2021 年 6 月 23 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（部分トレース）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．

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

$$A = \sum_{k=1}^{m} a_k E_k \tag{1}$$

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

$$f(UAU^*) = Uf(A)U^* \tag{2}$$

（証明） (1)より以下が成立.

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

UE_kU^*はエルミートかつ

$$(UE_kU^*)^2 = UE_kU^*UE_kU^* = UE_kU^*$$

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，

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

□

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

$$H(\rho) := -\operatorname{Tr} \rho \log \rho \tag{4}$$

$d = \dim \mathcal{H}$として，λ_k, $|\varphi_k\rangle$ $(k = 1, 2, \cdots, d)$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．

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)

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

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，

$$H(\rho) = 0$$
$$\iff H(\{\lambda_k\}_{k=1}^d) = 0$$
$$\iff \{\lambda_k\}_{k=1}^d \text{の中で一つだけ 1 で他はゼロ}$$
$$\iff \rho \text{は純粋状態}$$

(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，

$$
\begin{aligned}
&H(\{\lambda_k\}_{k=1}^d) = \log d \\
&\iff \{\lambda_k\}_{k=1}^d \text{は一様分布} \\
&\iff \rho = \frac{1}{d}\sum_{k=1}^d |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k| = \frac{1}{d} I
\end{aligned}
$$

(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，

$$
|\psi_{AB}\rangle\langle\psi_{AB}| = \sum_k \sum_l \sqrt{\lambda_k}\sqrt{\lambda_\ell}\,|e_k\rangle\langle e_\ell| \otimes |f_k\rangle\langle f_\ell|
$$

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$\log(\rho_{\mathrm{A}} \otimes \rho_{\mathrm{B}})$を計算する．$\rho_A$，$\rho_B$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，

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

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

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

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

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

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，

$$D(\rho||\sigma) := \mathrm{Tr}\,\rho\,(\log\rho - \log\sigma). \tag{6}$$

- 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，

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

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）

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 $\Longleftrightarrow \rho = \sigma$）
(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)：

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

とおくと R, S は密度作用素になる．このとき，

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

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いた．よって，

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

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 $W_1, W_2, \cdots, W_N \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ と，
確率分布 $P(x)$ $(x = 1, 2, \cdots, N)$ に対して，

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

- 以降では簡単のため，$W := (W_1, W_2, \cdots, W_N)$ 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．

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

- 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，

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

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，

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

量子相対エントロピーの非負性から，直ちに，

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

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

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

10.8　Holevo相互情報量と量子相互情報量の関係

- 密度作用素 $W_1, W_2, \cdots, W_N \in \mathcal{S}(\mathcal{H})$ と，確率分布 $P(x)$ $(x = 1, 2, \cdots, N)$ 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，$\mathcal{H}_\mathrm{B} = \mathcal{H}$ 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，

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

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，

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

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

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．

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

Lemma 5 (エントロピーとダイバージェンスの関係).

$$D(\rho||\rho_{\mathsf{mix}}) = \mathrm{Tr}\,\rho\{\log\rho - \log(\tfrac{1}{\dim\mathcal{H}}I)\} = \log\dim\mathcal{H} - H(\rho) \tag{17}$$

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

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

（注意）量子相対エントロピーの正値性より，$H(\rho) \le \log\dim\mathcal{H}$ と等号成立条件 $\rho = \rho_{\mathsf{mix}}$ 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 $0 \le t \le 1$ について，

$$H(t\rho_1 + (1-t)\rho_2) \ge tH(\rho_1) + (1-t)H(\rho_2) \tag{19}$$

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，

$$H(\rho_A) + H(\rho_B) \ge H(\rho_{AB}) \quad (\rho_A = \mathrm{Tr}_B\,\rho_{AB},\ \rho_B = \mathrm{Tr}_A\,\rho_{AB}) \tag{20}$$

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，

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

（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）.

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

（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値性より

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

(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，

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

□