します。従って、いずれの場合でも、補題が成り立つことがわかります。 \square

従って、この補題を用いることによって、私たちは次の結果を得ます。

Theorem 2. H と K を、 $mI \leq H, K \leq MI$ を満たすエルミット行列とする。ただし、 m, M は、 $m \leq M$ を満たす実数の定数とします。このとき、

$$\| \| e^{(1-\alpha)H + \alpha K} \| \| \leq S(e^{p(M-m)})^{\frac{1}{p}} \| \| (e^{pH} \#_{\alpha} e^{pK})^{\frac{1}{p}} \| \|$$

が、すべての $p > 0$ に対して成立します。さらに、 $p \downarrow 0$ のとき、右辺は左辺に収束する。特に、 $p = 1$, $\alpha = \frac{1}{2}$ とおくと、

$$\| \| e^{H+K} \| \| \leq S(e^{2(M-m)}) \| \| e^{2H} \# e^{2K} \| \|$$

が、成立する。

Remark 3. (1) Yamazaki-Yanagida [14] の結果より、 $\lim_{p \rightarrow 0} S(h^p)^{\frac{1}{p}} = 1$ がいえますので、Lie-Trotter の公式の α -幾何平均版とあわせて、右辺が左辺に収束することがわかります。

(2) 定理 2 により、そのスペクトルが閉区間 $[m, M]$ に分布しているエルミット行列 H と K に対しては、いつでもその商の存在範囲は

$$1 \leq \frac{\| \| e^{H+K} \| \|}{\| \| e^{2H} \| \| \| e^{2K} \| \|} \leq S(e^{2(M-m)})$$

になっています。

ところで、 $\alpha = 0$ から $\alpha = 1$ まで、変化させると、 $e^{(1-\alpha)H+\alpha K}$ と、 $(e^{pH} \#_{\alpha} e^{pK})^{\frac{1}{p}}$ は、 e^H と e^K を結ぶ path だという解釈ができます。Ando-Hiai の結果は、その作用素空間において、ユニタリ不変ノルムというフィルターで眺めると、常に一定の大小関係が保たれることを保証していると思えることができます。

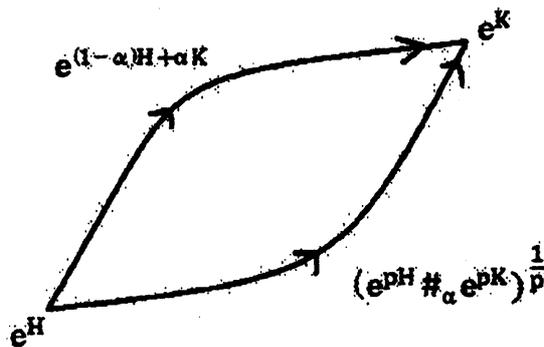


図 1: e^H と e^K を結ぶ 2 つの path

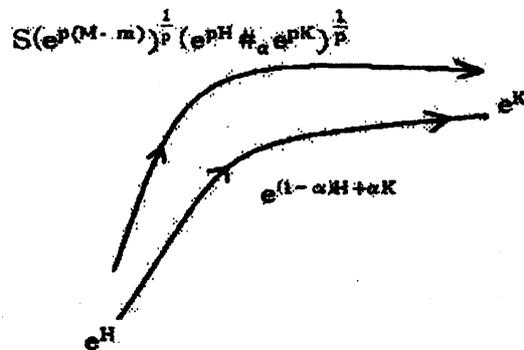


図 2: e^H と e^K を結ぶ逆不等式からみた path

私たちが得た定理 2 は、その反対からの評価は、定数 $S(e^{p(M-m)})^{\frac{1}{p}}$ の範囲内にあることを示していると見れます。しかし、逆不等式に表れる定数は、 α に対して一定です。

path という観点に立てば、その端点では、両者の評価は一致して欲しいところです。そこで、次節において、定理 2 の改良を試みることにします。

3 カントロヴィッチ定数を用いた評価

まず、一般化されたカントロヴィッチ定数の紹介から始めます [4]。算術・幾何平均の不等式は次のような作用素不等式の特別な場合だと解釈できます。A を正定値行列としたとき、任意の実数 $r \leq s$ に対して、

$$(A^r x, x)^{\frac{1}{r}} \leq (A^s x, x)^{\frac{1}{s}}$$

がすべての単位ベクトル x に対して成立します。正の数の算術・幾何平均の不等式は $r = 0$ 、 $s = 1$ の場合だと考えることができます。即ち、

$$\exp(\log A x, x) \leq (A x, x)$$

です。Specht ratio をこの枠組みで考えると次のようになります。正定値行列 A が、 $0 < mI \leq A \leq MI$ を満たしているとき、

$$(A^s x, x)^{\frac{1}{s}} \leq K(h^r, \frac{s}{r})^{\frac{1}{s}} (A^r x, x)^{\frac{1}{r}}$$

が、成立する。ここで、 $K(h, p)$ は、一般化されたカントロヴィッチ定数と呼ばれているもので、

$$K(h, p) = \frac{h^p - h}{(p-1)(h-1)} \left(\frac{p-1}{p} \frac{h^p-1}{h^p-h} \right)^p \quad p \in \mathbb{R}.$$

勿論、 $s = 1$ で、 $r \rightarrow 0$ とすれば、 $K(h^r, \frac{s}{r})^{\frac{1}{s}} \rightarrow S(h)$ が成り立ちます。即ち、

$$(A x, x) \leq S(h) \exp(\log A x, x)$$

が成り立っています。また、 $K(h, 0) = K(h, 1) = 1$ が分っています。

補題 1 に対応する形で、私たちは次の結果を得ました。

Lemma 4. A, B を正定値行列で、 $0 < mI \leq A, B \leq MI$ を満たす。 $h = \frac{M}{m}$ で、 $\alpha \in [0, 1]$ とする。 $0 < q \leq 1$ とします。このとき、

$$\| (A^q \#_{\alpha} B^q)^{\frac{1}{q}} \| \leq K(h, p)^{-\frac{\alpha}{p}} K(h^{2p}, \alpha)^{-\frac{1}{p}} \| (A^p \#_{\alpha} B^p)^{\frac{1}{p}} \| \quad \text{for } 0 < q \leq p \leq 1, \quad (9)$$

$$\| (A^q \#_{\alpha} B^q)^{\frac{1}{q}} \| \leq K(h^{2p}, \alpha)^{-\frac{1}{p}} \| (A^p \#_{\alpha} B^p)^{\frac{1}{p}} \| \quad \text{for } p \geq 1 \quad (10)$$

が成り立つ。

Proof. $0 < q \leq p \leq 1$ と $\|x\| = 1$ に対して、

$$\begin{aligned} & (x, (A^q \sharp_{\alpha} B^q)x)^{\frac{1}{q}} \\ & \leq (x, Bx)^{\frac{2\alpha}{p}} \|A^{\frac{q}{2}}x\|^{\frac{2}{q} - \frac{2\alpha}{q}} \quad \text{by } 0 < \alpha < 1, 0 < q < 1 \\ & \leq (K(h, p)^{-1}(x, B^p x))^{\frac{\alpha}{p}} \|A^{\frac{q}{2}}x\|^{\frac{2}{q} - \frac{2\alpha}{q}} \quad \text{by } 0 < p < 1 \\ & \leq K(h, p)^{-\frac{\alpha}{p}} K(h^{2p}, \alpha)^{-\frac{1}{p}} (x, A^p \sharp_{\alpha} B^p x)^{\frac{1}{p}} \|A^{\frac{q}{2}}x\|^{\frac{2\alpha}{p} - \frac{2}{p}} \|A^{\frac{q}{2}}x\|^{\frac{2}{q} - \frac{2\alpha}{q}} \\ & \leq K(h, p)^{-\frac{\alpha}{p}} K(h^{2p}, \alpha)^{-\frac{1}{p}} (x, A^p \sharp_{\alpha} B^p x)^{\frac{1}{p}} \quad \text{by } 0 < q \leq p \end{aligned}$$

が成立します。なお、最後の不等式は、 $0 < q \leq p$ なので、

$$\begin{aligned} \|A^{\frac{q}{2}}x\|^{\frac{2\alpha-2}{p}} \|A^{\frac{q}{2}}x\|^{\frac{2-2\alpha}{q}} & \leq (A^p x, x)^{\frac{\alpha-1}{p}} (A^q x, x)^{\frac{1-\alpha}{q}} \\ & = (A^p x, x)^{\frac{\alpha-1}{p}} (A^{p-\frac{q}{2}} x, x)^{\frac{1-\alpha}{q}} \\ & \leq (A^p x, x)^{\frac{\alpha-1}{p}} (A^p x, x)^{\frac{1-\alpha}{p}} = 1 \end{aligned}$$

が、成立します。再び、最小最大原理により

$$\lambda_k(A^q \sharp_{\alpha} B^q)^{\frac{1}{q}} \leq K(h, p)^{-\frac{\alpha}{p}} K(h^{2p}, \alpha)^{-\frac{1}{p}} \lambda_k(A^p \sharp_{\alpha} B^p)^{\frac{1}{p}}$$

がわかり、 $0 < q \leq p \leq 1$ に対してこの補題は成立します。また、 $p \geq 1$ の場合は、上の式変形で Hölder-McCarthy の不等式 $(x, Bx)^p \leq (x, B^p x)$ が成立するので、 $K(h, p)^{-1}$ が必要ありません。□

この補題を用いることにより、私たちは次の定理を得ます。

Theorem 5. H と K を、 $mI \leq H, K \leq MI$ を満たすエルミット行列とする。ただし、 m, M は、 $m \leq M$ を満たす実数の定数とします。このとき、

$$\| \| e^{(1-\alpha)H + \alpha K} \| \| \leq K(e^{M-m}, p)^{-\frac{\alpha}{p}} K(e^{2p(M-m)}, \alpha)^{-\frac{1}{p}} \| \| (e^{pH} \sharp_{\alpha} e^{pK})^{\frac{1}{p}} \| \| \quad \text{for } 0 < p \leq 1,$$

$$\| \| e^{(1-\alpha)H + \alpha K} \| \| \leq K(e^{2p(M-m)}, \alpha)^{-\frac{1}{p}} \| \| (e^{pH} \sharp_{\alpha} e^{pK})^{\frac{1}{p}} \| \| \quad \text{for } p \geq 1$$

が、成立します。特に、 $p = 1, \alpha = \frac{1}{2}$ とすれば、

$$\| \| e^{H+K} \| \| \leq \frac{e^{2M} + e^{2m}}{2e^M e^m} \| \| e^{2H} \sharp e^{2K} \| \|$$

が、成立する。

ここで、確かに $p \geq 1$ のときは、 $\alpha = 0, 1$ とすれば、 $0 < p < 1$ のときは、 $\alpha = 0$ とすれば、定理 5 における右辺の係数は、1 になります。私たちの当初の目的は達成されたことになります。しかし、このように評価式が二つ出てくると、新たな問題が生じます。それらの評価式の関係はどうなっているのか？これについては、次が分ります。

Remark 6. $\alpha = \frac{1}{2}$ のとき、 $p > 0$ に対して、Specht の定理 (7) より、

$$K(h^{2p}, \frac{1}{2})^{-\frac{1}{p}} = \left(\frac{h^{\frac{p}{2}} + h^{-\frac{p}{2}}}{2} \right)^{\frac{1}{p}} \leq \left(S(h^p) \sqrt{h^{\frac{p}{2}} h^{-\frac{p}{2}}} \right)^{\frac{1}{p}} = S(h^p)^{\frac{1}{p}}.$$

従って、 $p \geq 1$ の場合は、

$$\| \| e^{H+K} \| \| \leq K(e^{4p(M-m)}, \frac{1}{2})^{-\frac{1}{p}} \| \| (e^{2pH} \# e^{2pK})^{\frac{1}{p}} \| \| \leq S(e^{2p(M-m)})^{\frac{1}{p}} \| \| (e^{2pH} \# e^{2pK})^{\frac{1}{p}} \| \|$$

が成立します。特に、 $p = 1$ のときは、

$$\| \| e^{H+K} \| \| \leq \frac{e^{2M} + e^{2m}}{2e^M e^m} \| \| e^{2H} \# e^{2K} \| \| \leq S(e^{2(M-m)}) \| \| e^{2H} \# e^{2K} \| \|$$

になります。最後に、 $0 < p \leq 1$ の場合について、 $h = 2$ 、 $\alpha = \frac{1}{2}$ としたとき、 $S(2^p)^{\frac{1}{p}}$ と $K(2, p)^{-\frac{1}{2p}} K(2^{2p}, \frac{1}{2})^{-\frac{1}{p}}$ のグラフの概形を示します。

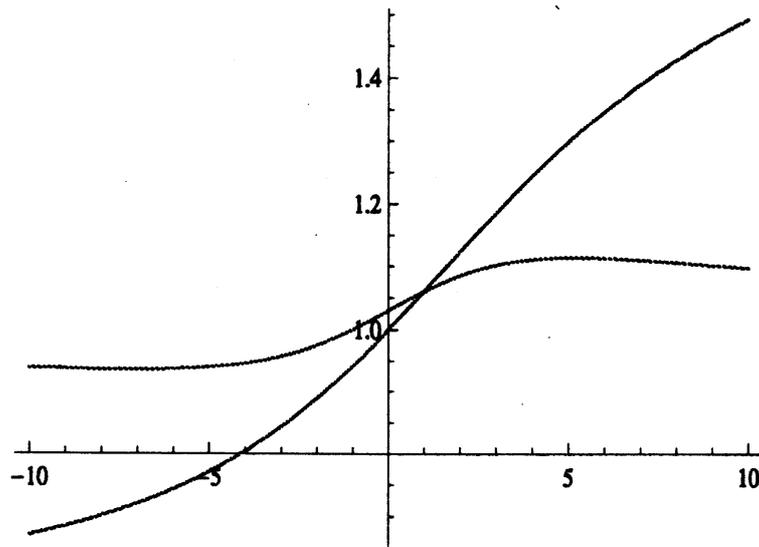


図 3: $S(2^p)^{\frac{1}{p}}$ と $K(2, p)^{-\frac{1}{2p}} K(2^{2p}, \frac{1}{2})^{-\frac{1}{p}}$ のグラフの概形

謝辞 神奈川大学の山崎さんには、補題 1 の q の範囲について、また、東京理科大学の柳田さんには、注意 6 の評価式に関して貴重な助言をいただき、ここに感謝したいと思います。

参考文献

- [1] 安藤毅, *Golden-Thompson の不等式をめぐって*, 北海道大学電子科学研究所 電子科学研究, 1(1993), pp. 1–6.
- [2] T.Ando and F.Hiai, *Log-majorization and complementary Golden-Thompson type inequalities*, Linear Alg. Appl., **197/198** (1994), pp. 113–131.
- [3] R.Bhatia, *Matrix Analysis*, Springer, New York, 1997.
- [4] T.Furuta, J.Mićić, J.E.Pečarić and Y.Seo, *Mond-Pečarić Method in Operator Inequalities*, Monographs in Inequalities 1, Element, Zagreb, 2005.
- [5] S.Golden, *Lower bounds for Helmholtz function*, Phys. Rev., **137**(1965), pp. B1127–B1128.
- [6] F.Hiai and D.Petz, *The Golden-Thompson trace inequality is complemented*, Linear Algebra Appl., **181** (1993), pp. 153–185.
- [7] F.Kubo and T.Ando, *Means of positive linear operators*, Math. Ann., **246** (1980), 205–224.
- [8] A.Lenard, *Generalization of the Golden-Thompson inequality $\text{Tr}(e^A e^B) \geq \text{Tr}e^{A+B}$* , Indiana Univ. Math. J., **21**(1971), pp. 457–467.
- [9] W.Specht, *Zur Theorie der elementaren Mittel*, Math. Z., **74** (1960), pp. 91–98.
- [10] K.Symanzik, *Proof and refinements of an inequality of Feynman*, J. Math. Phys., **6**(1965), pp. 1155–1156.
- [11] C.J.Thompson, *Inequality with applications in statistical mechanics*, J. Math. Phys., **6**(1965), pp. 469–480.
- [12] M.Tominaga, *Specht's ratio in the Young inequality*, Sci. Math. Japon., **55**(2002), pp. 585–588.
- [13] A.M.Turing, *Rounding off-errors in matrix processes*, Quart. J. Mech. Appl. Math., **1** (1948), pp. 287–308.
- [14] T.Yamazaki and M.Yanagida, *Characterizations of chaotic order associated with Kantorovich inequality*, Sci. Math., **2**(1999), pp. 37–50.

FACULTY OF ENGINEERING, SHIBAURA INSTITUTE OF TECHNOLOGY, 307 FUKASAKU,
MINUMA-KU, SAITAMA-CITY, SAITAMA 337-8570, JAPAN.

E-mail address : yukis@sic.shibaura-it.ac.jp