

2020年7月22日

量子情報数理特論

(第11回) von Neumann エントロピー, 量子相対エントロピー, 量子相互情報量

電気通信大学 大学院情報理工学研究科

小川朋宏

10 vN エントロピー，量子相対エントロピー，量子相互情報量

(課題)

- (1) von Neumann エントロピーと Shannon エントロピーの関係を述べよ
- (2) 二体系の純粋状態について，それぞれの系の縮約密度作用素の von Neumann エントロピーは等しい．なぜか？
- (3) 量子相対エントロピーについて，非負性：

$$D(\rho||\sigma) \geq 0$$

および等号成立条件を，単調性により示せ

- (4) 量子相対エントロピーの結合凸性より， σ を固定した場合の関数：

$$f(\rho) = D(\rho||\sigma)$$

は ρ に関して凸関数 (convex) になることを確認せよ．

- (5) 上記(4) + エントロピーとダイバージェンスの関係(18)から，von Neumann エントロピーは凹関数 (concave) になることを確認せよ．

10.1 エルミート作用素の関数（復習）

Definition 1 (復習). A をエルミート作用素, $f : x \in \mathbb{R} \mapsto f(x) \in \mathbb{R}$ を実数値関数とするとき, スペクトル分解

$$A = \sum_{k=1}^m a_k E_k \quad (1)$$

を用いて, $f(A)$ を次式で定義する :

$$f(A) := \sum_{k=1}^m f(a_k) E_k$$

ただし, A の固有値は f の定義域に入っているとする.

Lemma 1. 上記において, ユニタリ作用素 U に対して

$$f(UAU^*) = Uf(A)U^* \quad (2)$$

(証明) (1) より以下が成立.

$$UAU^* = \sum_{k=1}^m a_k U E_k U^* \quad (3)$$

$U E_k U^*$ はエルミートかつ

$$(U E_k U^*)^2 = U E_k U^* U E_k U^* = U E_k U^*$$

であるから射影子である. スペクトル分解の一意性から, (3) はエルミート作用素 UAU^* のスペクトル分解である. よって,

$$\begin{aligned} f(UAU^*) &= \sum_{k=1}^m f(a_k) U E_k U^* \\ &= U \left(\sum_{k=1}^m f(a_k) E_k \right) U^* = U f(A) U^* \end{aligned}$$

□

10.2 フォン・ノイマン・エントロピー (von Neumann entropy)

Definition 2. Hilbert空間 $\mathcal{H}$ 上の密度作用素 $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ に対して,

$$H(\rho) := -\text{Tr } \rho \log \rho \quad (4)$$

$d = \dim \mathcal{H}$ として, $\lambda_k, |\varphi_k\rangle$ ($k = 1, 2, \dots, d$) を ρ の固有値, 固有ベクトルとする. 固有値分解:

$$\rho = \sum_{k=1}^d \lambda_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|$$

を考える.

$$-\rho \log \rho = -\sum_{k=1}^d \lambda_k \log \lambda_k |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|,$$

であるから, 両辺のトレースをとると,

$$H(\rho) = -\sum_{k=1}^d \lambda_k \log \lambda_k$$

となる.

- von Neumann エントロピーは, ρ の固有値 $\{\lambda_k\}_{k=1}^d$ から成る確率分布に対するシャノン・エントロピーに等しい.
- 重複固有値がある場合は, 確率分布の条件:

$$\sum_{k=1}^d \lambda_k = 1$$

を満たすように, 重複度の分だけ固有値を並べる必要があることに注意.

10.3 フォン・ノイマン・エントロピーの性質

Lemma 2. $\rho \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ とするとき,

(i) (非負性)

$$H(\rho) \geq 0 \quad (\text{等号成立} \iff \rho \text{ は純粋状態})$$

(ii) (最大値)

$$H(\rho) \leq \log \dim \mathcal{H}$$

$$(\text{等号成立} \iff \rho = \frac{1}{\dim \mathcal{H}} I)$$

(iii) $\rho_{AB} \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ が純粋状態であるとき,
縮約密度作用素 (reduced density operator)

$$\rho_A = \text{Tr}_B \rho_{AB}, \quad \rho_B = \text{Tr}_A \rho_{AB}$$

について,

$$H(\rho_A) = H(\rho_B)$$

(iv) (加法性)

$$H(\rho_A \otimes \rho_B) = H(\rho_A) + H(\rho_B)$$

(v) (ユニタリ不変性) 任意のユニタリ作用素 U に対して,

$$H(U\rho U^*) = H(\rho)$$

(証明) (i) はシャノン・エントロピーの性質である. $d = \dim \mathcal{H}$ とすると, 等号成立条件について,

$$H(\rho) = 0$$

$$\iff H(\{\lambda_k\}_{k=1}^d) = 0$$

$$\iff \{\lambda_k\}_{k=1}^d \text{ の中で一つだけ } 1 \text{ で他はゼロ}$$

$$\iff \rho \text{ は純粋状態}$$

(ii) もシャノン・エントロピーの性質:

$$H(\{\lambda_k\}_{k=1}^d) \leq \log d$$

であり，等号成立条件について，

$$H(\{\lambda_k\}_{k=1}^d) = \log d$$

$$\iff \{\lambda_k\}_{k=1}^d \text{は一様分布}$$

$$\iff \rho = \frac{1}{d} \sum_{k=1}^d |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k| = \frac{1}{d} I$$

(iii) : 純粋状態 $\rho_{AB} = |\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}|$ に対して，
シュミット分解：

$$|\psi_{AB}\rangle = \sum_k \sqrt{\lambda_k} |e_k\rangle \otimes |f_k\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B,$$

を考えると，

$$|\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}| = \sum_k \sum_l \sqrt{\lambda_k} \sqrt{\lambda_l} |e_k\rangle\langle e_l| \otimes |f_k\rangle\langle f_l|$$

部分トレースをとると，

$$\rho_A = \sum_k \lambda_k |e_k\rangle\langle e_k|, \quad \rho_B = \sum_k \lambda_k |f_k\rangle\langle f_k|$$

であるから， ρ_A と ρ_B の固有値は等しい． von Neumann エントロピーは固有値のシャノン・エントロピーであるから (iii) が成立．

加法性 (iv) : 最初に $\log(\rho_A \otimes \rho_B)$ を計算する． ρ_A, ρ_B のスペクトル分解を

$$\rho_A = \sum_i \lambda_{A,i} E_{A,i}, \quad \rho_B = \sum_j \lambda_{B,j} E_{B,j}$$

とすると， $\rho_A \otimes \rho_B$ のスペクトル分解は

$$\rho_A \otimes \rho_B = \sum_i \sum_j \lambda_{A,i} \lambda_{B,j} E_{A,i} \otimes E_{B,j}$$

である。よって,

$$\begin{aligned}\log(\rho_A \otimes \rho_B) &= \sum_i \sum_j \log(\lambda_{A,i} \lambda_{B,j}) E_{A,i} \otimes E_{B,j} \\ &= \sum_i \sum_j \log \lambda_{A,i} E_{A,i} \otimes E_{B,j} + \sum_i \sum_j \log \lambda_{B,j} E_{A,i} \otimes E_{B,j} = \log \rho_A \otimes I_B + I_A \otimes \log \rho_B\end{aligned}\quad (5)$$

$-\rho_A \otimes \rho_B$ をかけてトレースをとると (iv) が示される。

$$\begin{aligned}H(\rho_A \otimes \rho_B) &= -\text{Tr}(\rho_A \otimes \rho_B) \log(\rho_A \otimes \rho_B) \\ &= -\text{Tr}_A \rho_A \log \rho_A \cdot \text{Tr}_B \rho_B - \text{Tr}_A \rho_A \cdot \text{Tr} \rho_B \log \rho_B = H(\rho_A) + H(\rho_B)\end{aligned}$$

ユニタリ不変性(v) : 関数 $f(x) = -x \log x$ に (2) を適用すると,

$$H(U\rho U^*) = \text{Tr} f(U\rho U^*) = \text{Tr} U f(\rho) U^* = \text{Tr} f(\rho) U^* U = \text{Tr} f(\rho) = H(\rho)$$

Definition 3 (条件付きフォン・ノイマン・エントロピー). $\rho_{AB} \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ に対して,

$$H_{\rho_{AB}}(A|B) := H(\rho_{AB}) - H(\rho_B),$$

(注意) 条件付き von Neumann エントロピーはチェイン・ルール

$$H(\rho_{AB}) = H(\rho_B) + H_{\rho_{AB}}(A|B)$$

が成立するように定義されている。古典系では条件付きエントロピーは非負であったが、**条件付き von Neumann エントロピーは負になることもある**。例えば ρ_{AB} を最大エンタングル状態とすると、 $H(\rho_{AB}) = 0$ であるが、 $H_{\rho_{AB}}(A|B) = -H(\rho_B) = -\log d \leq 0$ である。

10.4 量子相対エントロピー (quantum relative entropy)

Definition 4. 密度作用素 ρ, σ に対して,

$$D(\rho||\sigma) := \text{Tr } \rho (\log \rho - \log \sigma). \quad (6)$$

- 量子相対エントロピーは, 古典系のダイバージェンス

$$D(P||Q) = \sum_{x \in \mathcal{X}} P(x) \log \frac{P(x)}{Q(x)}$$

に対応する情報量で, 量子状態 ρ, σ の区別のし易さ (distinguishability) を表す

- 量子ダイバージェンス (quantum divergence), 梅垣エントロピーともよばれる
- von Neumann エントロピー, 量子相互情報量 (Holevo 相互情報量) は量子相対エントロピーの派生
- 様々な情報量に関する性質は, 量子相対エントロピーの単調性から示される

量子相対エントロピーの単調性 (monotonicity)

Theorem 1. 任意の密度作用素 ρ, σ と任意の CPTP 写像 $\mathcal{E}$ に対して,

$$D(\rho||\sigma) \geq D(\mathcal{E}(\rho)||\mathcal{E}(\sigma)) \quad (7)$$

等号成立 $\iff \exists \mathcal{R}$ (CPTP), $\mathcal{R}(\mathcal{E}(\rho)) = \rho, \mathcal{R}(\mathcal{E}(\sigma)) = \sigma$
(ρ, σ を同時に復元する逆向きの CPTP 写像 $\mathcal{R}$ が存在)

10.5 量子相対エントロピーの性質

Lemma 3. ρ, σ を密度作用素とする.

- (i) (非負性) $D(\rho||\sigma) \geq 0$ (等号成立 $\iff \rho = \sigma$)
- (ii) (ユニタリ不変性) 任意のユニタリ作用素 U について,

$$D(U\rho U^*||U\sigma U^*) = D(\rho||\sigma)$$

- (iii) (加法性) $D(\rho_A \otimes \rho_B||\sigma_A \otimes \sigma_B) = D(\rho_A||\sigma_A) + D(\rho_B||\sigma_B)$
- (iv) (結合凸性, joint convexity) 任意の $\rho_1, \rho_2, \sigma_1, \sigma_2 \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ と, 任意の $0 \leq t \leq 1$ について,

$$tD(\rho_1||\sigma_1) + (1-t)D(\rho_2||\sigma_2) \geq D(t\rho_1 + (1-t)\rho_2||t\sigma_1 + (1-t)\sigma_2)$$

(証明) **非負性 (i)** : すべての入力を, ある密度作用素 ρ_0 に出力する CPTP 写像 $\mathcal{E}$ を考えると,

$$D(\rho||\sigma) \geq D(\mathcal{E}(\rho)||\mathcal{E}(\sigma)) = D(\rho_0||\rho_0) = 0$$

等号成立条件 : $\rho = \sigma$ ならば $D(\rho||\sigma) = 0$ は明らか. $D(\rho||\sigma) = 0$ のとき, 逆向きの CPTP 写像 $\mathcal{R}$ が存在して,

$$\rho = \mathcal{R} \circ \mathcal{E}(\rho) = \mathcal{R}(\rho_0), \quad \sigma = \mathcal{R} \circ \mathcal{E}(\sigma) = \mathcal{R}(\rho_0)$$

よって, $\rho = \sigma$ である.

ユニタリ不変性 (i), 加法性 (iii) : von Neumann エントロピーと全く同様に示される.

結合凸性(iv) :

$$R := \begin{pmatrix} t\rho_1 & 0 \\ 0 & (1-t)\rho_2 \end{pmatrix}, \quad S := \begin{pmatrix} t\sigma_1 & 0 \\ 0 & (1-t)\sigma_2 \end{pmatrix} \quad (8)$$

とおくと R, S は密度作用素になる．このとき，

$$\begin{aligned} \log R - \log S &= \begin{pmatrix} \log(t\rho_1) & 0 \\ 0 & \log((1-t)\rho_2) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \log(t\sigma_1) & 0 \\ 0 & \log((1-t)\sigma_2) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \log \rho_1 - \log \sigma_1 & 0 \\ 0 & \log \rho_2 - \log \sigma_2 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (9)$$

ただし，(5)を用いると $\log(t\rho_1) = (\log t)I + \log \rho_1$ であることから， $\log t, \log(1-t)$ がキャンセルすることを用了．よって，

$$\begin{aligned} D(R||S) &= \text{Tr } R(\log R - \log S) = t \text{Tr } \rho_1 (\log \rho_1 - \log \sigma_1) + (1-t) \text{Tr } \rho_2 (\log \rho_2 - \log \sigma_2) \\ &= tD(\rho_1||\sigma_1) + (1-t)D(\rho_2||\sigma_2), \end{aligned} \quad (10)$$

これは(iv)の左辺である．一方，対角ブロックを足す写像

$$\mathcal{E} : \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \longmapsto A + D,$$

はCPTP写像である．この写像を R, S に適用すると，

$$\mathcal{E}(R) = t\rho_1 + (1-t)\rho_2, \quad \mathcal{E}(S) = t\sigma_1 + (1-t)\sigma_2$$

であるから， $D(\mathcal{E}(R)||\mathcal{E}(S))$ は(iv)の右辺である．単調性より $D(R||S) \geq D(\mathcal{E}(R)||\mathcal{E}(S))$ であるから，結合凸性(iv)が成立．

10.6 Holevo相互情報量

Definition 5. 密度作用素 $W_1, W_2, \dots, W_N \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ と、確率分布 $P(x)$ ($x = 1, 2, \dots, N$) に対して、

$$I(P; W_1, \dots, W_N) := \sum_{x=1}^N P(x) D(W_x \| W_P) \quad \left(W_P = \sum_{i=1}^N P(x) W_x \right) \quad (11)$$

- 以降では簡単のため、 $W := (W_1, W_2, \dots, W_N)$ とおき、Holevo相互情報量を $I(P; W)$ で表す。
- von Neumann エントロピーを用いた表式を定義にすることもある。

$$\begin{aligned} I(P; W) &= \sum_{x=1}^N P(x) \operatorname{Tr} W_x (\log W_x - \log W_P) = \sum_{x=1}^N P(x) \operatorname{Tr} W_x \log W_x - \sum_{x=1}^N P(x) \operatorname{Tr} W_x \log W_P \\ &= \sum_{x=1}^N P(x) \operatorname{Tr} W_x \log W_x - \operatorname{Tr} W_P \log W_P = H(W_P) - \sum_{x=1}^N P(x) H(W_x) \end{aligned} \quad (12)$$

- これは古典相互情報量に対する次式に対応：

$$I(X; Y) = H(Y) - H(Y|X) = H(Y) - \sum_{x=1}^N P(x) H(P_{Y|X}(\cdot | x))$$

10.7 Holevo相互情報量の性質と量子相互情報量

量子相対エントロピーの単調性から直ちに、次の性質が導かれる。

Holevo相互情報量の性質

Lemma 4.

- (i) (非負性) $I(P; W) \geq 0$ (等号成立 $\iff P(x) > 0$ であるすべての x について $W_x = W_P$)
- (ii) (単調性) 任意の CPTP 写像 $\mathcal{E}$ について,

$$I(P; W_1, \dots, W_N) \geq I(P; \mathcal{E}(W_1), \dots, \mathcal{E}(W_N))$$

Holevo相互情報量を含む量子相互情報量として次のものが知られている。

Definition 6 (量子相互情報量). 密度作用素 $\rho_{AB} \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ に対して,

$$I_{\rho_{AB}}(A; B) := D(\rho_{AB} \| \rho_A \otimes \rho_B) \quad (\rho_A := \text{Tr}_B \rho_{AB}, \rho_B := \text{Tr}_A \rho_{AB}) \quad (13)$$

量子相対エントロピーの非負性から、直ちに、

$$I_{\rho_{AB}}(A; B) \geq 0 \quad (\text{等号成立} \iff \rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B)$$

(5) と部分トレースの性質 $\text{Tr} \rho_{AB}(X_A \otimes I_B) = \text{Tr} \rho_A X_A$ より,

$$\begin{aligned} I_{\rho_{AB}}(A; B) &= \text{Tr} \rho_{AB} \{ \log \rho_{AB} - \log(\rho_A \otimes \rho_B) \} \\ &= \text{Tr} \rho_{AB} \log \rho_{AB} - \text{Tr} \rho_{AB} (\log \rho_A \otimes I_B) - \text{Tr} \rho_{AB} (I_A \otimes \log \rho_B) \\ &= \text{Tr} \rho_{AB} \log \rho_{AB} - \text{Tr} \rho_A \log \rho_A - \text{Tr} \rho_B \log \rho_B = H(\rho_A) + H(\rho_B) - H(\rho_{AB}) \end{aligned}$$

10.8 Holevo相互情報量と量子相互情報量の関係

- 密度作用素 $W_1, W_2, \dots, W_N \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ と, 確率分布 $P(x)$ ($x = 1, 2, \dots, N$) が与えられているとする.
- $\mathcal{H}_A$ を $\dim \mathcal{H}_A = N$ で正規直交基底 $\{|x\rangle\}_{x=1}^N$ をもつ Hilbert 空間とし, $\mathcal{H}_B = \mathcal{H}$ とする.
- 合成系 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ の密度作用素を

$$\rho_{AB} = \sum_{x=1}^N P(x) |x\rangle\langle x| \otimes W_x$$

とおく (cq 状態とよばれる). このとき,

$$\rho_A = \text{Tr}_B \rho_{AB} = \sum_{x=1}^N P(x) |x\rangle\langle x|, \quad \rho_B = \text{Tr}_A \rho_{AB} = \sum_{x=1}^N P(x) W_x = W_P$$

であるから,

$$\rho_A \otimes \rho_B = \sum_{x=1}^N P(x) |x\rangle\langle x| \otimes W_P$$

クロネッカー積表現を考えると,

$$\rho_{AB} = \begin{pmatrix} P(1) W_1 & & & 0 \\ & P(2) W_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & P(N) W_N \end{pmatrix} \quad (14)$$

$$\rho_A \otimes \rho_B = \begin{pmatrix} P(1) W_P & & & 0 \\ & P(2) W_P & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & P(N) W_P \end{pmatrix}. \quad (15)$$

このことから, cq 状態 ρ_{AB} の量子相互情報量は Holevo 相互情報量に他ならない.

$$\begin{aligned} D(\rho_{AB} || \rho_A \otimes \rho_B) &= \sum_{x=1}^N \text{Tr}(P(x) W_x) \{ \log(P(x) W_x) - \log(P(x) W_P) \} \\ &= \sum_{x=1}^N P(x) \text{Tr} W_x (\log W_x - \log W_P) = I(P; W) \end{aligned} \quad (16)$$

10.9 von Neumann エントロピーの凹性 (concavity) と劣加法性 (subadditivity)

Lemma 5 (エントロピーとダイバージェンスの関係).

$$D(\rho||\rho_{\text{mix}}) = \text{Tr } \rho \{ \log \rho - \log(\frac{1}{\dim \mathcal{H}} I) \} = \log \dim \mathcal{H} - H(\rho) \quad (17)$$

ただし, $\rho_{\text{mix}} = \frac{1}{\dim \mathcal{H}} I$ は完全混合状態. これより,

$$H(\rho) = \log \dim \mathcal{H} - D(\rho||\rho_{\text{mix}}) \quad (18)$$

(注意) 量子相対エントロピーの正值性より, $H(\rho) \leq \log \dim \mathcal{H}$ と等号成立条件 $\rho = \rho_{\text{mix}}$ が導かれる.

Lemma 6 (von Neumann エントロピーの凹性, 劣加法性).

(i) (凹性) 任意の密度作用素 ρ_1, ρ_2 と, 任意の $0 \leq t \leq 1$ について,

$$H(t\rho_1 + (1-t)\rho_2) \geq tH(\rho_1) + (1-t)H(\rho_2) \quad (19)$$

等号成立 $\iff t = 0, 1$ または $\rho_1 = \rho_2$.

(ii) (劣加法性) 任意の密度作用素 $\rho_{AB} \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ について,

$$H(\rho_A) + H(\rho_B) \geq H(\rho_{AB}) \quad (\rho_A = \text{Tr}_B \rho_{AB}, \rho_B = \text{Tr}_A \rho_{AB}) \quad (20)$$

等号成立 $\iff \rho_{AB} = \rho_A \otimes \rho_B$.

(iii) (強劣加法性) 任意の密度作用素 $\rho_{ABC} \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_C$ について,

$$H(\rho_{AB}) + H(\rho_{BC}) \geq H(\rho_{ABC}) + H(\rho_B) \quad (21)$$

(注意) 条件付き von Neumann エントロピーを用いると, (21) は以下のように書ける
(強劣加法性とよぶ理由である).

$$H_{\rho_{AB}}(A|B) + H_{\rho_{BC}}(C|B) \geq H_{\rho_{ABC}}(AC|B) \quad (22)$$

(証明) (i) : 密度作用素 ρ_1, ρ_2 と確率分布 $P(1) = t, P(2) = 1 - t$ に対して, Holevo 相互情報量を考える

$$I(P; \rho_1, \rho_2) = H(t\rho_1 + (1-t)\rho_2) - tH(\rho_1) - (1-t)H(\rho_2) \geq 0$$

これより (i) が示された.

(ii) : 量子相互情報量の正值性より

$$I_{\rho_{AB}}(A; B) = H(\rho_A) + H(\rho_B) - H(\rho_{AB}) \geq 0$$

(iii) : 部分トレースをとる写像 Tr_C は CPTP 写像である. よって, 量子相対エントロピーの単調性より,

$$\begin{aligned} H(\rho_A) + H(\rho_{BC}) - H(\rho_{ABC}) &= D(\rho_{ABC} \| \rho_A \otimes \rho_{BC}) \\ &\geq D(\rho_{AB} \| \rho_A \otimes \rho_B) = H(\rho_A) + H(\rho_B) - H(\rho_{AB}) \end{aligned}$$

□