2020年7月1日

量子情報数理特論
（第8回）部分トレース，極分解，特異値分解

電気通信大学 大学院情報理工学研究科

小川朋宏

7　部分トレース，極分解，特異値分解

(課題)

(1) 部分トレースの定義を述べよ
(2) 部分トレースの操作的意味を述べよ
(3) 等距離作用素 (isometry) の定義と意味を述べよ
(4) ユニタリ作用素の定義と意味を述べよ
(5) 正規直交基底 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^n$, $\{|f_i\rangle\}_{i=1}^n$ を対応させるユニタリ作用素を示せ
(6) 極分解定理を述べよ
(7) 特異値分解定理を述べよ

7.1 部分トレース

同時確率分布 $P(x,y)$ から周辺分布 $P(x)=\sum_y P(x,y)$ を計算する操作に対応

Definition 1. 部分トレース (partial trace)

$$\mathrm{Tr}_B : X \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B) \longmapsto \mathrm{Tr}_B\, X \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A)$$

を以下で定義する．

(i) $X = X_A \otimes X_B$ のとき，$\mathrm{Tr}_B\, X := X_A \cdot (\mathrm{Tr}\, X_B)$
(ii) 一般の $X \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ については (i) を線形拡大して定義する．

一般の $X \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ は，$\mathcal{H}_A$ の基底 $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^m$ $(m = \dim \mathcal{H}_A)$，$\mathcal{H}_B$ の基底 $\{|f_k\rangle\}_{k=1}^n$ $(n = \dim \mathcal{H}_n)$ により，

$$X = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n x^{i,j,k,l}\, |e_i\rangle\langle e_j| \otimes |f_k\rangle\langle f_l| \tag{1}$$

と表される（前回の復習）．(ii) の線形拡大とは，

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_B\, X &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^n x^{i,j,k,l}\, |e_i\rangle\langle e_j| \cdot \mathrm{Tr}(|f_k\rangle\langle f_l|) \\ &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \left(\sum_{k=1}^n x^{i,j,k,k} \right) |e_i\rangle\langle e_j| \end{aligned} \tag{2}$$

Lemma 1. $X_{AB} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ に対して，部分トレースを $X_A := \operatorname{Tr}_B X_{AB}$ とおくと，

$$\forall Y_A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A), \quad \operatorname{Tr} X_{AB}(Y_A \otimes I_B) = \operatorname{Tr} X_A Y_A \tag{3}$$

（証明）両辺とも X_{AB} について線形であるから，$X_{AB} = M_A \otimes N_B$ のときに (3) を示せばよい．左辺は

$$\operatorname{Tr}(M_A \otimes N_B)(Y_A \otimes I_B) = \operatorname{Tr}(M_A Y_A \otimes N_B) = (\operatorname{Tr} N_B) \operatorname{Tr} M_A Y_A$$

である．$X_A = \operatorname{Tr}_B X_{AB} = (\operatorname{Tr} N_B) M_A$ であるから，右辺は

$$\operatorname{Tr} X_A Y_A = (\operatorname{Tr} N_B) \operatorname{Tr} M_A Y_A$$

となって両者が一致することが示された．

部分トレースはリースベクトル（の共役）である

（Hilbert-Schmidt 内積が入っている）Hilbert 空間 $\mathcal{L}(\mathcal{H}_A)$ 上の線形汎関数

$$f_{X_{AB}} : Y_A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A) \longmapsto f_{X_{AB}}(Y_A) := \operatorname{Tr} X_{AB}(Y_A \otimes I_B)$$

を考えると，リースの表現定理から，次式を満たす $Z_A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A)$ が一意に存在する．

$$\forall Y_A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A), \quad f_{X_{AB}}(Y_B) = \langle\!\langle Z_A, Y_A \rangle\!\rangle = \operatorname{Tr} Z_A^* Y_A$$

(3) より $Z_A = X_A^*$ であり，(3) を部分トレースの定義にしても良いことが分かる．

7.3 部分トレースの計算方法

Lemma 2. $X_{AB} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ に対して，$\mathcal{H}_B$ の基底を $\{|f_k\rangle\}_{k=1}^n$ $(n = \dim \mathcal{H}_n)$ とすると，

$$\mathrm{Tr}_B X_{AB} = \sum_{k=1}^n (I_A \otimes \langle f_k|) X_{AB} (I_A \otimes |f_k\rangle) \tag{4}$$

完全性条件 $\sum_{k=1}^n |f_k\rangle\langle f_k| = I_B$ を用いると，任意の $Y_A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A)$ に対して，

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\, X_{AB}(Y_A \otimes I_B) &= \sum_{k=1}^n \mathrm{Tr}\, X_{AB}(Y_A \otimes |f_k\rangle\langle f_k|) \\
&= \sum_{k=1}^n \mathrm{Tr}\, X_{AB}(I_A \otimes |f_k\rangle)(Y_A \otimes 1)(I_A \otimes \langle f_k|) \\
&= \sum_{k=1}^n \mathrm{Tr}\big[\{(I_A \otimes \langle f_k|) X_{AB} (I_A \otimes |f_k\rangle)\} Y_A\big] \quad (\because\ Y_A \otimes 1 = Y_A) \\
&= \mathrm{Tr}\left[\left\{\sum_{k=1}^n (I_A \otimes \langle f_k|) X_{AB} (I_A \otimes |f_k\rangle)\right\} Y_A\right]
\end{aligned}$$

リースベクトルの一意性（Lemma 1 と注意）より (4) が示された．
［(1)(2) 式を用いて直接計算しても示される］

Lemma 3. $X_{AB} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$について，

(i) $\operatorname{Tr}_{AB} X_{AB} = \operatorname{Tr}_A(\operatorname{Tr}_B X_{AB})$
(ii) $(\operatorname{Tr}_B X_{AB})^* = \operatorname{Tr}_B X_{AB}^*$
(iii) $X_{AB} \geq 0 \implies \operatorname{Tr}_B X_{AB} \geq 0$

（証明）(i) (3)において$Y_A = I_A$とおけばよい．(ii) $X_A = \operatorname{Tr}_B X_{AB}$とおく．(3)の両辺について複素共役をとると，任意の$Y_A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A)$について，

$$\operatorname{Tr} X_{AB}^*(Y_A^* \otimes I_B) = \operatorname{Tr}(Y_A \otimes I_B)^* X_{AB}^* = \overline{\operatorname{Tr} X_{AB}(Y_A \otimes I_B)} = \overline{\operatorname{Tr} X_A Y_A} = \operatorname{Tr} Y_A^* X_A^* = \operatorname{Tr} X_A^* Y_A^*$$

$Y_A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A)$は任意であるから，$Y_A^*$を$Y_A$に置き換えて，

$$\operatorname{Tr} X_{AB}^*(Y_A \otimes I_B) = \operatorname{Tr} X_A^* Y_A \quad (\forall Y_A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}))$$

これは，(3)とリースベクトルの一意性より，$X_A^* = \operatorname{Tr}_B X_{AB}^*$を意味する．
(iii) (4)を考える．$X_{AB} \geq 0$を仮定すると，以下の補題で$C = (I_A \otimes |f_k\rangle)$とおくことで，
$(I_A \otimes \langle f_k|)X_{AB}(I_A \otimes |f_k\rangle) \geq 0$ であるから

$$\operatorname{Tr}_B X_{AB} = \sum_{k=1}^{n} (I_A \otimes \langle f_k|)X_{AB}(I_A \otimes |f_k\rangle) \geq 0$$

Lemma 4. $A \geq 0 \implies C^*AC \geq 0$

（証明）$A \geq 0$と仮定すると，任意のベクトル$|x\rangle \in \mathcal{H}$について，$\langle x| C^*AC |x\rangle = \langle Cx| A |Cx\rangle \geq 0$

7.5　部分トレースの操作的な意味

合成系の密度作用素 $\rho_{AB} \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ について，部分トレース $\rho_A := \mathrm{Tr}_B\, \rho_{AB}$ は (3) より半正定値であり，(1) より $\mathrm{Tr}\, \rho_A = \mathrm{Tr}\, \rho_A I_A = \mathrm{Tr}_{AB}\{\rho_{AB}(I_A \otimes I_B)\} = 1$ であるから，$\mathcal{H}_A$ 上の密度作用素である．

部分トレースの操作的な意味

合成系の密度作用素 $\rho_{AB} \in \mathcal{S}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$ について，部分トレースを $\rho_A := \mathrm{Tr}_B\, \rho_{AB}$ とすると，$\mathcal{H}_A$ 上の任意の測定 (POVM) $M = \{M_x^A\}_{x\in\mathcal{X}}$ について

$$\mathrm{Tr}\, \rho_{AB}(M_x^A \otimes I_B) = \mathrm{Tr}\, \rho_A M_x^A \quad (x \in \mathcal{X})$$

（系 A のみに測定を行い，系 B に何もしなかった場合の，系 A での確率を記述）

7.6 等距離作用素とユニタリ作用素

Definition 2 (等距離作用素)**.**

$$V:\mathcal{H}\longrightarrow\mathcal{K}\text{が等距離作用素(isometry)}\overset{\text{def}}{\Longleftrightarrow}\forall\left|x\right\rangle,\left|y\right\rangle\in\mathcal{H},\ \langle Vx,Vy\rangle=\langle x,y\rangle$$
$$\Longleftrightarrow\forall\left|x\right\rangle,\left|y\right\rangle\in\mathcal{H},\ \langle x,V^*Vy\rangle=\langle x,y\rangle$$
$$\Longleftrightarrow V^*V=I$$

等距離作用素は内積（計量＝長さと角度）を保存する作用素である．

Definition 3 (ユニタリ作用素)**.**

$$U:\mathcal{H}\longrightarrow\mathcal{K}\text{がユニタリ作用素(unitary)}\Longleftrightarrow U\text{がisometry，かつ}U^*\text{がisometry}$$
$$\Longleftrightarrow U^*U=I\text{ かつ }UU^*=I$$

$U^*=U^{-1}$ となることに注意！ユニタリ作用素は，自身と逆作用素が共に内積を保存する作用素である．

Definition 4 (部分等距離作用素)**.**

$$V:\mathcal{H}\longrightarrow\mathcal{K}\text{が部分等距離作用素(partial isometry)}\Longleftrightarrow(\mathrm{Ker}\,V)^\perp\text{に制限したとき，}V\text{はisometry}$$

（注意）$\mathrm{Ker}\,V:=\{\left|x\right\rangle\in\mathcal{H}\mid V\left|x\right\rangle=0\}$

Lemma 5. V をpartial isometryとすると，V^*V は $(\mathrm{Ker}\,V)^\perp$ への射影子である．

（証明）$\left|x\right\rangle=\left|y\right\rangle+\left|z\right\rangle$ $(\left|y\right\rangle\in(\mathrm{Ker}\,V)^\perp,\ \left|z\right\rangle\in\mathrm{Ker}\,V)$ を直交直和分解とすると，
$V\left|x\right\rangle=V\left|y\right\rangle+V\left|z\right\rangle=V\left|y\right\rangle$ であり，$(\mathrm{Ker}\,V)^\perp$ 上で V はisometryであるから，
$V^*V\left|x\right\rangle=V^*V\left|y\right\rangle=\left|y\right\rangle$．これは V^*V が $(\mathrm{Ker}\,V)^\perp$ への射影子であることを意味する．

7.7 ユニタリ作用素は基底の対応である

Lemma 6. $U : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{K}$をユニタリ作用素とすると，$\mathcal{H}$の正規直交基底$\{|e_i\rangle\}_{i=1}^n$に対して，$\{U|e_i\rangle\}_{i=1}^n$は$\mathcal{K}$の正規直交基底である．

（証明）Uはisometryであるから，$\langle Ue_i, Ue_j\rangle = \langle e_i, e_j\rangle = \delta_{i,j}$ であり，特に$\dim\mathcal{H} \le \dim\mathcal{K}$．
U^*もisometryであるから，$\mathcal{K}$の正規直交基底$\{|f_i\rangle\}_{i=1}^m$に対して，$\{|U^* f_i\rangle\}_{i=1}^m$は$\mathcal{H}$の正規直交系となり，$\dim\mathcal{H} \ge \dim\mathcal{K}$．これらより，$\dim\mathcal{H} = \dim\mathcal{K}$であり，$\{U|e_i\rangle\}_{i=1}^n$は$\mathcal{K}$の正規直交基底である．

Lemma 7. $\dim\mathcal{H} = \dim\mathcal{K} =: n$とする．任意の$\mathcal{H}$の正規直交基底$\{|e_i\rangle\}_{i=1}^n$と$\mathcal{K}$の正規直交基底$\{|f_i\rangle\}_{i=1}^n$に対して，ユニタリ作用素$U : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{K}$が存在して，

$$|f_i\rangle = U|e_i\rangle \quad (i = 1, 2, \ldots, n)$$

（証明）

$$U = \sum_{k=1}^n |f_k\rangle\langle e_k|$$

とおくと，

$$UU^* = \left(\sum_{k=1}^n |f_k\rangle\langle e_k|\right)\left(\sum_{l=1}^n |e_l\rangle\langle f_l|\right) = \sum_{k=1}^n\sum_{l=1}^n |f_k\rangle\langle e_k \mid e_l\rangle\langle f_l| = \sum_{k=1}^n |f_k\rangle\langle f_k| = I$$

同様にして，$U^*U = I$が示され，Uがユニタリ作用素であることが分かる．さらに，

$$U|e_i\rangle = \left(\sum_{k=1}^n |f_k\rangle\langle e_k|\right)|e_i\rangle = \sum_{k=1}^n |f_k\rangle\langle e_k \mid e_i\rangle = |f_i\rangle$$

Lemma 8. 作用素 $A : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{K}$, $B : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{K}'$ について以下は同値

(i) $A^*A = B^*B$

(ii) $\exists V : \mathcal{K}' \longrightarrow \mathcal{K}$ (partial isometry), $A = VB$ かつ $(\ker V)^\perp \supseteq \mathrm{Im}\, B$

（証明）(ii) $\Rightarrow$ (i):

$$A^*A = (VB)^*VB = B^*V^*VB = B^*P_{(\mathrm{Ker}\, V)^\perp}B = B^*B$$

最後の等式では，任意の $|x\rangle \in \mathcal{H}$ について $P_{(\mathrm{Ker}\, V)^\perp}(Bx) = Bx$ であることから，$P_{(\mathrm{Ker}\, V)^\perp}B = B$ であることを用いた．

(i) $\Rightarrow$ (ii): 最初に以下が写像であることを示す．

$$V : Bx \in \mathrm{Im}\, B \subseteq \mathcal{K}' \longmapsto Ax \in \mathrm{Im}\, A \subseteq \mathcal{K} \tag{5}$$

任意の $|x\rangle, |y\rangle \in \mathcal{H}$ について，

$$\langle Bx, By\rangle = \langle B^*Bx, y\rangle = \langle A^*Ax, y\rangle = \langle Ax, Ay\rangle \tag{6}$$

$|x\rangle = |y\rangle = |z\rangle - |z'\rangle$ とすれば，

$$\|B(z-z')\| = \|A(z-z')\| \quad (\forall\, |z\rangle, |z'\rangle \in \mathcal{H})$$

であるから，$Bz = Bz'$ ならば $Az = Az'$ である．すなわち，(5) が $\mathrm{Im}\, B$ 上の写像であることが示された．これが線形であることは容易に確かめられる．さらに，$(\mathrm{Im}\, B)^\perp$ での V の行き先を 0 と定義すれば，(6) より V は partial isometry であり，$\ker V = (\mathrm{Im}\, B)^\perp$ から，$(\ker V)^\perp = (\mathrm{Im}\, B)^{\perp\perp} = \mathrm{Im}\, B$

（注意）先のLemma 8において，$(\ker V)^{\perp} = \mathrm{Im}\, B$となるpartial isometryは（作り方から）一意である．

Definition 5 (絶対値作用素)**.** 作用素$A : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{K}$について，$|A| := \sqrt{A^*A}$ $\ (|A| : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H})$

Theorem 1 (極分解定理)**.** 作用素$A : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{K}$について，
partial isometry $V : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{K}$が存在して，$A = V|A|$

（証明）$B = |A|$とおけば，$B^*B = B^2 = A^*A$が成り立つ．よって，先のLemma 8を適用すればよい．

（注意）

(i) 極分解定理において，$(\ker V)^{\perp} = \mathrm{Im}\,|A|$となるpartial isometryは一意である．
(ii) 有限次元Hilbert空間において，Aが$\mathcal{H}$上の作用素$A : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$である場合，
Vをユニタリ作用素に取ることが出来る．

7.9 特異値分解(SVD, Singular Value Decomposition)

Theorem 2 (特異値分解(1)). 任意の$m \times n$行列Aに対して次の分解が出来る.

$$A = U\Lambda V \quad (U\text{: } m \times m\text{ユニタリ行列, }\Lambda\text{: } m \times n\text{行列, }V\text{: } n \times n\text{ユニタリ行列}) \tag{7}$$

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & & & & \\ & \lambda_2 & & & \mathbf{0} & & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & \lambda_r & & & \\ & & & & 0 & & \\ & \mathbf{0} & & & & \ddots & \\ & & & & & & 0 \end{pmatrix} \quad (\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_r > 0,\ r = \mathrm{rank}\, A) \tag{8}$$

Theorem 3 (特異値分解(2)). 作用素$A : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{K}$について, $\mathcal{H}$の基底$\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{n}$, $\mathcal{K}$の基底$\{|f_j\rangle\}_{i=1}^{m}$を任意に固定するとき,

$$A = U\Lambda V \qquad (U : \mathcal{K} \longrightarrow \mathcal{K}\text{ユニタリ作用素, }V : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}\text{ユニタリ作用素}) \tag{9}$$

$$\Lambda = \sum_{k=1}^{r} \lambda_k \, |f_k\rangle\langle e_k| \tag{10}$$

と出来る.

Definition 6. $\lambda_1, \ldots, \lambda_r$を特異値 (singlar value)とよぶ.

7.10 特異値分解定理の証明

特異値分解(2)で，基底を標準基底に取ると，特異値分解(1)になる．→特異値分解(2)を証明する．

$m = \dim \mathcal{H}$とおき，$A = V'|A|$を極分解とする．$|A|$の固有値分解により，

$$|A| = \sum_{k=1}^{m} \lambda_k \, |a_k\rangle\langle a_k| = \sum_{k=1}^{r} \lambda_k \, |a_k\rangle\langle a_k| \quad (\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_r > 0)$$

ここで，rは$|A|$のゼロ以外の固有値の数であり，$r = \mathrm{rank}\,|A|\,(= \mathrm{rank}\,A)$である．
また，$\{|a_k\rangle\}_{k=1}^{m}$は固有ベクトルからなる$\mathcal{H}$の正規直交基底である．これより，

$$A = V'|A| = \sum_{k=1}^{r} \lambda_k V \, |a_k\rangle\langle a_k| = \sum_{k=1}^{r} \lambda_k \, |b_k\rangle\langle a_k| \quad (|b_k\rangle := V \, |a_k\rangle \neq 0)$$

V'がpartial isometryであることから$|b_1\rangle, \ldots, |b_r\rangle$は$\mathcal{K}$上の互いに直交するノルム1のベクトルであり，
基底の延長定理により，$\mathcal{K}$上の正規直交基底

$$|b_1\rangle, \ldots, |b_r\rangle, |b_{r+1}\rangle, \ldots, |b_n\rangle \quad (n = \dim \mathcal{K})$$

が作れる．よって，

$$|e_k\rangle = V \, |a_k\rangle \;\; (\langle e_k| \, V = \langle a_k|) \; (k = 1, \ldots, m), \quad U \, |f_k\rangle = |b_k\rangle \;\; (k = 1, \ldots, n)$$

となるユニタリ作用素U, Vが存在し，これを用いると，

$$\underbrace{U \left(\sum_{k=1}^{r} \lambda_k \, |f_k\rangle\langle e_k| \right)}_{=\Lambda} V = \sum_{k=1}^{r} \lambda_k \, |b_k\rangle\langle a_k| = A$$