MPSの近似精度とRenyiエントロピー

塩崎　謙

August 18, 2024

Abstract

[1]の計算メモ．

Nサイト系を考える．局所Hilbert空間の次元をdとする． MPSを標準形に取る．

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1,\dots,i_N} A^{[1]}_{i_1} A^{[2]}_{i_2} \cdots A^{[N-1]}_{i_{N-1}} A^{[N]}_{i_N} |i_1 \cdots i_N\rangle . \tag{1}$$

ここで$A^{[m]}_i$は$D_m \times D_{m+1}$行列であり，$D_1 = D_{N+1} = 1$である．以下を満たす．

$$\sum_i A^{[m]}_i A^{[m]\dagger}_i = 1_{D_m}, \quad 1 \leq m \leq N, \tag{2}$$

$$\sum_i A^{[m]\dagger}_i \Lambda^{[m-1]} A^{[m]}_i = \Lambda^{[m]}, \quad 1 \leq m \leq N, \tag{3}$$

$$\Lambda^{[0]} = \Lambda^{[N]} = 1, \quad \Lambda^{[m]} = \mathrm{diag}(\lambda^{[m]}_1, \dots, \lambda^{[m]}_{D_m}), \quad \lambda^{[m]}_1 \geq \cdots \geq \lambda^{[m]}_{D_{m+1}} > 0, \quad \mathrm{tr}\,\Lambda^{[m]} = 1. \tag{4}$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 \tag{5}$$

に注意.

$D \in \mathbb{Z}_{>0}$とする．ボンド次元$D+1$以降を切ったMPS

$$|\psi_D\rangle := \sum_{i_1,\dots,i_N} A^{[1]}_{i_1} P A^{[2]}_{i_2} P \cdots P A^{[N-1]}_{i_{N-1}} P A^{[N]}_{i_N} |i_1 \cdots i_N\rangle , \quad P = \sum_{k=1}^{D} |k\rangle \langle k| , \tag{6}$$

を導入する.（ボンド次元がそもそもD未満のボンドには，Pは何もしないものとする.）ボンド$m, m+1$における「局所的なエラー」

$$\epsilon_m(D) := \sum_{a>D} \lambda^{[m]}_a \tag{7}$$

を導入する.

(Lemma 1 in [1])

$$|| \, |\psi\rangle - |\psi_D\rangle \, ||^2 \leq 2 \sum_{m=1}^{N-1} \epsilon_m(D). \tag{8}$$

（証明） $|\langle\psi^D|\psi\rangle|$を評価すれば良い.

$$\langle\psi^D|\psi\rangle = \mathrm{Tr}[S_N(PS_{N-1}(PS_{N-2}(\cdots PS_3(PS_2(P\Lambda^{[1]}))\cdots)))] \tag{9}$$

である．ここでS_mは転送行列

$$S_m(X) := \sum_i A_i^{[m]\dagger} X A_i^{[m]}, \quad S_{m+1}(\Lambda^{[m]}) = \Lambda^{[m+1]}, \tag{10}$$

であり，正の線形写像でかつトレース保存 $\mathrm{tr}\,[S_m(X)] = \mathrm{tr}\,[X]$. よって，トレースノルムの縮小性（定理 ??）より，

$$\|S_m(X)\|_{\mathrm{tr}} \leq \|X\|_{\mathrm{tr}} \tag{11}$$

が成立．記号

$$Y^{[1]} = \Lambda^{[1]}, \quad Y^{[k+1]} = S_{k+1}(PY^{[k]}) = \sum_i A_i^{[m]\dagger} P Y^{[k]} A_i^{[m]}, \tag{12}$$

を導入すると，

$$\langle \psi^D | \psi \rangle = S_N(PS_{N-1}(PS_{N-2}(\cdots PS_3(PS_2(P\Lambda^{[1]}))\cdots))) = Y^{[N]}. \tag{13}$$

また，

$$S_m(\Lambda^{[m-1]}) = \Lambda^{[m]} \tag{14}$$

に注意．

さて，

$$\| \, |\psi\rangle - |\psi^D\rangle \, \|^2 = 1 + \langle \psi^D | \psi^D \rangle - 2\Re \langle \psi^D | \psi \rangle \leq 2(1 - \Re Y^{[N]}) \leq 2|1 - Y^{[N]}| \tag{15}$$

であるが，トレースノルムの縮小性より，

$$|1 - Y^{[N]}| = |\Lambda^{[N]} - Y^{[N]}| = \|\Lambda^{[N]} - Y^{[N]}\|_{\mathrm{tr}} = \|S_N(\Lambda^{[N-1]} - PY^{[N-1]})\|_{\mathrm{tr}} \tag{16}$$

$$\leq \|\Lambda^{[N-1]} - PY^{[N-1]}\|_{\mathrm{tr}} = \|\Lambda^{[N-1]} - P\Lambda^{[N-1]} + P\Lambda^{[N-1]} - PY^{[N-1]}\|_{\mathrm{tr}} \tag{17}$$

$$\leq \|\Lambda^{[N-1]} - P\Lambda^{[N-1]}\|_{\mathrm{tr}} + \|P(\Lambda^{[N-1]} - Y^{[N-1]})\|_{\mathrm{tr}}. \tag{18}$$

ここで，$\|AB\|_{\mathrm{tr}} \leq \|A\|\|B\|_{\mathrm{tr}}$を用いると [1]，

$$|1 - Y^{[N]}| \leq \|\Lambda^{[N-1]} - P\Lambda^{[N-1]}\|_{\mathrm{tr}} + \|\Lambda^{[N-1]} - Y^{[N-1]}\|_{\mathrm{tr}}. \tag{19}$$

以下同様にして，$\|\Lambda^{[N-1]} - Y^{[N-1]}\|_{\mathrm{tr}}$を評価する．結局，

$$|1 - Y^{[N]}| \leq \sum_{m=1}^{N-1} \|\Lambda^{[m]} - P\Lambda^{[m]}\|_{\mathrm{tr}} = \sum_{m=1}^{N-1} \sum_{a>D} \lambda_a^{[m]} \tag{20}$$

を得る． □

したがって，MPSとの誤差は全てのボンドの誤差の総和で上から評価できる．

続いて，Renyiエントロピーと密度行列の間に成立する一般的な不等式を証明する．密度行列ρに対して，Renyiエントロピーは以下で定義される．

$$S^\alpha(\rho) = \frac{1}{1-\alpha} \log \mathrm{tr}\, \rho^\alpha. \tag{21}$$

スペクトル分解を

$$\rho = \sum_a \lambda_a |a\rangle \langle a|, \quad \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots, \quad \sum_a \lambda_a = 1, \tag{22}$$

[1]一般に特異値について$\sigma_k(AB) \leq \sigma_1(A)\sigma_k(B)$が成立する．よって， $\|AB\|_{\mathrm{tr}} = \sum_i \sigma_i(AB) \leq \sum_i \sigma_1(A)\sigma_i(B) = \|A\|\|B\|_{\mathrm{tr}}$.

とすると，

$$S^\alpha(\rho) = \frac{1}{1-\alpha}\log\sum_a \lambda_a^\alpha \tag{23}$$

である．

$$\epsilon(D) := \sum_{a>D}\lambda_a \tag{24}$$

と定義する．

(Lemma 2 in [1]) [a]

$$\log\frac{\epsilon(D)}{\alpha} \le \frac{1-\alpha}{\alpha}\left(S^\alpha(\rho) - \log\frac{D}{1-\alpha}\right), \quad 0<\alpha<1. \tag{26}$$

[a] [1]だと，

$$\log\epsilon(D) \le \frac{1-\alpha}{\alpha}\left(S^\alpha(\rho) - \log\frac{D}{1-\alpha}\right), \quad 0<\alpha<1. \tag{25}$$

であるが，typoだろうか．

（証明 [2]） $0<\alpha<1$とする． $\epsilon(D)$を固定しつつ，$S^\alpha(\rho)$を下から評価する． logは単調増加であるから$\sum_a \lambda_a^\alpha$を下から評価すれば良い．関数

$$\left\{\{p_a\}_a^N \in [0,1]^{\times N} | \sum_{a=1}^N p_a = 1\right\} \to \sum_{a=1}^N p_a^\alpha \tag{27}$$

は変数について対称かつ上に凸であるから，Schur-concave. つまり，$\{\lambda_a\}_a$をmajorizeする分布$\{p_a\}_a$によって下から抑えられる [3]：

$$\{p_a\}_a \succ \{\lambda_a\}_a \Rightarrow \sum_a p_a^\alpha \le \sum_a \lambda_a^\alpha. \tag{28}$$

分布$\{p_a\}_a$としては，任意の分布内で考えると，$p_1=1, p_{a>1}=0$なる分布は任意の分布をMajorizeするが，自明な評価$1\le\sum_a \lambda_a^\alpha$しか得られない．そこでtailを

$$\sum_{a>D} p_a = \epsilon(D) \tag{29}$$

と固定しつつ，$\{\lambda_a\}_a$をmajorizeするできるだけ偏った分布を見つける．

$0<h\le(1-\epsilon(D))/D$をパラメータとして，以下の分布$\{q_a\}_a$を考える．

$$q_1 = 1-\epsilon(D)-(D-1)h, \tag{30}$$
$$q_2 = q_3 = \cdots = q_D = q_{D+1} = \cdots q_{D+\lfloor\epsilon(D)/h\rfloor} = h, \tag{31}$$
$$q_{D+\lfloor\epsilon(D)/h\rfloor+1} = \epsilon(D) - \lfloor\frac{\epsilon(D)}{h}\rfloor h, \tag{32}$$
$$q_{a>D+\lfloor\epsilon(D)/h\rfloor+1} = 0, \tag{33}$$
$$\sum_{a>D} q_a = \lfloor\frac{\epsilon(D)}{h}\rfloor h + \epsilon(D) - \lfloor\frac{\epsilon(D)}{h}\rfloor h = \epsilon(D). \tag{34}$$

[2] [1]の証明についての下村顕士氏との議論に基づく．

[3] $\{p_a\}_a$を大きいものから順に並べた分布を$p_1^\downarrow \ge p_2^\downarrow \ge \cdots$として，$\{p_a\}_a \succ \{q_a\}_a$の定義は，任意の$k$に対して，$\sum_{a=1}^k p_a^\downarrow \ge \sum_{a=1}^k q_a^\downarrow$なること．

$a \leq D$と$a > D$の総和

$$\sum_{a\leq D} q_a = 1-\epsilon(D), \quad \sum_{a>D} q_a = \epsilon(D) \tag{35}$$

を一定に保ちつつ，中間部分の高さ$q_D = h$を可変にしている．

まず，この分布に対して，和$\sum_a q_a^\alpha$を評価する．

$$\sum_a q_a^\alpha = (1-\epsilon(D)-(D-1)h)^\alpha + (D-1+\lfloor\epsilon(D)/h\rfloor)h^\alpha + (\epsilon(D) - \lfloor\frac{\epsilon(D)}{h}\rfloor h)^\alpha. \tag{36}$$

簡単のため，$h = \epsilon(D)/r, r \in \mathbb{Z}_{>0}$の場合のみ考えると，

$$(1-\epsilon(D)-(D-1)h)^\alpha + (D-1+\epsilon(D)/h)h^\alpha - Dh^\alpha - \epsilon(D)h^{\alpha-1} \tag{37}$$

$$= (1-\epsilon(D)-(D-1)h)^\alpha - h^\alpha \tag{38}$$

$$= (1-\epsilon(D)-Dh)(\cdots) \geq 0 \tag{39}$$

に注意して，

$$\sum_a q_a^\alpha = (1-\epsilon(D)-(D-1)h)^\alpha + (D-1+\epsilon(D)/h)h^\alpha \geq Dh^\alpha + \epsilon(D)h^{\alpha-1}. \tag{40}$$

$0 < \alpha < 1$であるので，hに依存しない下限が存在する．

$$h = h_* = \frac{(1-\alpha)\epsilon(D)}{\alpha D} \tag{41}$$

で達成される．

$$Dh^\alpha + \epsilon(D)h^{\alpha-1} \geq (Dh^\alpha + \epsilon(D)h^{\alpha-1})|_{h=\frac{(1-\alpha)\epsilon(D)}{\alpha D}} = \frac{D(\frac{\epsilon(D)(1-\alpha)}{D\alpha})^\alpha}{1-\alpha} = \frac{D^{1-\alpha}\epsilon(D)^\alpha}{(1-\alpha)^{1-\alpha}\alpha^\alpha}. \tag{42}$$

したがって，$0 < h \leq (1-\epsilon(D))/D$を満たす$h$が存在して，$\{q_a\}_a \succ \{\lambda_a\}_a$であれば，$\sum_a \lambda_a^\alpha$が上式によって下から抑えられる．問題は，このようなhが常に見つかるかどうか．

$h = \lambda_D$のとき，$\{q_a\}_a \succ \{\lambda_a\}_a$が成立する．実際，$a = 1, \ldots, D$までの面積

$$\sum_{a=1}^{D} q_a = \sum_{a=1}^{D} \lambda_a = 1-\epsilon(D) \tag{43}$$

が固定されているため，q_1に全て寄与を押し付けた分布$\{q_a\}_a$は，

$$\sum_{a=1}^{k} q_a = 1-\epsilon(D)-(D-1)h+(k-1)h = \sum_{a=1}^{D}\lambda_a - (D-k)\lambda_D \tag{44}$$

$$= \sum_{a=1}^{k}\lambda_a + \sum_{a=k+1}^{D}(\lambda_a - \lambda_D) \geq \sum_{a=1}^{k}\lambda_a, \quad k = 1, \ldots, D, \tag{45}$$

が成立する．さらに$k > D$についても，λ_aのtailの部分を太らせているから， $D < k \leq D + \lfloor\epsilon(D)/h\rfloor$に対して，

$$\sum_{a=1}^{k}\lambda_a = 1-\epsilon(D)+(k-D)\lambda_D = \sum_{a=1}^{D}\lambda_a + \sum_{a=D+1}^{k}\lambda_D \geq \sum_{a=1}^{D}\lambda_a + \sum_{a=D+1}^{k}\lambda_a, \tag{46}$$

また，$k > D + \lfloor\epsilon(D)/h\rfloor$のときは，

$$\sum_{a=1}^{k}\lambda_a = 1 \geq \sum_{a=1}^{k}\lambda_a. \tag{47}$$

よって，

$$\{q_a\}_a\big|_{h=\lambda_D} \succ \{\lambda_a\}_a. \tag{48}$$

以上より，

$$\frac{D^{1-\alpha}\epsilon(D)^{\alpha}}{(1-\alpha)^{1-\alpha}\alpha^{\alpha}} \leq \sum_a \lambda_a^{\alpha}. \tag{49}$$

となり，$D, \epsilon(D)$だけで決まる下からの評価が得られた． Renyiエントロピーを取って，

$$\frac{1}{1-\alpha}\log\frac{D^{1-\alpha}\epsilon(D)^{\alpha}}{(1-\alpha)^{1-\alpha}\alpha^{\alpha}} \leq S^{\alpha}(\rho) \tag{50}$$

つまり，

$$\log\frac{D}{1-\alpha} + \frac{\alpha}{1-\alpha}\log\frac{\epsilon(D)}{\alpha} \leq S^{\alpha}(\rho) \tag{51}$$

これから，

$$\log\frac{\epsilon(D)}{\alpha} \leq \frac{1-\alpha}{\alpha}\left[S^{\alpha}(\rho) - \log\frac{D}{1-\alpha}\right], \tag{52}$$

つまり，

$$\epsilon(D) \leq \alpha\,\exp\left(\frac{1-\alpha}{\alpha}\left[S^{\alpha}(\rho) - \log\frac{D}{1-\alpha}\right]\right) \tag{53}$$

が得られた． □

臨界系では区間$[1, L]$におけるRenyiエントロピーは

$$S^{\alpha}(\rho_L) = \frac{c+\bar{c}}{12}(1+\frac{1}{\alpha})\log L \tag{54}$$

と振る舞うことが知られているらしい．したがって，臨界系であったとしても$\sum_{k=1}^{N-1}\epsilon_k(D)$は$N$のべきで抑えられる．

References

[1] F. Verstraete, J.I. Cirac, *Matrix product states represent ground states faithfully*, arXiv:cond-mat/0505140.