

Majorization

大上由人

2024 年 5 月 9 日

1 古典的エントロピー及びダイバージェンス

1.1 古典的状態及び系

必要な量を定義する。

Def: 状態を表す確率分布

古典的系における状態は確率分布

$$p = (p_1, p_2, \dots, p_d)^\top \quad (1.1)$$

で表される。ここで、 $p_i \geq 0$ かつ $\sum_{i=1}^d p_i = 1$ である。また、 d 次元の確率分布全体の集合を、 \mathcal{P}_d と表す。

また、その集合に属する一様分布を、

$$u = \left(\frac{1}{d}, \frac{1}{d}, \dots, \frac{1}{d} \right)^\top \quad (1.2)$$

と表す。

また、異なる確率分布の積を、

$$p \otimes q \in \mathcal{P}_{dd'} \quad p \in \mathcal{P}_d, q \in \mathcal{P}_{d'} \quad (1.3)$$

と表し、とくに、同じ確率分布の累乗を、

$$p^{\otimes n} \in \mathcal{P}_{d^n} \quad p \in \mathcal{P}_d \quad (1.4)$$

と表す。

Def:Supp

確率分布 $p = p_{ii} \in \mathcal{P}_d$ に対して、 p の台を、

$$\text{spp}(p) = \{i \in [d] | p_i > 0\} \subset \{1, 2, \dots, d\} \quad (1.5)$$

と表す。また、

$$\text{rank}(p) = |\text{spp}(p)| \quad (1.6)$$

を、 p のランクという。とくに、 $\text{rank}(p) = d$ のとき、 p はフルランクであるという。

要するに、確率が 0 でないようなインデックスの集合を台と呼び、その要素数をランクと呼ぶ。

Def: 確率遷移行列

古典的な確率分布の時間発展は、確率遷移行列 T を用いて以下のように表される。

$$p'_i = \sum_{j=1} T_{ij} p_j \quad (1.7)$$

Prop: 確率遷移行列の性質

確率遷移行列 T は以下の性質を持つ。

$$\sum_{i=1}^d T_{ij} = 1 \quad (1.8)$$

Prf

略 (確率の規格化を利用する。)

□

Def: 二重確率遷移行列

確率遷移行列 T が、

$$\sum_{j=1} T_{ij} = 1 \quad (1.9)$$

をみたすとき、二重確率遷移行列という。

Prop: 二重確率遷移行列の特徴づけ

以下の二つは同値である。

1. T は二重確率遷移行列である。
2. 一様分布 u は T に対して不変である。すなわち、 $u = Tu$ である。

Prf

$$p'_i = \sum_{j=1} T_{ij} u_j \quad (1.10)$$

$$= \frac{1}{d} \sum_{j=1}^d T_{ij} \quad (1.11)$$

$$= \frac{1}{d} \cdot d \quad (1.12)$$

$$= 1 \quad (1.13)$$

であることからわかる。

Def: トレース距離

二つの確率分布 p, q のトレース距離は、

$$D(p, q) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d |p_i - q_i| \quad (1.14)$$

で定義される。

Prop: トレース距離の性質

トレース距離は、 T に対して非増加である。すなわち、

$$D(p, q) \geq D(Tp, Tq) \quad (1.15)$$

が成り立つ。

Prf

後により一般の証明をするため、ここでは省略する。

1.2 シャノンエントロピー及び KL ダイバージェンス

Def: シャノンエントロピー

確率分布 $p \in \mathcal{P}_d$ のシャノンエントロピーは、

$$S_1(p) = - \sum_{i=1}^d p_i \log p_i \quad (1.16)$$

で定義される。

Def:KL ダイバージェンス

二つの確率分布 $p, q \in \mathcal{P}_d$ の KL ダイバージェンスは、

$$S_1(p||q) = \sum_{i=1}^d p_i \log \frac{p_i}{q_i} \quad (1.17)$$

で定義される。ただし、 $\text{supp}(p) \subset \text{supp}(q)$ でないときは、 $S_1(p||q) = \infty$ とする。

このとき、エントロピーと KL ダイバージェンスの関係がわかる。

Prop: エントロピーと KL ダイバージェンスの関係

任意の $p, q \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$S_1(p) = \ln(d) - S_1(p||u) \quad (1.18)$$

Prf

$$S_1(p||u) = \sum_{i=1}^d p_i \log \frac{p_i}{\frac{1}{d}} \quad (1.19)$$

$$= \sum_{i=1}^d p_i \log d p_i \quad (1.20)$$

$$= \sum_{i=1}^d p_i \log d + \sum_{i=1}^d p_i \log p_i \quad (1.21)$$

$$= \log d - S_1(p) \quad (1.22)$$

であることからわかる。 □

これより、 $S_1(p) \leq \log d$ であることがわかる。

このとき、KL ダイバージェンスのテイラー展開は以下ようになる。

$$S_1(p||p - \Delta p) = \frac{1}{2} \sum_i \frac{(\Delta p_i)^2}{p_i} + O(\Delta p^3) \quad (1.23)$$

$$(1.24)$$

ここで、 $\sum_i \Delta p_i = 0$ を用いている。

Def:monotone

monotone とは、free operation に対して、増減しない量のことである。

Prop: KL ダイバージェンスの単調性

KL ダイバージェンスは、 $p' = Tp$ および $q' = Tq$ に対して、

$$S_1(p||q) \geq S_1(p'||q') \quad (1.25)$$

が成り立つ。

Prf

後に一般に示す。

注意されたいこととして、KL ダイバージェンスの単調性の逆はいえない。すなわち、単調性を満たすが、 $p' = Tp$ および $q' = Tq$ を満たすような T が存在しない場合がある。

次に、二重確率遷移行列について考える。このとき、KL ダイバージェンスの単調性と、

$$S_1(p) \leq S_1(Tp) \quad (1.26)$$

が成り立つ。

すなわち、二重確率遷移行列による時間発展は、エントロピーを増加させる。

Def: 相互情報量

二つの確率分布 $p, q \in \mathcal{P}_d$ の相互情報量は、

$$I_1(p_{AB})_{A:B} = S_1(p_A) + S_1(p_B) - S_1(p_{AB}) = S_1(p_{AB}||p_A \otimes p_B) \geq 0 \quad (1.27)$$

で定義される。

この量は、A と B の相関を表す量である。

Prop: 相互情報量の性質

任意の $p, q \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$I_1(p_{AB})_{A:B} = 0 \Leftrightarrow p_{AB} = p_A \otimes p_B \quad (1.28)$$

が成り立つ。また、KL ダイバージェンスの単調性から、

$$I_1(p_{AB})_{A:B} \geq I_1(T_A \otimes T_B p_{AB})_{A:B} \quad (1.29)$$

が成り立つ。ただし、 $T_A \otimes T_B$ は、各 A, B に独立に作用する確率遷移行列である。

Prf

略 (過去のゼミ資料を参考せよ)

□

1.3 Rényi エントロピー及びダイバージェンス

シャノンエントロピーを包含する概念として、Rényi エントロピーがある。

Def: Rényi エントロピー

確率分布 $p \in \mathcal{P}_d$ の Rényi エントロピーは、 $0 \leq \alpha \leq \infty$ 、 $p \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$S_\alpha(p) = \frac{1}{1-\alpha} \log \left(\sum_{i=1}^d p_i^\alpha \right) \quad (1.30)$$

で定義される。

また、ダイバージェンスについても、Rényi ダイバージェンスがある。

Def: Rényi ダイバージェンス

二つの確率分布 $p, q \in \mathcal{P}_d$ の Rényi ダイバージェンスは、 $0 \leq \alpha \leq \infty$ 、 $p \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$S_\alpha(p||q) = \frac{1}{\alpha-1} \log \left(\sum_{i=1}^d p_i^\alpha q_i^{1-\alpha} \right) \quad (1.31)$$

で定義される。ただし、 $\text{supp}(p) \subset \text{supp}(q)$ でないときは、 $S_\alpha(p||q) = \infty$ とする。

これらの量が、たしかにシャノンエントロピーと KL ダイバージェンスを包含していることを示す。

Prop: Rényi エントロピーとシャノンエントロピーの関係

Rényi-1 エントロピーは、シャノンエントロピーに一致する。すなわち、

$$S_1(p) = S_\alpha(p)|_{\alpha=1} \quad (1.32)$$

が成り立つ。

Prf

$$S_\alpha(p)|_{\alpha=1} = -\lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{1}{1-\alpha} \log \left(\sum_{i=1}^d p_i^\alpha \right) \quad (1.33)$$

$$= -\frac{d}{d\alpha} \log \left(\sum_{i=1}^d p_i^\alpha \right) |_{\alpha=1} \quad (1.34)$$

$$= -\frac{\sum_{i=1}^d p_i \log p_i}{\sum_{i=1}^d p_i} \quad (1.35)$$

$$= -\sum_{i=1}^d p_i \log p_i \quad (1.36)$$

$$= S_1(p) \quad (1.37)$$

であることからわかる。 \square

Prop: Rényi ダイバージェンスとダイバージェンスの関係

Rényi-1 ダイバージェンスは、KL ダイバージェンスに一致する。すなわち、

$$S_\alpha(p||q)|_{\alpha=1} = S_1(p||q) \quad (1.38)$$

が成り立つ。

Prf

$$S_\alpha(p||q)|_{\alpha=1} = \lim_{\alpha \rightarrow 1} \frac{1}{\alpha-1} \log \left(\sum_{i=1}^d p_i^\alpha q_i^{1-\alpha} \right) \quad (1.39)$$

$$= \frac{d}{d\alpha} \log \left(\sum_{i=1}^d p_i^\alpha q_i^{1-\alpha} \right) |_{\alpha=1} \quad (1.40)$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^d q_i (p_i/q_i)^\alpha \log(p_i/q_i)}{\sum_{i=1}^d p_i^\alpha q_i^{1-\alpha}} |_{\alpha=1} \quad (1.41)$$

$$= \sum_{i=1}^d p_i \log \frac{p_i}{q_i} \quad (1.42)$$

$$= S_1(p||q) \quad (1.43)$$

であることからわかる。 \square

また、 $\alpha = 0, \infty$ の場合は重要らしいので、以下で確認する。

Prop: Rényi エントロピー/ダイバージェンスの極限

Rényi-0 エントロピーは、

$$S_0(p) = \log(\text{rank}(p)) \quad (1.44)$$

で定義される。また、Rényi- ∞ エントロピーは、

$$S_\infty(p) = -(\log \max_i p_i) \quad (1.45)$$

で定義される。また、Rényi-0 ダイバージェンスは、

$$S_0(p||q) = -\log \left(\sum_{i:p_i>0} q_i \right) \quad (1.46)$$

で定義される。また、Rényi- ∞ ダイバージェンスは、

$$S_\infty(p||q) = \log \left(\max_i \frac{p_i}{q_i} \right) \quad (1.47)$$

で定義される。

Prf

Prop: Rényi エントロピーと KL ダイバージェンスの関係

任意の $p, q \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$S_\alpha(p) = \frac{1}{1-\alpha} \log d - S_\alpha(p||u) \quad (1.48)$$

が成り立つ。

以下、Rényi ダイバージェンスについての性質を示す。

Prop: Rényi ダイバージェンスの非負性

任意の $p, q \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$S_\alpha(p||q) \geq 0 \quad (1.49)$$

が成り立つ。また、 $0 < \alpha \leq \infty$ に対して、

$$S_\alpha(p||q) = 0 \Leftrightarrow p = q \quad (1.50)$$

であり、また、 $\alpha = 0$ のとき、

$$S_0(p||q) = 0 \Leftrightarrow \text{supp}(p) \subset \text{supp}(q) \quad (1.51)$$

が成り立つ。

Prop: Rényi ダイバージェンスの単調性

任意の $p' = Tp, q' = Tq \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$S_\alpha(p||q) \geq S_\alpha(p'||q') \quad (1.52)$$

が成り立つ。また、二重確率遷移行列に対して、

$$S_\alpha(p) \leq S_\alpha(Tp) \quad (1.53)$$

が成り立つ。

Prop: Rényi ダイバージェンスの単調性 (2)

$\alpha \leq \alpha'$ に対して、

$$S_\alpha(p||q) \leq S_{\alpha'}(p||q) \quad (1.54)$$

が成り立ち、また、

$$S_\alpha(p) \geq S_{\alpha'}(p) \quad (1.55)$$

が成り立つ。

Lem:

f を下に凸な関数であるとし、 $p, q, p', q' \in \mathbb{R}^d$ がすべて正であるとする。もし、 $p' = Tp, q' = Tq$ であるとき、

$$\sum_{i=1}^d q'_i f\left(\frac{p'_i}{q'_i}\right) \leq \sum_{i=1}^d q_i f\left(\frac{p_i}{q_i}\right) \quad (1.56)$$

が成り立つ。

Prf

Jensen の不等式より、

$$\sum_{j=1}^d q'_j f\left(\frac{p'_j}{q'_j}\right) \leq \sum_{j=1}^d \sum_{i=1}^d \frac{T_{ji} q_i}{q'_j} f\left(\frac{p_i}{q_i}\right) = \sum_{i=1}^d q_i f\left(\frac{p_i}{q_i}\right) \quad (1.57)$$

である。 □

ここで、 $p, q \in \mathcal{P}_d$ として、 $f(x) = x \log x$ とすると、

$$S_1(p||q) \geq S_1(p'||q') \quad (1.58)$$

が成り立つ。これは、KL ダイバージェンスの単調性を示している。

Prf: (Rényi ダイバージェンスの非負性)

$f_\alpha(x) = x^\alpha$ とすると、 $1 < \alpha \leq \infty$ に対して、 $f_\alpha(x)$ は下に凸な関数である。

Jensen の不等式より

$$\sum_{i=1}^d q_i f\left(\frac{p_i}{q_i}\right) \geq f\left(\sum_{i=1}^d q_i \frac{p_i}{q_i}\right) = f(1) = 0 \quad (1.59)$$

である。両辺対数をとることにより、

$$\log\left(\sum_{i=1}^d q_i \frac{p_i}{q_i}\right) \geq 0 \quad (1.60)$$

である。これを両辺 $\frac{1}{\alpha-1}$ かけることにより、

$$\frac{1}{\alpha-1} \log\left(\sum_{i=1}^d q_i \frac{p_i}{q_i}\right) \geq 0 \quad (1.61)$$

である。したがって、

$$S_\alpha(p||q) \geq 0 \quad (1.62)$$

である。また、 $0 < \alpha < 1$ のときは、上の Jensen の不等式で不等号が逆になり、 $\frac{1}{\alpha-1}$ をかけるときにもう一度符号が逆になることに注意して、同様に示すことができる。

$\alpha = 0, 1, \infty$ の場合は、それぞれの定義から自明である。

□

Prf:(Rényi ダイバージェンスの単調性)

$1 < \alpha < \infty$ のとき、Lem で、 $f(x) = x^\alpha$ として示した不等式を用いると、

$$\sum_{i=1}^d q'_i \frac{p_i'^\alpha}{q_i'^\alpha} \leq \sum_{i=1}^d q_i \frac{p_i^\alpha}{q_i^\alpha} \quad (1.63)$$

である。この両辺対数をとることにより、

$$\log\left(\sum_{i=1}^d p_i'^\alpha q_i^{1-\alpha}\right) \leq \log\left(\sum_{i=1}^d p_i^\alpha q_i^{1-\alpha}\right) \quad (1.64)$$

である。したがって、

$$\frac{1}{\alpha-1} \log\left(\sum_{i=1}^d p_i'^\alpha q_i^{1-\alpha}\right) \leq \frac{1}{\alpha-1} \log\left(\sum_{i=1}^d p_i^\alpha q_i^{1-\alpha}\right) \quad (1.65)$$

である。したがって、

$$S_\alpha(p||q) \geq S_\alpha(p'||q') \quad (1.66)$$

である。

$0 < \alpha < 1$ のときは、同様に示すことができる。

$\alpha = 0, 1, \infty$ の場合は、それぞれの定義から自明である。

□

Prf:(Rényi ダイバージェンスの単調性 (2))

$\alpha \leq \alpha'$ に対して、 $f(x) = x^{\frac{\alpha-1}{\alpha'-1}}$ とすると、この関数は、 $1 < \alpha < \alpha' < \infty$ に対して下に凸な関数であり、 $0 < \alpha < \alpha' < 1$ および $0 < \alpha < 1 < \alpha'$ に対して上に凸な関数である。

したがって、Jensen の不等式より、

$$S_\alpha(p||q) = \frac{1}{\alpha-1} \log \left(\sum_{i=1} p_i \left(\frac{p_i}{q_i} \right)^{\alpha-1} \right) \quad (1.67)$$

$$= \frac{1}{\alpha-1} \log \left(\sum_{i=1} p_i \left(\frac{p_i}{q_i} \right)^{(\alpha'-1)(\frac{\alpha-1}{\alpha'-1})} \right) \quad (1.68)$$

$$\leq \frac{1}{\alpha'-1} \log \left(\sum_{i=1} p_i \left(\frac{p_i}{q_i} \right)^{\alpha'-1} \right) \quad (1.69)$$

$$= S_{\alpha'}(p||q) \quad (1.70)$$

である。

また、 $\alpha = 0, 1, \infty$ の場合は、それぞれの定義から自明である。

□

さらに、f-ダイバージェンスという概念がある。

Def:f-ダイバージェンス

$f(0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ を下に凸な関数とし、 $x = 1$ で $f(x)$ が狭義凸かつ $f(1) = 0$ であるとする。このとき、 $p, q \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$D_f(p||q) = \sum_{i=1}^d q_i f \left(\frac{p_i}{q_i} \right) \quad (1.71)$$

で定義される。

KL ダイバージェンスは、 $f(x) = x \log x$ のときの f-ダイバージェンスである。また、Rényi ダイバージェンスは、 $f(x) = x^\alpha$ として \log をとって $\frac{1}{\alpha-1}$ をかけたものである。

Prop:f-ダイバージェンスの非負性

任意の $p, q \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$D_f(p||q) \geq 0 \quad (1.72)$$

が成り立つ。また、

$$D_f(p||q) = 0 \Leftrightarrow p = q \quad (1.73)$$

が成り立つ。

Prf

Jensen の不等式より、

$$\sum_{i=1}^d q_i f\left(\frac{p_i}{q_i}\right) \geq f\left(\sum_{i=1}^d q_i \frac{p_i}{q_i}\right) = f(1) = 0 \quad (1.74)$$

である。ことからわかる。 \square

Prop:f-ダイバージェンスの単調性

任意の $p' = Tp, q' = Tq \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$D_f(p||q) \geq D_f(p'||q') \quad (1.75)$$

が成り立つ。

Prf

よくよく見ると、これは Lem で示した不等式と同じである。 \square

1.4 フィッシャー情報量

以下、我々は、なめらかにパラメータ化された確率分布 $p(\theta)$ について考える。ただし、 θ の取りうる領域は、 \mathbb{R}^m の開部分集合である。

Def: フィッシャー情報量

$p(\theta) \in \mathcal{P}_d$ がフルランクであるとし、 $\theta \in \mathbb{R}^m$ をパラメータとする。このとき、フィッシャー情報量は $m \times m$ 行列で、

$$J_{p(\theta),kl} = \sum_{i=1}^d p_i(\theta) \partial_k [\log p_i(\theta)] \partial_l [\log p_i(\theta)] = \sum_{i=1}^d \frac{\partial_k p_i(\theta) \partial_l p_i(\theta)}{p_i(\theta)} \quad (1.76)$$

で定義される。

フィッシャー情報量は、f-ダイバージェンスの極限として得られる。

Prop: フィッシャー情報量の単調性

任意の確率遷移行列 T に対して、

$$J_{p(\theta)} \geq J_{Tp(\theta)} \quad (1.77)$$

が成り立つ。

Prf

$p' = Tp$ とし、 $c = (c^1, \dots, c^m) \in \mathbb{R}^m$ として、 $\partial = \sum_k c^k \partial_k$ とする。このとき、

$$c^\top J_{p(\theta)} c = \sum_i p_i \left(\frac{\partial p_i}{p_i} \right)^2 \quad (1.78)$$

$$c^\top J_{p'(\theta)} c = \sum_i p'_i \left(\frac{\partial p'_i}{p'_i} \right)^2 \quad (1.79)$$

$$(1.80)$$

である。したがって、Lemma で $f = x^2$ として示した不等式より、

$$c^\top J_{p(\theta)} c \geq c^\top J_{p'(\theta)} c \quad (1.81)$$

である。したがって、

$$J_{p(\theta)} \geq J_{Tp(\theta)} \quad (1.82)$$

である。

□

フィッシャー情報量の操作的な意味付けとして、Cramér-Rao の不等式がある。

Thm: Cramér-Rao の不等式

あるパラメータ θ に対する不偏推定量 θ_{est} に対して、不偏条件 $\sum_{i=1}^d p_i(\theta) \theta_{est}(i) = \theta$ が成り立つとする。このとき、正確さは共分散行列

$$Cov_{\theta}^{kl}(\theta_{est}) = \sum_{i=1}^d p_i(\theta) (\theta_{est}^k(i) - \theta^k) (\theta_{est}^l(i) - \theta^l) \quad (1.83)$$

により表現される。このとき、

$$Cov_{\theta}^{kl}(\theta_{est}) \geq (J_{p(\theta)})_{kl}^{-1} \quad (1.84)$$

が成り立つ。

すなわち、フィッシャー情報量は、 θ の不偏推定量が、フィッシャー情報量によって制限されることを示している。

例として、指数型分布族とよばれる確率分布の集合族を考える。簡単のために、パラメータを θ のみとし、

$$p_i(\theta) = h_i \exp(\theta T_i - A(\theta)) \quad (1.85)$$

であるとする。ただし、 $A(\theta)$ は、 θ のなめらかな関数である。このとき、簡単な計算により、

$$\sum_{i=1} T_i p_i(\theta) = A'(\theta) \quad \sum_{i=1} T_i^2 p_i(\theta) = A''(\theta) + A'(\theta)^2 \quad (1.86)$$

である。したがって

$$J_{p(\theta)} = A''(\theta) \quad (1.87)$$

である。

熱力学の文脈では、 $p_i(\theta)$ をギブス分布、 T_i をエネルギーとして、 $-\theta$ を逆温度として解釈することができる。そして、 $\theta^{-1}A(\theta)$ は、自由エネルギーである。すなわち、

$$p_i(\theta) = \frac{1}{Z(\theta)} \exp(-\theta E_i) \quad (1.88)$$

である。

また、(1.89) は、 T_i が、 $A'(\theta)$ の不偏推定量であることを示している。それに対応するフィッシャー情報量は、 $J_{p(\theta)} = A''(\theta)^{-1}$ である。というのも、 $\frac{d}{d\theta} = (A''(\theta))^{-1} \frac{d}{d\theta}$ であるからである。

また、情報幾何の文脈では、フィッシャー情報量は、確率分布空間の計量として考えられる。以下では、monotone 計量という概念を導入する。

Def: Monotone 計量

$G_p : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ が、フルランクの $p \in \mathcal{P}_d$ に対して、以下を満たすとき、 G_p は Monotone 計量であるという。

- G_p は双線形である。
- $G_p(a, a) \geq 0$ であり、 $G_p(a, a) = 0 \Leftrightarrow a = 0$ である。
- $p \mapsto G_p(a, a)$ は任意の a に対して連続である。
- 任意の T, a, p に対して、 $G_p(a, a) \geq G_{Tp}(Ta, Ta)$ が成り立つ。

このとき、特にフィッシャー情報計量は、

$$G_p^F(a, b) = \sum_{i=1}^d \frac{a_i b_i}{p_i} \quad (1.89)$$

で定義される。ただし、 $a = (a_1, \dots, a_d), b = (b_1, \dots, b_d)$ である。

この計量は、フィッシャー情報量行列と、

$$J_{p(\theta), kl} = G_{p(\theta)}^F(\partial_k p(\theta), \partial_l p(\theta)) \quad (1.90)$$

との関係がある。

Prop: フィッシャー情報量計量の単調性

任意の確率遷移行列 T に対して、

$$G_p^F(a, a) \geq G_{Tp}^F(Ta, Ta) \quad (1.91)$$

が成り立つ。

Prf

逆に、任意の monotone 計量は、フィッシャー情報量計量を用いて、以下のように表現できる。

Thm: Chentsov の定理

任意の monotone 計量 G_p は、フィッシャー情報量計量を用いて、

$$G_p(a, b) = kG_p^F(a, b) + k' \left(\sum_{i=1}^d a_i \right) \left(\sum_{i=1}^d b_i \right) \quad (1.92)$$

と表現できる。ただし、 $k, k' \geq 0$ である。

Prf

略

2 Classical Majorization

状態の遷移可能性は、majorization によって、必要十分に特徴づけられる。

2.1 Majorization

Def: Majorization

$p, p' \in \mathcal{P}_d$ に対して、 p が p' を majorize することを、 $p' \prec p$ と書き、

$$\forall k \in \{1, \dots, d\} \quad \sum_{i=1}^k p_i'^{\downarrow} \leq \sum_{i=1}^k p_i^{\downarrow} \quad (2.1)$$

が成り立つとき、 p が p' を majorize するという。ただし、 p^{\downarrow} は、 p の要素を降順に並べたものである。

Majorization は、 p と p' の確率分布を比較したときに、ばらつきの大きさを比較する量である。

Majorization を図に表すと、以下のローレンツ曲線で表現される。

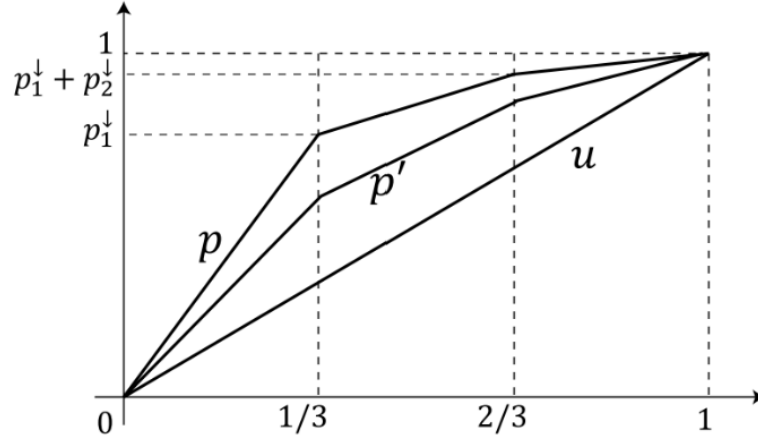


図1 Majorization の図示

図でいうところの、下に来ている曲線が、よりばらつきが小さい確率分布であり、とくに一様分布のときは直線になることがわかる。すなわち、

$$u \prec p \quad \forall p \in \mathcal{P}_d \quad (2.2)$$

である。

注意すべきこととして、この \prec は全順序ではない。すなわち、ある確率分布の組 p, p' に対して、 $p \prec p'$ か $p' \prec p$ のどちらも成り立たない場合がある。このとき、ローレンツ曲線は交わる。

Thm:Majorization の特徴づけ

$p, p' \in \mathcal{P}_d$ に対して、以下は同値である。

1. $p' \prec p$
2. $\forall t \in \mathbb{R} \quad \sum_{i=1}^d |p'_i - t| \leq \sum_{i=1}^d |p_i - t|$
3. 任意の下に凸な関数 f に対して、

$$\sum_{i=1}^d f(p'_i) \leq \sum_{i=1}^d f(p_i) \quad (2.3)$$

4. $p' = Tp$ となる二重確率遷移行列 T が存在する。

Prf

この証明は後で行う。

3 についての補足

また、一様分布は、二重確率遷移行列のもとで不変である。熱力学の文脈では、 u は高温極限をとった時の Gibbs 分布に対応している。このとき、二重確率遷移行列は、そのような Gibbs 分布を保つものである。

Thm:Birkhoff の定理

以下の二つは同値である。

1. T は二重確率遷移行列である。
2. T は、置換行列の凸結合で表現できる。すなわち、

$$T = \sum_k r_k P_k \quad (2.4)$$

である。ただし、 $r_k \geq 0$ であり、 $\sum_k r_k = 1$ である。また、 P_k は、置換行列である。

Prf

教科書で証明されていないので一旦飛ばす。

Prop: 二重確率遷移行列の性質

$$\text{「} T \text{ が二重確率遷移行列である」} \Leftrightarrow Tp \prec p \quad \forall p \in \mathbb{R}^d \quad (2.5)$$

Prf

Def:Schur 凸性

$F : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ が Schur 凸であるとは、

$$\forall p, p' \in \mathcal{P}_d \quad p' \prec p \Rightarrow F(p') \leq F(p) \quad (2.6)$$

が成り立つことである。言い換えると、Schur 凸な関数は、majorization に関して単調である。

Prop:

$F : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ が Schur 凸かつ微分可能なことと、 F が転置に対して不変なこと、すなわち、

$$F(p) = F(Pp) \quad \forall p, P \quad (2.7)$$

が成り立つことは同値であり、また、

$$\forall p \in \mathcal{P}_d \quad (p_i p_j) \left(\frac{\partial F}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_j} \right) \geq 0 \quad (2.8)$$

も同値である。

Prf

2.2 d-Majorization と Thermo-Majorization

先ほどまでは、一つの分布についての遷移について考えていたが、次は、二つの分布の組の遷移を考える。

このとき、 $p^* = (p_1^*, \dots, p_d^*)^\top, q^* = (q_1^*, \dots, q_d^*)^\top$ を、 $p = (p_1, \dots, p_d)^\top, q = (q_1, \dots, q_d)^\top$ を $\frac{p_1^*}{q_1^*} \geq \frac{p_2^*}{q_2^*} \geq \dots \geq \frac{p_d^*}{q_d^*}$ が成り立つように並べ替えたものとして定義する。この新しく定義した p^*, q^* に対して横軸を $\sum_{i=1}^k q_i^*$ 、縦軸を $\sum_{i=1}^k p_i^*$ としたローレンツ曲線を考える。図は以下ようになる。

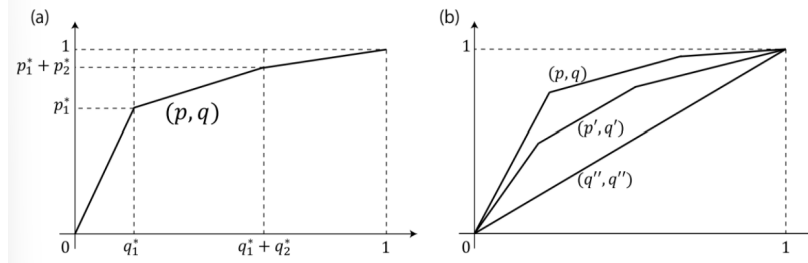


図 2 d-Majorization の図示

Def:d-Majorization

$p, q, p', q' \in \mathcal{P}_d$ に対して、

$$(p', q') < (p, q) \Leftrightarrow \text{「}(p, q) \text{ のローレンツ曲線が } (p', q') \text{ のローレンツ曲線の上に来る」} \quad (2.9)$$

が成り立つとき、 (p, q) は (p', q') を d-majorize するという。

d-majorization は、以下のような言い換えが可能である。

Thm:Blackwell の定理

$p, q, p', q' \in \mathcal{P}_d$ かつ q, q' がフルランクであるとき、以下は同値である。

1. $(p', q') \prec (p, q)$
- 2.

$$\forall t \in \mathbb{R} \quad \sum_{i=1}^d |p'_i - tq'_i| \leq \sum_{i=1}^d |p_i - tq_i| \quad (2.10)$$

3. 任意の下に凸な関数 f に対して、

$$\sum_{i=1}^d q'_i f\left(\frac{p'_i}{q'_i}\right) \leq \sum_{i=1}^d q_i f\left(\frac{p_i}{q_i}\right) \quad (2.11)$$

4. ある二重確率遷移行列 T が存在して、

$$p' = Tp \quad q' = Tq \quad (2.12)$$

が成り立つ。

Prf

後で証明を行う。

Def:Thermo-Majorization

$p, q, p' \in \mathcal{P}_d$ に対して、 p が q について p' を thermo-majorize するとは、

$$(p', q) \prec (p, q) \quad (2.13)$$

が成り立つことである。

(q, q) のローレンツ曲線は、直線であるため、 q は任意の p について thermo-majorize される。すなわち、

$$\forall p \quad (q, q) \prec (p, q) \quad (2.14)$$

である。したがって、thermo-majorization は、確率分布 p が q にどれだけ近いかを表す。

とくに、熱力学の文脈では q はあるハミルトニアン H の Gibbs 分布であり、 $q = p^G$ とかける。^{*1} このとき、 $q = Tq$ であるとは、 T は、Gibbs 分布を変えない遷移行列であるということである。このような遷移行列を、Gibbs-preserving map という。

リソース理論の枠組みでは、GPM は、free operation として扱われ、Gibbs 分布は、free state として扱われる。

^{*1} 任意のフルランクな q はあるハミルトニアンの Gibbs 分布であるらしい。

Thm: 遷移可能条件

$p, q, p', q' \in \mathcal{P}_d$ とし、 q, q' がフルランクであるとする。このとき、以下の二つが成り立つ。

$$1. \quad (p', q') \prec (p, q) \Leftrightarrow S_0(p||q) \geq S_0(p'||q') \quad S_\infty(p||q) \leq S_\infty(p'||q') \quad (2.15)$$

$$2. \quad S_\infty(p'||q') \leq S_0(p||q) \Leftrightarrow (p', q') \prec (p, q) \quad (2.16)$$

Prf

以下の図より明らかである。

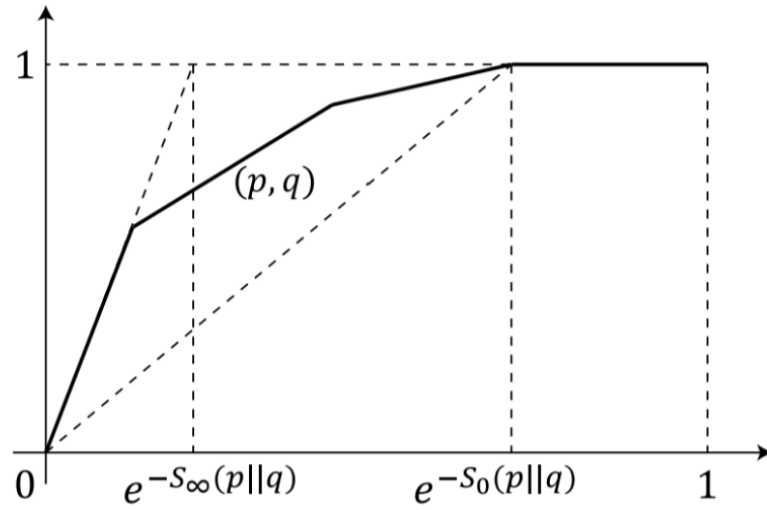


図3 遷移可能条件の図示

上の定理から明らかなように、Rényi divergence の観点からは、状態遷移と d-majorization に関する必要条件と十分条件は一致しない。