数理解析研究所講究録
第 1893 巻 2014 年 84-88

Separability cone and its dual cone

北海道大学（名誉教授）　安藤　毅 (Tsuyoshi Ando)
Hokkaido University (Emeritus)
Email: ando@es.hokudai.ac.jp

1. Introduction. この講演は解説的な性質のものである. $\mathbb{M}_k$ は $k\times k$ 複素行列の空間とする. これは自然な内積 $\langle\cdot|\cdot\rangle$ で Hilbert 空間になる. その norm を $\|\cdot\|_2$ で表す. $\mathbb{M}_k$ の positive semi-definite matrix の なす cone を $\mathbb{M}_k^+$ で表す.

この講演の主題は tensor 積 $\mathbb{M}_m\otimes\mathbb{M}_n$ であるが, 簡単のため $m=n$ の場合のみを考察することとする.

$\mathbb{M}_n\otimes\mathbb{M}_n$ には幾つかの自然な同一視がある: $A=[\alpha_{j,k}]$, $B=[\beta_{j,k}]\in\mathbb{M}_n$ に対して

$$\begin{array}{ccccc}\mathbb{M}_n\otimes\mathbb{M}_n & \sim & \mathbb{M}_n(\mathbb{M}_n) & \sim & \mathbb{M}_{n^2}\\ A\otimes B & \sim & [\alpha_{j,k}B]_{j,k} & \sim & [\alpha_{j,k}\beta_{p,q}]_{j,p;k,q}.\end{array}$$

ここで $\mathbb{M}_n(\mathbb{M}_n)$ は $n\times n$ matrix を entry にもつ $n\times n$ block-matrix の空間である.

重要なのは, この同一視の下で $A,B\in\mathbb{M}_n^+\Longrightarrow A\otimes B\in\mathbb{M}_{n^2}^+$ なる事実である. この事実の下に 3 つの cone を $\mathbb{M}_n\otimes\mathbb{M}_n$ に導入しよう.

$$\mathfrak{P}_0:=\mathbb{M}_{n^2}^+,\qquad \mathfrak{P}_+:=\mathrm{Conv}(\mathbb{M}_n^+\otimes\mathbb{M}_n^+),\qquad \mathfrak{P}_-:=\text{dual cone of }\mathfrak{P}_+.$$

すなわち $\mathbf{T}\in\mathfrak{P}_- \overset{def}{\Longleftrightarrow} \mathbf{T}=\mathbf{T}^*,\ \langle\mathbf{T}|\mathbf{S}\rangle\geq 0\quad\forall\,\mathbf{S}\in\mathfrak{P}_+$.

明らかに

$$\mathfrak{P}_+\ \subset\ \mathfrak{P}_0\ \subset\ \mathfrak{P}_-$$

であり, $\mathfrak{P}_+$ は $\mathfrak{P}_-$ の dual cone になり, $\mathfrak{P}_0$ は selfdual である.

Matrix $\mathbf{T}\in\mathfrak{P}_0$ が $\mathfrak{P}_+$ に属するとき $\mathbf{T}$ は *separable* であると言い, そうでないときは entangled と言われる. すなわち $\mathbf{T}$ が separable とは

$$\mathbf{T}=\sum_p A_p\otimes B_p\quad\exists\,A_p,B_p\in\mathbb{M}_n^+$$

のことである. $\mathfrak{P}_+$ を *separability cone* と呼ぼう.

$\mathbb{M}_n$ の linear map の空間 $\mathfrak{L}(\mathbb{M}_n)$ も以下の対応で $\mathbb{M}_n(\mathbb{M}_n)$ と同一視される:

$$\mathfrak{L}(\mathbb{M}_n)\ni\Phi\ \sim\ \mathbf{C}_\Phi:=[\Phi(E_{j,k})]_{j,k}\in\mathbb{M}_n(\mathbb{M}_n).$$

ここで $E_{j,k}$ $(j,k=1,2,\ldots,n)$ は $\mathbb{M}_n$ の *matrix unit* である. すなわち $\mathbb{C}^n$ の canonical O.N. 系 e_j $(j=1,2,\ldots,n)$ を使って $E_{j,k}=e_je_k^*$ と書かれる. ここで注意するのは, vector $x,y\in\mathbb{C}^n$ は column vector として取り扱う. したがって $\langle y|x\rangle=y^*x$ であるが, xy^* は

$\mathbb{M}_n$ の元である．この同一視の下での $\mathfrak{L}(\mathbb{M}_n)$ の norm は Hilbert-Schmidt norm になる．この block-matrix $\mathbf{C}_\Phi$ を linear map Φ の *Choi matrix* と呼ぶ．

Linear map Φ の *positivity* は $\Phi(\mathbb{M}_n^+) \subset \mathbb{M}_n^+$ で定義される最も familiar なものである．Φ の *completely positivity* はよく知られた概念である．更に Φ が *super-positive* とは

$$\Phi(X) = \sum_p \langle A_p | X \rangle \cdot B_p \quad \exists\, A_p, B_p \in \mathbb{M}_n^+$$

の事とする．これら３つの positivity と上に導入した３つの cone の間には, Choi matrix を介して，以下のような対応がある：

$$\begin{aligned} \Phi \ \text{super-positive} \quad &\Longleftrightarrow \quad \mathbf{C}_\Phi \in \mathfrak{P}_+, \\ \Phi \ \text{completely positive} \quad &\Longleftrightarrow \quad \mathbf{C}_\Phi \in \mathfrak{P}_0, \\ \Phi \ \text{positive} \quad &\Longleftrightarrow \quad \mathbf{C}_\Phi \in \mathfrak{P}_-. \end{aligned}$$

ここで completely positive と cone $\mathfrak{P}_0$ の対応は本当は深い結果で Choi [1] による．

$\mathbf{E} := [E_{j,k}]_{j,k}$ および $\mathbf{I} := I_n \otimes I_n$ (identity matrix) と書くと，$\mathbf{E}$ は identity map $X \longmapsto X$ の Choi matrix であり，$\mathbf{I}$ は linear map $X \longmapsto \mathrm{Tr}(X) \cdot I_n$ の Choi matrix となっている．明らかに $\mathbf{E} \in \mathfrak{P}_0$ で $\mathbf{I} \in \mathfrak{P}_+$ である．

Linear map Φ の positivity は明快な概念なのに，cone $\mathfrak{P}_-$ は漠然とした印象しか与えない．以下では $\mathfrak{P}_-$ に注視して行く．２つの linear map の composition に関する次ぎの Lemma は trivial なものであるが，使い方によっては役に立つ．

Lemma 1.
(i) Φ, Ψ positive $\Longrightarrow$ $\Psi \circ \Phi$ positive.
(ii) Φ super-positive, Ψ positive $\Longrightarrow$ $\Psi \circ \Phi$, $\Phi \circ \Psi$ super-positive.

Linear map の super-positivity の判定は一般に困難であるが，次が有用である．

Lemma 2. (Horodecki's [3]) Φ が positive のとき

$$\Phi \ \text{super-positive} \quad \Longleftrightarrow \quad \Psi \circ \Phi \ \text{completely positive} \quad \forall \ \text{positive} \ \Psi$$

これを使うと $\mathbf{I}$ の $\|\cdot\|_2 \leq 1$ の近傍にあるものがすべて separable であることが判る：

Theorem 3. (L. Gurvits and H. Harnum [2]) $\mathbf{T} = \mathbf{T}^*$, $\|\mathbf{T}\|_2 \leq 1 \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{I} + \mathbf{T} \in \mathfrak{P}_+$.

§2. **Properties of the cone $\mathfrak{P}_-$.** $\mathbf{T} = \mathbf{T}^*$ なものが $\mathfrak{P}_0$ に属するかどうかは eigenvalue だけで決まったしまうが，$\mathfrak{P}_-$ に属するものの特性は余り明らかでない．次ぎは Theorem 3 の dual form である．

Theorem 4. $\mathbf{T} \in \mathfrak{P}_- \quad \Longrightarrow \quad \mathrm{Tr}(\mathbf{T}) \geq \|\mathbf{T}\|_2$.

Ortho-projection $\mathbf{P}$ に対して $\mathbf{P} \in \mathfrak{P}_+$ であることと $\mathbf{P}^\perp := \mathbf{I} - \mathbf{P} \in \mathfrak{P}_+$ であることとは同値ではない．しかし Theorem 3 から次ぎ出る．

Theorem 5. Ortho-projection $\mathbf{P}$, $\mathrm{rank}(\mathbf{P}) = 1 \implies \mathbf{P}^{\perp} \in \mathfrak{P}_+$.

$\mathbb{M}_n$ での transposition map $X \longmapsto X^T$ は明らかに positive である．Linear map $\Phi \in \mathfrak{L}(\mathbb{M}_n)$ の Choi matrix が $\mathbf{T} = [T_{j,k}]_{j,k}$ であるとき，linear map $X \longmapsto \Phi(X^T)$ の Choi matrix は $[T_{k,j}]_{j,k}$ すなわち (j,k)-block-entry を (k,j)-block-entry に入れ替えたものになる．$\mathbb{M}_n(\mathbb{M}_n)$ でのこの対応を $\mathbf{T}^\tau$ と書き *partial trnaspose* と呼ぼう．$(A \otimes B)^\tau = A^T \otimes B$ であるから，$\mathfrak{P}_+^\tau \subset \mathfrak{P}_+$ およびその dual として $\mathfrak{P}_- \subset \mathfrak{P}_-$ となるが，$\mathfrak{P}_0^\tau \not\subset \mathfrak{P}_0$. である．たとえば $\mathbf{E} \in \mathfrak{P}_0$ であるが，$\mathbf{E}^\tau \notin \mathfrak{P}_0$ である．

$\mathbf{I}$ と $\mathbf{E}$ に関連する matrix の eigenvalue を調べてみよう：

$$
\begin{array}{ll}
\mathbf{E} \in \mathfrak{P}_0 & \sigma(\mathbf{E}) \ = \ \{n, \overbrace{0, \ldots, 0}^{n^2-1}\}, \\
\mathbf{E}^\tau \in \mathfrak{P}_- & \sigma(\mathbf{E}^\tau) \ = \ \{\overbrace{1, \ldots, 1}^{\frac{n(n+1)}{2}}, \overbrace{-1, \ldots, -1}^{\frac{n(n-1)}{2}}\}, \\
\mathbf{I} - \mathbf{E} \in \mathfrak{P}_- & \sigma(\mathbf{I} - \mathbf{E}) = \{\overbrace{1, \ldots, 1}^{n^2-1}, -(n-1)\}, \\
\mathbf{I} - \mathbf{E}^\tau \in \mathfrak{P}_0 & \sigma(\mathbf{I} - \mathbf{E}^\tau) = \{\overbrace{2, \ldots, 2}^{\frac{n(n-1)}{2}}, \overbrace{0, \ldots, 0}^{\frac{n(n+1)}{2}}\}.
\end{array}
$$

具体的な matrix の separability に関しては Lemma 2 を利用することが出来ず，より深い考察が必要になる．

Theorem 6. (A.O. Pittinger and M.H. Rubin [4]) $\mathbf{I} + \mathbf{E} \in \mathfrak{P}_+$ で $\mathbf{I} - \mathbf{E} \in \mathfrak{P}_-$.

これを応用するために *partial trace map* $\varphi_i(\cdot)$ $i = 1, 2$ を考えよう．$\mathbb{M}_n \ni X \longmapsto X \otimes I_n \in \mathbb{M}_n \otimes \mathbb{M}_n$ は positive linear map であるので，その adjoint map を $\varphi_1(\cdot)$ と書くと，これは $\mathbb{M}_n \otimes \mathbb{M}_n$ から $\mathbb{M}_n$ への positive linear map になり

$$\langle X \otimes I_n | \mathbf{T} \rangle = \langle X | \varphi_1(\mathbf{T}) \rangle \qquad \forall\, X \in \mathbb{M}_n,\ \mathbf{T} \in \mathbb{M}_n \otimes \mathbb{M}_n$$

で特徴付けられる．同様に partial trace map $\varphi_2(\cdot)$ は

$$\langle I_n \otimes Y | \mathbf{T} \rangle = \langle Y | \varphi_2(\mathbf{T}) \rangle \qquad \forall\, Y \in \mathbb{M}_n,\ \mathbf{T} \in \mathbb{M}_n \otimes \mathbb{M}_n$$

で特徴付けられる $\mathbb{M}_n \otimes \mathbb{M}_n$ から $\mathbb{M}_n$ への positive linear map である．

$\mathbf{I} + \mathbf{E}$ は linear map $\Phi(X) := \mathrm{Tr}(X) \cdot I_n + X$ の Choi matrix である．Theorem 6 によりこれは super-positive である．この Φ に Choi matrix が $\mathbf{T}$ である positive map $\Psi(\cdot)$ を左から compose すると，その Choi matrix は $\varphi_1(\mathbf{T}) \otimes I_n + \mathbf{T}$, また右から compose するとその Choi matrix は $\varphi_2(\mathbf{T}) \otimes I_n + \mathbf{T}$ となる．しがって Lemma 1 を使うと Theorem 6 から次ぎがでる．

Theorem 7.

$$
\mathbf{T} \in \mathfrak{P}_- \quad \Longrightarrow \quad
\begin{cases}
\varphi_1(\mathbf{T}) \otimes I_n + \mathbf{T} \in \mathfrak{P}_+ \quad \text{and} \quad I_n \otimes \varphi_2(\mathbf{T}) \otimes I_n + \mathbf{T} \in \mathfrak{P}_+, \\
\varphi_1(\mathbf{T}) \otimes I_n - \mathbf{T} \in \mathfrak{P}_- \quad \text{and} \quad I_n \otimes \varphi_2(\mathbf{T}) \otimes I_n - \mathbf{T} \in \mathfrak{P}_-.
\end{cases}
$$

Separability の定義から

$$\mathbf{T} \in \mathfrak{P}_+ \quad \Longrightarrow \quad \begin{cases} \varphi_1(\mathbf{T}) \otimes I_n - \mathbf{T} \in \mathfrak{P}_+, \\ I_n \otimes \varphi_2(\mathbf{T}) - \mathbf{T} \in \mathfrak{P}_+ \end{cases}$$

は明らかであるが，一般には

$$\mathbf{T} \in \mathfrak{P}_0 \quad \not\Leftarrow\!\!\!\Rightarrow \quad \begin{cases} \varphi_1(\mathbf{T}) \otimes I_n - \mathbf{T} \in \mathfrak{P}_0, \\ I_n \otimes \varphi_2(\mathbf{T}) - \mathbf{T} \in \mathfrak{P}_0 \end{cases}$$

である．しかし

$$\mathbf{T} \in \mathfrak{P}_0,\ \mathbf{T}^\tau \in \mathfrak{P}_0 \quad \Longrightarrow \quad \begin{cases} \varphi_1(\mathbf{T}) \otimes I_n - \mathbf{T} \in \mathfrak{P}_0, \\ I_n \otimes \varphi_2(\mathbf{T}) - \mathbf{T} \in \mathfrak{P}_0 \end{cases}$$

が判る．

§3. **$\mathfrak{P}_+$-best approximant.** $\mathbf{T} = \mathbf{T}^* \in \mathbb{M}_n \otimes \mathbb{M}_n$ にたいして

$$\|\mathbf{S}_0 - \mathbf{T}\|_2 = \inf_{\mathbf{S} \in \mathfrak{P}_0} \|\mathbf{S} - \mathbf{T}\|_2$$

となる $\mathbf{S}_0 \in \mathfrak{P}_0$ は unique に定まる．実際 $\mathbf{S}_0 = \mathbf{T}^+$ (positive part) であり

$$\mathbf{T} = \mathbf{S}_0 - (\mathbf{T} - \mathbf{S}_0)$$

は $\mathbf{T}$ の Jordan 分解となる．このとき $\mathbf{S}_0$ は $\mathbf{T}$ の spectre 分解から直接得られる．

ここで cone $\mathfrak{P}_0$ を separability cone $\mathfrak{P}_+$ に変えたときも

$$\|\mathbf{S}_0 - \mathbf{T}\|_2 = \inf_{\mathbf{S} \in \mathfrak{P}_+} \|\mathbf{S} - \mathbf{T}\|_2$$

となる $\mathbf{S}_0 \in \mathfrak{P}_+$ が unique に定まる．これを $\mathbf{T}$ の $\mathfrak{P}_+$-*best approximant* と呼ぶこととする．$\mathbf{S}_0$ が $\mathbf{T}$ の $\mathfrak{P}_+$-best approximant のときは $\mathbf{T}^\tau$ の $\mathfrak{P}_+$-best approximant は $\mathbf{S}_0^\tau$ となることは明らかである．

Best approximation の一般論から次ぎが知られる．

Lemma 8. $\mathbf{S}_0$ が $\mathbf{T}$ の $\mathfrak{P}_+$-best approximant となる必要充分条件は

$$\mathbf{S}_0 - \mathbf{T} \in \mathfrak{P}_- \quad \text{and} \quad \langle \mathbf{S}_0 - \mathbf{T} | \mathbf{S}_0 \rangle = 0.$$

$\mathbf{T}$ の $\mathfrak{P}_+$-best approximant を実際に決定することは困難であるが，Theorem 6 と Lemma 8 を使うと次ぎが知られる．

Theorem 9.

(i) $\mathbf{E}$ の $\mathfrak{P}_+$-best approximant は $\frac{1}{2}(\mathbf{I} + \mathbf{E})$ である．

(ii) $\mathbf{I} - \mathbf{E}$ の $\mathfrak{P}_+$-best approximant は $\mathbf{I} - \frac{1}{n}\mathbf{E}$ である．

参考文献

[1] M.D. Choi, *Completely positive linear maps on complex matrices,* Linear Alg. Appl., 10(1975), 285–290.

[2] L. Gurvits and H. Barnum, *Largest separable ball around the maximally mixed bipartite quantum system,* arXiv:quant-ph/021159v2, 10 Dec. 2002.

[3] M. Horodecki, P. Horodecki and R. Horodecki, *Separability of mixed states; necessary and sufficient conditions,* Phys. Letter A223 (1996), no. 1-2, 1–8.

[4] A.O. Pittinger and M.H. Rubin, *Note on separability of the Werner states in arbitrary dimensions,* Optics Comm., 179(200), 447–449.