arXiv:2602.08164v1 [math.OA] 8 Feb 2026

度量性质：从 S-散度到量子詹森散度

TENG ZHANG

摘要。我们将矩阵上的迹对数 S-散度推广到带迹 C^*-代数和有限冯·诺依曼代数，并证明其平方根在可逆正锥上定义了一种度量。我们还证明了量子詹森–香农散度可表示为平移迹对数距离的积分，从而推出在同一带迹框架下，其平方根在整个正锥上具有度量性。在矩阵情形中，我们回答了 Virosztek [28] 关于希尔伯特性的两个问题。最后，我们证明，由非仿射算子凸函数生成的对称量子詹森散度，在带迹情形下可通过导数的奈万林纳–斯蒂尔杰斯型表示得到度量；这推广了 Carlen、Lieb 和 Seiringer 的一项结果。

1. 引言

在本文中，令 $M_n^+(\mathbb{C})$ 表示所有 $n\times n$ 半正定矩阵构成的锥，并令 $M_n^{++}(\mathbb{C})$ 表示所有 $n\times n$ 正定矩阵构成的锥。

令 $(\mathcal{A},\tau)$ 为一个带单位的 C^*-代数，并配备忠实迹态

$$\tau(\mathbf{1})=1,\qquad \tau(x^*x)=0\ \Rightarrow\ x=0,\qquad \text{and}\qquad \tau(xy)=\tau(yx)\ \text{ for all } x,y\in\mathcal{A}.$$

我们还使用相应的非交换 L^2-范数 $\|x\|_{2,\tau}:=\tau(x^*x)^{1/2}$, 其中 τ 可根据上下文理解。我们将 $\mathcal{A}_+$ 记为 $\mathcal{A}$ 的正锥，并将 $\mathcal{A}_{++}$ 记为其可逆正锥。我们还记

$$\mathcal{S}_\tau:=\{\rho\in\mathcal{A}_+:\tau(\rho)=1\},\qquad \mathcal{S}_{\tau,++}:=\mathcal{S}_\tau\cap\mathcal{A}_{++}.$$

令 $(\mathcal{M},\tau)$ 为一个有限冯·诺依曼代数，配备忠实正规迹态 τ，并以 $\mathcal{M}^\times$ 表示 $\mathcal{M}$ 中可逆元素构成的群。记 $\mathcal{M}_{\mathrm{sa}}=\{x\in\mathcal{M}:\ x^*=x\}$，并分别以 $\mathcal{M}_+$ 和 $\mathcal{M}_{++}$ 表示 $\mathcal{M}$ 的正锥和可逆正锥。

1.1. The S-散度。 S-散度由 Sra [27]在研究开凸锥 $M_n^{++}(\mathbb{C})$时引入。相比之下，仿射不变黎曼距离

$$\delta_R(A,B)=\left\|\log\left(B^{-1/2}AB^{-1/2}\right)\right\|_F,\qquad A,B\in M_n^{++}(\mathbb{C}),$$

其中 $\|\cdot\|_F$ 表示弗罗贝尼乌斯范数，源于 $M_n^{++}(\mathbb{C})$的非正曲率黎曼几何（参见例如 [7, 第 10] 章和 [4, 第 6]章）。然而，离开这一特定几何框架后，通常不存在针对 $M_n^{++}(\mathbb{C})$的规范的“自然”距离选择。

受凸优化和信息几何思想的启发， [6, 9], Sra 提出了对称迹对数表达式

$$\delta_S^2(A,B)=\log\det\Big(\frac{A+B}{2}\Big)-\frac{1}{2}\log\det A-\frac{1}{2}\log\det B,\qquad A,B\in M_n^{++}(\mathbb{C}),\tag{1.1}$$

2020 数学学科分类。 46L10、46L30、15A42、94A17。关键词与短语。 迹詹森间隙、斯坦散度、迹对数距离、量子詹森–香农散度、量子詹森散度、度量、希尔伯特型。

该表达式也称为 Jensen–Bregman LogDet 散度（或对称 Stein 散度）；参见[8, 10, 27]。 [27] 证明了一个关键性质： $\delta_S := \sqrt{\delta_S^2}$ 在$M_n^{++}(\mathbb{C})$上满足三角不等式，因此定义了一种真正的度量。

定理 1.1 (Sra)**：** 设 A、$B \in M_n^{++}(\mathbb{C})$。通过 (1.1) 定义 δ_S。则 δ_S是$M_n^{++}(\mathbb{C})$上的度量。此外，对于任意 $n \geq 2$，它都不允许存在希尔伯特空间嵌入。

除了其内在的几何学意义之外， δ_S 在计算上也颇具吸引力，并已有效应用于诸如协方差描述符的相似性搜索等领域 [9], ，这进一步推动了对超越有限维情形的迹对数度量的研究。

已有大量文献致力于将对数行列式散度推广到无限维算子背景。例如，Minh [21, 22]通过扩展的弗雷德霍尔姆型行列式，针对单位化迹类扰动和希尔伯特–施密特扰动，发展了无限维 LogDet 散度。就有限 von Neumann 代数而言，Fuglede–Kadison 行列式 Δ [16] 为 det 提供了一个规范替代，而基于 Δ 和函数演算构造的“类距离”泛函，也已在等距问题的背景下得到研究（例如参见 Gaál–Nagy–Szokol [17]）。

在矩阵情形下，$\log\det X = \mathrm{Tr}(\log X)$，这提示可通过以忠实迹态替换 Tr，将其自然推广到迹 C^* 代数和有限冯·诺依曼代数。这引出了一个问题：在 C^* 代数框架下， S 散度是否仍为度量？本文对此给出了肯定的回答。

定理 1.2。 设 $(\mathcal{A}, \tau)$ 是一个带有忠实迹态的含幺 C^* 代数。对于 $A, B \in \mathcal{A}_{++}$，定义

$$d_\tau^2(A,B) := \tau\left(\log\left(\frac{A+B}{2}\right)\right) - \frac{1}{2}\tau(\log A) - \frac{1}{2}\tau(\log B). \tag{1.2}$$

Then $d_\tau(A, B)$ 是 $\mathcal{A}_{++}$ 上的一个度量。特别地，它在 $\mathcal{S}_{\tau,++}$ 上的限制是一个度量 .

我们称 d_τ为 与（或 S 散度度量）相关的迹对数距离 $(\mathcal{A}, \tau)$。

1.2. 量子詹森–香农散度。 设 $\eta(x) = x\log x$，其中 $x > 0$且 $\eta(0) =0$（连续延拓）。量子詹森–香农散度（QJSD）是经典 Jensen–Shannon 散度的量子类比，由 Majtey–Lamberti–Prato [20] 系统地提出。其标准矩阵形式为

$$J_\eta(A,B) := \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}(\eta(A)) + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}(\eta(B)) - \mathrm{Tr}\left(\eta\left(\frac{A+B}{2}\right)\right), \qquad A, B \in M_n^+(\mathbb{C}). \tag{1.3}$$

量子 Jensen–Shannon 散度非负、对称且有界；与量子相对熵相比，它在应用中通常被认为更平滑。它在量子理论之外也有广泛应用 [11, 23, 24], ，包括复杂网络理论 [12, 13], 、模式识别 [2],、图论 [25],和化学物理 [1]。

Virosztek [28] 证明，在任意维度下，量子詹森–香农散度的平方根在所有正矩阵构成的完整锥上定义了一个真正的度量。

定理 1.3 (Virosztek)。 设 $A, B \in M_n^+(\mathbb{C})$。定义 $J_\eta(A, B)$ 如(1.3)所示。则 $\sqrt{J_\eta(A, B)}$是 $\overline{M_n^+(\mathbb{C})}$ 上的一个度量。

在确立了度量性之后，Virosztek [28] 进一步提出，这个度量是否由希尔伯特空间嵌入诱导。

问题 1.4 (Virosztek)。 由量子詹森–香农散度诱导的度量在 $M_n^+(\mathbb{C})$ 上是否为希尔伯特型？

一个相关问题 [28] 涉及密度矩阵中具有重要物理意义的子集。

问题 1.5 (Virosztek)**.** 在 $n \geq 3$ 的 $n \times n$ 密度矩阵空间上，量子 *Jensen–Shannon* 散度度量是否为希尔伯特型？

我们的下一个定理对这两个问题都给出了否定的回答。

定理 1.6。设 $\sqrt{J_\eta}$ 为 $M_n^+(\mathbb{C})$ 上由 (1.3)定义的量子 *Jensen–Shannon* 散度度量。

(1) 若 $n \geq 2$，则 $\sqrt{J_\eta}$ 在 $M_n^{++}(\mathbb{C})$上不是希尔伯特型的。因此，它在 $M_n^+(\mathbb{C})$上也不是希尔伯特型的。(2) 若 $n \geq 3$，则 $\sqrt{J_\eta}$ 在密度矩阵 $\mathcal{D}_n := \{\rho \in M_n^+(\mathbb{C}) : \mathrm{Tr}(\rho) = 1\}$上不是希尔伯特型的。

除了这些有限维结果之外，我们还证明了 Virosztek 的度量性定理可扩展到带迹 C^*-代数的情形。

定理 1.7。设 $(\mathcal{A}, \tau)$ 是一个带单位的 C^*-代数，并具有忠实迹态；设 $\eta(x) = x\log x$，其中 $\eta(0) = 0$。对于 $A, B \in \mathcal{A}_+$ 定义

$$J_{\tau,\eta}(A,B) := \frac{1}{2}\tau(\eta(A)) + \frac{1}{2}\tau(\eta(B)) - \tau\left(\eta\left(\frac{A+B}{2}\right)\right).$$

那么，平方根 $\sqrt{J_{\tau,\,\eta(A,B)}}$ 是 $\mathcal{A}_+$上的度量。特别是，其在 τ态空间 $\mathcal{S}_\tau$ 上的限制也是度量。

量子 Jensen–Shannon 散度属于一类更广泛的詹森型散度，这类散度由凸函数（在非交换情形下，则由算子凸函数）生成。这一视角在后续章节中，无论从概念上还是技术上，都会有所助益。

1.3. 量子 Jensen f-散度与迹詹森间隙。

对于连续函数f：$[0,\infty) \to \mathbb{R}$，其在 $M_n^+(\mathbb{C})$上的相关迹詹森间隙 定义为

$$J_f(A,B) := \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\big(f(A)\big) + \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\big(f(B)\big) - \mathrm{Tr}\left(f\left(\frac{A+B}{2}\right)\right), \qquad A, B \in M_n^+(\mathbb{C}),$$

只要各项都有定义（在有界函数演算下，这一条件自动满足）。为确保 $J_f \geq 0$，我们还假设 f 是算子凸且非仿射的（否则，$J_f \equiv 0$）。

令 $\mathcal{S}(\mathbb{C}^2)$表示 2×2 密度矩阵空间。在量子比特态空间 $\mathcal{S}(\mathbb{C}^2)$上，Carlen–Lieb–Seiringer 证明了以下加强结论；参见 [28,定理 2]。

定理 1.8 (Carlen–Lieb–Seiringer)。对于算子凸函数 $f : [0,\infty) \to \mathbb{R}$，由下式定义的对称量子 *Jensen* f-散度的平方根

$$J_f(\rho,\sigma) := \frac{1}{2}\big(\mathrm{Tr}\, f(\rho)\big) + \frac{1}{2}\big(\mathrm{Tr}\, f(\sigma)\big) - \mathrm{Tr}\, f\left(\frac{\rho+\sigma}{2}\right), \qquad (\rho, \sigma \in \mathcal{S}(\mathbb{C}^2)),$$

是 $\mathcal{S}$（$\mathbb{C}^2$）上的真正的度量；此外，它还存在希尔伯特空间嵌入。

然而，超出量子比特的情形后，这种嵌入现象就不可能普遍成立，见 [28]。事实上，配备了对应于算子凸函数 $x \mapsto -\log x$ 的詹森散度的 2×2 正定矩阵锥，已知无法嵌入任何希尔伯特空间（定理 1.1）。这表明 Carlen–Lieb–Seiringer 定理是最优的：若要对所有算子凸生成元同时满足希尔伯特性，一般而言无法超出量子比特态空间。（确切地说，$x \mapsto -\log x$ 仅在 $(0,\infty)$ 上是算子凸的，而在 $[0,\infty)$ 上不是；不过，其积分表示

$$\log x = \int_0^\infty \left(\frac{1}{1+t} - \frac{1}{x+t}\right) dt$$

表明，从负定核的角度来看，它的表现类似于定义在 $[0,\infty$ 上的算子凸函数。）

一个重要且富有挑战性的问题是，对称量子詹森 f-散度的平方根是否能在 $M_n(\mathbb{C})^+$ 上定义一个度量。对于 $f(x) = x\log\, x$，该问题可化为定理 1.3。接下来，我们将在迹 C^*代数的情形下给出一种一般机制，说明算子凸詹森生成元仍能导出度量（但一般不声称具有希尔伯特性）。

定理 1.9。 设 $(\mathcal{A},\tau)$ 是一个带有忠实迹态的含幺 C^*代数。设 $f\colon(0,\infty)\to\mathbb{R}$是一个非仿射的算子凸函数，并假设 f 连续延拓至$[0,\infty)$ 且在 $f(0)$ 处取有限值。对于 $A,B\in\mathcal{A}_+$，定义

$$J_{\tau,f}(A,B) := \frac{1}{2}\tau\big(f(A)\big) + \frac{1}{2}\tau\big(f(B)\big) - \tau\left(f\left(\frac{A+B}{2}\right)\right).$$

那么，平方根 $\sqrt{J_{\tau,f}}$ 在 $\mathcal{A}_+$ 上定义一个度量。更确切地说，存在 $b\geq 0$ 以及定义在 $(0,\infty)$ 上的正博雷尔测度 ν，满足 $\int_{(0,\infty)} \frac{1}{1+t}\,\mathrm{d}\nu(t) < \infty$，使得对于所有 $A,B\in\mathcal{A}_+$，

$$J_{\tau,f}(A,B) = \frac{b}{8}\,\|A-B\|_{2,\tau}^2 + \int_{(0,\infty)} t\, d_\tau(A+t\mathbf{1},B+t\mathbf{1})^2\,\mathrm{d}\nu(t). \tag{1.4}$$

由定理 1.9 可立即推得

推论 1.10。 设 $f:(0,\infty)\to\mathbb{R}$ 是一个非仿射算子凸函数，并假设 f 可连续延拓至 $[0,\infty)$，且 $f(0)$有限。那么，由下式定义的对称量子 *Jensen* f-散度的平方根

$$J_f(A,B) := \frac{1}{2}\big(\mathrm{Tr}\, f(A)\big) + \frac{1}{2}\big(\mathrm{Tr}\, f(B)\big) - \mathrm{Tr}\, f\left(\frac{A+B}{2}\right), \qquad (A,B\in M_n^+(\mathbb{C})),$$

是 $M_n^+(\mathbb{C})$上的真正度量。

本文结构。 第2节回顾 Fuglede–Kadison 行列式和广义奇异值函数。第4–6节证明 d_τ 在 $\mathcal{M}_{++}$上的三角不等式：首先将标量散度嵌入希尔伯特空间（第4节），然后利用 Fack–Kosaki 不等式建立重排下界（第5节），最后结合闵可夫斯基不等式（第6节）。第7节通过 GNS 包络将冯·诺依曼结果转用于带迹的 C^*-代数，并完成定理 1.2 的证明。第8节证明量子 Jensen–Shannon 散度的积分表示，并推导定理 1.7。第9节确立定理 1.6 中的非希尔伯特性结果，并给出一个明确的数值见证。最后，第10节讨论一种用于 $\sqrt{J_{\tau,\ f}}$度量性的算子凸扩展机制。

致谢。作者还要感谢导师 Lajos Molnár 提出这一问题。本研究得到中国国家留学基金管理委员会、博士生青年精英科学家赞助计划（中国科学技术协会）以及西安交通大学中央高校基本科研业务费（项目编号：xzy022024045）的资助。

2. 冯·诺依曼预备知识：行列式与重排

2.1. **Fuglede–Kadison 行列式**。

对于可逆元素 $x\in\mathcal{M}^\times$，Fuglede–Kadison 行列式定义为

$$\Delta(x) := \exp\big(\tau(\log|x|)\big) \in (0,\infty).$$

在原始工作中 [16]（针对有限因子），证明了 $\Delta:\ \mathcal{M}^{\times}\to(0,\ \infty)$ 是一个连续的群同态，因此具有乘法性（参见 [16,定理 1(1)]）：

$$\Delta(xy)=\Delta(x)\Delta(y)\qquad(x,y\in\mathcal{M}^{\times}).\tag{2.1}$$

相同的结论也适用于带有忠实正规迹态的一般有限冯·诺依曼代数，例如可通过中心分解将其约化为因子；参见 [14, 19]。

When $x\in\mathcal{M}^{\times}$ 时，我们有 $\log\ \Delta(x)\ =\tau(\log\ |x|)$。此外，对于 $X\in\mathcal{M}_{++}$ 和 $r\in\mathbb{R}$，

$$\Delta(X^{r})=\Delta(X)^{r},\tag{2.2}$$

因为 $\log\ \Delta(X^{r})\ =\tau(\log(X^{r}))\ =r\,\tau(\log\ X)\ =r\log\ \Delta(X)$。

2.2. 广义 s-数与迹公式。我们回顾 τ-可测性以及 Fack–Kosaki 意义下的广义 s-数 [15]。设 $\mathcal{M}\subset B(H)$ 是作用在复希尔伯特空间 H 上的冯·诺依曼代数，并令 $\tau:\ \mathcal{M}_{+}\to[0,\infty]$ 为忠实正规迹。在我们的应用中，τ 将是有限且归一化的，即 $\tau(\mathbf{1})\ =1$。

设 T 是作用在 H 上的稠密定义闭算子（可能无界），且与 $\mathcal{M}$ 关联，并用 $\mathrm{Dom}(T)$ 表示其定义域。按照 [15, 定义 1.2]，T 称为 τ-可测的，如果对于每个 $\varepsilon>0$，都存在一个投影 $E\in\mathcal{M}$，使得

$$E(H)\subset\mathrm{Dom}(T)\qquad\text{and}\qquad\tau(\mathbf{1}-E)\leq\varepsilon.$$

由于在我们的情形中 τ 是有限的，$\mathcal{M}$ 中的 τ-可测算子代数与所有和 $\mathcal{M}$ 关联的稠密定义闭算子组成的集合相重合；参见 [15, 第 271 页，定义 1.2] 之后。

若 T 与 $\mathcal{M}$ 关联，则记 $T=U|T|$ 为其极分解，并令 $E^{|T|}$ 表示 $|T|$ 的谱测度。对于 $\lambda\geq0$，令

$$d_{|T|}(\lambda):=\tau\Big(E^{|T|}\big((\lambda,\infty)\big)\Big).$$

T 的广义 s-数 对 $t>0$ 定义为

$$\mu_{t}(T):=\inf\{\lambda\geq0:\ d_{|T|}(\lambda)\leq t\},\tag{2.3}$$

参见 [15, 定义 2.1]。对于有界正算子 $X\in\mathcal{M}_{+}$，我们将 $\mu_{X}(t):=\mu_{t}(X)$ 记作 $t\in(0,1]$。

现在假设 $\tau(\mathbf{1})\ =1$。

备注 2.1（迹的归一化）。在第 2–6 节中，我们始终使用一个迹态，因此 $\tau(\mathbf{1})\ =1$，且广义奇异值参数 t 自然取值于 $(0,1]$。若 τ 是满足 $\tau(\mathbf{1})\ =\theta\in(0,\infty)$ 的有限忠实正规迹，则可将其归一化为 $\tau_{0}:=\theta^{-1}\tau$。此时，所有重排恒等式中的 τ_{0}（因此积分区间为 $(0,1]$）仍然成立；或者也可以保留 τ，并将 $\int_{0}^{1}(\cdot)\ dt$ 替换为 $\int_{0}^{\theta}(\cdot)\ dt$。由于对迹进行缩放不会改变度量性（只会使距离乘上一个常数因子），为简化记号，我们限制 $\tau(\mathbf{1})\ =1$。

备注 2.2（μ_{X} 的端点行为）。假设 $\tau(\mathbf{1})\ =1$，且 $X\in\mathcal{M}_{+}$ 有界。那么$t\mapsto\mu_{X}(t)$ 在 $(0,1]$ 上单调递减且右连续。此外，始终有 $\mu_{X}(1)\ =0$（因为对所有 $\lambda\geq0,\ \ d_{X}(\lambda)\ \leq1$）。

当 $X\in\mathcal{M}_{++}$ 时，存在 $m>0$，使得对于所有 $t\in\in(0,\ 1)$，都有 $\mu_{X}(t)\ \geq m$。因此，形如 $\int_{0}^{1}\varphi(\mu_{X}(t))\ dt$ 的积分均理解为 $(0,\ 1)$ 上的勒贝格积分，而 $t=1$ 处的取值无关紧要。

设 $f:\ [0,\infty)\ \to\mathbb{R}$ 连续且单调递增，并且 $f(0)\ =0$。对于每个 τ-可测算子 T，Fack–Kosaki 证明了如下迹公式

$$\tau\big(f(|T|)\big)=\int_{0}^{\infty}f\big(\mu_{t}(T)\big)\ \mathrm{d}t,\tag{2.4}$$

参见 [15, 推论 2.8]。此外，若 $X \in \mathcal{M}_+$ 有界，则对于所有 $t > \tau(\mathbf{1}) = 1$，均有 $\mu_t(X) = 0$（参见[15,引理 2.6]），因此 (2.4) 可化简为

$$\tau(f(X)) = \int_0^1 f\big(\mu_X(t)\big)\,\mathrm{d}t. \tag{2.5}$$

注 2.3（平移常数）。假设 $\tau(\mathbf{1}) = 1$，并且 $X \in \mathcal{M}_+$ 有界。如果 $f : [0,\infty) \to \mathbb{R}$ 连续且递增（不一定满足 $f(0) = 0$），则

$$\tau(f(X)) = \int_0^1 f\big(\mu_X(t)\big)\,\mathrm{d}t. \tag{2.6}$$

最后，如果 $X \in \mathcal{M}_{++}$，那么对于某个 $m > 0$ 有 $X \geq m\mathbf{1}$，因此对于所有 $t \in (0,\ 1)$ 都有 $\mu_X(t) \geq m$ （参见注 2.2 ）。定义连续递增函数 $g_m : [0,\infty) \to \mathbb{R}$ 为

$$g_m(u) := \begin{cases} 0, & 0 \leq u \leq m, \\ \log(u/m), & u \geq m. \end{cases}$$

于是 $g_m(0) = 0$，并且由于 $\sigma(X) \subset [m, \|X\|]$，由函数演算可得

$$g_m(X) = \log X - (\log m)\mathbf{1}, \qquad g_m(\mu_X(t)) = \log(\mu_X(t)) - \log m \quad \text{for a.e. } t \in (0,1).$$

将（2.5）应用于 g_m，得到

$$\tau(\log X) - \log m = \tau(g_m(X)) = \int_0^1 g_m(\mu_X(t))\,\mathrm{d}t = \int_0^1 \big(\log(\mu_X(t)) - \log m\big)\,\mathrm{d}t,$$

因此

$$\tau(\log X) = \int_{(0,1)} \log\big(\mu_X(t)\big)\,\mathrm{d}t, \qquad X \in \mathcal{M}_{++}. \tag{2.7}$$

这里的积分按勒贝格意义理解；由于 $\mu_X(t) \geq m > 0$ 在 $(0,1)$ 上成立，因此被积函数在 $t \in (0,1)$ 上有限（参见注 2.2）。

Fack–Kosaki 不等式。我们将使用的一个关键不等式是 [15, 定理 4.4(iii)]：对于 $X, Y \in \mathcal{M}_+$ 以及任意连续凸递增函数 递增 $f : [0,\infty) \to \mathbb{R}$，

$$\int_0^u f\big(\mu_{X+Y}(t)\big)\,\mathrm{d}t \leq \int_0^u f\big(\mu_X(t) + \mu_Y(t)\big)\,\mathrm{d}t, \qquad 0 < u \leq 1. \tag{2.8}$$

3. $\mathcal{M}_{++}$上的迹对数距离

3.1. 算术平均与几何平均。对于 $A, B \in \mathcal{M}_{++}$，定义算术平均与几何平均如下：

$$A \nabla B := \frac{A+B}{2}, \qquad A \# B := A^{1/2}\big(A^{-1/2}BA^{-1/2}\big)^{1/2}A^{1/2}.$$

几何平均具有对称性，并满足算术—几何平均不等式

$$A \# B \leq A \nabla B. \tag{3.1}$$

3.2. **距离的等价形式。**

引理 3.1（几何项作为平均迹对数）。 对于 $A,\ B \in \mathcal{M}_{++}$,

$$\tau(\log(A \# B)) = \frac{1}{2}\tau(\log A) + \frac{1}{2}\tau(\log B).$$

因此,

$$d_\tau(A,B)^2 = \tau(\log(A \nabla B)) - \frac{1}{2}\tau(\log A) - \frac{1}{2}\tau(\log B) = \tau\big(\log(A \nabla B) - \log(A \# B)\big). \quad (3.2)$$

证明。 利用 $\tau(\log X) = \log \Delta(X)$ 以及乘法性（2.1）,

$$\Delta(A \# B) = \Delta(A^{1/2})\,\Delta\big((A^{-1/2}BA^{-1/2})^{1/2}\big)\,\Delta(A^{1/2}).$$

由于 $\Delta(A^{1/2})^2 = \Delta(A)$ 且 $\Delta(X^{1/2}) = \Delta(X)^{1/2}$ on $\mathcal{M}_{++}$（由（2.2））, 我们得到

$$\Delta(A \# B) = \Delta(A) \cdot \Delta(A^{-1/2}BA^{-1/2})^{1/2}.$$

再次利用乘法性,

$$\Delta(A^{-1/2}BA^{-1/2}) = \Delta(A^{-1/2})\,\Delta(B)\,\Delta(A^{-1/2}) = \Delta(A)^{-1}\Delta(B).$$

因此 $\Delta(A\#\ B) = \Delta(A)^{1/2}\Delta(B)^{1/2}$, 取对数即可得到所述恒等式。代入 (1.2) 得到 (3.2)。□

3.3. **基本度量公理（除三角不等式外）。**

命题 3.2（非负性、对称性、正定性）。 对所有 $A,\ B \in \mathcal{M}_{++}$:
(1) $d_\tau(A,B) \geq 0$.(2) $d_\tau(A,B) = d_\tau(B,A)$.(3) $d_\tau(A,B) = 0$ 当且仅当 $A = B$。

证明。由 (1.2) 立即可得对称性。由 (3.1) 以及对数的算子单调性可得非负性: $\log(A\#\ B) \leq \log(A \nabla B)$, 因此根据 (3.2), $d_\tau(A,B)^2 \geq 0$。

为证明正定性, 假设 $d_\tau(A,B) = 0$。那么 $\log(A \nabla B) - \log(A\#\ B) \geq 0$, 且其迹为 0, 因此由忠实性可知它必为 0。于是 $A \nabla B = A \# B$。令 $X := A^{-1/2}BA^{-1/2} \in \mathcal{M}_{++}$。共轭变换得到 $(\mathbf{1} + X)/2 = X^{1/2}$, 因此 $(X^{1/2} - \mathbf{1})^2 = 0$。由于 $X^{1/2} - \mathbf{1}$ 是自伴的, $X^{1/2} = \mathbf{1}$, 故 $X = \mathbf{1}$ 且 $A = B$。反之显然。□

3.4. **合同不变性与缩放。**

引理 3.3 (合同不变性). 对于任意可逆的 $S \in \mathcal{M}^\times$ 以及所有 A、 $B \in \mathcal{M}_{++}$,

$$d_\tau(S^*AS, S^*BS) = d_\tau(A,B).$$

证明。 由 (3.2) 可知, 只需证明对于 $X \in \mathcal{M}_{++}$,

$$\tau(\log(S^*XS)) = \tau(\log X) + 2\log\Delta(S). \quad (3.3)$$

I事实上, 将 (3.3) 应用于 $X = A \nabla B$、 $X = A$ 和 $X = B$, 即可使加性常数相互抵消。为证明 (3.3), 利用 $\tau(\log Y) = \log \Delta(Y)$ 以及乘法性:

$$\tau(\log(S^*XS)) = \log\Delta(S^*XS) = \log\Delta(S^*) + \log\Delta(X) + \log\Delta(S).$$

由于 $\Delta(S^*) = \Delta(S)$（由极分解和迹性可得）, (3.3) 即得证。 □

引理 3.4（正标量齐次性）。 对于每个 $c > 0$ 以及所有 $A,\ B \in \mathcal{M}_{++}$,

$$d_\tau(cA, cB) = d_\tau(A,B).$$

证明。 在 (1.2) 中使用 $\log(cX) = (\log c)\mathbf{1} + \log X$, 并消去常数项 . □

注 3.5（约化到基点）。 根据引理 3.3，对于 $A,\ B \in \mathcal{M}_{++}$，

$$d_\tau(A,B) = d_\tau\big(\mathbf{1},\, A^{-1/2}BA^{-1/2}\big).$$

因此，三角不等式可归结为对 $d_\tau(\mathbf{1},\ \cdot)$ 的界以及沿重排的比较。

4. Scalar divergence as a Hilbert space distance

定义 $x,\ y>0$ 的标量散度

$$\delta_s(x,y)^2 := \log\Big(\frac{x+y}{2}\Big) - \frac{1}{2}\log x - \frac{1}{2}\log y, \qquad \delta_s(x,y) := \sqrt{\delta_s(x,y)^2}. \tag{4.1}$$

引理 4.1 （积分表示）。对于 $x,\ y>0$,

$$\delta_s(x,y)^2 = \frac{1}{2}\int_0^\infty \big(e^{-rx/2} - e^{-ry/2}\big)^2\,\frac{\mathrm{d}r}{r}. \tag{4.2}$$

证明。使用 $\log u$ 的经典拉普拉斯表示（对所有 $u>0$ 均成立），

$$\log u = \int_0^\infty \frac{e^{-s}-e^{-us}}{s}\,\mathrm{d}s,$$

将其视为反常积分。将其应用于 $u=(x+y)/2$、$u=x$ 和 $u=y$，合并各项，并对分子进行因式分解。

收敛性检查。当 $r\downarrow 0$ 时，我们有 $e^{-rx/2}-e^{-ry/2} = \frac{r}{2}(y-x)+O(r^2)$，因此 $\big(e^{-rx/2}-e^{-ry/2}\big)^2/r = O(r)$，它在 0 附近可积。当 $r\to\infty$ 时，被积函数呈指数衰减。因此，(4.2) 中的反常积分有限。

□

Co推论 4.2 （标量三角不等式）。 函数 δ_s 是 $(0,\infty)$ 上的度量 .

证明。 固定 $x_0>0$ 并定义 $\Phi_{x_0}\colon(0,\infty)\to L^2((0,\infty),\mathrm{d}r/r)$ 为

$$\Phi_{x_0}(x)(r) := \frac{1}{\sqrt{2}}\big(e^{-rx/2}-e^{-rx_0/2}\big).$$

引理 4.1 给出

$$\delta_s(x,y)^2 = \|\Phi_{x_0}(x)-\Phi_{x_0}(y)\|^2_{L^2((0,\infty),\mathrm{d}r/r)},$$

因此 δ_s 是希尔伯特空间度量的拉回，并满足三角不等式。为验证正定性，设 $\delta_s(x,y)=0$。由 (4.2) 可知，对于几乎处处的 $r>0$，有 $e^{-rx/2}=e^{-ry/2}$。若 $x\neq y$，则函数 $r\mapsto e^{-rx/2}-e^{-ry/2}$ 在 $(0,\infty)$ 上实解析且不恒为零，因此其零点集是离散的，不可能具有正测度。因此 $x=y$。

□

5. $\tau(\log(X+Y))$ 的重排下界

命题 5.1 (重排下界)。 设 $X,\ Y\in\mathcal{M}_{++}$。则 $X+Y\in\mathcal{M}_{++}$ 且

$$\tau(\log(X+Y)) \geq \int_{(0,1)} \log\big(\mu_X(t)+\mu_Y(t)\big)\,\mathrm{d}t. \tag{5.1}$$

证明。 由于 $X,\ Y$均可逆，因此存在 $m_X,\ m_Y>0$ 使得 $X\geq m_X\mathbf{1}$ 且 $Y\geq m_Y\mathbf{1}$。于是 $X+Y\geq(m_X+m_Y)\mathbf{1}$，因此 $X+Y$可逆。

设 $m := m_X+m_Y$。定义

$$f_m(s) := \begin{cases} -\log m+1, & 0\leq s\leq m,\\ -\log s+\dfrac{s}{m}, & s\geq m.\end{cases}$$

注（常数平移）。如果希望将 (2.8) 表述为假设 $f(0) = 0$ 的形式，可将其应用于$\sim f_m$：$= f_m - f_m(0)$。由于我们取 $u = 1$，常数项在两边抵消。于是 f_m 在 $[0, \infty)$ 上连续、凸且单调递增。应用 (2.8)，取 $u = 1$ 和 $f = f_m$：

$$\int_0^1 f_m(\mu_{X+Y}(t))\ \mathrm{d}t \le \int_0^1 f_m(\mu_X(t) + \mu_Y(t))\ \mathrm{d}t.$$

由于 $X \ge m_X \mathbf{1}$，我们有 $E^X((\lambda, \infty)) = \mathbf{1}$ 对每个 $0 \le \lambda < m_X$ 都成立，因此对 $\lambda < m_X$ 有 $d_X(\lambda) = \tau(\mathbf{1}) = 1$。由 (2.3) 可知，对所有 $t \in (0, 1)$，$\mu_X(t) \ge m_X$。类似地，对所有 $t \in (0,1)$，$\mu_Y(t) \ge m_Y$ 且 $\mu_{X+Y}(t) \ge m_X + m_Y = m$。对于几乎处处的 $t \in (0, 1)$，我们有 $\mu_{X+Y}(t) \ge m$ 且 $\mu_X(t) + \mu_Y(t) \ge m$，因此在相关范围内 $f_m(z) = -\log z + \frac{z}{m}$。此外，将 (2.5) 应用于 $f(s) = s$，

$$\int_0^1 \mu_{X+Y}(t)\ \mathrm{d}t = \tau(X+Y) = \tau(X) + \tau(Y) = \int_0^1 \big(\mu_X(t) + \mu_Y(t)\big)\ \mathrm{d}t.$$

因此线性项 $\frac{1}{m}(\cdot)$ 相互抵消，我们得到

$$\int_0^1 \log\big(\mu_{X+Y}(t)\big)\ \mathrm{d}t \ge \int_0^1 \log\big(\mu_X(t) + \mu_Y(t)\big)\ \mathrm{d}t.$$

最后，对 $X + Y$ 应用 (2.7)，得到 (5.1)。 □

6. $\mathcal{M}_{++}$ 上迹对数距离的三角不等式

6.1. $d_\tau(\mathbf{1}, \cdot)$ 作为沿重排的 L^2-范数。

引理 6.1 ($d_\tau(\mathbf{1}, \cdot)$ 经由广义奇异值). 对每一个 $X \in \mathcal{M}_{++}$,

$$d_\tau(\mathbf{1}, X)^2 = \int_{(0,1)} \delta_s\big(1, \mu_X(t)\big)^2\ \mathrm{d}t,$$

其中被积函数对几乎处处的 $t \in (0,1)$ 取值，因此

$$d_\tau(\mathbf{1}, X) = \big\|\delta_s(1, \mu_X)\big\|_{L^2(0,1)}.$$

证明。 由 (1.2) 可得，其中 $A = \mathbf{1}$,

$$d_\tau(\mathbf{1}, X)^2 = \tau\Big(\log\Big(\frac{\mathbf{1} + X}{2}\Big)\Big) - \frac{1}{2}\tau(\log X).$$

由于 $u \mapsto \log\big(\frac{1+u}{2}\big)$ 在 $[0, \infty)$ 上连续且递增，因此我们可以应用 (2.6) 得到 in

$$\tau\Big(\log\Big(\frac{\mathbf{1} + X}{2}\Big)\Big) = \int_0^1 \log\Big(\frac{1 + \mu_X(t)}{2}\Big)\ \mathrm{d}t.$$

此外，由于 $X \in \mathcal{M}_{++}$，(2.7) 给出

$$\tau(\log X) = \int_0^1 \log\big(\mu_X(t)\big)\ \mathrm{d}t.$$

将这些代入 $d_\tau(\mathbf{1}, X)^2$ 的表达式，得到

$$d_\tau(\mathbf{1}, X)^2 = \int_0^1 \left(\log\Big(\frac{1 + \mu_X(t)}{2}\Big) - \frac{1}{2}\log\big(\mu_X(t)\big)\right)\mathrm{d}t = \int_0^1 \delta_s\big(1, \mu_X(t)\big)^2\ \mathrm{d}t,$$

根据标量散度的定义 (4.1)。由于 $X \in \mathcal{M}_{++}$，存在 $m > 0$ 使得 $X \ge m\mathbf{1}$，因此对于所有 $t \in$（0，1），都有 $\mu_X(t) \ge m$。因此，对于几乎处处的 $t \in$（0，1），$\delta_s(1, \mu_X(t))$ 是有限的（参见注 2.2）。□

6.2. $d_\tau(S,T)$**的下界。**

引理 6.2（$d_\tau(S,\ T)$ 的 Fack–Kosaki 下界）。对于所有 $S,\ T\in\mathcal{M}_{++}$,

$$d_\tau(S,T)^2\geq\int_0^1\delta_s\big(\mu_S(t),\mu_T(t)\big)^2\,\mathrm{d}t,\tag{6.1}$$

其中，被积函数几乎处处取于 $t\in(0,1)$。因此

$$\big\|\delta_s(\mu_S,\mu_T)\big\|_{L^2(0,1)}\leq d_\tau(S,T).$$

证明。利用 (1.2) 和 $\log\frac{S+T}{2}=\log(S+T)-(\log 2)\mathbf{1}$，由命题 5.1 得

$$\tau\Big(\log\Big(\frac{S+T}{2}\Big)\Big)\geq\int_0^1\log\Big(\frac{\mu_S(t)+\mu_T(t)}{2}\Big)\,\mathrm{d}t.$$

此外，由 (2.7) 得 $\tau(\log S)=\int_0^1\log\mu_S$，$T$ 同理。相减并与 (4.1) 比较，得 (6.1)。□

6.3. **三角不等式。**

命题 6.3（$\mathcal{M}_{++}$上的三角不等式）。对所有 $A,\ B,\ C\in\mathcal{M}_{++}$,

$$d_\tau(A,C)\leq d_\tau(A,B)+d_\tau(B,C).$$

Proof。 根据合同不变性（引理 3.3），取 $S=A^{-1/2}$ 即可，因此只需证明

$$d_\tau(\mathbf{1},T)\leq d_\tau(\mathbf{1},S)+d_\tau(S,T)\qquad(S,T\in\mathcal{M}_{++}).\tag{6.2}$$

固定 $S,\ T\in\mathcal{M}_{++}$。根据引理 6.1,

$$d_\tau(\mathbf{1},T)=\|\delta_s(1,\mu_T)\|_{L^2(0,1)},\qquad d_\tau(\mathbf{1},S)=\|\delta_s(1,\mu_S)\|_{L^2(0,1)}.$$

根据引理 6.2，$\|\delta_s(\mu_S,\ \mu_T)\|_{L^2(0,\ 1)}\leq d_\tau(S,\ T)$。

由于 $t\mapsto\mu_S(t)$ 和 $t\mapsto\mu_T(t)$ 在 (0，1) 上单调递减且右连续，因此它们是可测的。由于 δ_s 在 (0，∞) 上连续，^{2}, 函数 $t\mapsto\delta_s(1,\ \mu_S(t))$ 和 $t\mapsto\delta_s(\mu_S(t)\ \mu_T(t))$ 可测；此外，根据引理 6.1 和引理 6.2，它们属于 $L^2(0,\ 1)$。由于 δ_s 是标量度量（推论 4.2），对几乎处处的 $t\in(0,\ 1)$,

$$\delta_s(1,\mu_T(t))\leq\delta_s(1,\mu_S(t))+\delta_s(\mu_S(t),\mu_T(t)).$$

取 L^2-范数并应用闵可夫斯基不等式，得到 (6.2)。□

定理 6.4（有限冯·诺依曼代数上的迹对数度量）。设$(\mathcal{M},\tau)$是一个有限冯·诺依曼代数，并带有忠实正规迹态。那么 d_τ 是 $\mathcal{M}_{++}$上的度量。

证明。命题 3.2 给出了对称性、非负性和正定性。命题 6.3 给出了三角不等式。□

7. 转　移至具有迹态的 C^*-代数：通过 GNS 冯·诺依曼包络

引理 7.1（冯·诺依曼包络上的诱导迹）。设$(\mathcal{A},\tau)$是一个具有单位元的 C^*-代数，并带有忠实迹态；设$(H_\tau,\pi_\tau,\xi_\tau)$是 *GNS* 三元组。令 $\mathcal{M}:=\pi_\tau(\mathcal{A})''\subset B(H_\tau)$，并定义 $\tilde{\tau}(x):=\langle x\xi_\tau,\xi_\tau\rangle$，其中 $x\in\mathcal{M}$。那么 $\tilde{\tau}$是$\mathcal{M}$上的忠实正规迹态。

证明。正规性显然，因为 $\tilde{\tau}$ 是 $B(H_\tau)$ 上一个向量态在 $\mathcal{M}$ 上的限制。对于迹性，当 $a,\ b\in\mathcal{A}$ 时，我们有

$$\tilde{\tau}(\pi_\tau(a)\pi_\tau(b))=\langle\pi_\tau(ab)\xi_\tau,\xi_\tau\rangle=\tau(ab)=\tau(ba)=\tilde{\tau}(\pi_\tau(b)\pi_\tau(a)).$$

由于 $\pi_\tau(\mathcal{A})$ 在 $\mathcal{M}$ 中强稠密，且 $\tilde{\tau}$ 是正规的，因此这可扩展到所有 $\mathcal{M}$　.

对于忠实性，令 $x \in \mathcal{M}_+$，并假设 $\tilde{\tau}(x) = 0$。则

$$\|x^{1/2}\xi_\tau\|^2 = \langle x\xi_\tau, \xi_\tau\rangle = \tilde{\tau}(x) = 0,$$

因此 $x^{1/2}\xi_\tau = 0$。

我们声称，ξ_τ 是 $\mathcal{M}$的分离元素。为此，回想一下，H_τ 是带有内积 $\langle a, b\rangle = \tau(b^*a)$ 的 $\mathcal{A}$ 的完备化，而 ξ_τ是1类。定义稠密子空间 $\pi_\tau(\mathcal{A})\xi_\tau$ 上的右 作用如下

$$\rho_\tau(a)\,\pi_\tau(b)\xi_\tau := \pi_\tau(ba)\xi_\tau \qquad (a, b \in \mathcal{A}).$$

对于 $a, b \in \mathcal{A}$，我们有

$$\|\rho_\tau(a)\pi_\tau(b)\xi_\tau\|^2 = \|\pi_\tau(ba)\xi_\tau\|^2 = \tau\big((ba)^*(ba)\big) = \tau\big(a^*b^*ba\big) = \tau\big(b^*b\,aa^*\big) \le \|a\|^2\,\tau(b^*b).$$

良定义性。若 $\pi_\tau(b)\xi_\tau = 0$，则 $\|\pi_\tau(b)\xi_\tau\|^2 = \tau(b^*b) = 0$，因此由$\tau$的忠实性可得 $b = 0$。于是，$\rho_\tau(a)$在 $\pi_\tau(\mathcal{A})\xi_\tau$上的定义是明确无歧义的。

因此，$\rho_\tau(a)$ 可延拓为 H_τ 上的有界算子，且满足 $\|\rho_\tau(a)\| \le \|a\|$。在稠密子空间 $\pi_\tau(\mathcal{A})\xi_\tau$ 上直接计算可得，$\rho_\tau(a)$ 与每个 $\pi_\tau(c)$ 交换：对于 $a, b, c \in \mathcal{A}$,$\pi_\tau(c)\rho_\tau(a)\pi_\tau(b)\xi_\tau = \pi_\tau(cba)\xi_\tau = \rho_\tau(a)\pi_\tau(c)\pi_\tau(b)\xi_\tau$。因此，$\rho_\tau(\mathcal{A}) \subset \pi_\tau(\mathcal{A})' \subset \mathcal{M}'$。此外，

$$\rho_\tau(\mathcal{A})\xi_\tau = \{\pi_\tau(a)\xi_\tau :\ a \in \mathcal{A}\}$$

在 H_τ 中稠密，因此 ξ_τ 是 $\mathcal{M}'$ 的循环向量。因此，ξ_τ 是 $\mathcal{M}$ 的分离向量：若 $y \in \mathcal{M}$ 且$y\xi_\tau = 0$，则对所有 $z \in \mathcal{M}'$ 都有 $yz\xi_\tau = zy\xi_\tau = 0$，因此 y 在稠密子空间 $\mathcal{M}'\xi_\tau$ 上为零，从而 $y = 0$。

将此应用于 $y = x^{1/2}$，得到 $x^{1/2} = 0$，因此 $x = 0$。

□

定理 *1.2* 的证明。设 $(\mathcal{A}, \tau)$ 是一个带单位的 C^*-代数，且具有忠实迹，并设 $\mathcal{M} = \pi_\tau(\mathcal{A})''$ 是其冯·诺依曼包络。由引理 7.1，$\tilde{\tau}$ 是 $\mathcal{M}$ 上的忠实正规迹态。

若 $A \in \mathcal{A}_{++}$，则 $\pi_\tau(A) \in \mathcal{M}_{++}$，且连续函数演算保持不变：$\pi_\tau(\log A) = \log(\pi_\tau(A))$，$\log(\frac{A+B}{2})$ 也同理。因此，对于 $A, B \in \mathcal{A}_{++}$，

$$d_\tau(A, B)^2 = \tilde{\tau}\left(\log\left(\frac{\pi_\tau(A) + \pi_\tau(B)}{2}\right)\right) - \frac{1}{2}\tilde{\tau}(\log \pi_\tau(A)) - \frac{1}{2}\tilde{\tau}(\log \pi_\tau(B)) = d_{\tilde{\tau}}(\pi_\tau(A), \pi_\tau(B))^2.$$

因此 $d_\tau(A, B) = d_{\tilde{\tau}}(\pi_\tau(A)\ \pi_\tau(B))$。由定理 6.4，$d_{\tilde{\tau}}$ 是 $\mathcal{M}_{++}$ 上的度量，因此其在 $\pi_\tau(\mathcal{A}_{++})$ 上的限制也是度量；π_τ 的忠实性将正定性传递回 $\mathcal{A}_{++}$。□

8. 量子 詹森–香农散度及其积分表示

在本节中，我们首先在有限 von Neumann 代数 $(\mathcal{M}, \tau)$ 中进行讨论，然后通过第7节转移到 $\mathcal{A}$。令 $\eta(x) = x\log x$，其中 $\eta(0) = 0$。

8.1. 一个求导恒等式。

引理 8.1（求导公式）。设 $A \in \mathcal{M}_+$。映射 $t \mapsto \tau(\eta(A + t\mathbf{1}))$ 在 $(0, \infty)$ 上连续可微，并且

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\tau(\eta(A + t\mathbf{1})) = \tau(\log(A + t\mathbf{1}) + \mathbf{1}) \qquad (t > 0).$$

证明。令 E^A 为 A 的谱测度，并在 $[0, \|A\|]$上定义有限测度 $\nu_A(\Omega) = \tau(E^A(\Omega))$。则对于有界的 Borel f，$\tau(f(A)) = \int f(\lambda)\,\mathrm{d}\nu_A(\lambda)$。对于 $t > 0$,

$$\tau(\eta(A + t\mathbf{1})) = \int_{[0,\|A\|]} (\lambda + t)\log(\lambda + t)\ \mathrm{d}\nu_A(\lambda).$$

固定 $0<t_0<t_1<\infty$。对于 $t\in[t_0,t_1]$ 和 $\lambda\in[0,\|A\|]$，导数 $\partial_t\big((\lambda+t)\log(\lambda+t)\big)=\log(\lambda+t)+1$ 的绝对值有界，且其上界仅依赖于 t_0，t_1，$\|A\|$。因此，可由 $[t_0,t_1]$上的控制收敛定理证明在积分号下求导是合理的。将同样的控制论证应用于 $\partial_t(\log(\lambda+t)+1)=1/(\lambda+t)$，可知导数关于 t 在 $(0,\infty)$ 的任意紧子区间上连续。因此，$t\mapsto\tau(\eta(A+t\mathbf{1}))$ 在 $(0,\infty)$ 上是C^1。

□

8.2. **在无穷远处趋于零**。

引理 8.2（在无穷远处趋于零）。对所有 A，$B\in\mathcal{M}_+$，

$$\lim_{t\to\infty}J_{\tau,\eta}(A+t\mathbf{1},B+t\mathbf{1})=0.$$

证明。利用 $\eta(cX)=c\,\eta(X)+c(\log c)\,X$ 以及 $J_{\tau,\eta}$ 中仿射项的抵消，可以验证$J_{\tau,\eta}(cA,cB)=c\,J_{\tau,\eta}(A,B)$ 对于 $c>0$ 成立。因此

$$J_{\tau,\eta}(A+t\mathbf{1},B+t\mathbf{1})=t\,J_{\tau,\eta}\Big(\mathbf{1}+\frac{A}{t},\mathbf{1}+\frac{B}{t}\Big).$$

令 $\phi(r):=\eta(1+r)-r=(1+r)\log(1+r)-r$ 对于 $r\geq0$ 成立。取定 $r_0\in(0,1)$。由于 ϕ 在 $[0,r_0]$ 上是 C^2，且 $\phi(0)=\phi'(0)=0$，存在 $C>0$ 使得

$$0\leq\phi(r)\leq Cr^2\qquad(0\leq r\leq r_0).$$

取 $t_0>0$ 使得 $\|A\|/t_0\leq r_0$ 和 $\|B\|/t_0\leq r_0$。那么对于 $t\geq t_0$，由函数演算可得

$$\|\phi(A/t)\|\leq C\|A\|^2/t^2,\qquad\|\phi(B/t)\|\leq C\|B\|^2/t^2,\qquad\Big\|\phi\Big(\frac{A+B}{2t}\Big)\Big\|\leq C\|A+B\|^2/(4t^2).$$

利用 $\eta(\mathbf{1}+X)=X+\phi(X)$，以及仿射项在$J_\tau$中抵消的事实，$\eta$，我们得到

$$J_{\tau,\eta}\Big(\mathbf{1}+\frac{A}{t},\mathbf{1}+\frac{B}{t}\Big)=\frac12\tau\Big(\phi\Big(\frac{A}{t}\Big)\Big)+\frac12\tau\Big(\phi\Big(\frac{B}{t}\Big)\Big)-\tau\Big(\phi\Big(\frac{A+B}{2t}\Big)\Big).$$

由于 τ 是一个态，$|\tau(X)|\leq\|X\|$，因此

$$\Big|J_{\tau,\eta}\Big(\mathbf{1}+\frac{A}{t},\mathbf{1}+\frac{B}{t}\Big)\Big|\leq\frac12\Big\|\phi\Big(\frac{A}{t}\Big)\Big\|+\frac12\Big\|\phi\Big(\frac{B}{t}\Big)\Big\|+\Big\|\phi\Big(\frac{A+B}{2t}\Big)\Big\|\leq\frac{C'}{t^2}.$$

因此 $J_{\tau,\eta}(A+t\mathbf{1},B+t\mathbf{1})=t\,J_{\tau,\eta}(\mathbf{1}+A/t,\mathbf{1}+B/t)=O(t^{-1})\to0$。 □

8.3. **积分表示与度量性**。对于 $t>0$ 和 A，$B\in\mathcal{M}_+$ set

$$d_{\tau,t}(A,B):=d_\tau(A+t\mathbf{1},B+t\mathbf{1}).$$

命题 8.3（积分表示）。对于所有 A，$B\in\mathcal{M}_+$，

$$J_{\tau,\eta}(A,B)=\int_0^\infty d_{\tau,t}(A,B)^2\,\mathrm{d}t.\tag{8.1}$$

证明。定义 $F(t):=J_{\tau,\eta}(A+t\mathbf{1},B+t\mathbf{1})$ 对于 $t\geq0$。对于 $t>0$，由引理 8.1 得

$$F'(t)=\frac12\tau(\log(A+t\mathbf{1})+\mathbf{1})+\frac12\tau(\log(B+t\mathbf{1})+\mathbf{1})-\tau\Big(\log\Big(\frac{A+B}{2}+t\mathbf{1}\Big)+\mathbf{1}\Big).$$

其中的 $\mathbf{1}$ 项相互抵消，剩余表达式根据 (1.2) 等于$-d_{\tau,t}(A,B)^2$。因此，对于 $t>0$，$F'(t)=-d_{\tau,t}(A,B)^2$。

固定 $\varepsilon>0$。对于 $R>\varepsilon$，

$$F(R)-F(\varepsilon)=\int_\varepsilon^R F'(t)\,\mathrm{d}t=-\int_\varepsilon^R d_{\tau,t}(A,B)^2\,\mathrm{d}t.$$

令 $R \to \infty$，并应用引理 8.2，得到

$$F(\varepsilon) = \int_{\varepsilon}^{\infty} d_{\tau,t}(A,B)^2 \, \mathrm{d}t.$$

映射 $t \mapsto d_{\tau,\,t}(A,\ B)^2$ 在 $(0,\ \infty)$ 上是博雷尔可测的（事实上，它在$[\varepsilon,\infty$上范数连续），这对每个 $\varepsilon > 0$ 都成立（由对 log 应用连续函数演算可得）。

此外，由于 η连续延拓到 $[0,\infty)$，且连续函数的函数演算是范数连续的，因此 $F(t) = J_{\tau,\,\eta}(A + t\mathbf{1},\ B + t\mathbf{1})$ 在 $t = 0$ 处连续。

由于 $d_{\tau,\,t}(A,\ B)^2 \geq 0$，函数 $t \mapsto \mathbb{1}_{(\varepsilon,\ \infty)}(t) d_{\tau,\,t}(A,\ B)^2$ 逐点递增并收敛到 $d_{\tau,\,t}(A,\ B)^2$。因此，根据单调收敛定理，

$$\lim_{\varepsilon \downarrow 0} \int_{\varepsilon}^{\infty} d_{\tau,t}(A,B)^2 \, \mathrm{d}t = \int_{0}^{\infty} d_{\tau,t}(A,B)^2 \, \mathrm{d}t.$$

最后，由于 η 连续延拓到 $[0,\infty)$，且 $\eta(0) = 0$，函数演算对有界集上的映射 $X \mapsto \eta(X)$ 是范数连续的。因此，$t \mapsto \tau(\eta(A+t\mathbf{1}))$、$t \mapsto \tau(\eta(B+t\mathbf{1}))$ 和 $t \mapsto \tau\big(\eta(\frac{A+B}{2} + t\mathbf{1})\big)$ 在 $t = 0$ 处连续。因此，当 $\varepsilon \downarrow 0$时，$F(\varepsilon) \longrightarrow F(0) = J_{\tau,\,\eta}(A,\ B)$，将此结果与上述单调收敛步骤结合，即得 (8.1)。□

命题8.4（量子 Jensen–Shannon 散度在冯·诺依曼框架下是度量）。设 $A, B \in \mathcal{M}_+$，并令$D_{\tau,\,\eta} := \sqrt{J_{\tau,\,\eta}}$。则 $D_{\tau,\,\eta}$ 是 $\mathcal{M}_+$上的度量。

证明。对称性显然。非负性由（8.1）得出。若 $D_{\tau,\,\eta}(A,\ B) = 0$，则 $d_{\tau,\,t}(A,\ B) = 0$ 对几乎处处的 $t > 0$成立，因此对这些 t 有 $A + t\mathbf{1} = B + t\mathbf{1}$，从而得到 $A = B$。

为证明三角不等式，设 $A,\ B,\ C \in \mathcal{M}_+$。对每个 $t > 0$，$d_{\tau,\,t}$ 是作用于$\mathcal{M}_{++}$ 上的迹对数度量，其输入为 $(A + t\mathbf{1},\ B + t\mathbf{1},\ C + t\mathbf{1})$，因此由定理 6.4，

$$d_{\tau,t}(A,C) \leq d_{\tau,t}(A,B) + d_{\tau,t}(B,C).$$

取 $L^2(0,\ \infty)$ 范数并应用闵可夫斯基不等式，得到

$$D_{\tau,\eta}(A,C) = \|d_{\tau,\bullet}(A,C)\|_{L^2(0,\infty)} \leq \|d_{\tau,\bullet}(A,B)\|_{L^2} + \|d_{\tau,\bullet}(B,C)\|_{L^2} = D_{\tau,\eta}(A,B) + D_{\tau,\eta}(B,C).$$

□

定理 1.7 的证明。与第7节一样，将问题转到冯·诺依曼包络 $\mathcal{M} = \pi_\tau(\mathcal{A})''$，并赋予诱导的忠实正规迹 $\tilde{\tau}$。函数演算给出 $\pi_\tau(\eta(A)) = \eta(\pi_\tau(A))$，以及$\tilde{\tau}(\pi_\tau(\eta(A))) = \tau(\eta(A))$。因此 $J_{\tau,\eta}(A, B) = J_{\tilde{\tau},\eta}(\pi_\tau(A)\ \pi_\tau(B))$。由命题8.4，$D_{\tilde{\tau},\eta}$是度量；将其限制到 $\pi_\tau(\mathcal{A}_+)$，并利用 π_τ 的忠实性，可得 $D_{\tau,\eta}$ 是$\mathcal{A}_+$上的度量。□

9. 量子 Jensen–Shannon 散度度量是希尔伯特型的吗？矩阵维数中的否定结果

9.1. **希尔伯特度量与条件负定性**。

定义 9.1（条件负定核／负型）。设 X 为一个集合，且 $K\colon X \times X \to \mathbb{R}$ 对称，并满足 $K(x,x) = 0$。若对每个 $m \in \mathbb{N}$、每组 $x_1, \ldots, x_m \in X$ 以及每组 $c_1, \ldots, c_m \in \mathbb{R}$，只要满足 $\sum_{i=1}^m c_i = 0$，就有

$$\sum_{i,j=1}^{m} c_i c_j \, K(x_i, x_j) \leq 0.$$

若存在希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 和嵌入 $\Phi : X \to \mathcal{H}$，使得对所有 $x, y \in X$，都有 $d(x,y) = \|\Phi(x) - \Phi(y)\|_{\mathcal{H}}$，则度量 d 在 X 上是希尔伯特型 的。

引理 9.2（条件负定核产生希尔伯特嵌入）。设 K 是 X上的条件负定核。那么存在希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 和映射 $\Phi\colon X \to \mathcal{H}$，使得

$$K(x,y) = \|\Phi(x) - \Phi(y)\|_{\mathcal{H}}^2 \qquad (x,y \in X).$$

因此，度量空间 (X,d) 是希尔伯特型的，当且仅当 d^2 是条件负定的。

证明。固定 $x_0 \in X$。令 $\mathcal{V}$ 为有限支撑函数 $u\colon X \to \mathbb{R}$构成的实向量空间，其中 $\sum_{x\in X} u(x) = 0$。在 $\mathcal{V}$ 上定义对称双线性形式

$$\langle u, v\rangle_0 := -\frac{1}{2}\sum_{x,y\in X} u(x)v(y)\,K(x,y).$$

K 的条件负定性意味着，对于所有 $u \in \mathcal{V}$，$\langle u,u\rangle_0 \geq 0$。对零空间取商并完备化，得到希尔伯特空间 $\mathcal{H}$。对于 $x \in X$，令 $u_x := \delta_x - \delta_{x_0} \in \mathcal{V}$，并设 $\Phi(x) := [u_x] \in \mathcal{H}$。直接展开可得 $\|\Phi(x) - \Phi(y)\|^2 = K(x,y)$。最后一个断言可通过将此结果应用于$K = d^2$ 并注意到平方希尔伯特距离是条件负定的而得出。□

引理 9.3 (指数函数与条件负定性)。设 $K\colon X \times X \to \mathbb{R}$ 是对称的，且满足 $K(x,x) = 0$。若 K 是条件负定的，则对每个 $\beta > 0$，核函数 $\exp(-\beta K)$ 都是正定的。反之，若对于所有 $\beta > 0$，$\exp(-\beta K)$ 都是正定的，则 K 是条件负定的。

证明。这是 Schoenberg 提出的一个标准等价关系；参见 [26]（或 [3, 第 3]章）。首先假设 K 是条件负定的。根据引理 9.2，存在某个希尔伯特嵌入，使得 $K(x,y) = \|\Phi(x) - \Phi(y)\|^2$。对于$u, v \in \mathcal{H}$,

$$e^{-\beta\|u-v\|^2} = e^{-\beta\|u\|^2} e^{-\beta\|v\|^2} e^{2\beta\langle u,v\rangle}$$

而且 $e^{2\beta\langle u,v\rangle}$ 作为一个系数均为正的幂级数（张量幂）是正定的。乘以正的对角因子仍保持正定性。因此，$\exp(-\beta K)$ 是正定的。

反过来，假设对于所有 $\beta > 0$，$\exp(-\beta K)$ 都是正定的。固定 $x_1, \dots, x_m \in X$和$c_1, \dots, c_m \in \mathbb{R}$，其中 $\sum_i c_i = 0$。定义

$$F(\beta) := \sum_{i,j=1}^{m} c_i c_j\, e^{-\beta K(x_i,x_j)} \geq 0 \qquad (\beta > 0),$$

并注意 $F(0) = \sum_{i,j} c_i c_j = (\sum_i c_i)^2 = 0$。因此 $F'(0^+) \geq 0$。但是

$$F'(\beta) = -\sum_{i,j} c_i c_j\, K(x_i,x_j)\, e^{-\beta K(x_i,x_j)},$$

so $F'(0^+) = -\sum_{i,j} c_i c_j K(x_i, x_j) \geq 0$，即 $\sum_{i,j} c_i c_j K(x_i, x_j) \leq 0$。因此，$K$是条件负定的. □

9.2. **在 $M_n^{++}(\mathbb{C})$ 上，$n \geq 2$的非希尔伯特性**。本小节中，设 $\mathcal{A} = M_n(\mathbb{C})$，并令$\tau = \frac{1}{n}\operatorname{Tr}$。

命题 9.4 (量子 Jensen–Shannon 散度在 $M_n^{++}(\mathbb{C})$ 上，$n \geq 2$)：设 $n \geq 2$。$M_n^{++}(\mathbb{C})$ 上的量子 *Jensen–Shannon* 散度度量 $D_{\tau,\eta}$ 不是希尔伯特型。因此，$D_{\tau,\eta}$ 在全锥 $M_n^{+}(\mathbb{C})$上不是希尔伯特型。

证明。回顾一下，度量空间 (X, d) 是希尔伯特型的，当且仅当 d^2 是条件负定的（引理 9.2）。因此，只需证明核 $J_{\tau,\eta}$ 不是条件负定的。

步骤 *1*：情形 $n = 2$。根据例 9.6，存在 $X_1, \dots, X_m \in M_2^{++}(\mathbb{C})$ 和 $c_1, \dots, c_m \in \mathbb{R}$，使得 $\sum_{i=1}^m c_i = 0$

$$\sum_{i,j=1}^{m} c_i c_j\, J_{\tau_2,\eta}(X_i, X_j) > 0, \qquad \text{where } \tau_2 = \tfrac{1}{2}\operatorname{Tr} \text{ on } M_2(\mathbb{C}).$$

因此 $J_{\tau_2,\ \eta}$ 在 $M_2^{++}(\mathbb{C})$ 上不是条件负定，所以度量 $D_{\tau_2,\ \eta}=\sqrt{J_{\tau_2,\ \eta}}$ 在 $\overline{M_2^{++}}(\mathbb{C})$ 上不是希尔伯特型。

步骤 *2*：嵌入到 $M_n^{++}(\mathbb{C})$ 中，其中 $n\geq 2$。令 $n\geq 2$，并记 $\tau_n=\frac{1}{n}\mathrm{Tr}$ 为 $M_n(\mathbb{C})$ 上的迹。定义分块嵌入 $\iota\colon M_2^{++}(\mathbb{C})\to M_n^{++}(\mathbb{C})$，使得

$$\iota(X):=X\oplus \mathbf{1}_{n-2}.$$

Since $\eta(1)=1\cdot\log 1=0$，且 η 逐块作用于分块对角矩阵，因此我们有

$$\eta(\iota(X))=\eta(X)\oplus 0_{n-2},\qquad \eta\left(\frac{\iota(X)+\iota(Y)}{2}\right)=\eta\left(\frac{X+Y}{2}\right)\oplus 0_{n-2}.$$

因此，对所有 $X,\ Y\in M_2^{++}(\mathbb{C})$，

$$J_{\tau_n,\eta}(\iota(X),\iota(Y))=\frac{1}{n}\,\mathrm{Tr}\left(\frac{1}{2}\eta(X)+\frac{1}{2}\eta(Y)-\eta\left(\frac{X+Y}{2}\right)\right)=\frac{2}{n}\,J_{\tau_2,\eta}(X,Y).$$

现在令 $Y_i:=\iota(X_i)\in M_n^{++}(\mathbb{C})$，并使用与步骤 1 中相同的系数 c_i：

$$\sum_{i,j=1}^{m}c_ic_j\,J_{\tau_n,\eta}(Y_i,Y_j)=\frac{2}{n}\sum_{i,j=1}^{m}c_ic_j\,J_{\tau_2,\eta}(X_i,X_j)>0.$$

因此，$J_{\tau_n,\ \eta}$ 在 $M_n^{++}(\mathbb{C})$ 上不是条件负定的，所以 $D_{\tau_n,\ \eta}$ 在 $M_n^{++}(\mathbb{C})$ 上不是希尔伯特型的。

最后，若 $D_{\tau_n,\eta}$ 在 $M_n(\mathbb{C})_+$上是希尔伯特型的，则存在一个嵌入 $\Phi\colon M_n(\mathbb{C})_+\to\mathcal{H}$ 到某个希尔伯特空间中，且满足 $D_{\tau_n,\eta}(X,Y)=\|\Phi(X)-\Phi(Y)\|$。将 Φ 限制到子集$M_n^{++}(\mathbb{C})$上，就会使 $D_{\tau_n,\eta}$在 $M_n^{++}(\mathbb{C})$上成为希尔伯特型的，这与上述结论矛盾。

□

9.3. $n\geq 3$**上的密度矩阵的非希尔伯特性**。设

$$\mathcal{D}_n:=\{\rho\in M_n^{+}(\mathbb{C}):\mathrm{Tr}(\rho)=1\}$$

为密度矩阵。

命题 9.5 (量子 Jensen–Shannon 散度在 $\mathcal{D}_n$ 上不具希尔伯特性，适用于 $n\geq 3$)。对于任意 $n\geq 3$，量子 *Jensen–Shannon* 散度度量 $D_{\tau,\eta}=\sqrt{J_{\tau,\eta}}$ 在 $\mathcal{D}_n$上都不是希尔伯特型的。

证明。设 $\tau_n=\frac{1}{n}\mathrm{Tr}$ 定义在 $M_n(\mathbb{C})$上。根据引理 9.2，一个度量是希尔伯特型的，当且仅当它的平方是条件负定的（CND）。因此，只需证明核 $J_{\tau_n,\eta}$ 在 $\mathcal{D}_n$上不是条件负定的。

步骤 *1*：在 $\mathcal{D}_3$ 上已有条件负定性违背。在例 9.6 中，我们给出密度矩阵 $\rho_1,\dots,\rho_5\in\mathcal{D}_3$ 以及整数 $c_1,\dots,c_5$，满足 $\sum_i c_i=0$，使得

$$\sum_{i,j=1}^{5}c_ic_j\,J_{\tau_3,\eta}(\rho_i,\rho_j)>0.$$

因此$J_{\tau_3,\eta}$ 在 $\mathcal{D}_3$ 上不是条件负定的，进而$D_{\tau_3,\eta}$ 在 $\mathcal{D}_3$上不是希尔伯特型的。

步骤 *2*：将 $\mathcal{D}_3$ 嵌入 $\mathcal{D}_n$，其中 $n>3$。对于 $n>3$，将 $\mathcal{D}_3$ 嵌入 $\mathcal{D}_n$，通过

$$\iota(\rho):=\rho\oplus 0_{n-3}\qquad(\rho\in\mathcal{D}_3).$$

由于 $\eta(0)=0$，且 η 对分块对角矩阵逐块作用，因此对所有 $\rho,\sigma\in\mathcal{D}_3$，

$$J_{\tau_n,\eta}(\iota(\rho),\iota(\sigma))=\frac{1}{n}\,\mathrm{Tr}\left(\frac{1}{2}\eta(\rho)+\frac{1}{2}\eta(\sigma)-\eta\left(\frac{\rho+\sigma}{2}\right)\right)=\frac{3}{n}\,J_{\tau_3,\eta}(\rho,\sigma).$$

因此，$\mathcal{D}_3$ 上的同一条件负定性违背在 $\mathcal{D}_n$上依然存在。这证明了$D_{\tau_n,\ \eta}$ 对于每个 $n\geq 3$都不是希尔伯特型的 $\mathcal{D}_n$。□

示例 9.6（经认证的整数矩阵条件负定性显式违背）。令$\tau_2 = \frac{1}{2}$ Tr on$M_2(\mathbb{C})$和 $\eta(x) = x$log x with $\eta(0) = 0$。考虑以下 2×2 实对称整数矩阵：

$$X_1 = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad X_2 = \begin{pmatrix} 9 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}, \quad X_3 = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 7 \end{pmatrix}, \quad X_4 = \begin{pmatrix} 8 & 5 \\ 5 & 8 \end{pmatrix}, \quad X_5 = \begin{pmatrix} 8 & 8 \\ 8 & 9 \end{pmatrix}.$$

它们全都属于 $M_2^{++}(\mathbb{C})$，因为

$$\det(X_1) = 1,\ \det(X_2) = 5,\ \det(X_3) = 13,\ \det(X_4) = 39,\ \det(X_5) = 8.$$

Let

$$c = (c_1, \ldots, c_5) = (-10,\ 10,\ 10,\ -20,\ 10), \qquad \sum_{i=1}^{5} c_i = 0.$$

(i) 在 $M_2^{++}(\mathbb{C})$ 上违反条件。定义

$$S_2 := \sum_{i,j=1}^{5} c_i c_j\, J_{\tau_2,\eta}(X_i, X_j).$$

A 定向舍入区间算术计算给出严格包围区间

$$S_2 \in \big[\,9.8113517061626681,\ 9.8113517062313917\,\big],$$

因此，$S_2 > 0$ 和 $J_{\tau_2,\ \eta}$ 在 $M_2^{++}(\mathbb{C})$ 上不是条件负定。

(ii) 在 $\mathcal{D}_3$ 上违反条件。取定 $T = 40$（注意，$T > \max_i \mathrm{Tr}(X_i) = 17$），并通过分块嵌入定义 $M_3(\mathbb{C})$ 中的密度矩阵

$$\rho_i := \frac{1}{T} X_i \ \oplus \left(1 - \frac{\mathrm{Tr}(X_i)}{T}\right) \in \mathcal{D}_3, \qquad i = 1, \ldots, 5.$$

（例如，$\rho_1 = \frac{1}{40}\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \oplus \frac{37}{40}$、$\rho_4 = \frac{1}{40}\begin{pmatrix} 8 & 5 \\ 5 & 8 \end{pmatrix} \oplus \frac{3}{5}$ 等。）令 $\tau_3 = \frac{1}{3}$Tr，并设

$$S_3 := \sum_{i,j=1}^{5} c_i c_j\, J_{\tau_3,\eta}(\rho_i, \rho_j).$$

同一经认证的区间方法给出的包络为

$$S_3 \in \big[\,0.1601205745051536,\ 0.16012057450782458\,\big],$$

因此 $S_3 > 0$。所以 $J_{\tau_3,\ \eta}$ 在 $\mathcal{D}_3$ 上不是条件负定。

可复现性。本例中的所有输入均为整数（经过密度矩阵嵌入后，则为分母固定的有理数），因此验证过程无需处理任何浮点数解析歧义。附录 A 提供了完全严谨的定向舍入区间算术工作流程和伪代码。

备注 9.7（可复现性与认证）。例 9.6 中的正性陈述可以通过定向舍入区间算术以完全严谨的方式验证。

（*1*）精确输入数据。所有矩阵元素均为整数，系数 c_i 均为整数，且满足$\sum_i c_i = 0$。此外，在密度矩阵嵌入中，我们固定 $T = 40$，因此 ρ_i 的每个元素都是分母为 T的有理数（最后一个对角元素为 $1 - \mathrm{Tr}(X_i)/T$）。因此不存在浮点数解析歧义：在进行区间求值之前，所有输入都可以视为精确有理数。

（2）化归为一维认证运算。对于 2×2 实对称矩阵$X=\begin{pmatrix} a & b \\ b & d \end{pmatrix}$，其特征值可由闭式给出：

$$\lambda_{\pm}(X)=\frac{(a+d)\pm\sqrt{(a-d)^2+4b^2}}{2}.$$

因此

$$\operatorname{Tr}(\eta(X))=\eta(\lambda_+(X))+\eta(\lambda_-(X)),$$

因此，计算 $J_{\tau_2,\ \eta}(X_i,\ X_j)$ 可归结为对一个实变量进行加法、乘法、平方根和对数的区间求值（采用定向舍入）。对于分块对角态$\rho_i\in\mathcal{D}_3$，还需计算标量项 $\eta(1-\operatorname{Tr}(X_i)/T)$ 以及 $\eta(\rho_i+\rho_j)/2$ 对应的类似项；无需进行更高维的谱计算。

(3) 认证正性。采用定向舍入时，计算得到的区间可保证包含 S_2 和 S_3 的精确值；因此，若下端点严格为正，即可认证存在条件负定性违例。该流程可通过任何标准的验证区间软件包实现（例如 Arb、INTLAB 或 Julia IntervalArithmetic）。

10. 产生度量的詹森生成元

定义 10.1（算子凸）。若函数 $f:(0,\ \infty)\to\mathbb{R}$ 满足以下条件，则称其为算子凸：对于每个 $n\in\mathbb{N}$，所有 $X,\ Y\in M_n^{++}(\mathbb{C})$ 和 $\lambda\in[0,1]$，

$$f(\lambda X+(1-\lambda)Y)\le\lambda f(X)+(1-\lambda)f(Y)$$

在洛文纳序下。

引理 10.2（关于 f'的积分表示）。设 $f:(0,\infty)\to\mathbb{R}$ 为算子凸。则 f' 是算子单调的，并且具有奈万林纳–斯蒂尔杰斯型表示。更精确地说，存在常数 $a\in\mathbb{R}$、$b\ge 0$ 以及 $(0,\infty)$ 上的正博雷尔测度 ν，满足$\int_{(0,\infty)}\frac{1}{1+t}\,\mathrm{d}\nu(t)<\infty$，使得

$$f'(x)=a+bx+\int_{(0,\infty)}\frac{x}{x+t}\,\mathrm{d}\nu(t),\qquad x>0. \tag{10.1}$$

证明。由 [18, 定理 3.7]（另见 [5]），若 f 在 $(0,\infty)$ 上算子凸，则 f 可微，并且对每个 $t_0>0$，差商

$$g_{t_0}(t)=\begin{cases}\dfrac{f(t)-f(t_0)}{t-t_0}, & t\ne t_0,\\ f'(t_0), & t=t_0,\end{cases}$$

在 $(0,\infty)$ 上是算子单调的。特别地，$h:=f'$ 在 $(0,\infty)$ 上是算子单调的。

我们现在援引 $(0,\infty)$ 上算子单调函数的斯蒂尔切斯（洛文纳）表示；参见例如 [18, 推论 5.1]（等价地，[18, 定理 5.2] 中的积分表示可改写为这一形式）。因此存在 $a\in\mathbb{R}$、$b\ge 0$ 以及 $(0,\infty)$ 上的正博雷尔测度 ν，使得

$$h(x)=a+bx+\int_{(0,\infty)}\frac{x}{x+t}\,\mathrm{d}\nu(t),\qquad x>0.$$

此外，h 在 $(0,\infty)$ 上取有限值，且对于每个 $x>0$，式 (10.1) 中的积分都是有限的。特别地，在 $x=1$ 处取值可得

$$\int_{(0,\infty)}\frac{1}{1+t}\,\mathrm{d}\nu(t)=h(1)-a-b<\infty,$$

这正是所述的可积性条件。 □

定理 *1.9* 的证明。 首先在有限 von Neumann 代数 $(\mathcal{M},\ \tau)$ 中进行，并固定 $A,\ B \in \mathcal{M}_{+}$。根据引理 10.2， f' 具有形式 (10.1)。从 1 积分到 x ，得到

$$f(x) = \alpha + \beta x + \frac{b}{2}x^2 + \int_{(0,\infty)} \Big((x-1) - t\log\Big(\frac{x+t}{1+t}\Big)\Big)\ \mathrm{d}\nu(t), \qquad x > 0,$$

对于适当的常数 $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$。

有界 x-区间上的一致收敛。固定 $R > 0$ 并考虑

$$k_t(x) := (x-1) - t\log\Big(\frac{x+t}{1+t}\Big), \qquad x \geq 0,\ t > 0.$$

首先，注意到对每个 $L > 0$，都有 $\nu((0,L]) < \infty$。事实上，由于 $\frac{1}{1+t} \geq \frac{1}{1+L}$ 在 $(0, L]$ 上，我们得到

$$\nu((0,L]) \leq (1+L)\int_{(0,\infty)} \frac{1}{1+t}\ \mathrm{d}\nu(t) < \infty.$$

接下来，对于 $x \in [0,R]$ 和 $t > 0$，我们记

$$\log\Big(\frac{x+t}{1+t}\Big) = \log\Big(1 + \frac{x-1}{1+t}\Big).$$

由对数的中值定理，存在 $\theta = \theta(x,t) \in (0,1)$，使得

$$\log\Big(1 + \frac{x-1}{1+t}\Big) = \frac{x-1}{t+1+\theta(x-1)}.$$

因此

$$k_t(x) = (x-1)\Big(1 - \frac{t}{t+1+\theta(x-1)}\Big) = \frac{(x-1)\big(1+\theta(x-1)\big)}{t+1+\theta(x-1)}.$$

令 $M := \max\{1, R-1\}$，于是 $|x-1| \leq M$ 对 $x \in [0,R]$ 成立。对于 $t \geq 2M$，我们有 $t+1+\theta(x-1) \geq t+1-M \geq t/2$，因此

$$|k_t(x)| \leq \frac{2M(1+M)}{t} \leq \frac{C_R}{1+t} \qquad (x \in [0,R],\ t \geq 2M).$$

对于剩余范围 $t \in (0, 2M]$，我们通过紧性延拓进行论证。定义 $k_0(x) := x-1$，其中 $x \geq 0$。那么对于 $t > 0$,

$$k_t(x) - k_0(x) = -t\log\Big(\frac{x+t}{1+t}\Big).$$

固定 $R > 0$。对于 $x \in [0,R]$ 和 $t \in (0,1]$，我们有

$$\Big|\log\Big(\frac{x+t}{1+t}\Big)\Big| \leq |\log(x+t)| + |\log(1+t)| \leq |\log t| + \log(R+1) + \log 2,$$

因此

$$\sup_{x\in[0,R]} |k_t(x) - k_0(x)| \leq t\big(|\log t| + \log(R+1) + \log 2\big) \xrightarrow[t\downarrow 0]{} 0.$$

因此，$(t,x) \mapsto k_t(x)$ 连续延拓到紧集 $[0,2M] \times [0,R]$ 上（令 $k_0(x) = x-1$），故在该紧集上有界。因此，存在常数 $C'_R > 0$，使得

$$|k_t(x)| \leq C'_R \qquad (x \in [0,R],\ 0 < t \leq 2M).$$

结合这些界可得一个可积控制函数：

$$\sup_{x\in[0,R]} |k_t(x)| \leq C'_R\ \mathbb{1}_{(0,2M]}(t) + \frac{C_R}{1+t}\ \mathbb{1}_{(2M,\infty)}(t),$$

并且右侧是 ν-可积的，因为 $\nu((0,\ 2M])\ <\infty$ 且 $\int_{(0,\ \infty)}\ \frac{1}{1+t}\,\mathrm{d}\nu(t)\ <\infty$。因此，$x\mapsto\int k_t(x)\,\mathrm{d}\nu(t)$ 在 $[0,R]$ 上绝对且一致收敛。因此，对于每个固定的 $R>0$，标量函数

$$g_R(x):=\int_{(0,\infty)}k_t(x)\ \mathrm{d}\nu(t),\qquad x\in[0,R],$$

i在 $[0,R]$ 上定义良好且连续，并且该收敛在 $[0,R$ 上一致].

算子值积分及与 τ 的交换。现在固定 $A,\ B\ \in\ \mathcal{M}_+$ 并选取 $R\ >\max\{\|A\|,\|B\|,\|\frac{A+B}{2}\|\}$。根据上述得到的控制，存在 $h_R\in L^1((0,\ \infty)\ \nu$，使得

$$\sup_{x\in[0,R]}|k_t(x)|\le h_R(t)\qquad(t>0).$$

因此，对每个 $X\in\{A,B,\frac{A+B}{2}\}$，映射 $t\mapsto k_t(X)$ 在算子范数下博赫纳可积，并且

$$g_R(X)=\int_{(0,\infty)}k_t(X)\ \mathrm{d}\nu(t)\in\mathcal{M},\qquad\text{with}\quad\tau(g_R(X))=\int_{(0,\infty)}\tau(k_t(X))\ \mathrm{d}\nu(t),$$

因为 $|\tau(k_t(X))|\le\|k_t(X)\|\le h_R(t)$，且 h_R 是 ν-可积的。

因此，我们可以通过交换 τ 与 t-积分来计算詹森间隙。仿射项在詹森间隙中相互抵消，由此得到

$$J_{\tau,f}(A,B)=\frac{b}{2}\,J_{\tau,x^2}(A,B)+\int_{(0,\infty)}J_{\tau,k_t}(A,B)\ \mathrm{d}\nu(t),$$

其中 $k_t(x):=(x-1)\ -t\log(\frac{x+t}{1+t})$。这里 $J_{\tau,x^2}(A,B)=\frac{1}{4}\ \|A-B\|_{2,\tau}^2$。此外，$k_t(x)$ 与 $-t\log(x+t)$ 相差一个关于 x 的仿射函数（取决于 t），因此

$$J_{\tau,k_t}(A,B)=t\,d_\tau(A+t\mathbf{1},B+t\mathbf{1})^2.$$

这就得到 (1.4)。

定义测度空间 $\Omega:=\{0\}\cup(0,\infty)$，其中 $\{0\}$ 携带计数测度，而 $(0,\infty)$ 携带 ν。对于 $X,Y\in\mathcal{M}_+$，定义

$$w_{X,Y}(0):=\sqrt{\frac{b}{8}}\ \|X-Y\|_{2,\tau}\,,\qquad w_{X,Y}(t):=\sqrt{t}\,d_\tau(X+t\mathbf{1},Y+t\mathbf{1})\quad(t>0).$$

于是 (1.4) 可写为

$$J_{\tau,f}(X,Y)=\|w_{X,Y}\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

对于每个 $t\in\Omega$，$w_{A,C}(t)\le w_{A,B}(t)+w_{B,C}(t)$，这是由 $\|\cdot\|_{2,\tau}$ 以及 $d_\tau(\cdot,\cdot)$ 的三角不等式得出的（当 $t>0$ 时，应用于平移后的数对）。在 $L^2(\Omega)$ 中应用闵可夫斯基不等式，可得 $\sqrt{J_{\tau,f}}$ 的三角不等式。由于 f 不是仿射函数，因此 $b>0$ 或 $\nu\neq0$，所以 $\sqrt{J_{\tau,f}}(A,B)=0$ 蕴含 $A=B$。

最后，按照第7节中的方法，通过 GNS von Neumann 包络将度量性从 $\mathcal{M}$ 转移回 $\mathcal{A}$。

□

推论10.3。设 $f:\ [0,\infty)\ \to\mathbb{R}$ 为算子凸且非仿射函数。那么 $\sqrt{J_f}$ 在密度矩阵 $\mathcal{D}_n$ 上定义一个度量，对每个 n均成立。

证明。将定理 1.9 应用于 $\mathcal{A}=M_n(\mathbb{C})$，其中 $\tau=\frac{1}{n}\mathrm{Tr}$，并限制到 $\mathcal{D}_n\subset\mathcal{A}_+$。 □

参考文献

[1] J. Antolín、J. C. Angulo 和 S. López-Rosa，Fisher 散度与詹森–香农散度：分布间的定量比较。其在位置和动量原子密度中的应用，J. Chem. Phys. 130 (2009)，074110。doi:10.1063/1.3078050。 [2] L. Bai、L. Rossi、A. Torsello 和 E. R. Hancock，用于无属性图的量子詹森–香农图核，Pattern Recognit. 48 (2015)，344–355。doi:10.1016/j.patcog.2014.03.028。 [3] C. Berg、J. P. R. Christensen 和 P. Ressel，《半群上的调和分析》，Graduate Texts in Mathematics，第 100 卷，Springer-Verlag，纽约，1984。doi:10.1007/978-1-4612-1128-0。 [4] R. Bhatia，《正定矩阵》，Princeton Series in Applied Mathematics，Princeton University Press，普林斯顿，新泽西州，2007。doi:10.1515/9781400827787。 [5] F. Bendat 和 S. Sherman，单调凸算子函数，Trans. Amer. Math. Soc. 79 (1955)，58–71。doi:10.2307/1992836。 [6] S. Boyd 和 L. Vandenberghe，《凸优化》，Cambridge University Press，剑桥，2004。 [7] M. R. Bridson 和 A. Haefliger，《非正曲率度量空间》，Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften，第 319 卷，Springer-Verlag，柏林，1999。 [8] P. Chen、Y. Chen 和 M. Rao，由布雷格曼散度定义的度量，Commun. Math. Sci. 6 (2008)，第 4 期，927–948。doi:10.4310/CMS.2008.v6.n4.a6。 [9] A. Cherian、S. Sra、A. Banerjee 和 N. Papanikolopoulos，通过 Jensen–Bregman LogDet 散度高效搜索协方差矩阵，载于 Proc. IEEE Int. Conf. Computer Vision (ICCV)，2011 年，第 2399–2406 页。 [10] Z. Chebbi 和 M. Moakher，基于对数行列式 α-散度函数的厄米正定矩阵均值，Linear Algebra Appl. 436 (2012)，第 7 期，1872–1889。doi:10.1016/j.laa.2011.12.003。 [11] J. Dajka、J. Łuczka 和 P. Hänggi，存在初始量子比特–环境关联时量子态之间的距离：比较研究，Phys. Rev. A 84 (2011)，032120。doi:10.1103/PhysRevA.84.032120。 [12] M. De Domenico、V. Nicosia、A. Arenas 和 V. Latora，多层网络的结构可约性，Nat. Commun. 6 (2015)，6864。doi:10.1038/ncomms7864。 [13] M. De Domenico、M. A. Porter 和 A. Arenas，MuxViz：用于多层网络分析与可视化的工具，J. Complex Netw. 3 (2015)，159–176。doi:10.1093/comnet/cnu038。 [14] J. Dixmier，《希尔伯特空间中的算子代数（冯·诺依曼代数）》，Gauthier-Villars，巴黎，1957。 [15] T. Fack 和 H. Kosaki，τ-可测算子的广义 s-数，Pacific J. Math. 123 (1986)，第 2 期，269–300。doi:10.2140/pjm.1986.123.269。 [16] B. Fuglede 和 R. V. Kadison，有限因子中的行列式理论，Ann. of Math. (2) 55 (1952)，520–530。doi:10.2307/1969645。 [17] M. Gaál、G. Nagy 和 P. Szokol，单位 Fuglede–Kadison 行列式的正定算子上的等距映射，Taiwanese J. Math. 23 (2019)，第 6 期，1423–1433。doi:10.11650/tjm/190205。 [18] F. Hansen，通往 Löwner 定理的捷径，Linear Algebra Appl. 438 (2013)，第 11 期，4557–4571。doi:10.1016/j.laa.2013.01.022。 [19] P. de la Harpe，Fuglede–Kadison 行列式：主题与变奏，Proc. Natl. Acad. Sci. USA 110 (2013)，第 52 期，20800–20806。doi:10.1073/pnas.1202059110。 [20] A. P. Majtey、P. W. Lamberti 和 D. P. Prato，詹森–香农散度作为混合量子态可区分性的度量，Phys. Rev. A 72 (2005)，052310。doi:10.1103/PhysRevA.72.052310。 [21] H. Q. Minh，正定迹类算子之间的无限维对数行列式散度，Linear Algebra Appl. 528 (2017)，331–383。doi:10.1016/j.laa.2016.09.018。 [22] H. Q. Minh，正定希尔伯特–施密特算子之间的无限维对数行列式散度，Positivity 24 (2020)，631–662。doi:10.1007/s11117-019-00701-4。 [23] C. Radhakrishnan、M. Parthasarathy、S. Jambulingam 和 T. Byrnes，多体系统中的量子相干性分布，Phys. Rev. Lett. 116 (2016)，150504。doi:10.1103/PhysRevLett.116.150504。 [24] W. Roga、M. Fannes 和 K. Życzkowski，Holevo 量、相干信息和詹森–香农散度的普适界，Phys. Rev. Lett. 105 (2010)，040505。doi:10.1103/PhysRevLett.105.040505。 [25] L. Rossi、A. Torsello、E. R. Hancock 和 R. C. Wilson，通过量子詹森–香农散度表征图对称性，Phys. Rev. E 88 (2013)，032806。doi:10.1103/PhysRevE.88.032806。 [26] I. J. Schoenberg，度量空间与完全单调函数，Ann. of Math. (2) 39 (1938)，811–841。doi:10.2307/1968466。

[27] S. Sra，正定矩阵与 S-散度，《美国数学会会刊》**144** (2016), 2787–2797. doi:10.1090/proc/12953. [28] D. Virosztek，量子詹森–香农散度的度量性质，《数学进展》**380** (2021), 107595. doi:10.1016/j.aim.2021.107595.

附录 A. 例 9.6 的经认证验证

本附录记录了一套具体的区间算术工作流程，用于严格界定例 9.6 中的量 S_2 和 S_3。关键在于，对于 2×2 实对称矩阵，特征值可用闭式表示，因此整个计算可归结为采用定向舍入的一维区间运算（加法、乘法、平方根、对数）。

A.1. 2×2 **块的闭式特征值**。对于 $X=\begin{pmatrix} a & b \\ b & d \end{pmatrix}\in M_2^{++}(\mathbb{C})$ (实对称)，令

$$\mathrm{Tr}(X)=a+d, \qquad \det(X)=ad-b^2, \qquad \Delta=(a-d)^2+4b^2.$$

则特征值为

$$\lambda_{\pm}(X)=\frac{\mathrm{Tr}(X)\pm\sqrt{\Delta}}{2}.$$

因此，对于 $\eta(x)=x\log x$,

$$\mathrm{Tr}(\eta(X))=\eta(\lambda_+(X))+\eta(\lambda_-(X)).$$

A.2. **区间算术伪代码**。 下面给出一种与语言无关风格的伪代码；任何标准的经认证区间计算软件包（例如 INTLAB、Arb 或 Julia IntervalArithmetic）都可以实现相同步骤。

输入：
矩阵 X_i（2x2），系数 c_i（总和 c_i = 0），熵 η 函数(x)=x*log(x)，归一化迹 τ_2 = (1/2)Tr，作用于 M_2

区间基本运算（定向舍入）：+、-、*、/、
sqrt(·)、log(·) 作用于区间

函数 eigvals_2x2_区间(a,b,d)：tr =a +d
disc = (a -d)^2 + 4*b^2s =sqrt(disc)
lam_plus = (tr +s)/2 lam_minus = (tr -
s)/2 返回 (lam_plus, lam_minus)

函数 Tr_η 函数_2x2_区间(X)：
(lam_plus, lam_minus) = eigvals_2x2_区间(X.a, X.b, X.d) 返回
η 函数(lam_plus) + η 函数(lam_minus)

函数 J_tau2_interval(X,Y): Z = (X + Y)/2 # J_{tau_2,η 函数}(X,Y) = (1/2)tau_2(η 函数(X)) + (1/2)tau_2(η 函数(Y)) - tau_2(η 函数(Z)) # 其中 τ_2=(1/2)Tr 时，结果为：return (1/4) * (Tr_η 函数_2x2_interval(X) + Tr_η 函数_2x2_interval(Y) - 2*Tr_η 函数_2x2_interval(Z))

计算 S_2: S2 = 0for i=1..m: for j=1..m: S2 += c_i * c_j * J_tau2_interval(X_i, X_j) 输出 严格包围区间 interval(S2)

对于 S_3 （块对角密度矩阵）：选取 T > 2*max_i Tr(X_i) rho_i = blockdiag(X_i/T, 1 - Tr(X_i)/T)，在 D_3 中使用 Tr(η 函数(rho_i)) = Tr(η 函数(X_i/T)) + η 函数(1 - Tr(X_i)/T)，并对 (rho_i +rho_j)/2 作类似处理。令 tau_3 = (1/3)Tr，以类似方式定义 J_tau3，并计算 S_3。

在本文中，我们将所有十进制输入视为区间端点处的精确有理数，因此认证不受二进制浮点解析的影响。

西安交通大学数学与统计学院，中国西安，中国 710049电子邮箱：teng.zhang@stu.xjtu.edu.cn