

ノート：行列積状態

塩崎 謙

August 23, 2024

Abstract

本ノートの目的は、行列積状態の基本定理と呼ばれる、並進対称性な行列積状態のゲージ自由度に関する定理の証明である。関連して、行列積状態と近似の精度に関する事実の証明も追う。

Contents

1	波動関数の近似	2
1.1	Schmidt分解	2
1.2	低ランク近似	4
1.3	誤差評価	8
2	OBC-MPS	11
2.1	MPSの導出	12
2.2	標準的OBC-MPSへの変形	13
2.3	誤差評価	14
3	正写像とPerron=Frobeniusの定理	16
3.1	正写像の諸性質	17
3.2	Perron=Frobeniusの定理	23
4	TI-MPS	31
4.1	TI-MPSの存在と標準形	31
4.2	Injectivityと強既約性	33
4.3	TI-MPSの基本定理	36
4.4	応用例：1次元SPT相	40

はじめに

本ノートは、行列積状態 (matrix product state (MPS)) の基本定理 [2] と呼ばれるある種のゲージ不

定性の証明に関して文献[2, 7]から関連する部分の行間を埋めたノートである¹.

MPSの一般論については、レビュー文献[3, 4]が参考になる。行列解析については講義ノート [5]も有用である。また、MPSに関わる多くの重要な結果は [1]で得られていることに注意する。一方で[1]は無関係における数学的に厳密な枠組みに基づいており、技術的に敷居が高い。[2]は[1]の有限サイト数への拡張であり、本ノートは[2]のMPSの基本定理に関連する証明を追う。

行列積状態とは波動関数のテンソルネットワーク表示の一種であり、特に空間1次元において

$$\psi_{i_1 \dots i_N} = A_{i_1}^{[1]} A_{i_2}^{[2]} \dots A_{i_N}^{[N]} \quad (0.1)$$

のように行列 $A_{i_m}^{[m]}$ の積で表示する方法を指す。有限の N サイト系においては、与えられた波動関数 $\psi_{i_1 \dots i_N}$ に対して情報を落とすことのない上記右辺の行列の集合 $\{A_{i_m}^{[m]}\}_{i_m, m}$ が存在するが、重要な点はあるクラス、例えば局所項からなるハミルトニアン基底状態に対しては、興味のある物理量に依存して、行列 $A_{i_m}^{[m]}$ のある有限ランク近似によって効率良く（系のサイズ N と誤差の逆数の代数的関数程度で）近似できる、という点である。したがって、本質的に無限次元系である空間1次元系の量子状態の性質を、有限サイズの行列によって調べることができる。例として、MPSの基本定理より、対称体によって保護されたトポロジカル（symmetry protected topological (SPT)）相を特徴づける不変量が定義できることを最終節で見る。

1 波動関数の近似

1.1 Schmidt分解

特異値分解から始める。

Theorem 1.1 (特異値分解). 行列 $A \in \text{Mat}_{m,n}(\mathbb{C})$ に対して、以下の分解がある。

$$A = U \Sigma V^\dagger, \quad U \in \text{Mat}_{m,r}(\mathbb{C}), \quad V \in \text{Mat}_{n,r}(\mathbb{C}), \quad \Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r), \quad (1.1)$$

$$U^\dagger U = 1_r, \quad V^\dagger V = 1_r, \quad \sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r. \quad (1.2)$$

ここで、 $r = \text{rank}(A)$ 、 $\{\sigma_a\}_{a=1}^r$ は一意的、 U, V は縮退する

(証明) 行列 $A^\dagger A$ はエルミートかつ半正定値であることに注意する。 $A^\dagger A$ を対角化して、

$$A^\dagger A = \sum_{a=1}^r \sigma_a^2 v_a v_a^\dagger, \quad \sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r > 0, \quad v_a^\dagger v_b = \delta_{ab}, \quad (1.3)$$

とおける。 $V = (v_1, \dots, v_r)$ と置く。 $u_a = Av_a/\sigma_a, a = 1, \dots, r$ とおくと、 $u_a^\dagger u_b = v_a^\dagger A^\dagger Av_b/(\sigma_a \sigma_b) = \delta_{ab}$ であり、

$$\sum_{a=1}^r \sigma_a u_a v_a^\dagger = A \sum_{a=1}^r v_a v_a^\dagger = A - A(1_n - \sum_{a=1}^r v_a v_a^\dagger) = A. \quad (1.4)$$

ここで、 $Av = 0 \Rightarrow A^\dagger Av = 0$ 、及び、 $A^\dagger Av = 0 \Rightarrow \|Av\| = 0 \Rightarrow Av = 0$ より、 $\ker A = \ker A^\dagger A$ を用いた。 $\{\sigma_a\}_{a=1}^r$ の一意性は構成から明らか。特異ベクトル v_a の不定性は、 $\sigma_{a_1} = \dots = \sigma_{a_p}$ を縮退する特異値としたとき、 $W \in U(p)$ をユニタリ行列として、

$$(v_{a_1}, \dots, v_{a_p}) \mapsto (v_{a_1}, \dots, v_{a_p})W \quad (1.5)$$

¹本ノートの内容は東京大学において2024年7月29日(月) - 2024年7月30日(火)に行われた集中講義「行列積状態のゲージ自由度とその応用について」に基づく。本ノートの作成にあたり、下村顕士氏、北村侃氏、法橋顕広氏には数々の疑問点についてご教示いただき、また、誤りの指摘を頂き、大変お世話になりました。

で与えられる。対応して,

$$(u_{a_1}, \dots, u_{a_p}) \mapsto (u_{a_1}, \dots, u_{a_p})W \quad (1.6)$$

である。□

Schmidt分解に移る。一般の有限次元のHilbert空間 \mathcal{H} における量子状態 $|\psi\rangle$ を考える。

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |i\rangle. \quad (1.7)$$

ここで、 $|i\rangle$ はHilbert空間 \mathcal{H} の基底。Hilbert空間 \mathcal{H} を任意の方法で2つの量子系 L, R に分割する。

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_L \otimes \mathcal{H}_R. \quad (1.8)$$

対応して、基底も $|i\rangle = |i_L, i_R\rangle = |i_L\rangle \otimes |i_R\rangle$ と書く。

$$|\psi\rangle = \sum_{i_L, i_R} \psi_{i_L, i_R} |i_L, i_R\rangle. \quad (1.9)$$

波動関数 ψ_{i_L, i_R} に特異値分解を適用することにより、以下の分解の存在が示される。

Corollary 1.2 (Schmidt分解). 任意の状態 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_L \otimes \mathcal{H}_R$ に対して、以下の分解がある。

$$|\psi\rangle = \sum_{a=1}^r \lambda_a^{\frac{1}{2}} |L_a\rangle \otimes |R_a\rangle. \quad (1.10)$$

ここで、 $\{|L_a\rangle\}_a, \{|R_a\rangle\}_a$ はそれぞれ $\langle L_a | L_b \rangle = \delta_{ab}, \langle R_a | R_b \rangle = \delta_{ab}$ を満たす正規直交集合、 $\{\lambda_a\}_{a=1}^r$ は $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_r > 0$ を満たす正の実数である。 $r \in \mathbb{N}$ 、及び $\{\lambda_a\}_{a=1}^r$ は一意的であり、正規直交集合 $\{|L_a\rangle\}_{a=1}^r, \{|R_a\rangle\}_{a=1}^r$ は縮退するSchmidt係数 λ_a のブロック内におけるユニタリ変換を除いて一意的。つまり、 $\lambda_{a_1} = \dots = \lambda_{a_p}$ なるブロックにおいて、不定性は、 $U \in U(p)$ をユニタリ行列として、

$$(L_{a_1}, \dots, L_{a_i}) \mapsto (L_{a_1}, \dots, L_{a_i})U, \quad (R_{a_1}, \dots, R_{a_i}) \mapsto (R_{a_1}, \dots, R_{a_i})U^*. \quad (1.11)$$

また、 $|\psi\rangle$ が規格化条件 $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ を満たすときは、 $\sum_{a=1}^r \lambda_a = 1$ 。

- r をSchmidtランクと呼ぶ。
- L 系を消去した縮約密度行列は、

$$\rho_R = \text{tr}_L |\psi\rangle \langle \psi| = \sum_{a=1}^r \lambda_a |R_a\rangle \langle R_a| \quad (1.12)$$

で与えられる。同様に、

$$\rho_L = \text{tr}_R |\psi\rangle \langle \psi| = \sum_{a=1}^r \lambda_a |L_a\rangle \langle L_a|. \quad (1.13)$$

- 特に、エンタングルメント・エントロピーは

$$S(\rho_R) = -\text{tr} \rho_R \log \rho_R = -\sum_{a=1}^r \lambda_a \log \lambda_a \quad (1.14)$$

によって与えられる。

- 例. $|\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle$ は $r = 1, \lambda = 1$ なる Schmidt 分解.
- 例. Bell 対

$$\frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} (-|\downarrow\rangle) \otimes |\uparrow\rangle \quad (1.15)$$

は $r = 2, \lambda_1 = \lambda_2 = 1/\sqrt{2}$ なる Schmidt 分解.

1.2 低ランク近似

Schmidt 分解は以下の意味で状態 $|\psi\rangle$ の最良の近似を与える.

状態 $|\psi\rangle$ の Schmidt 分解

$$|\psi\rangle = \sum_{a=1}^r \lambda_a^{\frac{1}{2}} |L_a\rangle \otimes |R_a\rangle \quad (1.16)$$

に対して, ランク D 近似を

$$|\psi_D\rangle := \sum_{a=1}^D \lambda_a^{\frac{1}{2}} |L_a\rangle \otimes |R_a\rangle \quad (1.17)$$

によって導入する. $\langle\psi_D|\psi_D\rangle \leq 1$ に注意.

Theorem 1.3. 任意の Schmidt ランクが D なる状態 $|\phi_D\rangle$ に対して,

$$\| |\psi\rangle - |\phi_D\rangle \|^2 \geq \| |\psi\rangle - |\psi_D\rangle \|^2 = \sum_{a>D} \lambda_a. \quad (1.18)$$

また, $|\phi_D\rangle$ が規格化されているときは以下が成立.

$$|\langle\psi|\phi_D\rangle| \leq |\langle\psi|\psi_D\rangle| = \sum_{a=1}^D \lambda_a. \quad (1.19)$$

(1.19) は (1.18) から直ちに従う: $\| |\psi\rangle - |\phi_D\rangle \|^2 \geq \| |\psi\rangle - |\psi_D\rangle \|^2$ より

$$2 - 2\Re\langle\psi|\phi_D\rangle \geq 2 - 2\Re\langle\psi|\psi_D\rangle \geq 2 - 2\Re\langle\psi|\psi_D\rangle \quad (1.20)$$

より,

$$\Re\langle\psi|\phi_D\rangle \leq \Re\langle\psi|\psi_D\rangle = \sum_{a=1}^D \lambda_a. \quad (1.21)$$

$|\phi_D\rangle$ の位相は任意である. 特に, $\langle\psi|\phi_D\rangle \geq 0$ なるように位相を選ぶと, (1.18) を得る.

特異値分解において対応する定理は, Eckart=Young=Mirsky の定理として知られる. これを証明する. 準備として, min-max 定理と Weyl の不等式を示す.

Theorem 1.4 (Min-max定理). A を $n \times n$ エルミート行列とする. A の固有値を

$$\lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_n \quad (1.22)$$

と並べる.

$$\lambda_k = \max_{\dim V=k} \min_{v \in V, \|v\|=1} \langle v|A|v \rangle \quad (1.23)$$

$$= \min_{\dim V=n-k+1} \max_{v \in V, \|v\|=1} \langle v|A|v \rangle. \quad (1.24)$$

明らかに

$$\lambda_1 = \max_{v, \|v\|=1} \langle v|A|v \rangle, \quad (1.25)$$

$$\lambda_n = \min_{v, \|v\|=1} \langle v|A|v \rangle, \quad (1.26)$$

が成立. 他の固有値についてもこのような変分的な特徴づけを与えるのがmin-max定理.

(証明) 固有値 λ_a の縮退度を d_a とする. X の固有値を重複を含めず,

$$\lambda_1 > \cdots > \lambda_p \quad (1.27)$$

と並べる. $\lambda = \lambda_a$ なる固有空間を V_a と書く. ($\sum_{a=1}^p \dim V_a = n$ に注意.) 部分空間 $V \subset \mathbb{C}^n$ に対して, 以下が成立する:

$$V \cap (V_a \oplus \cdots \oplus V_p) \neq \{0\} \Rightarrow \min_{v \in V, \|v\|=1} \langle v|A|v \rangle \leq \lambda_a, \quad (1.28)$$

$$V \subset (V_a \oplus \cdots \oplus V_p)^\perp \Rightarrow \min_{v \in V, \|v\|=1} \langle v|A|v \rangle > \lambda_a. \quad (1.29)$$

後者は $\dim V > \sum_{b=1}^{a-1} \dim V_b$ であれば不成立. また $\sum_{b=1}^{a-1} \dim V_b < \dim V \leq \sum_{b=1}^a \dim V_b$ であれば $V = V_1 \oplus \cdots \oplus V_{a-1} \oplus V'$, $\{0\} \subsetneq V' \subset V_a$ の場合に後者の等号が成立する. よって(1.23)を得る. (1.24)は $-A$ に対して(1.23)を適用することにより得られる. \square

特異値についても同様の変分公式を導出することができる. 行列 $A \in \text{Mat}_{n,m}(\mathbb{C})$ の特異値を大きいものから順に

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_{\min(m,n)} \quad (1.30)$$

と並べる. A の特異値の自乗はエルミート行列 $A^\dagger A$ の固有値に他ならない. 自明な不等式

$$\sqrt{\langle v|A^\dagger A|v \rangle} \geq \sqrt{\langle v'|A^\dagger A|v' \rangle} \Leftrightarrow \langle v|A^\dagger A|v \rangle \geq \langle v'|A^\dagger A|v' \rangle \quad (1.31)$$

に注意すると表示

$$\sigma_k = \max_{\dim V=k} \min_{v \in V, \|v\|=1} \sqrt{\langle v|A^\dagger A|v \rangle} = \max_{\dim V=k} \min_{v \in V, \|v\|=1} \|Av\|. \quad (1.32)$$

を得る.

Corollary 1.5 (特異値に関するMin-max定理). $n \times m$ 行列 A の特異値を

$$\sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_{\min(m,n)} \quad (1.33)$$

と並べる. このとき,

$$\sigma_k = \max_{\dim V=k} \min_{v \in V, \|v\|=1} \|Av\| \quad (1.34)$$

$$= \min_{\dim V=n-k+1} \max_{v \in V, \|v\|=1} \|Av\|. \quad (1.35)$$

後で用いるので、以下を示しておく.

Corollary 1.6.

$$\sigma_k(AB) \leq \sigma_1(A)\sigma_k(B). \quad (1.36)$$

(証明)

$$\sigma_k(AB) = \max_{\dim V=k} \min_{v \in V, \|v\|=1} \|ABv\| \leq \|A\| \max_{\dim V=k} \min_{v \in V, \|v\|=1} \|Bv\| = \sigma_1(A)\sigma_k(B). \quad \square \quad (1.37)$$

次に、Weylの不等式を証明する. A を $n \times n$ エルミート行列とする. A の固有値を大きいものから並べる.

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n. \quad (1.38)$$

エルミート行列 A, B に対して、固有値の集合 $\{\lambda_i(A+B)\}_i$ と $\{\lambda_i(A)\}_i, \{\lambda_i(B)\}_i$ の間に成立する不等式が知りたい. 例えば最大固有値については何が言えるだろうか. 行列 A の $\lambda = \lambda_i(A)$ なる固有値の規格化された固有状態を v_i^A と書く. すると,

$$\lambda_1(A+B) = (v_1^{A+B}, (A+B)v_1^{A+B}) = (v_1^{A+B}, Av_1^{A+B}) + (v_1^{A+B}, Bv_1^{A+B}) \quad (1.39)$$

$$\leq (v_1^A, Av_1^A) + (v_1^B, Bv_1^B) = \lambda_1(A) + \lambda_1(B) \quad (1.40)$$

なる関係式が成立する.

より一般には、以下が成立する.

Theorem 1.7 (Weylの不等式).

$$\lambda_{i+j-1}(A+B) \leq \lambda_i(A) + \lambda_j(B) \leq \lambda_{i+j-n}(A+B) \quad (1.41)$$

(証明²) Min-max定理より,

$$\lambda_{i+j-1}(A+B) = \max_{V, \dim V=i+j-1} \min_{x \in V, \|x\|=1} (x, (A+B)x), \quad (1.42)$$

$$\lambda_i(A) = \min_{V, \dim V=n-i+1} \max_{x \in V, \|x\|=1} (x, Ax), \quad (1.43)$$

$$\lambda_j(B) = \min_{V, \dim V=n-j+1} \max_{x \in V, \|x\|=1} (x, Bx). \quad (1.44)$$

よって、ある部分空間 V_{A+B}, V_A, V_B が存在して

$$\lambda_{i+j-1}(A+B) = \min_{x \in V_{A+B}, \|x\|=1} (x, (A+B)x), \quad \dim V_{A+B} = i+j-1, \quad (1.45)$$

$$\lambda_i(A) = \max_{x \in V_A, \|x\|=1} (x, Ax), \quad \dim V_A = n-i+1, \quad (1.46)$$

$$\lambda_j(B) = \max_{x \in V_B, \|x\|=1} (x, Bx), \quad \dim V_B = n-j+1. \quad (1.47)$$

このとき,

$$\dim(V_A \cap V_B) = \dim V_A + \dim V_B - \dim(V_A \cup V_B) \geq \dim V_A + \dim V_B - n = n-i-j+2, \quad (1.48)$$

$$\dim(V_{A+B} \cap (V_A \cap V_B)) = \dim V_{A+B} + \dim(V_A \cap V_B) - \dim(V_{A+B} \cup (V_A \cap V_B)) \quad (1.49)$$

$$\geq (i+j-1) + (n-i-j+2) - n = 1 \quad (1.50)$$

²Wikipedia, *Weyl's inequality*, [url](#).

より, 非ゼロのベクトル

$$x_0 \in V_{A+B} \cap V_A \cap V_B \quad (1.51)$$

を取ることができる. すると,

$$\lambda_{i+j-1}(A+B) \leq (x_0, (A+B)x_0) = (x_0, Ax_0) + (x_0, Bx_0) \leq \lambda_i(A) + \lambda_j(B) \quad (1.52)$$

より左側の不等式を得る. 主張の右側の不等式は, 左側の不等式の(-1)倍で得られる. \square

系として, 以下を得る.

Corollary 1.8 (特異値に関するWeylの不等式).

$$\sigma_{i+j-1}(A+B) \leq \sigma_i(A) + \sigma_j(B) \quad (1.53)$$

(証明) A の特異値はエルミート行列

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} & A \\ A^\dagger & \end{pmatrix} \quad (1.54)$$

の非負固有値である.

$$\lambda_i = \sigma_i \quad i = 1, \dots, n, \quad \lambda_{n+1} = -\sigma_{n-i+1} \quad i = 1, \dots, n, \quad (1.55)$$

と定義すると, Weylの不等式

$$\lambda_{i+j-1}(\tilde{A} + \tilde{B}) \leq \lambda_i(\tilde{A}) + \lambda_j(\tilde{B}) \leq \lambda_{i+j-2n}(\tilde{A} + \tilde{B}) \quad (1.56)$$

が成立. $i+j-1 \leq n$ に制限する. \square

次に, Eckart=Young=Mirskyの定理を証明する. $m \times n$ 行列 $A \in \text{Mat}_{m,n}(\mathbb{C})$ に対して, A の特異値分解を

$$A = U \Sigma V^\dagger = \sum_{i=1}^{\text{rank}(A)} \sigma_i u_i v_i^\dagger, \quad \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \quad (1.57)$$

とする. Frobeniusノルム (= Hilbert=Schmidt内積によって定義されるノルム) の定義は

$$\|A\|_F := \sqrt{(A, A)_{\text{HS}}} = \sqrt{\text{tr}[A^\dagger A]} = \sqrt{\sum_{i=1}^{\text{rank}(A)} \sigma_i^2}. \quad (1.58)$$

2ノルム (= 演算子ノルム) の定義は,

$$\|A\| := \sup_{x \in \mathbb{C}^n, \|x\|=1} \|Ax\| = \sigma_1(A). \quad (1.59)$$

さて, 行列 A のランク k 近似を

$$A_k := \sum_{i=1}^k \sigma_i u_i v_i^\dagger \quad (1.60)$$

と書く. 主張は以下.

Theorem 1.9 (Eckart=Young=Mirsky). 2ノルム, 及びFrobeniusノルムの意味で, A のランク k なる行列による最良の近似は A_k で与えられる. つまり, 任意のランク k の行列 B_k に対して,

$$\|A - B_k\|_F \geq \|A - A_k\|_F, \quad (1.61)$$

$$\|A - B_k\|_2 \geq \|A - A_k\|_2, \quad (1.62)$$

が成立する.

(証明³) Weylの不等式より, 任意の i, j に対して,

$$\sigma_{i+j-1}(X+Y) \leq \sigma_i(X) + \sigma_j(Y) \quad (1.63)$$

が成立. B のランクを k とする. このとき $\sigma_{i>k}(B) = 0$ に注意. $j = k+1, X = A - B, Y = B$ として,

$$\sigma_{i+k}(A) \leq \sigma_i(A - B) + \sigma_{k+1}(B) = \sigma_i(A - B). \quad (1.64)$$

すると,

$$\|A - B\|_2 = \sigma_1(A - B) \geq \sigma_{k+1}(A) = \sigma_1(A - A_k). \quad (1.65)$$

$$\|A - B\|_F^2 = \sum_i \sigma_i^2(A - B) \geq \sum_i \sigma_{i+k}^2(A) = \|A - A_k\|_F^2. \quad \square \quad (1.66)$$

波動関数 ψ_{i_L, i_R} を行列とみなしたときのFrobeniusノルムは状態 $|\psi\rangle$ のノルムに他ならないことに注意する.

$$\|\psi\|_F^2 = \text{tr } \psi^\dagger \psi = \sum_{i_L, i_R} \psi_{i_L, i_R}^* \psi_{i_L, i_R} = \sum_{i_L, i_R} |\psi_{i_L, i_R}|^2 = \|\psi\|^2. \quad (1.67)$$

したがってFrobeniusノルムに関するEckart=Young=Mirskyの定理は(1.18)に他ならない.

1.3 誤差評価

Schmidt分解のランク D 近似 $|\psi_D\rangle$ はどの程度良い近似だろうか? Renyiエントロピーを用いて, 誤差を上から評価できることを見る [6]. 以下, $\text{rank}(\rho)$ は十分大きいものとする.

一般の密度行列 ρ に対して, Renyiエントロピーは以下で定義される.

$$S^\alpha(\rho) = \frac{1}{1-\alpha} \log \text{tr } \rho^\alpha, \quad \alpha > 0. \quad (1.68)$$

$\alpha \rightarrow 1$ はvon Neumannエントロピーを与える.

$$S^{\alpha \rightarrow 1}(\rho) = S_{\text{vN}}(\rho) = -\text{tr } \rho \log \rho. \quad (1.69)$$

スペクトル分解を

$$\rho = \sum_a \lambda_a |a\rangle \langle a|, \quad \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots, \quad \sum_a \lambda_a = 1, \quad (1.70)$$

とすると,

$$S^\alpha(\rho) = \frac{1}{1-\alpha} \log \sum_a \lambda_a^\alpha. \quad (1.71)$$

³Physics Stack Exchange, Proof of Eckart-Young-Mirsky theorem, url.

関数 $f(\{\lambda_a\}_a) = \sum_a \lambda_a^\alpha$ は, $0 < \alpha < 1$ であれば上に凸, $\alpha > 1$ に対して下に凸であることに注意. 誤差を

$$\epsilon(D) := \sum_{a>D} \lambda_a \quad (1.72)$$

と定義し, $\epsilon(D)$ を評価する. (1.18) より, $\epsilon(D)$ は状態 $|\psi\rangle$ の Schmidt 分解によるランク D 近似の自乗誤差 $\| |\psi\rangle - |\psi_D\rangle \|^2$ に他ならない.

Theorem 1.10 (Lemma 2 in [6]).

$$\log \frac{\epsilon(D)}{\alpha} \leq \frac{1-\alpha}{\alpha} \left(S^\alpha(\rho) - \log \frac{D}{1-\alpha} \right), \quad 0 < \alpha < 1. \quad (1.73)$$

同じことだが,

$$\epsilon(D) \leq \alpha \times \left(\frac{1-\alpha}{D} \right)^{\frac{1-\alpha}{\alpha}} \times \exp \left[\frac{1-\alpha}{\alpha} S^\alpha(\rho) \right], \quad 0 < \alpha < 1, \quad (1.74)$$

が成立する⁴. Renyi エントロピーは密度行列 ρ のみで決まる量であることに注意. 誤差 $\epsilon(D)$ は D に対してべき減衰で上から抑えられる.

(証明⁵) $0 < \alpha < 1$ 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

$$\left\{ \{p_a\}_a^N \in [0, 1]^{\times N} \mid \sum_{a=1}^N p_a = 1 \right\} \rightarrow \sum_{a=1}^N p_a^\alpha \quad (1.76)$$

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⁶:

$$\{p_a\}_a \succ \{\lambda_a\}_a \Rightarrow \sum_a p_a^\alpha \leq \sum_a \lambda_a^\alpha. \quad (1.77)$$

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 $1 \leq \sum_a \lambda_a^\alpha$ しか得られない. そこで tail を

$$\sum_{a>D} p_a = \epsilon(D) \quad (1.78)$$

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.

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

$$q_1 = 1 - \epsilon(D) - (D-1)h, \quad (1.79)$$

$$q_2 = q_3 = \dots = q_D = q_{D+1} = \dots = q_{D+\lfloor \epsilon(D)/h \rfloor} = h, \quad (1.80)$$

$$q_{D+\lfloor \epsilon(D)/h \rfloor+1} = \epsilon(D) - \lfloor \frac{\epsilon(D)}{h} \rfloor h, \quad (1.81)$$

$$q_{a>D+\lfloor \epsilon(D)/h \rfloor+1} = 0, \quad (1.82)$$

$$\sum_{a>D} q_a = \lfloor \frac{\epsilon(D)}{h} \rfloor h + \epsilon(D) - \lfloor \frac{\epsilon(D)}{h} \rfloor h = \epsilon(D). \quad (1.83)$$

⁴[6]だと,

$$\log \epsilon(D) \leq \frac{1-\alpha}{\alpha} \left(S^\alpha(\rho) - \log \frac{D}{1-\alpha} \right), \quad 0 < \alpha < 1. \quad (1.75)$$

であるが, typo だろうか.

⁵[6]の証明についての下村顕土氏との議論に基づく.

⁶ $\{p_a\}_a$ を大きいものから順に並べた分布を $p_1^\downarrow \geq p_2^\downarrow \geq \dots$ として, $\{p_a\}_a \succ \{q_a\}_a$ の定義は, 任意の k に対して, $\sum_{a=1}^k p_a^\downarrow \geq \sum_{a=1}^k q_a^\downarrow$ なること.

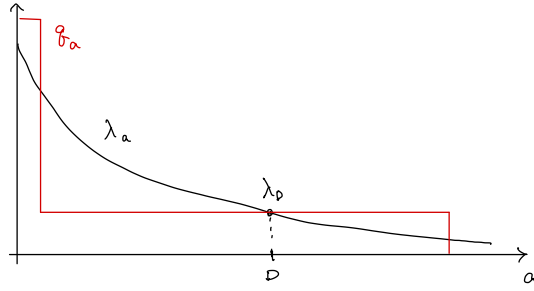


Figure 1

$a \leq D$ と $a > D$ の総和

$$\sum_{a \leq D} q_a = 1 - \epsilon(D), \quad \sum_{a > D} q_a = \epsilon(D) \quad (1.84)$$

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。

$$\sum_a q_a^\alpha = (1 - \epsilon(D) - (D - 1)h)^\alpha + (D - 1 + \lfloor \epsilon(D)/h \rfloor)h^\alpha + (\epsilon(D) - \lfloor \frac{\epsilon(D)}{h} \rfloor h)^\alpha. \quad (1.85)$$

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

$$(1 - \epsilon(D) - (D - 1)h)^\alpha + (D - 1 + \epsilon(D)/h)h^\alpha - Dh^\alpha - \epsilon(D)h^{\alpha-1} \quad (1.86)$$

$$= (1 - \epsilon(D) - (D - 1)h)^\alpha - h^\alpha \quad (1.87)$$

$$= (1 - \epsilon(D) - Dh)(\dots) \geq 0 \quad (1.88)$$

に注意して、

$$\sum_a q_a^\alpha = (1 - \epsilon(D) - (D - 1)h)^\alpha + (D - 1 + \epsilon(D)/h)h^\alpha \geq Dh^\alpha + \epsilon(D)h^{\alpha-1}. \quad (1.89)$$

$0 < \alpha < 1$ であるので、 h に依存しない下限が存在する。

$$h = h_* = \frac{(1 - \alpha)\epsilon(D)}{\alpha D} \quad (1.90)$$

で達成される。

$$Dh^\alpha + \epsilon(D)h^{\alpha-1} \geq (Dh^\alpha + \epsilon(D)h^{\alpha-1})|_{h=\frac{(1-\alpha)\epsilon(D)}{\alpha D}} = \frac{D(\frac{\epsilon(D)(1-\alpha)}{D\alpha})^\alpha}{1 - \alpha} = \frac{D^{1-\alpha}\epsilon(D)^\alpha}{(1 - \alpha)^{1-\alpha}\alpha^\alpha}. \quad (1.91)$$

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、 $a = 1, \dots, D$ までの面積

$$\sum_{a=1}^D q_a = \sum_{a=1}^D \lambda_a = 1 - \epsilon(D) \quad (1.92)$$

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、

$$\sum_{a=1}^k q_a = 1 - \epsilon(D) - (D - 1)h + (k - 1)h = \sum_{a=1}^D \lambda_a - (D - k)\lambda_D \quad (1.93)$$

$$= \sum_{a=1}^k \lambda_a + \sum_{a=k+1}^D (\lambda_a - \lambda_D) \geq \sum_{a=1}^k \lambda_a, \quad k = 1, \dots, D, \quad (1.94)$$

が成立する. 図 1 を見よ. 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,

$$\sum_{a=1}^k \lambda_a = 1 - \epsilon(D) + (k - D)\lambda_D = \sum_{a=1}^D \lambda_a + \sum_{a=D+1}^k \lambda_D \geq \sum_{a=1}^D \lambda_a + \sum_{a=D+1}^k \lambda_a, \quad (1.95)$$

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

$$\sum_{a=1}^k \lambda_a = 1 \geq \sum_{a=1}^k \lambda_a. \quad (1.96)$$

よって,

$$\{q_a\}_a|_{h=\lambda_D} \succ \{\lambda_a\}_a. \quad (1.97)$$

以上より,

$$\frac{D^{1-\alpha}\epsilon(D)^\alpha}{(1-\alpha)^{1-\alpha}\alpha^\alpha} \leq \sum_a \lambda_a^\alpha. \quad (1.98)$$

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,

$$\frac{1}{1-\alpha} \log \frac{D^{1-\alpha}\epsilon(D)^\alpha}{(1-\alpha)^{1-\alpha}\alpha^\alpha} \leq S^\alpha(\rho) \quad (1.99)$$

つまり,

$$\log \frac{D}{1-\alpha} + \frac{\alpha}{1-\alpha} \log \frac{\epsilon(D)}{\alpha} \leq S^\alpha(\rho) \quad (1.100)$$

これから,

$$\log \frac{\epsilon(D)}{\alpha} \leq \frac{1-\alpha}{\alpha} \left[S^\alpha(\rho) - \log \frac{D}{1-\alpha} \right], \quad (1.101)$$

つまり,

$$\epsilon(D) \leq \alpha \exp \left(\frac{1-\alpha}{\alpha} \left[S^\alpha(\rho) - \log \frac{D}{1-\alpha} \right] \right) \quad (1.102)$$

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

$$S^\alpha(\rho_L) = \frac{c + \bar{c}}{12} \left(1 + \frac{1}{\alpha} \right) \log L \quad (1.103)$$

と振る舞うことが知られている. 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ことに注意. この点は次節で詳しく検討する.

2 OBC-MPS

本節では, 開放端条件 (open boundary condition, OBC) における行列積状態 (matrix product state, MPS) を導入する. 重要な注意として, 状態が周期境界条件を満たすかどうかにかかわらず, 常に OBC-MPS が定義される.

MPS は記号で表示すると可読性が増すが, 本ノートでは行わない.

2.1 MPSの導出

1次元の N サイトからなるスピン系を考える。局所Hilbert空間の次元を d として、Hilbert空間は局所Hilbert空間のテンソル積で与えられる。

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{x=1}^N \mathcal{H}_x, \quad \mathcal{H}_x \cong \mathbb{C}^d. \quad (2.1)$$

\mathcal{H}_x の基底を $\{|i_x\rangle\}_{i_x=1}^d$ と書き、

$$|i_1 \dots i_N\rangle = |i_1\rangle \otimes \dots \otimes |i_N\rangle \quad (2.2)$$

と略記する。 \mathcal{H} の状態は

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_N} \psi_{i_1 \dots i_N} |i_1 \dots i_N\rangle \quad (2.3)$$

と書かれる。規格化

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (2.4)$$

を仮定する。

Definition 2.1. 以下の波動関数 $\psi_{i_1 \dots i_N}$ の表示をOBC-MPSと呼ぶ。

$$\psi_{i_1 \dots i_N} = A_{i_1}^{[1]} A_{i_2}^{[2]} \dots A_{i_{N-1}}^{[N-1]} A_{i_N}^{[N]}. \quad (2.5)$$

ここで、 $A_{i_x}^{[x]}$ は $D_{x-1} \times D_x$ 行列であり、 $D_0 = D_{N+1} = 1$ 。

常にOBC-MPSは存在する。存在も含めて、以下の標準的OBC-MPSの存在を示す。

Theorem 2.2 ([2]. OBC-MPSの標準形). 以下を満たすOBC-MPSが存在する。

$$\sum_i A_i^{[m]} A_i^{[m]\dagger} = 1_{r_m}, \quad 1 \leq m \leq N, \quad (2.6)$$

$$\sum_i A_i^{[m]\dagger} \Lambda^{[m-1]} A_i^{[m]} = \Lambda^{[m]}, \quad 1 \leq m \leq N. \quad (2.7)$$

ここで、 $\Lambda^{[m]}$ は正の実数を要素として持つ対角行列

$$\Lambda^{[m]} = \text{diag}(\lambda_1^{[m]}, \dots, \lambda_{r_m}^{[m]}) \quad (2.8)$$

であり、以下を満たす。

$$\Lambda^{[0]} = \Lambda^{[N]} = 1, \quad (2.9)$$

$$\lambda_1^{[m]} \geq \dots \geq \lambda_{r_m}^{[m]} > 0, \quad (2.10)$$

$$\text{tr} \Lambda^{[m]} = \sum_{a=1}^{r_m} \lambda_a = 1. \quad (2.11)$$

また、 r_m は分割 $[1 \dots m], [m+1 \dots N]$ に関するSchmidtランク。

導出は右から特異値分解を実行するだけであるので、略証のみつける。

(略証) まず $\psi_{i_1 \dots i_{N-1}, i_N}$ に対してSVDを実行して,

$$\psi_{i_1 \dots i_{N-1}, i_N} = \sum_{a_{N-1}} \lambda_{a_{N-1}}^{[N-1]\frac{1}{2}} \psi'_{i_1 \dots i_{N-1} a_{N-1}} [A_{i_N}^{[N]}]_{a_{N-1}}. \quad (2.12)$$

続いて

$$\tilde{\psi}'_{i_1 \dots i_{N-2}, i_{N-1} a_{N-1}} = \lambda_{a_{N-1}}^{[N-1]\frac{1}{2}} \psi'_{i_1 \dots i_{N-1} a_{N-1}} \quad (2.13)$$

に対して特異値分解を実行して,

$$\tilde{\psi}'_{i_1 \dots i_{N-2}, i_{N-1} a_{N-1}} = \sum_{a_{N-2}} \lambda_{a_{N-2}}^{[N-2]\frac{1}{2}} \psi''_{i_1 \dots i_{N-2} a_{N-2}} A_{a_{N-2} a_{N-1}}^{[N-2]}. \quad (2.14)$$

以下同様. 特異値分解 $A = U\Sigma V^\dagger$ の性質 $U^\dagger U = 1, V^\dagger V = 1$ を用いると, 条件(2.6), (2.7)が導かれる. \square

標準的OBC-MPSを用いると, 縮約密度行列が直ちに得られることに注意する.

$$\rho_{[m+1, N]} = \text{tr}_{[1, m]} |\psi\rangle \langle \psi| = \sum_{a_m=1}^{r_m} \Lambda_{a_m}^{[m]} |R_{a_m}\rangle \langle R_{a_m}|. \quad (2.15)$$

ここで,

$$|R_{a_m}\rangle = \sum_{i_{m+1} \dots i_N} \sum_{a_{m+1} \dots a_{N-1}} [A_{i_{m+1}}^{[m+1]}]_{a_m a_{m+1}} \dots [A_{i_N}^{[N]}]_{a_{N-1}} |i_{m+1} \dots i_N\rangle. \quad (2.16)$$

Proposition 2.3. 標準的OBC-MPSは特異ベクトルの不定性を除き, 一意的.

これは構成より明らか.

標準的OBC-MPSの一意性は, PBC-MPSのゲージ不定性の証明において重要な役割を果たす.

2.2 標準的OBC-MPSへの変形

量子状態 $|\psi\rangle$ に対して, 必ずしも標準的OBC-MPSでないOBC-MPS

$$\psi_{i_1 \dots i_N} = B_{i_1}^{[1]} \dots B_{i_N}^{[N]} \quad (2.17)$$

を標準的OBC-MPSに変形する手続きを考える.

Theorem 2.4 ([2]). OBC-MPS(2.17)に対して, 次を満たす Y_m, Z_m が存在する.

$$A_i^{[m]} \text{は標準的OBC-MPS}, \quad (2.18)$$

$$Y_m Z_m = 1, \quad 1 < m < N, \quad (2.19)$$

$$A_i^{[1]} = B_i^{[1]} Z_1, \quad A_i^{[N]} = Y_{N-1} B_i^{[N]}, \quad (2.20)$$

$$A_i^{[m]} = Y_{m-1} B_i^{[m]} Z_m, \quad 1 < m < N. \quad (2.21)$$

導出はやり右から特異値分解を実行するだけであるので, 略証のみつける.

(略証) まず, $[B_{i_N}^{[N]}]_{b_{N-1}}$ に対して特異値分解を実行して,

$$[B_{i_N}^{[N]}]_{b_{N-1}} = \sum_{a_{N-1}} U_{b_{N-1}a_{N-1}}^{[N-1]} \Delta_{a_{N-1}}^{[N-1]} A_{i_N}^{[N]}. \quad (2.22)$$

$$Z_{N-1} = U^{[N-1]} \Delta^{[N-1]}, \quad Y_{N-1} = (\Delta^{[N-1]})^{-1} U^{[N-1]\dagger} \quad (2.23)$$

と置くと, $Y_{N-1} B_i^{[N]} = A_i^{[N]}$, $Y_{N-1} Z_{N-1} = 1$ が成立する. 次に行列 $\sum_{b_{N-1}} [B_{i_{N-1}}^{[N-2]}]_{b_{N-2}b_{N-1}} [Z_{N-1}]_{b_{N-1}a_{N-1}}$ の足の分割 $b_{N-2}i_N, a_{N-1}$ に対して特異値分解を実行して,

$$\sum_{b_{N-1}} [B_{i_{N-1}}^{[N-2]}]_{b_{N-2}b_{N-1}} [Z_{N-1}]_{b_{N-1}a_{N-1}} = \sum_{a_{N-2}} U_{b_{N-2}a_{N-2}}^{[N-2]} \Delta_{a_{N-2}}^{[N-2]} [A_{i_{N-1}}^{[N-1]}]_{a_{N-2}a_{N-1}}. \quad (2.24)$$

$$Z_{N-2} = U^{[N-2]} \Delta^{[N-2]}, \quad Y_{N-2} = (\Delta^{[N-2]})^{-1} U^{[N-2]\dagger} \quad (2.25)$$

とおくと $Y_{N-2} B_i^{[N-1]} Z_{N-1} = A_i^{[N-1]}$, $Y_{N-2} Z_{N-2} = 1$ が成立する. これを $m=1$ まで実行すると, 表示

$$B_{i_1}^{[1]} \cdots B_{i_N}^{[N]} = A_{i_1}^{[1]} \cdots A_{i_N}^{[N]} \quad (2.26)$$

が得られ, $A_i^{[m]}$ は左カノニカル条件以外を満たす.

左カノニカル条件を満たすようにさらに変形するには, まず $m=1$ から

$$\sum_i A_i^{[1]\dagger} A_i^{[1]} = V_1 \Lambda^{[1]} V_1^\dagger \quad (2.27)$$

と対角化すると, $A_i'^{[1]} = A_i^{[1]} V_1$ は左カノニカル条件 $\sum_i A_i'^{[1]\dagger} A_i'^{[1]} = \Lambda^{[1]}$ を満たす. $\Lambda^{[0]} = 1$ に注意. $A_i'^{[2]} = V_1^\dagger A_i^{[2]}$ と再定義して,

$$\sum_i A_i'^{[2]\dagger} \Lambda^{[1]} A_i'^{[2]} = V_2 \Lambda^{[2]} V_2^\dagger \quad (2.28)$$

と対角化すると,

$$\sum_i (A_i'^{[2]} V_2)^\dagger \Lambda^{[1]} A_i'^{[2]} V_2 = \Lambda^{[2]} \quad (2.29)$$

となり, $A_i''^{[2]} = A_i'^{[2]} V_2$ は左カノニカル条件を満たす. 以上の変形をまとめると,

$$A_i'^{[1]} = A^{[1]} V_1 = B^{[1]} Z_1 V_1, \quad (2.30)$$

$$A_i''^{[m]} = V_{m-1}^\dagger A_i^{[m]} V_m = V_{m-1}^\dagger Y_{m-1} B_i^{[m]} Z_m V_m, \quad m > 1, \quad (2.31)$$

より

$$Z_m \mapsto Z_m V_m, \quad Y_m \mapsto V_m^\dagger Y_m \quad (2.32)$$

なる再定義を意味するが, $Y_m Z_m = 1$ は保たれる. \square

2.3 誤差評価

標準的OBC-MPSのボンド次元を一様に D で切って得られるOBC-MPSがどの程度もとの状態を近似するかを見積もる.

$$\psi_{i_1 \dots i_N} = A_{i_1}^{[1]} \cdots A_{i_N}^{[N]} \quad (2.33)$$

を標準的OBC-MPSとする。 $D \in \mathbb{N}$ をひとつ選び、 $a > D$ 以降を落としたOBC-MPSを定義する。

$$\psi_{i_1 \dots i_N}^D := \sum_{a_1, \dots, a_{N-1}=1}^D [A_{i_1}^{[1]}]_{a_1} [A_{i_2}^{[2]}]_{a_1 a_2} \cdots [A_{i_{N-1}}^{[N-1]}]_{a_{N-2} a_{N-1}} [A_{i_N}^{[N]}]_{a_{N-1}}. \quad (2.34)$$

これは、ボンド自由度 $a_m \leq D$ までの自由度への射影行列

$$P = \begin{pmatrix} 1_D & \\ & 0 \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

を導入して、

$$\psi_{i_1 \dots i_N}^D = A_{i_1}^{[1]} P A_{i_2}^{[2]} P \cdots P A_{i_{N-1}}^{[N-1]} P A_{i_N}^{[N]} \quad (2.36)$$

と書くこともできる。 i_m - i_{m+1} サイトにおける“誤差”を

$$\epsilon_m(D) = \sum_{a_m=1}^{r_m} \lambda_a^{[m]} \quad (2.37)$$

として導入する。

Proposition 2.5 (Lemma 1 in [6]).

$$\| |\psi\rangle - |\psi^D\rangle \|^2 \leq 2 \sum_{m=1}^{N-1} \epsilon_m(D). \quad (2.38)$$

証明には、正写像に対するトレースノルムの縮小性（定理 3.23）が必要となる。定理 3.23の証明は次節に先送りする。

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

$$\langle \psi^D | \psi \rangle = \text{Tr} [S_N (P S_{N-1} (P S_{N-2} (\cdots P S_3 (P S_2 (P \Lambda^{[1]}) \cdots)))] \quad (2.39)$$

である。ここで S_m は転送行列

$$S_m(X) := \sum_i A_i^{[m]\dagger} X A_i^{[m]}, \quad S_{m+1}(\Lambda^{[m]}) = \Lambda^{[m+1]}, \quad (2.40)$$

であり、正の線形写像でかつトレース保存 $\text{tr} [S_m(X)] = \text{tr} [X]$. よって、トレースノルムの縮小性（定理 3.23）より、

$$\|S_m(X)\|_{\text{tr}} \leq \|X\|_{\text{tr}} \quad (2.41)$$

が成立。記号

$$Y^{[1]} = \Lambda^{[1]}, \quad Y^{[k+1]} = S_{k+1}(P Y^{[k]}) = \sum_i A_i^{[m]\dagger} P Y^{[k]} A_i^{[m]}, \quad (2.42)$$

を導入すると、

$$\langle \psi^D | \psi \rangle = S_N (P S_{N-1} (P S_{N-2} (\cdots P S_3 (P S_2 (P \Lambda^{[1]}) \cdots))) = Y^{[N]}. \quad (2.43)$$

また、

$$S_m(\Lambda^{[m-1]}) = \Lambda^{[m]} \quad (2.44)$$

に注意。

さて,

$$\| |\psi\rangle - |\psi^D\rangle \|^2 = 1 + \langle \psi^D | \psi^D \rangle - 2\Re \langle \psi^D | \psi \rangle \leq 2(1 - \Re Y^{[N]}) \leq 2|1 - Y^{[N]}| \quad (2.45)$$

であるが, トレースノルムの縮小性より,

$$|1 - Y^{[N]}| = |\Lambda^{[N]} - Y^{[N]}| = \|\Lambda^{[N]} - Y^{[N]}\|_{\text{tr}} = \|S_N(\Lambda^{[N-1]} - PY^{[N-1]})\|_{\text{tr}} \quad (2.46)$$

$$\leq \|\Lambda^{[N-1]} - PY^{[N-1]}\|_{\text{tr}} = \|\Lambda^{[N-1]} - P\Lambda^{[N-1]} + P\Lambda^{[N-1]} - PY^{[N-1]}\|_{\text{tr}} \quad (2.47)$$

$$\leq \|\Lambda^{[N-1]} - P\Lambda^{[N-1]}\|_{\text{tr}} + \|P(\Lambda^{[N-1]} - Y^{[N-1]})\|_{\text{tr}}. \quad (2.48)$$

ここで, $\|AB\|_{\text{tr}} \leq \|A\|\|B\|_{\text{tr}}$ を用いると⁷,

$$|1 - Y^{[N]}| \leq \|\Lambda^{[N-1]} - P\Lambda^{[N-1]}\|_{\text{tr}} + \|\Lambda^{[N-1]} - Y^{[N-1]}\|_{\text{tr}}. \quad (2.49)$$

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

$$|1 - Y^{[N]}| \leq \sum_{m=1}^{N-1} \|\Lambda^{[m]} - P\Lambda^{[m]}\|_{\text{tr}} = \sum_{m=1}^{N-1} \sum_{a>D} \lambda_a^{[m]} \quad (2.50)$$

を得る. □

したがって, 真の状態 $|\psi\rangle$ と標準的OBC-MPSから構成したボンド次元 D 近似 $|\psi^D\rangle$ との誤差は, 全てのボンドにおける誤差の総和で上から評価できる. (1.73)と合わせると,

$$\| |\psi\rangle - |\psi^D\rangle \|^2 \leq 2 \sum_{m=1}^{N-1} \epsilon_m(D) \leq 2 \sum_{m=1}^{N-1} \alpha \times \left(\frac{1-\alpha}{D} \right)^{\frac{1-\alpha}{\alpha}} \times \exp \left[\frac{1-\alpha}{\alpha} S^\alpha(\rho_{1,m}) \right]. \quad (2.51)$$

さて $|\psi\rangle$ がCFTの基底状態のときは, $1 \ll \ell \ll N$ のとき,

$$S^\alpha(\rho_{1,\ell}) \sim \frac{c}{6} \left(1 + \frac{1}{\alpha} \right) \log \ell \quad (2.52)$$

と振る舞う. よって,

$$\| |\psi\rangle - |\psi^D\rangle \|^2 \leq (\text{const.}) \times D^{-\frac{1-\alpha}{\alpha}} N^{\frac{c}{6}(1+\frac{1}{\alpha})+1}. \quad (2.53)$$

これから,

$$\| |\psi\rangle - |\psi^D\rangle \| \leq \frac{\epsilon_0}{N} \quad (2.54)$$

が達成されるためのボンド次元 D_N の N 依存性は (物理量の誤差が N に対して増大しない条件として, $1/N$ を考えている.),

$$\frac{\epsilon_0}{N} \leq (\text{const.}) \times D^{-\frac{1-\alpha}{\alpha}} N N^{\frac{c}{6}(1+\frac{1}{\alpha})} \quad (2.55)$$

より

$$D_N \sim \left(\frac{N^2}{\epsilon_0} \right)^{\frac{\alpha}{1-\alpha}} \times N^{\frac{c}{6} \frac{1+\alpha}{1-\alpha}} \quad (2.56)$$

となり, 系のサイズ N に対して多項式関数で与えられる.

3 正写像とPerron=Frobeniusの定理

本節では, 正写像に関する必要事項をまとめる. [9]はコンパクトで読みやすい. 有限次元の正写像に対するPerron=Frobenius型の定理は, [7]の内容である.

⁷補題1.6より, $\|AB\|_{\text{tr}} = \sum_i \sigma_i(AB) \leq \sum_i \sigma_1(A)\sigma_i(B) = \|A\|\|B\|_{\text{tr}}$.

3.1 正写像の諸性質

Definition 3.1. $X \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ が半正定値 $X \geq 0$ とは、任意の $v \in \mathbb{C}^n$ に対して $(v, Xv) \geq 0$ なること。また、 $X \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ が正定値 $X > 0$ とは、任意の $v \in \mathbb{C}^n, v \neq 0$ に対して $(v, Xv) > 0$ なること。

特に、 X が半正定値であれば X はエルミートである：

Proposition 3.2. $X \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ に対して、任意の $v \in \mathbb{C}$ に対して $(v, Xv) \in \mathbb{R}$ であれば X はエルミート。

(証明) 恒等式 (偏極恒等式の一つ)

$$(x, Ay) = \frac{1}{4} \sum_{k=0}^3 i^{-k} (x + i^k y, A(x + i^k y)) \quad (3.1)$$

に注意. $(v, Xv) = (X^\dagger v, v)$ であるが、実である仮定より $(X^\dagger v, v) = (X^\dagger v, v)^* = (v, X^\dagger v)$. よって、任意の $v \in \mathbb{C}^n$ に対して $(v, (X - X^\dagger)v) = 0$. すると、上記の恒等式より、任意の $x, y \in \mathbb{C}^n$ に対して、 $(x, (X - X^\dagger)y) = 0$. \square

以下、写像

$$T : \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \quad (3.2)$$

は常に線形とする。つまり、

$$T(\alpha X + \beta Y) = \alpha T(X) + \beta T(Y) \quad (3.3)$$

が成立する。

Proposition 3.3. $X \geq 0$ のとき、任意の行列 A に対して、 $A^\dagger X A \geq 0$.

(証明)

$$\langle v | A^\dagger X A | v \rangle = \{ Av | X | Av \rangle \geq 0. \quad \square \quad (3.4)$$

Definition 3.4. $T : \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ が正 (positive) とは、半正定値性を保つこと。つまり、

$$X \geq 0 \Rightarrow T(X) \geq 0 \quad (3.5)$$

が成立すること。

例えば、行列の集合 $\{A_i\}_{i=1}^d, A_i \in \text{Mat}_{m,n}(\mathbb{C})$ に対して、

$$T(X) = \sum_{i=1}^d A_i^\dagger X A_i \quad (3.6)$$

は正。

Definition 3.5. $T : \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ に対して, 双対写像 $T^* : \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_m(\mathbb{C})$ を以下で定義する.

$$\text{tr}(YT(X)) = \text{tr}(T^*(Y)X), \quad X \in \text{Mat}_m(\mathbb{C}), Y \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}). \quad (3.7)$$

注意として, 双対写像 T^* は Hilbert-Schmidt 内積 $(X, Y)_{\text{HS}} = \text{tr}[X^\dagger Y]$ に関するエルミート共役 T^\dagger ではない. X, Y をエルミート行列に限れば T^* と T^\dagger は一致する.

Proposition 3.6.

$$T \text{ が } \mathfrak{s} \text{ 正} \Leftrightarrow T^* \text{ が } \mathfrak{s} \text{ 正}.$$

(証明) T が \mathfrak{s} 正とする. $X = \sum_i \lambda_i |i\rangle \langle i|$ とスペクトル分解すると,

$$\langle v | T^*(X) | v \rangle = \text{tr}[T^*(X) |v\rangle \langle v|] = \text{tr}[X \text{tr}[|v\rangle \langle v|]] = \sum_i \lambda_i \langle i | T(|i\rangle \langle i|) | i \rangle \geq 0 \quad (3.8)$$

より. 逆も同様. □

Definition 3.7. $T : \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ が \mathfrak{s} トレース保存とは,

$$\text{tr}[T(X)] = \text{tr}[X] \quad (3.9)$$

なること. $T : \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ が \mathfrak{s} unital (単位的) とは

$$T(1) = 1 \quad (3.10)$$

なること.

Proposition 3.8.

$$T \text{ が } \mathfrak{s} \text{ トレース保存} \Leftrightarrow T^* \text{ が } \mathfrak{s} \text{ unital}.$$

(証明) $\text{tr}[T^*(1)X] = \text{tr}[T(X)]$ より. □

任意のエルミート行列 X は半正定値行列の差で表現される.

Definition 3.9. エルミート行列 $X \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$, $X^\dagger = X$ に対して, スペクトル分解を $X = \sum_i \lambda_i |i\rangle \langle i|$ とする.

$$X_+ := \sum_{i, \lambda_i > 0} \lambda_i |i\rangle \langle i|, \quad X_- := \sum_{i, \lambda_i < 0} (-\lambda_i) |i\rangle \langle i|, \quad (3.11)$$

と定義する.

特に,

$$X = X_+ - X_-, \quad |X| = \sqrt{X^\dagger X} = X_+ + X_-, \quad (3.12)$$

である. 特に,

Proposition 3.10. 任意の行列 $A \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ は半正定値行列の線形和で表現される。

(証明) $A = (A + A^\dagger)/2 + i(A - A^\dagger)/(2i) = X + iY$ とすると,

$$A = X_+ - X_- + iY_+ - iY_-. \quad \square \quad (3.13)$$

Proposition 3.11. $T : \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ がエルミート性を保つ, つまり,

$$X^\dagger = X \Rightarrow T(X)^\dagger = T(X) \quad (3.14)$$

が成立するとき,

(i) $A \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ に対して, $T(A)^\dagger = T(A^\dagger)$.

(ii) T の固有値は $\lambda \in \mathbb{R}$ か, あるいは複素共役の対 (λ, λ^*) で出現する.

(iii) T の実固有値の固有ベクトルはエルミートに取ることができる.

(証明) (i) $A = X + iY, X^\dagger = X, Y^\dagger = Y$ とエルミート行列に分解すると,

$$T(A)^\dagger = T(X)^\dagger - iT(Y)^\dagger = T(X) - iT(Y) = T(A^\dagger). \quad (3.15)$$

(ii) $T(A) = \lambda A$ ならば $T(A^\dagger) = T(A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger$ より. (iii) $T(A + A^\dagger) = \lambda(A + A^\dagger)$ より. \square

Proposition 3.12. $T : \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ が正であれば, T はエルミート性を保つ.

(証明) $X = X_+ - X_-$ と半正定値行列に分解すると, $T(X) = T(X_+) - T(X_-)$ であるが, $T(X_+), T(X_-)$ は半正定値でありよってエルミート. \square

よって, 正写像 T の固有値は実か, あるいは複素共役の対として出現する.

次に, 行列ノルム, 演算子ノルムを導入する.

Definition 3.13. $v \in \mathbb{C}^n, A \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}), T : \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ に対して,

$$\|v\| := \sqrt{\sum_{i=1}^n |v_i|^2}, \quad (3.16)$$

$$\|A\| := \sup_{v \in \mathbb{C}^n, \|v\|=1} \|Av\|, \quad (3.17)$$

$$\|T\| := \sup_{A \in \text{Mat}_m(\mathbb{C}), \|A\|=1} \|T(A)\|. \quad (3.18)$$

Proposition 3.14. 行列 A のノルムは最大特異値で与えられる :

$$\|A\| = \sigma_{\max}(A). \quad (3.19)$$

(証明) $A = U\Sigma V^\dagger$ と特異値分解すると $\|Av\| = \|\Sigma v'\|, v' = V^\dagger v$ より. \square

Proposition 3.15.

$$\|Av\| \leq \|A\|\|v\|, \quad (3.20)$$

$$\|T(A)\| \leq \|T\|\|A\|. \quad (3.21)$$

(証明)

$$\|A\| = \sup_{v \in \mathbb{C}^n, v \neq 0} \frac{\|Av\|}{\|v\|} \geq \frac{\|Av\|}{\|v\|} \quad (3.22)$$

より. $\|T\|$ も同様. □

Proposition 3.16.

$$\|AB\| \leq \|A\|\|B\|, \quad (3.23)$$

$$\|T_1 T_2\| \leq \|T_1\|\|T_2\|. \quad (3.24)$$

(証明) 任意の $v \in \mathbb{C}^n$ に対して,

$$\|ABv\| \leq \|A\|\|Bv\| \leq \|A\|\|B\|\|v\| \quad (3.25)$$

より. $\|T_1 T_2\|$ も同様. □

Lemma 3.17.

$$\|A\| \leq 1 \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & A \\ A^\dagger & 1 \end{pmatrix} \geq 0. \quad (3.26)$$

(証明) $A = U\Sigma V^\dagger, \sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_n$ を特異値分解とする.

$$\begin{pmatrix} 1 & A \\ A^\dagger & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U & \\ & V \end{pmatrix} \bigoplus_i \begin{pmatrix} 1 & \sigma_i \\ \sigma_i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U^\dagger & \\ & V^\dagger \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

よって固有値の集合は $\{1 + \sigma_i, 1 - \sigma_i\}_i$. よって, $\begin{pmatrix} 1 & A \\ A^\dagger & 1 \end{pmatrix} \geq 0 \Leftrightarrow \sigma_1 \leq 1 \Leftrightarrow \|A\| \leq 1$. □

Theorem 3.18 (Russo=Dye). $T : \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ を正かつ *unital*とする.

$$\|T\| = 1. \quad (3.28)$$

(証明) 一般のユニタリ行列 $U \in U(n)$ に対して,

$$U = \sum_i e^{i\phi_i} P_i, \quad P_i^\dagger = P_i, \quad P_i^2 = P_i, \quad (3.29)$$

をスペクトル分解とする. すると,

$$\begin{pmatrix} 1 & T(U) \\ T(U)^\dagger & 1 \end{pmatrix} = \sum_i \begin{pmatrix} T(P_i) & e^{i\phi_i} T(P_i) \\ e^{-i\phi_i} T(P_i) & T(P_i) \end{pmatrix} = \sum_i \begin{pmatrix} 1 & e^{i\phi_i} \\ e^{-i\phi_i} & 1 \end{pmatrix} \otimes T(P_i). \quad (3.30)$$

最終式の各項は半正定値であるため⁸, $\begin{pmatrix} 1 & T(U) \\ T(U)^\dagger & 1 \end{pmatrix} \geq 0$ である. よって前補題より, $\|T(U)\| \leq 1$ である.

⁸ $A, B \geq 0$ のとき, $A \otimes B$ の固有値は $\lambda_i(A)\lambda_j(B) \geq 0$ であるため, $A \otimes B$ も半正定値.

さて一般に, $\|A\| = 1$ なる $A \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ に対して, $A = U\Sigma V^\dagger$, $1 = \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots$, を特異値分解とすると,

$$\sigma_i = \cos \theta_i = \frac{e^{i\theta_i} + e^{-i\theta_i}}{2} \quad (3.31)$$

より,

$$A = \frac{1}{2}U \text{diag}(e^{i\theta_1}, \dots, e^{i\theta_n})V^\dagger + \frac{1}{2}U \text{diag}(e^{-i\theta_1}, \dots, e^{-i\theta_n})V^\dagger =: \frac{1}{2}U_1 + \frac{1}{2}U_2 \quad (3.32)$$

と2つのユニタリ行列に分解できる. すると,

$$\|T(A)\| \leq \frac{1}{2}(\|T(U_1)\| + \|T(U_2)\|) \leq 1. \quad (3.33)$$

一方,

$$\|T\| \geq \|T(1)\| = \|1\| = 1 \quad (3.34)$$

であるので, $\|T\| = 1$. □

Corollary 3.19 (Russo=Dye). $T : \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ を正とする.

$$\|T\| = \|T(1)\|. \quad (3.35)$$

(証明) $P := T(1) \geq 0$ である. $P > 0$ のときは $T'(A) = P^{-1/2}T(A)P^{-1/2}$ はunital $T'(1) = 1$. よって,

$$\|T(A)\| = \|P^{1/2}T'(A)P^{1/2}\| \leq \|P\| \|T'(A)\| \leq \|P\| \|T'\| \|A\| = \|P\| \|A\|. \quad (3.36)$$

よって, $\|T\| \leq \|P\|$. 一方で, $\|T(1)\| = \|P\|$ であるから, $\|T\| = \|P\| = \|T(1)\|$.

P が0固有値を含む場合は, $\epsilon > 0$ を小さい実数として, $T_\epsilon(A) = A + \epsilon 1$ に対して $T_\epsilon(1) = P + \epsilon 1 > 0$. よって, $\|T_\epsilon\| = \|T_\epsilon(1)\|$ である. $\epsilon \rightarrow 0$ として, 望みの関係式を得る. □

Definition 3.20 (トレースノルム). $A \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ に対して,

$$\|A\|_{\text{tr}} = \text{tr} |A| \quad (3.37)$$

をトレースノルムと呼ぶ.

$\{\sigma_a\}_a$ を A の特異値とすると,

$$\|A\|_{\text{tr}} = \sum_{a=1}^n \sigma_a. \quad (3.38)$$

また, 任意の $U, V \in U(n)$ に対して,

$$\|UAV^\dagger\|_{\text{tr}} = \|A\|_{\text{tr}} \quad (3.39)$$

に注意.

以下, トレースノルムの正写像に対する縮小性を証明する. 準備として, まず, 以下の補題を示す.

Lemma 3.21. $A, B \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ に対して,

$$|\text{tr}(AB)| \leq \|A\|_{\text{tr}} \|B\|. \quad (3.40)$$

等号成立は $A = U|A|$ を極分解として, $B = U^\dagger$ のとき.

(証明) $A = U|A|$ と極分解する⁹. 線形写像

$$\phi_{|A|} : \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C}), \quad \phi_{|A|}(B) := \text{tr}(|A|B) \times 1_n = \text{tr}(\sqrt{|A|}B\sqrt{|A|}) \times 1_n \quad (3.41)$$

は positive であるから, Russo=Dye より, 任意の $B \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ に対して,

$$|\text{tr}(|A|B)| = \|\phi_{|A|}(B)\| \leq \|\phi_{|A|}\| \cdot \|B\| \leq \|\phi_{|A|}(1)\| \cdot \|B\| = \text{tr}|A| \cdot \|B\| = \|A\|_{\text{tr}} \cdot \|B\|. \quad (3.42)$$

よって,

$$|\text{tr}(AB)| = |\text{tr}(|A|BU)| \leq \|A\|_{\text{tr}} \cdot \|BU\| = \|A\|_{\text{tr}} \cdot \|B\|. \quad (3.43)$$

等号成立は $BU = 1_n$ のとき. □

これからトレースノルムの変分表示を得る:

Corollary 3.22.

$$\|A\|_{\text{tr}} = \sup_{B, \|B\|=1} |\text{tr}(AB)|. \quad (3.44)$$

以下を示す.

Theorem 3.23 (トレースノルムの縮小性). $T : \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ を正とする. $A \in \text{Mat}_m(\mathbb{C})$ に対して,

$$\|T(A)\|_{\text{tr}} \leq \|T^*(1)\| \cdot \|A\|_{\text{tr}}. \quad (3.45)$$

特に, T がトレースを保存するとき,

$$\|T(A)\|_{\text{tr}} \leq \|A\|_{\text{tr}}. \quad (3.46)$$

(証明)

$$\|T(A)\|_{\text{tr}} = \sup_{B, \|B\|=1} |\text{tr}(T(A)B)| = \sup_{B, \|B\|=1} |\text{tr}(AT^*(B))| \quad (3.47)$$

ここで,

$$|\text{tr}(AT^*(B))| \leq \|A\|_{\text{tr}} \cdot \|T^*(B)\| \leq \|A\|_{\text{tr}} \cdot \|T^*\| \cdot \|B\| = \|A\|_{\text{tr}} \cdot \|T^*(1)\| \cdot \|B\| \quad (3.48)$$

より,

$$\|T(A)\|_{\text{tr}} \leq \|A\|_{\text{tr}} \cdot \|T^*(1)\| \quad (3.49)$$

を得る. □

⁹ $A = U\Sigma V^\dagger$ を特異値分解として, $A = (UV^\dagger)V\Sigma V^\dagger$ が極分解.

3.2 Perron=Frobeniusの定理

有限次元正線形写像に対するPerron=Frobeniusの定理を, [7]に従って証明する. 無限次元のBanach空間におけるPerron=Frobeniusの定理の拡張である, Krein=Rutmanの定理の, 有限次元版である.

Definition 3.24. $T : \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ に対して,

- $\text{Sp}(T) := \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \lambda - T \text{が非可逆}\}$ を T のスペクトル集合と呼ぶ.
- $\rho_T = \max_{\lambda \in \text{Sp}(T)} |\lambda|$ を T のスペクトル半径と呼ぶ.

証明したい主張は次. 正線形写像 $T : \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ に対して,

- $\rho_T \in \text{Sp}(T)$.
- $\exists X \geq 0$ s.t. $T(X) = \rho_T X$.

つまり, 正写像であればスペクトル半径は固有値のひとつであり, さらにその固有ベクトルは正に取ることができる.

証明はやや長いので, 先に流れを書く.

- T が“既約”という良い条件を満たす場合に, より強い主張を示す.
- Hereditaryという性質を導入する.
- T が既約であれば $(1 + T)^{n-1} > 0$ を示す.
- T が既約であれば $T(X) = \rho_T X, X > 0$ なる固有値, 固有ベクトルが存在して一意であることを示す.
- 一般の正写像を, 既約な正写像の極限と見る.

本節では, 特定の n を指す場合を除き, $M = \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ と略し, 線形写像 $T : \langle \rightarrow M$ は常に正とする. また, 半正定値行列全体の集合を

$$M_+ := \{X \in M \mid X \geq 0\} \tag{3.50}$$

と書く.

Definition 3.25. 部分代数 $M' \subset M$ がhereditaryとは, M' が以下の性質を持つときと定義する.

$$0 \leq X \leq Y \text{ かつ } y \in M' \text{ ならば } X \in M'. \tag{3.51}$$

Proposition 3.26. $p \in M$ を直交射影とする. 部分代数 pMp はhereditary.

証明に入る前に, 例を見る. $M = \text{Mat}_2(\mathbb{C})$ とする. このとき, 半正定値行列全体の集合は,

$$M_+ = \{x_0 + \mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\sigma} \mid x_0 \geq |\mathbf{x}|\} \tag{3.52}$$

で与えられる, 円錐内部とその境界である. すると, 条件 $0 \leq X \leq Y$ は X は原点を頂点とする円錐内に, Y は X を中心とする円錐内にいることを意味する. 図 2 [a]を見よ. さて直交射影の例として,

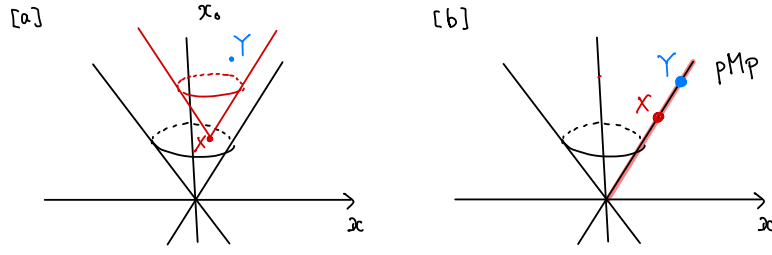


Figure 2

11成分への射影 $p = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ を考えよう. このとき,

$$(pMp)_+ = \{x_0 + x_3\sigma_3 \mid x_0 = x_3\} \quad (3.53)$$

であるので, $Y \in (pMp)_+$ は円錐 M_+ の“縁”上に存在する. よって $Y \geq X$ が満たされるためには, X も M_+ の“縁”に存在する必要がある, $X \in (pMp)_+$ が示される. 図 2 [b] を見よ.

(証明. [10]) $0 \leq X \leq pYp$ かつ $Y \in M$ とする. すると,

$$0 \leq (1-p)X(1-p) \leq (1-p)pYp(1-p) = 0 \quad (3.54)$$

より, $(1-p)\sqrt{X} = \sqrt{X}(1-p) = 0$. よって, $(1-p)X = X(1-p) = 0$ より, $X \in pMp$. \square

正線形写像 T が既約であることを以下のように定義する.

Definition 3.27. T が既約とは, 以下を満たす非自明な, つまり $p = 0$ でも $p = 1$ でもない直交射影が存在しないこと.

$$T(pMp) \subset pMp. \quad (3.55)$$

群 G の表現 $\rho : G \rightarrow V$ (V は表現ベクトル空間) が既約で既約であるとは, ρ_g がブロック対角化されない, つまり, 非自明な射影 p が存在して $\rho_g(pV) \subset pV$ とはならないことだったことを思い出そう. Perron=Frobenius の定理における既約性の, 正線形写像に対する一般化である.

条件 $T(pMp) \subset pMp$ はより具体的に p に関する性質として言い換えることができる.

Lemma 3.28. $p \in M$ を直交射影とする.

$$T(pMp) \subset pMp \Leftrightarrow \exists \lambda > 0 \text{ s.t. } T(p) \leq \lambda p. \quad (3.56)$$

(証明 ¹⁰) 基底を適当に選んで $p = \begin{pmatrix} 1_r & \\ & 0 \end{pmatrix}$ として良い. $X \in pMp$ とする. つまり,

$$X = \begin{pmatrix} X' & O \\ O & O \end{pmatrix}, \quad X' \in \text{Mat}_r(\mathbb{C}), \quad (3.57)$$

なる表式. T の線形性と任意の行列は半正定値行列の線形和で表現できることより, $X \geq 0$ として良い. X のスペクトル分解を

$$X = \sum_{a=1}^q \lambda_a p_a, \quad \lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_q > 0, \quad q \leq r \quad (3.58)$$

¹⁰北村侃さんに教えて頂きました. ありがとうございます.

とする.

$$p = \sum_{a=1}^r p_a \quad (3.59)$$

に注意. すると,

$$0 \leq \lambda_q p \leq X \leq \lambda_1 p \quad (3.60)$$

が成立.

(\Leftarrow) 任意の $X \geq 0, X \neq 0$ に対して, ある λ_1 が存在して, $0 \leq T(X) \leq \lambda_1 T(p) \leq \lambda_1 \lambda p \in (pMp)_+$. よって hereditary より $T(X) \in pMp$.

(\Leftarrow) ある $X \geq 0, X \neq 0$ に対して, $0 \leq \lambda_q T(p) \leq T(X) \in (pMp)_+$ が成立. よって hereditary より $\lambda_q T(p) \in (pMp)_+$, つまり, $T(p) \in (pMp)_+$. $T(p) \geq 0$ かつ $T(p) \in pMp$ であるから再びスペクトル分解を

$$T(p) = \sum_{a=1}^s \xi_s p'_a, \quad \xi_1 \geq \cdots \geq \xi_s > 0, \quad s \leq r, \quad (3.61)$$

とすると, $T(p) \leq \xi_1 p$. □

以下が示される.

Proposition 3.29. T を既約とする.

(i) $T(1) > 0$.

(ii) $X > 0$ ならば $T(X) > 0$.

(証明) (i) $T(1)$ がゼロ固有値を含むと仮定する. $\text{im } T(1)$ への直交射影を p とすると, $T(p) \leq T(1) \in pMp$ より, ある $\lambda > 0$ が存在して $T(1) \leq \lambda p$. これは T の既約性に反する.

(ii) $X > 0$ ならばある $\epsilon > 0$ が存在して $X > \epsilon 1_n$. よって, $T(X) > \epsilon T(1) > 0$. □

さらに T の既約性を言い換える.

Definition 3.30. T が真に正 (strictly irreducible) $T > 0$ とは, 任意の $X \geq 0, X \neq 0$ に対して $T(X) > 0$ なることと定義する.

Hilbert-Schmidt 内積を,

$$(A, B)_{\text{HS}} := \text{tr} [A^\dagger B], \quad A, B \in \text{Mat}_n(X), \quad (3.62)$$

と定義する.

Proposition 3.31.

- $X, Y \geq 0$ ならば $(X, Y)_{\text{HS}} \geq 0$.
- $X > 0, Y \geq 0$ ($X \geq 0, Y > 0$) ならば $(X, Y)_{\text{HS}} > 0$.
- $T > 0$ と任意の $X, Y \geq 0, X, Y \neq 0$ に対して $(Y, T(X))_{\text{HS}} > 0$ は等価.

(証明) 1, 2 番目は $\text{tr}[XY] = \text{tr}[\sqrt{Y}X\sqrt{Y}] \geq 0$ より. 3 番目の (\Rightarrow) は $\text{tr}[YT(X)] = \text{tr}[\sqrt{T(X)}Y\sqrt{T(X)}]$ より $T > 0, X \neq 0$ であれば $T(X) > 0$ は正定値であるので, $Y \neq 0$ であれば $\text{tr}[\sqrt{T(X)}Y\sqrt{T(X)}] > 0$. (\Leftarrow) は, 任意の $v \in \mathbb{C}^n$ に対して, $Y = |v\rangle\langle v|$ とすると, $\langle v|T(X)|v\rangle > 0$ より, $T(X) > 0$. \square

Lemma 3.32.

$$T \text{ が既約} \Leftrightarrow (1+T)^{n-1} > 0. \quad (3.63)$$

(証明) (\Rightarrow) $Y \geq 0, Y \neq 0$ に対して, $(1+T)^{n-1}(Y)$ を計算する. $Y > 0$ であれば $(1+T)(Y) > 0$ であるので Y は 0 固有値を含むと仮定する. $v \in \mathbb{C}^n$ に対して, $(1+T)(Y)v = 0$ ならば $\langle v|(1+T)(Y)|v\rangle = 0$ より, $\langle v|Y|v\rangle = 0$ から $Yv = 0$. よって, $\ker(1+T)(Y) \subset \ker Y$ は常に成立.

$\ker(1+T)(Y) = \ker Y$, つまり, $\ker Y \subset \ker(1+T)(Y)$ を仮定しよう. $Yv = 0$ ならば $(1+T)(Y)v = T(Y)v$ であるので, $\ker Y \subset \ker T(Y)$. これは, $\text{im } T(Y) \subset \text{im } Y$ と同値. p を $\text{im } Y$ への直交射影, つまり, $Y = \sum_{a=1}^r \lambda_a p_a$, $r < n$ をスペクトル分解とすると, $p = \sum_{a=1}^r p_a$. $T(p) \in \text{im } Y = \text{im } p$ より, $T(p)$ の最大固有値を ξ_1 とすると $T(p) \leq \xi_1 p$. よって補題 3.28 より $T(pMp) \subset pMp$. T は既約かつ $Y \neq 0$ であるので, $p = 1$. よって Y は非可逆となり矛盾する. したがって, $\ker(1+T)(Y) = \ker Y$ は成立せず, $\ker(1+T)(Y) \subsetneq \ker Y$, つまり $(1+T)(Y)$ のランクは Y のランクより真に大きい. したがって, 非可逆行列 Y に対して少なくとも $n-1$ 回 $(1+T)$ を作用させると, $(1+T)^{n-1}(Y)$ はフルランク, つまり, $(1+T)^{n-1}(Y) > 0$ である.

(\Leftarrow) 背理法. T が可約と仮定すると, ある直交射影 $p \neq 0, 1$ とある $\lambda > 0$ が存在して $T(p) \leq \lambda p$ であるが, このとき

$$0 < (1+T)^{n-1}(p) \leq (1+\lambda)^{n-1}p \quad (3.64)$$

となり最右辺はフルランクでないから矛盾. \square

既約な正写像の例をひとつ与える.

• 例.

$$T(A) := \frac{1}{n} \text{tr}[A] 1_n \quad (3.65)$$

は既約. なぜなら, $T^2 = T$ より, $(1+T)^{n-1} = 1 + (\text{const.})T > 0$ より.

既約性のさらに別の表現方法を導入する.

Lemma 3.33. T が既約であることと以下は同値.

- 任意の $(Y, X)_{\text{HS}} = 0$ なる非ゼロの半正定値行列 $X, Y \geq 0, X, Y \neq 0$ に対して, ある $k \in \mathbb{N}$ が存在して $(Y, T^k(X))_{\text{HS}} > 0$.

Perron=Frobenius の定理における既約性の定義, つまり, 任意の足の対 (i, j) に対して, 行列の非ゼロ成分の経路 $i i_1 \rightarrow i_1 i_2 \rightarrow \dots \rightarrow i_k j$ が存在する, という性質に対応する.

(証明) (\Rightarrow) T の既約性より $X, Y \geq 0, X, Y \neq 0$ に対して, $(Y, (1+T)^{n-1}(X))_{\text{HS}} > 0$. 展開して, $(Y, X)_{\text{HS}} = 0$ より,

$$\left(Y, \left\{ (n-1)T + \frac{1}{2}(n-1)(n-2)T^2 + \dots + T^{n-1} \right\} (X) \right)_{\text{HS}} > 0 \quad (3.66)$$

である. 全ての項は非負なので, 少なくともひとつの $k \in \{1, \dots, n-1\}$ に対して $T^k(X) > 0$.

(\Leftarrow) 対偶を示す. ある直交射影 $p, p \neq 0, 1$ が存在して $T(pMp) \subset pMp$ とする. すると, 任意の $k > 0$ に対して $T^k(p) \subset pMp$ より $T^k(p)p = T^k(p)$. したがって, 任意の $k > 0$ に対して, $0 = \text{tr}[(1 -$

$p)T^k(p) = (1-p, T^k(p))_{\text{HS}}$. すると, $X = p, Y = 1-p$ なる $(Y, X)_{\text{HS}} = 0$ なる非ゼロの半正定値行列の対に対して任意の $k \in \mathbb{N}$ に対して $(Y, T^k(X))_{\text{HS}} = 0$. \square

双対写像 T^* は, エルミート行列に限ると Hilbert-Schmidt 内積から定義されたエルミート共役と等価であった. X, Y がエルミートのとき, $(X, T^k(Y))_{\text{HS}} = \text{tr}[XT^k(Y)] = \text{tr}[T^{*k}(X)Y] = \text{tr}[YT^{*k}(X)] = (Y, T^{*k}(X))_{\text{HS}}$ より以下を得る.

Corollary 3.34.

$$T \text{が既約} \Leftrightarrow T^* \text{が既約.} \quad (3.67)$$

$X \in M_+$ において定義される以下の実関数を導入する.

$$r : M_+ \rightarrow \mathbb{R}, \quad r(X) := \sup\{\lambda \in \mathbb{R} | T(X) \geq \lambda X\}. \quad (3.68)$$

さらにこの上限を

$$r := \sup_{X \in M_+} r(X). \quad (3.69)$$

と書く. Perron-Frobeniusの定理は以下の補題より従う.

Lemma 3.35 ([7]). T を既約とする.

- (i) 上限 r を実現する $X = Z$ は正定値 $Z > 0$.
- (ii) $T(Z) = rZ$.
- (iii) $\lambda = r$ なる固有空間は1次元.
- (iv) $r = \rho_T$ (スペクトル半径).

(証明) (i) まず上限値を実現する $X \in M_+$ の存在を示す. $r(aX) = a \times r(X), a > 0$ より, $\text{tr}[X] = 1$ と仮定してよい. “球面”

$$S = \{X \in M_+ | \text{tr}[X] = 1\} \quad (3.70)$$

はコンパクト. したがって, S に制限した関数 $r|_S$ が連続であれば S 内で最大値を取る. しかし, S において r は連続とは限らない.

関数 $r(X)$ であるが, $X > 0$ であれば $T(X) > 0$ より (命題 3.29)

$$r(X) = \|T(X)^{-\frac{1}{2}}XT(X)^{-\frac{1}{2}}\|^{-1} \quad (3.71)$$

と関数系が決まるので, 正定値行列全体の集合 $\{X \in M_+ | X > 0\}$ においては連続. 上限 r は $X > 0$ で達成されるかを見るために,

$$N := (1+T)^{n-1}S = \{(1+T)^{n-1}(X) > 0 | \text{tr}[X] = 1\} \quad (3.72)$$

を導入する. N はコンパクトかつ正定値行列 $X > 0$ のみで構成される. よって N への制限 $r|_N$ は N 内のある点 $Z > 0$ で最大値を取る. では Z は M_+ 全体における上限値か?

$X \in S, Y = (1+T)^{n-1}(X) \in N$ とする. $r(X)$ の定義より $T(X) - r(X)X \geq 0$ であるから,

$$(T - r(X))(Y) = (T - r(X))(1+T)^{n-1}(X) = (1+T)^{n-1}(T(X) - r(X)X) \geq 0. \quad (3.73)$$

$T(Y) \geq r(X)Y$ であるので,

$$r(Y) \geq r(X) \text{ for all } X \in S. \quad (3.74)$$

したがって,

$$r \geq \max_{X \in N} r(X) \geq \sup_{X \in S} r(X) = \sup_{X \in M_+} = r \quad (3.75)$$

より,

$$r = \max_{X \in N} r(X) \quad (3.76)$$

を得る. よって, ある正定値行列 $Z > 0$ で上限値 r が達成される.

(ii) 背理法. $T(Z) - rZ \neq 0$ を仮定する. $W = (1 + T)^{n-1}(Z)$ とすると,

$$T(W) - rW = (1 + T)^{n-1}(T(Z) - rZ) > 0 \quad (3.77)$$

となるが, これは $r(W) > r$ を意味するので, r の最大性に反する.

(iii) Z に比例しない別の固有ベクトル Z' が存在して $T(Z') = rZ'$ と仮定する. r は実固有値であるので, Z' はエルミート行列として良い (命題 3.11). すると, $Z^{-\frac{1}{2}}Z'Z^{-\frac{1}{2}}$ のスペクトル分解を

$$Z^{-\frac{1}{2}}Z'Z^{-\frac{1}{2}} = \sum_{a=1}^n \lambda_a p_a, \quad \lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_n \quad (3.78)$$

とすると

$$\lambda_1 - Z^{-\frac{1}{2}}Z'Z^{-\frac{1}{2}} = \sum_{a=2}^n (\lambda_1 - \lambda_a) p_a \geq 0 \quad (3.79)$$

はフルランクでない. よって $\lambda_1 Z - Z'$ もフルランクでないが,

$$0 < (1 + T)^{n-1}(\lambda_1 Z - Z') = (1 + r)^{n-1}(\lambda_1 Z - Z') \quad (3.80)$$

より矛盾.

(iv)

$$\tilde{T}(A) := \frac{1}{r} Z^{-\frac{1}{2}} T(Z^{\frac{1}{2}} A Z^{\frac{1}{2}}) Z^{-\frac{1}{2}} \quad (3.81)$$

は $\tilde{T}(1) = 1$ より unital. よって $\|\tilde{T}\| = 1$ (定理 3.18). $T(A) = \alpha A$ とすると, $\tilde{T}(Z^{-\frac{1}{2}} A Z^{-\frac{1}{2}}) = (\alpha/r) Z^{-\frac{1}{2}} A Z^{-\frac{1}{2}}$. よって,

$$1 = \|T\| \geq \left| \frac{\alpha}{r} \right|. \quad \square \quad (3.82)$$

さらに, $\lambda \neq r$ なる固有値の固有ベクトルは半正定値行列でない.

Lemma 3.36 ([7]). T を既約とする. $Y \geq 0, Y \neq 0$ が T の固有値 α なる固有ベクトルであるならば, $\alpha = r$.

(証明) 双対 T^* を使う. T^* も既約. T と同様に,

$$r^* := \sup_{X \in M_+} \sup\{\lambda \in R \mid T^*(X) \geq \lambda X\} \quad (3.83)$$

とすると, ある $Z^* > 0$ が存在して $T^*(Z^*) = r^* Z^*$. すると,

$$r(Z^*, Z)_{\text{HS}} = (Z^*, T(Z))_{\text{HS}} = (T^*(Z^*), Z)_{\text{HS}} = r^*(Z^*, Z)_{\text{HS}} > 0 \quad (3.84)$$

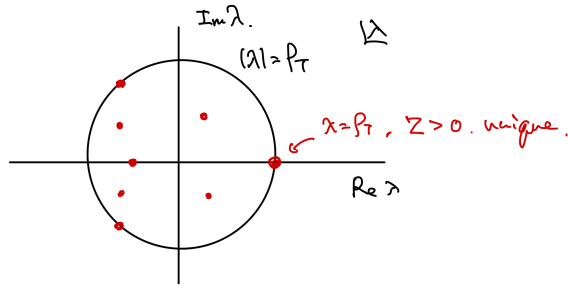


Figure 3

よって $r = r^*$. $T(Y) = \alpha Y, Y \geq 0, Y \neq 0$ とすると,

$$\alpha(Z^*, Y)_{\text{HS}} = (Z^*, T(Y))_{\text{HS}} = (T^*(Z^*), Y)_{\text{HS}} = r(Z^*, Y)_{\text{HS}} \quad (3.85)$$

であるが, $Z^* > 0$ であるので $(Z^*, Y)_{\text{HS}} > 0$ (命題 3.31). よって $\alpha = r$. □

結局, 以下が示された.

Theorem 3.37 ([7]. (有限次元 Krein=Rutman の定理)). $T : \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ を既約な正線形写像とする.

(i) $\rho_T \in \text{Sp}(T)$.

(ii) $\lambda = \rho_T$ なる固有空間は非縮退かつ固有ベクトルは正定値:

$$T(Z) = \rho_T Z, \quad Z > 0. \quad (3.86)$$

(iii) 固有値 $\lambda \neq \rho_T$ なる固有ベクトルは半正定値でない.

既約な正線形写像 T に対して, 図 3 のようなスペクトルが得られる.

Corollary 3.38. $T : \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ を既約な正線形写像とする.

(i) $\rho_T \in \text{Sp}(T)$.

(ii) 固有値 $\lambda = \rho_T$ なる固有ベクトルは半正定値に取ることができる.

(証明 [5]) 既約な正線形写像全体の集合は, 正線形写像全体の集合において稠密である. 実際, 任意の正線形写像 T と既約な正線形写像 S に対して, $T_\epsilon = T + \epsilon S$ は,

$$(1 + T_\epsilon)^{n-1} = (1 + \epsilon S)^{n-1} + \dots > 0 \quad (3.87)$$

より既約. (T_1, T_2 が正のとき, $T_1 \circ T_2$ も正に注意.) 任意の T に対していくらでも近くに既約な T_ϵ が存在する. 既約な T_ϵ に対して定理 3.37 を適用して,

$$T_\epsilon(Z_\epsilon) = \rho_{T_\epsilon} Z_\epsilon, \quad Z_\epsilon > 0. \quad (3.88)$$

$\epsilon \rightarrow +0$ として,

$$T(Z) = \rho_T Z, \quad Z \geq 0. \quad (3.89)$$

(Z は正定値とは限らず, また $\lambda = \rho_T$ なる固有空間は非縮退とは限らない.) □

既約性は以下の“相似変換”に対して保たれる。

Proposition 3.39. $T : \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ を既約な正線形写像とする。任意の $c > 0$ と任意の $Q \in \text{GL}_n(\mathbb{C})$ に対して、

$$\tilde{T}(A) = cQ^{-1}T(QAQ^\dagger)(Q^\dagger)^{-1} \quad (3.90)$$

とする。

(i) \tilde{T} は既約。

(ii) $\tilde{T}^*(A) = cQ^\dagger T^*((Q^{-1})^\dagger A Q^{-1})Q$.

(証明) (i) q を直交射影とし、 $\tilde{T}(q) \leq \lambda q, \lambda > 0$ とする。これは $cT(QqQ^\dagger) \leq \lambda QqQ^\dagger$ と等価。すると、 $\text{im } QqQ^\dagger$ への直交射影 p は T を“割る”。つまり、

$$QqQ^\dagger = \sum_{a=1}^r \lambda_a p_a, \quad \lambda_1 \geq \cdots \lambda_r > 0, \quad (3.91)$$

をスペクトル分解として、 $p = \sum_{a=1}^r p_a$ とすると、 $\lambda_r p \leq QqQ^\dagger \leq \lambda_1 p$ より $\lambda_r T(p) \leq \lambda_1 p$ 。よって $c\lambda_r T(p) \leq \lambda\lambda_r p$ 。 T は既約であるから、 $p = 0, 1$ 。

(ii) 単純計算。

$$(\tilde{T}^*(A), B)_{\text{HS}} = (A, \tilde{T}(B))_{\text{HS}} = \text{tr}[A^\dagger cQ^{-1}T(QBQ^\dagger)(Q^\dagger)^{-1}] \quad (3.92)$$

$$= \text{tr}[c(Q^\dagger)^{-1}A^\dagger Q^{-1}T(QBQ^\dagger)] = \text{tr}[cT^*[(Q^\dagger)^{-1}A^\dagger Q^{-1}]QBQ^\dagger] = \text{tr}[cQ^\dagger T^*[(Q^\dagger)^{-1}A^\dagger Q^{-1}]QB] \quad (3.93)$$

より。 □

Proposition 3.40 ([2, 5]. 標準化). $T : \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ を既約な正線形写像とする。相似変換により、

(i) $T(1) = 1$,

(ii) $T^*(\Lambda) = \Lambda, \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n), \lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_n > 0, \text{tr}[\Lambda] = 1$,

とできる。

(証明)

$$T(Z) = \rho_T Z > 0, \quad T^*(Z^*) = \rho_T Z^* > 0 \quad (3.94)$$

とする。相似変換

$$T_1(A) := \rho_T^{-1} Z^{-1/2} T(Z^{1/2} A Z^{1/2}) Z^{-1/2} \quad (3.95)$$

とすると、 $T_1(1) = 1$,

$$T_1^*(Z^{1/2} Z^* Z^{1/2}) = Z^{1/2} Z^* Z^{1/2}. \quad (3.96)$$

$Z^{1/2} Z^* Z^{1/2} = U\Lambda U^\dagger$ と対角化して、

$$T_2(A) := U^\dagger T_1(UAU^\dagger)U \quad (3.97)$$

とすると、 $T_2(1) = 1$ かつ $T_2(\Lambda) = \Lambda$ 。($\text{tr}[\Lambda] = 1$ は定数倍をかける。) □

4 TI-MPS

本節より、並進対称性のあるMPSを調べる。

4.1 TI-MPSの存在と標準形

1次元スピン系におけるハミルトニアンが周期境界条件のもとで定義されているとき、その固有状態を記述するMPSは何らかの意味で並進対称性をもつことが期待されるため、行列 $\{A_i^{[m]}\}$ のサイト依存性が消去できると期待できる。

Definition 4.1. 行列 $A_i^{[m]}$ が m に依存しないMPSを、translational invariant (TI)-MPSと呼ぶ。

並進演算子を

$$\hat{\text{Tr}} |i_1 \cdots i_N\rangle := |i_N i_1 \cdots i_{N-1}\rangle \quad (4.1)$$

と定義する。本ノートでは、Bloch運動量が0、つまり、 $\hat{\text{Tr}} |\psi\rangle = |\psi\rangle$ なる状態のみを扱う。

Theorem 4.2. $\hat{\text{Tr}} |\psi\rangle = |\psi\rangle$ なる状態はTI-MPS表現を有する。

論理的にはこれは非自明な命題であることに注意。

(証明) $|\psi\rangle$ のOBC-MPSを

$$|\psi\rangle = A_{i_1}^{[1]} \cdots A_{i_N}^{[N]} |i_1 \cdots i_N\rangle \quad (4.2)$$

とする。並進不変性より任意の k に対して

$$|\psi\rangle = \text{tr} [A_{i_1}^{[k+1]} \cdots A_{i_N}^{[k+N]}] |i_1 \cdots i_N\rangle. \quad (4.3)$$

平均化する。以下がTI-MPS.

$$B_i := N^{-\frac{1}{N}} \begin{pmatrix} 0 & A_i^{[1]} & & & & \\ & 0 & A_i^{[2]} & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & 0 & A_i^{[N-1]} & \\ A^{[N]} & & & & 0 & \end{pmatrix}. \quad \square \quad (4.4)$$

したがって、並進不変な状態 $\hat{\text{Tr}} |\psi\rangle = |\psi\rangle$ は単一サイトにおける d 個の正方行列の集合 $\{A_i\}_{i=1}^d$ によって表現できる。

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1 \cdots i_N} \text{tr} [A_{i_1} \cdots A_{i_N}] |i_1 \cdots i_N\rangle. \quad (4.5)$$

行列 $\{A_i\}_i$ の何らかの分類を実行して、「ギャップのある縮退のない基底状態」の分類を実行したい。排除したい状態として以下がある。

- 例.

$$A_\uparrow = \begin{pmatrix} 1 & \\ & 0 \end{pmatrix}, \quad A_\downarrow = \begin{pmatrix} 0 & \\ & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

状態はマクロな状態の重ね合わせである。

$$|\psi\rangle = |\uparrow \cdots \uparrow\rangle + |\downarrow \cdots \downarrow\rangle. \quad (4.7)$$

より一般に、

$$A_i = \begin{pmatrix} B_i & D_i \\ & C_i \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

のように上三角ブロック行列となる場合を排除したい。

• 例.

$$A_\uparrow = \begin{pmatrix} & 1 \\ & \end{pmatrix}, \quad A_\downarrow = \begin{pmatrix} 1 & \\ & \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

このとき、

$$|\psi\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \cdots\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \cdots\rangle \quad (4.10)$$

となり、並進不変でないマクロな状態の重ね合わせであり、線形和を取ることで並進不変性が回復している。後述するが、転送行列の固有値の構造に制限をつけることで排除できる。

上に挙げたような状態を排除したい。TI-MPS $\{A_i\}_i$ に対して転送行列を

$$T_A(X) := \sum_{i=1}^d A_i X A_i^\dagger, \quad (4.11)$$

$$T_A^*(X) := \sum_{i=1}^d A_i^\dagger X A_i, \quad (4.12)$$

と定義する。これら転送行列に対して良い条件をつけることで、望みの状態のクラスを与える。

Proposition 4.3. 転送行列 T_A, T_A^* は正線形写像である。

(証明) 線形性は自明。正性は $X \geq 0$ を $X = \sum_a \lambda_a P_a$ とスペクトル分解して、

$$T_A(X) = \sum_{i,a} A_i P_a A_i^\dagger \quad (4.13)$$

であるが、 $A_i P_a A_i^\dagger \geq 0$ であるから (命題 3.3) $T(X) \geq 0$. □

事実として、 T_A はcompletely positive であることが知られている。以下の議論は T の正性のみを用いる。

TI-MPSの標準形を導入する。 $\{A_i\}_i$ をTI-MPSとする。 $\{A_i\}_i$ が既約 (可約) であることを、 T_A が既約 (可約) であるときと定義する。

Proposition 4.4. $\{A_i\}_i$ が可約ならば、状態 $|\psi\rangle$ を変えずにTI-MPSを

$$A_i = \begin{pmatrix} B_i & \\ & C_i \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

とブロック対角化できる。

(証明) T_A の可約性よりある直交射影 $p \neq 0, 1$ が存在して $T_A(pMp) \subset pMp$. T_A の部分代数 pMp への制限も正線形であるから, $Y \in pMp$ が存在して $T_A(Y) = \rho_{T_A|_{pMp}} Y$ なる非ゼロのフルランクでない半正定値行列 $Y \geq 0$ が存在する.

$$Y = \sum_{a=1}^r \lambda_a |a\rangle \langle a| \quad (4.15)$$

とスペクトル分解すると,

$$\sum_{a=1}^r \sum_{i=1}^d A_i |a\rangle \langle a| A_i^\dagger = \sum_{a=1}^r \lambda_a |a\rangle \langle a|. \quad (4.16)$$

すると一般論より, $\{A_i |a\rangle\}_{i,a}$ の張るベクトル空間と $\{|a\rangle\}_a$ の張るベクトル空間は一致する. $P_Y = \sum_{a=1}^r |a\rangle \langle a|$ を $\text{im } Y$ への直交射影とすると, $A_i |a\rangle \in \text{im } Y$ ならば $A_i |a\rangle = P_Y A_i |a\rangle$ より, $A_i P_Y = P_Y A_i P_Y$. すると $P_Y = \begin{pmatrix} 1_r & \\ & 0 \end{pmatrix}$ なる基底で

$$A_i = \begin{pmatrix} B_i & D_i \\ O & C_i \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

なる表式. 非対角項はトレースを取ると落ちるから,

$$A_i \mapsto \begin{pmatrix} B_i & O \\ O & C_i \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

と置き換えても状態 $|\psi\rangle$ は不変. □

Proposition 4.5. 相似変換(3.90)は状態 $|\psi\rangle$ を変えない.

(証明)

$$A_i \mapsto \sqrt{c} Q^{-1} A_i Q \quad (4.19)$$

に対応する. Q はキャンセルし, \sqrt{c} は定数倍. □

上記2つの命題を合わせると, TI-MPSの標準形を得る.

Theorem 4.6 ([2]. TI-MPSの標準形 (canonical form)). TI-MPS $\{A_i\}_i$ は以下の標準形を持つ.

$$A_i = \bigoplus_{\alpha} \rho_{\alpha} A_i^{\alpha}, \quad \rho_{\alpha} > 0. \quad (4.20)$$

ここで各ブロック $\{A_i^{\alpha}\}_i$ は既約かつカノニカル条件

$$\sum_i A_i^{\alpha} A_i^{\alpha \dagger} = 1_{D_{\alpha}}, \quad (4.21)$$

$$\sum_i A_i^{\alpha \dagger} \Lambda^{\alpha} A_i^{\alpha} = \Lambda^{\alpha}, \quad \Lambda = \text{diag}(\lambda_1^{\alpha}, \dots, \lambda_{D_{\alpha}}^{\alpha}), \quad \text{tr}[\Lambda^{\alpha}] = 1, \quad (4.22)$$

を満たす.

4.2 Injectivityと強既約性

既約性は「ギャップのある縮退のない基底状態」のクラスの特徴づけとしては不十分である. 望ましくない例(4.9)の転送行列 T_A のスペクトルは $\text{Sp}(T_A) = \{1, -1, 0, 0\}$ である.

相関関数の振る舞いから、転送行列 T_A の望ましいスペクトルの構造に制限をかけることができる。事実として、ギャップのある基底状態においては、任意の2点関数は指数関数的に減衰することが知られている [11]。サイト x, y 近傍にそれぞれ台を持つ任意の演算子の対 \hat{O}_x, \hat{O}'_y に対する相関関数

$$\langle \psi | \hat{O}_x \hat{O}'_y | \psi \rangle \quad (4.23)$$

の主要部には $|y-x| \rightarrow \infty$ で $(T_A)^{|y-x|}$ の2番目に絶対値が大きな固有値が効く。よって、 $|\lambda| = \rho_{T_A}$ なる固有値が2個以上存在する場合は長距離秩序を示す相関関数が存在するため、このような場合を排除したい。

Definition 4.7 (強既約 (strongly irreducible [8])). TI-MPS $\{A_i\}_i$ が強既約とは、既約でかつ、 $|\lambda| = \rho_{T_A}$ ならば $\lambda = \rho_{T_A}$ なるとき。

$\{A_i\}_i$ が強既約であれば、 T_A^N は十分大きな N で“切れる”。 T_A のスペクトル分解は、 $T_A(Z) = \rho_{T_A} Z, T_A^*(Z^*) = \rho_{T_A} Z^*, \text{tr}[Z^* Z] = 1$ として、

$$T_A(\cdot) = \rho_{T_A} \left[Z \text{tr}[Z^* \cdot] + \sum_{\lambda} \frac{\lambda}{\rho_{T_A}} P_{\lambda}(\cdot) \right] \quad (4.24)$$

より、

$$T_A^N \sim (\rho_{T_A})^N [Z \text{tr}[Z^* \cdot] + \dots]. \quad (4.25)$$

ここで第2項以降は N の指数関数的に減衰する。特に、 $N \rightarrow \infty$ で

$$T_A^N(X) \sim (\rho_{T_A})^N \text{tr}[Z^* X]. \quad (4.26)$$

強既約性は $\{A_i\}_i$ の代数的な性質で言い換えることができる。まず、 $L \in \mathbb{N}$ に対して線形写像

$$\Gamma_L : \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \rightarrow (\mathbb{C}^d)^{\otimes L}, \quad X \mapsto \Gamma_L(X) := \sum_{i_1, \dots, i_L} \text{tr}[X A_{i_1} \cdots A_{i_L}] |i_1 \cdots i_L\rangle \quad (4.27)$$

を導入する。

Proposition 4.8 ([2]).

$$\Gamma_L \text{が単射} \Leftrightarrow \text{Span}\langle \{A_{i_1} \cdots A_{i_L}\}_{i_1, \dots, i_L} \rangle = \text{Mat}_n(\mathbb{C}). \quad (4.28)$$

(証明) (\Leftarrow) $\Gamma_L(X) = 0$ とすると任意の i_1, \dots, i_L に対して $\text{tr}[X A_{i_1} \cdots A_{i_L}] = 0$ 。仮定より、ある $\{c_{i_1 \cdots i_L}\}_{i_1, \dots, i_L}$ が存在して $\sum_{i_1, \dots, i_L} c_{i_1, \dots, i_L} A_{i_1} \cdots A_{i_L} = X^\dagger$ であるので $\text{tr}[X X^\dagger] = 0$ 、つまり $X = 0$ 。

(\Rightarrow) Γ_L を行列表示すると、

$$[\Gamma_L]_{i_1 \cdots i_L, ab} = \langle i_1 \cdots i_L | \Gamma_L(|a\rangle \langle b|) \rangle = \langle b | A_{i_1} \cdots A_{i_L} | a \rangle = [A_{i_1} \cdots A_{i_L}]_{ba}. \quad (4.29)$$

よって Γ_L が単射であれば、(L 大で) 行列 Γ_L のランクがフルランク、つまり n^2 であるので、 d^L 個の行ベクトル $[A_{i_1} \cdots A_{i_L}]$ は $\text{Mat}_n(\mathbb{C})$ を張る。□

Proposition 4.9 ([2]).

$$\Gamma_L \text{が単射} \Rightarrow \Gamma_{L' > L} \text{も単射}. \quad (4.30)$$

(証明) $L' = L + 1$ のとき,

$$\Gamma_{L+1}(X) = \sum_{i_{L+1}} \Gamma_L(A_{i_{L+1}}X) |i_{L+1}\rangle. \quad (4.31)$$

$\Gamma_{L+1}(X) = 0$ ならば任意の i に対して $\Gamma_L(A_i X) = 0$. すると Γ_L の単射性より任意の i に対して, $A_i X = 0$. $\{A_{i_1} \cdots A_{i_L}\}$ は $\text{Mat}_n(\mathbb{C})$ を張るから,

$$\sum_{i_1, \dots, i_L} c_{i_1, \dots, i_L} A_{i_1} \cdots A_{i_L} = 1_n \quad (4.32)$$

なる c_{i_1, \dots, i_L} が存在. すると,

$$X = \sum_{i_1, \dots, i_L} c_{i_1, \dots, i_L} A_{i_1} \cdots A_{i_L} X = 0. \quad \square \quad (4.33)$$

Definition 4.10 (Injectivity). TI-MPS $\{A_i\}_i$ がinjectiveとは, ある $L_0 \in \mathbb{N}$ が存在して Γ_{L_0} が単射であること. 同じことだが, ある $L_0 \in \mathbb{N}$ が存在して $\{A_{i_1} \cdots A_{i_{L_0}}\}_{i_1, \dots, i_{L_0}}$ が $\text{Mat}_n(\mathbb{C})$ を張ること.

注意として, $\{A_i\}_i$ がinjectiveであることは, 積の数を固定しない行列の積の集合が $\text{Mat}_n(\mathbb{C})$ を張ること,

$$\text{Span} \langle \{A_{i_1} \cdots A_{i_L}\}_{i_1, \dots, i_L} \rangle = \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \quad (4.34)$$

とは真に異なる条件である. (4.9)の例は, $\text{Span}(A_\uparrow, A_\downarrow, A_\uparrow A_\downarrow, A_\downarrow A_\uparrow) = \text{Mat}_2(\mathbb{C})$ であるが, 任意の $L \in \mathbb{N}$ に対して $\{A_{i_1} \cdots A_{i_L}\}_{i_1, \dots, i_L}$ は $\text{Mat}_2(\mathbb{C})$ を張らない.

Proposition 4.11. $\{A_i\}_i$ がinjectiveならば $\{A_i\}_i$ は既約.

(証明) 対偶を示す. 命題 4.4の証明と同様にして, $\{A_i\}_i$ が可約であれば

$$A_i = \begin{pmatrix} B_i & D_i \\ O & C_i \end{pmatrix} \quad (4.35)$$

であるので, いかなる $L \in \mathbb{N}$ に対して $\{A_{i_1} \cdots A_{i_L}\}_{i_1, \dots, i_L}$ は $\text{Mat}_n(\mathbb{C})$ を張らない. \square

Proposition 4.12 ([1, 8]). $\{A_i\}_i$ が強既約ならば $\{A_i\}_i$ はinjective.

(証明) 背理法. 任意の $L \in \mathbb{N}$ に対して $\{A_{i_1} \cdots A_{i_L}\}_{i_1, \dots, i_L}$ が $\text{Mat}_n(\mathbb{C})$ を張らないと仮定する. すると, 任意の $L \in \mathbb{N}$ に対して直交補空間が非ゼロだから, ある $B_L \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ が存在して, 任意の i_1, \dots, i_L に対して $\text{tr}[A_{i_1} \cdots A_{i_L} B_L] = 0$. すると,

$$0 = (T_A)^L (B \otimes B^\dagger). \quad (4.36)$$

ところが, 強既約性より,

$$(T_A)^L (B_L \otimes B_L^\dagger) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} (\rho_{T_A})^L \text{tr}[Z^* B_L Z B_L^\dagger] = 0 \quad (4.37)$$

であるが, $Z, Z^* > 0$ より矛盾する. \square

実は逆, つまり injective ならば強既約も成立する [8]. 証明には T_A のSchwarz性から来るスペクトルの性質 [7]を証明する必要があり, 本ノートでは証明しない.

4.3 TI-MPSの基本定理

有限系の量子状態 $|\psi\rangle$ は $U(1)$ 位相が不定である。 $|\psi\rangle \sim e^{i\alpha} |\psi\rangle$. TI-MPS $\{A_i\}_i$ も、相似変換(4.19)に対して状態 $|\psi\rangle$ は定数倍を除いて不変、つまり「物理的な状態」は不変である。一般のTI-MPSの不定性は相似変換(4.19)よりも大きい、強既約の場合は相似変換(4.19)に限ることが証明される。

まず、TI-MPSのボンド次元 n と、TI-MPSが記述する状態 $|\psi\rangle$ の関係をつける。

Proposition 4.13 ([2]). $\{A_i\}_i$ を *injective*なボンド次元 n のTI-MPSとし、 $L_0 \in \mathbb{N}$ に対して G_{L_0} が単射であるとする。サイト数を N とする。 $L_0 \leq R \leq N - R$ なる R に対して、

$$\text{rank}(\rho_{[1,R]}) = n^2. \quad (4.38)$$

(証明)

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1 \cdots i_N} \text{tr}[A_{i_1} \cdots A_{i_N}] |i_1 \cdots i_L\rangle = \sum_{a,b=1}^n \Gamma_R(|b\rangle \langle a|) \Gamma_{N-R}(|a\rangle \langle b|) \quad (4.39)$$

と書くことができる。ここで、 n^2 個のベクトル $\{\Gamma_R(|b\rangle \langle a|)\}_{a,b}$, $\{\Gamma_{N-R}(|a\rangle \langle b|)\}_{a,b}$ はそれぞれ Γ_R, Γ_{N-R} の単射性より線形独立。よって $|\psi\rangle$ は以下の形。

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{n^2} |v_k\rangle |w_k\rangle, \quad \{|v_k\rangle\}_k, \quad \{|w_k\rangle\}_k \text{は線形独立.} \quad (4.40)$$

すると

$$\rho_{[1,R]} = \sum_{k,l=1}^{n^2} |v_k\rangle \langle w_l | w_k\rangle \langle v_l| \quad (4.41)$$

であるば、Gram行列 $\langle w_l | w_k\rangle$ はフルランクであるから、 $\text{rank}(\rho_{[1,R]}) = n^2$. □

2つの技術的な補題を準備する。

Lemma 4.14 ([2]). 線形写像 $T, S: \mathbb{C}^\ell \rightarrow \mathbb{C}^m$ とベクトル $Y_1, \dots, Y_\ell \in \mathbb{C}^\ell$ が存在して以下を満たすとする.

- $T(Y_k) = S(Y_{k+1}), k = 1, \dots, \ell - 1$.
- $Y_1, \dots, Y_{\ell-1}$ は線形独立.
- Y_1, \dots, Y_ℓ は線形従属. $Y_\ell = \sum_{k=1}^{\ell-1} \lambda_k Y_k$.

このとき, 代数方程式

$$\lambda_1 x^{\ell-1} + \lambda_2 x^{\ell-2} + \dots + \lambda_{\ell-1} x = 1 \quad (4.42)$$

の解 x に対して,

$$\mu_1 = \lambda_1 x, \quad (4.43)$$

$$\mu_2 = \lambda_1 x^2 + \lambda_2 x, \quad (4.44)$$

\vdots

$$\mu_{\ell-1} = \lambda_1 x^{\ell-1} + \dots + \lambda_{\ell-1} x = 1, \quad (4.45)$$

とする. このとき, ベクトル

$$Y = \sum_{k=1}^{\ell-1} \mu_k Y_k \quad (4.46)$$

$$Y \neq 0, \quad T(Y) = \frac{1}{x} S(Y). \quad (4.47)$$

直接計算なので, 証明略.

Lemma 4.15 ([2]). $B, C \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ とする. W に対する線形方程式

$$W(C \otimes 1_n) = (B \otimes 1_n)W \quad (4.48)$$

の解空間は

$$S \otimes \text{Mat}_n(\mathbb{C}), \quad S = \{X \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \mid XC = BX\}. \quad (4.49)$$

こちらも証明略.

Theorem 4.16 ([2, 12]. TI-MPSの基本定理). ボンド次元 n のTI-MPS $\{B_i\}_i$ が, *injective*かつ標準形にある, つまり, ある $L_0 \in \mathbb{N}$ が存在して Γ_{L_0} が単射であり, カノニカル条件

$$\sum_i B_i B_i^\dagger = 1_n, \quad (4.50)$$

$$\sum_i B_i^\dagger \Lambda_B B_i = \Lambda, \quad \Lambda_B = \text{diag}(\lambda_{B,1}, \dots, \lambda_{B,n}), \quad \lambda_{B,1} \geq \dots \geq \lambda_{B,n} > 0, \quad \text{tr}[\Lambda_B] = 1, \quad (4.51)$$

を満たすとする. さらに, 同一ボンド次元 n の既約なTI-MPS $\{C_i\}_i$ が標準形にある, つまり, カノニカル条件

$$\sum_i C_i C_i^\dagger = 1_n, \quad (4.52)$$

$$\sum_i C_i^\dagger \Lambda_C C_i = \Lambda_C, \quad \Lambda_C = \text{diag}(\lambda_{C,1}, \dots, \lambda_{C,n}), \quad \lambda_{C,1} \geq \dots \geq \lambda_{C,n} > 0, \quad \text{tr}[\Lambda_C] = 1, \quad (4.53)$$

を満たすとする. あるサイト数 $N > 2L_0 + n^4$ においてTI-MPS $\{B_i\}_i, \{C_i\}_i$ で記述される状態が物理的に等価, つまり, ある $U(1)$ 位相 $e^{i\alpha}$ が存在して,

$$\psi_{i_1 \dots i_N} = \text{tr}[B_{i_1} \dots B_{i_N}] = e^{i\alpha} \text{tr}[C_{i_1} \dots C_{i_N}] \quad \text{for all } i_1, \dots, i_N, \quad (4.54)$$

が成立すると仮定する. このとき, あるユニタリ行列 $U \in U(n)$ と $U(1)$ 位相 $e^{i\theta} \in U(1)$ が存在して,

$$B_i = e^{i\theta} U C_i U^\dagger, \quad i = 1, \dots, d. \quad (4.55)$$

さらに, TI-MPS $\{B_i\}_i, \{C_i\}_i$ が強既約である場合, $e^{i\theta}$ は一意的であり, U は $U(1)$ 位相を除いて一意的.

証明の方針は, TI-MPS $\{B_i\}_i, \{C_i\}_i$ からOBC-MPSを構成して, OBC-MPSの一意性 (命題 2.2) を用いて関係をつける.

(証明) $C_i \mapsto e^{-i\alpha/N} C_i$ と再定義することにより, $e^{i\alpha} = 1$ として良い. OBC-MPSを構成する.

$$\text{tr}[B_{i_1} \dots B_{i_N}] = \sum_{a,b,c} [B_{i_1}]_{ab} [B_{i_2} \dots B_{i_{N-1}}]_{bc} [B_{i_N}]_{ca} = \sum_{a,b,c} [B_{i_1}]_{ab} [\tilde{B}]_{bc} [B_{i_N}]_{ca} \quad (4.56)$$

と表示する, 足 a を内積で縮約される足とみなすと, \tilde{B} を n 個対角的に並べて

$$= \sum_a u_a \tilde{B} v_a \quad (4.57)$$

$$= (u_1, \dots, u_n) \begin{pmatrix} \tilde{B} & & \\ & \ddots & \\ & & \tilde{B} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} \quad (4.58)$$

と書くことができる.

$$b_i^{[1]} = (u_1, \dots, u_n) = ([B_i]_{1 \cdot}, \dots, [B_i]_{n \cdot}), \quad (4.59)$$

$$b_i^{[N]} = (v_1, \dots, v_n)^\top = ([B_i]_{\cdot 1}, \dots, [B_i]_{\cdot n})^\top, \quad (4.60)$$

と書くと, OBC-MPS表示

$$\psi_{i_1 \dots i_N} = b_{i_1}^{[1]}(B_{i_2} \otimes 1_n) \dots (B_{i_{N-1}} \otimes 1_n) b_{i_N}^{[N]} \quad (4.61)$$

が得られる. $\{C_i\}_i$ も同様.

$$\psi_{i_1 \dots i_N} = c_{i_1}^{[1]}(C_{i_2} \otimes 1_n) \dots (C_{i_{N-1}} \otimes 1_n) c_{i_N}^{[N]}. \quad (4.62)$$

すると、OBC-MPSの標準形（命題 2.2）より、共通の標準的OBC-MPS $\{\{A_{i_m}^{[m]}\}_{i_m}\}_m$ が存在して、

$$A_i^{[m]} = Y_{m-1}(B_i \otimes 1_n)Z_m = Y'_{m-1}(C_i \otimes 1_n)Z'_m, \quad (4.63)$$

$$Y_m Z_m = 1, \quad Y'_m Z'_m = 1, \quad 1 < m < N, \quad (4.64)$$

が成立。 $A_{i_m}^{[m]}$ は $r_{m-1} \times r_m$ 行列である。命題 4.13より、 $L_0 \leq m \leq N - L_0$ なる m に対して縮約密度行列 $\rho_{[1,m]}$ のランクは n^2 だった。よって、 $L_0 \leq m \leq N - L_0$ に対して、 $r_m = n^2$ 。行列 Y_m, Y'_m は $r_m \times n^2$ 行列、 Z_m, Z'_m は $n^2 \times r_m$ 行列であるので、(4.64)は $L_0 \leq m \leq N - L_0$ なる m に対して Y_m, Z_m, Y'_m, Z'_m は可逆行列であることを意味する。よって(4.63)より、 $W_m = Z_m Y'_m$ と置くと、

$$W_{m-1}(C_i \otimes 1_n) = (B_i \otimes 1_n)W_m, \quad i = 1, \dots, d, \quad L_0 + 1 \leq m \leq N - L_0, \quad (4.65)$$

が成立している。 W_m は i に依存しないことに注意。 $\{W_m\}_{m=L_0+1}^{N-L_0}$ は、各 i について $N - 2L_0$ 個の $n^2 \times n^2$ 行列 $\{W_m\}_{m=L_0+1}^{N-L_0}$ に対する線形方程式の解であるので、 $N - 2L_0 > n^4$ であれば $\{W_m\}_{m=L_0+1}^{N-L_0}$ は線形従属。

したがって、以下が得られた： $T_i(W) = W(B_i \otimes 1_n), S_i(W) = (C_i \otimes 1_n)W$ とする。ある $\ell \in \mathbb{N}, 1 < \ell < n^4 + 1$ が存在して、 $W_1, \dots, W_{\ell-1}$ は線形独立、

$$W = W_\ell = \sum_{k=1}^{\ell-1} \lambda_k W_k, \quad (4.66)$$

$$T_i(W_k) = S_i(W_{k+1}), \quad k = 1, \dots, \ell-1, \quad i = 1, \dots, d. \quad (4.67)$$

よって補題 4.14より、ある $W \neq 0$ と $x \neq 0$ が存在して、

$$W(B_i \otimes 1_n) = \frac{1}{x}(C_i \otimes 1_n)W, \quad i = 1, \dots, d. \quad (4.68)$$

補題 4.15より、 W は以下の共通部分の元：

$$W \in \bigcap_{i=1}^d S_i \otimes \text{Mat}_n(\mathbb{C}) = \left(\bigcap_{i=1}^d S_i \right) \otimes \text{Mat}_n(\mathbb{C}), \quad S_i = \{X \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) | XB_i = \frac{1}{x}C_i X\}. \quad (4.69)$$

特に、 $\bigcap_{i=1}^d S_i \neq \emptyset$ である。 $U \in \bigcap_{i=1}^d S_i$ をひとつ選ぶと、

$$UB_i = \frac{1}{x}C_i U, \quad i = 1, \dots, d, \quad (4.70)$$

が成立。

$|x| = 1$ を示す。 $\{B_i\}_i$ は標準形であるので、

$$U^\dagger \Lambda_B U = U \left(\sum_i B_i^\dagger \Lambda_i B_i \right) U^\dagger = \frac{1}{|x|^2} \sum_i C_i^\dagger U^\dagger \Lambda_B U C_i. \quad (4.71)$$

トレースを取ると

$$0 < \text{tr}[U^\dagger \Lambda_B U] = \frac{1}{|x|^2} \sum_i \text{tr}[U^\dagger \Lambda_B U C_i C_i^\dagger] = \frac{1}{|x|^2} \text{tr}[U^\dagger \Lambda_B U] \quad (4.72)$$

より $|x| = 1$ 。

$U \in U(n)$ を示す。 $UB_i = e^{i\theta} C_i U$ より

$$T_C(UU^\dagger) = \sum_i C_i U U^\dagger C_i = \sum_i U B_i B_i^\dagger U^\dagger = UU^\dagger. \quad (4.73)$$

T_C は既約であるので、 $\lambda = 1$ なる固有ベクトルは一意的。よって、 $UU^\dagger \propto 1_n$ 。 $UU^\dagger > 0$ であるので、 $UU^\dagger = 1_n$ として良い。

強既約性を仮定した場合に $e^{i\theta}$, U の一意的を証明する。 $U'B_i = e^{i\theta'} C_i U, i = 1, \dots, d$ とする。

$$\sum_i C_i U' U^\dagger C_i^\dagger = \sum_i e^{-i\theta'} U' B_i e^{i\theta} B_i^\dagger U^\dagger = e^{-i\theta'} e^{i\theta} U' U^\dagger. \quad (4.74)$$

強既約性より $|\lambda| = 1$ なる固有値は $\lambda = 1$ に限り、かつ固有ベクトルは一意的であるから、 $e^{i\theta'} = e^{i\theta}, U' \sim U$. \square

既に注意したように、injective性と強既約性は等価であるので [8], $e^{i\theta}, U$ の一意的の証明に強既約性を追加で課す必要はない。

4.4 応用例：1次元SPT相

応用として、並進不変で「ギャップのある非縮退状態」 $|\psi\rangle$ が群 G の対称性を持つとき、群コホモロジー $-H^1(G, U(1)_\phi) \times H^2(G, U(1)_\phi)$ に値を取る不変量が定義されることを示す。

まず、対称性を定義する。 G を群、準同型写像 $\phi: G \rightarrow \mathbb{Z}/2 = \{\pm 1\}$ を、 $\phi_g = 1$ のとき g はユニタリな対称性を、 $\phi_g = -1$ のときは g は反ユニタリな対称性を示すものとして定義する。群元 $g \in G$ に対して、Hilbert空間 \mathcal{H} への作用を、局所Hilbert空間への群作用のテンソル積として定義する。

$$\hat{g} = \begin{cases} \bigotimes_x \hat{g}_x & (\phi_g = 1) \\ (\bigotimes_x \hat{g}_x) K & (\phi_g = -1) \end{cases}, \quad \hat{g}_x |j\rangle = \sum_i |i\rangle [u_g]_{ij}. \quad (4.75)$$

ここで、 K は複素共役。ユニタリ行列 $\{u_g\}_g$ は線形表現、つまり、

$$u_g u_h^{\phi_g} = u_{gh}, \quad g, h \in G, \quad (4.76)$$

を仮定する。ここで行列 X に対して表記

$$X^{\phi_g} = \begin{cases} X & (\phi_g = 1), \\ X^* & (\phi_g = -1), \end{cases} \quad (4.77)$$

を導入した。

TI-MPS $\{A_i\}_i$ によって記述される状態を

$$|\{A_i\}_i\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_N} \text{tr} [A_{i_1} \cdots A_{i_N}] |i_1 \cdots i_N\rangle \quad (4.78)$$

と表記すると、TI-MPSへの G 作用は

$$\hat{g} |\{A_i\}_i\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_N, j_1, \dots, j_N} \text{tr} [A_{i_1} \cdots A_{i_N}]^{\phi_g} |j_1 \cdots j_N\rangle [u_g]_{j_1 i_1} \cdots [u_g]_{j_N i_N} = \left| \left\langle \sum_j [u_g]_{ij} A_j^{\phi_g} \right\rangle \right\rangle, \quad (4.79)$$

つまり、

$$g: A_i \mapsto {}^g A_i := \sum_j [u_g]_{ij} A_j^{\phi_g}, \quad i = 1, \dots, d, \quad (4.80)$$

によって与えられる。 u_g の線形性より、

$${}^{gh} A_i = {}^{gh} A_i, \quad i = 1, \dots, d, \quad (4.81)$$

に注意. 状態 $\{|A_i\rangle_i\}$ が G 不変, つまり, ある $e^{i\alpha_g}$ が存在して,

$$\hat{g}|\{A_i\rangle_i\rangle = |\{^g A_i\rangle_i\rangle = e^{i\alpha_g} |\{A_i\rangle_i\rangle, \quad g \in G, \quad (4.82)$$

が成立する. (サイト数 N は固定している.)

任意の並進不変で「ギャップのある非縮退状態」は, 強既約なTI-MPSにより近似できると期待できる. $\{A_i\}_i$ を強既約でかつ標準形にあるTI-MPSとすると, 定理 4.16より, G 対称性(4.82)は各 $g \in G$ に対して,

$$^g A_i = e^{i\theta_g} V_g^\dagger A_i V_g, \quad i = 1, \dots, d, \quad (4.83)$$

を意味する. ここで, $e^{i\theta_g}$ は一意であり, ユニタリ行列 V_g は $U(1)$ 位相を除いて一意的. (4.81)より

$$\begin{aligned} {}^{gh} A_i &= {}^g(e^{i\theta_h} V_h^\dagger A_i V_h) = e^{i\phi_g \theta_h} (V_h^{\phi_g})^\dagger ({}^g A_i) V_h^{\phi_g} \\ &= e^{i\phi_g \theta_h} (V_h^{\phi_g})^\dagger e^{i\theta_g} V_g^\dagger A_i V_g V_h^{\phi_g} = e^{i\theta_g} e^{i\phi_g \theta_h} (V_g V_h^{\phi_g})^\dagger A_i (V_g V_h^{\phi_g}), \quad i = 1, \dots, d. \end{aligned} \quad (4.84)$$

一方で,

$${}^{gh} A_i = e^{i\theta_{gh}} V_{gh}^\dagger A_i V_{gh}. \quad (4.85)$$

一意性より, $\{e^{i\theta_g}\}_g$ は G の1次元表現 $\{e^{i\theta_g}\}_g \in \text{Hom}(G, U(1)_\phi) \cong H^1(G, U(1)_\phi)$ をなす:

$$e^{i\theta_g} e^{i\phi_g \theta_h} = e^{i\theta_{gh}}, \quad g, h \in G. \quad (4.86)$$

一方で, V_g は $U(1)$ 位相を除いて一意であるから, ある $z_{g,h} \in U(1)$ が存在して,

$$V_g V_h^{\phi_g} = z_{g,h} V_{gh}, \quad g, h \in G. \quad (4.87)$$

$U(1)$ 位相 $z_{g,h}$ は任意ではなく, $(V_g V_h^{\phi_g}) V_k^{\phi_{gh}} = V_g (V_h V_k^{\phi_h})^{\phi_g}$ より

$$z_{h,k}^{\phi_g} z_{gh,k}^{-1} z_{g,hk} z_{g,h}^{-1} = 1, \quad g, h, k \in G. \quad (4.88)$$

つまり, $z_{g,h}$ は2コサイクル条件を満たす. つまり, $z \in Z^2(G, U(1)_\phi)$ の元である¹¹. V_g の $U(1)$ 位相の取り替えは $V_g \mapsto V_g \eta_g$ は, 変換

$$z_{g,h} \mapsto z_{g,h} \eta_g^{\phi_g} \eta_{gh}^{-1} \eta_g, \quad g, h \in G, \quad (4.89)$$

を引き起こす. ここで, $\{\eta_g\}_g$ は2コバウンダリ $B^2(G, U(1)_\phi)$ の元である. よって, 強既約で標準形にあり G 不変なTI-MPS $\{A_i\}_i$ は2コホモロジー $H^2(G, U(1)_\phi) = Z^2(G, U(1)_\phi)/B^2(G, U(1)_\phi)$ の元を定める. 以下が得られた.

Theorem 4.17 ([13, 14] 1次元SPT相). $\{A_i\}_i$ を強既約, 標準形かつ G 不変なTI-MPSとする. $\{A_i\}_i$ は,

$$H^1(G, U(1)_\phi) \times H^2(G, U(1)_\phi) \quad (4.90)$$

に値を取る量を定める.

事実として, 全ての不変量 $H^1(G, U(1)_\phi) \times H^2(G, U(1)_\phi)$ の組み合わせを実現するTI-MPSの構成が知られている [15].

¹¹ $U(1)_\phi$ は G 作用が $z \cdot z = z^{\phi_g}, z \in U(1)$ と定義されていることを意味する.

References

- [1] Mark Fannes, Bruno Nachtergaele, and Reinhard F. Werner, *Finitely correlated states on quantum spin chains*, Communications in mathematical physics **144** (1992): 443-490.
- [2] D. Perez-Garcia, F. Verstraete, M.M. Wolf, J.I. Cirac, *Matrix Product State Representations*, arXiv:quant-ph/0608197.
- [3] Ignacio Cirac, David Perez-Garcia, Norbert Schuch, Frank Verstraete *Matrix Product States and Projected Entangled Pair States: Concepts, Symmetries, and Theorems*, arXiv:2011.12127.
- [4] Ulrich Schollwoeck, *The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states*, arXiv:1008.3477.
- [5] Michael M. Wolf, *Quantum Channels & Operations, Guided Tour*, lecture note, <https://citeseerx.ist.psu.edu/document?repid=rep1&type=pdf&doi=afa58291b0b8bd47504acb1ab8f553f0b37685cf>
- [6] F. Verstraete, J.I. Cirac, *Matrix product states represent ground states faithfully*, arXiv:cond-mat/0505140.
- [7] Evans, David E. and Raphael Hoegh-Krohn, *Spectral properties of positive maps on C^* -algebras*. Preprint series: Pure mathematics [http://urn.nb.no/URN: NBN: no-8076](http://urn.nb.no/URN:NBN:no-8076) (1977).
- [8] Sanz, M., Perez-Garcia, D., Wolf, M. M., Cirac, J. I. (2010). *A quantum version of Wielandt's inequality*, IEEE Transactions on Information Theory, 56(9), 4668-4673.
- [9] Bhatia, R. (2009). *Positive definite matrices*, Princeton university press.
- [10] H. H. Schaefer, M. P. Wolff, *Topological Vector Spaces*, Springer-Verlag New York, Inc. 1999.
- [11] Matthew B. Hastings, Tohru Koma, *Spectral Gap and Exponential Decay of Correlations*, arXiv:math-ph/0507008.
- [12] D. Perez-Garcia, M.M. Wolf, M. Sanz, F. Verstraete, J.I. Cirac *String order and symmetries in quantum spin lattices*, arXiv:0802.0447.
- [13] Frank Pollmann, Erez Berg, Ari M. Turner, Masaki Oshikawa *Entanglement spectrum of a topological phase in one dimension*, arXiv:0910.1811
- [14] Xie Chen, Zheng-Cheng Gu, Xiao-Gang Wen, *Classification of Gapped Symmetric Phases in 1D Spin Systems*, arXiv:1008.3745.
- [15] Xie Chen, Zheng-Cheng Gu, Zheng-Xin Liu, Xiao-Gang Wen, *Symmetry protected topological orders and the group cohomology of their symmetry group*, arXiv:1106.4772.