学部生のための「ミクロ・マクロ双対性」とその周辺の物理学講義 : 補講B1 : Schmidt分解

成清, 修
九州大学理学部物理学科

学部生のための
「ミクロ・マクロ双対性」
とその周辺の物理学講義

九州大学理学部物理学科　成清 修

補講 B1：Schmidt 分解

エンタングルメント

[C-T,D,L] の Chapter XXI に従って、複合系のエンタングルメント[1]の観点から話を始める。

複合系のベクトル $|\Psi^0\rangle$ が

$$|\Psi^0\rangle = |\psi_\mathrm{A}\rangle \otimes |\psi_\mathrm{B}\rangle$$

のように、部分系 A の規格化されたベクトル $|\psi_\mathrm{A}\rangle$ と部分系 B の規格化されたベクトル $|\psi_\mathrm{B}\rangle$ の積になっている（エンタングルしていない）場合を考える。複合系の密度行列を $\rho^0 = |\Psi^0\rangle\langle\Psi^0|$、部分系の密度行列を $\rho^0_\mathrm{A} = |\psi_\mathrm{A}\rangle\langle\psi_\mathrm{A}|$ および $\rho^0_\mathrm{B} = |\psi_\mathrm{B}\rangle\langle\psi_\mathrm{B}|$ とすると

$$\rho^0 = \rho^0_\mathrm{A} \otimes \rho^0_\mathrm{B}$$

である[2]。

部分系 A の完全正規直交基底 $\{|i\rangle\}_{i=1}^m$ を用いて $|\psi_\mathrm{A}\rangle$ を展開して $|\psi_\mathrm{A}\rangle = \sum_{i=1}^m a_i|i\rangle$、部分系 B の完全正規直交基底 $\{|j\rangle\}_{j=1}^n$ を用いて $|\psi_\mathrm{B}\rangle$ を展開して $|\psi_\mathrm{B}\rangle = \sum_{j=1}^n b_j|j\rangle$ とすると

$$|\Psi^0\rangle = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_i b_j |i\rangle \otimes |j\rangle$$

[1]エンタングルメントの詳しい話は別の機会に行う。

[2]このとき、$\mathrm{Tr}_\mathrm{A}\{\rho^0_\mathrm{A}\} = \langle\psi_\mathrm{A}|\psi_\mathrm{A}\rangle = 1$ および $\mathrm{Tr}_\mathrm{B}\{\rho^0_\mathrm{B}\} = \langle\psi_\mathrm{B}|\psi_\mathrm{B}\rangle = 1$ より、$\mathrm{Tr}_\mathrm{A}\{\rho^0\} = \rho^0_\mathrm{B}$ および $\mathrm{Tr}_\mathrm{B}\{\rho^0\} = \rho^0_\mathrm{A}$ である。（**問題**　[Nielsen-Chuang] の §2.4.3 の文中にある式 $\mathrm{Tr}_\mathrm{A}\{|\psi_\mathrm{A}\rangle\langle\psi'_\mathrm{A}|\} = \langle\psi'_\mathrm{A}|\psi_\mathrm{A}\rangle$ を示せ。）

である。

複合系の一般のベクトル $|\Psi\rangle$ を基底 $|i\rangle \otimes |j\rangle$ で展開すると

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} c_{ij}|i\rangle \otimes |j\rangle$$

となり、一般には、$|\Psi^0\rangle$ のような積には分解できない。

規格化されたベクトル $|\Psi\rangle$ を Schmidt 分解した結果[3]

$$|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^{r} \lambda_k |\xi_k\rangle \otimes |\eta_k\rangle$$

であったとする。r の値（Schmidt ランク）は、エンタングルメントの程度に応じて、$|\Psi\rangle$ ごとに決まる。$r \geq 2$ のとき、$|\Psi\rangle$ をエンタングルした[4]ベクトルと呼ぶ。

問題 Schmidt 分解の展開基底は、λ_k が縮退する部分空間においては、ユニタリ変換で移り変われる任意性[5]をもつことを確認せよ。

問題 Schmidt 分解の展開係数が一意であることを確認せよ。

$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ から縮約密度行列 $\rho_\mathrm{A} = \mathrm{Tr}_\mathrm{B}\{\rho\}$ を作る[6]と $p_k \equiv \lambda_k^2$ として

$$\rho_\mathrm{A} = \sum_{k=1}^{r} p_k |\xi_k\rangle\langle\xi_k|$$

である。$\rho_\mathrm{B} = \mathrm{Tr}_\mathrm{A}\{\rho\}$ については

$$\rho_\mathrm{B} = \sum_{k=1}^{r} p_k |\eta_k\rangle\langle\eta_k|$$

である。ρ_A^0 と ρ_B^0 は純粋状態であったが、この ρ_A と ρ_B は混合状態である。何個の状態の混合になるかという r の値はエンタングルメントの程度[7]による。

[3]次節以降で Schmidt 分解を実行する。

[4]$r = 1$ のときは、$|\Psi^0\rangle$ のように、積に分解でき、エンタングルしていない。

[5][C-T,D,L] の p.2196 の Comment の議論。本補講の末尾の補足も参照。

[6]縮約密度行列については、補講 Q3 で議論した。

[7]エンタングルメントの程度は r の大きさに反映されるが、定量化するには、例えば、エンタングルメントのエントロピー S を用いる。S は ρ_A から求めても ρ_B から求めても $S = -\sum_{k=1}^{r} p_k \log p_k$ となり、部分系どうしが共有する相互情報量のように見える。このあたりの議論は補講 Q4 において行う。

$|\Psi\rangle$ を基底 $|i\rangle \otimes |j\rangle$ で展開した上記の式において、$|i\rangle$ を縮約密度行列 ρ_{A} の固有ベクトルにとる。ρ_{A} の固有値を $\{p_i\}_{i=1}^m$ とすると

$$\rho_{\mathrm{A}} = \sum_{i=1}^{m} p_i |i\rangle\langle i|$$

である。このとき、

$$|\tilde{\eta}_i\rangle \equiv \sum_{j=1}^{n} c_{ij} |j\rangle$$

とおけば

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{m} |i\rangle \otimes |\tilde{\eta}_i\rangle$$

と書ける。$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ から縮約密度行列 $\rho_{\mathrm{A}} = \mathrm{Tr}_{\mathrm{B}}\{\rho\}$ を作ると

$$\rho_{\mathrm{A}} = \sum_{j'=1}^{n} \langle j'|\Psi\rangle\langle\Psi|j'\rangle$$

である。$|\Psi\rangle$ は規格化されているものとする。ρ_{A} の行列要素を見ると

$$\langle i|\rho_{\mathrm{A}}|i'\rangle = \sum_{j'=1}^{n} \langle j'|\tilde{\eta}_i\rangle\langle\tilde{\eta}_{i'}|j'\rangle = \sum_{j'=1}^{n} \langle\tilde{\eta}_{i'}|j'\rangle\langle j'|\tilde{\eta}_i\rangle = \langle\tilde{\eta}_{i'}|\tilde{\eta}_i\rangle$$

である。この段落の話を首尾一貫させるためには、$\langle\tilde{\eta}_{i'}|\tilde{\eta}_i\rangle = p_i \delta_{i'i}$ でなければならない。この関係式をもとに、部分系 B の正規直交系 $\{|\eta_i\rangle\}$ が定義される。$p_i = 0$ ならば、$|\tilde{\eta}_i\rangle = \mathbf{0}$ となり、正規直交系には入らない。$p_i > 0$ ならば、$|\eta_i\rangle = (1/\sqrt{p_i})|\tilde{\eta}_i\rangle$ として正規直交系に入れる。

$|\xi_i\rangle \equiv |i\rangle$ として、$|\Psi\rangle$ は基底 $|\xi_i\rangle \otimes |\eta_i\rangle$ で展開できて

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{r} \sqrt{p_i} |\xi_i\rangle \otimes |\eta_i\rangle$$

となる。ここに、r は固有値 $\{p_i\}_{i=1}^m$ のうち $p_i > 0$ であるものの個数である。

特異値分解

[北野] の 13.5 節に従って、以下に導入する W の特異値分解を考える。

部分系 A と B のベクトル空間をそれぞれ $\mathcal{H}_\mathrm{A}$ と $\mathcal{H}_\mathrm{B}$ とする。$\mathcal{H}_\mathrm{A}$ のベクトルを $\mathcal{H}_\mathrm{B}$ に移す写像を W、$\mathcal{H}_\mathrm{B}$ のベクトルを $\mathcal{H}_\mathrm{A}$ に移し

$$\langle y|W|x\rangle^* = \langle x|W^\dagger|y\rangle$$

の関係を満たす写像を $W^\dagger$ とする。ここに、$|x\rangle$ と $|y\rangle$ は、$|x\rangle \in \mathcal{H}_\mathrm{A}$ および $|y\rangle \in \mathcal{H}_\mathrm{B}$ の任意のベクトルである。

$W^\dagger W$ は $\mathcal{H}_\mathrm{A}$ のベクトルを $\mathcal{H}_\mathrm{A}$ のベクトルに移す正写像[8]なので、正の固有値[9]によって

$$W^\dagger W = \sum_{i=1}^{m} w_i |u_i\rangle\langle u_i|$$

のように固有値分解できる。ここに、$\{|u_i\rangle\}_{i=1}^m$ は完全な正規直交基底[10]である。

$\mathcal{H}_\mathrm{B}$ のベクトル $|v_i\rangle$ を

$$W|u_i\rangle = \lambda_i|v_i\rangle$$

によって導入する[11]。ここに、$\lambda_i \equiv \sqrt{w_i}$ である。$i \le r$ のとき、$|v_i\rangle$ は正規直交[12]である。$i > r$ に対して、適当な $|v_i\rangle$ を付け加えれば、完全な正規直交基底 $\{|v_i\rangle\}_{i=1}^n$ を得る。ただし、$i > r$ の $|u_i\rangle$ と $|v_i\rangle$ は、特異値分解には寄与しない。

完全な正規直交基底 $\{|u_i\rangle\}_{i=1}^m$ と $\{|v_i\rangle\}_{i=1}^n$ は

$$W|u_i\rangle = \lambda_i|v_i\rangle, \qquad W^\dagger|v_i\rangle = \lambda_i|u_i\rangle$$

の関係[13]を満たす。ここに、$i > r$ ならば $W|u_i\rangle = \mathbf{0}$ および $W^\dagger|v_i\rangle = \mathbf{0}$ で

---

[8] 補講 Q1 を参照。

[9] 固有値を大きい順に並べて、r 番目までは正（$w_1 \ge w_2 \ge \cdots \ge w_r > 0$ および $w_{r+1} = w_{r+2} = \cdots = w_m = 0$）とする。固有値が 0 ならば分解への寄与はないので、実際は $W^\dagger W = \sum_{i=1}^r w_i|u_i\rangle\langle u_i|$ である。

[10] 補講 B の脚注 4 のようにして、完全な正規直交基底をつくることができる。本補講の末尾の補足も参照。

[11] $i > r$ に対しては、$W|u_i\rangle = \mathbf{0}$ となり、この関係式からは $|v_i\rangle$ は決められない。

[12]
$$\langle v_{i'}|v_i\rangle = \frac{1}{\lambda_{i'}\lambda_i}\langle u_{i'}|W^\dagger W|u_i\rangle = \delta_{i'i}$$

[13] $W|u_i\rangle = \lambda_i|v_i\rangle$ に $W^\dagger$ を作用させて、$W^\dagger W|u_i\rangle = \lambda_i W^\dagger|v_i\rangle$ を得る。これは、$\lambda_i|u_i\rangle = W^\dagger|v_i\rangle$ と等価である。

ある。この関係を、固有値分解を一般化した特異値分解として書くと

$$W=\sum_{i=1}^{r}\lambda_i|v_i\rangle\langle u_i|, \qquad W^{\dagger}=\sum_{i=1}^{r}\lambda_i|u_i\rangle\langle v_i|$$

となる。

Schmidt 分解

[北野] の 13.6 節に従って、$|\Psi\rangle$ の Schmidt 分解を考える。

複合系の任意のベクトル $|\Psi\rangle$ を部分系 A と B の完全正規直交基底 $\{|i\rangle\}_{i=1}^{m}$ と $\{|j\rangle\}_{j=1}^{n}$ を用いて展開して

$$|\Psi\rangle=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}w_{ij}|i\rangle\otimes|j\rangle$$

と書く。

$\mathcal{H}_{\mathrm{A}}$ のベクトルを $\mathcal{H}_{\mathrm{B}}$ に移す写像 W を

$$W|i\rangle=\sum_{j=1}^{n}w_{ij}|j\rangle$$

とする。このとき

$$|\Psi\rangle=\sum_{i=1}^{m}|i\rangle\otimes W|i\rangle$$

と書ける。

W を特異値分解[14]して

$$W=\sum_{k=1}^{r}\lambda_k|v_k\rangle\langle u_k|$$

とすると

$$|\Psi\rangle=\sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{r}\lambda_k|i\rangle\otimes|v_k\rangle\langle u_k|i\rangle$$

と書ける。ここで

$$|w_k\rangle\equiv\sum_{i=1}^{m}|i\rangle\langle u_k|i\rangle$$

[14] $\{|u_k\rangle\}_{k=1}^{r}$ と $\{|v_k\rangle\}_{k=1}^{r}$ は、いずれも正規直交である。

を導入すると、Schmidt 分解

$$|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^{r} \lambda_k |w_k\rangle \otimes |v_k\rangle$$

を得る。

前述のように、$\{|w_k\rangle\}_{k=1}^{r}$ と $\{|v_k\rangle\}_{k=1}^{r}$ は部分系の密度行列を対角化する。

問題 $\{|w_k\rangle\}_{k=1}^{r}$ が正規直交であることを確かめよ。

補足

補講 B の脚注 4 で、「縮退した固有値に属する固有空間の中では、シュミットの直交化法により、正規直交基底を用意する」と述べた。以下に、簡単な具体例（[内田] の例題 9.1.1）を示す。

行列 $\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$ の固有空間を考える。

縮退のない固有値 -1 に属する固有空間は 1 次元（直線）である。

2 重縮退した固有値 1 に属する固有空間は 2 次元（平面）である。平面内の任意の線形独立な 2 つのベクトルを基底とすることができるが、正規直交基底にしたければ、シュミットの直交化法を用いればよい。具体的な手続きは、[内田] の例題 9.1.1 で示されている。

2 次元の固有空間の正規直交基底を $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle\}$ とすると、固有空間への射影演算子 P_2 は、この基底を用いれば、$P_2 = |e_1\rangle\langle e_1| + |e_2\rangle\langle e_2|$ と書ける。別の正規直交基底 $\{|e_1'\rangle, |e_2'\rangle\}$ を用いれば、$P_2 = |e_1'\rangle\langle e_1'| + |e_2'\rangle\langle e_2'|$ とも書ける。これらの基底はユニタリ変換で移り変わる。どちらの基底を用いても、P_2 の演算の結果は同じである。

参考文献

[C-T,D,L]

Cohen-Tannoudji, Diu, Laloë「Quantum Mechanics -2nd-」(Wiley, 2020).

[Nielsen-Chuang]

Nielsen, Chuang「Quantum Computation and Quantum Information」(Cambridge, 2000).

[北野]

北野「量子力学の基礎」(共立出版, 2010).

[内田]

内田, 高木, 剱持, 浦川「線形代数入門」(裳華房, 1988).

(2026-06-29)