

2021年6月2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 $\{|f_k\rangle\}_{k=1}^n$ ($n = \dim \mathcal{H}_B$) により,

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

と表される (前回の復習). (ii) の線形拡大とは,

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

7.2 部分トレースの性質（リースベクトル）

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 $X_A := \text{Tr}_B X_{AB}$ とおくと、

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

(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

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

である。 $X_A = \text{Tr}_B X_{AB} = (\text{Tr } N_B) M_A$ であるから、右辺は

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

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

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

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。

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

(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. $X_{AB} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$, $\mathcal{H}_B$ の正規直交基底を $\{|f_k\rangle\}_{k=1}^n$ ($n = \dim \mathcal{H}_B$) とすると,

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

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,

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

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]

7.4 部分トレースの性質

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

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

(証明) (i) (3)において $Y_A = I_A$ とおけばよい. (ii) $X_A = \text{Tr}_B X_{AB}$ 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,

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

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

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

これは, (3)とリースベクトルの一意性より, $X_A^* = \text{Tr}_B X_{AB}^*$ 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

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

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

(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, $\langle x| C^* A C |x\rangle = \langle Cx| A |Cx\rangle \geq 0$

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,

- Lemma 3 (iii) より, $\rho_A := \text{Tr}_B \rho_{AB} \geq 0$
- Lemma 3 (i) より, $\text{Tr} \rho_A = \text{Tr}_A(\text{Tr}_B \rho_{AB}) = \text{Tr}_{AB} \rho_{AB} = 1$

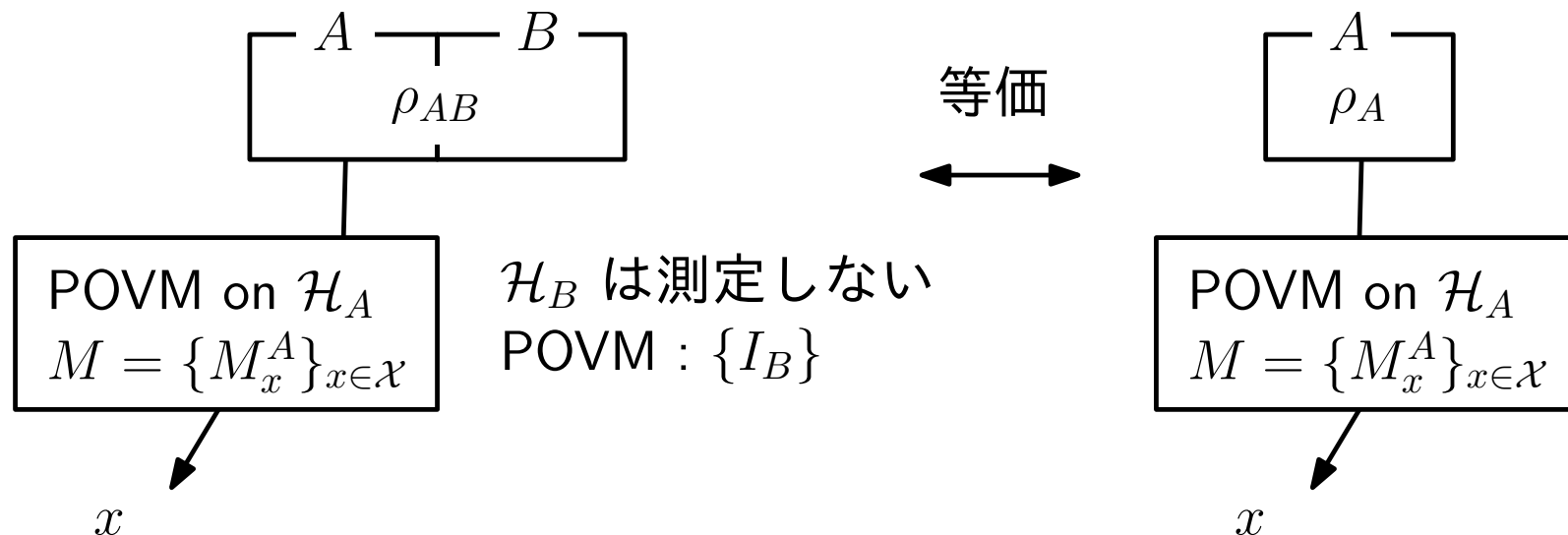
であるから, $\mathcal{H}_A$ 上の密度作用素である. Lemma 1 より,

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 $\rho_A := \text{Tr}_B \rho_{AB}$ 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

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

(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).

$$\begin{aligned} V : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{K} \text{ が等距離作用素 (isometry) } &\stackrel{\text{def}}{\iff} \forall |x\rangle, |y\rangle \in \mathcal{H}, \langle Vx, Vy \rangle = \langle x, y \rangle \\ &\iff \forall |x\rangle, |y\rangle \in \mathcal{H}, \langle x, V^*Vy \rangle = \langle x, y \rangle \\ &\iff V^*V = I \end{aligned}$$

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).

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

$U^* = U^{-1}$ 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).

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

$$(\text{注意}) \text{ Ker } V := \{|x\rangle \in \mathcal{H} \mid V|x\rangle = 0\}$$

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

(証明) $|x\rangle = |y\rangle + |z\rangle$ ($|y\rangle \in (\text{Ker } V)^\perp, |z\rangle \in \text{Ker } V$) を直交直和分解とすると,
 $V|x\rangle = V|y\rangle + V|z\rangle = V|y\rangle$ であり, $(\text{Ker } V)^\perp$ 上で V は isometry であるから,
 $V^*V|x\rangle = V^*V|y\rangle = |y\rangle$. これは V^*V が $(\text{Ker } V)^\perp$ 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 $\dim \mathcal{H} \leq \dim \mathcal{K}$. 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, $\dim \mathcal{H} \geq \dim \mathcal{K}$. 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,

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

(証明)

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

とおくと,

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

同様にして, $UU^* = I$ 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,

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

7.8 極分解 (Polar Decomposition)

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

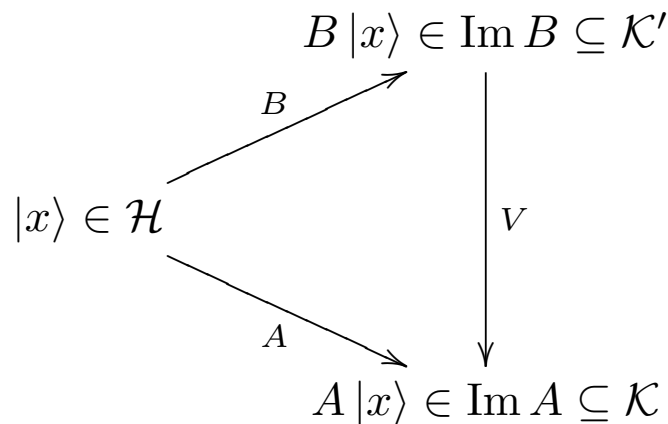
- (i) $A^*A = B^*B$
- (ii) $\exists V : \mathcal{K}' \rightarrow \mathcal{K}$ (partial isometry), $A = VB$ かつ $(\ker V)^\perp \supseteq \text{Im } B$

証明. (ii) $\Rightarrow$ (i): Lemma 5 より, $V^*V = P_{(\text{Ker } V)^\perp}$ である. また, 任意の $|x\rangle \in \mathcal{H}$ について $P_{(\text{Ker } V)^\perp}(B|x\rangle) = B|x\rangle$ であることから, $P_{(\text{Ker } V)^\perp}B = B$ が成り立つ. よって,

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

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

$$V : B|x\rangle \in \text{Im } B \mapsto A|x\rangle \in \text{Im } A \quad (5)$$



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

$$\langle Bx, By \rangle = \langle B^*Bx, y \rangle = \langle A^*Ax, y \rangle = \langle Ax, Ay \rangle \quad (6)$$

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

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

であるから, $B|z\rangle = B|z'\rangle$ ならば $A|z\rangle = A|z'\rangle$ である. すなわち, (5) が $\text{Im } B$ 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, (6) より $V : \text{Im } B \rightarrow \text{Im } A$ は isometry である.

さらに, $(\text{Im } B)^\perp \subseteq \mathcal{K}'$ での V の行き先を 0 として定義すれば, partial isometry $V : \mathcal{K}' \rightarrow \mathcal{K}$ が定まる.
 $\ker V = (\text{Im } B)^\perp$ より,

$$(\ker V)^\perp = (\text{Im } B)^{\perp\perp} = \text{Im } B$$

□

Remark 1. Lemma 8 の状況で,

- (i) $(\ker V)^\perp = \text{Im } B$ となる partial isometry は一意である (上の作り方から).
- (ii) $V : \text{Im } B \rightarrow \text{Im } A$ は isometry であるから, $\dim \text{Im } B = \dim \text{Im } A$
- (iii) $\dim \mathcal{K} = \dim \mathcal{K}' < \infty$ である場合, V をユニタリ作用素に取れる.
 $\because$ (ii) より $\dim(\text{Im } B)^\perp = \dim(\text{Im } A)^\perp$ なので, $(\text{Im } B)^\perp$ と $(\text{Im } A)^\perp$ の基底を対応させればよい.

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

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

(証明) $B = |A| : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ とおくと, $B^*B = B^2 = A^*A$. 先の Lemma 8 を適用すればよい.

Remark 2.

- (i) 極分解定理において, $(\ker V)^\perp = \text{Im } |A|$ となる partial isometry は一意である.
- (ii) $\dim \mathcal{H} = \dim \mathcal{K} < \infty$ である場合, V をユニタリ作用素に取れる.

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.

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

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

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

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

$$\Lambda = \sum_{k=1}^r \lambda_k |f_k\rangle\langle e_k| \quad (10)$$

と出来る.

Definition 6. $\lambda_1, \dots, \lambda_r$ を **特異値 (singular value)** とよぶ.

7.10 特異値分解定理の証明

特異値分解(2)で、基底を標準基底にとると、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、 $A = W|A|$ 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、 $r = \text{rank } |A| (= \text{rank } A)$ 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、

$$A = W|A| = \sum_{k=1}^r \lambda_k W |a_k\rangle\langle a_k| = \sum_{k=1}^r \lambda_k |b_k\rangle\langle a_k| \quad (|b_k\rangle := W |a_k\rangle \neq 0) \quad (11)$$

W がpartial isometryであることから $|b_1\rangle, \dots, |b_r\rangle$ 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

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

が作れる．7.7より、基底 $\{|a_k\rangle\}_{k=1}^m, \{|b_k\rangle\}_{k=1}^n$ を、与えられた基底 $\{|e_k\rangle\}_{k=1}^m, \{|f_k\rangle\}_{k=1}^n$ に対応させるユニタリ作用素 V と U が存在する^{*1}．よって(11)より、

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

^{*1} $V^* |e_k\rangle = |a_k\rangle, U |f_k\rangle = |b_k\rangle$