MPS間の転送行列のふるまいについて

塩崎　謙

February 15, 2023

1　準備

$D\times D$行列の集合$\{A_i\}_{i=1}^d, A_i \in \mathrm{Mat}_{D\times D}(\mathbb{C})$をMPSと呼ぶことにする．異なる行列サイズ$D$を同時に扱う場合は，$D$-MPSなどと書くことにする． MPSがカノニカルとは，

$$\sum_i A_i A_i^\dagger = 1_D \tag{1}$$

を満たすことを指す． MPSがinjectiveとは，転送行列

$$T_{AA}(X) = \sum_i A_i X A_i^\dagger \tag{2}$$

のスペクトル半径をρ_Aとしたとき，固有値$|\lambda| = \rho_A$なる固有値λは一意的であり，対応する固有空間の次元は1で，固有ベクトルは正定値であることを指す． injectiveなMPS$\{A_i\}_i$に対して，$\lambda = \rho_A$なる固有ベクトル$X, X > 0$を用いて，

$$A_i \mapsto \frac{1}{\sqrt{\rho_A}} X^{-1/2} A_i X^{1/2} \tag{3}$$

とすることでいつでもカノニカル化できることに注意する．以下の事実がある． [1]

$$|\{A_i\}_i\rangle_L := \sum_{i_1,\dots,i_L} \mathrm{tr}\left[A_{i_1}\cdots\right]|i_1\cdots i_L\rangle \tag{4}$$

と書く． 2つのカノニカルかつinjectiveなD-MPS$\{A_i\}_i, \{B_i\}_i$に対して，ある$L\in\mathbb{N}$とある$e^{i\phi}\in U(1)$が存在して$|\{A_i\}\rangle_L = e^{i\phi}|\{B_i\}_i\rangle_L$であれば，$e^{i\theta}\in U(1)$と$V\in U(D)$が存在して

$$A_i = e^{i\theta} V^\dagger B_i V \tag{5}$$

である． $e^{i\theta}$は一意的であり，Vは$U(1)$位相を除いて一意的である．

Gを有限群とし，$\phi: G\to\{\pm 1\}$を準同型とする． ϕ_gはユニタリ，反ユニタリを示す．行列Xに対して表記

$$X^{\phi_g} = \begin{cases} X & (\phi_g = 1) \\ X^* & (\phi_g = -1) \end{cases} \tag{6}$$

を導入する． $\bigotimes_{x=1}^L |i_x\rangle$で張られるHilbert空間に対して，$G$作用を

$$\hat{g} = \bigotimes_{x=1}^L \hat{u}_g^{[x]}, \quad \hat{u}_g^{[x]}|j_x\rangle = \sum_{i_x}|i_x\rangle [u_g]_{i_x j_x}, \quad u_g\in U(d), \quad u_g u_h^{\phi_g} = u_{gh}, \tag{7}$$

で定義する． $\{u_g\}_{g\in G}$はGの線形表現である．カノニカルかつinjectiveなMPS$\{A_i\}_i$がG対称であることを，任意の$L\in\mathbb{N}$に対して，あるe^{ϕ_L}が存在して，

$$\hat{g}|\{A_i\}_i\rangle_L = e^{i\phi_L}|\{A_i\}_i\rangle_L \tag{8}$$

なることと，と定義する．すると，上記事実より，$g\in G$に対して，$e^{i\theta_g}\in U(1)$と$V_g\in U(D)$が存在して，

$$[u_g]_{ij}A_j^{\phi_G}=e^{i\theta_g}V_g^\dagger A_iV_g \tag{9}$$

である．ここで，$e^{i\theta_g}$は一意的であり，V_gは$U(1)$位相を除いて一意的である．

$$e^{i\theta_g}e^{i\phi_h\theta_h}=e^{i\theta_{gh}},\quad g,h\in G \tag{10}$$

が成立し，また，$\omega_{g,h}\in U(1)$が存在して，

$$V_gV_h^{\phi_g}=\omega_{g,h}V_{gh},\quad g,h\in G \tag{11}$$

が成立する．

$$(\omega_{h,k})^{\phi_g}\omega_{gh,k}^{-1}\omega_{g,hk}\omega_{g,h}^{-1}=1, \tag{12}$$

つまり，$\omega\in Z^2(G,U(1)_\phi)$であり，$V_g$の位相の取り替え$V_g\mapsto V_g\alpha_g,\alpha_g\in U(1)$に対して，$\omega\mapsto\omega\delta\alpha$となる．よって，$\omega$は群コホモロジー$[\omega]\in H^2(G,U(1)_\phi)$によって分類される．

2 転送行列

カノニカルかつinjectiveなD_0-MPS$\{A_i^0\}_{i=1}^d$とD_1-MPS$\{A_i^0\}_i$に対して，転送行列$T_{A^0A^1}\in\mathrm{End}(\mathrm{Mat}_{D_0\times D_1}(\mathbb{C}))$を

$$T_{A^0A^1}(X)=\sum_i A_i^0X(A_i^1)^\dagger \tag{13}$$

と定義する．サイト数LにおけるMPS間の内積が$\mathrm{tr}\,[(T_{A^0A^1})^L]$である．なお，$D_0\times D_1$行列の空間の基底を$e_{ab}=|a\rangle\langle b|$とすると，転送行列の行列成分は

$$[T_{A^0A^1}]_{ab,cd}=\mathrm{tr}\,[\sum_i A_i^0e_{cd}(A_i^1)^\dagger e_{ab}^T]=\sum_i\langle a|A_i^0|c\rangle\langle b|(A_i^1)^*|d\rangle \tag{14}$$

となる． $\{A_i^0\}_i,\{A^1\}_i$がG対称である場合に転送行列$T_{A^0A^1}$のG対称性を調べる．

$$\sum_j[u_g]_{ij}(A_j^\mu)^{\phi_g}=e^{i\theta_g^\mu}(V_g^\mu)^\dagger A_i^\mu V_g^\mu,\quad V_g^\mu(V_h^\mu)^{\phi_g}=\omega_{g,h}^\mu V_{gh}^\mu,\quad \mu\in\{0,1\}, \tag{15}$$

とする．

$$A_i^\mu=(\sum_j[u_g^\dagger]_{ij}e^{i\theta_g^\mu}(V_g^\mu)^\dagger A_j^\mu V_g^\mu)^{\phi_g} \tag{16}$$

に注意．すると，$g\in G$に対して，

$$\begin{aligned}
T_{A^0A^1}(X)&=\sum_i A_i^0X(A_i^1)^\dagger &(17)\\
&=\sum_i(\sum_j[u_g^\dagger]_{ij}e^{i\theta_g^0}(V_g^0)^\dagger A_j^0V_g^0)^{\phi_g}X((\sum_k[u_g^\dagger]_{ik}e^{i\theta_g^1}(V_g^1)^\dagger A_j^1V_g^1)^{\phi_g})^\dagger &(18)\\
&=\sum_i(e^{i\theta_g^0}(V_g^0)^\dagger A_i^0V_g^0)^{\phi_g}X(e^{i\theta_g^1}(V_g^1)^\dagger A_i^1V_g^1)^{\phi_g})^\dagger &(19)\\
&=e^{i\phi_g(\theta_g^0-\theta_g^1)}((V_g^0)^\dagger)^{\phi_g}(\sum_i A_i^0V_g^0X^{\phi_g}(V_g^1)^\dagger(A_i^1)^\dagger)^{\phi_g}(V_g^1)^{\phi_g} &(20)\\
&=e^{i\phi_g(\theta_g^0-\theta_g^1)}((V_g^0)^\dagger)^{\phi_g}(T_{A^0A^1}(V_g^0X^{\phi_g}(V_g^1)^\dagger)^{\phi_g}(V_g^1)^{\phi_g}, &(21)
\end{aligned}$$

つまり，

$$((V_g^0))^{\phi_g}T_{A^0A^1}(X)((V_g^1)^{\phi_g})^\dagger=e^{i\phi_g(\theta_g^0-\theta_g^1)}(T_{A^0A^1}(V_g^0X^{\phi_g}(V_g^1)^\dagger)^{\phi_g}, \tag{22}$$

なる対称性がある．成分で書くと，

$$
\begin{aligned}
(\mathrm{lhs})_{ab,cd} &= \mathrm{Tr}[((V_g^0))^{\phi_g} T_{A^0A^1}(e_{cd})((V_g^1)^{\phi_g})^\dagger e_{ab}^T] &(23)\\
&= \sum_{ef} [T_{A^0A^1}]_{ef,cd} \mathrm{Tr}[((V_g^0))^{\phi_g} e_{ef}((V_g^1)^{\phi_g})^\dagger e_{ab}^T] &(24)\\
&= \sum_{ef} [T_{A^0A^1}]_{ef,cd} [V_g^0]_{ae}^{\phi_g} [(V_g^1)^*]_{bf}^{\phi_g}, &(25)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
(\mathrm{rhs})_{ab,cd} &= \mathrm{Tr}[e^{i\phi_g(\theta_g^0-\theta_g^1)}(T_{A^0A^1}(V_g^0 e_{cd}^{\phi_g}(V_g^1)^\dagger)^{\phi_g} e_{ab}^T] &(26)\\
&= e^{i\phi_g(\theta_g^0-\theta_g^1)} \sum_{ef} \mathrm{Tr}[(T_{A^0A^1}(e_{ee}V_g^0 e_{cd}^{\phi_g}(V_g^1)^\dagger e_{ff})^{\phi_g} e_{ab}^T] &(27)\\
&= e^{i\phi_g(\theta_g^0-\theta_g^1)} \sum_{ef} [V_g^0]_{ec}^{\phi_g} [(V_g^1)^*]_{fd}^{\phi_g} \mathrm{Tr}[(T_{A^0A^1}(e_{ef}))^{\phi_g} e_{ab}^T] &(28)\\
&= e^{i\phi_g(\theta_g^0-\theta_g^1)} \sum_{ef} [V_g^0]_{ec}^{\phi_g} [(V_g^1)^*]_{fd}^{\phi_g} [T_{A^0A^1}]_{ab,ef}^{\phi_g}, &(29)
\end{aligned}
$$

つまり，

$$
\sum_{ef} [T_{A^0A^1}]_{ef,cd}^{\phi_g} [V_g^0]_{ae} [(V_g^1)^*]_{bf} = e^{i(\theta_g^0-\theta_g^1)} \sum_{ef} [V_g^0]_{ec} [(V_g^1)^*]_{fd} [T_{A^0A^1}]_{ab,ef}, \tag{30}
$$

であり，

$$
\sum_{ef} (V_g^0 \otimes V_g^{1*})_{ab,ef} [T_{A^0A^1}]_{ef,cd}^{\phi_g} = e^{i(\theta_g^0-\theta_g^1)} \sum_{ef} [T_{A^0A^1}]_{ab,ef} (V_g^0 \otimes V_g^{1*})_{ef,cd} \tag{31}
$$

と表示するとわかるように，以下のように行列表示できる．

$$
(V_g^0 \otimes V_g^{1*})[T_{A^0A^1}]^{\phi_g} = e^{i(\theta_g^0-\theta_g^1)} T_{A^0A^1}(V_g^0 \otimes V_g^{1*}), \quad g \in G. \tag{32}
$$

$|\lambda\rangle$を$T_{A^0A^1}$の固有値λなる固有状態とする．

$e^{i\theta_g^0}$と$e^{i\theta_g^1}$がGの異なる 1 次元表現であれば，ある$g \in G, \phi_g = 1$が存在して$e^{i(\theta_g^0-\theta_g^1)} \neq 1$であるから，そのような$g \in G$に対して，$e^{-i(\theta_g^0-\theta_g^1)}\lambda$も固有値．

$e^{i\theta_g^0}$と$e^{i\theta_g^1}$がGの同一の1次元表現とする．このとき，転送行列$T_{A^0A^1}$は対称性

$$
(V_g^0 \otimes V_g^{1*})[T_{A^0A^1}]^{\phi_g} = T_{A^0A^1}(V_g^0 \otimes V_g^{1*}), \quad g \in G, \tag{33}
$$

を満たす． $[\omega^0] \neq [\omega^1]$である場合は$T_{A^0A^1}$は$V^0 \otimes V^{1*}$の既約分解に対してブロック対角化される．$\omega^0\omega^{1*}$-既約表現の次元は2以上であるため，$\lambda$が固有値であれば，$\lambda$か，あるいは$\lambda^*$も固有値である．

以上より，$e^{i\theta_g^0}$と$e^{i\theta_g^1}$が異なる1次元表現であるか，あるいは$[\omega^0] \neq [\omega^1]$である場合に，転送行列$T_{A^0A^1}$の固有値の絶対値は必ず2個以上の対で出現することが示された．

つまり，並進対称かつG対称な1次元非縮退状態$\{A_i^0\}_i$，$\{A_i^1\}_i$が，異なるSPT相に属する場合は，転送行列$T_{A^0A^1}$の固有値の絶対値は必ず2個以上の対で出現する．

References

[1] D. Perez-Garcia, F. Verstraete, M.M. Wolf, J.I. Cirac, *Matrix Product State Representations*, arXiv:quant-ph/0608197 .