Matrix Product State

塩崎　謙

April 13, 2022

Abstract

Matrix product state (MPS)関連の数学的証明を追う．[3]の証明を追う．

このノートでは，サイト数をNとする．局所Hilbert空間の次元dを共通とする．また，特異値分解（SVD），Schmidt分解（SD）については常にゼロ特異値の特異ベクトルによる展開を含まないコンパクトなSVD, SDを意味するものとする．

1　MPSの導出

一般のMPSは，$A^{[m]}_{i_m}$を$r_{m-1} \times r_m$行列として，

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

と書かれる．

- MPSが開放端条件（OBC）で書かれているとは，$A^{[1]}_{i_1}, A^{[N]}_{i_N}$がベクトルである場合を指す．つまり，$r_0 = r_N = 1$のとき．これをOBC-MPS表現と呼ぶ．
- $r = \max_m r_m$をMPSのボンド次元と呼ぶ．

MPSがOBCであるとは，単にMPSの表現方法の規則を指すことに注意する．例えば，周期境界条件下において並進対称性を満たすハミルトニアンの基底状態を含む任意の量子状態が，OBC-MPS表現で与えられることができることが，以下の定理からわかる．[1]

Theorem 1.1 (完全性と標準形[2]). 任意の状態$|\psi\rangle \in \mathbb{C}^{d\otimes N}$は，以下を満たすボンド次元$r < d^{\lfloor N/2 \rfloor}$なる*OBC-MPS*表現が存在する．規格化$\langle\psi|\psi\rangle = 1$を仮定する．

1. 任意の$1 \leq m \leq N$について$\sum_i A^{[m]\dagger}_i A^{[m]}_i = \mathbf{1}_{r_m}$.
2. 任意の$1 \leq m \leq N$について$\sum_i A^{[m]}_i \Lambda^{[m]} A^{[m]\dagger}_i = \Lambda^{[m-1]}$．ここで，
3. $\Lambda^{[0]} = \Lambda^{[N]} = 1$であり，$\Lambda^{[m]}$は成分が正の$r_m \times r_m$対角行列であり，$\mathrm{tr}\,\Lambda^{[m]} = 1$である．

---

[1] [3]では

$$\sum_i A^{[m]}_i A^{[m]\dagger}_i = \mathbf{1}_{D_m}, \quad \sum_i A^{[m]\dagger}_i \Lambda^{[m-1]} A^{[m]}_i = \Lambda^{[m]}$$

と書いている．これは右からSDを実行した場合．このノートでは左からSDを実行する．状況を少し変えて証明を追うことにより，理解を高める狙いもある．

(証明) [4]に従って，単に左からSDを実行してMPSを構成し，定理の主張を得る．純粋状態

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1,\ldots,i_N} \psi_{i_1 i_2 \cdots i_N} |i_1 \ldots i_N\rangle \tag{2}$$

において，波動関数に対してSDを実行して，

$$\psi_{i_1\cdots i_N} = \psi_{i_1,(i_2\cdots i_N)} = \sum_{a_1=1}^{r_1} U_{i_1,a_1} \sqrt{\Lambda^{[1]}_{a_1,a_1}} V^{\dagger}_{a_1,(i_2\cdots i_N)} \tag{3}$$

$$= \sum_{a_1=1}^{r_1} A^{[1]i_1}_{a_1} \psi_{a_1 i_2 \cdots i_N}, \quad (r_1 \le d), \tag{4}$$

を得る．定理の主張と合わせるために特異値を$\sqrt{\Lambda^{[1]}_{a_1,a_1}} > 0$と書いた．また，

$$A^{[1]i_1}_{a_1} = U_{i_1,a_1}, \quad \psi_{a_1 i_2 \cdots i_N} = \sqrt{\Lambda^{[1]}_{a_1,a_1}} V^{\dagger}_{a_1,(i_2\cdots i_N)} \tag{5}$$

と置いた．規格化条件$\langle\psi|\psi\rangle = 1$より，

$$\mathrm{tr}\,[\Lambda^{[1]}] = 1 \tag{6}$$

である． $V^{\dagger}V = 1_{r_1}$であるので，

$$\sum_{i_2\cdots i_N} \psi^*_{a_1 i_2 \cdots i_N} \psi_{a'_1 i_2 \cdots i_N} = \sum_{i_2\cdots i_N} \sqrt{\Lambda^{[1]}_{a_1,a_1}} \sqrt{\Lambda^{[1]}_{a'_1,a'_1}} V^*_{a_1,i_2\cdots i_N} V_{a_1,i_2\cdots i_N} = \delta_{a_1 a'_1} \Lambda^{[1]}_{a_1,a_1}, \tag{7}$$

$$\sum_{a_1 i_2 \cdots i_N} \psi^*_{a_1 i_2 \cdots i_N} \psi_{a_1 i_2 \cdots i_N} = \sum_{a_1} \Lambda^{[1]}_{a_1,a_1} = 1 \tag{8}$$

である．よって波動関数$\psi_{a_1 i_2 \cdots i_N}$も規格化条件を満たす．行列$\psi_{a_1 i_1 i_2 \cdots i_N}$に対して，分割$[a_1 i_2] : [i_3 \cdots i_N]$に対してSDを実行して，

$$\psi_{a_1 i_2 \cdots i_N} = \sum_{a_2=1}^{r_2} U_{(a_1 i_2),a_2} \sqrt{\Lambda^{[2]}_{a_2,a_2}} V^{\dagger}_{a_2,(i_3\cdots i_N)} \tag{9}$$

$$= \sum_{a_2=1}^{r_2} A^{[2]i_2}_{a_1 a_2} \psi_{a_2 i_3 \cdots i_N}, \quad (r_2 \le r_1 d), \tag{10}$$

$$\mathrm{tr}\,[\Lambda^{[2]}] = 1, \tag{11}$$

を得る．

$$A^{[2]i_2}_{a_1 a_2} = U_{(a_1 i_2),a_2}, \quad \psi_{a_2 i_3 \cdots i_N} = \sqrt{\Lambda^{[2]}_{a_2,a_2}} V^{\dagger}_{a_2,(i_3\cdots i_N)} \tag{12}$$

と置いた．同様にして，$n = 3, \ldots, N-1$に対して，分割$[a_{n-1} \cdots i_n] : [i_{n+1} \cdots i_N]$に対してSDを実行すると，

$$\psi_{a_{n-1} i_n \cdots i_N} = \sum_{a_n=1}^{r_n} U_{(a_{n-1} i_n),a_n} \sqrt{\Lambda^{[n]}_{a_n,a_n}} V^{\dagger}_{a_n,(i_{n+1}\cdots i_N)} = \sum_{a_n=1}^{r_n} A^{[n]i_n}_{a_{n-1} a_n} \psi_{a_n i_{n+1} \cdots i_N}, \tag{13}$$

$$r_n \le \min(r_{n-1} d, d^{N-n}), \tag{14}$$

$$\mathrm{tr}\,[\Lambda^{[n]}] = 1, \tag{15}$$

$$A^{[n]i_n}_{a_{n-1} a_n} = U_{(a_{n-1} i_n),a_n}, \tag{16}$$

$$\psi_{a_n i_{n+1} \cdots i_N} = \sqrt{\Lambda^{[n]}_{a_n,a_n}} V^{\dagger}_{a_n,(i_{n+1}\cdots i_N)}, \tag{17}$$

を得る．最後に$n=N$については

$$A^{[N]i_N}_{a_{N-1}} = \psi_{a_{N-1}i_N} \tag{18}$$

と書き換える．

さて，$A^{[n]i_n}_{a_{n-1}a_n} = U_{(a_{n-1}i_n),a_n}$は正規直交集合であるから，

$$\sum_{i_n=1}^{d}[A^{[n]i_n\dagger}A^{[n]i_n}]_{a_n a'_n} = \sum_{a_{n-1}=1}^{r_{n-1}}\sum_{i_n=1}^{d} U^*_{(a_{n-1}i_n),a_n}U_{(a_{n-1}i_n),a'_n} = \delta_{a_n a'_n}, \quad a_n, a'_n = 1,\dots,r_n, \tag{19}$$

$$n = 1,\dots,N-1, \tag{20}$$

が成立．$n=N$についても$A^{[N]i_N}_{a_{N-1}} = \psi_{a_N-1 i_N}$は規格化されているので，

$$\sum_{i_N=1}^{d} A^{[N]i_N\dagger}A^{[N]i_N} = \sum_{a_{N-1}=1}^{r_{N-1}}\sum_{i_N=1}^{d} A^{[N]i_N*}_{a_{N-1}}A^{[N]i_N}_{a_{N-1}} = 1 \tag{21}$$

が成立する．行列表示すると，

$$\sum_{i_n=1}^{d} A^{[n]i_n\dagger}A^{[n]i_n} = 1_{r_n}, \quad n = 1,\dots,N. \tag{22}$$

さらにVは正規直交集合であるから，

$$\sum_{i_n\cdots i_N}\psi^*_{a_{n-1}i_n\cdots i_N}\psi_{a'_{n-1}i_n\cdots i_N} = \Lambda^{[n-1]}_{a_{n-1},a_{n-1}}\delta_{a_{n-1}a'_{n-1}}, \quad n = 2,\dots,N, \tag{23}$$

であるが，左辺は分解$\psi_{a_{n-1}i_n\cdots i_N} = \sum_{a_n=1}^{r_n} U_{(a_{n-1}i_n),a_n}\sqrt{\Lambda^{[n]}_{a_n,a_n}}V^\dagger_{a_n,(i_{n+1}\cdots i_N)}, (n = 2,\dots,N-1)$を代入して，

$$\sum_{i_n\cdots i_N}\psi^*_{a_{n-1}i_n\cdots i_N}\psi_{a'_{n-1}i_n\cdots i_N} \tag{24}$$

$$= \sum_{i_n\cdots i_N}\sum_{a_n,a'_n=1}^{r_n} U^*_{(a_{n-1}i_n),a_n}\sqrt{\Lambda^{[n]}_{a_n,a_n}}V^T_{a_n,(i_{n+1}\cdots i_N)}U_{(a'_{n-1}i_n),a'_n}\sqrt{\Lambda^{[n]}_{a'_n,a'_n}}V^\dagger_{a'_n,(i_{n+1}\cdots i_N)} \tag{25}$$

$$= \sum_{i_n}\sum_{a_n=1}^{r_n} U^*_{(a_{n-1}i_n),a_n}\Lambda^{[n]}_{a_n,a_n}U_{(a'_{n-1}i_n),a_n} \tag{26}$$

$$= \sum_{i_n}\sum_{a_n=1}^{r_n} A^{[n]i_n*}_{a_{n-1}a_n}\Lambda^{[n]}_{a_n,a_n}A^{[n]i_n}_{a'_{n-1}a_n} \tag{27}$$

$$= \sum_{i_n}[A^{[n]i_n}\Lambda^{[n]}A^{[n]i_n\dagger}]_{a'_{n-1}a_{n-1}} \tag{28}$$

となる．$n=N$については形式的に$\Lambda^{[N]} = 1$として，

$$\sum_{i_N}\psi^*_{a_{N-1}i_N}\psi_{a'_{N-1}i_N} = \sum_{i_N}A^{[N]i_N*}_{a_{N-1}}A^{[N]i_N}_{a'_{N-1}} = \sum_{i_N}A^{[N]i_N}_{a'_{N-1}}\Lambda^{[N]}A^{[N]i_N*}_{a_{N-1}} = \sum_{i_N}[A^{[N]i_N}\Lambda^{[N]}A^{[N]i_N\dagger}]_{a'_{N-1}a_{N-1}} \tag{29}$$

より，$n=N$についても成立．$n=1$については直接計算して，

$$\sum_{i_1}A^{[1]i_1}\Lambda^{[1]}A^{[1]i_1\dagger} = \sum_{i_1}\sum_{a_1=1}^{r_1}A^{[1]i_1}_{a_1}\Lambda^{[1]}_{a_1,a_1}A^{[1]i_1*}_{a_1} = \sum_{i_1}\sum_{a_1=1}^{r_1}U_{i_1,a_1}\Lambda^{[1]}_{a_1,a_1}U^*_{i_1,a_1} = \sum_{a_1=1}^{r_1}\Lambda^{[1]}_{a_1,a_1} = 1 \tag{30}$$

を得る．形式的に$\Lambda^{[0]}=1$と置くと，結局，

$$\sum_{i_n} A^{[n]i_n}\Lambda^{[n]}A^{[n]i_n\dagger}=\Lambda^{[n-1]},\quad n=1,\ldots,N, \tag{31}$$

が成立する．

最後にボンド次元について見積もると，$r_1\leq d, r_n\leq r_{n-1}d$より$r_n\leq d^n$．よって，

$$r_n\leq \min(d^n,d^{N-n})\leq d^{\lfloor N/2\rfloor}. \tag{32}$$

$\lfloor x\rfloor$はxの整数部分である．これが任意のnについて成立するので，$r\leq d^{\lfloor N/2\rfloor}$を得る．□

定理1.1の1,2,3を満たすOBC-MPSを標準形にある，と言う．

- OBC-MPSの標準形は，SDの特異値の順番の入れ替えと縮退した特異値の固有空間の特異ベクトルの選び方を除き，一意的．

これは構成から明らか．

- $\Lambda^{[m]}$は縮約密度行列$\rho_m=\mathrm{tr}_{\,m+1,\ldots,N}\left|\psi\right\rangle\left\langle\psi\right|$の正の固有値を並べた対角行列である．

なぜなら，

$$\rho_m=\sum_{i_1,\ldots,i_N,j_1,\ldots,j_N}\mathrm{tr}_{\,m+1,\ldots N}A^{[1]}_{i_1}\cdots A^{[N]}_{i_N}\left|i_1\cdots i_N\right\rangle\left\langle j_1\cdots j_N\right|A^{[N]\dagger}_{j_N}\cdots A^{[1]\dagger}_{j_1} \tag{33}$$

$$=\sum_{i_1,\ldots,i_m,j_1,\ldots,j_m}\sum_{i_{m+1},\ldots,i_N}A^{[1]}_{i_1}\cdots A^{[m]}_{i_m}A^{[m+1]}_{i_{m+1}}\cdots A^{[N]}_{i_N}\left|i_1\cdots i_m\right\rangle\left\langle j_1\cdots j_m\right|A^{[N]\dagger}_{i_N}\cdots A^{[m+1]\dagger}_{i_{m+1}}A^{[m]\dagger}_{j_m}\cdots A^{[1]\dagger}_{j_1}. \tag{34}$$

ここで，

$$\sum_{i_N}A^{[N]}_{i_N}A^{[N]^\dagger}_{i_N}=A^{[N]}_{i_N}\Lambda^{[N]}A^{[N]^\dagger}_{i_N}=\Lambda^{[N-1]}, \tag{35}$$

$$\sum_{i_{N-1}}A^{[N-1]}_{i_{N-1}}\Lambda^{[N-1]}A^{[N-1]^\dagger}_{i_{N-1}}=\Lambda^{[N-2]}, \tag{36}$$

$$\cdots \tag{37}$$

に注意すると，

$$\rho_m=\sum_{i_1,\ldots,i_m,j_1,\ldots,j_m}A^{[1]}_{i_1}\cdots A^{[m]}_{i_m}\Lambda^{[m]}A^{[m]\dagger}_{j_m}\cdots A^{[1]\dagger}_{j_1}\left|i_1\cdots i_m\right\rangle\left\langle j_1\cdots j_m\right| \tag{38}$$

$$=\sum_{i_1,\ldots,i_m,j_1,\ldots,j_m}[A^{[1]}_{i_1}]_{a_1}\cdots[A^{[m]}_{i_m}]_{a_{m-1}a_m}\Lambda^{[m]}_{a_m,a_m}[A^{[m]\dagger}_{j_m}]_{a_m a'_{m-1}}\cdots[A^{[1]\dagger}_{j_1}]_{a'_1}\left|i_1\cdots i_m\right\rangle\left\langle j_1\cdots j_m\right|. \tag{39}$$

ここで，状態

$$\left|\phi_{a_m}\right\rangle=\sum_{i_1,\ldots,i_m}[A^{[1]}_{i_1}]_{a_1}\cdots[A^{[m]}_{i_m}]_{a_{m-1}a_m}\left|i_1\cdots i_m\right\rangle \tag{40}$$

は

$$\langle\phi_{a_m}|\phi_{a'_m}\rangle = \sum_{i_1\ldots i_m} [A^{[m]\dagger}_{i_m}]_{a_m a'_{m-1}} \cdots [A^{[1]\dagger}_{i_1}]_{a'_1} [A^{[1]}_{i_1}]_{a_1} \cdots [A^{[m]}_{i_m}]_{a_{m-1}a'_m} \tag{41}$$

$$= \sum_{i_2\ldots i_m} [A^{[m]\dagger}_{i_m}]_{a_m a'_{m-1}} \cdots [A^{[2]\dagger}_{i_2}]_{a'_2 a'_1} \delta_{a'_1 a_1} [A^{[2]}_{i_2}]_{a_1 a_2} \cdots [A^{[m]}_{i_m}]_{a_{m-1}a'_m} \tag{42}$$

$$= \sum_{i_2\ldots i_m} [A^{[m]\dagger}_{i_m}]_{a_m a'_{m-1}} \cdots [A^{[2]\dagger}_{i_2}]_{a'_2 a_1} [A^{[2]}_{i_2}]_{a_1 a_2} \cdots [A^{[m]}_{i_m}]_{a_{m-1}a'_m} \tag{43}$$

$$= \sum_{i_m} [A^{[m]\dagger}_{i_m}]_{a_m a_{m-1}} [A^{[m]}_{i_m}]_{a_{m-1}a'_m} = \delta_{a_m a'_m} \tag{44}$$

より正規直交集合であり，固有展開

$$\rho_m = \sum_{a_m=1}^{r_m} \Lambda^{[m]}_{a_m,a_m} |\phi_{a_m}\rangle\langle\phi_{a_m}| \tag{45}$$

を得る．

（メモ：$1,\ldots,m$サイトについてトレースを取った縮約密度行列についても計算する．）

- 任意の$\max_m \mathrm{rank}(\rho_m) \le D$なる状態は，ボンド次元DのMPSで表現できる．

$\Lambda^{[m]}$のランクは一意なので，$\mathrm{rank}(\rho^m) = r_m$より明らか．

Theorem 1.2 (行列の自由度[3]). *OBC-MPS*

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1,\ldots,i_N} B^{[1]}_{i_1} \cdots B^{[N]}_{i_N} |i_1 \cdots i_N\rangle \tag{46}$$

を考える．規格化$\langle\psi|\psi\rangle = 1$を仮定する． $B^{[m]}_i$は$D_{m-1} \times D_m$行列である． $D_0 = D_N = 1$である．縮約密度行列$\rho_{[1\cdots m]}$のランクをr_mとする． $r_m \times D_m$行列Y_m，$D_m \times r_m$行列Z_jであって，$Y_m Z_m = 1_{r_m}$を満たすものが存在して，

$$A^{[1]}_i = Z_1 B^{[1]}_i, \quad A^{[m]}_i = Y_{m-1} B^{[m]}_i Z_m, \quad (1 < m < N), \quad A^{[N]}_i = B^{[N]}_i Y_{N-1}, \tag{47}$$

とすると*OBC-MPS*

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1,\ldots,i_N} A^{[1]}_{i_1} \cdots A^{[N]}_{i_N} |i_1 \cdots i_N\rangle \tag{48}$$

は標準形．

(証明) [3]を追う． $B^{[m]}_i$を$D_{m-1} \times D_m$行列とする． $D_0 = D_N = 1$である．

(Step 1.) まず，$\sum_i A^{[m]\dagger}_i A^{[m]}_i = \mathbf{1}$を満たす行列$A^{[m]}_i$をSVDで見つける．左からSVDを実行する．

$$B^{[1]}_{i,a} = \sum_{b=1}^{r_1} A^{[1]}_{i,b} \Delta^{[1]}_b U^{[1]\dagger}_{b,a}. \tag{49}$$

ここで，$\Delta_b^{[1]} > 0$であり，$A^{[1]}, U^{[1]}$は正規直交集合，つまり，$\sum_i A_{i,b}^{[1]*} A_{i,b'}^{[1]} = \delta_{bb'}, \sum_a U_{a,b}^{[1]*} U_{a,b'}^{[1]} = \delta_{bb'}$. 後者は$U^{[1]\dagger} U^{[1]} = 1_{r_1}$に注意．$Z_1 = \Delta^{[1]} U^{[1]\dagger}$と置く．$Z_1$は右逆行列を持つ，つまり，$Z_1 U^{[1]} (\Delta^{[1]})^{-1} = 1_{r_1}$に注意．$\tilde{B}_i^{[2]} = Z_1 B_i^{[2]}$と置き，$\tilde{B}_{i,b_1 a_2}^{[2]} (= \sum_{a_1} [Z_1]_{b_1,a_1} B_{i,a_1 a_2}^{[2]})$の足の分割$[ib_1] : [a_2]$に対してSVDを実行すると

$$\tilde{B}_{i,b_1 a_2}^{[2]} = \sum_{b_2=1}^{r_2} A_{i,b_1 b_2}^{[2]} \Delta_{b_2}^{[2]} U_{b_2,a_2}^{[2]\dagger} \tag{50}$$

を得る．$A^{[2]}, U^{[2]}$は正規直交集合であるので，$\sum_i \sum_{b_1=1}^{r_1} A_{i,b_1 b_2}^{[2]*} A_{i,b_1 b_2'}^{[2]} = \delta_{b_2 b_2'}$と$U^{[2]\dagger} U^{[2]} = 1_{r_2}$に注意. $Z_2 = \Delta^{[2]} U^{[2]\dagger}$と置く．$Z_2$は右逆行列を持つ：$Z_2 U^{[2]} (\Delta^{[2]})^{-1} = 1_{r_2}$. 同様に$n = 3, \ldots, N-1$に対して，

$$\tilde{B}_{i,b_{n-1} a_n}^{[n]} = \sum_{b_n=1}^{r_n} A_{i,b_{n-1} b_n}^{[n]} \Delta_{b_n}^{[n]} U_{b_n,a_n}^{[n]\dagger}, \tag{51}$$

$$\sum_i \sum_{b_{n-1}=1}^{r_{n-1}} A_{i,b_{n-1} b_n}^{[n]*} A_{i,b_{n-1} b_n'}^{[n]} = \delta_{b_n b_n'}, \tag{52}$$

$$Z_n = \Delta^{[n]} U^{[n]\dagger}, \quad Z_n U^{[n]\dagger} (\Delta^{[n]})^{-1} = 1_{r_n}, \tag{53}$$

$$\tilde{B}_i^{[n+1]} = Z_n B_i^{[n]}, \tag{54}$$

を得る．$n = N$は

$$A_{i,b_{N-1}}^{[N]} := \tilde{B}_{i,b_{N-1}}^{[N]} = [Z_{N-1}]_{b_{N-1},a_{N-1}} B_{i,a_{N-1}}^{[N]} \tag{55}$$

と置くと，

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1,\ldots,i_N} A_{i_1}^{[1]} \cdots A_{i_N}^{[N]} |i_1 \cdots i_N\rangle \tag{56}$$

であり，ノルムは

$$\langle\psi|\psi\rangle = \sum_{i_1 \ldots i_N} A_{i_N,a_{N-1}}^{[N]\dagger} \cdots A_{i_2,a_2 a_1}^{[2]\dagger} A_{i_1,a_1}^{[1]^\dagger} A_{i_1,a_1'}^{[1]} A_{i_2,a_1' a_2'}^{[2]} \cdots A_{i_N,a_{N-1}'}^{[N]} = \sum_{i_N} A_{i_N,a_{N-1}}^{[N]\dagger} A_{i_N,a_{N-1}}^{[N]} \tag{57}$$

であるので，規格化条件$\langle\psi|\psi\rangle = 1$を課すと，$\sum_{i_N} A_{i_N}^{[N]\dagger} A_{i_N}^{[N]} = 1$を得る．

$$A_i^{[1]} = B_i^{[1]} U^{[1]} (\Delta^{[1]})^{-1}, \tag{58}$$

$$A_i^{[n]} = \tilde{B}_i^{[n]} U^{[n]} (\Delta^{[n]})^{-1} = \Delta^{[n-1]} U^{[n-1]\dagger} B_i^{[n]} U^{[n]} (\Delta^{[n]})^{-1}, \quad (n = 2, \ldots, N-1), \tag{59}$$

$$A_i^{[N]} = \tilde{B}_i^{[N]} = \Delta^{[N-1]} U^{[N-1]\dagger} B_i^{[N]}, \tag{60}$$

に注意．構成より，$\Delta^{[m]}$は成分が正の$r_m \times r_m$対角行列である．$B_i^{[m]}$は$D_{m-1} \times D_m$行列であるが，$A_i^{[m]}$は$r_{m-1} \times r_m$行列である．

(Step 2.) Step.1の変換により$\sum_i B_i^{[m]\dagger} B_i^{[m]} = \mathbf{1}_{r_m}$を仮定して良い．$r_{N-1} \times r_{N-1}$半正定値エルミート行列$\sum_i B_i^{[N]} B_i^{[N]\dagger}$を対角化すると，（正定値とは限らないことに注意.）

$$\sum_i B_i^{[N]} B_i^{[N]\dagger} = V^{[N-1]} \Lambda^{[N-1]} V^{[N-1]\dagger}. \tag{61}$$

$A_i^{[N]} = V^{[N-1]\dagger} B_i^{[N]}$を導入すると

$$\sum_i A_i^{[N]\dagger} A_i^{[N]} = 1, \quad \sum_i A_i^{[N]} \Lambda^{[N]} A_i^{[N]\dagger} = \Lambda^{[N-1]} \tag{62}$$

を得る．形式的に$\Lambda^{[N]}=1$と書いた．次に半正定値$D_{n-2}\times D_{N-2}$エルミート行列

$$\sum_i B_i^{[N-1]} V^{[N-1]} \Lambda^{[N-1]} V^{[N-1]\dagger} B_i^{[N-1]\dagger} \tag{63}$$

を対角化して，

$$\sum_i B_i^{[N-1]} V^{[N-1]} \Lambda^{[N-1]} V^{[N-1]\dagger} B_i^{[N-1]\dagger} = V^{[N-2]} \Lambda^{[N-2]} V^{[N-2]} \tag{64}$$

を得る． $A_i^{[N-1]} = V^{[N-2]\dagger} B_i^{[N-1]} V^{[N-1]}$を導入すると

$$\sum_i A_i^{[N-1]\dagger} A_i^{[N-1]} = 1_{r_{N-1}}, \quad \sum_i A_i^{[N-1]} \Lambda^{[N-1]} A_i^{[N-1]\dagger} = \Lambda^{[N-2]} \tag{65}$$

を得る． $n=N-2,\dots,2$についても同様.

$$\sum_i B_i^{[n]} V^{[n]} \Lambda^{[n]} V^{[n]\dagger} B_i^{[n]\dagger} = V^{[n-1]} \Lambda^{[n-1]} V^{[n-1]} \tag{66}$$

と対角化して，

$$A_i^{[n]} = V^{[n-1]\dagger} B^{[n]} V^{[n]}, \tag{67}$$

$$\sum_i A_i^{[n]\dagger} A_i^{[n]} = 1_{r_n}, \quad \sum_i A_i^{[n]} \Lambda^{[n]} A_i^{[n]\dagger} = \Lambda^{[n-1]} \tag{68}$$

を得る． $n=1$は

$$A_i^{[1]} = B_i^{[1]} V^{[1]} \tag{69}$$

とすると，

$$\sum_i A_i^{[1]\dagger} A_i^{[1]} = V^{[1]\dagger} \sum_i B_i^{[1]\dagger} B_i^{[1]} V^{[1]} = V^{[1]\dagger} V^{[1]} = 1_{r_1}, \tag{70}$$

は自明に得られる．また，

$$\begin{aligned}
\sum_{i_1} A_{i_1}^{[1]} \Lambda^{[1]} A_{i_1}^{[1]\dagger} &= \sum_{i_1} B_{i_1}^{[1]} V^{[1]} \Lambda^{[1]} V^{[1]\dagger} B_{i_1}^{[1]\dagger} && (71)\\
&= \sum_{i_1 i_2} B_{i_1}^{[1]} V^{[1]} A_{i_2}^{[2]} \Lambda^{[2]} A_{i_2}^{[2]\dagger} V^{[1]\dagger} B_{i_1}^{[1]\dagger} && (72)\\
&= \sum_{i_1 i_2} B_{i_1}^{[1]} B_{i_2}^{[2]} V^{[2]} \Lambda^{[2]} V^{[2]\dagger} B_{i_2}^{[2]\dagger} B_{i_1}^{[1]\dagger} && (73)\\
&= \cdots && (74)\\
&= \sum_{i_1 i_2 \cdots i_N} B_{i_1}^{[1]} \cdots B_{i_N}^{[N]} B_{i_N}^{[N]\dagger} \cdots B_{i_1}^{[1]\dagger} && (75)\\
&= \langle \psi | \psi \rangle = 1 && (76)
\end{aligned}$$

より，

$$\sum_{i_1} A_{i_1}^{[1]} \Lambda^{[1]} A_{i_1}^{[1]\dagger} = 1 = \Lambda^{[0]} \tag{77}$$

を得る． $\operatorname{tr}\Lambda^{[n]}=1$については，

$$\operatorname{tr}\Lambda^{[n-1]} = \operatorname{tr}[\sum_i A_i^{[n]} \Lambda^{[n]} A_i^{[n]\dagger}] = \operatorname{tr}[\sum_i \Lambda^{[n]} A_i^{[n]\dagger} A_i^{[n]}] = \operatorname{tr}\Lambda^{[n]}, \quad n=2,\dots,N, \tag{78}$$

であるので，$\Lambda^{[N]}=1$から，$\operatorname{tr}\Lambda^{[n]}=1, n=1,\dots,N$が従う．

Step 1の変形とまとめて，

$$A_i^{[1]} = B_i^{[1]} U^{[1]} (\Delta^{[1]})^{-1} V^{[1]}, \tag{79}$$

$$A_i^{[n]} = V^{[n-1]\dagger} \Delta^{[n-1]} U^{[n-1]\dagger} B_i^{[n]} U^{[n]} (\Delta^{[n]})^{-1} V^{[n]}, \quad (n = 2, \ldots, N-1), \tag{80}$$

$$A_i^{[N]} = V^{[N-1]\dagger} \Delta^{[N-1]} U^{[N-1]\dagger} B_i^{[N]}. \tag{81}$$

(Step 3.) 半正定値対角行列$\Lambda^{[n]} = \mathrm{diag}(\Lambda_1^{[n]}, \ldots, \Lambda_{r_n}^{[n]})$は一般にはゼロ成分を持つ可能性がある．帰納法により，$\Lambda^{[n]}$がフルランクとなるように，Y_j, Z_jを取り替えることができることを示す．

$$\sum_i A_i^{[n]} \Lambda^{[n]} A_i^{[n]\dagger} = \Lambda^{[n-1]}, \quad n = 1, \ldots, N. \tag{82}$$

$\Lambda^{[N]} = 1$はフルランクである． $\Lambda^{[n+1]}$がフルランクと仮定する． $\tilde{r}_n = \mathrm{rank}(\Lambda^{[n]})$として，

$$\Lambda^{[n]} = \begin{pmatrix} \tilde{\Lambda}^{[n]} & \\ & O_{r_n - \tilde{r}_n} \end{pmatrix} \tag{83}$$

とし，$r_n \times \tilde{r}_n$行列

$$P_n = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{\tilde{r}_n} \\ O_{r_n - \tilde{r}_n} \end{pmatrix} \tag{84}$$

を導入すると，

$$\sum_i A_i^{[n]} P_n \Lambda^{[n]} P_n^\dagger A_i^{[n]\dagger} = \sum_i A_i^{[n]} \Lambda^{[n]} A_i^{[n]\dagger} = \Lambda^{[n-1]} \tag{85}$$

であるので，$r_{n-1} \times \tilde{r}_n$行列への置き換え$A_i^{[n]} \mapsto A_i^{[n]} P_n$は関係式(82)を変えない．また，

$$\sum_i P_n^\dagger A_i^{[n]\dagger} A_i^{[n]} P_n = \mathbf{1}_{\tilde{r}_n}. \tag{86}$$

さらに $A_{i_n}^{[n]} A_{i_{n+1}}^{[n+1]} = A_{i_n}^{[n]} P_n P_n^\dagger A_{i_{n+1}}^{[n+1]}$を示す．十分条件は$(\mathbf{1}_{r_n} - P_n P_n^\dagger) A_i^{[n+1]} = 0$.

$$\mathbf{1}_{r_n} - P_n P_n^\dagger = \begin{pmatrix} O_{\tilde{r}_n} & \\ & \mathbf{1}_{r_n - \tilde{r}_n} \end{pmatrix} \tag{87}$$

より，

$$0 = (\mathbf{1}_{r_n} - P_n P_n^\dagger) \Lambda^{[n]} (\mathbf{1}_{r_n} - P_n P_n^\dagger) = \sum_i (\mathbf{1}_{r_n} - P_n P_n^\dagger) A_i^{[n+1]} \Lambda^{[n+1]} A_i^{[n+1]\dagger} (\mathbf{1}_{r_n} - P_n P_n^\dagger) \tag{88}$$

となる．仮定より$\Lambda^{[n+1]}$は正定値であるので，$(\mathbf{1}_{r_n} - P_n P_n^\dagger) A_i^{[n+1]} = 0$を得る． [2] したがって，$\Lambda^{[n+1]}$がフルランクである仮定のもとで， $\Lambda^{[n]}$の正固有値への固有空間へ行列を

$$A_i^{[n]} \mapsto \tilde{A}_i^{[n]} = A_i^{[n]} P_n, \tag{91}$$

$$A_i^{[n+1]} \mapsto \tilde{A}_i^{[n+1]} = P_n^\dagger A^{[n+1]}, \tag{92}$$

[2]成分で書くと

$$\sum_{i,b} [X_i^\dagger]_{ab} \Lambda_b [X_i]_{bc} = \sum_{i,b} [X_i]_{ba}^* \Lambda_b [X_i]_{bc} = 0. \tag{89}$$

特に，$a = c$とすると，

$$\sum_{i,b} \Lambda_b |[X_i]_{ba}|^2 = 0 \tag{90}$$

より，$\Lambda_b > 0$の場合は$[X_i]_{ba} = 0$を得る．

と制限しても関係式

$$\sum_i \tilde{A}_i^{[n]}\tilde{\Lambda}^{[n]}\tilde{A}_i^{[n]\dagger} = \Lambda^{[n-1]}, \quad \sum_i \tilde{A}_i^{[n]\dagger}\tilde{A}_i^{[n]} = \mathbf{1}_{\tilde{r}_n}, \tag{93}$$

を保ち，さらに波動関数を変えない

$$\tilde{A}_{i_n}^{[n]}\tilde{A}_{i_{n+1}}^{[n+1]} = A_{i_n}^{[n]}A_{i_{n+1}}^{[n+1]} \tag{94}$$

ことが示された． $\Lambda^{[n]}$の正固有値への制限を行列Y_j, Z_jに取り入れると，Step 1, Step 2と合わせて，

$$A_i^{[1]} = B_i^{[1]}U^{[1]}(\Delta^{[1]})^{-1}V^{[1]}P_1, \tag{95}$$

$$A_i^{[n]} = P_{n-1}^\dagger V^{[n-1]\dagger}\Delta^{[n-1]}U^{[n-1]\dagger}B_i^{[n]}U^{[n]}(\Delta^{[n]})^{-1}V^{[n]}P_n, \quad (n = 2, \ldots, N-1), \tag{96}$$

$$A_i^{[N]} = P_{N-1}^\dagger V^{[N-1]\dagger}\Delta^{[N-1]}U^{[N-1]\dagger}B_i^{[N]} \tag{97}$$

とまとめられる．つまり，

$$Y_n = P_n^\dagger V^{[n]\dagger}\Delta^{[n]}U^{[n]\dagger}, \tag{98}$$

$$Z_n = U^{[n]}(\Delta^{[n]})^{-1}V^{[n]}P_n \tag{99}$$

である．

$$Y_nZ_n = P_n^\dagger P_n = \mathbf{1}_{\tilde{r}_n} \tag{100}$$

を満たす．□

2 並進対称なMPS

並進対称な純粋状態のMPSを扱いたい．つまり，以下で定義される並進演算子T,

$$\hat{T}|i_1i_2\cdots i_N\rangle = |i_Ni_1\cdots i_{N-1}\rangle \tag{101}$$

の固有状態

$$\hat{T}|\psi\rangle = e^{iP}|\psi\rangle \tag{102}$$

なる状態$|\psi\rangle$のMPSについて考える．以下では$e^{iP} \neq 1$なる状態については一切扱わない．運動量$e^{iP} = 1$を持つ並進対称な純粋状態をTI状態と呼ぶことにする．以下の定理がある．

Theorem 2.1 (サイト依存しないMPS[3]). $\hat{T}|\psi\rangle = |\psi\rangle$なる純粋状態（つまり，*TI*状態）$|\psi\rangle$に対して，$A_i^{[n]}$がサイトに依存しない以下の表現を持つ．

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1,\ldots,i_N} \mathrm{tr}\left[A_{i_1}\cdots A_{i_N}\right]|i_1\cdots i_N\rangle. \tag{103}$$

この表現をTI-MPSと呼ぶ． OBC-MPSからサイト依存しない上記MPSを得る際に，一般にはボンド次元がDからNDに増大する．

(証明) $\hat{T}|\psi\rangle = |\psi\rangle$を仮定する． $|\psi\rangle$のOBC-MPSを

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1\cdots i_N} A_{i_1}^{[1]}\cdots A_{i_N}^{[N]}|i_1\cdots i_N\rangle \tag{104}$$

とする．

$$\sum_{i_1\cdots i_N} A^{[1]}_{i_{1+j}} A^{[2]}_{i_{2+j}} \cdots A^{[N]}_{i_j} |i_1 i_2 \cdots i_N\rangle = \sum_{i_1\cdots i_N} A^{[1]}_{i_1} \cdots A^{[N]}_{i_N} |i_1 i_2 \cdots i_N\rangle . \tag{105}$$

全てのサイトについて平均化する．

$$B_i = N^{-\frac{1}{N}} \begin{pmatrix} 0 & A_i^{[1]} & & & \\ & 0 & A_i^{[2]} & & \\ & & \cdots & & \\ & & & 0 & A_i^{[N-1]} \\ A_i^{[N]} & & & & 0 \end{pmatrix} \tag{106}$$

を導入すると，

$$\sum_{i_1,\ldots,i_N} \mathrm{tr}\,[B_{i_1}\cdots B_{i_N}]\,|i_1\cdots i_N\rangle = \frac{1}{N}\sum_{i_1\cdots i_N}\sum_{j=1}^{N} \mathrm{tr}\,[A^{[1+j]}_{i_1} A^{[2+j]}_{i_2}\cdots A^{[N+j]}_{i_N}]\,|i_1\cdots i_N\rangle \tag{107}$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{i_1\cdots i_N}\sum_{j=0}^{N-1} \mathrm{tr}\,[A^{[1+j]}_{i_{1+j}} A^{[2+j]}_{i_{2+j}}\cdots A^{[N+j]}_{i_{N+j}}]\,|i_{1+j}\cdots i_{N+j}\rangle \tag{108}$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{i_1\cdots i_N}\sum_{j=0}^{N-1} A^{[1]}_{i_1} A^{[2]}_{i_2}\cdots A^{[N]}_{i_N}\,|i_{1+j}\cdots i_{N+j}\rangle \tag{109}$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{i_1\cdots i_N}\sum_{j=0}^{N-1} A^{[1]}_{i_1} A^{[2]}_{i_2}\cdots A^{[N]}_{i_N}\hat{T}^{-j}\,|i_1\cdots i_N\rangle \tag{110}$$

$$= \frac{1}{N}\sum_{j=0}^{N-1} \hat{T}^{-j}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle . \tag{111}$$

最後に仮定$\hat{T}\,|\psi\rangle = |\psi\rangle$を用いた． □

[3]の定理4に移る前に，いくつか準備する．

$D\times D$行列の集合$\{A_i\}_{i=1,\ldots,d}$に対して，

$$X \mapsto E(X) := \sum_i A_i^\dagger X A_i \tag{112}$$

を$D\times D$行列全体の空間に作用する線形写像とする． Eは半正定値性を保つため，positiveである．詳しくはC参照．有限次元線形空間における線形写像Eのスペクトル半径とは，固有値をλ_aと書いて，$\max_a |\lambda_a|$のこと． Eを成分表示すると，

$$E(X) = \sum_{jk} \langle j|E(X)|k\rangle\,|j\rangle\langle k| , \tag{113}$$

$$E_{jk,lm} = \langle j|E(|l\rangle\langle m|)|k\rangle = \sum_i [A_i^\dagger]_{jl}[A_i]_{mk} = \sum_i [A_i]^*_{lj}[A_i]_{mk} \tag{114}$$

である．エルミート共役は

$$[E^\dagger]_{jk,lm} = (E_{lm,jk})^* = (\sum_i [A_i]^*_{jl}[A_i]_{km})^* = \sum_i [A_i]_{jl}[A_i]^*_{km} = \sum_i [A_i^T]_{lj}[A_i^\dagger]_{mk} \tag{115}$$

よって，

$$E^\dagger(X) = \sum_i A_i X A_i^\dagger \tag{116}$$

である．一般には$E \neq E^\dagger$であるため，Eの固有値は複素数であることに注意．特性方程式は$0 = \det(\lambda - E^\dagger) = [\det(\lambda^* - E)]^*$より，$\lambda$が特性方程式$\det(\lambda - E) = 0$の解であれば，$\lambda^*$は特性方程式$\det(\lambda^* - E^\dagger) = 0$の解．よって，重複を考慮しない固有値の集合，つまりスペクトル$\lambda(E) = \{\lambda \in \mathbb{C} | \lambda - E \text{ is not invertible}\}$として$\lambda(E^\dagger) = [\lambda(E)]^* = \{\lambda^* \in \mathbb{C} | \lambda \in \lambda(E)\}$が成立する．特に，$E$と$E^\dagger$のスペクトル半径は一致する．さらに，同一固有値を持つ固有ベクトルの数についても一致する．なぜなら，EのJordan標準形

$$P^{-1}EP = \bigoplus_j \begin{pmatrix} \lambda_j & 1 & & \\ & \lambda_j & 1 & \\ & & \cdots & \\ & & & \lambda_j \end{pmatrix} \tag{117}$$

に対して，

$$P^\dagger E^\dagger (P^\dagger)^{-1} = \bigoplus_j \begin{pmatrix} \lambda_j^* & & & \\ 1 & \lambda_j^* & & \\ & 1 & \cdots & \\ & & & \lambda_j^* \end{pmatrix} \tag{118}$$

であるが，各ブロックに対して相似変換

$$\begin{pmatrix} & & & 1 \\ & & 1 & \\ & \cdots & & \\ 1 & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_j^* & & & \\ 1 & \lambda_j^* & & \\ & 1 & \cdots & \\ & & & \lambda_j^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} & & & 1 \\ & & 1 & \\ & \cdots & & \\ 1 & & & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_j^* & 1 & & \\ & \lambda_j^* & 1 & \\ & & \cdots & \\ & & & \lambda_j^* \end{pmatrix} \tag{119}$$

により再びJordan標準形に相似変換可能だからである．

さてエルミート共役は内積$\langle X, Y \rangle$が定義されている場合に$\langle E(X), Y \rangle = \langle X, E^\dagger(Y) \rangle$とそもそも定義されるが，上の計算で暗に仮定された内積の定義はなんだろうか？ Hilbert-Schmidt内積

$$\langle X, Y \rangle = \mathrm{tr}\,[X^\dagger Y] \tag{120}$$

である．実際，

$$\langle E(X), Y \rangle = \mathrm{tr}\,[E(X)^\dagger Y] = \sum_i \mathrm{tr}\,[(A_i^\dagger X A_i)^\dagger Y] = \sum_i \mathrm{tr}\,[A_i^\dagger X^\dagger A_i Y] = \sum_i \mathrm{tr}\,[X^\dagger A_i Y A_i^\dagger] = \langle X, E^\dagger(Y) \rangle \tag{121}$$

が成立する．

Theorem 2.2. 有限系の*TI-MPS*表現に対して，状態$|\psi\rangle$を変えずに行列A_iを以下の形に分解できる．

$$A_i = \begin{pmatrix} A_i^1 & 0 & 0 \\ 0 & A_i^2 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots \end{pmatrix}. \tag{122}$$

A_i^jは以下を満たす： λ_jを$\mathcal{E}_j(X) = \sum_i A_i^{j\dagger} X A_i^j$のスペクトル半径とする．

1. $\sum_i A_i^{j\dagger} A_i^j = \lambda_j \mathbf{1}$であり，$\mathbf{1}$は線形写像$\mathcal{E}_j(X) = \sum_i A_i^{j\dagger} X A_i^j$の固有値$\lambda_j$なる唯一の固有ベクトル．
2. ある正定値対角行列Λ^jが存在して，$\sum_i A_i^j \Lambda^j A_i^{j\dagger} = \lambda_j \Lambda^j$であり，$\Lambda^j$は線形写像$\mathcal{E}_j^\dagger(X) = \sum_i A_i^j X A_i^{j\dagger}$の固有値$\lambda_j$なる唯一の固有ベクトル．

初期のボンド次元がDであれば，上記のボンド次元はD以下である．

注意：[3]では$\mathcal{E}_j^\dagger$の固有ベクトルの唯一性に言及がないが，唯一性なしにΛ^jが正定値であることを示すことができなかったので，付け足した．

まず，以下を示す．

Lemma 2.3. 線形写像$E:\mathbb{C}^{D\times D}\to\mathbb{C}^{D\times D}, E(X)=\sum_i A^{i\dagger}XA_i$とする．固有値が正の実数$\lambda>0$なる正定値固有ベクトル$X$が存在したとする．このとき固有値$\lambda$なる固有ベクトル$Y$で，$X$の定数倍でないものが存在するならば，同一固有値$\lambda$の半正定値かつ非可逆な固有ベクトルが存在する．また，$E^\dagger(X)=\sum_i A_iXA_i^\dagger$についても同様．

（証明）

$$\sum_i A_i^\dagger XA_i=\lambda X, \tag{123}$$
$$\sum_i A_i^\dagger YA_i=\lambda Y \tag{124}$$

とする． Xは正定値であり，YはXの定数倍ではない．

$$\sum_i A_i^\dagger Y^\dagger A_i=\lambda Y^\dagger \tag{125}$$

であるので，$Y^\dagger$も固有値であり，$Y+Y^\dagger$も固有値．よってYはエルミートとしても良い．エルミート行列$X^{-1/2}YX^{-1/2}$の固有分解を

$$X^{-1/2}YX^{-1/2}=\sum_{a=1}^{D}\lambda_a\left|a\right>\left<a\right|,\quad \lambda_1\geq\cdots\geq\lambda_D \tag{126}$$

とする． $\lambda_1\neq 0$の場合は，線形結合$X-\frac{1}{\lambda_1}Y$はEの固有値λなるエルミートな固有ベクトルであり，かつ

$$X-\frac{1}{\lambda_1}Y=X^{1/2}(1_D-\frac{1}{\lambda_1}X^{-1/2}YX^{-1/2})X^{1/2}=X^{1/2}(\sum_{a=1}^{D}(1-\frac{\lambda_a}{\lambda_1})\left|a\right>\left<a\right|)X^{1/2} \tag{127}$$

と変形すると，$X^{-1/2}YX^{-1/2}$は半正定値かつ非可逆であることが分かる． [3] $\lambda_1=0$のときは，$-Y$が半正定値かつ非可逆な固有値λの固有ベクトルである．

$A_i\to A_i^\dagger$と変更すると，エルミート共役な線形写像$E^\dagger$についても同様の補題が得られる．□

次に以下を示す．

Lemma 2.4. 線形写像$E:\mathbb{C}^{D\times D}\to\mathbb{C}^{D\times D}, E(X)=\sum_i A_i^\dagger XA_i$とする．半正定値，非可逆，かつ固有値が正の実数であるような固有ベクトルXが存在すれば，Xを対角化するユニタリ変換により，*TI-MPS*表現をブロック対角化した行列

$$A_i\to\begin{pmatrix}B_i & \\ & C_i\end{pmatrix} \tag{128}$$

で置き換えることができる．（相似変換でブロック対角化できるとは言っていないので注意．）

[3] X,Yが半正定値のとき，XYXはエルミートかつ，$z^\dagger XYXz=(Xz)^\dagger Y(Xz)\geq 0$であるので，$XYX$は半正定値．

（証明）

$$X = \sum_{a=1}^{r} \lambda_a \left|a\right\rangle \left\langle a\right|, \quad \langle a|b\rangle = \delta_{ab}, \tag{129}$$

と固有分解する．$\lambda_a > 0$であり，$r = \mathrm{rank}(X)$である．

$$\sum_{a=1}^{r} \sum_{i} \lambda_a A_i^\dagger \left|a\right\rangle \left\langle a\right| A_i = \sum_{a=1}^{r} \lambda_a \left|a\right\rangle \left\langle a\right| \tag{130}$$

である．よって補題A.3より，$\{A_i^\dagger \left|a\right\rangle\}_{i,a}$と$\{\left|a\right\rangle\}_a$の張る部分空間は一致する． $R = \mathrm{Span}(\{A_i^\dagger \left|a\right\rangle\}_{i,a}) = \mathrm{Span}(\{\left|a\right\rangle\}_a)$と書く． Rへの射影を$P_R(= \sum_{a=1}^{r} \left|a\right\rangle \left\langle a\right|)$と書く． $A_i^\dagger \left|a\right\rangle \in R$であるので$A_i^\dagger P_R = P_R A_i^\dagger P_R$が成立する．よって，

$$P_R A_i = P_R A_i P_R. \tag{131}$$

$R^\perp$をRの（標準内積に対する）直交補空間とする． $\mathrm{tr} = \mathrm{tr}_R + \mathrm{tr}_{R^\perp}$であるので，

$$\left|\psi\right\rangle = \sum_{i_1,\ldots,i_N} \mathrm{tr}_R(A_{i_1} \cdots A_{i_N}) \left|i_1 \cdots i_N\right\rangle + \sum_{i_1,\ldots,i_N} \mathrm{tr}_{R^\perp}(A_{i_1} \cdots A_{i_N}) \left|i_1 \cdots i_N\right\rangle \tag{132}$$

であるが，上記性質より

$$\mathrm{tr}_R(A_{i_1} \cdots A_{i_N}) = \mathrm{tr}\,(P_R A_{i_1} \cdots A_{i_N}) = \mathrm{tr}\,(P_R A_{i_1} P_R \cdots P_R A_{i_N} P_R) \tag{133}$$

であるので，第1項については$r \times r$行列$B_i = P_R A_i P_R$で置き換えて良い．第2項についても

$$\mathrm{tr}_{R^\perp}(A_{i_1} \cdots A_{i_N}) = \mathrm{tr}\,(P_{R^\perp} A_{i_1} \cdots A_{i_N} P_{R^\perp}) \tag{134}$$

であるが，

$$P_{R^\perp} A_i = P_{R^\perp} A_i P_{R^\perp} + P_{R^\perp} A_i P_R \tag{135}$$

より

$$P_{R^\perp} A_{i_1} A_{i_2} \cdots P_{R^\perp} = P_{R^\perp} A_{i_1} P_{R^\perp} A_{i_2} \cdots P_{R^\perp} + P_{R^\perp} A_{i_1} P_R A_{i_2} \cdots P_{R^\perp} \tag{136}$$

となるが第2項については(131)よりゼロ．第1項については変換(135)を繰り返すと，結局

$$\mathrm{tr}_{R^\perp}(A_{i_1} \cdots A_{i_N}) = \mathrm{tr}\,(P_{R^\perp} A_{i_1} P_{R^\perp} \cdots P_{R^\perp} A_{i_N} P_{R^\perp}) \tag{137}$$

を得る．これは$(D-r) \times (D-r)$行列$C_i = P_{R^\perp} A_i P_{R^\perp}$で置き換えて良い．よって， Xが可逆でない場合は状態$\left|\psi\right\rangle$はブロック対角化された行列（Xが対角化される基底）

$$\begin{pmatrix} B_i & \\ & C_i \end{pmatrix}, \quad B_i = P_R A_i P_R, \quad C_i = P_{R^\perp} A_i P_{R^\perp} \tag{138}$$

によるMPS表現で置き換えて良いことがわかった．□

エルミート共役な線形写像$E^\dagger$についても微修正で同様の補題が成立する．

Lemma 2.5. 線形写像$E^\dagger : \mathbb{C}^{D\times D} \to \mathbb{C}^{D\times D}, E^\dagger(X) = \sum_i A_i X A_i^\dagger$とする．半正定値，非可逆，かつ固有値が正の実数であるような固有ベクトルXが存在すれば，*TI-MPS*表現をブロック対角化した行列

$$A_i \to \begin{pmatrix} B_i & \\ & C_i \end{pmatrix} \tag{139}$$

で置き換えることができる．（相似変換でブロック対角化できるとは言っていないので注意．）

（証明）同様にして，$\{A_i\,|a\rangle\}_{i,a}$と$\{|a\rangle\}_a$の張る部分空間は一致するため， $R = \mathrm{Span}(\{A_i\,|a\rangle\}_{i,a}) = \mathrm{Span}(\{|a\rangle\}_a)$と書き， Rへの射影を$P_R(= \sum_{a=1}^{r} |a\rangle\langle a|)$と書くと，

$$A_i P_R = P_R A_i P_R. \tag{140}$$

あとは同様．□

固有値が正の実数なる半正定値の固有ベクトルの存在は以下の定理で保証されている．

Lemma 2.6 (Theorem 2.5 in [7])．有限次元$\mathbb{C}^*$代数上の*positive*な線形写像Eにおいて， Eのスペクトル半径をλ_{sr}とすると，非ゼロの半正定値の固有ベクトルXが存在し，$E(X) = \lambda_{\mathrm{sr}} X$．

証明はApp.??で行う予定．Krein-Rutmanの定理の有限次元$\mathbb{C}^*$代数の場合．

（Theorem 2.7の証明）以下を示す．

$\{A_i\}$で与えられるTI-MPS表現に対して，行列A_iを以下の形に分解できる．

$$A_i = \begin{pmatrix} A_i^1 & 0 & 0 \\ 0 & A_i^2 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots \end{pmatrix}. \tag{141}$$

$\mathcal{E}_j(X) = \sum_i A_i^{j\dagger} X A_i^j$, $\mathcal{E}_j^\dagger(X) = \sum_i A_i^j X A_i^{j\dagger}$のスペクトル半径を$\lambda_j > 0$とする．各ブロック$A_i^j$は以下を満たす：

a. $\mathcal{E}_j$は固有値λ_jなる正定値固有ベクトルXを持ち，かつXは定数倍を除き$\mathcal{E}_j$の固有値λ_jなる唯一の固有ベクトルである．

b. $\mathcal{E}_j^\dagger$は固有値λ_jなる正定値固有ベクトルX'を持ち，かつX'は定数倍を除き$\mathcal{E}_j^\dagger$の固有値λ_jなる唯一の固有ベクトルである．

示す．補題2.6より，線形写像$E : X \mapsto \sum_i A_i^\dagger X A_i$は，$E$のスペクトル半径$\lambda_{\mathrm{sp}}$なる半正定値固有ベクトル$X$を持つ． Xが非可逆であれば補題2.4に従ってブロック行列で置き換える．よってXは可逆と仮定してよい．さらに，固有値λ_{sp}なる固有ベクトルYであってXの定数倍でないものが存在すると，補題2.3より固有値λ_{sp}なる非可逆な半正定値固有ベクトルが存在するため，再び補題2.4に従ってブロック行列で置き換える．よって，固有値λ_{sp}なる固有ベクトルは定数倍を除き一意として良い．エルミート共役$E^\dagger$についても同様．よって示された．

定理の条件1.を得るには，Xを$\mathcal{E}_j(X) = \lambda_j X$を満たす正定値行列として，

$$B_i^j = X^{1/2} A_i^j X^{-1/2} \tag{142}$$

と相似変換すると，

$$\sum_i B_i^{j\dagger} B_i^j = \lambda_j \mathbf{1}. \tag{143}$$

さらにXの一意性より$\mathbf{1}$は固有値λ_jなる唯一の固有ベクトルである．

定理の条件2.は，正定値行列X'を対角化するユニタリ変換をUとして，$B_i^j \mapsto U B_i^j U^\dagger$と変換すると条件2.を得る． □

各ブロックについて，

$$A_i^j = \sqrt{\lambda_j} B_i^j \tag{144}$$

と再定義して，$X \mapsto \sum_i B_i^{j\dagger} X B_i^j$のスペクトル半径を1に取ることができる．よって以下を得る．

Theorem 2.7 (TI-MPSの標準形[3])**.** 有限系の*TI-MPS*表現に対して，行列A_iを以下の形に分解できる．

$$A_i = \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} A_i^1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda_2} A_i^2 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots \end{pmatrix}. \tag{145}$$

A_i^jは以下を満たす：

1. $\sum_i A_i^{j\dagger} A_i^j = \mathbf{1}$であり，$\mathbf{1}$は線形写像$\mathcal{E}_j(X) = \sum_i A_i^{j\dagger} X A_i^j$の唯一の固定点.
2. ある正定値対角行列Λ^jが存在して$\sum_i A_i^j \Lambda^j A_i^{j\dagger} = \Lambda^j$であり，$\Lambda^j$は線形写像$\mathcal{E}_j^\dagger(X) = \sum_i A_i^j X A_i^{j\dagger}$の唯一の固定点.

- [10]のTheorem 6.2を見ると，positive線形写像Tが既約であるとは，$P \in \mathbb{C}^{D\times D}$がエルミートな射影であって$T(P\mathbb{C}^{D\times D}P) \subset P\mathbb{C}^{D\times D}P$であれば$P=0$または$P = 1_D$．とあるので，不変部分空間が存在しないことが既約の定義.
- さらに[10]のTheorem 6.4は，Tが既約であることと，Tのスペクトル半径λ_{sr}がT単一の固有値であり，かつ$T, T^\dagger$の固有値λ_{sr}なる固有ベクトルが正定値であることが同値らしいので，「ブロックがひとつの標準的TI-MPS」とは，既約性のこと.

定理2.7のTI-MPS標準形において，ブロックが一つだけであったとしても，複数の巨視的波動関数の線形結合である場合がある．例は反強磁性GHZ状態である：

$$A_0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{146}$$

とすると，

$$A_0A_0 = 0, \quad A_0A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_1A_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_1A_1 = 0, \tag{147}$$

$$A_0A_1A_0 = A_0, \quad A_1A_0A_1 = A_1, \tag{148}$$

より，サイト数Nが偶数の場合に状態は

$$|\psi\rangle = |0101\cdots\rangle + |1010\cdots\rangle \tag{149}$$

となることがわかる．転送行列$E(X) = A_0^\dagger X A_0 + A_1^\dagger X A_1$は$A_0^\dagger A_0 + A_1 A_1^\dagger = \mathbf{1}$を満たすので標準形．固有値を求める．単純計算より

$$E(\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}) = \begin{pmatrix} d & 0 \\ 0 & a \end{pmatrix}. \tag{150}$$

$M_2(\mathbb{C})$の基底を$[e_{ij}]_{kl} = \delta_{ik}\delta_{jl}$に取ると，

$$E(e_{11}, e_{12}, e_{21}, e_{22}) = (e_{11}, e_{12}, e_{21}, e_{22}) \begin{pmatrix} & & & 1 \\ & & 0 & \\ & 0 & & \\ 1 & & & \end{pmatrix}. \tag{151}$$

よって固有値は$\{1,-1,0,0\}$となり，ブロック一つの標準形である．

より一般に，次の事実がある．

Theorem 2.8 (周期系における分解[3]). ブロック一つの標準形にある*TI-MPS*を考える．行列$\{A_i\}$は$D\times D$次元とする．線形写像$\mathcal{E}(X)=\sum_i A_iXA_i^\dagger$が$p$個の絶対値*1*の固有値を持つとき．

1. pがNの因子であれば，状態$|\psi\rangle$はp個の*MPS*のボンド次元Dなる「周期的状態」の線形和である．
2. pがNの因子でなければ，$|\psi\rangle=0$.

証明は後回し．

定理2.8を踏まえると，ブロック１つの標準形はまだ「非縮退状態」として条件が弱い．以下，２つの条件を導入する．

線形写像

$$\Gamma_L:\mathbb{C}^{D\times D}\to\mathbb{C}^{d^L},\quad X\mapsto\sum_{i_1,\ldots,i_L}^{d}\mathrm{tr}\left[XA_{i_1}\cdots A_{i_L}\right]|i_1\cdots i_L\rangle \tag{152}$$

を考える． A_iは必ずしも標準形にない．

Γ_Lが単射であることと，必ずしも標準形にない行列$\{A_i\}_i$に対して$\{A_{i_1}\cdots A_{i_L}\}_{i_1,\ldots,i_L}$が$D\times D$行列全体を張ることは同値.

（証明） $\{A_{i_1}\cdots A_{i_L}\}_{i_1,\ldots,i_L}$が$D\times D$行列全体を張ると仮定する． $\Gamma_L(X)=0$は任意の組$i_1,\cdots,i_L$に対して

$$\mathrm{tr}\left[XA_{i_1}\cdots A_{i_L}\right]=0 \tag{153}$$

と同値．仮定より適当に線形結合を取り，

$$\sum_{i_1,\ldots,i_L}c_{i_1\cdots i_L}A_{i_1}\cdots A_{i_L}=e_{ij} \tag{154}$$

とできるため，$\mathrm{tr}\left[Xe_{ij}\right]=X_{ij}=0$より$X=0$が従う．

逆にΓ_Lが単射であると仮定する． Γ_Lを行列表示すると，

$$[M_{\Gamma_L}]_{i_1\cdots i_L,kl}=\langle i_1\cdots i_L|\,\Gamma_L(|k\rangle\langle l|)=[A_{i_1}\cdots A_{i_L}]_{lk}. \tag{155}$$

これは$d^L\times D^2$行列． Γ_Lが単射であることは行列M_{Γ_L}がフルランク，つまり，$\mathrm{rank}(M_{\Gamma_L})=D^2$と同値．これは，$d^L$個の$D^2$成分横ベクトル

$$A_{i_1}\cdots A_{i_L}=\sum_{k,l=1}^{D}[A_{i_1}\cdots A_{i_L}]_{lk}\,|k\rangle\langle l|\,,\quad i_1\cdots i_L\in\{1,\ldots,d\}^L \tag{156}$$

がフルランクであることと同値であるが，これは，d^L個の行列の$\{A_{i_1}\cdots A_{i_L}\}$が$D^2$次元ベクトル空間$M_D(\mathbb{C})$を張ることと同値． □

さらに，Γ_Lが単射であれば，$L' \geq L$なる任意のL'に対して$\Gamma_{L'}$は単射.

（証明） $L' = L+1$に対して示せば十分.

$$\Gamma_{L+1}(X) = \sum_{i_1 \cdots i_L, i} \mathrm{tr}\left[X A_{i_1} \cdots A_{i_L} A_i\right] |i_1 \cdots i_L\rangle |i\rangle = \sum_i \Gamma_L(A_i X) |i\rangle \tag{157}$$

に注意する． $\Gamma_{L+1}(X) = 0$は任意のiについて$\Gamma_L(A_i X) = 0$と同値． Γ_Lの単射性より任意のiについて$A_i X = 0$．さらにΓ_Lの単射性より$\{A_{i_1} \cdots A_{i_L}\}$が$M_D(\mathbb{C})$を生成するから，

$$1_D = \sum_{i_1 \cdots i_L} c_{i_1 \cdots i_L} A_{i_1} \cdots A_{i_L} \tag{158}$$

なる係数$c_{i_1 \cdots i_L}$が存在する．左からXをかけて

$$X = \sum_{i_1 \cdots i_L} c_{i_1 \cdots i_L} X A_{i_1} \cdots A_{i_L} = 0. \tag{159}$$

よって示された．□

一つ目の条件は以下.

条件C1： あるL_0が存在して，Γ_{L_0}は単射．つまり，$\{A_{i_1} \cdots A_{i_{L_0}}\}_{i_1,\ldots,i_{L_0}}$は$D \times D$行列全体を張る.

Proposition 2.9. 定理2.7の標準*TI-MPS*を考える． $L_0 < N$として条件*C1*が成立するとき，

1. *TI-MPS*は，ブロックがひとつの標準形にある.
2. $L_0 \leq R \leq N-R$なるサイトの分割$[1 \cdots R] : [R+1 \cdots N]$に対する縮約密度行列$\rho_{[1 \cdots R]}$のランクは$D^2$.

（証明）標準形を仮定しているので，

$$A_i = \begin{pmatrix} \sqrt{\lambda_1} A_i^1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\lambda_2} A_i^2 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots \end{pmatrix} \tag{160}$$

であるが，ブロックが複数あると，$A_{i_1} \cdots A_{i_{L_0}}$もブロック対角的なので，$D \times D$行列全体を張ることできないので，ブロックは一つのみ.

後半については，完全系をはさみ，

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha,\beta=1}^{D} \sum_{i_1 \cdots i_N} \langle\alpha| A_{i_1} \cdots A_{i_R} |\beta\rangle \langle\beta| A_{i_{R+1}} \cdots A_{i_N} |\alpha\rangle |i_1 \cdots i_N\rangle = \sum_{\alpha,\beta=1}^{D} |L_{\alpha,\beta}\rangle |R_{\alpha,\beta}\rangle, \tag{161}$$

$$|L_{\alpha,\beta}\rangle = \sum_{i_1 \cdots i_R} \langle\alpha| A_{i_1} \cdots A_{i_R} |\beta\rangle |i_1 \cdots i_R\rangle = \Gamma_R(|\beta\rangle\langle\alpha|) \tag{162}$$

$$|R_{\alpha,\beta}\rangle = \sum_{i_{R+1} \cdots i_N} \langle\beta| A_{i_{R+1}} \cdots A_{i_N} |\alpha\rangle |i_{R+1} \cdots i_N\rangle = \Gamma_{N-R}(|\alpha\rangle\langle\beta|) \tag{163}$$

とする．D^2個の状態$|L_{\alpha,\beta}\rangle, |R_{\alpha,\beta}\rangle$は線形独立である．なぜなら，$\sum_{\alpha,\beta} c_{\alpha\beta} |L_{\alpha,\beta}\rangle = \Gamma_R(\sum_{\alpha\beta} c_{\alpha\beta} |\beta\rangle \langle\alpha|) = 0$を仮定すると，$R \geq L_0$のとき$\Gamma_R$の単射性より，$\sum_{\alpha\beta} c_{\alpha\beta} |\beta\rangle \langle\alpha| = 0$，つまり$c_{\alpha\beta} = 0$．$|R_{\alpha,\beta}\rangle$についても同様.

さて一般論として，$\{|e_i\rangle\}_{i=1,\ldots,n}$が線形独立であることとGram行列$G_{ij} = \langle e_i|e_j\rangle$が可逆であることは同値．また，$|e_i\rangle \langle e_j|$はベクトル空間$M_n(\mathbb{C})$の元として線形独立．すると，ベクトル$|\psi\rangle = \sum_i |e_i\rangle |f_i\rangle$に対して$\{|e_i\rangle\}_i, \{|f_i\rangle\}_i$が線形独立であるとき，縮約密度行列

$$\rho_1 = \sum_{ij} \langle f_j|f_i\rangle |e_i\rangle \langle e_j| \tag{164}$$

は，基底$|e_i\rangle \langle e_j|$が線形独立で，かつ係数行列$\langle f_j|f_i\rangle$が可逆であるから，ρ_1のランクはn^2．□

Lemma 2.10. *$T, S : \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^m$を線形写像とする．$n$個のベクトル$Y_1, \ldots, Y_n \in \mathbb{C}^n$で以下を満たすものが存在したと仮定する.*

- $T(Y_k) = S(Y_{k+1})$ *for* $k = 1, \ldots, n-1$,
- $Y_1, \ldots, Y_{n-1}$は線形独立,
- $Y_n = \sum_{k=1}^{n-1} \lambda_k Y_k$.

方程式$\lambda_1 x^{n-1} + \cdots \lambda_{n-1} x = 1$の$x \neq 0$なる解に対して，

$$\mu_1 = \lambda_1 x, \tag{165}$$
$$\mu_2 = \lambda_1 x^2 + \lambda_2 x, \tag{166}$$
$$\vdots \tag{167}$$
$$\mu_{n-1} = \lambda_1 x^{n-1} + \cdots \lambda_{n-1} x = 1 \tag{168}$$

を導入する．$Y = \sum_{k=1}^{n-1} \mu_k Y_k$は$Y \neq 0$かつ$T(Y) = \frac{1}{x} S(Y)$.

（証明）代数方程式$\lambda_1 x^{n-1} + \cdots \lambda_{n-1} x = 1$は$n-1$個の解を持つ．$x = 0$は解でない．解のひとつを$x$とする.

$$T(Y) = \sum_{k=1}^{n-1} \mu_k T(Y_k) = \sum_{k=1}^{n-1} \mu_k S(Y_{k+1}) = S\left(\sum_{k=1}^{n-1} \mu_k Y_{k+1}\right) \tag{169}$$
$$= S\left(\sum_{k=1}^{n-2} \mu_k Y_{k+1} + Y_n\right) = S\left(\sum_{k=1}^{n-2} \mu_k Y_{k+1} + \sum_{k=1}^{n-1} \lambda_k Y_k\right) \tag{170}$$
$$= S\left(\lambda_1 Y_1 + (\lambda_2 + \mu_1) Y_2 + \cdots + (\lambda_{n-1} + \mu_{n-2}) Y_{n-1}\right) \tag{171}$$
$$= S\left(\lambda_1 Y_1 + (\lambda_2 + \lambda_1 x) Y_2 + \cdots + (\lambda_{n-1} + \lambda_1 x^{n-2} + \cdots \lambda_{n-2} x) Y_{n-1}\right) \tag{172}$$
$$= \frac{1}{x} S\left(x\lambda_1 Y_1 + (\lambda_1 x^2 + \lambda_2 x) Y_2 + \cdots + (\lambda_1 x^{n-1} + \cdots \lambda_{n-2} x^2 + \lambda_{n-1} x) Y_{n-1}\right) \tag{173}$$
$$= \frac{1}{x} S\left(\sum_{k=1}^{n-1} \mu_k Y_k\right) = \frac{1}{x} S(Y). \tag{174}$$

$Y_1, \ldots, Y_{n-1}$は線形独立で係数の一つ$\mu_{n-1} = 1$なので，$Y \neq 0$. □

Lemma 2.11. B, Cを$n\times n$行列とする．線形方程式

$$W(C\otimes 1_n) = (B\otimes 1_n)W \tag{175}$$

の解空間は$S\otimes\mathbb{C}^{n\times n}$．ここで，$S$は線形方程式$XC = BX$の解空間．つまり，$n^2$個の勝手な解の集合$X_{ij}\in S, i, j = 1,\ldots,n$である．

$n = 2$の場合を考えると，x, y, z, w, B, Cを2×2行列として方程式は

$$\begin{pmatrix} x & y \\ z & w \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C & \\ & C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B & \\ & B \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x & y \\ z & w \end{pmatrix} \tag{176}$$

であるが，これはx, y, z, wについての4つの独立な方程式

$$xC = Bx, \quad yC = By, \quad zC = Bz, \quad wC = Bw \tag{177}$$

と同値．よって$S = \{X\in\mathbb{C}^{2\times 2} | XC = BX\}$として，解空間は$S\otimes\mathbb{C}^{2\times 2}$．

（証明）$w_{ij}\in\mathbb{C}^{n\times n}$として$W = \sum_{i,j=1}^{n} w_{ij}\otimes e_{ij}$と書く．$C\otimes 1_n = \sum_{i=1}^{n} C\otimes e_{ii}, B\otimes 1_n = \sum_{i=1}^{n} B\otimes e_{ii}$である．方程式は

$$\sum_{ij} w_{ij}C\otimes e_{ij} = \sum_{ij} Bw_{ij}\otimes e_{ij} \tag{178}$$

であるがe_{ij}は線形独立なので，全てのi, jについて共通の方程式

$$w_{ij}C = Bw_{ij}, \quad i, j = 1,\ldots,n \tag{179}$$

を得る．よって任意の解は$XC = CX$の解をn^2個選んで$W = \sum_{ij} x_{ij}\otimes e_{ij}$となるが，これは$S\otimes\mathbb{C}^{n\times n}$の任意元に他ならない．□

Theorem 2.12 (標準形の一意性[3]).

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1,\ldots,i_N=1}^{d} \mathrm{tr}\left[B_{i_1}\cdots B_{i_N}\right]|i_1\cdots i_N\rangle \tag{180}$$

を，ボンド次元Dの，定理2.7の意味の標準的*TI-MPS*表現であり，以下を満たすとする．

(i) 条件*C1*を満たす．つまり，あるL_0が存在して$\{B_{i_1}\cdots B_{i_{L_0}}\}_{i_1,\cdots,i_{L_0}}$が$D\times D$行列全体を張る．

(ii) $|\psi\rangle$の標準的*OBC-MPS*表現が一意的．

(iii) $N > 2L_0 + D^4$.

このとき，$|\psi\rangle$の別の，ボンド次元Dの標準的*TI-MPS*表現

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1,\ldots,i_N=1}^{d} \mathrm{tr}\left[C_{i_1}\cdots C_{i_N}\right]|i_1\cdots i_N\rangle \tag{181}$$

に対して（条件*C1*は仮定しない），あるユニタリ行列$U\in U(D)$と$U(1)$位相$e^{i\theta}$が存在して，任意の$i = 1,\ldots,d$に対して$B_i = e^{i\theta}UC_iU^\dagger$．

注：[3]においては$B_i = UC_iU^\dagger$と書かれているが，$e^{i\theta} = 1$の証明は書かれておらず，また，$e^{i\theta} = 1$であることの証明もできなかった．

上記の$U, e^{i\theta}$であるが，サイト数Nに依存するだろうか？依存しないのであれば，任意の$N > 2L_0 + D^4$に対して$e^{i\theta N} = 1$であるので，$p, q > 2L_0 + D^4$を互いに素な整数として，$\theta p, \theta q$は2πの整数倍．一方で，ある整数a, bが存在して$1 = pa + qb$であるので，$\theta = (\theta p)a + (\theta q)b$より$\theta$自身も$2\pi$の整数倍．

（証明）条件C1を満たす仮定より，命題2.9の2.より，縮約密度行列の$\rho_{[1\cdots m]}$のランクは$L_0 \leq m \leq N - L_0$に対してD^2であることに注意する．縮約密度行列のランクはMPS表現に依存せずに決まる．

$\langle\psi|\psi\rangle = 1$と規格化する．$|\psi\rangle$の標準的OBC-MPS表現

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1,\ldots,i_N} A^{[1]}_{i_1} A^{[2]}_{i_2} \cdots A^{[N]}_{i_N} |i_1 \cdots i_N\rangle, \tag{182}$$

$$\sum_i A^{[m]\dagger}_i A^{[m]}_i = \mathbf{1}_{r_m}, \quad 1 \leq m \leq N, \tag{183}$$

$$\sum_i A^{[m]}_i \Lambda^{[m]} A^{[m]\dagger}_i = \Lambda^{[m-1]}, \quad 1 \leq m \leq N, \tag{184}$$

$$\Lambda^{[0]} = \Lambda^{[N]} = 1, \quad \Lambda^{[m]}\text{は正定値対角行列}, \quad \operatorname{tr}\Lambda^{[m]} = 1. \tag{185}$$

を考える．$A^{[m]}_i$は$D_{m-1} \times D_m$行列である．標準的OBC-MPS表現は，特異値$\Lambda^{[m]}$の入れ替えと縮退する特異値の部分空間における回転を除いて一意的だった．縮約密度行列$\rho_{[1\cdots m]}$は標準的OBC-MPS表現を用いて具体的に

$$\rho_{[1\cdots m]} = \sum_{a_m=1}^{D_m} \Lambda^{[m]}_{a_m,a_m} |\phi_{a_m}\rangle \langle\phi_{a_m}|, \tag{186}$$

$$|\phi_{a_m}\rangle = \sum_{i_1,\ldots,i_m} [A^{[1]}_{i_1}]_{a_1} [A^{[1]}_{i_1}]_{a_1 a_2} \cdots [A^{[m]}_{i_m}]_{a_{m-1} a_m} |i_1 \cdots i_m\rangle \tag{187}$$

と与えられる．$|\phi_{a_m}\rangle$は正規直交集合である．$\Lambda^{[m]}$は正定値対角行列であるから，$D_m = D^2$である．つまり，標準的OBC-MPS表現であれば

$$D_m = D^2, \quad L_0 \leq m \leq N - L_0 \tag{188}$$

が成立する．よって，$A^{[m+1]}_i, \ldots, A^{[N-L_0]}_i$は$D^2 \times D^2$行列である．$|\psi\rangle$の規格化には依存しない結果である．

さて，

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1,\ldots,i_N=1}^{d} \operatorname{tr}[B_{i_1} \cdots B_{i_N}] |i_1 \cdots i_N\rangle \tag{189}$$

をボンド次元Dなる標準的TI-MPS表現とする．これから以下のOBC-MPS表現が得られる．

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1,\ldots,i_N=1}^{D} b^{[1]}_{i_1} (B_{i_2} \otimes 1_D) \cdots (B_{i_{N-1}} \otimes 1_D) b^{[N]}_{i_N} |i_1 \cdots i_N\rangle. \tag{190}$$

ここで，$b^{[1]}_i$は行列B_iの行を並べた$1 \times D^2$行列である：

$$b^{[1]}_i = ([B_i]_{1,1}, [B_i]_{1,2}, \cdots, [B_i]_{1,D}, [B_i]_{2,1}, \cdots, [B_i]_{D,D}). \tag{191}$$

$$B_i = \begin{pmatrix} u^i_1 \\ \vdots \\ u^i_D \end{pmatrix}, \quad u^i_j \in \mathbb{C}^{1\times D}, \tag{192}$$

と書くと，

$$b_i^{[1]} = (u_1^i, \cdots, u_D^i) \tag{193}$$

である． $b_i^{[N]}$は行列B_iの列を並べた$D^2 \times 1$行列である：

$$b_i^{[N]} = ([B_i]_{1,1}, [B_i]_{2,1}, \cdots, [B_i]_{D,1}, [B_i]_{1,2}, \cdots, [B_i]_{D,D})^T. \tag{194}$$

$$B_i = (v_1^i, \ldots, v_D^i), \quad v_j^i \in \mathbb{C}^{D\times 1} \tag{195}$$

と書くと，

$$b_i^{[N]} = \begin{pmatrix} v_1^i \\ \vdots \\ v_D^i \end{pmatrix} \tag{196}$$

である．さて

$$B_i \otimes 1_D = \mathrm{diag}(B_i, \cdots, B_i) \tag{197}$$

であるので，

$$b_{i_1}^{[1]}(B_{i_2} \otimes 1_D) \cdots (B_{i_{N-1}} \otimes 1_D) b_{i_N}^{[N]} \tag{198}$$

$$= \left(u_1^{i_1} B_{i_2} \cdots B_{i_{N-1}}, \cdots, u_D^{i_1} B_{i_2} \cdots B_{i_{N-1}}\right) \begin{pmatrix} v_1^{i_N} \\ \vdots \\ v_D^{i_N} \end{pmatrix} \tag{199}$$

$$= \sum_{a=1}^{D} u_a^{i_1} B_{i_2} \cdots B_{i_{N-1}} v_a^{i_N} \tag{200}$$

$$= \sum_{a,b,c=1}^{D} [u_a^{i_1}]_b [B_{i_2} \cdots B_{i_{N-1}}]_{bc} [v_a^{i_N}]_c \tag{201}$$

$$= \sum_{a,b,c=1}^{D} [B_{i_1}]_{ab} [B_{i_2} \cdots B_{i_{N-1}}]_{bc} [B_{i_N}]_{ca} \tag{202}$$

$$= \mathrm{tr}\,[B_{i_1} \cdots B_{i_N}] \tag{203}$$

に注意．

ボンド次元Dの標準的TI-MPS表現

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1,\ldots,i_N=1}^{d} \mathrm{tr}\,[C_{i_1} \cdots C_{i_N}]\, |i_1 \cdots i_N\rangle \tag{204}$$

に対しても同様にしてOBC-MPS表現

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1,\ldots,i_N=1}^{D} c_{i_1}^{[1]}(C_{i_2} \otimes 1_D) \cdots (C_{i_{N-1}} \otimes 1_D) c_{i_N}^{[N]}\, |i_1 \cdots i_N\rangle \tag{205}$$

を得る．

さて，２つのOBC-MPS表現(190), (205)から定理1.2の手続きにより共通の標準的OBC-MPS(182)を構成する． （共通の標準的OBC-MPSがいつでも構成できることは，真？） このとき，以下が成立する．

$$A_i^{[1]} = Z_1 b_i^{[1]}, \quad A_i^{[m]} = Y_{m-1}(B_i \otimes 1_D) Z_m \quad (1 < m < N), \quad A_i^{[N]} = c_i^{[N]} Y_{N-1}, \quad Y_m Z_m = 1, \tag{206}$$

$$A_i^{[1]} = Z_1 c_i^{[1]}, \quad A_i^{[m]} = Y'_{m-1}(C_i \otimes 1_D) Z'_m \quad (1 < m < N), \quad A_i^{[N]} = c_i^{[N]} Y'_{N-1}, \quad Y'_m Z'_m = 1. \tag{207}$$

さて$m=L_0+1,\dots,N-L_0$については$A_i^{[m]},B_i\otimes 1_D,C_i\otimes 1_D$は全て$D^2\times D^2$行列である．よって，$m=L_0+1,\dots,N-L_0$について$Y_{m-1},Z_m,Y'_{m-1},Z'_m$は$D^2\times D^2$行列である．よって，$Y_mZ_m=1,Y'_mZ'_m=1$より， $m=L_0+1,\dots,N-L_0-1$に対してY_m,Z_m,Y'_m,Z'_mは可逆．よって，

$$Y_{m-1}(B_i\otimes 1_D)Z_m=Y'_{m-1}(C_i\otimes 1_D)Z'_m \tag{208}$$

より， $N-2L_0$個の$D\times D$可逆行列$Y_{L_0}^{-1}Y'_{L_0},\cdots,Y_{N-L_0-1}^{-1}Y'_{N-L_0-1}$が存在して，

$$Y'^{-1}_{m-1}Y_{m-1}(B_i\otimes 1_D)=(C_i\otimes 1_D)Y'^{-1}_mY_m \quad \text{for} \quad m=L_0+1,\dots,N-L_0-1, \tag{209}$$

が成立する．よって，$2N-L_0$個の$D\times D$可逆行列$W_1,\dots,W_{N-2L_0}$が存在して，

$$W_k(B_i\otimes 1_D)=(C_i\otimes 1_D)W_{k+1}, \quad \text{for} \quad k=1,\dots,N-2L_0-1, \tag{210}$$

が成立する．

さて，定理の仮定より$N-2L_0>D^4$であるが， $W_1,\dots,W_{N-2L_0}$は$D^2\times D^2$行列であるので，$N-2L_0$この行列$W_1,\dots,W_{N-2L_0}$は線形独立であり得ない．つまり，ある自然数$n,1<n\le D^4+1$が存在して， $W_1,\dots,W_{n-1}$は線形独立であり，かつ$W_1,\dots,W_n$は線形従属である．

$$W_n=\sum_{k=1}^{n-1}\lambda_kW_k \tag{211}$$

と置く． $x,\mu_1,\cdots,\mu_{n-1}$を補題2.10のように取る．つまり，$x\neq 0$を方程式

$$\lambda_1x^n+\lambda_2x^{n-1}+\cdots+\lambda_{n-1}x=1 \tag{212}$$

の解とし，

$$\mu_1=\lambda_1x, \tag{213}$$

$$\mu_2=\lambda_1x^2+\lambda_2x, \tag{214}$$

$$\vdots \tag{215}$$

$$\mu_{n-1}=\lambda_1x^{n-1}+\cdots\lambda_{n-1}x=1 \tag{216}$$

とする．

$$W=\sum_{k=1}^{n-1}\mu_kW_k \tag{217}$$

と置く．補題2.10の線形写像T,Sは，$i=1,\dots,d$に対して

$$T_i,S_i:\mathbb{C}^{D^2\times D^2}\to\mathbb{C}^{D^2\times D^2}, \tag{218}$$

$$T_i(W)=W(B_i\otimes 1_D), \tag{219}$$

$$S_i(W)=(C_i\otimes 1_D)W, \tag{220}$$

と取る．すると

$$T_i(W_k)=S_i(W_{k+1}), \quad i=1,\dots,d, \tag{221}$$

である．すると補題2.10より，$W\neq 0$かつ$T_i(W)=\frac{1}{x}S_i(W)$，つまり，

$$W(B_i\otimes 1_D)=\frac{1}{x}(C_i\otimes 1_D)W, \quad i=1,\dots,d. \tag{222}$$

さて補題2.11より，方程式

$$W(B_i\otimes 1_D)=\frac{1}{x}(C_i\otimes 1_D)W \tag{223}$$

の解空間は，S_iを方程式

$$XB_i = \frac{1}{x} C_i X \tag{224}$$

の解空間として，$S_i \otimes \mathbb{C}^{D\times D}$．よって，

$$W \in S_i \otimes \mathbb{C}^{D\times D}, \quad i = 1, \dots, d. \tag{225}$$

これは，

$$W = \begin{pmatrix} w_{11} & \cdots & w_{1D} \\ \vdots & & \vdots \\ w_{D1} & \cdots & w_{DD} \end{pmatrix}, \quad w_{kl} \in \mathbb{C}^{D\times D} \tag{226}$$

と書くと，任意の$k, l = 1, \dots, D$と任意の$i = 1, \dots, d$に対して，

$$w_{kl} \in S_i \tag{227}$$

を意味する． $W \neq 0$であるので，あるkl成分について$w_{kl} \neq 0$．このような非ゼロの行列をRとすると，任意の$i = 1, \dots, d$に対して$R \in S_i$，つまり，

$$RB_i = \frac{1}{x} C_i R, \quad i = 1, \dots, d \tag{228}$$

が成立する．

$\{B_i\}, \{C_i\}$は標準的TI-MPS表現であるので，正定値対角行列Λ_B, Λ_Cが存在して以下を満たす．

$$\sum_{i=1}^{d} B_i^\dagger B_i = 1_D, \quad \sum_{i=1}^{d} B_i \Lambda_B B_i^\dagger = \Lambda_B, \tag{229}$$

$$\sum_{i=1}^{d} C_i^\dagger C_i = 1_D, \quad \sum_{i=1}^{d} C_i \Lambda_C C_i^\dagger = \Lambda_C. \tag{230}$$

まず$|x| = 1$を示す． $\sum_{i=1}^d B_i \Lambda_B B_i^\dagger = \Lambda_B$より

$$R\Lambda_B R^\dagger = \sum_{i=1}^{d} RB_i \Lambda_B B_i^\dagger R^\dagger = \frac{1}{|x|^2} \sum_{i=1}^{d} C_i R \Lambda_B R^\dagger C_i^\dagger. \tag{231}$$

さて，線形写像$X \mapsto \sum_{i=1}^d C_i X C_i^\dagger$は$\mathrm{tr}\,[\sum_{i=1}^d C_i X C_i^\dagger] = \mathrm{tr}\,[X \sum_{i=1}^d C_i^\dagger C_i] = \mathrm{tr}\,[X]$より，トレースを保つので，$\mathrm{tr}\,[R\Lambda_B R^\dagger] \neq 0$であれば$|x|^2 = 1$． $\mathrm{tr}\,[R\Lambda_B R^\dagger] \neq 0$は$\Lambda_B > 0$より従う：

$$\mathrm{tr}\,[R\Lambda_B R^\dagger] = \sum_{k,l=1}^{D} [\Lambda_B]_{ll} |R_{kl}|^2 \tag{232}$$

であるので，$\mathrm{tr}\,[R\Lambda_B R^\dagger] = 0$ならば$R = 0$であるがこれは$R \neq 0$に反する．

次にRがユニタリーに取ることができることを示す． $\sum_{i=1}^d C_i^\dagger C_i = 1_D$より

$$R^\dagger R = \sum_{i=1}^{d} R^\dagger C_i^\dagger C_i R = |x|^2 \sum_{i=1}^{d} B_i^\dagger R^\dagger R B_i = \sum_{i=1}^{d} B_i^\dagger R^\dagger R B_i \tag{233}$$

であるが， $\{B_{i_1} \cdots B_{i_{L_0}}\}_{i_1, \dots, i_{L_0}}$が$D \times D$行列を張る仮定より，命題2.9より$B_i$はブロックが一つの標準的TI-MPSである．よって，1_Dは線形写像$X \mapsto \sum_{i=1}^d B_i^\dagger X B_i$の固有値1なる唯一の固有ベクトルであるため，$z \in \mathbb{C}, z \neq 0$として

$$R^\dagger R = z 1_D \tag{234}$$

である．このとき

$$z = \frac{1}{D}\mathrm{tr}\,[R^\dagger R] > 0 \tag{235}$$

であるので，zは正の実数である．

$$\tilde{R} = \frac{1}{\sqrt{z}}R \tag{236}$$

と規格化すると$\tilde{R}$はユニタリーであり，

$$\tilde{R}B_i = \frac{1}{x}C_i\tilde{R}, \quad i = 1, \ldots, d \tag{237}$$

を満たす．

以上より，あるユニタリ行列$U \in U(D)$と$U(1)$位相$e^{i\theta}$が存在して，

$$B_i = e^{i\theta}UC_iU^\dagger \quad \text{for} \quad i = 1, \ldots, d \tag{238}$$

が示された．□

ユニタリ行列Uと，$U(1)$位相$e^{i\theta}$の一意性については[8]に簡単な証明がコメントされており，以下の性質を用いる．

条件C2： $\mathcal{E}(X) = \sum_i A_i^\dagger X A_i$のスペクトル半径を$r$とする．線形写像$\mathcal{E}$の絶対値が$r$の固有値の数は$r$のひとつのみ．（縮退もなしに注意．）

条件C1と条件C2が同値であることが[9]で証明されている．条件C2ならば条件C1であることは，[1]のLemma 5.2で証明されており，L_0の評価については絶対値が２番目に大きいEの固有値をλ_2とすると，$L_0 \sim O(\exp\frac{1}{|\lambda_2|})$であると[9]にコメントされている．（自分では[1]の証明は確認していない．）[9]によるL_0の評価は一般的に$L_0 \sim O(D^4)$であるらしく，次節で[9]の証明を追う．

Theorem 2.13 ([8]). Uは$U(1)$位相を除き一意的であり，$e^{i\theta}$は一意的.

（証明）

@@@

3　条件C1と条件C2が同値であること

[9]の証明を追う．

トレースを保存するCP（completely positive）線形写像$E : \mathbb{C}^{D\times D} \to \mathbb{C}^{D\times D}$を量子チャンネルと呼ぶ．

注意として，$\sum_i A_i^\dagger A_i = 1_D$が成立するとき，

$$\sum_i \mathrm{tr}\,[A_i X A_i^\dagger] = \sum_i \mathrm{tr}\,[X A_i^\dagger A_i] = \mathrm{tr}\,[X] \tag{239}$$

であるので，$X \mapsto \sum_i A_i X A_i^\dagger$は量子チャンネルである．逆にCP線形写像$X \mapsto \sum_i A_i X A_i^\dagger$がトレースを保存するとき，$X = |k\rangle\langle l|$として，任意の$k, l$について$\langle l| \sum_i A_i^\dagger A_i |k\rangle = \delta_{kl}$であるから，$\sum_i A_i^\dagger A_i = 1_D$である．

Kraus演算子$\{A_k \in \mathbb{C}^{D\times D}\}_{k=1,\ldots,d}$によって与えられる量子チャンネルを

$$\mathcal{E}_A(X) = \sum_{k=1}^{d} A_k X A_k^\dagger \tag{240}$$

と書く． $S_n(A) \subset \mathbb{C}^{D\times D}$を

$$S_n(A) = \mathrm{Span}(\{A_{k_1}\cdots A_{k_n}\}_{k_1,\ldots,k_n}), \tag{241}$$

つまり，任意の$k_1, \ldots, k_n$に対する積$A_{k_1}\cdots A_{k_n}$によって張られる部分空間とする． $|\phi\rangle \in \mathbb{C}^D$に対して，

$$H_n(A, \phi) := S_n(A)\,|\phi\rangle \subset \mathbb{C}^D, \tag{242}$$

つまり，$A_{k_1}\cdots A_{k_n}\,|\phi\rangle$によって張られる部分空間，と定義する．

$$\mathcal{E}_A^n(X) = \sum_{k_1,\ldots,k_n} A_{k_1}\cdots A_{k_n} X (A_{k_1}\cdots A_{k_n})^\dagger \tag{243}$$

より

$$\mathcal{E}_A^n(|\phi\rangle\langle\phi|) = \sum_{k_1,\ldots,k_n} A_{k_1}\cdots A_{k_n}\,|\phi\rangle\,(A_{k_1}\cdots A_{k_n}\,|\phi\rangle)^\dagger \tag{244}$$

であるので，一般論より，

$$\mathrm{rank}[\mathcal{E}_A^n(|\phi\rangle\langle\phi|)] = \mathrm{dim} H_n(A, \phi). \tag{245}$$

以下，量子チャンネルの 3 つのクラスを定義する．

Definition 3.1 ((a) primitive)**.** 量子チャンネル$\mathcal{E}$がprimitiveとは，ある自然数nが存在して任意の非ゼロのベクトル$|\phi\rangle \in \mathbb{C}^D$に対して$H_n(A, \phi) = \mathbb{C}^D$なるとき．この条件を満たす最小の$n$を$q(\mathcal{E}_A)$と書く．

次の 3 点に注意する．

$n \geq q(\mathcal{E}_A)$のとき，任意の$|\phi\rangle \neq 0$に対して$H_n(A, \phi) = \mathbb{C}^D$.

（証明）量子チャンネルがprimitiveであるとき，任意の$|\phi\rangle \neq 0$に対して，ある$k \in \{1, \ldots, d\}$が存在して$A_k\,|\phi\rangle \neq 0$であることに注意する．仮にある$|\phi\rangle \neq 0$が存在して任意の$k = 1, \ldots d$に対して$A_k\,|\phi\rangle = 0$であれば，$S_n(A)\,|\phi\rangle = \mathbb{C}^D$に反する． よって，任意の$|\phi\rangle \neq 0$に対して$k_{n+1}$が存在して$S_n(A) A_{k_{n+1}}\,|\phi\rangle = \mathbb{C}^D$であるので，

$$S_n(A) A_{k_{n+1}}\,|\phi\rangle = \{A_{k_1}\cdots A_{k_n} A_{k_{n+1}}\,|\phi\rangle\}_{k_1,\ldots,k_n} = \mathbb{C}^D \tag{246}$$

であるので，$S_n(A) A_{k_{n+1}}\,|\phi\rangle \subset S_{n+1}(A)\,|\phi\rangle = \mathbb{C}^D$が成立する．□

$n \geq q(\mathcal{E}_A)$のとき，任意の密度行列ρに対して$\mathcal{E}_A^n(\rho)$はフルランク．

（証明）任意の密度行列$\rho = \sum_k p_k |k\rangle \langle k|, p_k \geq 0$に対して，$\mathcal{E}_A^n(\rho) = \sum_k p_k \mathcal{E}_A^n(|k\rangle \langle k|)$であり，$n \geq q(\mathcal{E}_A)$であれば$\mathcal{E}_A^n(|k\rangle \langle k|)$は半正定値かつフルランク，つまり正定値であるので，正定値行列の和は正定値であるので，$\mathcal{E}_A(\rho)$も正定値，つまりフルランク．□

$\mathcal{E}_A$がprimitiveであれば，任意の自然数pに対して$\mathcal{E}_A^p$もprimitive.

（証明）$(\mathcal{E}_A^p)^n = \mathcal{E}_A^{np}$より，$np \geq q(\mathcal{E}_A)$ならば任意の$|\phi\rangle$に対して$S_n(A)|\phi\rangle = \mathbb{C}^D$であるので，$q(\mathcal{E}_A^p)$は$q(\mathcal{E}_A)/p$以上の最小の整数．□

Definition 3.2 ((b) eventually full Kraus rank)**.** 量子チャンネル$\mathcal{E}$がeventually full Kraus rankとは，ある自然数nが存在して$S_n(A) = \mathbb{C}^{D\times D}$なるとき．この条件を満たす最小の$n$を$i(A)$と書く．

条件C1に対応する．証明済みの事実，$n \geq i(A)$ならば$S_n(A) = \mathbb{C}^{D\times D}$に注意.

Definition 3.3 ((c) strongly irreducible)**.** 量子チャンネル$\mathcal{E}$が strongly irreducibleとは，以下の 2 点が成立するとき.

(i) $\mathcal{E}_A$の$|\lambda| = 1$なる固有値は重複も含めて$\lambda = 1$のみ.

(ii) 固有値$\lambda = 1$なる固有ベクトルρは，正定値（$\rho > 0$）.

条件C2に対応する． $\mathcal{E}_A$の$\lambda = 1$なる固有ベクトルの正定値性は，MPSの文脈では標準的TI-MPSにおいて各ブロックに課した条件であることに注意する．実際，ρが可逆である場合は$\{A_k\}$の不変部分空間が存在し，A_kをあるブロック対角化された行列で置き換えても状態$|\psi\rangle$が変化しなかった.

半正定値$\rho \geq 0$かつ$\mathrm{tr}[\rho] = 1$なる行列ρを密度行列と呼ぶ．量子チャンネル$\mathcal{E}_A$がprimitiveであるとき，

Proposition 3.4. $q(\mathcal{E}_A) \leq i(A)$.

（証明） $n \geq i(A)$とする． $S_n(A) = \mathbb{C}^{D\times D}$である．任意の$|\phi\rangle \in \mathbb{C}^D, |\phi\rangle \neq 0$に対して， $|\phi\rangle$を 1 番目に含む正規直交基底を構成することができる．この基底において$\{e_{kl}\}_{k,l=1}^D \in S_n(A)$を取ると，$\{e_{k1}|\phi\rangle\}_{k=1,\ldots,D}$は$\mathbb{C}^D$を張る．□

一般に，$q(\mathcal{E}_A) < i(A)$である．つまり，$S_n(A)$が行列代数でない場合であっても，任意の$|\phi\rangle$に対して$S_n(A)|\phi\rangle$が任意の$\mathbb{C}^D$の元を張る場合がある．例を挙げると，$d = 3, D = 2$で$A_{k\in\{1,2,3\}} = \sigma_k/\sqrt{3}$と

する．$\sum_k A_k^\dagger A_k = 1_2$に注意． A_1, A_2, A_3は線形独立なので$i(A) > 1$だが，$i(A) = 2$が成立．一方で，$|\phi\rangle = (a, b)^T$に対して行列

$$(\sigma_1 |\phi\rangle, \sigma_2 |\phi\rangle, \sigma_3 |\phi\rangle) = \begin{pmatrix} b & -ib & a \\ a & ia & -b \end{pmatrix} \tag{247}$$

の特異値をMathematicaで計算すると

$$\sqrt{|a|^2 + |b|^2}, \sqrt{2}\sqrt{|a|^2 + |b|^2} \tag{248}$$

よりフルランクであり，よって$q(\mathcal{E}_A) = 1$.

Proposition 3.5. 量子チャンネル$\mathcal{E}_A$に対して，*(a) primitive, (b) eventually full Kraus rank, (c) strongly irreducible,* は全て同値.

（証明） $\rho \geq 0$を$\mathcal{E}_A$の固有値1のある固有ベクトルとする.（この段階で一意であることはわからないことに注意.） (b)⇒(a)は既に示した.

(a)⇒(c)を示す． $\mathcal{E}_A$が strongly irreducibleでないと仮定すると，以下のいずれかが成立する.

(i) ρは非可逆.

(ii) $\lambda = 1$なるρでない固有ベクトルρ'が存在する.

(iii) $|\lambda'| = 1, \lambda' \neq 1$なる固有値が存在する.

さて(i)であれば，任意のnに対して$\mathcal{E}_A^n(\rho) = \rho$であるので，$n \geq q(\mathcal{E}_A)$であれば$\mathcal{E}_A^n(\rho)$がフルランクであることに反する．前節で示したように，(ii)ならば非可逆な固有ベクトルρが存在するので(i)に帰着する． (iii)であれば,

...[1]の命題3.3が必要.

@@@

量子チャンネル$\mathcal{E}:\mathbb{C}^{D\times D}\to\mathbb{C}^{D\times D}$に対して，

$$\omega(\mathcal{E})=(\mathrm{id}\otimes\mathcal{E})(\Omega),\quad \Omega=\sum_{i,j=1}^{D}|ii\rangle\langle jj|=\sum_{i,j=1}^{D}e_{ij}\otimes e_{ij}, \tag{249}$$

をChoi行列と呼ぶ．$\mathrm{id}:\mathbb{C}^{D\times D}\to\mathbb{C}^{D\times D}$は恒等写像である．

4 Peripheralスペクトル

[10]の6章より，Peripheral （周辺と訳す？）スペクトルについて必要事項をまとめる．有限次元のpositiveな線形写像の性質ついては，[11]の2章に良くまとまっている．本節の多くは[11]の写し．Aが半正定値であることを，$A\geq 0$と書く．

この節では特に断らない限りノルムは常に$\mathbb{C}^d$のユークリッドノルム

$$||x||=\sqrt{\sum_{j=1}^{n}|x_j|^2},\quad x\in\mathbb{C}^n, \tag{250}$$

から誘導されるノルムとする．つまり，行列$A\in M_n(\mathbb{C})$に対して，

$$||A||:=\sup_{||x||=1}||Ax||=\sup_{||x||\leq 1}||Ax||, \tag{251}$$

線形写像$T:M_n(\mathbb{C})\to M_n(\mathbb{C})$に対して，

$$||T||:=\sup_{||X||=1}||T(X)||=\sup_{||X||\leq 1}||T(X)|| \tag{252}$$

と定義する．

4.1 $A\in M_n(\mathbb{C})$の性質

4.1. $A\in M_n(\mathbb{C})$に対して，特異値を$\sigma_1,\dots,\sigma_n$と書く．

$$||A||=\max_j\sigma_j. \tag{253}$$

（証明）特異値分解を$A=USV$とすると

$$\sup_{||x||=1}||Ax||=\sup_{||x||=1}||USVx||=\sup_{||x||=1}||Sx||=\max_j\sigma_j \tag{254}$$

より．□

4.2. $||Ax||\leq||A||||x||$.

（証明） $x=0$のときは成立するので，$x\neq 0$とする． $||A||=\sup_{x\neq 0}||Ax||/||x||\geq ||Ax||/||x||$より．□

4.3. $||AB||\leq ||A||||B||$（劣乗法的）.

（証明）任意のxに対して$||ABx||\leq ||A||||Bx||\leq ||A||||B||||x||$より．□

Proposition 4.4. $A\in M_n(\mathbb{C})$とする．

$$||A||\leq 1 \quad \Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} I & A \\ A^\dagger & I \end{pmatrix}\geq 0. \tag{255}$$

（証明）特異値分解を$A=USV$とすると

$$\begin{pmatrix} I & A \\ A^\dagger & I \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} I & USV \\ V^\dagger SU^\dagger & I \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} U & \\ & V^\dagger \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I & S \\ S & I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} U^\dagger & \\ & V \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} U & \\ & V^\dagger \end{pmatrix}(\bigoplus_j \begin{pmatrix} 1 & \sigma_j \\ \sigma_j & 1 \end{pmatrix})\begin{pmatrix} U^\dagger & \\ & V \end{pmatrix}. \tag{256}$$

よって行列$\begin{pmatrix} I & A \\ A^\dagger & I \end{pmatrix}$の固有値は$1\pm\sigma_j, j=1,\dots,n$であるので，$\begin{pmatrix} I & A \\ A^\dagger & I \end{pmatrix}$が半正定値は，$j=1,\dots,n$に対して$\sigma_j\leq 1$と同値．よって$||A||\leq 1$と同値．□

4.2 $T:M_n(\mathbb{C})\to M_n(\mathbb{C})$の性質

以下，$T:M_n(\mathbb{C})\to M_n(\mathbb{C})$は線形写像とする．

4.5. $||T(X)||\leq ||T||||X||$.

（証明） $X=0$のときは成立するので，$X\neq 0$とする． $||T||=\sup_{X\neq 0}||T(X)||/||X||\geq ||T(X)||/||X||$より．□

4.6. $||T_1T_2||\leq ||T_1||||T_2||$（劣乗法的）.

（証明）任意のXに対して$||T_1(T_2(X))||\leq ||T_1||||T_2(X)||\leq ||T_1||||T_2||||X||$より．□

Tがエルミート性を保つとは，$X^\dagger=X\Rightarrow T(X)^\dagger=T(X)$のとき．

4.7. $T:M_n(\mathbb{C})\to M_n(\mathbb{C})$がエルミート性を保つとき，

$$T(X^\dagger)=T(X)^\dagger. \tag{257}$$

（証明） $X = \frac{X+X^\dagger}{2} + i\frac{X-X^\dagger}{2i} = A + iB$と分解すると，

$$T(X)^\dagger = [T(A+iB)]^\dagger = T(A)^\dagger - iT(B)^\dagger = T(A) - iT(B) = T(X^\dagger).\Box \tag{258}$$

4.8. $T: M_n(\mathbb{C}) \to M_n(\mathbb{C})$がエルミート性を保つとき，$T$の固有値は実であるか，複素共役な組である．特に，実固有値なる固有ベクトルはエルミートに取ることができる．

（証明） $T(X) = \lambda X$とする． Tは線形かつエルミート性を保つため，

$$\lambda^* X^\dagger = T(X)^\dagger = T(\frac{X+X^\dagger}{2})^\dagger + T(\frac{X-X^\dagger}{2})^\dagger = T(\frac{X+X^\dagger}{2}) - T(\frac{X-X^\dagger}{2}) = T(X^\dagger) \tag{259}$$

よりλ^*も固有値． λが実であれば$X + X^\dagger$が固有値λの固有ベクトル．$\Box$

線形写像$T: M_n(\mathbb{C}) \to M_n(\mathbb{C})$がpositiveとは，$T$が半正定値性を保つとき：

$$X \geq 0 \Rightarrow T(X) \geq 0. \tag{260}$$

4.9. $T: M_n(\mathbb{C}) \to M_n(\mathbb{C})$が*positive*であるとき，$T$はエルミート性を保つ.

（証明） Xが半正定値であればXはエルミートであるから．$\Box$

Tがunitalとは，$T(I) = I$なるとき.

以下ではpositiveな線形写像$T: \mathbb{C}^{D\times D} \to \mathbb{C}^{D\times D}$のみ考える． positiveとは半正定値性を保つこと．半正定値であればエルミートであるので，上記命題から固有値は実であるか，あるいは複素共役な組.

Proposition 4.10 (Russo=Dye)**.** 線形写像$T: M_n(\mathbb{C}) \to M_n(\mathbb{C})$が*positive*かつ*unital*であるとき，

$$||T|| = 1. \tag{261}$$

（証明） $U \in M_n(\mathbb{C})$をユニタリ行列とする． $U = \sum_j e^{i\theta_j} P_j$, $P_j^\dagger = P_j$と固有分解すると，

$$\begin{pmatrix} I & T(U) \\ T(U)^\dagger & I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_j T(P_j) & \sum_j e^{i\theta_j} T(P_j) \\ \sum_j e^{-i\theta_j} T(P_j) & \sum_j T(P_j) \end{pmatrix} \tag{262}$$

$$= \sum_j \begin{pmatrix} 1 & e^{i\theta_j} \\ e^{-i\theta_j} & 1 \end{pmatrix} \otimes T(P_j) \geq 0. \tag{263}$$

よって命題4.4より，$||T(U)|| \leq 1$．さて任意の$||X|| \leq 1$に対して，特異値分解$X = U\mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_n)V$において$0 \leq \sigma_j \leq 1$であるから$\sigma_j = \frac{e^{i\theta_j} + e^{-i\theta_j}}{2}$と置ける．すると

$$X = \frac{1}{2}U \begin{pmatrix} e^{i\theta_1} & & \\ & \ddots & \\ & & e^{i\theta_n} \end{pmatrix} V + \frac{1}{2}U \begin{pmatrix} e^{-i\theta_1} & & \\ & \ddots & \\ & & e^{-i\theta_n} \end{pmatrix} V = \frac{U_1 + U_2}{2} \tag{264}$$

と書くとU_1, U_2はユニタリー．すると，

$$||T(X)|| \leq \frac{||T(U_1)|| + ||T(U_2)||}{2} \leq 1 \tag{265}$$

より$||T|| \leq 1$. 一方で，$||T(I)|| = ||I|| = 1$より，$||T|| = 1$. □

Corollary 4.11. 線形写像$T : M_n(\mathbb{C}) \to M_n(\mathbb{C})$が*positive*であるとき，

$$||T|| = ||T(I)||. \tag{266}$$

（証明） $P = T(I) \geq 0$と置く． Pが可逆であれば$T'(X) = P^{-1/2}T(X)P^{-1/2}$と定義すると$T'$はpositive [4]かつunital． よって$||T'|| = 1$. すると，

$$||T|| = \sup_{||X||=1} ||T(X)|| = \sup_{||X||=1} ||P^{1/2}T'(X)P^{1/2}|| \leq \sup_{||X||=1} ||T'(X)||||P|| = ||P|| = ||T(I)||. \tag{267}$$

□

4.3 Peripheralスペクトル

Proposition 4.12 (Proposition 6.2 in [10])**.** *$T : M_n(\mathbb{C}) \to M_n(\mathbb{C})$をpositive，unitalとする．$\lambda$が$|\lambda| = 1$なる$T$の固有値であれば，Jordan細胞が1次元（幾何的重複度と代数学的重複度が一致する）．*

（証明） $T(X)$を$M_{n^2}(\mathbb{C})$の元として行列表示する．

$$T_{ij,kl} = \langle i|T(|k\rangle \langle l|)|l\rangle \to T_{p,q}, \quad p, q = 1, \ldots, n^2. \tag{268}$$

行列$T_{p,q}$をJordan分解し，$|\lambda| = 1$なる固有値λのJordan細胞の次元> 1を仮定して，Jordan細胞を$J(\lambda) = \lambda + N$と書く．すると，

$$J(\lambda)^n = \sum_{j=0}^{n} \binom{n}{j} \lambda^{n-j} N^j. \tag{269}$$

$(1, 2)$成分は

$$[J(\lambda)^n]_{12} = \sum_{j=0}^{n} \binom{n}{j} \lambda^{n-j} [N^j]_{12} = n\lambda^{n-1} \tag{270}$$

であり，$n \to \infty$で発散するので，$(1, 2)$成分を取り出すような行列Xによって下からboundすれば良い．Pを可逆行列とし，

$$T = P(J(\lambda) \oplus \cdots)P^{-1} \tag{271}$$

とする．すると，

$$T^n = P(J(\lambda)^n \oplus \cdots)P^{-1} \tag{272}$$

[4] $X, Y \geq 0$のとき，$z^\dagger XYXz = (Xz)^\dagger Y(Xz) \geq 0$より$XYX$も半正定値．

$X = P(0,1,0,\cdots)^T$とすると

$$T^n(X) = P(n\lambda^{n-1}, \lambda^n, 0, \cdots)^T. \tag{273}$$

すると，

$$||T^n|| \geq ||T^n(X)|| = ||P(n\lambda^{n-1}, \lambda^n, 0, \cdots)^T|| \geq ||P(n\lambda^{n-1}, \lambda^n, 0, \cdots)^T||_{\max}. \tag{274}$$

性質$||X|| \geq ||X||_{\max} = \max_{ij} |X_{ij}|$を用いた． Pは可逆行列であるので，積$P(n\lambda^{n-1}, \lambda^n, 0, \cdots)^T$は少なくともひとつ$n$に比例する項を含むので，$||T^n|| \to \infty$となり，$||T^n|| \leq ||T||^n = 1$に矛盾する．□

@@@@

行列の空間$\mathbb{C}^{D\times D}$において，（Hilbert=Schmidt）内積を

$$\langle A, B\rangle = \mathrm{tr}\,[A^\dagger B] = \sum_{ij} B_{ij}^* A_{ij}, \quad A, B \in \mathbb{C}^{D\times D} \tag{275}$$

で定める． $\mathbb{C}^{D\times D}$の元を$\mathbb{C}^{D^2}$の元とみなしたときのユークリッドノルムである．これから決まるノルム$||A||_F = \sqrt{\mathrm{tr}\,[A^\dagger A]}$をFrobeniusノルムと呼ぶ．

行列$A \in \mathbb{C}^{D\times D}$に対して無限大ノルムを

$$||A||_\infty = \sup_{x\neq 0} \frac{||Ax||_\infty}{||x||_\infty} = \sup_{||x||_\infty = 1} ||Ax||_\infty, \quad ||x||_\infty = \max_i |x_i| \tag{276}$$

で定める．

4.13. $||A||_\infty = \max_i \sum_j |A_{ij}|$.

（証明） $||x||_\infty = 1$のとき$|x_i| \leq 1$に注意して，

$$|\sum_j A_{ij} x_j| \leq \sum_j |A_{ij}|. \tag{277}$$

等号は，$A_{ij}x_j = |A_{ij}|$なるよう$|x_j| = 1$の位相を選んだとき．よって，

$$\sup_{||x||_\infty = 1} \max_i |\sum_j A_{ij} x_j| \leq \max_i \sum_j |A_{ij}| \tag{278}$$

で，かつ等号が成立するxも存在する．□

4.14. $||Ax||_\infty \leq ||A||_\infty ||x||_\infty$.

（証明）

$$||Ax||_\infty = \max_i |\sum_j A_{ij} x_j| \leq \max_i \sum_j |A_{ij}||x_j| \leq \max_i \sum_j |A_{ij}|||x_j||_\infty = ||A||_\infty ||x||_\infty \tag{279}$$

より．□

4.15. 無限大ノルムは劣乗法的$||AB||_\infty \leq ||A||_\infty ||B||_\infty$.

（証明）任意のxに対して$||ABx||_\infty \leq ||A||_\infty ||Bx||_\infty \leq ||A||_\infty ||B||_\infty ||x||_\infty$より．□

線形写像$T : \mathbb{C}^{D\times D} \to \mathbb{C}^{D\times D}$のスペクトルとは，$T$の固有値の集合であり，固有値とは$(\lambda - T)$が非可逆であるような$\lambda$のこと．有限次元ではある$X \in \mathbb{C}^{D\times D}$が存在して$T(X) = \lambda X$と同値．スペクトルは固有値の重複を含めないことに注意． Tのスペクトル半径$\varrho(T)$とは絶対値が最大の固有値のこと．

$$\varrho(T) = \max\{|\lambda| | \lambda \in \mathrm{Spec}(T)\}. \tag{280}$$

線形写像$T:\mathbb{C}^{D\times D}\to\mathbb{C}^{D\times D}$がunitalとは$T(1_D)=1_D$が成立するとき．$T:\mathbb{C}^{D\times D}\to\mathbb{C}^{D\times D}$がtrace-preservingとは任意の$X\in\mathbb{C}^{D\times D}$に対して$\mathrm{tr}\,[T(X)]=\mathrm{tr}\,[X]$が成立するとき．

4.16. Tが*unital* $\Leftrightarrow$ $T^\dagger$が*trace-preserving.*

（証明）Tのエルミート共役$T^\dagger$は内積$\langle X,Y\rangle=\mathrm{tr}\,[X^\dagger Y]$について定義されている．つまり，$\langle T(X),Y\rangle=\mathrm{tr}\,[T(X)^\dagger Y]=\mathrm{tr}\,[X^\dagger T^\dagger(Y)]=\langle X,T^\dagger(Y)\rangle$が定義．よって，$T$がunitalであれば$\mathrm{tr}\,[Y]=\mathrm{tr}\,[T^\dagger(Y)]$より$T^\dagger$はtrace-reserving．逆に$T^\dagger$がtrace-preservingであれば任意の$Y\in\mathbb{C}^{D\times D}$に対して$\mathrm{tr}\,[T(1_D)^\dagger Y]=\mathrm{tr}\,[Y]$であるから$T(1_D)=1_D$．□

A　線形代数

本文で証明なしに使う線形代数の事実について本節でまとめる．

A.1 (Gram行列)．m個のベクトルの集合$A = (v_1, \dots, v_m) \in \mathbb{C}^n$に対して，$G = A^\dagger A, G_{ij} = v_i^\dagger v_j$を*Gram*行列と呼ぶ．$v_1, \dots, v_m$が線形独立であることと，$\det G > 0$が同値．

（証明）$G = A^\dagger A$はエルミートであり，$z \in \mathbb{C}^m$に対して$z^\dagger G z = ||Az||^2 \geq 0$であるので半正定値．よって$\det G \geq 0$に注意．$v_1 \dots, v_m$が線形従属であることと$\det G = 0$が同値であることを示せば良い．$v_1, \dots, v_m$が線形従属であれば$x \in \mathbb{C}^m, x \neq 0$が存在して，$Ux = 0$．よって，$Gx = A^\dagger A x = 0$であるので，$\det G = 0$．逆に$\det G = 0$を仮定すると$x \in \mathbb{C}^m, x \neq 0$が存在して$Gx = 0$．すると，$x^\dagger G x = ||Ax||^2 = 0$より$Ax = 0$．よって$v_1, \dots, v_m$は線形従属．□

A.2. $v_1, \dots, v_m \in \mathbb{C}^n$が線形独立であれば，$\{v_i v_j^\dagger\}_{i,j=1,\dots,m}$は線形独立．

（証明）グラム・シュミットの正規直交化法により，

$$v_i = \sum_{j=1}^{l} \alpha_{ij} e_j, \quad i = 1, \dots, l, \tag{281}$$

$$e_i^\dagger e_j = \delta_{ij}, \tag{282}$$

$$\alpha\text{は上三角行列であって，対角成分は非ゼロ} \tag{283}$$

とできる．このとき$0 = \sum_{i,j=1}^{l} c_{ij} v_i v_j^\dagger$と仮定すると，$\sum_{i,j=1}^{l} \sum_{k,m=1}^{l} c_{ij} \alpha_{ik} \alpha_{jm}^* e_i e_j^\dagger = 0$より，左から$e_i^\dagger$, 右から$e_j$をかけることにより$\sum_{k,m=1}^{l} c_{ij} \alpha_{ik} \alpha_{jm}^* = 0$を得る．行列表示すると$\alpha^T c \alpha^* = 0$であるが，$\alpha$は可逆であるので，$c = 0$を得る．□

A.3. n成分ベクトルの集合$\{v_i\}_{i=1}^N$，$\{w_i\}_{i=1}^M$に対して$\sum_{i=1}^N v_i v_i^\dagger = \sum_{i=1}^M w_i w_i^\dagger$が成立するとき，$\{v_i\}_{i=1}^N$と$\{w_i\}_{i=1}^M$で張られる部分空間は一致する．

（証明）

$$A = \sum_{i=1}^{N} v_i v_i^\dagger = \sum_{i=1}^{M} w_i w_i^\dagger \tag{284}$$

と書く．行列Aは半正定値であるので，以下の固有分解を持つ．

$$A = \sum_{k=1}^{r} \lambda_k x_k x_k^\dagger, \quad \lambda_k > 0. \tag{285}$$

ここで，$\lambda_k > 0$のみ和を取ることに注意．$r = \mathrm{rank}(A)$である．x_kは正規直交集合$x_k^\dagger x_l = \delta_{kl}$に取ることができる．$x_1, \dots, x_r$に$x_{r+1}, \dots, x_n$を付け加えて，$\{x_k\}_{k=1}^n$を正規直交基底とする．$v_i$を基底$\{x_k\}_{k=1}^n$で展開すると

$$v_i = \sum_{k=1}^{n} (x_k^\dagger v_i) x_k \tag{286}$$

であるが，$k>r$に対して$x_k^\dagger v_i=0$である．なぜなら$k>r$に対して$Ax_k=0$より，

$$x_k^\dagger A x_k=\sum_{i=1}^N x_k^\dagger v_i v_i^\dagger x_k=\sum_{i=1}^N |x_k^\dagger v_i|^2=0,\quad k>r. \tag{287}$$

よって，$k>r$のとき任意の$i=1,\ldots,N$に対して$x_k^\dagger v_i=0$. したがって，

$$v_i=\sum_{k=1}^r (x_k^\dagger v_i)x_k,\quad i=1,\ldots,N, \tag{288}$$

と展開できる． $\tilde{x}_k=\sqrt{\lambda_k}x_k$と置く．

$$v_i=\sum_{k=1}^r c_{ik}\tilde{x}_k,\quad i=1,\ldots,N, \tag{289}$$

と展開できる． [5] $A=\sum_{k=1}^r \tilde{x}_k\tilde{x}_k^\dagger$であるので，

$$\sum_{k=1}^r \tilde{x}_k\tilde{x}_k^\dagger=\sum_{i=1}^N v_i v_i^\dagger=\sum_{i=1}^N\sum_{k,l=1}^r c_{ik}c_{il}^*\tilde{x}_k\tilde{x}_l^\dagger. \tag{290}$$

$\{\tilde{x}_k\tilde{x}_l^\dagger\}_{k,l=1}^r$の線形独立性より

$$\sum_{i=1}^N c_{ik}c_{il}^*=\delta_{kl},\quad k,l=1,\ldots,r \tag{291}$$

である．つまり，$c^\dagger c=1_r$である．同様にして，

$$w_i=\sum_{k=1}^r d_{ik}\tilde{x}_k,\quad i=1,\ldots,M, \tag{292}$$

と展開でき，$d^\dagger d=1_r$である．すると，

$$v_i=\sum_{k=1}^r c_{ik}\tilde{x}_k=\sum_{k=1}^r [cd^\dagger d]_{ik}\tilde{x}_k=\sum_{k=1}^r\sum_{j=1}^M [cd^\dagger]_{ij}d_{jk}\tilde{x}_k=\sum_{j=1}^M [cd^\dagger]_{ij}w_j,\quad i=1,\ldots,N, \tag{293}$$

となり，任意のv_iは$\{w_i\}_{i=1}^M$で展開できる．逆に，任意のw_iは$\{v_i\}_{i=1}^N$で展開できるので，主張を得る．
□

A.4 (特異値分解)**.** Mを$m\times n$複素行列とする．行列Mのランクをrとする．以下の分解が存在する．

$$M=U\Lambda V^\dagger. \tag{294}$$

ここで，U,Vは$U^\dagger U=1_r, V^\dagger V=1_r$を満たすそれぞれ$m\times r, n\times r$の半ユニタリ行列であり，$\Lambda=\mathrm{diag}(\lambda_1,\ldots,\lambda_r)$は正の特異値$\lambda_i>0$のみを並べた対角行列である． $U=(u_1,\ldots,u_r), V=(v_1,\ldots,v_r)$と書くと，

$$M=\sum_{i=1}^r \lambda_i u_i v_i^\dagger \tag{295}$$

と書ける．

[5]付け足したゼロベクトル$\mathbf{0}\in\mathbb{C}^n$に対して，展開係数$c_{ik}=0$である．

（証明）行列$M^\dagger M$は半正定値行列であるので，ユニタリ行列で対角化できる．

$$M^\dagger M(V_1, V_2) = \begin{pmatrix} \Lambda^2 & O \\ O & O \end{pmatrix}. \tag{296}$$

ここで，$\Lambda^2 = \mathrm{diag}(\lambda_1^2, \ldots, \lambda_r^2)$は$M^\dagger M$正の固有値$\lambda_j^2 > 0$を並べた対角行列であり，$V_1 = (v_1, \ldots, v_r)$は対応する正規直交基底である． $V_2 = (v_{r+1}, \ldots, v_n)$はゼロ固有値の正規直交基底である． $v_i^\dagger v_j = \delta_{ij}$は$V_1^\dagger V_1 = 1_r$． $j > r$に対して$M^\dagger M v_j = 0$より，$v_j^\dagger M^\dagger M v_j = ||Mv_j|| = 0$, つまり，$Mv_j = 0, j > r$に注意する．つまり，$MV_2 = 0$である． $u_j = \frac{1}{\lambda_j} M v_j, j = 1, \ldots, r$を導入する． $u_i^\dagger u_j = v_i^\dagger M^\dagger \frac{1}{\lambda_i} \frac{1}{\lambda_j} M v_j = \delta_{ij}$は$U_1^\dagger U_1 = 1_r$. $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_r), \lambda_j > 0$とする． $U_1 = (u_1, \ldots, u_r) = MV_1\Lambda^{-1}$と書くと，欲しい関係式

$$U_1 \Lambda V_1^\dagger = MV_1\Lambda^{-1}\Lambda V_1^\dagger = MV_1V_1^\dagger = M(1_n - V_2V_2^\dagger) = M \tag{297}$$

を得る． □

A.5. 行列$A \in \mathbb{C}^{n\times m}$のランクと行列$AA^\dagger, A^\dagger A$のランクは一致する．

（証明） Aのランクをrとすると，Λを$r \times r$正定値対角行列として，Aの特異値分解は

$$A = U\Lambda V \tag{298}$$

の形．すると$AA^\dagger, A^\dagger A$の特異値分解

$$AA^\dagger = U\Lambda V V^\dagger \Lambda U^\dagger = U\Lambda^2 U^\dagger, \tag{299}$$

$$A^\dagger A = V^\dagger \Lambda U^\dagger U \Lambda V = V^\dagger \Lambda^2 V \tag{300}$$

が得られる．よって$AA^\dagger, A^\dagger A$のランクはr． □

A.6. m個のベクトルの集合$v_1, \ldots, v_m \in \mathbb{C}^n$に対して， $\mathrm{Span}(v_1, \ldots, v_m)$の次元と行列$\sum_{i=1}^m v_i v_i^\dagger$のランクは一致する．

（証明） $[AA^\dagger]_{ij} = \sum_k A_{ik}A_{jk}^* = \sum_k [v_k]_i [v_k]_j^*$より． □

A.7 (Schmidt分解)**.** $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$をそれぞれ$\dim \mathcal{H}_1 = n \geq m = \dim \mathcal{H}_2$なる*Hilbert*空間とする．状態$w \in \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$に対して，以下の分解が存在する．

$$w = \sum_{i=1}^r \lambda_i u_i \otimes v_i. \tag{301}$$

ここで，λ_iは実で$\lambda_i \geq 0$であり，$\{\lambda_i\}_{i=1}^r$は集合として一意． rは“ランク”． $u_1, \ldots, u_r$は$(u_i, u_j) = \delta_{ij}$を満たし， $v_1, \ldots, v_r$は$(v_i, v_j) = \delta_{ij}$を満たす．（つまり，正規直交集合．）

（証明） $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$の正規直交基底をひとつ選び，それぞれ$\{e_i\}_{i=1}^n, \{f_i\}_{i=1}^m$とする．

$$w = \sum_{i,j} M_{ij} e_i \otimes f_j \tag{302}$$

と展開する． $n \times m$行列Mに対して，特異値分解を実行する．

$$M = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i u_i v_i^\dagger, \tag{303}$$

$$\lambda_i > 0, \quad u_i^\dagger u_j = \delta_{ij}, \quad v_i^\dagger v_j = \delta_{ij}. \tag{304}$$

$r = \mathrm{rank}(M)$である．すると，

$$w = \sum_{i,j} \sum_{a=1}^{r} \lambda_a [u_a]_i [v_a]_j^* e_i \otimes f_j = \sum_{a=1}^{r} \lambda_a u_a \otimes v_a. \tag{305}$$

ここで，

$$u_a = \sum_i [u_a]_i e_i, \quad v_a = \sum_j [v_a]_j^* f_j, \tag{306}$$

と定義した．

$$(u_a, u_b) = \sum_{ij} ([u_a]_i e_i, [u_b]_j e_j) = \sum_i [u_a]_i^* [u_b]_i = u_a^\dagger u_b = \delta_{ab}, \tag{307}$$

$$(v_a, v_b) = \sum_{ij} ([v_a]_i^* f_i, [v_b]_j^* f_j) = \sum_i [v_a]_i [v_b]_i^* = v_b^\dagger v_a = \delta_{ba}, \tag{308}$$

であるので，$\{u_1, \ldots, u_r\}, \{v_1, \ldots, v_r\}$はそれぞれ$\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$の正規直交集合． □

B Vidalによる MPSの導出

VidalによるMPSの導出[2]の証明を追う．

まず準備として，サイト$1, \ldots, N$の任意の２分割$A : B$に対してSchmidt分解（SD）

$$|\phi\rangle = \sum_{a=1}^{\chi_A} \lambda_a |\phi_a^{[A]}\rangle |\phi_a^{[B]}\rangle \tag{309}$$

が存在することに注意する．ここで，$\lambda_a > 0$であり，$\{|\phi_a^{[A]}\rangle\}_{a=1}^{\chi_A}, \{|\phi_a^{[B]}\rangle\}_{a=1}^{\chi_B}$はそれぞれ$\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$の正規直交集合．従って，

$$\langle \phi_A^{[A]} | \psi \rangle = \lambda_a |\phi_a^{[B]}\rangle \tag{310}$$

である．

- Schmidtベクトル$|\phi_a^{[A]}\rangle$は部分密度行列$\rho^{[A]} = \mathrm{tr}_B |\psi\rangle\langle\psi|$の固有値$\lambda_a^2 > 0$なる規格化された固有ベクトルである．

実際，SDを用いると，

$$\rho^{[A]} = \sum_{a=1}^{\chi_A} \lambda_a^2 \mathrm{tr}_B \left(|\phi_a^{[A]}\rangle \langle \phi_a^{[A]}| \otimes |\phi_a^{[B]}\rangle \langle \phi_a^{[B]}| \right) \tag{311}$$

であるが，$|\phi_a^{[B]}\rangle$は正規直交集合であるから，

$$\rho^{[A]} = \sum_{a=1}^{\chi_A} \lambda_a^2 |\phi_a^{[A]}\rangle \langle \phi_a^{[A]}| \tag{312}$$

である．

$$\chi := \max_A \chi_A \tag{313}$$

は状態$|\psi\rangle$のエンタングルメントを測る．分割$[1\cdots l]:[(l+1)\cdots N]$におけるSDを

$$|\psi\rangle = \sum_{a_l=1}^{\chi_l} \lambda_{a_l}^{[l]} |\phi_{a_l}^{[1\cdots l]}\rangle |\phi_{a_l}^{[(l+1)\cdots N]}\rangle \tag{314}$$

と書く．

サイト1と$2,\ldots,N$に対してSchmidt分解（SD）を実行すると，

$$|\psi\rangle = \sum_{a_1=1}^{\chi_1} \lambda_{a_1}^{[1]} |\phi_{a_1}^{[1]}\rangle |\phi_{a_1}^{[2\cdots N]}\rangle \tag{315}$$

を得る． $|\psi\rangle$の規格化より，$\sum_a (\lambda_a^{[1]})^2 = 1$に注意． $|\phi_a^{[1]}\rangle$を$\mathcal{H}_1$の基底$|i_1\rangle$における展開を

$$|\phi_a^{[1]}\rangle = \sum_{i_1} \Gamma_a^{[1]i_1} |i_1\rangle, \quad \sum_{i_1} [\Gamma_a^{[1]i_1}]^* \Gamma_b^{[1]i_1} = \delta_{ab}, \tag{316}$$

と書くと，

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1,a_1} \Gamma_{a_1}^{[1]i_1} \lambda_{a_1}^{[1]} |i_1\rangle |\phi_{a_1}^{[2\cdots N]}\rangle . \tag{317}$$

次に$|\phi_{a_1}^{[2\cdots N]}\rangle$を$\mathcal{H}_2$の基底で展開する．

$$\mathrm{Id} = 1_{\mathcal{H}_2} \otimes \cdots 1_{\mathcal{H}_N} = \sum_{i_2} |i_2\rangle \langle i_2| \otimes 1_{\mathcal{H}_3} \otimes \cdots 1_{\mathcal{H}_N} \tag{318}$$

に注意して，

$$|\phi_{a_1}^{[2\cdots N]}\rangle = \sum_{i_2} |i_2\rangle \langle i_2|\phi_{a_1}^{[2\cdots N]}\rangle = \sum_{i_2} |i_2\rangle |\tau_{a_1 i_2}^{[3\cdots N]}\rangle, \quad |\tau_{a_1 i_2}^{[3\cdots N]}\rangle = \langle i_2|\phi_{a_1}^{[2\cdots N]}\rangle . \tag{319}$$

- 状態$|\tau_{a_1 i_2}^{[3\cdots N]}\rangle$は Schmidtベクトル$\{|\phi_a^{[3\cdots N]}\rangle\}_{a=1}^{\chi_2}$によって展開できる．

これを示すには，縮約密度行列$\rho^{[3\cdots N]}$を 2 通りの方法で表示する． $|\phi_{a_1}^{[2\cdots N]}\rangle$の展開より，

$$\rho^{[2\cdots N]} = \sum_{a_1=1}^{\chi_1} (\lambda_{a_1}^{[1]})^2 |\phi_{a_1}^{[2\cdots N]}\rangle \langle \phi_{a_1}^{[2\cdots N]}| = \sum_{a_1=1}^{\chi_1} \sum_{i_2,j_2=1}^{d} (\lambda_{a_1}^{[1]})^2 |i_2\rangle |\tau_{a_1 i_2}^{[3\cdots N]}\rangle \langle \tau_{a_1 j_2}^{[3\cdots N]}| \langle j_2| \tag{320}$$

より，

$$\rho^{[3\cdots N]} = \mathrm{tr}_2 \rho^{[2\cdots N]} = \sum_{a_1=1}^{\chi_1} \sum_{i_2=1}^{d} (\lambda_{a_1}^{[1]})^2 |\tau_{a_1 i_2}^{[3\cdots N]}\rangle \langle \tau_{a_1 j_2}^{[3\cdots N]}| . \tag{321}$$

一方で，

$$\rho^{[3\cdots N]} = \sum_{a_2=1}^{\chi_2} (\lambda_{a_2}^{[2]})^2 |\phi_{a_2}^{[3\cdots N]}\rangle \langle \phi_{a_2}^{[3\cdots N]}| \tag{322}$$

である．

$$|\tilde{\phi}^{[3\cdots N]}_{a_2}\rangle = \lambda^{[2]}_{a_2} |\phi^{[3\cdots N]}_{a_2}\rangle, \tag{323}$$
$$|\tilde{\tau}^{[3\cdots N]}_{a_1 i_2}\rangle = \lambda^{[1]}_{a_1} |\tau^{[3\cdots N]}_{a_1 i_2}\rangle \tag{324}$$

と書くと

$$\sum_{a_1=1}^{\chi_1}\sum_{i_2=1}^{d} |\tilde{\tau}^{[3\cdots N]}_{a_1 i_2}\rangle\langle\tilde{\tau}^{[3\cdots N]}_{a_1 j_2}| = \sum_{a_2=1}^{\chi_2} |\tilde{\phi}^{[3\cdots N]}_{a_2}\rangle\langle\tilde{\phi}^{[3\cdots N]}_{a_2}| \tag{325}$$

である．よって補題A.3より，$\{|\tilde{\phi}^{[3\cdots N]}_{a_2}\rangle\}_{a_2=1,\dots,\chi_2}$の張る部分空間と$\{|\tilde{\tau}^{[3\cdots N]}_{a_1 i_2}\rangle\}_{a_1=1,\dots,\chi_1, i_2=1,\dots,d}$の張る部分空間は一致する．

$|\tau^{[3\cdots N]}_{a_1 i_2}\rangle$の$|\tilde{\phi}^{[3\cdots N]}_{a_2}\rangle = \lambda^{[2]}_{a_2}|\phi^{[3\cdots N]}_{a_2}\rangle$による展開係数を$\Gamma^{[2]i_2}_{a_1 a_2}$と書く：

$$|\tau^{[3\cdots N]}_{a_1 i_2}\rangle = \sum_{a_2=1}^{\chi_2} \Gamma^{[2]i_2}_{a_1 a_2} \lambda^{[2]}_{a_2} |\phi^{[3\cdots N]}_{a_2}\rangle. \tag{326}$$

すると，

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \sum_{a_1=1}^{\chi_1} \lambda^{[1]}_{a_1} |\phi^{[1]}_{a_1}\rangle |\phi^{[2\cdots N]}_{a_1}\rangle & (327)\\
&= \sum_{i_1,i_2=1}^{d}\sum_{a_1=1}^{\chi_1} \lambda^{[1]}_{a_1}\Gamma^{[1]i_1}_{a_1} |i_1\rangle|i_2\rangle|\tau^{[3\cdots N]}_{a_1 i_2}\rangle & (328)\\
&= \sum_{i_1,i_2=1}^{d}\sum_{a_1=1}^{\chi_1}\sum_{a_2=1}^{\chi_2} \Gamma^{[1]i_1}_{a_1}\lambda^{[1]}_{a_1}\Gamma^{[2]i_2}_{a_1 a_2}\lambda^{[2]}_{a_2} |i_1\rangle|i_2\rangle|\phi^{[3\cdots N]}_{a_2}\rangle. & (329)
\end{aligned}$$

同様にして，

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1,\dots,i_{N-1}=1}^{d}\sum_{a_1=1}^{\chi_1}\cdots\sum_{a_{N-1}=1}^{\chi_{N-1}} \Gamma^{[1]i_1}_{a_1}\lambda^{[1]}_{a_1}\Gamma^{[2]i_2}_{a_1 a_2}\lambda^{[2]}_{a_2}\cdots\Gamma^{[N-1]i_{N-1}}_{a_{N-2}a_{N-1}}\lambda^{[N-1]}_{a_{N-1}} |i_1\rangle|i_2\rangle\cdots|i_{N-1}\rangle|\phi^{[N]}_{a_{N-1}}\rangle. \tag{330}$$

最後は

$$|\phi^{[N]}_{a_{N-1}}\rangle = \sum_{i_N=1}^{d} \Gamma^{[N]i_N}_{a_{N-1}} |i_N\rangle \tag{331}$$

と展開して以下を得る．

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1,\dots,i_N=1}^{d}\sum_{a_1=1}^{\chi_1}\cdots\sum_{a_{N-1}=1}^{\chi_{N-1}} \Gamma^{[1]i_1}_{a_1}\lambda^{[1]}_{a_1}\Gamma^{[2]i_2}_{a_1 a_2}\lambda^{[2]}_{a_2}\cdots\Gamma^{[N-1]i_{N-1}}_{a_{N-2}a_{N-1}}\lambda^{[N-1]}_{a_{N-1}}\Gamma^{[N]i_N}_{a_{N-1}} |i_1\cdots i_N\rangle. \tag{332}$$

C　CPマップとChoiの定理

Choiの定理 [5]の証明をメモする．

正方行列Aが半正定値であるとは，任意の$z\in\mathbb{C}^n$に対して$z^\dagger Az\geq 0$とき． Aが半正定値であれば，Aはエルミートに注意する． [6]

[6]より一般に，任意の$z\in\mathbb{C}^n$に対して$z^\dagger Az\in\mathbb{R}$であれば$A$はエルミートである（https://math.stackexchange.com/questions/267300/positive-definite-matrix-must-be-hermitian）：任意の$z\in\mathbb{C}^n$に対して，

$$z^\dagger Az = (z, Az) = (A^\dagger z, z) = (z, A^\dagger z)^* = (z, A^\dagger z) \tag{333}$$

$\mathbb{C}^{n\times n}$を$n\times n$複素行列全体の空間とする．線形写像$\Phi:\mathbb{C}^{n\times n}\to\mathbb{C}^{m\times m}$が*positive*であるとは，$A\in\mathbb{C}^{n\times n}$が半正定値であれば$\Phi(A)\in\mathbb{C}^{m\times m}$も半正定値であるとき．つまり，$\Phi$が半正定値性を保つときを言う． $\Phi\otimes 1_p:\mathbb{C}^{n\times n}\otimes\mathbb{C}^{p\times p}\to\mathbb{C}^{m\times m}\otimes\mathbb{C}^{p\times p}$を自然に定義する．つまり，$\mathbb{C}^{n\times n}$値$p\times p$行列$A=(A_{j,k})_{1\le j,k\le p}=(([A_{j,k}]_{i,l})_{1\le i,l\le n})_{1\le j,k\le p}$に対して，$\mathbb{C}^{m\times m}$値$p\times p$行列の成分を$\Phi(A_{j,k})$として定義する．つまり，

$$\Phi\otimes 1_p:\begin{pmatrix}A_{1,1}&\cdots&A_{1,p}\\ \vdots&&\vdots\\ A_{p,1}&\cdots&A_{p,p}\end{pmatrix}\mapsto\begin{pmatrix}\Phi(A_{1,1})&\cdots&\Phi(A_{1,p})\\ \vdots&&\vdots\\ \Phi(A_{p,1})&\cdots&\Phi(A_{p,p})\end{pmatrix}. \tag{334}$$

任意の自然数pに対して$\Phi\otimes 1_p$がpositiveであるとき，Φを*completely positive*と言う．CPと略す．

Vを$n\times m$行列とすると，半正定値行列Aに対して，$(V^\dagger AV)^\dagger=V^\dagger AV$かつ，$z\in\mathbb{C}^m$に対して$z^\dagger V^\dagger AVz=(Vz)^\dagger A(Vz)\ge 0$であるので，$\Phi_V(A):=V^\dagger AV$はpositive．さらに，$\Phi_V$はCPである：$\mathbb{C}^{n\times n}$値$p\times p$行列$(A_{a,b})_{1\le a,b\le p}$を半正定値とする．つまり，任意の$z\otimes w=(z_iw_a)\in\mathbb{C}^n\otimes\mathbb{C}^p$に対して，

$$(z\otimes w)^\dagger(A_{a,b})_{1\le a,b\le p}(z\otimes w)=(z^\dagger A_{a,b}z)w_a^*w_b\ge 0 \tag{335}$$

とする． [7] このとき，$(\Phi_V\otimes 1_p)((A_{a,b})_{1\le a,b\le p})=(V^\dagger A_{a,b}V)_{1\le a,b\le p}$であるが，$z\otimes w\in\mathbb{C}^m\otimes\mathbb{C}^p$に対して，

$$(z\otimes w)^\dagger(V^\dagger A_{a,b}V)_{1\le a,b\le p}(z\otimes w)=(z^\dagger V^\dagger A_{a,b}Vz)w_a^*w_b=((Vz)^\dagger A_{a,b}(Vz))w_a^*w_b\ge 0 \tag{338}$$

より．同様に，$V_1,\dots,V_d$を$n\times m$行列の集合としたとき， $\Phi_{\{V_i\}}(A):=\sum_i V_i^\dagger AV_i$もCPである：

$$(z\otimes w)^\dagger(\sum_i V_i^\dagger A_{a,b}V_i)_{1\le a,b\le p}(z\otimes w)=\sum_i(z^\dagger V_i^\dagger A_{a,b}V_iz)w_a^*w_b=\sum_i((V_iz)^\dagger A_{a,b}(V_iz))w_a^*w_b\ge 0 \tag{339}$$

より．

逆が成立する．

Theorem C.1 ([5])**.** Φが*CP*であることと，$\Phi(A)=\sum_i V_i^\dagger AV_i$と書けることは同値.

（証明） $n\times n$行列E_{jk}をjk成分のみ1で他はゼロ，つまり，$[E_{jk}]_{j'k'}=\delta_{jj'}\delta_{kk'}$と定義する．

一般に，$1\times nm$行列vに対してvをn個のブロックに分解することにより$n\times m$行列Vに対応させることができる：

$$v=(x_1,\dots,x_n),\quad x_j=((x_j)_1,\dots,(x_j)_m), \tag{340}$$
$$V_{ij}=(x_i)_j. \tag{341}$$

このとき，

$$[V^\dagger E_{jk}V]_{pq}=V_{pr}^\dagger[E_{jk}]_{rs}V_{sq}=(x_r^*)_p\delta_{jr}\delta_{ks}(x_s)_q=(x_j^*)_p(x_k)_q=[x_j^\dagger x_k]_{pq}, \tag{342}$$

より，任意の$z\in\mathbb{C}^n$に対して$(z,(A-A^\dagger)z)=0$. $B=A-A^\dagger$と置く． $z=x+ky$と置くと，任意の$x,y\in\mathbb{C}^n,k\in C$に対して，$(x+ky,B(x+ky))=k^*(y,Bx)+k(x,By)=0$. $k=1,i$と置いて$(y,Bx)+(x,By)=0$かつ$(y,Bx)-(x,By)=0$. よって，任意の$x,y\in\mathbb{C}^n$に対して$(y,Bx)=0$より$B=0$.

[7] エルミート共役は,

$$[[A^\dagger]_{a,b}]_{i,j}=([A_{b,a}]_{j,i})^*=[[A_{b,a}]^\dagger]_{i,j}. \tag{336}$$

$$(z_i^*[A_{a,b}]_{i,j}z_jw_a^*w_b)^*=z_i([A_{a,b}]_{i,j})^*z_j^*w_aw_b^*=z_i^*([A_{b,a}]_{j,i})^*z_jw_a^*w_b \tag{337}$$

より，$z_i^*[A_{a,b}]_{i,j}z_jw_a^*w_b$が実に注意． Aのエルミート条件に矛盾がない.

つまり，

$$V^\dagger E_{jk} V = x_j^\dagger x_k \in \mathbb{C}^{m\times m}. \tag{343}$$

すると，$m\times m$行列値$n\times n$行列$(V^\dagger E_{jk}V)_{1\le j,k\le n}$は，

$$(V^\dagger E_{jk}V)_{1\le j,k\le n} = \begin{pmatrix} x_1x_1^\dagger & \cdots & x_1x_n^\dagger \\ \vdots & & \\ & & \vdots \\ x_nx_1^\dagger & \cdots & x_nx_n^\dagger \end{pmatrix} = vv^\dagger. \tag{344}$$

以下に注意する．

- $n\times n$行列値$n\times n$行列$(E_{jk})_{1\le j,k\le n}$は半正定値．

エルミート性は，$E_{j,k}^\dagger = E_{k,j}$より．また$z\otimes w = (z_i w_a) \in \mathbb{C}^n \otimes \mathbb{C}^n$に対して，

$$(z\otimes w)^\dagger (E_{jk})_{1\le j,k\le n}(z\otimes w) = \sum_{j,k}(z^\dagger E_{jk} z) w_j^* w_k = \sum_{j,k} z_j^* z_k w_j^* w_k = |\sum_j z_j w_j|^2 \ge 0. \tag{345}$$

さて，$\Phi : \mathbb{C}^{n\times n} \to \mathbb{C}^{m\times m}$がCPと仮定すると，$m\times m$行列値$n\times n$行列$(\Phi(E_{jk}))_{1\le j,k\le n}$は半正定値であるので，$(\Phi(E_{jk}))_{1\le j,k\le n}$を$nm\times nm$行列として固有分解すると

$$(\Phi(E_{jk}))_{1\le j,k\le n} = \sum_{i=1}^{nm} \lambda_i v_i^\dagger v_i \tag{346}$$

と書くことができる． λ_iは実で$\lambda_i \ge 0$である． v_iは$1\times nm$行列である．さらにλ_iを固有ベクトルに吸収して，

$$(\Phi(E_{jk}))_{1\le j,k\le n} = \sum_i v_i^\dagger v_i \tag{347}$$

と書くことができる．ここで，$\lambda_i = 0$なる固有ベクトルの和を取らないことを，$\sum_i$と略記している．上で示した結果を用いると，v_iに対応する$n\times m$行列をV_iと書くと，

$$(\Phi(E_{jk}))_{1\le j,k\le n} = \sum_{i=1}^{nm} (V_i^\dagger E_{jk} V_i)_{1\le j,k\le n}. \tag{348}$$

よって，$m\times m$行列値$n\times n$行列の成分毎に

$$\Phi(E_{jk}) = \sum_{i=1}^{nm} V_i^\dagger E_{jk} V_i \tag{349}$$

が成立する．つまり，任意の$\mathbb{C}$値$n\times n$行列Aは$A = a_{jk}E_{jk}$と分解できるから，Φの線形性より，

$$\Phi(A) = \sum_{jk} a_{jk}\Phi(E_{jk}) = \sum_{jk} a_{jk} \sum_i V_i^\dagger E_{jk} V_i = \sum_i V_i^\dagger A V_i. \tag{350}$$

よって主張を得る．□

上の証明は$m\times m$行列値$n\times n$行列$(\Phi(E_{jk}))_{1\le j,k\le n}$の半正定値性のみを用いており，$\Phi(A) = \sum_i V_i^\dagger A V_i$であればCPであるので，以下を得る．

Theorem C.2 ([5]). $\Phi : \mathbb{C}^{n\times n} \to \mathbb{C}^{m\times m}$を線形写像とする． ΦがCPであることと，$m\times m$行列値$n\times n$行列$(\Phi(E_{jk}))_{1\le j,k\le n}$が半正定値であることは同値．

$\Phi(A) = \sum_i V_i^\dagger A V_i$なる分解において，行列の集合$\{V_i\}$は一意でない．ある程度の一意性を示すには，$\{V_i\}_{i=1}^{\ell}$がベクトル空間$\mathbb{C}^{n\times m}$として線形独立であることを課す．（線形独立に選ぶことができることは，固有分解であることから明らか．）このとき，表示$\Phi(A) = \sum_{i=1}^{\ell} V_i^\dagger A V_i$は以下の意味で標準的（canonical）．

Theorem C.3 ([5]). $n\times m$行列の集合$\{V_i\}_{i=1}^{l}$を線形独立とし，$\Phi(A) = \sum_{i=1}^{l} V_i^\dagger A V_i$とする．$n\times m$行列の集合$\{W_p\}_{p=1}^{l'}$に対して，$\Phi(A) = \sum_{p=1}^{l'} W_p^\dagger A W_p$ であることと，$l'\times l$等長行列$\mu, \mu^\dagger\mu = 1_l$が存在して$W_p = \sum_{i=1}^{l}\mu_{pi}V_i$なることが同値．さらに$\{W_p\}_{p=1}^{l'}$が線形独立である場合は，$l = l'$であり，$\mu$はユニタリ行列．

（証明）十分性は自明であるので，必要性のみ示す． $v_i, i = 1,\dots,l$をV_iに対応する$1\times nm$行列とし， $w_p, p = 1,\dots,l'$をW_pに対応する$1\times nm$行列とする．

$$\sum_{p=1}^{l'} w_p^\dagger w_p = (\Phi(E_{jk}))_{1\le j,k\le n} = \sum_{i=1}^{l} v_i^\dagger v_i \tag{351}$$

なので，補題A.3より

$$w_p^\dagger = \sum_{i=1}^{l} \mu_{pi}^* v_i^\dagger, \quad p = 1,\dots,l' \tag{352}$$

と展開できる．つまり，

$$W_p = \sum_{i=1}^{l} \mu_{pi} V_i, \quad p = 1,\dots,l'. \tag{353}$$

さて$\{v_i^\dagger\}_{i=1}^{l}$は線形独立であるので，$\{v_i^\dagger v_j\}_{i,j=1}^{l}$も線形独立．すると，

$$\sum_{i=1}^{l} v_i^\dagger v_i = \sum_{p=1}^{l'} w_p^\dagger w_p = \sum_{p=1}^{l'}\sum_{i,j=1}^{l} \mu_{pi}^*\mu_{pj} v_i^\dagger v_j \tag{354}$$

より，$v_i^\dagger v_j$の線形独立性より

$$\sum_{p=1}^{l'} \mu_{pi}^*\mu_{pj} = \delta_{ij} \tag{355}$$

が従う．つまり$\mu^\dagger\mu = 1_l$であり，μは等長行列．

$w_1,\dots,w_{l'}$も線形独立であれば上記補題より$l = l'$であるので，μはユニタリ行列．□

D　有限次元Krein–Rutmanの定理

まず，以下に注意する．

半正定値行列の和は半正定値.

なぜなら，A, Bを半正定値とすると，$z \in \mathbb{C}^n$に対して，$z^\dagger(A+B)z = z^\dagger Az + z^\dagger Bz \geq 0$より．同様にして，

正定値行列と半正定値行列の和は正定値.

E　検討していない事項

- [1]における，状態が“pure”であることの定義．特に，CPマップ$\mathcal{E}, \mathcal{E}^\dagger$の$\lambda = 1$なる固有ベクトルが，共に正定値まで課すかどうか．そもそも，“pure state”の数学的定義は存在する？存在したとして，ブロックがひとつの標準的TI-MPSのクラスと，どれくらい異なる？

- 有限次元Krein=Rutmanの定理の証明.

- 標準的TI-MPSの「ブロックがひとつ」であることの数学的定義．不変部分空間の非存在で良い？転送行列の固有ベクトルの正定値性との関係は？

- [3]の定理７の仮定,「標準的OBC-MPS表現の一意性」は仮定として必要？

References

[1] Fannes, Mark, Bruno Nachtergaele, and Reinhard F. Werner. *Finitely correlated states on quantum spin chains*, Communications in mathematical physics 144.3 (1992): 443-490.

[2] G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **91**, 147902 (2003).

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

[4] Ulrich Schollwöck, *The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states*, Annals of Physics **326**, 96 (2011).

[5] Man-Duen Choi, *Completely positive linear maps on complex matrices*, Linear algebra and its applications 10.3 (1975): 285-290.

[6] Nielsen, M. A., Chuang, I. (2002). *Quantum computation and quantum information.*

[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 (1977).

[8] Fidkowski, Lukasz, and Alexei Kitaev. *Topological phases of fermions in one dimension*, Physical review b 83.7 (2011): 075103.

[9] 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.

[10] Michael M. Wolf, *Quantum Channels & Operations Guided Tour*, https://www-m5.ma.tum.de/foswiki/pub/M5/Allgemeines/MichaelWolf/QChannelLecture.pdf

[11] Bhatia, R. (2009). *Positive definite matrices*, Princeton university press.