

Conditions for separability of matrices
 in $M_2 \otimes M_n$

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. M_k は $k \times k$ 複素行列の空間とする. ($M_{n,m}$ は $n \times m$ 行列の全体である.) これは Trace を使った自然な内積 $\langle S|T \rangle := \text{Tr}(S^*T)$ で Hilbert 空間になる. 対応する (Hilbert-Schmit) norm を $\|\cdot\|_2$ で表す. (普通の operator norm は $\|\cdot\|$ で表わそう.)

M_k の positive semi-definite matrix のなす cone を M_k^+ で表すが, A が positive semi-definite なることを, 通例により, $A \geq 0$ で表す. また A, C が selfadjoint で $A - C \geq 0$ のとき $A \geq C$ と書く.

テンソル積 $M_m \otimes M_n$ は, 幾つかの自然な方法で, 他の行列の空間と同一視される. $A = [\alpha_{j,k}] \in M_m, B = [\beta_{p,q}] \in M_n$ に対して

$$\begin{aligned} M_m \otimes M_n &\sim M_m(M_n) \sim M_{mn} \\ A \otimes B &\sim [\alpha_{j,k} B]_{j,k} \sim [\alpha_{j,k} \beta_{p,q}]_{j,p;k,q}. \end{aligned}$$

ここで $M_m(M_n)$ は $n \times n$ 行列を entry にもつ $m \times m$ block-matrix の空間である. 重要なのは, この同一視の下で

$$A \in M_m^+, B \in M_n^+ \implies A \otimes B \in M_m(M_n)^+ \sim M_{mn}^+$$

なる事実である. この事実の下に, $M_m \otimes M_n \sim M_m(M_n)$ に 3 つの cone を導入しよう.

$$\mathfrak{P}_0 := M_{mn}^+, \quad \mathfrak{P}_+ := \text{Conv}(M_m^+ \otimes M_n^+), \quad \mathfrak{P}_- := \text{dual cone of } \mathfrak{P}_+.$$

すなわち

$$S \in \mathfrak{P}_+ \iff S = \sum_p A_p \otimes C_p \quad \exists A_p \in M_m^+, C_p \in M_n^+ \quad (1)$$

であり

$$S \in \mathfrak{P}_- \stackrel{\text{def}}{\iff} S = S^*, \langle T|S \rangle \geq 0 \quad \forall T \in \mathfrak{P}_+. \quad (2)$$

明らかに

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

である. $M_m(M_n)$ が有限次元であることから \mathfrak{P}_+ は closed になり, その結果 \mathfrak{P}_- の dual cone になっている. \mathfrak{P}_0 は selfdual である.

$S \in M_m(M_n)$ が \mathfrak{P}_+ に属するとき S は **separable** であると言う. ([2] 参照)

この講演は, もっとも簡単な $m = 2$ の場合に限定して,

$$0 \leq S = \begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \in M_2(M_n)$$

が separable になるための, A, B, C の間の幾つかの条件を求めることを目標としており, 解説的な性格で, 知られている事も多い.

2. Cones \mathfrak{P}_0 と \mathfrak{P}_- . 以下では \mathbb{C}^n の元 x は **column n -vector** で表す. したがって x^* は **row n -vector** であり, product xy^* や y^*x は **matrix product** と考えて

$$xy^* \in M_n \quad \text{で} \quad y^*x = \langle y|x \rangle$$

と理解する. $\|x\|$ は vector x の通常の norm である.

$\mathbb{C}^2(\mathbb{C}^n) \sim \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^n$ の vector が **product vector** であるとは

$$\xi \otimes x := \begin{bmatrix} \xi_1 x \\ \xi_2 x \end{bmatrix} \quad \exists \xi = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix} \quad \exists x \in \mathbb{C}^n \quad (3)$$

の形のときのことである.

M_2^+ の元は $\sum_j \xi_j \xi_j^* \quad \exists \xi_j \in \mathbb{C}^2$ の形であり, また M_n^+ の元は $\sum_k x_k x_k^* \quad \exists x_k \in \mathbb{C}^n$ の形であるから

$$\begin{aligned} S \text{ separable} &\iff S = \sum_k (\xi_k \xi_k^*) \otimes (x_k x_k^*) \\ &= \sum_k (\xi_k \otimes x_k)(\xi_k \otimes x_k)^* \quad \exists \xi_k \in \mathbb{C}^2, \exists x_k \in \mathbb{C}^n \end{aligned} \quad (4)$$

が判る.

Cone \mathfrak{P}_- の dual の形の定義 (2) と (4) から

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \in \mathfrak{P}_- &\iff \left\langle \begin{bmatrix} \alpha x \\ \beta x \end{bmatrix} \middle| S \begin{bmatrix} \alpha x \\ \beta x \end{bmatrix} \right\rangle \geq 0 \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}, \forall x, y \in \mathbb{C}^n \\ &\iff A, C \geq 0, \langle x|Ax \rangle \cdot \langle x|Cx \rangle \geq |\langle x|Bx \rangle|^2 \quad \forall x \in \mathbb{C}^n, \end{aligned} \quad (5)$$

となっている.

また Cone \mathfrak{P}_0 の元は $\sum_k x_k x_k^* \quad \exists x_k \in \mathbb{C}^n$ の形であるから, \mathfrak{P}_0 の self-duality より

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \in \mathfrak{P}_0 &\iff \left\langle \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \middle| S \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \right\rangle \geq 0 \quad \forall x, y \in \mathbb{C}^n \\ &\iff A, C \geq 0, \langle x|Ax \rangle \cdot \langle y|Cy \rangle \geq |\langle x|By \rangle|^2 \quad \forall x, y \in \mathbb{C}^n \end{aligned} \quad (6)$$

が判る。しかし \mathfrak{P}_- の一般元の表示が知られていないので、 $\begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \in \mathfrak{P}_+$ を (5) や (6) に対応した形で求めることは出来ない。これが separability の判定が困難な原因のひとつである。

3. 幾つかの operations. $\mathbb{M}_2 \ni X \mapsto X^T$ (transpose) なる linear map を考えよう。この linear map は

$$X \otimes Y \mapsto X^T \otimes Y \quad \forall X \in \mathbb{M}_2, Y \in \mathbb{M}_n$$

を通じて $\mathbb{M}_2 \otimes \mathbb{M}_n$ の linear map に一意的に拡張されるが、それは $\mathbb{M}_2(\mathbb{M}_n)$ での表示を使えば

$$\begin{bmatrix} X_{11} & X_{12} \\ X_{21} & X_{22} \end{bmatrix} \mapsto \begin{bmatrix} X_{11} & X_{21} \\ X_{12} & X_{22} \end{bmatrix}$$

すなわち (1,2)-entry と (2,1)-entry を交換したものになっている。この linear map を partial transpose map といい $(\cdot)^T$ で書くと、 S が selfadjoint のとき

$$S = \begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \implies S^T = \begin{bmatrix} A & B^* \\ B & C \end{bmatrix}$$

となっている。 $X \geq 0 \implies X^T \geq 0$ なので、この linear map は cone \mathfrak{P}_+ を invariant にするので、separability のための一つの重要な必要条件を与える：

$$S = \begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \geq 0 \text{ separable} \implies S^T = \begin{bmatrix} A & B^* \\ B & C \end{bmatrix} \geq 0. \quad (7)$$

このことを S は (PPT) (positive partial transpose) を持つという。([2], [3], [4] 参照)

$[0, \infty)$ 上の実関数 $f(t) \geq 0$ から、 $S \geq 0$ に対して $f(S)$ が functional calculus を通じて定義されるが、cone \mathcal{P}_0 が non-linear map $S \mapsto f(S)$ に関して invariant なことは明らかである。しかし separability cone \mathfrak{P}_+ はこの functional calculus に適合しない。

$[0, \infty)$ 上の身近な関数

$$f(t) = t^\lambda \ (\lambda > 0), \quad = \frac{t}{t+\lambda} \ (\lambda > 0), \quad = \log(\lambda t + 1)$$

の中では、 $f(t) = t$ の場合を除いて、cone \mathfrak{P}_+ を invariant にしないと思われる。

完全な証明ではないが、次ぎのような方針で行けばよいと思われる。 $\mathbb{M}_4 \equiv \mathbb{M}_2 \otimes \mathbb{M}_2$ で考えよう。

$$S := 3 \cdot \begin{bmatrix} 1/\sqrt{12} \\ 1/\sqrt{12} \\ 1/\sqrt{12} \\ 3/\sqrt{12} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1/\sqrt{12} \\ 1/\sqrt{12} \\ 1/\sqrt{12} \\ 3/\sqrt{12} \end{bmatrix}^* + \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \end{bmatrix}^*$$

とすると、これは S のスペクトル表示になっている。すなわち S の positive eigenvalue は 3 と 1 で、対応する unit eigenvector は

$$\begin{bmatrix} 1/\sqrt{12} \\ 1/\sqrt{12} \\ 1/\sqrt{12} \\ 3/\sqrt{12} \end{bmatrix} \quad \text{と} \quad \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \end{bmatrix}$$

である。次ぎはすぐ検証できる

$$S = 2P + 2Q$$

ここで

$$P := \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} = \left(\begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix}^* \right) \otimes \left(\begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix}^* \right)$$

および

$$Q := \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \left(\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}^* \right) \otimes \left(\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}^* \right)$$

であるから、 P, Q は separable であり、したがって S は separable である。

関数 $f(t)$ が与えられて、 $\alpha := f(3)$ および $\beta := f(1)$ とすると、functional calculus の性質から

$$f(S) = \frac{\alpha}{12} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 3 \\ 1 & 1 & 1 & 3 \\ 1 & 1 & 1 & 3 \\ 3 & 3 & 3 & 9 \end{bmatrix} + \frac{\beta}{4} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

となるので

$$\gamma := \frac{3\alpha - 3\beta}{\alpha + 3\beta} \quad \text{および} \quad \delta := \frac{9\alpha + 3\beta}{\alpha + 3\beta}$$

として

$$f(S) = \frac{\alpha + 3\beta}{12} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \gamma \\ 1 & 1 & 1 & \gamma \\ 1 & 1 & 1 & \gamma \\ \gamma & \gamma & \gamma & \delta \end{bmatrix}$$

となる。もし $f(S)$ が separable であれば partial transpose も ≥ 0 になる。すなわち

$$\frac{12}{\alpha + 3\beta} f(S)^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & \gamma & \gamma \\ 1 & \gamma & 1 & \gamma \\ 1 & \gamma & \gamma & \delta \end{bmatrix} \geq 0$$

でなければならない。したがって、その左上部の 3×3 の principal submatrix の determinant ≥ 0 でなければならない。すなわち

$$\det \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & \gamma \\ 1 & \gamma & 1 \end{pmatrix} = -(\gamma - 1)^2 \geq 0$$

となるが、これは $\gamma = 1$ のときのみ可能である。すなわち $f(3) = \alpha = 3\beta = 3f(1)$ のときのみとなる。□

S が separable のとき、(4) の表示

$$S = \sum_k (\xi_k \xi_k^*) \otimes (x_k x_k^*) = \sum_k (\xi_k \otimes x_k)(\xi_k \otimes x_k)^* \quad \exists \xi_k \in \mathbb{C}^2, x_k \in \mathbb{C}^n.$$

で特に

$$\langle \xi_j \otimes x_j | \xi_k \otimes x_k \rangle = 0 \quad \forall j \neq k \quad (8)$$

のように選ぶことができるとき、 S は totally separable であると言おう。

S が totally separable なことは、 $S \geq 0$ で、そのどの positive eigenvalue に対する eigenspace にも product vectors からなる (CONS) (= complete orthonormal system) が存在することである。

ここで 0 が S の eigenvalue のとき、すなわち $\ker(S) \neq \{0\}$ のとき、 $\ker(S)$ にも product vectors からなる (CONS) がある事は後で示す。

4. Separability. 先ず明らかなのは

$$0 \leq X, Y \in M_n \implies \begin{bmatrix} X & 0 \\ 0 & Y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \otimes X + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \otimes Y \quad \text{separable.} \quad (9)$$

次に (4) の表示を考えれば

$$\begin{aligned} T \in M_2 \otimes M_m \text{ separable} &\implies \\ (X \otimes Z) \cdot T \cdot (X \otimes Z)^* &\in M_2 \otimes M_n \text{ separable} \quad \forall X \in M_2, Z \in M_{n,m} \end{aligned} \quad (10)$$

な事が判る。特に

$$\begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \text{ separable} \implies \begin{bmatrix} XAX^* & XBX^* \\ XB^*X^* & XCX^* \end{bmatrix} \text{ separable} \quad \forall X \in M_n. \quad (11)$$

Theorem 4.1.

$$S = \begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \in \mathfrak{B}_- \text{ で } A, B, B^*, C \text{ が commuting} \implies S \text{ totally separable.}$$

(Proof.) 可換な normal matrices に対する同時 spectral 表示より orthonormal vector $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{C}^n$ があり

$$A = \sum_{j=1}^n \alpha_j x_j x_j^*, \quad B = \sum_{j=1}^n \lambda_j x_j x_j^*, \quad B^* = \sum_{j=1}^n \bar{\lambda}_j x_j x_j^*, \quad C = \sum_{j=1}^n \beta_j x_j x_j^*$$

となる。したがって

$$S = \sum_{j=1}^n \begin{bmatrix} \alpha_j & \lambda_j \\ \lambda_j & \beta_j \end{bmatrix} \otimes x_j x_j^*$$

となる。ここで $S \in \mathfrak{P}_-$ より $\begin{bmatrix} \alpha_j & \lambda_j \\ \lambda_j & \beta_j \end{bmatrix} \geq 0$ となる事が判る。この 2×2 行列に対する spectral 表示より

$$\begin{bmatrix} \alpha_j & \lambda_j \\ \lambda_j & \beta_j \end{bmatrix} = \xi_j \xi_j^* + \zeta_j \zeta_j^*, \quad \langle \xi_j | \zeta_j \rangle = 0 \quad \exists \xi_j, \eta_j \in \mathbb{C}^2$$

と書かれ。したがって

$$S = \sum_{j=1}^n (\xi_j \xi_j^*) \otimes x_j x_j^* + \sum_{j=1}^n (\zeta_j \zeta_j^*) \otimes x_j x_j^*$$

となり, orthogonality condition (8) も満たされる。□

Theorem 4.2. S separable \implies

$$S = (I_2 \otimes Z) \cdot \begin{bmatrix} I & N^* \\ N & NN^* \end{bmatrix} \cdot (I_2 \otimes Z)^* + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & Y \end{bmatrix}$$

$$\exists \text{ normal } N \in M_m, Z \in M_{n,m}, 0 \leq Y \in M_n.$$

(Proof.) S にたいする (4) の表示の $\xi_j = \begin{bmatrix} \xi_{j,1} \\ \xi_{j,2} \end{bmatrix}$ で, $\xi_{j,1} \neq 0$ と $\xi_{j,1} = 0$ のものに別け, 前者に対しては x_j の代わりに $\xi_{j,1} x_j$ を考えることにより

$$S = \sum_{j=1}^m \begin{bmatrix} x_j \\ \xi_j x_j \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_j \\ \xi_j x_j \end{bmatrix}^* + \sum_k \begin{bmatrix} 0 \\ y_k \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ y_k \end{bmatrix}^*$$

の形になる。まず $0 \leq Y := \sum_k y_k y_k^* \in M_n$ とする。つぎに

$$Z := [x_1, \dots, x_m] \in M_{n,m}$$

そして M_m の normal matrix N を

$$N := \text{diag}(\xi_1, \dots, \xi_m)$$

で定義すると

$$S = \begin{bmatrix} Z \\ ZN \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} Z \\ ZN \end{bmatrix}^* + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & Y \end{bmatrix}$$

となるが, これは

$$S = (I_2 \otimes Z) \cdot \begin{bmatrix} I & N^* \\ N & NN^* \end{bmatrix} \cdot (I_2 \otimes Z)^* + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & Y \end{bmatrix}$$

となる. \square

$S \geq 0$ および $S^r \geq 0$ の条件を使い易い形に書いておこう. その前に $A \geq 0$ の generalized inverse A^{-1} について述べておこう. $C^n = \text{ran}(A) \oplus \text{ker}(A)$ と書かれるから, A^{-1} は $\text{ran}(A)$ では A の inverse で, $\text{ker}(A)$ では 0 として定義される. 明らかに $(A^{1/2})^{-1} = (A^{-1/2})^{-1}$ となる.

次ぎの事実は, linear algebra の演習問題である.

Lemma 4.1. $0 \leq A, C \in M_n$ とする.

$$(i) \quad \begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \geq 0 \iff B = A^{1/2}WC^{1/2} \quad \exists \|W\| \leq 1$$

$$\iff \text{ran}(B) \subset \text{ran}(A), \text{ker}(B) \supset \text{ker}(C) \text{ and } B^*A^{-1}B \leq C.$$

(ii)

$$\begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \geq 0 \text{ かつ } \begin{bmatrix} A & B^* \\ B & C \end{bmatrix} \geq 0 \iff B = A^{1/2}NA^{1/2} \quad \exists N \text{ such that}$$

$$\text{ran}(N) \subset \text{ran}(A), \text{ker}(N) \supset \text{ker}(A) \text{ かつ } A^{1/2}N^*NA^{1/2} \leq C, A^{1/2}NN^*A^{1/2} \leq C.$$

次ぎの結果は non-trivial である.

Theorem 4.3. (Woronowicz [6]) $1 \leq n \leq 3$ のときは,

$$0 \leq S \in M_2 \otimes M_n, \quad (\text{PPT}) \implies \text{separable}.$$

Theorem 4.4. $S = \begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \geq 0$ かつ $S^r = \begin{bmatrix} A & B^* \\ B & C \end{bmatrix} \geq 0$ とする.

(i) $\text{rank}(S) = \text{rank}(A) \implies S$ separable.

(ii) $\text{rank}(S) \leq 4$ または $\text{rank}(A) \leq 3 \implies S$ separable.

(Proof) (i): Lemma 4.1 (i) を使うと

$$S = \begin{bmatrix} I & 0 \\ B^*A^{-1} & I \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & C - B^*A^{-1}B \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} I & A^{-1}B \\ 0 & I \end{bmatrix}$$

と書くことができる. $\begin{bmatrix} I & 0 \\ B^*A^{-1} & I \end{bmatrix}$ と $\begin{bmatrix} I & A^{-1}B \\ 0 & I \end{bmatrix}$ はともに invertible であるから,

$$\text{rank}(S) = \text{rank}(A) + \text{rank}(C - B^*A^{-1}B)$$

となり, 仮定 $\text{rank}(S) = \text{rank}(A)$ より,

$$\text{rank}(C - B^*A^{-1}B) = 0, \quad \text{すなわち } C - B^*A^{-1}B = 0$$

となる。これは Lemma 4.1(ii) の表示を使うと

$$A^{1/2}N^*NA^{1/2} = B^*A^{-1}B = C \geq A^{1/2}NN^*A^{1/2}$$

となる。\$N\$ の range と kernel を考えると、これは \$N^*N \geq NN^*\$ となるが、trace を考えて \$N^*N = NN^*\$ すなわち \$N\$ は normal となり

$$S = (I_2 \otimes A^{1/2}) \cdot \begin{bmatrix} I & N \\ N^* & N^*N \end{bmatrix} \cdot (I_2 \otimes A^{1/2})^*$$

と書くことができ、Theorem 4.1 により separable になる。□

(Proof) (ii): \$\text{rank}(S) = 4\$ のとき。もし \$\text{rank}(A) = 4\$ なら上の (i) により \$S\$ は separable になる。

次ぎに \$\text{rank}(A) \leq 3\$ としよう。

$$\text{ran}(A^{1/2}NA^{1/2}), \text{ran}(A^{1/2}N^*A^{1/2}) \subset \text{ran}(A)$$

で

$$\begin{bmatrix} A & A^{1/2}NA^{1/2} \\ A^{1/2}N^*A^{1/2} & A^{1/2}N^*NA^{1/2} \end{bmatrix} \geq 0 \quad \text{そして} \quad C \geq A^{1/2}N^*NA^{1/2}, \quad (12)$$

および

$$\begin{bmatrix} A & A^{1/2}N^*A^{1/2} \\ A^{1/2}NA^{1/2} & A^{1/2}NN^*A^{1/2} \end{bmatrix} \geq 0 \quad \text{そして} \quad C \geq A^{1/2}NN^*A^{1/2} \quad (13)$$

となっている。

以下の Lemma 4.2 を使うと、Theorem 4.3 (Woronowicz) により \$S\$ は separable になる。

Lemma 4.2. \$0 \leq C \in \mathbb{M}_n\$ と subspace \$\mathcal{M} \subset \mathbb{C}^n\$ が与えられたとしよう。このとき

$$\max\{X; C \geq X \geq 0, \text{ran}(X) \subset \mathcal{M}\} = \begin{bmatrix} C_{11} - C_{12}C_{22}^{-1}C_{21} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

が成り立つ。ここで \$C = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{bmatrix}\$ は空間 \$\mathbb{C}^n\$ の直交分解 \$\mathbb{C}^n = \mathcal{M} \oplus \mathcal{M}^\perp\$ に対応する \$C\$ の block-matrix 表示である。

(Continuation of the proof.) \$\mathcal{M} := \text{ran}(A)\$ にとり

$$C_0 := \max\{X; C \geq X \geq 0, \text{ran}(X) \subset \text{ran}(A)\}$$

を使って、\$S_0 \in \mathbb{M}_2(\mathbb{M}_n)\$ を

$$S_0 := \begin{bmatrix} A & A^{1/2}NA^{1/2} \\ A^{1/2}N^*A^{1/2} & C_0 \end{bmatrix}$$

とすると, (12) と (13) より $S_0 \geq 0$ さらに $S_0^T \geq 0$ となる. また S_0 の各 entry の range は $\text{ran}(A)$ に含まれており, $\dim(\text{ran}(A)) \leq 3$ であるから, $S_0 \in M_2(M_3)$ と考えてよい. したがって Theorem 4.3 (Woronowicz) により S_0 は separable になる. 最後に

$$S = S_0 + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & C - C_0 \end{bmatrix}, \quad C - C_0 \geq 0$$

であるから, (9) より S も separable になる. \square

Theorem 4.5. $S = \begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \geq 0$ かつ $S^T = \begin{bmatrix} A & B^* \\ B & C \end{bmatrix} \geq 0$ とする.

A, B, B^*, C の中のどれか 3 個が commuting $\implies S$ separable.

(Proof) (i): A, B, C が commuting としよう. \mathfrak{P}_+ が closed であるから, $A + \epsilon I$ を考えると, 最初から $A > 0$ として仮定してよい. A, B, B^*, C の代わりに $I, A^{-1/2}BA^{-1/2}, (A^{-1/2}BA^{-1/2})^*, A^{-1/2}CA^{-1/2}$ を考えると, 最初から $A = I$ として,

$$B, C \text{ commuting, } \begin{bmatrix} I & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \geq 0 \text{ かつ } \begin{bmatrix} I & B^* \\ B & C \end{bmatrix} \geq 0 \implies \begin{bmatrix} I & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \text{ separable}$$

を示せばよい. この2つの ≥ 0 の条件は, Lemma 4.1 (i) により, $C \geq B^*B, BB^*$ と同じである.

$$N := \begin{bmatrix} B & (C - BB^*)^{1/2} \\ (C - B^*B)^{1/2} & -B^* \end{bmatrix}$$

とすると, B と C の commuting なことから N は normal となる事が判る.

$V = [I, 0] \in M_{n, 2n}$ とすると

$$\begin{bmatrix} I & B \\ B^* & C \end{bmatrix} = (I_2 \otimes V) \cdot \begin{bmatrix} I & N \\ N^* & N^*N \end{bmatrix} \cdot (I_2 \otimes V)^*$$

となり, Theorem 4.1 により真ん中の項は separable なので, (10) により $\begin{bmatrix} I & B \\ B^* & C \end{bmatrix}$ も separable になる.

(ii): A, B, B^* が commuting としよう.

$$S = \begin{bmatrix} A & B \\ B^* & B^*A^{-1}B \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & C - B^*A^{-1}B \end{bmatrix}$$

と書かれ, どの項も ≥ 0 となる. 仮定と Theorem 4.1 より第1項は separable で,

$C \geq B^*A^{-1}B$ より, (9) より第2項も separable であるので S は separable になる.

\square

Theorem 4.6. $S = \begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \geq 0$ とする.

(i) S が Toeplitz 型, i.e., $A = C \implies S$ separable.

(ii) S が Hankel 型, i.e., $B = B^* \implies S$ separable.

(Proof.) どちらの場合も (PPT) は自然に満たされる.

(i) は $\begin{bmatrix} I & B \\ B^* & I \end{bmatrix}$ の場合に還元さるし. (ii) は $\begin{bmatrix} I & B \\ B & C \end{bmatrix}$ の場合に還元されて, それらの separability はともに Theorem 4.4 から出る. \square

最後に容易に検証可能な separability のための条件を挙げよう. I は最も安定した separable 行列であるが, その近傍にあるものはどうかという摂動問題である.

Theorem 4.7. (Gurvitz - Barnum [1]) S selfadjoint, $\|I - S\|_2 \leq 1 \implies S$ separable.

rank 1 の ortho-projection は $\|\cdot\|_2 = 1$ であるから, 次の不思議な結果が出る.

Theorem 4.8. co-rank 1 の ortho-projection はすべて separable である.

5. Total separability. S の total separability の定義を思い出そう. すなわち

$$S = \sum_j (\xi_j \otimes x_j)(\xi_j \otimes x_j)^* \quad \exists \xi_j \in \mathbb{C}^2, x_j \in \mathbb{C}^n$$

$$\langle \xi_j \otimes x_j | \xi_k \otimes x_k \rangle = \langle \xi_j | \xi_k \rangle \cdot \langle x_j | x_k \rangle = 0 \quad \forall j \neq k$$

のように選べることである.

rank 1 の ortho-projection に関しては, separability と total separability は同じことになる. separable でない rank 1 の ortho-projection もあるから, Theorem 4.8 の系として

$$P \text{ separable ortho-projection} \not\Rightarrow I - P \text{ separable}$$

が結論される. ここで当然 total separability の場合はどうか問題になる.

Theorem 5.1.

$$P \in M_2 \otimes M_n \text{ totally separable ortho-projection} \implies I - P \text{ totally separable.}$$

これは orthogonalization の手続きを考えれば, 次の事から出ることは明らかである.

Theorem 5.2. $\zeta_j \otimes x_j \in \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^n$ ($j = 1, 2, \dots, N < 2n$) (ONS)

$$\implies \langle \zeta_j \otimes x_j | \eta \otimes x \rangle = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, N) \quad \exists \eta \otimes x \neq 0.$$

証明のために Lemma を用意しよう.

Lemma 5.1. P_j, Q_j ($j = 1, 2, \dots, m$) は M_n の ortho-projection で

$$P_j P_k = Q_j Q_k = P_j Q_k = 0 \quad \forall j \neq k.$$

で

$$\sum_{j=1}^m P_j \neq I \quad \text{または} \quad \sum_{j=1}^m Q_j \neq I$$

を満たすとする. このとき $\exists k, x \in \mathbb{C}^n, \|x\| = 1$ で, 次の性質を持つものがある:

$$P_j x = 0 \quad \forall j \neq k \quad \text{かつ} \quad Q_j x = 0 \quad \forall j$$

か, または

$$Q_j x = 0 \quad \forall j \neq k \quad \text{かつ} \quad P_j x = 0 \quad \forall j.$$

(Proof.) $P_j = Q_j \quad \forall j$ ならば, 仮定より

$$\sum_{j=1}^m P_j = \sum_{j=1}^m Q_j \neq I$$

であるから, $(\sum_{j=1}^m P_j)x = (\sum_{j=1}^m Q_j)x = 0$ である $\|x\| = 1$ のものを取り k は任意に定めてよい.

次に, 例えば, もし $P_1 \neq Q_1$ であれば, 仮定から

$$\text{ran}(P_1), \text{ran}(Q_1) \subset \ker\left(\sum_{j=2}^m P_j\right) \cap \ker\left(\sum_{j=2}^m Q_j\right)$$

であるから,

$$0 \neq x \in \ker\left(\sum_{j=2}^m P_j\right) \cap \ker\left(\sum_{j=2}^m Q_j\right)$$

で $P_1 x = 0$ または $Q_1 x = 0$ のものがある. \square

Theorem 5.2 の証明に入る前に, 記号を用意しよう.

\mathbb{C}^2 の unit vector $\xi = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix}$ に対して (unimodular な常数を除いて) 一意的に unit vector $\xi^\perp \in \mathbb{C}^2$ が以下の条件で決まる:

$$\langle \xi | \xi^\perp \rangle = 0, \quad \text{実際} \quad \xi^\perp = \begin{bmatrix} \overline{\xi_2} \\ -\overline{\xi_1} \end{bmatrix} \quad (14)$$

そして (unimodular な常数を除いての equivalence \equiv の意味で)

$$(\xi^\perp)^\perp \equiv \xi, \quad \langle \xi | \zeta \rangle \equiv \langle \xi^\perp | \zeta^\perp \rangle \quad \forall \text{ unit vector } \xi, \zeta \in \mathbb{C}^2. \quad (15)$$

重要なのは ξ, ζ が \mathbb{C}^2 の unit vector で x, y が \mathbb{C}^n の unit vector のとき

$$\langle \xi \otimes x | \zeta \otimes y \rangle = 0 \iff \zeta \equiv \xi^\perp \quad \text{or} \quad \langle x | y \rangle = 0. \quad (16)$$

(Proof of Theorem 5.2). ζ_j ($j = 1, 2, \dots, N$) を書き換え, そして並べ変えて

$$\overbrace{\xi_1, \dots, \xi_1}^{p_1}, \quad \overbrace{\xi_1^\perp, \dots, \xi_1^\perp}^{q_1}, \quad \overbrace{\xi_2, \dots, \xi_2}^{p_2}, \quad \overbrace{\xi_2^\perp, \dots, \xi_2^\perp}^{q_2}, \quad \dots, \quad \overbrace{\xi_m, \dots, \xi_m}^{p_m}, \quad \overbrace{\xi_m^\perp, \dots, \xi_m^\perp}^{q_m}$$

の形であるとしてよい (q_j は 0 の場合もある.) ここで

$$\xi_j \neq \xi_k \quad \xi_j \neq \xi_k^\perp \quad \forall j \neq k. \quad (17)$$

対応して product vector の (ONS) を

$$\begin{aligned} & \xi_1 \otimes x_{1,1}, \dots, \xi_1 \otimes x_{1,p_1}, \quad \xi_1^\perp \otimes y_{1,1}, \dots, \xi_1^\perp \otimes y_{1,q_1}, \\ & \xi_2 \otimes x_{2,1}, \dots, \xi_2 \otimes x_{2,p_2}, \quad \xi_2^\perp \otimes y_{2,1}, \dots, \xi_2^\perp \otimes y_{2,q_2}, \\ & \dots \dots \dots \\ & \xi_m \otimes x_{m,1}, \dots, \xi_m \otimes x_{m,p_m}, \quad \xi_m^\perp \otimes y_{m,1}, \dots, \xi_m^\perp \otimes y_{m,q_m}. \end{aligned}$$

と書こう. (17) から

$$\langle \xi_j | \xi_k \rangle \neq 0, \quad \langle \xi_j^\perp | \xi_k^\perp \rangle \neq 0 \quad \text{and} \quad \langle \xi_j | \xi_k^\perp \rangle = 0 \quad (j \neq k),$$

となるので, (16) から

$$\langle x_{j,s} | x_{k,t} \rangle = \delta_{j,k} \delta_{s,t}, \quad \langle y_{j,s} | y_{k,t} \rangle = \delta_{j,k} \delta_{s,t} \quad \text{and} \quad \langle x_{j,s} | y_{k,t} \rangle = 0 \quad \forall j \neq k, \forall s, t. \quad (18)$$

となる. ここで ortho-projections

$$\begin{aligned} P_1 & := \sum_{s=1}^{p_1} x_{1,s} x_{1,s}^* \quad \text{and} \quad Q_1 := \sum_{s=1}^{q_1} y_{1,s} y_{1,s}^* \\ & \dots \dots \dots \\ P_m & := \sum_{s=1}^{p_m} x_{m,s} x_{m,s}^* \quad \text{and} \quad Q_m := \sum_{s=1}^{q_m} y_{m,s} y_{m,s}^*. \end{aligned}$$

で定義しよう. (17) と (18) から P_j, Q_j ($j = 1, 2, \dots, m$) は

$$P_j P_k = Q_j Q_k = P_j Q_k = 0 \quad \forall j \neq k$$

を満たす.

さらに $N < 2n$ より $\sum_{j=1}^m P_j \neq I$ or $\sum_{j=1}^m Q_j \neq I$ となる.

Lemma 5.1 を使って unit vector x があり, ある k にたいして (例えば)

$$P_j x = 0 \quad \forall j \neq k \quad \text{and} \quad Q_j x = 0 \quad \forall j.$$

これから

$$\langle x_{j,t} | x \rangle = 0 \quad \forall j \neq k \quad \text{and} \quad \forall t$$

となるので, $\eta := \xi_k^\perp$ とすると (14) から

$$\langle \xi_j \otimes x_{j,t} | \eta \otimes x \rangle = 0 \quad \forall j, \forall t$$

となる. さらに $Q_j x = 0 \quad \forall j$ であるから

$$\langle y_{j,t} | x \rangle = 0 \quad \forall j, \forall t.$$

が判り, 再び (16) から

$$\langle \xi_j^\perp \otimes y_{j,t} | \eta \otimes x \rangle = 0 \quad \forall j, \forall t$$

判る. 結局

$$\langle \zeta_j \otimes w_j | \eta \otimes x \rangle = 0 \quad (j = 1, 2, \dots, N)$$

となる. \square

Corollary 5.1. (i) $M_2(M_n)$ の ortho-projection P に関しては

$$P \text{ totally separable} \iff P^\perp := I - P \text{ totally separable.}$$

(ii) S が totally separable なら, $\text{ran}(S)$ も $\text{ker}(S)$ も, product vector からなる (CONS) を許容する.

(iii) $0 \leq S \leq I$ のとき

$$S \text{ totally separable} \iff I - S \text{ totally separable.}$$

Theorem 4.1 に関連して, $S = \begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix}$ が totally separable となるのは A, B, B^*, C が commuting な場合に限るのではないかという疑問が湧く.

Theorem 5.3. $\begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix}$ が totally separable \implies

B は normal, i.e., $B^*B = BB^*$ であるが, A, B, C は必ずしも commuting でない.

(Proof.) $\begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix} = \sum_{k=1}^N (\xi_k \xi_k^*) \otimes (x_k x_k^*) \quad \text{with} \quad \xi_k = \begin{bmatrix} \xi_{k,1} \\ \xi_{k,2} \end{bmatrix}$ で

$$\langle \xi_j | \xi_k \rangle \cdot \langle x_j | x_k \rangle = (\overline{\xi_{j,1}} \xi_{k,1} + \overline{\xi_{j,2}} \xi_{k,2}) \cdot \langle x_j | x_k \rangle = 0 \quad \forall j \neq k$$

となっていると, この orthogonality 条件 と (14) の関係から

$$B = \sum_{j=1}^N \xi_{j,1} \overline{\xi_{j,2}} x_j x_j^* \quad \text{commute with} \quad B^* = \sum_{k=1}^N \overline{\xi_{k,1}} \xi_{k,2} x_k x_k^*$$

が結論される. しかし $N = 2$ の場合でも, A, B, C の commuting は結論できない. \square

6. \mathfrak{P}_- 再考. \mathfrak{P}_+ の dual として定義された \mathfrak{P}_- も, 本質はよく判らない. partial transpose map $S \mapsto S^\tau$ は $M_2(M_n)$ の involution で

$$\mathfrak{P}_+^\tau = \mathfrak{P}_+ \quad \text{および} \quad \mathfrak{P}_-^\tau = \mathfrak{P}_-$$

である。この map は \mathfrak{P}_0 を invariant にしないが

$$\mathfrak{P}_+ \subset \mathfrak{P}_0 \cap \mathfrak{P}_0^\tau \quad \text{および} \quad \mathfrak{P}_- \supset \mathfrak{P}_0 + \mathfrak{P}_0^\tau$$

となっている。Theorem 4.3 (Woronowicz) は

$$\mathfrak{P}_0 \cap \mathfrak{P}_0^\tau = \mathfrak{P}_+ \quad (n \leq 3)$$

を述べているが、これの dual な関係は

$$\mathfrak{P}_- = \mathfrak{P}_0 + \mathfrak{P}_0^\tau \quad (n \leq 3)$$

である。すなわち $n \leq 3$ のとき

$$S \in \mathfrak{P}_- \implies S = T_1 + T_2^\tau \quad \exists T_1, T_2 \in \mathfrak{P}_0 \quad (19)$$

を述べている。

以下では、 $n \geq 3$ の場合でも、 $S \in \mathfrak{P}_-$ が Hankel 型や Toeplitz 型である場合は (19) の関係がずっと改善できることを示そう。

Theorem 6.1. $S = \begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \in \mathfrak{P}_-$ に対して以下の条件は同値である。

- (i) Hankel 型, i.e., $B = B^*$,
- (ii) $B = \frac{1}{2}\{A^{1/2}WC^{1/2} + C^{1/2}W^*A^{1/2}\} \quad \exists \text{ unitary } W$,
- (iii) $S = \frac{1}{2}\{T + T^\tau\} \quad \exists T \in \mathfrak{P}_0$.

Theorem 6.2. $S = \begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \in \mathfrak{P}_-$ に対して以下の条件は同値である。

- (i) Toeplitz 型, i.e., $A = C$,
- (ii) $B = 2D^{1/2}W(A - D)^{1/2} \quad A \geq \exists D \geq 0, \text{ unitary } W$.
- (iii) $S = T + (JTJ)^\tau \quad \exists T \in \mathfrak{P}_0$. ここで $J := \begin{bmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \otimes I$.

これ等の証明には、行列値多項式の分解に関する次ぎの Fejer-Riesz の結果 ([5] 参照) が有用である。

Theorem 6.3. (Fejer-Riesz) $F(t)$ は M_n -値の関数とする。

- (i) $F(t)$ ($t \in \mathbb{R}$) が M_n -値の多項式るとき

$$F(t) \geq 0 \quad \forall t \in \mathbb{R} \implies F(t) = G(t)^*G(t) \quad \forall t \in \mathbb{R} \quad \exists \text{ 多項式 } G(t).$$

(ii) $F(e^{it})$ ($t \in \mathbb{R}$) が M_n -値の trigonometric 多項式るとき

$$F(e^{it}) \geq 0 \quad \forall t \in \mathbb{R} \implies$$

$$F(e^{it}) = G(e^{it})^* G(e^{it}) \quad \forall t \in \mathbb{R} \quad \exists M_n - \text{値 analytic trigonometric 多項式 } G(e^{it}).$$

ここで $G(e^{it})$ が analytic とは $G(e^{it}) = \sum_{k \geq 0} e^{ikt} X_k \quad \exists X_k \in M_n$ の形るときである。

以下の議論では

$$A = X^* X \quad \exists X \in M_n \implies X = W A^{1/2} \quad \exists \text{ unitary } W \quad (20)$$

というよく知られた事実を使おう。

(Proof of Theorem 6.1.) (i) \implies (ii): $B = B^*$ のとき, (5) の $S \in \mathfrak{P}_-$ の条件は

$$F(t) := A + 2tB + t^2 C \geq 0 \quad \forall t \in \mathbb{R}$$

の事となる。Theorem 6.3(Fejer-Riesz)(i) により

$$F(t) = (X_0 + tX_1)^*(X_0 + tX_1) \quad \forall t \in \mathbb{R}, \quad \exists X_0, X_1 \in M_n$$

と分解できるが, これは

$$A = X_0^* X_0, \quad C = X_1^* X_1 \quad \text{そして} \quad B = \text{Re}(X_0^* X_1)$$

となる。これから (19) により

$$B = \text{Re}(A^{1/2} W C^{1/2}) \quad \exists \text{ unitary } W.$$

(ii) \implies (iii):

$$T := \begin{bmatrix} A & A^{1/2} W C^{1/2} \\ C^{1/2} W^* A^{1/2} & C \end{bmatrix}$$

とすると, $T \in \mathfrak{P}_0$ で $S = \frac{1}{2} \{T + T^r\}$ となっている。

(iii) \implies (i) は明らかであろう。□

(Proof of Theorem 6.2.) (i) \implies (ii): $A = C$ のときは (5) の $S \in \mathfrak{P}_-$ の条件は

$$\langle x | Ax \rangle^2 \geq |\langle x | Bx \rangle|^2 \quad \forall x \in \mathbb{C}^n.$$

となるが, これは

$$F(e^{it}) := 2A + e^{it} B + e^{-it} B^* \geq 0 \quad \forall t \in \mathbb{R}$$

の事と理解できる。Theorem 6.3 (Fejer-Riesz)(ii) により

$$F(e^{it}) = (X_0 + e^{it} X_1)^*(X_0 + e^{it} X_1) \quad \forall t \in \mathbb{R}, \quad \exists X_0, X_1 \in M_n$$

と分解できる。これは

$$2A = 2C = X_0^* X_0 + X_1^* X_1 \quad \text{そして} \quad B = X_0^* X_1$$

のことである。

$$D = \frac{1}{2} X_0^* X_0$$

とすると, (18) により

$$\frac{1}{2} X_1^* X_1 = A - D \quad \text{で} \quad B = 2D^{1/2} W (A - D)^{1/2} \quad \exists \text{ unitary } W.$$

となる。

(ii) \implies (iii).

$$T = \begin{bmatrix} D & D^{1/2} W (A - D)^{1/2} \\ (A - D)^{1/2} W^* D^{1/2} & A - D \end{bmatrix}$$

とすると, $T \in \mathfrak{P}_0$ であり,

$$T + (JTJ)^T = \begin{bmatrix} D + (A - D) & 2D^{1/2} W (A - D)^{1/2} \\ 2(A - D)^{1/2} W^* D^{1/2} & (A - D) + D \end{bmatrix} = S$$

(iii) \implies (i) は明らかであろう。 \square

$S \in \mathfrak{P}_-$ の条件だけでは, Toeplitz 型からも Hankel 型からも, $S \in \mathfrak{P}_0$ は導出されない。

$S = \begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \in \mathfrak{P}_-$ で, $A = I$ のときは, S が Toeplitz 型であるのは

$$\max\{|\langle x, Bx \rangle|; \|x\| \leq 1\} \leq 1$$

のとき, すなわち B の numerical radius ≤ 1 のことを言っている。また $A = I$ で S が Hankel 型であるのは

$$B = \operatorname{Re}(X) \quad \text{で} \quad C = X^* X \quad \exists X \in \mathbb{M}_n$$

のことは示している。

最後に考えるのは $S = \begin{bmatrix} A & B \\ B^* & C \end{bmatrix} \in \mathfrak{P}_-$ で Toeplitz 型でありさらに Hankel 型の場合, すなわち

$$S = \begin{bmatrix} A & B \\ B & A \end{bmatrix} \in \mathfrak{P}_-$$

の場合である。このときは

$$A \geq B \geq -A$$

となるので,

$$B = A^{1/2} W A^{1/2} \quad I \geq \exists W \geq -I$$

となり, 結局 $S \geq 0$ で, 最後に S が separable である事が結論される。

参考文献

- [1] L. Gurvitz and H. Barnum, *Largest separable ball around the maximally mixed bipartite quantum system*, arXiv. quant-ph. 021150v2, 10 Dec. 2002.
- [2] M. Horodecki, P. Horodecki and R. Horodecki, *Separability of mixed states; necessary and sufficient conditions*, Physics Letters, A223(1996), 1-8.
- [3] S.-J. Kye, *Facial structures for various notions of positivity and applications to the theory of entanglement*, Rev. Math. Phys. 25(2013), no. 2, 133002.
- [4] A. Peres, *Separability criterion for density matrices*, Phys. Rev. Lett., 77(1996), 1413-1415.
- [5] M. Rosenblum and J. Rovnyak, *Hardy classes and operator theory*, Oxford Univ. Press, New York, 1977.
- [6] S.L. Woronowicz, *Positive maps of low dimensional matrix algebras*, Rep. Math. Phys. 10(1976), 165-183.