

空間非一様に作用する対称性を持つ 1 次元トポロジ カル相の分類

2025 年 12 月 10 日

目次

第 1 章	励起ギャップのある 1 次元量子多体系	5
1.1	gapped 系におけるクラスター性	5
1.2	1 次元系でのエンタングルメントエントロピーの面積則	11
第 2 章	行列積状態	13
2.1	Schmidt 分解	13
2.2	行列積状態	20
2.3	転送行列の特性	29
2.4	無限サイズ密度行列繰り込み群法 (iDMRG)	41
第 3 章	対称性に保護されたトポロジカル相	47
3.1	自明相と SSB 相 - 横磁場強磁性 Ising 模型	47
3.2	対称性の自発的破れによる相の分類	51
3.3	AKLT 模型	51
3.4	クラスター模型	55
3.5	SPT 相の物理的定義	57
3.6	SPT 相の分類	57
3.7	Decorated domain wall 構成	65
第 4 章	多極子対称性下のトポロジカル相	67
4.1	多極子対称性	67
4.2	MPS を用いた多極子 SPT 相の分類	69
第 5 章	1+1 次元 modulated symmetry のもとでのトポロジカル相の分類	77
付録 A	線型代数に関する命題と証明	79
A.1	行列の分解と幾何学的解釈	79
A.2	ノルム	80
A.3	正写像	92
付録 B	対称性と表現論	111
B.1	群	111
付録 C	群の表現	113
C.1	線形表現	113

C.2	射影表現	120
付録 D 量子情報理論		123
D.1	純粹状態・混合状態	123
D.2	エントロピー	124
D.3	忠実度	127
付録 E 本文で省略した証明		131
E.1	?? (Lieb-Robinson 限界) の証明	131
E.2	?? (SPT は相関関数が指数減衰) の証明	133
E.3	整数論に関する命題の証明	141
E.4	(4.2.3) の転送行列を用いた議論による証明	143
E.5	Prop. 8 の証明	145
E.6	decorated domain wall 構成による多極子 SPT 模型に関する証明	147
参考文献		151
索引		155

序論

相図の分類は物性物理学における中心的な問題である。

第 1 章

励起ギャップのある 1 次元量子多体系

本章では 1 次元量子多体系が励起ギャップをもつときに現れる性質を整理する。熱力学極限を念頭に Hamiltonian の固有値の分布を調べると、基底状態と第一励起状態の間に有限のエネルギー差がある場合とない場合に大別できる。絶対零度極限において前者は絶縁体、後者は導体に対応する。

因果の流れとしては、

$$\begin{array}{ccc} \text{gapped Hamiltonian} & \xrightarrow{\text{Lieb-Robinson bound}} & \text{exponential decay of correlation} \\ & \xrightarrow{\text{quantum info. theory}} & \text{area law of entanglement entropy} \end{array}$$

が成り立つ。なお上段は 1 次元に限らず、有限次元の格子系であれば常に成立する。

1.1 gapped 系におけるクラスター性

相対論的量子場理論では、質量を持つ粒子が媒介する相互作用は距離の指数関数的減衰を示す。相対論を要求しない物性理論でも、質量に対応して励起ギャップがあるならば基底状態の相関関数が

$$\langle \phi_0 | A_x B_y | \phi_0 \rangle - \langle \phi_0 | A_x | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | B_y | \phi_0 \rangle = \mathcal{O}\left(e^{-\text{const.} \times |x-y|}\right)$$

のように指数関数的に減衰すること（クラスター性）が、数々の具体例を通じて期待されていた。 A_x, B_y はそれぞれ格子点 x, y 上の局所演算子、 $|\phi_0\rangle$ は基底状態を表す。実際、この事実は [1] にて示された。^{*1} その背景に、非相対論的量子力学でも Lieb-Robinson 限界と呼ばれる実質的な因果律がある [3] ことは示唆的である。

まず問題設定を整理する。格子点を Λ_s 、格子のボンドを Λ_b として、これを合わせて $\Lambda = (\Lambda_s, \Lambda_b)$ とする。本節では格子 Λ の形状や次元には制限を課さない。 $x, y \in \Lambda_s$ が Λ_b の部分集合で連結されているとき、 $\text{dist}(x, y)$ と書いたら、 x, y 間の最短経路長を表す。格子は次の意味で有限次元であると仮定する。

^{*1} 極限の取り方によっては [2] もこの事実を示しているが、論文の主眼はクラスター性にない。

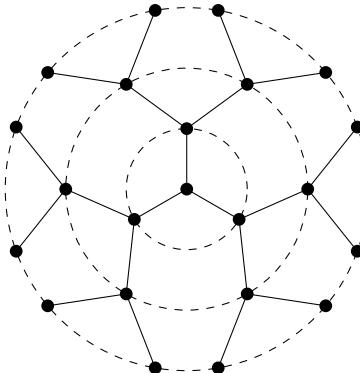


図 1.1: Bethe 格子

Assumps. 1: 格子の有限次元性

熱力学極限をとる格子点 Λ_s の増大列は、ある定数 $\eta > 0$ を用いて

$$\sup_{\Lambda_s} \sup_{x \in \Lambda_s} \sum_{y \in \Lambda_s} \frac{1}{[1 + \text{dist}(x, y)]^\eta} < \infty$$

を満たす。

例えば d 次元 Euclid 空間ににおける通常の格子は半径 r の球面に含まれるサイト数が $\mathcal{O}(r^{d-1})$ であるため、

$$\sum_y \frac{1}{r^\eta} \approx \int_1^\infty dr \frac{r^{d-1}}{r^\eta} = \int_1^\infty dr \frac{1}{r^{\eta-d+1}}$$

が有限になるような $\eta > d$ が必ず存在する。一方 Bethe 格子 (Fig. 1.1) のように、距離に応じて指数関数的にサイト数が増加する格子はこの仮定を満たさない。

格子点 $x \in \Lambda_s$ ごとに局所 Hilbert 空間 \mathcal{H}_x を定義する。各点の Hilbert 空間の次元は $\sup_{x \in \Lambda_s} \dim \mathcal{H}_x < \infty$ を満たすとする。全 Hilbert 空間は $\mathcal{H} = \bigotimes_{x \in \Lambda} \mathcal{H}_x$ で与える。

Λ の部分系の集合 S をとることで全系の Hamiltonian が

$$H = \sum_{X \in S} h_X$$

と書けるとする。例えば空間 1 次元 $\Lambda_s \cong \mathbb{Z}$ の Ising モデルを念頭に置く場合、 S は隣接する格子点の組全体の集合 $S = \{(x, x+1) \mid x \in \mathbb{Z}\}$ である。局所 Hamiltonian h_X は $X \subset \Lambda$ に台 (非自明な作用) を持つ演算子である。 $X, Y \in S$ が同じサイト数であっても、 $X \neq Y$ であれば h_X と h_Y は異なる形状の相互作用を表して良い。ただし相互作用はある程度局所的であることを要請し、次の仮定をする。

Assumps. 2: 相互作用の指数減衰

相互作用 h_X は定数 $\lambda_0, \mu, \varepsilon > 0$ を用いて

$$\sum_{X \ni x, y} \|h_X\| \leq \lambda_0 e^{-(\mu + \varepsilon) \text{dist}(x, y)}$$

を満たす。^a

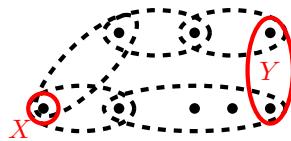


図 1.2: 格子系と相互作用の例。破線は局所 Hamiltonian が非自明に作用する範囲を表す。この図では $d(X, Y) = 2$ である。

^a 演算子のノルム $\|h_X\|$ は Hilbert 空間に作用する行列としての誘導ノルムとする。appendix A.2.2 を参照。

距離 r の 2 点に働く相互作用が $V(r) = \mathcal{O}(e^{-\mu r})$ の形で指数減衰する場合、典型的な局所 Hamiltonian はこの仮定を満たす。一方で Coulomb 相互作用のように幂減衰する相互作用はこの仮定を満たさないが、これ以降の議論を応用すると幂減衰する Lieb-Robinson 限界およびクラスター性も導出できる [1]。

1.1.1 Lieb-Robinson 限界

相対論的量子力学では空間的に十分離れた 2 点間の bosonic な演算子は交換し、さらに時間発展しても光円錐が交わるまでは可換である。^{*2} 一方、凝縮系理論では相対論的效果を無視することが多く、一見このような因果律は要請されないように思える。しかし、[3] にて、局所的な相互作用を持つ量子多体系においても、情報伝搬速度の実質的な上限が存在することが示された。この結果は Lieb-Robinson 限界と呼ばれ、非相対論的量子力学における実質的な因果律を与える。

光円錐の直感を与えるために、以下の距離を定義する。

Def. 1: 相互作用距離

上で与えた S を用いて格子 Λ の部分集合 X, Y の間の距離を

$$d(X, Y) := \min | \{Z_i \in S \mid X \cap Z_1 \neq \emptyset, Z_i \cap Z_{i+1} \neq \emptyset, Z_n \cap Y \neq \emptyset\}_i |$$

とする。^a

^a X, Y は S の元である必要はない。

Fig. 1.2 を参照。時間発展を離散ステップで見ると、点 $x \in \Lambda$ が次の時刻で相互作用するのは、 x に非自明な作用を与える h_X の台 $X(\ni x)$ に含まれる点だけである。すなわち相互作用距離は Hamiltonian の各項を辿っていくことで二つの有界部分集合をつなぐ最短時間を表す。

上記の状況設定に対して、次の定理が成り立つ。

^{*2} 寧ろ bosonic な演算子の定義を、空間的に十分離れた演算子が交換することとする。空間的に離れた演算子が反可換なときは fermionic な演算子と呼ぶ。[1] では fermionic な演算子に対しても Lieb-Robinson 限界及びクラスター性を示している。

Thm. 1: 指数減衰する相互作用系に関する Lieb-Robinson 限界

A_X, B_Y をコンパクトな台 X, Y ($X \cap Y = \emptyset$) で定義された bosonic な演算子とする。系が Assump. 1 および Assump. 2 を満たすとき、

$$\|[A_X(t), B_Y]\| \leq C \|A_X\| \|B_Y\| |X| e^{-\mu d(X, Y)} (e^{v|t|} - 1) \quad (1.1.1)$$

を満たす正定数 $C, v > 0$ が存在する。

証明は技術的なので appendix E.1 に回す。(1.1.1) 右辺最後の -1 を無視して(十分時間が経過したのち) $v_{LR} = v/\mu$ を与え、交換子のノルムが $\exp[-\mu(d(X, Y) - v_{LR}|t|)]$ で上から押さえられることを見ると、 v_{LR} が速度であると解釈しやすい。

(1.1.1) 左辺と因果律の関係がより明白になるように量子測定の例を紹介する。全体系を Λ とし、Alice は部分系 $X \subset \Lambda$ 、Bob は部分系 $Y \subset \Lambda$ にのみアクセスできるとする。初期状態は $\hat{\rho}$ である。Alice が古典ビットの乱数を持っているとして以下のプロトコルを考察する。

1. Alice がビット 0を得たとき、何もしない。ビット 1を得たら、 X に台を持つ Hamiltonian $H' = \hat{O}_X$ によって微小時間 ε だけ時間発展させて、状態を $\hat{\rho}' = \hat{\rho} + i\varepsilon[\hat{O}_X, \hat{\rho}]$ に変化させる。
2. 全体系を時間 t だけ時間発展させる。
3. Bob が Y に台を持つ観測量 \hat{M}_Y を測定する。

Bob の測定結果の期待値の差は

$$\begin{aligned} \Delta O_Y &:= \left| \text{Tr} \left[\hat{\rho}' \hat{M}_Y(t) \right] - \text{Tr} \left[\hat{\rho} \hat{M}_Y(t) \right] \right| \\ &= \varepsilon \left| \text{Tr} \left[[\hat{O}_X, \hat{\rho}] \hat{M}_Y(t) \right] \right| = \varepsilon \left| \text{Tr} \left[\hat{\rho} [\hat{M}_Y(t), \hat{O}_X] \right] \right| \leq \varepsilon \left\| [\hat{O}_X, \hat{M}_Y(t)] \right\| \end{aligned}$$

となる。最後の不等式では $|\text{Tr} AB| \leq \|A\|_{\text{tr}} \|B\|$ から導いている(cf. appendix A.2)。Thm. 1 は Bob の測定結果の差が“光円錐” $d = v_{LR} t$ からの距離の指數関数により減少することを示しており、因果律を実質的に保証している。

1.1.2 主張と証明の概略

Def. 2: 励起ギャップ

Hamiltonian H_Λ のスペクトル $\text{Sp}(H_\Lambda)$ が以下を満たすとき、基底状態の上に励起ギャップがあるという。

- H_Λ の基底状態が q -重縮退する。すなわち、固有状態 $E_{0,1}, \dots, E_{0,q}$ が

$$\Delta \mathcal{E} := \max_{\mu, \mu'} |E_{0,\mu} - E_{0,\mu'}| \rightarrow 0 \quad (|\Lambda_s| \rightarrow \infty)$$

を満たす $\text{Sp}(H_\Lambda)$ の最少の元である。

- q -重の基底状態と第1励起状態のスペクトル間のギャップが、 $|\Lambda_s|$ に依存しない($\mathcal{O}(1)$ の)定数 ΔE で下から抑えられる。

物理量の基底状態期待値を

$$\langle O \rangle_{0,\Lambda} := \frac{1}{q} \text{Tr}[OP_{0,\Lambda}]$$

で定義する。ただし、 $P_{0,\Lambda}$ は H_Λ の基底状態空間への射影である。有限体積の格子 Λ の規格化された基底状態ベクトル Φ_Λ による評価値の極限

$$\omega(O) := \lim_{|\Lambda_s| \rightarrow \infty} \langle \Phi_\Lambda, O\Phi_\Lambda \rangle$$

によって、無限体積における基底状態期待値を定義する。

Thm. 2: ボゾン系のクラスター性

A_X, B_Y をそれぞれコンパクト部分集合 $X, Y \subset \Lambda$ に台を持つ演算子とする。系が Assump. 1 および Assump. 2 を満たし、さらに励起ギャップ $\Delta E > 0$ があるとき、熱力学極限の基底状態期待値 ω について

$$\left| \omega(A_X B_Y) - \frac{1}{2} [\omega(A_X P_0 B_Y) + \omega(B_Y P_0 A_X)] \right| \leq \text{const.} \times e^{-\tilde{\mu}d(X,Y)}$$

が成立する。ただし、 $\tilde{\eta}, \tilde{\mu}$ は η, μ の増加関数 v_η, v_μ を用いて

$$\tilde{\eta} := \frac{\eta}{1 + 2v_\eta/\Delta E}, \quad \tilde{\mu} := \frac{\mu}{1 + 2v_\mu/\Delta E}$$

と表される。

「励起ギャップがあるなら相関関数は指数減衰」という定性的な主張には系の動的な情報が一切入っていないが、情報伝搬速度の上限を与える Lieb-Robinson bound が本質的に関わっていることには注目すべきである。また特に基底状態が縮退する系について、主張の左辺は連結相関関数

$$\langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle - \langle \phi_0 | A_X | \phi_0 \rangle \langle \phi_0 | B_Y | \phi_0 \rangle$$

とは一般に異なることに注意。例えば、古典 Ising 模型の基底状態を猫状態 $|\pm\rangle = (|\uparrow\uparrow\dots\rangle \pm |\downarrow\downarrow\dots\rangle)/\sqrt{2}$ により展開すると、連結相関関数が

$$\langle \pm | Z_x Z_y | \pm \rangle - \langle \pm | Z_x | \pm \rangle \langle \pm | Z_y | \pm \rangle = 1 - 0 \cdot 0 = 1$$

であるのに対し、定理における不等式左辺は

$$\begin{aligned} & \langle \pm | Z_x Z_y | \pm \rangle - \frac{1}{2} [\langle \pm | Z_x (|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|) Z_y | \pm \rangle + \langle \pm | Z_y (|+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|) Z_x | \pm \rangle] \\ &= 1 - \frac{\langle \mp | Z_x | \mp \rangle + \langle \mp | Z_y | \mp \rangle}{2} = 0 \end{aligned}$$

となる。

証明自体はテクニカルなので appendix E.2 に回すが、以下では基底状態 $|\phi_0\rangle$ が縮退せず、单一物理量の期待値が $\langle \phi_0 | A_X | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | B_Y | \phi_0 \rangle = 0$ の場合に限って、[4] を参考に証明の方針を概観する。

演算子 A のエネルギー固有基底による行列要素を $A_{ij} = \langle i | A | j \rangle$ で表す。ただし $H |i\rangle = E_i |i\rangle$ であり、基底状態は $|0\rangle = |\phi_0\rangle$ である。この行列要素の時間発展は

$$A_{ij}(t) = \langle i | e^{iHt} A e^{-iHt} | j \rangle = e^{i(E_i - E_j)t} A_{ij}$$

と表せ、 $E_i - E_j = \omega_{ij}$ とすると A の行列表示は

$$A(t) = \begin{pmatrix} \ddots & & & \\ & \ddots & & \omega < 0 \\ & & \omega = 0 & \\ & & & \ddots \\ \omega > 0 & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

のように、対角成分が $\omega = 0$ 、上三角成分が $\omega < 0$ 、下三角成分が $\omega > 0$ に対応する。
 $A_{00} = \langle \phi_0 | A_X | \phi_0 \rangle = 0$ に注意して、相関関数は

$$\begin{aligned} \langle \phi_0 | A_X(t) B_Y | \phi_0 \rangle &= (1 \ 0 \ \cdots) A_X(t) B_Y \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \\ &= (1 \ 0 \ \cdots) \begin{pmatrix} 0 & * & * & \cdots \\ 0 & 0 & * & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \vdots \\ & & & \ddots \end{pmatrix} B \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.1.2)$$

と書けるので、基底状態期待値に影響するのは A_X の $\omega < 0$ の部分だけである。そこで、最右辺の上三角行列を構成する。 $\omega < 0$ の部分だけを取り出すには、 $A(t)$ の Fourier 変換に $\omega < 0$ の部分だけを通すフィルター関数をかけて逆 Fourier 変換すれば良い。階段関数

$$\Theta(\omega) = \begin{cases} 1 & (\omega < 0) \\ 0 & (\omega \geq 0) \end{cases}$$

を導入して A の Fourier 変換にかけ、さらに Fourier 逆変換すると、 Θ の逆変換 $\hat{\Theta}$ を用いた畳み込み積分

$$A(t) * \hat{\Theta}(t) = \int dt' A(t') \hat{\Theta}(t - t')$$

を得るので、 $t = 0$ で評価して

$$A_{\omega < 0} := \int dt A_X(t) \hat{\Theta}(-t).$$

また、

$$\langle \phi_0 | B_Y A_{\omega < 0} | \phi_0 \rangle = (1 \ 0 \ \cdots) B_Y \begin{pmatrix} 0 & * & * & \cdots \\ & * & \cdots & \\ 0 & \ddots & \vdots & \\ & & & * \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0$$

であるから、

$$\langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle = \int dt \langle \phi_0 | [A_X(t), B_Y] | \phi_0 \rangle \hat{\Theta}(-t) \quad (1.1.3)$$

が得られる。

(1.1.3) 右辺被積分関数の交換子では Lieb-Robinson 限界が使える。 t が十分小さいときは Lieb-Robinson 限界が効いて $[A_X(t), B_Y]$ が小さくなるが、積分は t が大きい部分

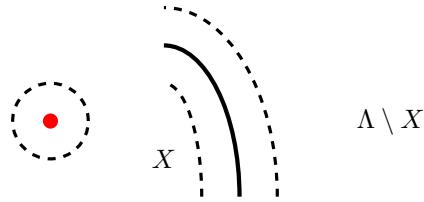


図 1.3: エンタングルメントの面積則。赤点とエンタングルする点は周囲の破線の円を超えない」と期待すると、 X と $\Lambda \setminus X$ の境界(太線)を跨ぐエンタングルメントの最大値は境界近傍(破線内側)にある点の数に比例すると考えられる。

が支配的になる。そこで t が大きい部分の寄与を抑えるために Gaussian のフィルター関数を導入する。

$$\tilde{A}_X := \int dt \langle \phi_0 | [A_X(t), B_Y] | \phi_0 \rangle \hat{\Theta}(-t) e^{-\alpha t^2} \quad (1.1.4)$$

しかし、新たに入れたフィルター関数のために、Fourier 空間でのフィルター Θ がぼやけてしまう。具体的には、被積分関数の Fourier 変換が

$$\mathcal{F}\left(\langle \phi_0 | [A_X(t), B_Y] | \phi_0 \rangle \hat{\Theta}(-t) e^{-\alpha t^2}\right) \simeq \langle \phi_0 | \tilde{A}_X(\omega) B_Y | \phi_0 \rangle \left(\Theta(-\omega) * e^{-\omega^2/4\alpha}\right)$$

となり、 α が大きいと基底状態期待値 (1.1.2) に $\omega \geq 0$ の寄与が混入する。この

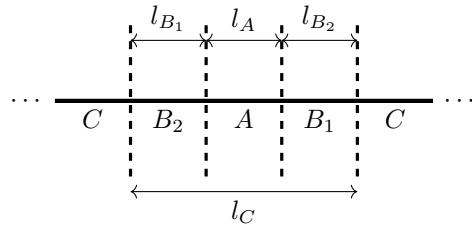
- (1.1.3) で t が大きい部分の寄与を抑えるには t が大きい方が望ましい
- (1.1.2) に $\omega \geq 0$ の寄与を混入させないためには α が小さい方が望ましい

のトレードオフを考慮して α を適切に選ぶと、相関関数の最適な上界を得られる。

1.2 1次元系でのエンタングルメントエントロピーの面積則

前節で見たように、1次元 gapped 系ではクラスター性が満たされる。相関関数は古典相関に限らず量子相関も検出できるので、エンタングルメントも同様の振る舞いを示すことが期待される。より一般に、以下の直感から任意次元の gapped な格子系でエンタングルメントエントロピーが面積則を満たすことが期待されている。相関関数が指数的に減衰する系では、ある点上の状態とエンタングルするのはその点から有限距離以内にある点に限られると期待される。Fig. 1.3 のように全体系を部分系 $X \subset \Lambda$ とそれ以外に分割したとき、境界を跨ぐようなエンタングルメントは境界近傍の点に限られる。エンタングルメントエントロピーは X とそれ以外の間のエンタングルメントの量を測る指標なので (cf. ??)、上限は境界の面積に比例すると考えられる。特に 1 次元系では領域の境界が点になるので、どのような連結領域 X を取ってもエンタングルメントエントロピーは定数で抑えられると期待される。

実際、1次元 gapped 系ではエンタングルメントエントロピーが定数で抑えられることが [5] にて示されており、[6] で改善された。[7] にて、1次元系ではクラスター性がこの十分条件であることが示されている。??と合わせると、1次元 gapped 系ではエンタングルメントエントロピーが面積則を満たす。しかしここでの証明はランダム状態とエンタングルメント蒸留のテクニックを使った複雑なものであり、エンタングルメントエントロピーは定数で抑えられてはいるが物理的に妥当な評価にはなっていない。[8] にてより簡単な

図 1.4: 1 次元鎖の分割。 $l_{B_1} \leq l_{B_2}$ とする。

証明が与えられており、さらに上限の評価も改善されている。

1 次元系のスピン $1/2$ 鎖を考える。スピンが大きい場合も各スピンをスピン $1/2$ に分解して長さを調整することでこの議論を適用できる。純粋状態 $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ が以下を満たすとする。

Assumps. 3

距離 l だけ離れた 2 つの領域 $X, Y \subset \Lambda_s$ に台を持つ任意の演算子 A_X, B_Y について、 $\langle \cdot \rangle = \text{Tr}(\rho \cdot)$ による期待値が

$$\langle A_X B_Y \rangle - \langle A_X \rangle \langle B_Y \rangle \leq \|A_X\| \|B_Y\| 2^{-l/\xi}$$

を満たす。

$\xi > 1$ としても一般性を失わない (NOT SURE!!!)。このもとで以下が成り立つ。

Thm. 3: 1 次元系でのエンタングルメントエントロピーの面積則

任意の $\alpha_0 \in [2/3, 1)$ を用いて、任意の領域のエンタングルメントエントロピー S は

$$S < \frac{\alpha_0}{1 - \alpha_0} \left(\ln \frac{\xi}{1 - \alpha_0} + 3 \right) 4^{n_0} + 12$$

で抑えられる。ただし、

$$n_0 \leq \left\lceil \frac{10\xi}{\alpha_0} + \frac{1 - \alpha_0}{\alpha_0} \frac{3}{\ln \xi - \ln(1 - \alpha_0) + 3} \right\rceil + 2$$

であり、 $\lceil x \rceil$ は x 以上の最小の整数を表す。

Fig. 1.4 のように 1 次元鎖を $A, B = B_1 + B_2, C$ に分ける。全体系の密度演算子を ρ として、部分系にトレースアウトしたものを ρ^A のように書く。

第 2 章

行列積状態

本章では 1 次元 gapped 量子スピン系の基底状態を効率的に表現する行列積状態 (matrix product state; MPS) について扱う。数学的な定式化は [9] すでに与えられており、重要な結果の多くはここで証明されている。

本章では状態は専らスピン系を念頭に置く。

本章は主に [10, 11, 12] を参考にした。

2.1 Schmidt 分解

2.1.1 行列の低ランク近似と特異値分解

L サイトの Hilbert 空間 $\mathcal{H} = \bigotimes_{k=1}^L \mathcal{H}_k$ 上の量子多体系の純粹状態

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_L} M_{i_1, \dots, i_L} |i_1, \dots, i_L\rangle \quad (M_{i_1, \dots, i_L} \in \mathbb{C}, 1 \leq i_k \leq d_k = \dim \mathcal{H}_k) \quad (2.1.1)$$

を効率的に近似する方法を考察する。ここで i_k はサイト k における Hilbert 空間 \mathcal{H}_k の基底を表し、 $M_{i_1, \dots, i_L} \in \mathbb{C}$ である。簡単のため、全系の Hilbert 空間の次元は有限であるとする。

一旦問題を簡単にして $L = 2$ とする。 $i_1 \in \{1, \dots, m\}, i_2 \in \{1, \dots, n\}$ を走るとすれば、 M_{i_1, i_2} は $m \times n$ 行列 M の成分とみなせる。この行列を適切に近似することで状態 $|\psi\rangle$ を近似する。 M は一般に正方行列ではないので、 M の情報は $\text{rank } M$ でおおよそ評価せざるを得ないだろう。^{*1} そこで近似行列 \tilde{M} として、ランクが小さくかつ M に近い行列を探す。 M との近さを評価するにはノルム $\|M - \tilde{M}\|$ が必要だが、計算が比較的容易な行列のノルムとして Frobenius ノルム

$$\|M\|_F := \sqrt{\text{Tr } M^\dagger M} = \sqrt{\sum_{i,j} |M_{ij}|^2}$$

がある。これにより状態の近似は一旦以下の問題に書き換えられる。

^{*1} ここでの情報とは情報理論における情報量を意味せず、基底を適切に変えたときに非ゼロになる成分としている。

Problem 1: 行列の低ランク近似問題

与えられた $m \times n$ 行列 M と $\tilde{r} \in \mathbb{N}$ に対して

$$\min_{\tilde{M}} \|M - \tilde{M}\|_F^2 \quad \text{s.t. } \text{rank } \tilde{M} \leq \tilde{r}$$

を実現する \tilde{M} を求めよ。

$\tilde{r} \geq \text{rank } M$ ならば自明に $\tilde{M} = M$ が解なので、以下 $\tilde{r} \leq \text{rank } M$ を仮定する。

Problem 1 を解くに当たって、最適化問題の解法として頻用される Lagrange の未定乗数法を用いる。またランクが問題設定に大きく影響しているので、階数分解??を用いる。最適近似を与える行列を階数分解により $\tilde{M} = \tilde{B}\tilde{C}$ として、さらに \tilde{B} が \tilde{r} 個の正規直交行列を並べて構成されることを踏まえ制約条件に $\tilde{B}^\dagger \tilde{B} = 1_{\tilde{r}}$ を課す。^{*2}Lagrange の未定乗数 $\lambda_{ij} \in \mathbb{R}$ を成分とする行列 $\tilde{\Lambda}$ により

$$\begin{aligned} L &= \|M - \tilde{B}\tilde{C}\|_F^2 + \sum_{i,j=1}^{\tilde{r}} \lambda_{ij}(\tilde{b}_i \cdot \tilde{b}_j - \delta_{ij}) \\ &= \text{Tr}[(M - \tilde{B}\tilde{C})^\dagger(M - \tilde{B}\tilde{C})] + \sum_{i,j=1}^{\tilde{r}} \tilde{\Lambda}_{ij}(\tilde{b}_i \cdot \tilde{b}_j - \delta_{ij}) \\ &= \text{Tr}[M^\dagger M - M^\dagger \tilde{B}\tilde{C} - (\tilde{B}\tilde{C})^\dagger M + \tilde{C}^\dagger \tilde{B}^\dagger \tilde{B}\tilde{C}] + \text{Tr}(\tilde{\Lambda}\tilde{B}^\dagger \tilde{B} - \tilde{\Lambda}) \\ &= \text{Tr}[M^\dagger M - M^\dagger(\tilde{B}\tilde{C}) - (\tilde{B}\tilde{C})^\dagger M + \tilde{C}^\dagger \tilde{B}^\dagger \tilde{B}\tilde{C}] + \text{Tr}(\tilde{\Lambda}\tilde{B}^\dagger \tilde{B} - \tilde{\Lambda}) \end{aligned}$$

とする。制約条件は i, j の入れ替えで対称になるので、 $\tilde{\Lambda}$ も対称行列にできる。 \tilde{B} の成分で微分して停留点を求める

$$0 = \frac{\partial L}{\partial \tilde{b}_{ij}} = (-\tilde{C}M^\dagger + \tilde{\Lambda}\tilde{B}^\dagger)_{ji}$$

\tilde{C} の成分で微分して停留点を求める

$$0 = \frac{\partial L}{\partial \tilde{c}_{ij}} = (-M^\dagger \tilde{B} + \tilde{C}^\dagger)_{ji}$$

であるから、 $\tilde{\Lambda}^\dagger = \tilde{\Lambda}$ に注意して

$$M\tilde{C}^\dagger = \tilde{B}\tilde{\Lambda}, \quad \tilde{C} = \tilde{B}^\dagger M$$

なる $\tilde{\Lambda}, \tilde{B}, \tilde{C}$ が停留点を与える。さらに $\tilde{\Lambda}$ は実対称行列 (i.e. エルミート行列) であるから、 $\tilde{r} \times \tilde{r}$ ユニタリ行列 \tilde{D} と実対角行列 $\tilde{\Delta}$ により $\tilde{\Lambda} = \tilde{D}\tilde{\Delta}\tilde{D}^\dagger$ と対角化できる。よって近似行列 \tilde{M} は条件式

$$M(\tilde{D}^\dagger \tilde{C})^\dagger = \tilde{B}\tilde{D}\tilde{\Delta}, \quad \tilde{D}^\dagger \tilde{C} = (\tilde{B}\tilde{D})^\dagger M \quad (2.1.2)$$

を満たす行列の積 $\tilde{B}\tilde{C}$ として与えられる。

\tilde{B}, \tilde{C} の意味合いがより明確になるように条件式を変形する。(2.1.2) 第2式を第1式に代入したものと、第1式左から M^\dagger を作用させて第2式を代入したものを使うと

$$\begin{cases} MM^\dagger(\tilde{B}\tilde{D}) = (\tilde{B}\tilde{D})\tilde{\Delta} \\ M^\dagger M(\tilde{D}^\dagger \tilde{C})^\dagger = (\tilde{D}^\dagger \tilde{C})^\dagger \tilde{\Delta} \end{cases} \quad (2.1.3)$$

^{*2} 以下、 \tilde{r} に依存する最適解を与える量は[?]を付けて区別する。

と書き換えられる。 $\tilde{U} := \tilde{B}\tilde{D}$ の \tilde{r} 本の列ベクトルは MM^\dagger の固有ベクトル、 $\tilde{D}^\dagger\tilde{C}$ の \tilde{r} 本の行ベクトルは $M^\dagger M$ の固有ベクトルであり、固有値は $\tilde{\Delta}$ の対角成分であることがわかる。ともに半正定値エルミート行列 $MM^\dagger, M^\dagger M$ の固有方程式なので、固有値を与える対角行列 $\tilde{\Delta}$ は非負の実数を対角成分を持つ。また $\tilde{U}^\dagger\tilde{U} = 1_{\tilde{r}}$ なので、 \tilde{U} の列ベクトルは正規直交基底を組む。一方

$$\tilde{D}^\dagger\tilde{C}\tilde{C}^\dagger\tilde{D} \stackrel{(2.1.2)}{=} \tilde{U}^\dagger MM^\dagger\tilde{U} \stackrel{(2.1.3)}{=} \tilde{U}^\dagger\tilde{U}\tilde{\Delta} = \tilde{\Delta}$$

より、 $\tilde{D}^\dagger\tilde{C}$ の行ベクトルのノルムは $\tilde{\Delta}$ の対角成分の平方根で与えられる。 $\tilde{\Sigma} := \sqrt{\tilde{\Delta}}$ により $\tilde{V} := \tilde{C}^\dagger\tilde{D}\tilde{\Sigma}^{-1}$ とおくと $\tilde{V}^\dagger\tilde{V} = 1_{\tilde{r}}$ となるので、 \tilde{V} は \tilde{r} 個の n 次元正規直交列ベクトルを持つ。以上をまとめると、(2.1.2) と (2.1.3) はそれぞれ

$$\begin{cases} M\tilde{V}\tilde{\Sigma} = \tilde{U}\tilde{\Sigma}^2, \\ \tilde{\Sigma}\tilde{V}^\dagger = \tilde{U}^\dagger M, \end{cases} \quad \begin{cases} MM^\dagger\tilde{U} = \tilde{U}\tilde{\Sigma}^2, \\ M^\dagger M\tilde{V}\tilde{\Sigma}^{-1} = \tilde{V}\tilde{\Sigma} \end{cases}$$

である。

最適化問題 Problem 1 に戻る。停留点における目的関数の値は

$$\|M - \tilde{M}\|_F^2 = \text{Tr} [M^\dagger M - M^\dagger \tilde{U}\tilde{\Sigma}\tilde{V} - (\tilde{U}\tilde{\Sigma}\tilde{V})^\dagger M + \tilde{\Sigma}\tilde{V}^\dagger\tilde{V}\tilde{\Sigma}] = \text{Tr} [M^\dagger M - \tilde{\Sigma}^2]$$

である。 $\tilde{\Sigma}^2 = \tilde{\Delta}$ は $M^\dagger M$ の固有値のうち \tilde{r} 個を選んで並べた対角行列なので、目的関数を最小にするには $\tilde{\Sigma}$ として可能な限り大きな値の対角行列を選べばよい。よって最適な $\tilde{\Sigma}$ は固有値の並べ方の順番を除いて一意に定まる。

特に $\text{rank } \tilde{\Sigma} = \tilde{r} = \text{rank } M$ の場合、 $U^\dagger U = V^\dagger V = 1_{\text{rank } M}$ を満たす $M = U\Sigma V^\dagger$ がこの条件を満たす ($\text{rank } \tilde{\Sigma} < \text{rank } M$ では M と $\tilde{U}\tilde{\Sigma}\tilde{V}^\dagger$ の間でランクが異なるため、この形は解にならない)。ここまで的事実は以下のようにまとめられる。

Thm. 4: 特異値分解

任意の $m \times n$ 行列 M のランクを r とする。 $m \times r$ 行列 U , $n \times r$ 行列 V と $r \times r$ 対角行列 Σ を用いて

$$M = U\Sigma V^\dagger$$

と分解できる。ここで $U^\dagger U = V^\dagger V = 1_r$ を満たす。^a また Σ の対角成分 (特異値) は正であり、並び替えを除いて一意に定まる。

^a 本稿ではこの条件をユニタリ性、 U, V をユニタリと呼ぶ。 U, V は一般に正方行列ではないので、 $UU^\dagger = 1_m, VV^\dagger = 1_n$ とは限らない。

Thm. 5: Eckart-Young の定理

$m \times n$ 行列 M の特異値分解を

$$M = \sum_{k=1}^{\text{rank } M} \sigma_k \mathbf{u}_k \mathbf{v}_k^\dagger$$

として、 $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_{\text{rank } M} > 0$ とする。

$$M_{\tilde{r}} := \sum_{k=1}^{\tilde{r}} \sigma_k \mathbf{u}_k \mathbf{v}_k^\dagger$$

はランク \tilde{r} の行列で M を最もよく近似する。すなわち任意のランク \tilde{r} 以下の行列 M' に対して

$$\|M - M'\|_F^2 \geq \|M - M_{\tilde{r}}\|_F^2 = \sum_{k=\tilde{r}+1}^{\text{rank } M} \sigma_k^2.$$

特異値分解は図式で表すことができる。まず行列 $(M_{ij})_{i,j}$ には $i \in \{1, \dots, m\}, j \in \{1, \dots, n\}$ を走る 2 本の脚がある。これを

$$M = \boxed{M}$$

と表す。特に明示しない限り右側が j の脚、左側が i の脚と約束する。また行列を四角で囲まざに

$$\Sigma$$

のようにすることもある。この記法を用いると特異値分解は

$$\boxed{M} = \boxed{U} \Sigma \boxed{V^\dagger}$$

と対応する。つながっている脚は、添え字がとり得る値全てにわたって同じ添え字どうしの積を足しあげることを意味する。例えば

$$(\boxed{M} \boxed{B})_{i,j} = \sum_k M_{ik} B_{kj}$$

である。次節以降では行列に限らず高階テンソルにもこの記法を用いるが、脚が増えるだけで縮約のルールは変わらない。本稿を通してこの記法がたびたび登場する。

次節に移る前に、特異値分解の直感的解釈を与える。特異値分解の式から直ちに $Mv_k = \sigma_k u_k$ が得られるが、これは線形変換 $M : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^m$ が v_k を長さ σ_k 倍して方向 u_k に移すことを表している。appendix A.1 も参照。また Thm. 5 により特異値 σ_k が大きいほど M の情報を多く持っていると解釈できる。

この解釈を視覚的に理解できる画像圧縮の例を紹介する。^{*3} グレースケールの画像は各ピクセルの明るさを 0 から 255 までの整数で表した行列で表現される。Fig. 2.1 は 3024×4032 画素の画像を特異値分解し、特異値の大きい順に残して近似したものである。合計 3024 個の特異値のうちごくわずかで画像を復元できることがわかる。実際 Fig. 2.2 に示すように、この画像では少数の特異値が大きな寄与を有し、大部分の特異値は非常に小さい。

2.1.2 2 粒子系の Schmidt 分解

我々がはじめ取り組んでいた問題は L サイトの純粹状態の近似であった。今、簡単のために $L = 2$ として、それぞれのサイトを A, B とする。合成系の Hilbert 空間は各サイ

^{*3} <https://github.com/lowtonevoice/masterthesis/tree/main/demonstration/SVD> にここで用いた画像圧縮の Python コードと画像を公開している。

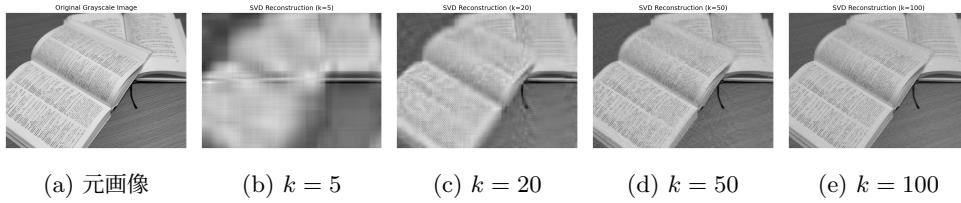
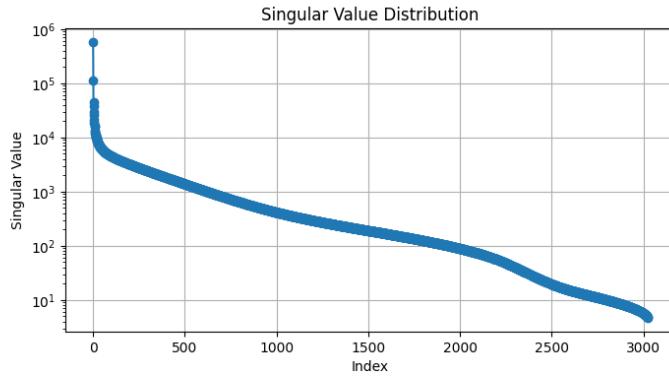
(a) 元画像 (b) $k = 5$ (c) $k = 20$ (d) $k = 50$ (e) $k = 100$ 図 2.1: 元画像 (左端) と、特異値によるランク k の低ランク近似で得られる画像 (右 4 枚)。

図 2.2: Fig. 2.1 の元画像の特異値分布。

トの Hilbert 空間の直積 $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ で与えている。各サイトの Hilbert 空間の正規直交基底により 2 サイトの規格化された純粋状態は

$$|\Phi\rangle_{AB} = \sum_{i=1}^{\dim \mathcal{H}_A} \sum_{j=1}^{\dim \mathcal{H}_B} M_{ij} |i\rangle_A \otimes |j\rangle_B \quad \left(M_{ij} \in \mathbb{C}, \sum_{i,j} |M_{ij}|^2 = 1 \right)$$

と書ける。行列 $(M_{ij})_{i,j}$ を特異値分解して

$$\begin{aligned} |\Phi\rangle_{AB} &= \sum_{i,j} \sum_{k=1}^{\text{rank } M} u_{ik} \sigma_k (v^\dagger)_{kj} |i\rangle_A \otimes |j\rangle_B \\ &= \sum_{k=1}^{\text{rank } M} \sigma_k \left(\sum_i |i\rangle_A u_{ik} \right) \left(\sum_j (v^\dagger)_{kj} |j\rangle_B \right) \end{aligned}$$

とできる。

$$\left(\sum_{i_1} u_{k i_1}^* \langle i_1 |_A \right) \left(\sum_{i_2} u_{i_2 l} |i_2\rangle_A \right) = \sum_i u_{k i}^* u_{il} = \delta_{kl}$$

より $\sum_i |i\rangle_A u_{ik}$ は正規直交基底を組む。 $\sum_j (v^\dagger)_{kj} |j\rangle_B$ も同様。規格化条件から $\sum_k \sigma_k^2 = 1$ である。以上は次の定理にまとめられる。

Thm. 6: Schmidt 分解

有限次元 Hilbert 空間上の 2 サイト純粋状態は各サイトの Hilbert 空間の正規直交基底 $\{|\phi_k\rangle_A\}, \{|\psi_k\rangle_B\}$ により

$$|\Phi\rangle_{AB} = \sum_{k=1}^d \sigma_k |\phi_k\rangle_A \otimes |\psi_k\rangle_B \quad (2.1.4)$$

と分解できる。ここに、

$$\sum_{k=1}^d \sigma_k^2 = 1$$

を満たす。 d を $|\Phi\rangle_{AB}$ の Schmidt ランクという。

??の系として以下が示される。

Cor. 1: Schmidt 分解は純粋状態の最適近似

2 サイト純粋状態 $|\Phi\rangle_{AB}$ の Schmidt 分解を (2.1.4) で与える。ただし $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots > 0$ とする。Schmidt ランク \tilde{d} 以下の状態で $|\Phi\rangle_{AB}$ を最もよく近似する状態は

$$|\Phi_{\tilde{d}}\rangle_{AB} := \sum_{k=1}^{\tilde{d}} \sigma_k |\phi_k\rangle_A \otimes |\psi_k\rangle_B$$

である。より厳密には、Schmidt ランク \tilde{d} 以下の任意の状態 $|\Psi\rangle_{AB}$ は

$$|\langle \Phi \rangle_{AB} - \langle \Psi \rangle_{AB}|^2 \geq |\langle \Phi \rangle_{AB} - \langle \Phi_{\tilde{d}} \rangle_{AB}|^2 = \sum_{k>\tilde{d}+1} \sigma_k^2$$

となる。

最後の誤差評価は

$$|\langle \Phi \rangle_{AB} - \langle \Phi_{\tilde{d}} \rangle_{AB}|^2 = \left| \sum_{k>\tilde{d}} \sigma_k |\phi_k\rangle_A \otimes |\psi_k\rangle_B \right|^2 = \sum_{k>\tilde{d}} \sigma_k^2$$

から得られる。

Schmidt 分解によりエンタングルメントエントロピーが簡単に評価できる。まず B 系をトレースアウトして

$$\rho_A := \text{Tr}_B[|\Phi\rangle_{AB} \langle \Phi|_{AB}] = \sum_{k \in \mathbb{N}} \sigma_k^2 |\phi_k\rangle_A \langle \phi_k|_A$$

の可分状態であり、 A のエンタングルメントエントロピーは

$$S_A(\rho) := -\text{Tr}[\rho_A \ln \rho_A] = -\sum_{k \in \mathbb{N}} \sigma_k^2 \ln \sigma_k^2$$

となる。右辺は A, B に依存しない値なので、 $S_A = S_B$ が成り立つことがわかる。 $\sum_k \sigma_k^2 = 1$ であるから右辺は Def. 28 で定義した $\{\sigma_k^2\}$ を確率分布とする Shannon エントロピー $H(\{\sigma_k^2\})$ である。可分状態 $\rho = \sum p_i |i\rangle\langle i|$ では Shannon エントロピー $H(\{p_i\})$ と von Neumann エントロピー $S(\rho)$ が一致することを反映している。CITE

SOMEWHERE!!! Schmidt ランクを固定すると Prop. 15 により Schmidt ランクで S_A の上限が決まる。

$$S_A \left(\sum_{k=1}^d \sigma_k^2 |\phi_k\rangle\langle\phi_k| \right) = H(\{\sigma_k^2\}_{k=1}^d) \leq \log_2 d$$

2.1.3 3 粒子以上での Schmidt 分解の不可能性

$L = 2$ では Schmidt 分解によって状態を近似した。同様の近似方法が $L > 2$ でも期待される。しかし結論を先に述べると、3 サイト以上の量子系では常に Schmidt 分解の対応物が存在するとは限らない。以下、この事実を確認する。

Schmidt 分解の部分トレース

$L = 3$ の各サイトを A, B, C とする。3 サイト状態 $|\psi\rangle$ が

$$|\psi\rangle = \sum_{k \in \mathbb{N}} \sigma_k |a_k\rangle_A |b_k\rangle_B |c_k\rangle_C$$

のような Schmidt 分解が可能であるとする。右辺のケットベクトルは全て正規直交基底を組むことに注意すると、例えば部分系 A に関する部分トレースをとることで

$$\rho_{BC} = \text{Tr}_A[|\psi\rangle\langle\psi|] = \sum_{k \in \mathbb{N}} \sigma_k^2 |b_k\rangle_B |c_k\rangle_C \langle b_k|_B \langle c_k|_C$$

の separable 状態となる。一般にサイト数に関わらず、Schmidt 分解の部分トレースは separable 状態である。逆に、部分トレースが separable でない、すなわち部分系の状態が古典混合で表せない場合は Schmidt 分解で表すことができない。

以下、具体的にこのような状態の存在を確認する。議論を簡単にするために、qubit 系を考察する。 $L = 3$ の純粹状態は

$$|000\rangle, |001\rangle, |010\rangle, |011\rangle, |100\rangle, |101\rangle, |110\rangle, |111\rangle$$

の 8 つの基底で張られる。計算の利便性を考慮し、類似した基底を等重率で重ね合わせたエンタングルメントのある状態を構成すると、最も簡単なものは

$$|GHZ\rangle = (|000\rangle + |111\rangle)/\sqrt{2}$$

とできるだろう (GHZ 状態)。しかし部分トレースをとると

$$\text{Tr}_A[|GHZ\rangle\langle GHZ|] = \frac{1}{2}(|00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|)$$

となり、separable 状態である。次に簡単なエンタングル状態として、

$$|W\rangle = (|001\rangle + |010\rangle + |100\rangle)/\sqrt{3}$$

の W 状態を考える。この状態の部分トレースは

$$W_{BC} = \frac{1}{3}[|00\rangle\langle 00| + (|01\rangle + |10\rangle)(\langle 01| + \langle 10|)] = \frac{2}{3}|\phi^+\rangle\langle\phi^+| + \frac{1}{3}|00\rangle\langle 00| \quad (2.1.5)$$

と表せ、 $|\phi^+\rangle = (|01\rangle + |10\rangle)/\sqrt{2}$ の最大エンタングル状態を含んでいる。このことから W 状態は Schmidt 分解できないことがわかる。

混合状態のエンタングルメント解析

より定量的に議論するために、混合状態のエンタングルメント解析を行う。混合状態のエンタングルメントの定量化には何種類かの方法があるが、ここでは着目している状態が最大エンタングル状態 (Bell状態) とどれだけ類似しているかを測る指標となる忠実度を用いる (忠実度については appendix D.3 を参照)。この手法の利点として、Hilbert空間の次元に依存しない評価ができることが挙げられる。

まずは separable 状態 ρ_{BC} と Bell 状態の忠実度を評価する。 ρ_{BC} が純粋状態のとき、 $\rho_{BC} = |\psi\rangle_B |\phi\rangle_C \langle\psi|_B \langle\phi|_C$ と書ける。

$$|\langle\Phi|\psi_B\phi_C\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \sum_{i=0,1} \langle i|\psi\rangle \langle i|\phi\rangle \right| = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| \sum_{i=0,1} (\langle i|\psi\rangle^* |i\rangle)^\dagger |\phi\rangle \right|$$

である。

$$|\psi^*\rangle := \sum_{i=0,1} |i\rangle \langle i|\psi\rangle^* = \sum_{i=0,1} \langle\psi|i\rangle |i\rangle$$

で定義すると、

$$|\langle\Phi|\psi_A\phi_B\rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}} |\langle\psi^*|\phi\rangle| \leq \frac{1}{\sqrt{2}}$$

となる。ゆえに $\mathcal{F}(\rho_{BC}, |\phi^+\rangle\langle\phi^+|) \leq 1/\sqrt{2}$. separable 状態 ρ_{BC} が混合状態のとき状態は $\rho_{BC} = \sum_k p_k |\psi_k\rangle_B |\phi_k\rangle_C \langle\psi_k|_B \langle\phi_k|_C$ の形で書けるが、忠実度の凸性??から

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\rho_{BC}, |\phi^+\rangle\langle\phi^+|) &\leq \sum_k p_k \mathcal{F}(|\psi_k\rangle_B |\phi_k\rangle_C \langle\psi_k|_B \langle\phi_k|_C, |\phi^+\rangle\langle\phi^+|) \\ &\leq \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k p_k = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

を満たす。

一方で W 状態の部分トレース (2.1.5) と Bell 状態の間の忠実度を評価すると、

$$\mathcal{F}(W_{BC}, |\phi^+\rangle\langle\phi^+|) = \sqrt{\frac{2}{3}} > \frac{1}{\sqrt{2}}$$

となる。

したがって W 状態は Schmidt 分解できないことが定量的にも示された。

2.2 行列積状態

前節で見たように、 $L > 2$ では全系を一度に近似する Schmidt 分解の対応物は存在しない。しかし全系の Hilbert 空間を大きく 2 分割して 2 サイト系と思えば部分的に特異値分解が可能である。開放端条件を具体例にとると、端から順に特異値分解を繰り返すことで、行列積状態 (matrix product state; MPS) と呼ばれる状態の表現を得られる。バルクの物理は境界条件に依存しないという信念に基けば、MPS は周期境界条件でも有効だと期待される。本節ではまず開放端条件での MPS を導入し、これを利用して周期境界条件での MPS を定義する。

2.2.1 開放端条件での標準形 MPS

(2.1.1) に現れる M_{i_1, \dots, i_L} の脚を i_L とそれ以外に分けて $(d_1 \cdots d_{L-1}) \times d_L$ 行列とみなす。物理的には 1 番目から $(L-1)$ 番目のサイトをまとめて一つのサイトとみなすことに対応する。特異値分解により

$$M_{i_1, \dots, i_L} = \boxed{\begin{array}{c|c|c} \cdots & | & | \\ M_{i_1, \dots, i_L} & & \end{array}} = \boxed{\begin{array}{c|c|c} \cdots & | & | \\ U_{L-1} & & \end{array}} \Sigma_{L-1} \bullet \boxed{V_L^\dagger}$$

とできる。Schmidt ランク $r_{L-1} = \text{rank } \Sigma_{L-1}$ は $\min(d_1 + \cdots + d_{L-1}, d_L) \leq (d_1 + \cdots + d_L)/2$ である。 M から上に伸びる細線で表した Hilbert 空間の脚を一般に physical な脚、特異値分解で新たに生じた横向きの太線で表す脚を virtual な脚と呼ぶ。Thm. 5 のユニタリ性は

$$\begin{aligned} 1_{r_{L-1}} &= V_L^\dagger V_L = \boxed{V_L^\dagger} \quad \boxed{V_L} \\ &= U_{L-1}^\dagger U_{L-1} = \boxed{\cdots} \quad \boxed{U_{L-1}^\dagger} \quad \boxed{U_{L-1}} \quad \cdots \end{aligned}$$

と記述される。 \dagger は virtual と physical を合わせた脚全体に関する転置と複素共役を表す。(2.1.1) の $|\psi\rangle$ の規格化条件は

$$1 = \boxed{\begin{array}{c|c|c} M_{i_1, \dots, i_L} & | & | \\ \cdots & | & | \\ M_{i_1, \dots, i_L} & & \end{array}} = \boxed{\begin{array}{c|c|c} U_{L-1} & \Sigma_{L-1} \bullet & V_L^\dagger \\ \cdots & | & | \\ U_{L-1} & \Sigma_{L-1} \bullet & V_L^\dagger \end{array}} = \boxed{\begin{array}{c} \Sigma_{L-1} \bullet \\ \Sigma_{L-1} \end{array}} = \text{Tr}[\Sigma_{L-1}^2]$$

と表される。ただし上段にある行列要素は全て複素共役を取るものとする。

1 番目から $L-2$ 番目の physical な脚を 1 本とみなし、 $L-1$ 番目の physical な脚と V_L^\dagger へ伸びる virtual な脚と合わせて 1 本とすると再度特異値分解を適用でき、

$$\begin{aligned} \boxed{\begin{array}{c|c|c} \cdots & | & | \\ U_{L-1} & \Sigma_{L-1} \bullet & V_L^\dagger \end{array}} &= \boxed{\begin{array}{c|c|c} \cdots & | & | \\ U_{L-2} & \Sigma_{L-2} \bullet & V_{L-1}^\dagger \end{array}} \quad \boxed{V_L^\dagger} \\ 1_{r_{L-2}} &= \boxed{V_{L-1}^\dagger} \quad \boxed{V_{L-1}} = \boxed{\begin{array}{c|c} \cdots & | \\ U_{L-2}^\dagger & U_{L-2} \end{array}} \end{aligned}$$

が成り立つ。特に $U_{L-1}^\dagger U_{L-1} = 1$ の条件式と合わせて

$$\boxed{V_{L-1} \bullet \Sigma_{L-2}^2 V_{L-1}^\dagger} = \boxed{\Sigma_{L-1}^2}$$

も成立する。Schmidt ランクは $r_{L-2} = \min(d_1 + \cdots + d_{L-2}, d_{L-1} + r_{L-1}) \leq (d_1 + \cdots + d_L)/2$ である。規格化条件から $\text{Tr}[\Sigma_{L-2}^2] = 1$ である。

これを繰り返すことで、

$$\boxed{\begin{array}{c|c} \cdots & | \\ M_{i_1, \dots, i_L} & \end{array}} = \boxed{U_1} \quad \Sigma_1 \bullet \boxed{A_2} \quad \boxed{A_3} \quad \cdots \quad \boxed{A_L},$$

の形を得る。ここで $A_k = V_k^\dagger$ とした。 U_1 の virtual な脚は右向きしかないが、左向きにランク 1 の脚がある virtual $1 \times (\text{virtual } r_1 + \text{physical } d_1)$ 行列とみなせば

$$\begin{array}{c} \cdots \\ | \\ M_{i_1, \dots, i_L} \\ | \\ \end{array} = \Sigma_0 \begin{array}{c} | \\ A_1 \\ | \\ A_2 \\ | \\ A_3 \\ | \\ \dots \\ | \\ A_L \\ | \\ \end{array}$$

と書ける。by construction でこの表示は特異値分解の自由度を除いて一意に定まる。規格化条件により任意の $1 \leq k \leq L$ にて

$$\begin{array}{c} | \\ A_k \\ | \\ A_k^\dagger \\ | \\ \end{array} = 1_{r_{k-1}}, \quad \begin{array}{c} | \\ A_k^\dagger \\ | \\ \bullet \\ | \\ \Sigma_{k-1}^2 \\ | \\ A_k \\ | \\ \end{array} = \begin{array}{c} | \\ \bullet \\ | \\ \Sigma_k^2 \\ | \\ \end{array},$$

$$\text{Tr}[\Sigma_k^2] = 1, \quad r_k \leq \frac{d_1 + \dots + d_L}{2}$$

が成り立つ。ただし $\Sigma_0 = 1$ はスカラーである。

ここまで的事実は以下の定理にまとめられる。

Prop. 1: 開放端条件の純粋状態の右標準形の MPS

有限次元 Hilbert 空間のテンソル積で表される L サイト系の純粋状態は右標準形 (right canonical form) の行列積状態 (matrix product state; MPS)

$$\sum_{i_1, \dots, i_L} A_1^{i_1} A_2^{i_2} \dots A_L^{i_L} |i_1, \dots, i_L\rangle = \begin{array}{c} | \\ A_1 \\ | \\ A_2 \\ | \\ A_3 \\ | \\ \dots \\ | \\ A_L \\ | \\ \end{array}$$

の表示を有し、特異値分解の自由度を除いて一意に定まる。ここに、

$$\sum_{i_m} A_m^{i_m} (A_m^{i_m})^\dagger = \begin{array}{c} | \\ A_k \\ | \\ A_k^\dagger \\ | \\ \end{array} = 1_{r_{k-1}} \quad (2.2.1)$$

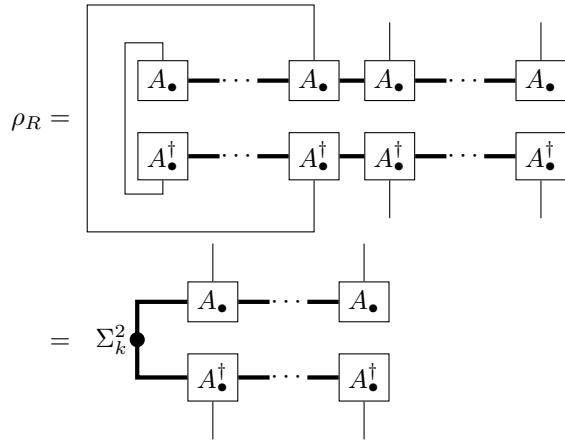
$$\sum_{i_k} (A_k^{i_k})^\dagger \Sigma_{k-1}^2 A_k^{i_k} = \begin{array}{c} | \\ A_k^\dagger \\ | \\ \bullet \\ | \\ \Sigma_{k-1}^2 \\ | \\ A_k \\ | \\ \end{array} = \begin{array}{c} | \\ \bullet \\ | \\ \Sigma_k^2 \\ | \\ \end{array} \quad (2.2.2)$$

を満たし、 Σ_k は正の実数が並び $\text{Tr } \Sigma_k^2 = 1$ となるランク $r_k \leq (d_1 + \dots + d_L)/2$ の対角行列である。

Schmidt 分解の順番を左からにすることで、(2.2.1), (2.2.2) の A と A^\dagger の位置が入れ替わった左標準形 (left canonical form) の MPS 表示も得られる。Schmidt ランクの上限 $\max(r_1, \dots, r_{L-1})$ をボンド次元と呼ぶ。

Sec. 2.1.2 最後に見たように、2 粒子系では特異値からエンタングルメントエントロピーを簡単に計算できた。MPS は全体系を大きく 2 つに分割して特異値分解を繰り返して構成しているので、やはりエンタングルメントエントロピーを簡単に計算できると期待できる。左側 k サイトと右側 $L - k$ サイトに分割したときのエンタングルメントエント

ロピーを考える。左規格化条件 (2.2.2) から、左側の自由度をトレースアウトした状態が



となる。 ρ_R の積はこれを上下に積層することで表されるので、右規格化条件 (2.2.1) によって MPS テンソルが消えていき、最終的に

$$S = -\text{Tr}[\rho_R \ln \rho_R] = -\text{Tr}[\Sigma_k^2 \ln \Sigma_k^2]$$

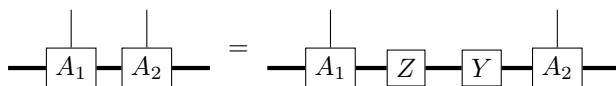
となる。Sec. 2.1.2 同様右辺は Σ_k^2 の対角成分を確率分布とする Shannon エントロピーなので、ボンド次元 D_k によってエントロピーの上限が決まる。

$$S = H(\{(\sigma_k)^2\}_{\alpha=1}^{D_k}) \leq \log_2 D_k.$$

2.2.2 開放端条件での MPS の自由度

特異値分解は一意ではないので、MPS 表示も一意ではない。標準形 MPS は必要最小限のランクに合わせた、ある種の最適化のもとでの表示だが、ボンド次元に冗長性を持たせた MPS 表示も可能である。また特異値分解におけるユニタリの取り方も自由度がある。この事実は一見理論の記述を冗長にしているだけのように見えるが、後の章でみると MPS の表示の変形に対応する現象が物理的に重要な意味を持つ場合がある。

上記の自由度はともに virtual な脚に恒等演算子を挿し込む形で実現できる。例えば二つのテンソルの間に



となるような $ZY = 1$ を挿入することができる。この操作は全てのボンドに対して可能である。全てのボンドに ZY を挿入すると、MPS テンソルは $\cdots A_{k-1} A_k A_{k+1} \cdots$ の形から $\cdots Y_{k-2} A_{k-1} Z_{k-1} Y_{k-1} A_k Z_k Y_k A_{k+1} Z_{k+1} \cdots$ の形に変形され、 $Y_{k-1} A_k Z_k =: B_k$ が新たな MPS テンソルになる。逆操作を行えば、任意の MPS 表示を標準形 MPS に変形できる。Sec. 2.2.1 で与えたように、端から順に特異値分解を繰り返せばよい。

ここまで議論を命題の形で明示すると以下のようになる。

Thm. 7: OBC-MPS の行列の選び方に関する自由度

L サイト系の開放端条件における任意の MPS

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_L} B_1^{i_1} B_2^{i_2} \cdots B_L^{i_L} |i_1, \dots, i_L\rangle$$

に対して、 $Y_i Z_i = 1$ なる行列 Y_i, Z_i が存在し、

$$A_1^i = B_1^i Z_1, \quad A_L^i = Y_{L-1} B_L^i, \quad A_k^i = Y_{k-1} B_k^i Z_k \quad (2 \leq k \leq L-1) \quad (2.2.3)$$

とすることで標準形 MPS

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_L} A_1^{i_1} A_2^{i_2} \cdots A_L^{i_L} |i_1, \dots, i_L\rangle \quad (2.2.4)$$

を得られる。すなわち、任意の OBC-MPS は標準形 MPS に $Y_i Z_i = 1$ なる行列 Y_i, Z_i を挿入することで実現できる。

前述の通り Sec. 2.2.1 の構成を繰り返すだけなので、証明は容易である。

Prf.

■標準形 MPS の構成 (左規格化条件以外) (2.2.3) を念頭に、 $\sum_i A_k^i (A_k^i)^\dagger = 1$ を満たすような MPS テンソル A_k^i を構成する。MPS の一番右のテンソルを特異値分解して

$$\boxed{B_L} = \boxed{U_{L-1}} \xrightarrow{\Delta_{L-1}} \boxed{A_L}$$

とする。ここで U_{L-1}, A は Thm. 4 のユニタリ性条件を満たすようにとり、 Δ_{L-1} は正の実数が並ぶ対角行列である。すなわち $\sum_i A_L^i (A_L^i)^\dagger = 1$ とでき、 $Z_{L-1} = U_{L-1} \Delta_{L-1}$ は left inverse $\Delta_{L-1}^{-1} U_{L-1}^\dagger$ を有する。続いて特異値分解

$$\boxed{B_{L-1}} \boxed{Z_{L-1}} = \boxed{U_{L-2}} \xrightarrow{\Delta_{L-2}} \boxed{A_{L-1}}$$

を行い、同様に $Z_{L-2} = U_{L-2} \Delta_{L-2}$ とすると、 $\sum_i A_{L-1}^i (A_{L-1}^i)^\dagger = 1$ とでき、 Z_{L-2} は left inverse を有する。これを続けて、最終的に $A_1^i = B_1^i Z_1$ まで到達すると (2.2.4) を得て、 $\sum_i A_j^i (A_j^i)^\dagger = 1$ を $1 < j \leq L$ にて満たす。規格化条件

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \sum_{i_1, \dots, i_L} A_1^{i_1} \cdots A_L^{i_L} (A_1^{i_L})^\dagger \cdots (A_L^{i_1})^\dagger = \sum_{i_1} A_1^{i_1} (A_1^{i_1})^\dagger$$

も合わせて考慮すると、 $j = 1$ を含め全ての j で MPS テンソルの右規格化条件を得る。

■左規格化条件 続いて $\sum_i (A_1^i)^\dagger A_1^i$ は半正定値エルミート行列なのでユニタリ V_1 と対角行列 Λ_1 を用いて

$$\sum_i (A_1^i)^\dagger A_1^i = V_1 \Lambda_1 V_1^\dagger$$

と対角化できる。 $A_1'^i = A_1^i V_1$ とすると $\sum_i (A_1'^i)^\dagger A_1'^i = V_1^\dagger V_1 \Lambda_1 V_1^\dagger V_1 = \Lambda_1$ となって左規格化条件を得る。続いて $\sum_i (V_1^\dagger A_2^i)^\dagger \Lambda_1 (V_1^\dagger A_2^i)$ も半正定値エルミート行列なのでユニタリ V_2 と対角行列 Λ_2 を用いて

$$\sum_i (V_1^\dagger A_2^i)^\dagger \Lambda_1 (V_1^\dagger A_2^i) = V_2 \Lambda_2 V_2^\dagger$$

と対角化すると、 $A_2'^i = V_1^\dagger A_2^i V_2$ は左規格化条件 $\sum_i (A_2'^i)^\dagger A_2'^i = \Lambda_2$ を満たす。以下、同様に続けていくと、

$$A_k'^i = V_{k-1}^\dagger A_k^i V_k = V_{k-1}^\dagger Z_{k-1}^{-1} B_k^i Z_k V_k$$

が $2 \leq k \leq L-1$ にて左規格化条件を満たす。右規格化条件も同時に満たすこと 注意。この書き換えで MPS の右端には $V_{L-1}^\dagger Z_{L-1}^{-1} B_L^i = V_{L-1} A_L^i$ が残っているが、左規格化条件は

$$\sum_i (V_{L-1} A_L^i)^\dagger (V_{L-1} A_L^i) = \boxed{A_L^\dagger} \xrightarrow{\quad} \boxed{V_{L-1}^\dagger} \xrightarrow{\quad} \boxed{V_{L-1}} \xrightarrow{\quad} \boxed{A_L} \in \mathbb{C}$$

により自動的に満たす。

2.2.3 ボンド次元の削減による近似

Prop. 1 は Hilbert 空間の次元の増大に伴いボンド次元が上限なく増大しうることを示唆している。特に熱力学極限をとると一般にボンド次元は無限大へ発散してしまう。特に数値計算など具体的な計算を念頭に置くと、ボンド次元を有限に抑えた近似が必要になる。Thm. 5 を踏まえると、特異値分解を繰り返して得られた MPS はボンド次元を制限してもある程度適切な近似を与えていると期待されるが、本節ではその妥当性を具体的に評価する。

基準となる PBC-MPS $A_1^{i_1} \cdots A_L^{i_L}$ のボンド次元を D に制限した状態を

$$|\psi_D\rangle := \sum_{a_1, \dots, a_{L-1}=1}^D (A_1^{i_1})_{a_1} (A_2^{i_2})_{a_1, a_2} \cdots (A_L^{i_L})_{a_{L-1}} |i_1, \dots, i_L\rangle$$

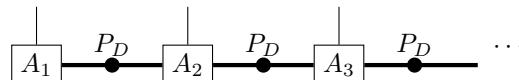
とする。ボンド次元 D の空間への射影

$$P_D := \begin{pmatrix} 1_D & \\ & 0 \end{pmatrix}$$

を用いて

$$|\psi_D\rangle := A_1^{i_1} P_D A_2^{i_2} P_D \cdots A_L^{i_L} |i_1, \dots, i_L\rangle$$

とも書けるので、図式では



のように表すことにする。Thm. 5 (Eckart-Young の定理) で見たように、行列間の誤差

は削減された特異値の二乗和で評価できるので、ここでも

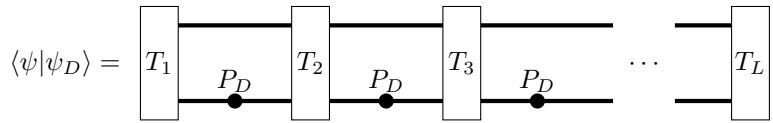
$$\epsilon_D(k) := \sum_{i=D+1}^{r_k} \sigma_i(k)^2$$

として導入する。ここで r_k は k 番目のボンド次元、 $\sigma_i(k)$ はその i 番目に大きな特異値であり、Prop. 1 で導入した $\Sigma_k = \text{diag}(\sigma_1(k), \dots, \sigma_{r_k}(k))$ に対応する。

具体的に誤差を評価する。

$$\| |\psi\rangle - |\psi_D\rangle \| ^2 = 1 + \langle \psi_D | \psi_D \rangle - 2 \operatorname{Re} \langle \psi | \psi_D \rangle \leq 2|1 - \langle \psi | \psi_D \rangle|$$

第2項は



と表される。ここに、

$$\begin{array}{c} T_k \\ \hline \end{array} := \begin{array}{c} A_k^\dagger \\ \downarrow \\ A_k \end{array}$$

は転送行列と呼ばれ、 T_1 は左へ、 T_L は右へ伸びる virtual な脚がない形で定義される。間に挟まっているのが P_D ではなく恒等演算子のときは、左端から順に左規格化条件 (2.2.2) を適用することで計算できて、値は 1 になる。^{*4} 左から右へと計算を進めていくことを踏まえると、

$$\begin{array}{c} Y_1 \\ \hline \end{array} = \begin{array}{c} \Sigma_0^2 \\ \hline P_D \end{array}, \quad \begin{array}{c} Y_k \\ \hline \end{array} = \begin{array}{c} Y_{k-1} \\ \hline P_D \\ \hline T_k \end{array}$$

を定義すれば、 $\langle \psi | \psi_D \rangle = Y_L$ となる (Y_L は右端に virtual な脚が伸びないスカラーであることに注意)。また右規格化条件 (2.2.1) があるので、 T_k の縮約は CPTP 対応になっていて、この性質を利用して、トレースノルム

$$\|A\|_{\text{tr}} := \operatorname{Tr} \sqrt{A^\dagger A}$$

で誤差を評価すると見通しが良い。

$$\begin{aligned} |1 - \langle \psi | \psi_D \rangle| &= \left| \begin{array}{c} T_1 \\ \hline T_2 \\ \hline T_3 \\ \hline \cdots \\ \hline T_L \end{array} - \begin{array}{c} T_1 \\ \hline P_D \\ \hline T_2 \\ \hline P_D \\ \hline T_3 \\ \hline \cdots \\ \hline T_L \end{array} \right| \\ &= \|(1\text{st term}) - (2\text{nd term})\|_{\text{tr}} \end{aligned}$$

^{*4} ϵ_k の定義式に σ^2 が入っているので、右規格化条件 (2.2.1) よりも左規格化条件を使うのが好ましい。

第1項を $\prod_{k=1}^L T_k$ と表せば、TP 正写像 T_L によるトレースノルムの縮小性 Thm. 15 を用いることで

$$\begin{aligned} (\text{LHS}) &\leq \|T_{L-1} \circ T_{L-2} \circ \cdots \circ T_1 - P_D Y_{L-1}\|_{\text{tr}} \\ &= \left\| \prod_{k=1}^{L-1} T_k - P_D \prod_{k=1}^{L-1} T_k + P_D \prod_{k=1}^{L-1} T_k - P_D Y_{L-1} \right\|_{\text{tr}} \\ &\leq \left\| \prod_{k=1}^{L-1} T_k - P_D \prod_{k=1}^{L-1} T_k \right\|_{\text{tr}} + \left\| P_D \prod_{k=1}^{L-1} T_k - P_D Y_{L-1} \right\|_{\text{tr}} \\ &\leq \left\| \prod_{k=1}^{L-1} T_k - P_D \prod_{k=1}^{L-1} T_k \right\|_{\text{tr}} + \|P_D\| \left\| \prod_{k=1}^{L-1} T_k - Y_{L-1} \right\|_{\text{tr}} \end{aligned}$$

である。ただし、最後の不等号では (A.2.9) を用いた。第2項についてこの計算を再起的に行なうことで、

$$|1 - \langle \psi | \psi_D \rangle| \leq \sum_{k=1}^{L-1} \|P_D\|^{L-1-k} \left\| \prod_{j=1}^k T_j - P_D \prod_{j=1}^k T_j \right\|_{\text{tr}}$$

を得る。トレースノルムは特異値の総和なので (cf. appendix A.2.2)、ノルム部分はボンドに現れる特異値のうち $D+1$ 番目以降の和で評価できる。従って $\|P_D\| \leq 1$ を用いれば、

$$|1 - \langle \psi | \psi_D \rangle| \leq \sum_{k=1}^{L-1} \sum_{i>D} \sigma_i(k)^2 = \sum_{k=1}^{L-1} \epsilon_D(k)$$

と評価できる。

2.2.4 周期境界条件下で並進対称性のある行列積状態

凝縮系物理学においては熱力学極限でバルクが並進対称性を有することを期待している。特に MPS で並進対称性を課すと、MPS テンソルが位置に依存しないことが期待される。サイトが少数でも並進対称性を課すには周期境界条件 (PBC: periodic boundary condition) が便利である。本節では周期境界条件下で並進不变な MPS について議論する。

状態の並進を $T|i_1, i_2, \dots, i_L\rangle = |i_L, i_1, i_2, i_3, \dots, i_{L-1}\rangle$ と定義する。並進不变な状態 $|\psi\rangle = T|\psi\rangle$ について、Sec. 2.2.1 の構成を繰り返せば OBC-MPS の標準形

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_L} A_1^{i_1} A_2^{i_2} \cdots A_L^{i_L} |i_1, \dots, i_L\rangle$$

を得られる。両端のテンソルの位置を明示するために、これを $A_1^{i_1} A_2^{i_2} \cdots A_L^{i_L}$ のように記述すると、並進不变性により

$$\begin{aligned} \sum_{i_1, \dots, i_L} A_1^{i_1} A_2^{i_2} \cdots A_L^{i_L} |i_1, \dots, i_L\rangle &= \sum_{i_1, \dots, i_L} A_1^{i_1} A_2^{i_2} \cdots A_L^{i_L} |i_L, \dots, i_{L-1}\rangle \\ &= \sum_{i_1, \dots, i_L} \text{Tr} \left[A_L^{i_L} A_1^{i_1} A_2^{i_2} \cdots A_{L-1}^{i_{L-1}} \right] |i_L, \dots, i_{L-1}\rangle \end{aligned}$$

である。状態の並進不变性から各サイトの Hilbert 空間は同型なので、 i_k の走る値は同じ。よって一般に係数は任意の $k \in \mathbb{Z}$ について $k+L \sim k$ の同一視のもとで

$\text{Tr}[A_{k+1}^{i_1} \cdots A_{k+L}^{i_L}]$ と書き換えると等価である。ここで $\mathbf{i} = (i_1, i_2, \dots, i_L)$ として

$$B^{\mathbf{i}} := \frac{1}{L^{1/L}} \begin{pmatrix} 0 & A_1^{i_1} & & & \\ & 0 & A_2^{i_2} & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 0 & A_{L-1}^{i_{L-1}} \\ A_L^{i_L} & & & & 0 \end{pmatrix}$$

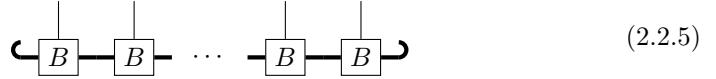
を定義すると、行列積により

$$(B^{\mathbf{i}})^L = \frac{1}{L} \begin{pmatrix} A_1^{i_1} A_2^{i_2} \cdots A_L^{i_L} & & & \\ & A_2^{i_2} A_3^{i_3} \cdots A_1^{i_1} & & \\ & & \ddots & \\ & & & A_L^{i_L} A_1^{i_1} \cdots A_{L-1}^{i_{L-1}} \end{pmatrix}$$

なのでトレースを取れば $\text{Tr}[(B^{\mathbf{i}})^L] = \text{Tr}[A_1^{i_1} A_2^{i_2} \cdots A_L^{i_L}]$ となる。これによって

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{i}} \text{Tr}[(B^{\mathbf{i}})^L] |\mathbf{i}\rangle$$

すなわち全ての MPS テンソルが等しい MPS (translation invariant MPS: **TI-MPS**)



によって状態を記述できる。両端で virtual な脚を曲げることで周期境界条件を表している。

OBC-MPS に標準形があったように、TI-MPS にも標準形を導入したい。上述の定義で

$$\begin{aligned} (B^{\mathbf{i}})^\dagger B^{\mathbf{i}} &= L^{-2/L} \begin{pmatrix} A_L^{i_L\dagger} A_L^{i_L} & & & \\ & A_1^{i_1\dagger} A_1^{i_1} & & \\ & & \ddots & \\ & & & A_{L-1}^{i_{L-1}\dagger} A_{L-1}^{i_{L-1}} \end{pmatrix} = L^{-2/L} I \\ B^{\mathbf{i}} &\left(\begin{matrix} \Sigma_{L-1} & & & \\ & \Sigma_0 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \Sigma_{L-2} \end{matrix} \right) (B^{\mathbf{i}})^\dagger \\ &= L^{-2/L} \begin{pmatrix} A_L^\dagger \Sigma_{L-1} A_L & & & \\ & A_1^\dagger \Sigma_0 A_1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & A_{L-2}^\dagger \Sigma_{L-2} A_{L-2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となるので、適切な規格化により左右の規格化条件が得られる。しかし、 $B^{\mathbf{i}}$ は行列サイズが $\prod_{k=1}^L \text{rank } A^{i_k}$ という巨大なものであり、系を効率的に記述できているとはいえないだろう。OBC-MPS の行列サイズが $\text{rank } A^{i_k}$ であったことを考えると、TI-MPS も同程度の行列サイズで記述できると期待される。すなわち、標準形 MPS としては適切にブロック対角化した形として定義するのが良いだろう。^{*5} 転送行列を考察する際に便利なよ

^{*5} 右規格化条件で現れる Σ_k が単位行列でない場合、 $A_k^\dagger A_k \neq A_k A_k^\dagger$ なので一般に対角化不可能である。
 $B^{\mathbf{i}}$ は対角化不可能な行列を用いて構成されていることからも推察できる通り、一般に対角化不可能。

うに、ブロック対角化はそのブロックから構成される転送行列が正写像として既約 (cf. [????](#)) となるまで行うのが一般的である。

ブロック対角化は一般に $c \in \mathbb{C}$, $Q \in \mathrm{GL}(D, \mathbb{C})$ により $cQ^{-1}B^iQ$ で実現されるので、(2.2.5) は定数倍しかされず、状態は変わらない。ここまでを踏まえ、TI-MPS の標準形を定義する。

Def. 3: TI-MPS の標準形

TI-MPS $\{A^i\}_i$ は標準形として

$$A^i = \bigoplus_{\alpha} \rho_{\alpha} A_{(\alpha)}^i$$

と表せる。ただし、 $\rho_{\alpha} > 0$, $A_{(\alpha)}^i$ は転送行列 $T_{A_{(\alpha)}} : \rho \mapsto \sum_i A_{(\alpha)}^i \rho A_{(\alpha)}^{i\dagger}$ が正写像として既約となる MPS テンソルであり、右規格化条件

$$\sum_i A_{(\alpha)}^i (A_{(\alpha)}^i)^{\dagger} = \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{A_{(\alpha)}} \\ | \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{A_{(\alpha)}^{\dagger}} \\ | \\ \text{---} \end{array} = 1_{D_{\alpha}} \quad (2.2.6)$$

および対角行列 $\Sigma_{(\alpha)}$ ($\mathrm{Tr} \Sigma_{(\alpha)}^2 = 1$) による左規格化条件

$$\sum_i (A_{(\alpha)}^i)^{\dagger} \Sigma_{(\alpha)}^2 A_{(\alpha)}^i = \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{A_{(\alpha)}^{\dagger}} \\ | \\ \Sigma_{(\alpha)}^2 \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{A_{(\alpha)}} \\ | \\ \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \bullet \\ | \\ \text{---} \end{array} \Sigma_{(\alpha)}^2$$

を満たす。

2.3 転送行列の特性

gapped 系で縮退のない基底状態を記述するという目的で MPS を用いる場合、chapter 1 で掲げた性質を満たすような MPS テンソルに議論を限定したい。例えば相関関数は

$$\begin{aligned} \langle O_x O_y \rangle &= \sum_{i_1, \dots, i_L} \sum_{j_1, \dots, j_L} \langle i_1, \dots, i_L | A_{i_1, \dots, i_L}^* (O_x)_{i_x, j_x} (O_y)_{i_y, j_y} A_{j_1, \dots, j_L} | j_1, \dots, j_L \rangle \\ &= \dots \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{A^{\dagger}} \\ | \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{A^{\dagger}} \\ | \\ \text{---} \end{array} \dots \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{A^{\dagger}} \\ | \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{O_x} \\ | \\ \text{---} \end{array} \dots \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{A^{\dagger}} \\ | \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{A^{\dagger}} \\ | \\ \text{---} \end{array} \dots \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{A^{\dagger}} \\ | \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{O_y} \\ | \\ \text{---} \end{array} \dots \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{A} \\ | \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{A} \\ | \\ \text{---} \end{array} \dots \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{A} \\ | \\ \text{---} \end{array} \quad (2.3.1) \end{aligned}$$

のように書けるが、[??](#)で示したように指指数関数的に減衰しなければならない。転送行列に隔てられた相関関数の減衰は、古典 1 次元 Ising 模型の厳密解を求める際に用いられた転送行列法の議論と酷似している。1 次元 Ising 模型の転送行列の議論では、非自明な演算子が作用することで計算に現れる 2 番目に大きな固有値が相関関数の減衰を支配していた。

また TI-MPS の標準形を導出するにあたり、サイズ $\mathcal{O}(L)$ の行列を構成して既約分解するという人工的な手続きを行なった。規格化条件に現れた $\Sigma_{(\alpha)}$ は TI-MPS の性質を反映していると期待されるが、直接的な関係は不明である。両側規格化条件は転送行列の固

有方程式と見ることができるので、転送行列の性質を調べることで MPS の標準形の理解が深まると期待される。

本節では上記の 2 点を念頭に、転送行列の性質を調べる。明記しない限り本節の内容は境界条件に依存しない。十分バルクの MPS を取り出すことでテンソルはサイトに依存しないと仮定する。

2.3.1 転送行列を念頭においた性質の定義

今後の議論を円滑にするため、あらかじめ以下を示す。

Lem. 1: MPS の転送行列は CP 写像

MPS テンソル $A \in \mathbb{C}^D \otimes (\mathbb{C}^D)^* \otimes \mathbb{C}^d$ の転送行列 $T_A : \rho \mapsto T_A(\rho) = \sum_i (A^i)^\dagger \rho A^i$ は完全正值。

Prf.

任意の半正定値演算子 $\rho \geq 0$ とベクトル $|v\rangle$ に対し、

$$\begin{aligned}\langle v | (T_A \otimes I)(\rho) | v \rangle &= \sum_i \langle v | ((A^i)^\dagger \otimes I) \rho (A^i \otimes I) | v \rangle \\ &= \sum_i ((A^i \otimes I) | v \rangle)^\dagger \rho ((A^i \otimes I) | v \rangle) \geq 0\end{aligned}$$

であるから、 T_A は完全正值。

これに加え、OBC-MPS の右規格化条件 (2.2.1) および TI-MPS の右規格化条件 (2.2.6) と合わせると、標準形では (各ブロックから構成される) 転送行列が CPTP (完全正值かつトレース保存) 写像であることが分かる。

転送行列の絶対値最大の固有値に興味があるので、appendix A.3.3 で導入した線型写像の特性を応用する。

Def. 4: injective, normal, periodic MPS

MPS テンソル A が

injective: $\sum_i \text{Tr}\{A^i \rho\} |i\rangle = 0$ ならば $\rho = 0$ であること

normal: 転送行列 T_A が primitive であること

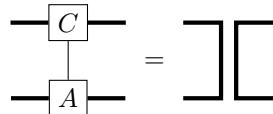
periodic: 転送行列 T_A が irreducible だが primitive でないこと

injective, normal, periodic な MPS テンソルから生成される MPS をそれぞれ injective MPS, normal MPS, periodic MPS と呼ぶ。

写像が単射であることと (制限された空間からの) 逆写像が存在することは同値なので、以下の定理が成り立つ。

Thm. 8: injective MPS テンソルと逆が存在は等価

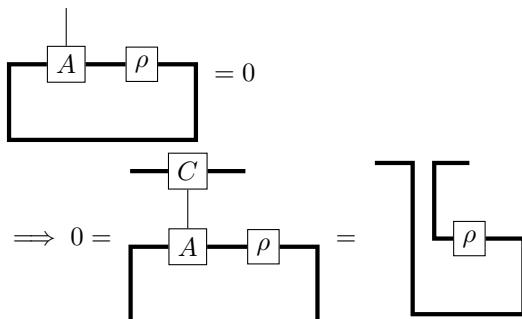
MPS テンソル A が injective であることと、left inverse C が存在して下図の意味で $\sum_i A^i \otimes C^i = \text{Id}$ を満たすことは同値である。



Prf.

■ injective \implies left inverse が存在 A^i は virtual な行列から physical なベクトルへの線型写像 $\text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C}) \rightarrow \mathbb{C}^d$ として单射である。したがって逆写像 $C : A(\text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})) \rightarrow \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$ が存在して、任意の $\rho \in \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$ に対し $C \circ A(\rho) = \rho$ を満たす。これはまさしく主張における図式に他ならない。

■ left inverse が存在 \implies injective



転送行列の間には (2.3.1) のように観測可能量を挟みたい。on-site な観測可能量であれば (2.3.1) の形で書けるが、一般に演算子は複数サイトに跨り得る。MPS と同様にして特異値分解により

$$\boxed{O} = \boxed{O_1} - \boxed{O_2}$$

と書ける。これを一般化して、行列積演算子を定義する。

Def. 5: MPO

テンソル $X : \mathbb{C}^D \otimes (\mathbb{C}^D)^* \otimes \mathbb{C}^d \otimes (\mathbb{C}^d)^*$ により

$$\begin{aligned} V_n(X) &= \sum_{i_1, \dots, i_n; j_1, \dots, j_n} \text{Tr}[X^{i_1, j_1} \dots X^{i_n, j_n}] |i_1, \dots, i_n\rangle \langle j_1, \dots, j_n| \\ &= \boxed{X} - \boxed{X} - \dots - \boxed{X} \end{aligned}$$

と書かれる演算子を matrix product operator (MPO) と呼ぶ。

MPO の下に伸びる脚を上の脚と合わせて physical な脚とすれば MPS と等価である。そのため以下全ての MPS に関する命題は MPO でも成り立つ。

2.3.2 MPS の blocking とテンソル積

appendix A.3.3 の議論から、既約正写像 T の絶対値最大の固有値は複素平面においてスペクトル半径を半径とする円周上に等間隔に分布し、そのスペクトルは $e^{2\pi ik/m}$ の形で書けた (cf. ??) ので、 T^m はスペクトル半径上にただ一つのスペクトル ρ_T^m を有する。一般にこの最大固有値 ρ_T^m は縮退するが、既約分解しなおせば各ブロックで非縮退、すなわち primitive になる。この構成を念頭に置くと、転送行列を m 回作用させれば常に normal MPS に分解できる。

分解については次節に回し、本節では転送行列の再起的作用 T^m に対応する MPS テンソルを定義する。

Def. 6: blocking

MPS tensor B が

$$\begin{array}{c} | \\ \text{---} \boxed{B} \text{---} \\ | \end{array} = \begin{array}{c} | \\ \text{---} \boxed{A} \text{---} \boxed{A} \text{---} \cdots \text{---} \boxed{A} \text{---} \\ | \end{array}$$

と表せるとき、 A の blocking であるという。

上述のように転送行列が既約だからといって、その累乗が既約とは限らない。しかし転送行列 T が primitive であれば、 k 回 blocking してもスペクトル半径上に固有値は ρ_T^k しかなく、固有ベクトルも T のスペクトル ρ_T の固有ベクトル $X > 0$ のままである。Thm. 18 と合わせて T^k は primitive であり、転送行列を与える MPS A は normal である。また定義から明らかに injective MPS テンソル A の blocking も injective である。

Cor. 2: blocking は injectivity, normality を保存

- 任意の injective MPS テンソルの blocking は injective
- 任意の normal MPS テンソルの blocking は normal

blocking した MPS の injectivity は

$$\Gamma_L : X \mapsto \sum_{i_1, \dots, i_L=1}^d \text{Tr}[XA^{i_1}A^{i_2} \cdots A^{i_L}] |i_1, \dots, i_L\rangle$$

が单射であることと等価である。したがって单射な逆写像 $\Gamma_L(\text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})) \rightarrow \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$ が定義できるため blocking したテンソル $A^{i_1} \cdots A^{i_L}$ の virtual 脚が $\text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$ を張る。逆に $\text{Span}\{A^{i_1} \cdots A^{i_L}\}_{i_1, \dots, i_L=1}^d = \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$ のとき、 $\Gamma_L(X) = 0$ ならば任意の i_1, \dots, i_L に対し $\text{Tr}[XA^{i_1} \cdots A^{i_L}] = 0$ である。適切に係数 $(c_{i_1, \dots, i_L})_{i_1, \dots, i_L=1}^d$ を選べば

$$\begin{array}{c} \boxed{c} \\ | \quad | \quad | \\ \text{---} \boxed{A} \text{---} \boxed{A} \text{---} \cdots \text{---} \boxed{A} \text{---} \\ | \quad | \quad | \end{array} = X^\dagger$$

となるように取れるが、このとき $\text{Tr}[XX^\dagger] = 0$ となり $X = 0$ が従う。

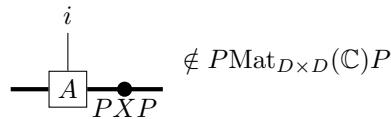
Lem. 2: MPS が injective \iff virtual な脚が完全系を張る

$$\Gamma_L \text{ が单射} \iff \text{Span}\{A^{i_1} \cdots A^{i_L}\}_{i_1, \dots, i_L=1}^d = \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C}) = \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$$

この補題により injective MPS テンソルの virtual な脚が $\text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$ 全体を張るので、転送行列は既約になるだろう。実際、任意の非自明な射影

$$P = \begin{pmatrix} I_r & \\ & 0 \end{pmatrix}$$

を与えたとき、 A^i として非対角成分を持つ行列を取ればある $X \in \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$ (例えば単位行列) に対して



を実現できる。よって転送行列 T_A は既約であり、injective MPS A は normal または periodic である。もし A が periodic であると仮定すると、periodicity $m > 1$ によって T_A^m はスペクトル半径上に固有値 ρ_T^m のみを持つ。が、 T_A の peripheral spectrum の固有ベクトルが全て ρ_T^m に対応するので縮退し、??の対偶から T_A^m は既約でない。これは injective MPS テンソルの blocking が injective であること (i.e. 転送行列が既約であること) と矛盾する。よって A は normal である。

逆に、Cor. 2 直下では MPS テンソルを blocking することで injective MPS を構成した。何度も指摘しているように peripheral spectrum が非自明な場合、blocking しても injective にはならない。では normal MPS テンソルを blocking すれば injective MPS テンソルが得られるのではないか。転送行列が primitive なので、Thm. 19 によりある有限の $L_0 \in \mathbb{N}$ が存在して $T^{L_0} > 0$ となる。このような L_0 回の blocking によりもし $\text{Span}\{A^{i_1} \cdots A^{i_L} \mid 1 \leq i_1, \dots, i_L \leq d\} \subsetneq \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$ であると仮定すると、ある非自明な射影 $P \neq 0, 1$ が存在して $T(P) = 0$ となり、 $T^{L_0} > 0$ と矛盾する。よって $\text{Span}\{A^{i_1} \cdots A^{i_L} \mid 1 \leq i_1, \dots, i_L \leq d\} = \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$. すなわち有限な L_0 回の blocking により injective テンソルが得られる。⁶

Prop. 2: injective \iff normal の blocking

任意の injective MPS テンソルは normal テンソルに比例する。逆に任意の normal テンソルに対してある $L_0 \in \mathbb{N}$ が存在して、任意の $L \geq L_0$ 回の blocking により injective テンソルが得られる。このような最小の L_0 を **injectivity length** と呼ぶ。

また右規格化条件 $\sum_i A^i A^{i\dagger} = I$ があるので、单射な Γ_L に対しさらに MPS テンソルを繋げても virtual な行列空間を狭めることはない。すなわち L 回の blocking で injective ならそれ以上の blocking でも injective である。

⁶ virtual な脚の自由度が D^2 であるのに対し、physical な脚の自由度は d^L なので、素朴には $d^L \gtrsim D^2$ すなわち $L \gtrsim 2 \log_d(D)$ 回の blocking で injective になると予想できる。ここでは具体的な回数には触れず $L_0 < \infty$ であることのみを示したが、Hilbert 空間の次元 d やボンド次元 D から求められる具体的な上限は [13] にて与えられている。

Prop. 2 により normal テンソルの熱力学極限は injective になる。MPS により表される純粋状態の内積 $\langle V_L(A) | V_L(B) \rangle$ は異なるテンソル A, B から

$$\langle V_L(A) | V_L(B) \rangle = \cdots - \boxed{A^\dagger} - \boxed{A^\dagger} - \boxed{A^\dagger} - \cdots \\ \cdots - \boxed{B} - \boxed{B} - \boxed{B} - \cdots$$

と構成される。右規格化条件によって

$$\| \begin{array}{c} | \\ \boxed{A} \end{array} \| ^2 = \boxed{\begin{array}{c} A^\dagger \\ | \\ A \end{array}} = 1 = \boxed{\begin{array}{c} B^\dagger \\ | \\ B \end{array}} = \| \begin{array}{c} | \\ \boxed{B} \end{array} \| ^2$$

と規格化されているので、Cauchy-Schwarz の不等式より

$$\boxed{\begin{array}{c} A^\dagger \\ | \\ B \end{array}} \leq 1$$

である。virtual な脚を開いたときの作用は非自明だが、転送行列のスペクトル半径も 1 以下に押さえられることが下で示す命題からわかる。大雑把に $B \neq A$ のときスペクトル半径が 1 未満であるとすれば、熱力学極限で転送行列の blocking は 0 に収束し、MPS の内積も 0 となる。この直感の正当化が以下の定理である。

Prop. 3: injective MPS は熱力学極限で比例または直交 ([14] Lem A.2)

injectivity length が高々 L_0 の normal MPS テンソル A, B から作られる MPS テンソルは以下のいずれかを満たす。

- 熱力学極限で MPS が直交する。すなわち、

$$\frac{|\langle V_L(A) | V_L(B) \rangle|}{\|V_L(A)\| \|V_L(B)\|} \xrightarrow{L \rightarrow \infty} 0$$

この場合、 A, B は本質的に異なる (essentially different) と呼ばれる。

- 以下の等価な条件を満たす。

- $\lambda \in \mathbb{C}$ が存在して、任意の n で $V_n(A) = \lambda^n V_n(B)$ を満たす
- $n \geq 2L_0 + 1$ が存在して、ある $\lambda \in \mathbb{C}$ にて $V_n(A) = \lambda^n V_n(B)$
- ある $\alpha \in \mathbb{C}$ と可逆行列 X が存在して、 $B^i = \alpha X B^i X^{-1}$ を満たし、この X は定数を除いて unique

Prf.

適切な相似変換によって normal MPS テンソル A, B を規格化して左右の規格化条件 (??) を満たすようにとる。

まず、

$$\langle V_L(A) | V_L(A) \rangle = \cdots - \boxed{A^\dagger} - \boxed{A^\dagger} - \boxed{A^\dagger} - \cdots \\ \cdots - \boxed{A} - \boxed{A} - \boxed{A} - \cdots$$

であり、 T_A が primitive な TP 写像なのでこのスペクトルは $L \rightarrow \infty$ 極限で

$\{0, 1\}$ に収束する。特に固有値 1 は縮退せず、固有ベクトルは単位行列。同様にして

$$\langle V_L(A) | V_L(B) \rangle = \cdots - \boxed{A^\dagger} - \boxed{A^\dagger} - \boxed{A^\dagger} - \cdots$$

$$\cdots - \boxed{B} - \boxed{B} - \boxed{B} - \cdots$$

である。ここで、転送行列の固有方程式

$$\begin{array}{c} \boxed{A^\dagger} \\ \downarrow \\ \boxed{B} \end{array} \quad \boxed{X} = \lambda X$$

を考察する。 T_A の不動点 X_A が正定値であることを用いると

$$\begin{aligned} |\lambda \operatorname{Tr}[X \Sigma_A^2 X^\dagger]|^2 &= \left| \lambda \begin{array}{c} \boxed{\Sigma_A} \\ \downarrow \\ \boxed{\Sigma_A} - \boxed{X^\dagger} \end{array} \right|^2 \\ &= \left| \begin{array}{c} \boxed{\Sigma_A} - \boxed{A^\dagger} - \boxed{X} \\ \downarrow \\ \boxed{\Sigma_A} - \boxed{X^\dagger} - \boxed{B} \end{array} \right|^2 \\ &\leq \left| \begin{array}{cc} \boxed{\Sigma_A} - \boxed{A^\dagger} - \boxed{X} & \boxed{\Sigma_A} - \boxed{X} - \boxed{B^\dagger} \\ \downarrow & \downarrow \\ \boxed{\Sigma_A} - \boxed{A} - \boxed{X^\dagger} & \boxed{\Sigma_A} - \boxed{X^\dagger} - \boxed{B} \end{array} \right|^2 \quad (2.3.2) \\ &= \left| \begin{array}{c} \boxed{\Sigma_A^2} \\ \downarrow \\ \boxed{X^\dagger} \end{array} \right|^2 = |\operatorname{Tr}[X \Sigma_A^2 X^\dagger]|^2 \end{aligned}$$

である。不等号では Cauchy-Schwarz の不等式を用いたほか、最後の等号では左右の規格化条件を使っている。 Σ_A^2 はフルランクなので $\operatorname{Tr}[X \Sigma_A^2 X^\dagger] > 0$ であり、したがって $|\lambda| \leq 1$ 。 $|\lambda| < 0$ の場合は熱力学極限で $\langle V_L(A) | V_L(B) \rangle \rightarrow 0$ となる。

$|\lambda| = 1$ の場合を考察する。(2.3.2) の Cauchy-Schwarz の不等号が等号になるので、あるスカラー $\alpha \in \mathbb{C}$ が存在して

$$\begin{array}{c} \boxed{A^\dagger} - \boxed{X} \\ \downarrow \\ \boxed{A} - \boxed{X^\dagger} \end{array} = \alpha \begin{array}{c} \boxed{X} - \boxed{B^\dagger} \\ \downarrow \\ \boxed{X^\dagger} - \boxed{B} \end{array}$$

が成り立つ。テンソル B を接続して規格化条件を使うと

$$\begin{aligned} \lambda X &= \begin{array}{c} \boxed{A^\dagger} - \boxed{X} \\ \downarrow \\ \boxed{B} \end{array} \\ &= \alpha \begin{array}{c} \boxed{X} - \boxed{B^\dagger} \\ \downarrow \\ \boxed{B} \end{array} = \alpha X \end{aligned}$$

なので $\lambda^{-1}\alpha = 1$ 。特に $|\alpha| = 1$ である。

$$\begin{array}{ccc} \begin{array}{c} A^\dagger \\ \hline A \end{array} \otimes \begin{array}{c} X \\ \hline X^\dagger \end{array} & = \alpha^* & \begin{array}{c} A^\dagger \\ \hline X^\dagger \end{array} \otimes \begin{array}{c} X \\ \hline B \end{array} = \alpha^* \lambda X^\dagger X = X^\dagger X \end{array}$$

で、primitive な転送行列 T_A の不動点が右規格化条件により単位行列で与えられていることから $X^\dagger X = I_D$ 。もしボンド次元が A, B で異なり $D_a < D_b$ となると仮定すると、 A は $D_b - D_a$ 次元の零空間を持つが、これは A が normal である仮定に反する。よって $D_a = D_b$ であり、 X はユニタリ。 A, B は相似変換によって規格化していたので、 A と B は相似変換で結びつく。転送行列 $T_{AB} : \rho \mapsto \sum_i B^i \rho A^{i\dagger}$ の非自明な固有ベクトルが全てユニタリで与えられ、さらに

これを踏まえ、上記のように熱力学極限で直行する normal MPS テンソルを「本質的に異なる MPS テンソル」と呼ぶ。適切に規格化すると、本質的に異なる normal MPS の熱力学極限 $\{\lim_{L \rightarrow \infty} |V_L(A)\rangle\}$ は MPS 空間の正規直交基底を与える。

blocking だけでなく、異なる MPS テンソルのテンソル積をとっても normality と injectivity は保たれる。テンソル積は MPS テンソルが平行に並んでいる状況に対応する。これは独立な多体系がテンソル積で表されることと整合している。

$$\begin{array}{c} | \\ A \end{array} \otimes \begin{array}{c} | \\ B \end{array} = \begin{array}{c} | \\ B \\ \hline | \\ A \end{array}$$

Prop. 4: テンソル積で normality, injectivity は保存

二つの normal MPS テンソルのテンソル積は normal である。また二つの injective MPS テンソルのテンソル積は injective である。

Prf.

■normal のテンソル積は normal normal tensor A, B のテンソル積 $A \otimes B$ の転送行列は $T_A \otimes T_B$ である。任意の演算子 T のスペクトルを $\text{Sp}(T)$ と書くと、 $\text{Sp}(T_A \otimes T_B) = \text{Sp}(T_A) \cdot \text{Sp}(T_B)$ である。よって $T_A \otimes T_B$ はスペクトル半径に等しい大きさの固有値がただ一つ存在する。各々の最大固有値の固有ベクトルを X_A, X_B とすれば、対応する固有ベクトルは $X_A \otimes X_B$ である。 $X_A \otimes X_B$ は正定値かつ full rank なので、 $T_A \otimes T_B$ は primitive である。

■injective のテンソル積は injective A, B が injective ならば、left inverse A^{-1}, B^{-1} が存在する。 $A^{-1} \otimes B^{-1}$ は $A \otimes B$ の left inverse なので、 $A \otimes B$ も injective である。

2.3.3 MPS の分解

転送行列は既約分解によって既約な正写像に直和分解できる。既約な転送行列を与える MPS テンソルは normal または periodic なので、MPS そのものも normal MPS と periodic MPS の線型結合で表されるだろう。この期待を正当化するのが以下の命題である。

Prop. 5: MPS は normal と periodic の線型結合

任意の MPS $V_n(A)$ は normal MPS と periodic MPS の線型結合に分解できる。

$$V_n(A) = \sum_i \mu_i^n V_n(A_i)$$

ここに A_i はそれぞれ nomal または periodic である。

Prf.

ボンド次元 D の帰納法で示す。

$D = 1$ の時、 A_i は virtual な脚に関してスカラーなので 2 乗すると正になる。転送行列の固有方程式は

$$\begin{array}{c} A^\dagger \\ \downarrow \\ X = \lambda X \\ \downarrow \\ A \end{array}$$

の形であり、固有値は $|\lambda| = |A|^2 > 0$ に限られる。よって転送行列のスペクトル半径が正で固有値が縮退しないので A_i は normal テンソルに比例する。

$D < D_0$ までで主張が正しいと仮定する。ボンド次元 D_0 の MPS テンソル A を考える。転送行列 T_A が既約なら A は periodic または normal MPS テンソルに比例するので可約な場合を考えれば良い。 T_A が可約なら、非自明な射影 P が存在して $A_i P = P A_i P$ ができる。このとき $Q = \text{Id} - P$ を用いて $V_n(A) = V_n(PAP) + V_n(QAQ)$ 。 PAP のボンド次元が $D = \text{rank } P$ になるので、階数分解 (??) によりある $X : \mathbb{C}^{D_0} \rightarrow \mathbb{C}^D$ と $Y : \mathbb{C}^D \rightarrow \mathbb{C}^{D_0}$ が存在して $P = YX$, $XY = \text{Id}_D$ ができる。結果、得られる MPS のボンド次元が $D < D_0$ になるので、帰納法の仮定から主張が従う。

既約線型写像の peripheral spectrum は整数乗根で構成された (Prop. 13) ので、転送行列を複数回かけるとスペクトル半径上の固有値は单一の値に定まる (cf. appendix A.3.3)。この転送行列の blocking を既約分解すれば primitive な転送行列に分解できる。

Prop. 6: periodic MPS は blocking で normal の線型結合

A を periodicity K の periodic な MPS テンソルとする。 K 回の blocking によ

り $V_n(A)$ は K 個の本質的に異なる normal MPS テンソルに分解できる:

$$V_{Kn}(A) = \sum_{i=1}^K V_n(B_i)$$

ここに B_i は互いに本質的に異なる normal MPS テンソルで、 K サイトに作用する。さらに $n \notin K\mathbb{N}$ に対して $V_n(A) = 0$.

Prf. cf. [15] Lem. 5

この命題は [15] の Lem. 5 にある。本質的には [9] を使うらしい。[14] の Prop. 9 はこの Cor. である。

この観察から直ちに次の命題を得る。

Cor. 3: blocking により normal テンソルの線型結合になる

任意の MPS テンソル A に対して $K \in \mathbb{N}$ が存在し、 K 回の blocking により $V_{Kn}(A)$ は normal テンソルの線型結合に分解できる。

$$V_{Kn}(A) = \sum_{i=1}^M \mu_i^n V_n(B_i)$$

ここに B_i は互いに本質的に異なる normal MPS テンソルで、 K サイトに作用するものである。

Prop. 3 直後で議論したように、熱力学極限にて本質的に異なる normal MPS テンソルは正規直交基底を張る。Cor. 3 の分解は基底を定めると一意である。この一意性をより強固に保証するのが以下の定理である。

Prop. 7

$\mu_1, \dots, \mu_r \in \mathbb{C}^\times$ と $\lambda_1, \dots, \lambda_s \in \mathbb{C}^\times$ が任意の $n \in \mathbb{N}$ で

$$\sum_{i=1}^r \mu_i^n = \sum_{j=1}^s \lambda_j^n$$

を満たすならば、 $r = s$ であり、またある順列 p によって $\mu_i = \lambda_{p(i)}$ が成り立つ。

Prf. cf. [16] Lem. 9

s_k を n 変数 x_1, \dots, x_n の k 次多項式

$$s_k := x_1^k + \cdots + x_n^k$$

とする。また

$$\tau_k := \sum_{i_1 < i_2 < \cdots < i_k} x_{i_1} x_{i_2} \cdots x_{i_k}$$

で定義すると、Newton の恒等式 (??) により

$$\begin{aligned}\tau_1 &= s_1, \\ \tau_k &= (-1)^{k-1} \frac{1}{k} (s_k - \tau_1 s_{k-1} + \cdots + (-1)^{k-1} \tau_{k-1} s_1)\end{aligned}$$

とできるので、 τ_1, \dots, τ_n を s_1, \dots, s_n の多項式として表せる。

新たに変数 X を用意して

$$f(X) := (X - x_1)(X - x_2) \cdots (X - x_n)$$

とする。

$$f(X) = X^n - \tau_1 X^{n-1} + \cdots + (-1)^n \tau_n$$

だが、 f_μ を全ての i で $x_i = \mu_i$ とした式で、 f_λ を $x_j = \lambda_j$ とした式で定義すると、前段落での考察と仮定から f_μ, f_λ は X の多項式として等価になる。 μ_i, λ_j は $f_\mu = f_\lambda = 0$ の解なので題意を満たす。

2.3.4 TI-MPS の標準形の一意性

OBC-MPS の標準形はユニタリ自由度を除いて一意に定まった。TI-MPS もバルクでは OBC-MPS と等価になると期待すれば、TI-MPS の標準形もユニタリ自由度を除いて一意に定まると考えられる。しかも並進普遍性があるのでユニタリは各ブロックで同一。すなわち以下の定理の形で一意性が示されると期待される。

Thm. 9: TI-MPS の標準形の一意性

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_L} \text{Tr}[A^{i_1} A^{i_2} \cdots A^{i_L}] |i_1, \dots, i_L\rangle$$

を

- injectivity length L_0
- $L > 2L_0 + D^4$

を満たすボンド次元 D の TI-MPS とする。 $|\psi\rangle$ のボンド次元 D の TI-MPS 標準形がこれとは別に

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_L} \text{Tr}[B^{i_1} B^{i_2} \cdots B^{i_L}] |i_1, \dots, i_L\rangle$$

と与えられるとき、ユニタリ行列 U によって任意の i で $B^i = UA^iU^\dagger$ が成り立つ。

Lem. 3

T, S を同じベクトル空間で定義された線型写像として、ベクトル Y_1, \dots, Y_n が

- $T(Y_k) = S(Y_{k+1})$ for $k = 1, \dots, n-1$

- Y_1, \dots, Y_n は線型独立
- $Y_n = \sum_{k=1}^{n-1} \lambda_k Y_k$

を満たすとする。このとき、方程式 $\lambda_1 x^{n-1} + \dots + \lambda_{n-1} x = 1$ の非自明な解 x により

$$\begin{aligned}\mu_1 &= \lambda_1 x \\ \mu_2 &= \lambda_1 x^2 + \lambda_2 x \\ &\vdots \\ \mu_{n-1} &= \lambda_1 x^{n-1} + \dots + \lambda_{n-1} x = 1\end{aligned}$$

を定義して $Y = \sum_{k=1}^{n-1} \mu_k Y_k$ が成り立つなら、 $Y \neq 0$ かつ $T(Y) = S(Y)/x$.

Prf.

具体的計算により

$$\begin{aligned}T(Y) &= \sum_{k=1}^{n-1} \mu_k T(Y_k) = \sum_{k=1}^{n-1} \mu_k S(Y_{k+1}) \\ &= S\left(\sum_{k=1}^{n-2} \mu_k Y_{k+1} + \sum_{k=1}^{n-1} \lambda_k Y_k\right) \\ &= S(\lambda_1 Y_1 + (\lambda_2 + \mu_1) Y_2 + \dots + (\lambda_{n-1} + \mu_{n-2}) Y_{n-1}) \\ &= S\left(\frac{\mu_1}{x} Y_1 + \frac{\mu_2}{x} Y_2 + \dots + \frac{\mu_{n-1}}{x} Y_{n-1}\right) \\ &= \frac{1}{x} S(Y).\end{aligned}$$

さらに $\mu_{n-1} = 1$ であることと Y_1, \dots, Y_{n-1} が線型独立であることから、 $Y \neq 0$ が成り立つ。

Lem. 4

B, C が共に $n \times n$ 行列のとき、方程式

$$W(C \otimes I) = (B \otimes I)W$$

の解空間は $XC = BX$ の解 S により $S \otimes \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ で与えられる。

Prf.

以下、 \mathcal{S} を $XC = BX$ の解空間、 \mathcal{W} を $W(C \otimes I) = (B \otimes I)W$ の解空間とする。
任意の $X \in \mathcal{S}$ と $Y \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ に対して

$$(X \otimes Y)(C \otimes I) = (XC) \otimes Y = (BX) \otimes Y = (B \otimes I)(X \otimes Y)$$

なので $\mathcal{S} \otimes \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \subseteq \mathcal{W}$. 逆に $W \in \mathcal{W}$ を任意に取って $\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ の基底 $\{E_{ij} \mid (E_{ij})_{k,l} = \delta_{i,k}\delta_{j,l}\}_{1 \leq i,j \leq n}$ により

$$W = \sum_{i,j=1}^n X_{ij} \otimes E_{ij} \quad (X_{ij} \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}))$$

と展開すると、

$$\begin{aligned} 0 &= W(C \otimes I) - (B \otimes I)W \\ &= \sum_{i,j=1}^n [(X_{ij} \otimes E_{ij})(C \otimes I) - (B \otimes I)(X_{ij} \otimes E_{ij})] \\ &= \sum_{i,j=1}^n (X_{ij}C - BX_{ij}) \otimes E_{ij} \end{aligned}$$

である。 E_{ij} は線型独立なので $X_{ij} \in \mathcal{S}$. よって $\mathcal{W} \subseteq \mathcal{S} \otimes \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$.

Prf.

??から、OBC-MPS 標準形の行列 A

2.4 無限サイズ密度行列繰り込み群法 (iDMRG)

密度行列繰り込み群 (density matrix renormalization group; **DMRG**) 法は、量子多体系の基底状態を行列積状態により近似して求める数値計算手法である [17]。DMRG に関するレビューは [18, 19, 20] などがあるほか、教科書として [21, 22] などがある。本節では主に [?] をもとに、並進対称性がある 1 次元量子多体系の基底状態を求める **iDMRG** (infinite-size DMRG) アルゴリズムを紹介する。

2.4.1 例: 横磁場 Ising 模型

横磁場 Ising 模型

$$H = -J \sum_i Z_i Z_{i+1} - h \sum_i X_i$$

を例にする。例えば 6 サイト系として十分基底状態を再現する状態

$$|\psi_6\rangle = \begin{array}{ccccccc} \sigma_1 & & \sigma_2 & & \sigma_3 & & \\ \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \\ L_1 & - & L_2 & - & L_3 & - & \Lambda_3 & - & R_3 & - & R_2 & - & R_1 \end{array}$$

から

$$|\psi_8\rangle = \begin{array}{cccccccc} \sigma_1 & \sigma_2 & \sigma_3 & \sigma_4 & & \tau_4 & \tau_3 & \tau_2 & \tau_1 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ L_1 & - & L_2 & - & L_3 & - & L_4 & - & \Lambda_4 & - & R_4 & - & R_3 & - & R_2 & - & R_1 \end{array}$$

を構成するのが目標である。

$|\psi_6\rangle$ を構成する L, R を固定して、

$$|\tilde{\psi}_8\rangle = \begin{array}{ccccccccc} & \sigma_1 & & \sigma_2 & & \sigma_3 & \sigma_4 & \tau_4 & \tau_3 & \tau_2 & \tau_1 \\ & | & & | & & | & & | & & | & \\ L_1 & - & L_2 & - & L_3 & - & Q_3 & - & R_3 & - & R_2 & - & R_1 \end{array}$$

について、横磁場 Ising 模型の Hamiltonian 期待値を最小にする Q_3 を求める。すなわち Q_3 の変分により

$$\langle H \rangle = \begin{array}{ccccccccc} L_1^\dagger & - & L_2^\dagger & - & L_3^\dagger & - & Q_3^\dagger & - & R_3^\dagger & - & R_2^\dagger & - & R_1^\dagger \\ | & & | & & | & & | & & | & & | & & | \\ L_1 & - & L_2 & - & L_3 & - & Q_3 & - & R_3 & - & R_2 & - & R_1 \end{array} \quad H$$

を拘束条件

$$\langle \psi | \psi \rangle = \begin{array}{ccccccccc} L_1^\dagger & - & L_2^\dagger & - & L_3^\dagger & - & Q_3^\dagger & - & R_3^\dagger & - & R_2^\dagger & - & R_1^\dagger \\ | & & | & & | & & | & & | & & | & & | \\ L_1 & - & L_2 & - & L_3 & - & Q_3 & - & R_3 & - & R_2 & - & R_1 \end{array} = 1$$

のもとで最小化する。 Q_3 がわかれば特異値分解によって L_4, R_4, Λ_4 を構成できる。 $\langle H \rangle$ や $\langle \psi | \psi \rangle$ の Q_3, Q_3^\dagger 以外の部分を縮約して H_4 としたい。 L, R の規格化条件を

$$\begin{array}{c} L_1^\dagger \\ | \\ L_1 \end{array} = \boxed{\begin{array}{c} L_j^\dagger \\ | \\ L_j \end{array}} = \boxed{\quad}, \quad \boxed{\begin{array}{c} R_1^\dagger \\ | \\ R_1 \end{array}} = \boxed{\begin{array}{c} R_j^\dagger \\ | \\ R_j \end{array}} = \boxed{\quad}$$

で与えると

$$\boxed{\begin{array}{c} Q_3^\dagger \\ | \\ Q_3 \end{array}} = 1$$

が拘束条件である。また縮約された Hamiltonian H_4 により $Q^\dagger H_4 Q$ を最小化したいので、固有値問題 $H_4 Q = EQ$ を解くことに帰着される。

演算子の縮約は

$$\begin{aligned}
 \langle H_3^{LL} \rangle &= -J \left(\begin{array}{c} \boxed{L_1^\dagger} \xrightarrow{} \boxed{L_2^\dagger} \xrightarrow{} \boxed{L_3^\dagger} \xrightarrow{} \boxed{Q_3^\dagger} \\ \boxed{Z_1} \quad \boxed{Z_2} \\ \boxed{L_1} \xrightarrow{} \boxed{L_2} \xrightarrow{} \boxed{L_3} \xrightarrow{} \boxed{Q_3} \end{array} + \begin{array}{c} \boxed{L_1^\dagger} \xrightarrow{} \boxed{L_2^\dagger} \xrightarrow{} \boxed{L_3^\dagger} \xrightarrow{} \boxed{Q_3^\dagger} \\ \boxed{Z_2} \quad \boxed{Z_3} \\ \boxed{L_1} \xrightarrow{} \boxed{L_2} \xrightarrow{} \boxed{L_3} \xrightarrow{} \boxed{Q_3} \end{array} \right) \\
 &\quad - h \left(\begin{array}{c} \boxed{L_1^\dagger} \xrightarrow{} \boxed{L_2^\dagger} \xrightarrow{} \boxed{L_3^\dagger} \xrightarrow{} \boxed{Q_3^\dagger} \\ \boxed{X_1} \\ \boxed{L_1} \xrightarrow{} \boxed{L_2} \xrightarrow{} \boxed{L_3} \xrightarrow{} \boxed{Q_3} \end{array} + \begin{array}{c} \boxed{L_1^\dagger} \xrightarrow{} \boxed{L_2^\dagger} \xrightarrow{} \boxed{L_3^\dagger} \xrightarrow{} \boxed{Q_3^\dagger} \\ \boxed{X_2} \\ \boxed{L_1} \xrightarrow{} \boxed{L_2} \xrightarrow{} \boxed{L_3} \xrightarrow{} \boxed{Q_3} \end{array} \right. \\
 &\quad \left. + \begin{array}{c} \boxed{L_1^\dagger} \xrightarrow{} \boxed{L_2^\dagger} \xrightarrow{} \boxed{L_3^\dagger} \xrightarrow{} \boxed{Q_3^\dagger} \\ \boxed{X_3} \\ \boxed{L_1} \xrightarrow{} \boxed{L_2} \xrightarrow{} \boxed{L_3} \xrightarrow{} \boxed{Q_3} \end{array} \right) \\
 &= H_3^L \\
 \langle H_3^{LC} \rangle &= -J \left(\begin{array}{c} \boxed{L_3^\dagger} \xrightarrow{} \boxed{Q_3^\dagger} \\ \boxed{Z_3} \quad \boxed{Z_4} \\ \boxed{L_3} \xrightarrow{} \boxed{Q_3} \end{array} \right) = -J \left(\begin{array}{c} \boxed{Z_3^L} \xrightarrow{} \boxed{Q_3^\dagger} \\ \boxed{Z_4} \\ \boxed{Q_3} \end{array} \right) \\
 \langle H_3^{CC} \rangle &= -J \left(\begin{array}{c} \boxed{Q_3^\dagger} \\ \boxed{Z_4} \quad \boxed{Z_4} \\ \boxed{Q_3} \end{array} \right) - h \left(\begin{array}{c} \boxed{Q_3^\dagger} \\ \boxed{X_4} \\ \boxed{Q_3} \end{array} + \begin{array}{c} \boxed{Q_3^\dagger} \\ \boxed{X_4} \\ \boxed{Q_3} \end{array} \right)
 \end{aligned}$$

によって与えられる。Hamiltonian の各項が右側に作用する演算子も同様。こうして得られた H_4 の最小固有値を与える固有ベクトル Q_3 を求め、さらに特異値分解により $Q_3 = L_4 \Lambda_4 R_4$ が得られる。

次のステップでは

$$Z_4^L = \begin{array}{c} \boxed{L_4^\dagger} \\ \boxed{Z_4} \\ \boxed{L_4} \end{array}$$

$$H_4^L = H_3^L - h \begin{array}{c} L_4^\dagger \\ | \\ X_4 \\ | \\ L_4 \end{array} - J \begin{array}{c} L_4^\dagger \\ | \\ Z_3^L \\ | \\ Z_4 \\ | \\ L_4 \end{array} - \frac{E_4}{2} \mathbf{1}$$

として解き直せば良い。第2式最終項は演算子が bounded になるようにエネルギー shaft を行っている。縮約行列が全てわかっているので、次ステップの計算に L サイトの MPS について情報は不要である。

2.4.2 iDMRG アルゴリズム

単位格子が 2 サイトの場合にアルゴリズムをまとめた。中心的な思想としては、まず有限サイズから始め、単位格子を繰り返し挿入し self-consistent な無限サイズの状態を得ることである。

初期化

まずは単位格子である 2 サイトにて有限サイズ DMRG を行い、基底状態

$$|\Psi_2\rangle = \begin{array}{c} | \\ \square \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ \square \end{array}$$

を得る。この状態を特異値分解して

$$|\Psi_2\rangle = \begin{array}{c} | \\ A_0^{(1)} \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ \Lambda_0 \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ B_0^{(2)} \end{array}$$

とする。上付き文字はサイト番号を、下付き文字はステップ番号を表す。

第1ステップは単位格子 2 つの系から始める。

$$|\Psi_4\rangle = \begin{array}{c} | \\ \square \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ \square \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ \square \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ \square \end{array} = \begin{array}{c} | \\ A_1^{(1)} \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ A_1^{(2)} \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ \Lambda_1 \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ B_1^{(3)} \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ B_1^{(4)} \end{array}$$

これを初期状態とする。

システムサイズ増

4 サイト状態 $|\Psi_4\rangle$ の内側は単位格子と同じ見た目をしている。単位格子を挿入する。

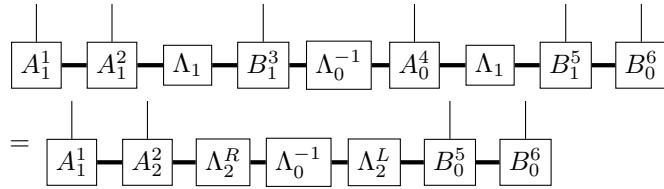
$$\begin{array}{c} | \\ A_1^1 \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ A_1^2 \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ \Lambda_1 \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ B_1^3 \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ \Lambda_0^{-1} \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ A_0^4 \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ \Lambda_1 \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ B_1^5 \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ B_0^6 \end{array}$$

内側にある二つの $A\Lambda B$ は

$$\begin{array}{c} | \\ A_1^4 \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ \Lambda_1 \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ B_1^5 \end{array} = \begin{array}{c} | \\ \Lambda_2^L \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ B_2^4 \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ B_1^5 \end{array}$$

$$\begin{array}{c} | \\ A_1^2 \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ \Lambda_1 \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ B_1^3 \end{array} = \begin{array}{c} | \\ A_1^2 \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ A_2^3 \end{array} \quad \begin{array}{c} | \\ \Lambda_2^R \end{array}$$

この変換により



であり、続くステップでは外側 2 サイトずつを放置して内側を更新していくべき。

1. (初期化) $|\psi_0\rangle = A^{\sigma_0} \Lambda_0 B^{\tau_0}$ と $|\psi_1\rangle = A^{\sigma_0} A^{\sigma_1} \Lambda_1 B^{\tau_1} B^{\tau_0}$ を用意して $n = 1$ とする。
2. ユニタリ変換により

第3章

対称性に保護されたトポロジカル相

本章は主に [23] を参考にした。

3.1 自明相と SSB 相 - 横磁場強磁性 Ising 模型

SPT 相と比較のため、まずは自明相と SSB 相を理解する。この両方を実現する最も簡単な例として、1 次元横磁場強磁性 Ising 模型を考える。1 次元格子 Λ 各サイトに Hilbert 空間 \mathbb{C}^2 を配置し、全系の Hilbert 空間はテンソル積で与える。Hamiltonian は

$$H_{\text{Ising}} = -J \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i^x \quad (J, h \geq 0)$$

とする。スピン $1/2$ 演算子 s_i に対して $\sigma_i = 2s_i$ に注意。Hamiltonian には $\sigma_i^z \mapsto -\sigma_i^z$, $\sigma_i^x \mapsto \sigma_i^x$ で与えられる \mathbb{Z}_2 スpin 反転対称性がある。

$J = 0$ のとき、基底状態は σ_i^x の +1 固有状態のテンソル積 $\bigotimes_i |\rightarrow\rangle$ で unique になる。第 1 励起状態は一つのサイトのスピンを σ_i^x 固有値 -1 に反転させた状態で、エネルギーギャップは $\Delta = 2|h|$ である。 \mathbb{Z}_2 スpin 反転対称性の秩序変数 $M_z = \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i^z/N$ の基底状態期待値は 0 となり、基底状態は対称性を破らない。秩序変数として全磁化ではなく、局所的な $O_i = \sigma_i^z$ や $O_{i,j} = \sigma_i^z \sigma_j^z$ をとっても同様に、基底状態における期待値は 0 である。

一方 $h = 0$ のとき古典強磁性 Ising 模型である。基底状態は全てのサイトで共通して σ_i^z の +1 固有値をとる固有状態 $\bigotimes_i |\uparrow\rangle$ と、全てのサイトで共通して σ_i^z の -1 固有値をとる固有状態 $\bigotimes_i |\downarrow\rangle$ の 2 つで縮退する。 \mathbb{Z}_2 スpin 反転対称性の秩序変数はそれぞれ

$$\begin{cases} \langle M_z \rangle_{\bigotimes_i |\uparrow\rangle} = +1 \\ \langle M_z \rangle_{\bigotimes_i |\downarrow\rangle} = -1 \end{cases} \quad \begin{cases} \langle O_i \rangle_{\bigotimes_i |\uparrow\rangle} = +1 \\ \langle O_i \rangle_{\bigotimes_i |\downarrow\rangle} = -1 \end{cases} \quad \langle O_{i,j} \rangle_{\bigotimes_i |\uparrow\rangle} = \langle O_{i,j} \rangle_{\bigotimes_i |\downarrow\rangle} = +1$$

となり、基底状態は \mathbb{Z}_2 対称性を自発的に破ることがわかる。

3.1.1 Kitaev の p 波超伝導模型による厳密対角化

3.1.2 Jordan-Wigner 変換による解析解

$|h/J| = 0$ で常磁性、 $|h/J| = \infty$ で強磁性となっているので、間に相転移点が存在すると予想される。[24] に従って、この様子を解析的に検証する。後の便宜のため、サイト数 L は偶数とする。

Jordan-Wigner 変換の比較的よく知られた形で対角化ができるように、スピンを回転させて

$$H_{\text{Ising}} = -J \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x - h \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i^z$$

と書き直す。¹ $\sigma = 2s$ に注意して、Jordan-Wigner 変換は

$$\begin{aligned}\sigma_j^+ &= 2 \exp\left(i\pi \sum_{k=1}^{j-1} c_k^\dagger c_k\right) c_j^\dagger = 2(-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{j-1}} c_j^\dagger \\ \sigma_j^- &= 2c_j \exp\left(-i\pi \sum_{k=1}^{j-1} c_k^\dagger c_k\right) = 2c_j (-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{j-1}} \\ \sigma_j^z &= 2c_j^\dagger c_j - 1\end{aligned}$$

によりスピン $1/2$ をフェルミオンへ移す変換である。ここに $n_k = c_k^\dagger c_k$ はサイト k のフェルミオン数演算子で、固有値は $0, 1$ のいずれか。最右辺の記法を用いると $s_j^x = s_j^+ + s_j^- = (-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{j-1}} (c_j^\dagger + c_j)/2$ の形で書けるので、Hamiltonian は

$$H_{\text{Ising}} = -J \sum_{j \in \Lambda} \left(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j + c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger + c_{j+1}^\dagger c_j \right) - 2h \sum_{j \in \Lambda} \left(c_j^\dagger c_j - \frac{1}{2} \right)$$

の2次形式になる。

j サイトと $j+1$ サイトの演算子が入り混じっているので、周期境界条件のもとで Fourier 変換する。Fock 空間への作用を考慮すると、 $n = n_1 + n_2 + \dots + n_L$ を全粒子数として、

$$\begin{aligned}\sigma_L^x \sigma_1^x &= (-1)^{n_1+n_2+\dots+n_{L-1}} (c_L^\dagger + c_L)(c_1^\dagger + c_1) = (-1)^n (-c_L^\dagger + c_L)(c_1^\dagger + c_1) \\ \sigma_L^x \sigma_{L+1}^x &= (-1)^{n-n_L} (c_L^\dagger + c_L)(-1)^n (c_{L+1}^\dagger + c_{L+1}) = (c_L^\dagger - c_L)(c_{L+1}^\dagger + c_{L+1})\end{aligned}$$

と書けるので、スピンに周期境界条件 $\sigma_j = \sigma_{j+L}$ を課すと、フェルミオンの周期境界条件は n の偶奇に応じて $c_{L+1} = (-1)^{n+1} c_L$ としなければならない。従って Fourier 変換

$$c_j = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k c_k e^{ikj}, \quad c_k = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j c_j e^{-ikj}$$

により生じる波数 k は、

$$k = \begin{cases} \frac{2\pi m - \pi}{L} & (n = 0 \pmod{2}) \\ \frac{2\pi m}{L} & (n = 1 \pmod{2}) \end{cases} \quad (m = 0, 1, \dots, L-1)$$

¹ 具体的にはユニタリ $\bigotimes_i (\sigma_i^x + \sigma_i^z)/\sqrt{2}$ で Hamiltonian を挟む。

に値をとる。Hamiltonian の Fourier 空間での表現は

$$\begin{aligned}
 H_{\text{Ising}} &= -J \sum_k \left((e^{ik} + e^{-ik}) c_k^\dagger c_k + (e^{ik} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + e^{-ik} c_{-k} c_k) \right) - 2h \sum_k \left(c_k^\dagger c_k - \frac{1}{2} \right) \\
 &= -\frac{J}{2} \sum_{k \neq 0, \pi} \left[2 \cos k (c_k^\dagger c_k + c_{-k}^\dagger c_{-k}) + (e^{ik} c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + e^{-ik} c_{-k}^\dagger c_k^\dagger) \right. \\
 &\quad \left. + (e^{-ik} c_{-k} c_k + e^{ik} c_k c_{-k}) \right] - h \sum_{k \neq 0, \pi} \left(c_k^\dagger c_k + c_{-k}^\dagger c_{-k} - 1 \right) + H_0 + H_\pi \\
 &= -J \sum_{k \neq 0, \pi} \left[\cos k (c_k^\dagger c_k - c_{-k} c_{-k}^\dagger + 1 + 1) + i \sin k (c_k^\dagger c_{-k}^\dagger + c_{-k} c_k) \right] \\
 &\quad - h \sum_{k \neq 0, \pi} (c_k^\dagger c_k - c_{-k} c_{-k}^\dagger) + H_0 + H_\pi \\
 &= - \sum_{k \neq 0, \pi} \left[\begin{pmatrix} c_k^\dagger & c_{-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J \cos k + h & iJ \sin k \\ -iJ \sin k & -J \cos k - h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_k \\ c_{-k}^\dagger \end{pmatrix} + 2 \cos k \right] \\
 &\quad + H_0 + H_\pi.
 \end{aligned}$$

第 2 行では k の昇順の総和と降順の総和を組み合わせている。ここに、

$$H_0 = -2(J + h)c_0^\dagger c_0 + h, \quad H_\pi = 2(J - h)c_\pi^\dagger c_\pi + h$$

とした。行列部分の固有値は

$$\pm \epsilon(k) := \pm \sqrt{(J \cos k + h)^2 + (J \sin k)^2} = \pm \sqrt{J^2 + h^2 + 2Jh \cos k}$$

なので、熱力学極限では $|h/J| \neq 1$ のとき gapped, $|h/J| = 1$ のとき gapless がわかる。Bogoliubov 変換により適切な新しいフェルミオン演算子 $\tilde{\eta}_k$ を導入すると、 $k \neq 0, \pi$ について

$$\begin{aligned}
 &- \sum_{k \neq 0, \pi} \left[\epsilon(k) \tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k - \epsilon(k) \tilde{\eta}_{-k} \tilde{\eta}_{-k}^\dagger - J \cos k \right] \\
 &= - \sum_{k \neq 0, \pi} \left[\epsilon(k) (\tilde{\eta}_k^\dagger \tilde{\eta}_k + \tilde{\eta}_{-k}^\dagger \tilde{\eta}_{-k}) - \epsilon(k) - J \cos k \right]
 \end{aligned}$$

である。^{*2} この形状では粒子の生成によりエネルギーが減少するので、 $k \neq 0, \pi$ モードで粒子正孔変換 $\eta_k^\dagger = \tilde{\eta}_k$ を行うと^{*3}

$$\begin{aligned}
 H_{\text{Ising}} &= - \sum_{k \neq 0, \pi} \left[\epsilon(k) (\eta_k \eta_k^\dagger + \eta_{-k} \eta_{-k}^\dagger) - \epsilon(k) - J \cos k \right] + H_0 + H_\pi \\
 &= \sum_{k \neq 0, \pi} \left[\epsilon(k) (\eta_k^\dagger \eta_k + \eta_{-k}^\dagger \eta_{-k}) - \epsilon(k) + J \cos k \right] + H_0 + H_\pi
 \end{aligned}$$

を得る。

n が偶数のとき基底状態は $\eta_k |0\rangle = \eta_{-k} |0\rangle = c_0 |0\rangle = c_\pi |0\rangle = 0$ を満たす状態で、エネルギーは $\sum_k (-\epsilon(k) + J \cos k)$ である。 n が奇数のとき粒子を最低 1 つ生成しなければならず、基底状態は $\tilde{\eta}_0^\dagger |0\rangle$ で、基底エネルギーは $\sum_{k \neq 0, \pi} (-\epsilon(k) + J \cos k) - 2J$ である。 $c_0^\dagger = 1/\sqrt{L} \sum_j c_j^\dagger$ は Jordan-Wigner 変換前では $\sum_j \sigma_j^+$ に比例していたので、新たに得られた状態は全てのスピンが反転したものと解釈できる。

^{*2} 具体的には、

^{*3} $k = 0, \pi$ モードは後述する基底状態の物理的解釈が整合するように粒子正孔変換を行わない。

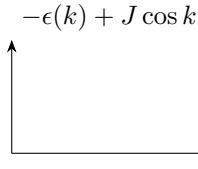
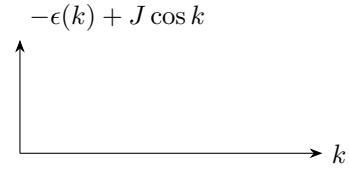
図 3.1: E_1 から生じる総和の範囲図 3.2: E_2 から生じる総和の範囲

図 3.3: (3.1.1) の計算で生じる総和が表す面積領域

図 3.4: 横磁場強磁性 Ising 模型の基底状態における 2 点相関関数

n の偶奇ごとに基底状態が現れるが、熱力学極限でそのエネルギー差を求めてみる。一見エネルギーギャップ $2J$ があるよう見えるが、総和の k が走る範囲が異なるためギャップの有無は非自明である。もしエネルギー差が 0 なら、gapped となる $|h/J| \neq 1$ でも熱力学極限で基底状態が二重縮退する。

$$E_1 - E_0 = \sum_{k=2\pi m/L \neq 0, 2\pi} (-\epsilon(k) + J \cos k) - 2J - \sum_{k=(2\pi m-\pi)/L} (-\epsilon(k) + J \cos k). \quad (3.1.1)$$

k の範囲に注意すると、総和はそれぞれ Fig. 3.3 に示す通りである。よって $L \rightarrow \infty$ の極限で

$$E_1 - E_2 =$$

すなわち $|h/J| < 1$ で基底状態は单一、 $|h/J| > 1$ で二重縮退する。境界値 $|h/J| = 1$ では先に考察した通りギャップレスになっていた。

以上の結果は Landau パラダイムに基づく相転移の存在を示している。まず $|h/J| < 1$ で基底状態は $|0\rangle$ で一意だった。実際、スピン反転の対称性変換 $U = \bigotimes_i \sigma_i^x$ を基底状態に作用させると、

$$H_{\text{Ising}} U |0\rangle = U H_{\text{Ising}} |0\rangle = E_0 U |0\rangle$$

となるため、 $U |0\rangle$ も基底状態になる。基底状態が一意であることから $U(1)$ 位相の自由度を除いて $U |0\rangle = |0\rangle$ が成り立つ。一方で $|h/J| > 1$ で現れた基底状態は $|0\rangle$ と $\tilde{\eta}_0^\dagger |0\rangle$ の 2 つで、後者は前者のスピン反転で表されている。熱力学極限を取る前はエネルギーが異なっていたことからもわかるとおり、この二つは線形独立で自発的に対称性を破っている。したがって M_z 期待値が非零になる基底の貼り方が存在する。

有限サイズ系の基底状態は対称性を破らないことが多いので、磁化を数値計算の指標とするのは好ましくない。そこで 2 点相関関数 $\langle \sigma_i^z \sigma_j^z \rangle$ の収束を調べると、Fig. 3.4 に示すように h による微分が $|h/J| = 1$ で発散することが示唆されている。^{*4 *5}

J を固定して h の値ごとに基底状態を調べると、 $|h/J| < 1$ で自発的に対称性が破れることが見て取れる。数値計算は DMRG を用いて行なった。

^{*4} に DMRG のコードを置いてある。

^{*5} Jordan-Wigner 変換した後の模型を Majorana 表示して得られる Kitaev の p 波超伝導模型を解析すれば、相転移の存在を厳密に示すことができる。しかしその結果を物理的に解釈しようとするとトポロジカル相転移の議論に立ち入らざるを得ず、本節の大筋から外れるのでここでは扱わない。

3.2 対称性の自発的破れによる相の分類

物性物理学においては、対象物が取り得る相を全て列挙する相の分類問題が一つの重要な課題である。

相を列挙する研究には大きく分けて二つの流儀がある。第一に、物質を固定し温度や圧力といったパラメーターを変化させ平衡状態になったときに該当物質がどの相に属するかを調べる、物質科学的な興味に基づくもの。どのような温度帯で固体、液体、気体が相転移するか、超伝導、磁性が発現するかといった問題を調べる。第二に、物質を問わずある種の対称性を持つ系が取り得る相を全て列挙する、理論的な興味に基づくもの。Landauにより対称性と相転移の関係が整理されて以来、この世に存在する物質が実現し得る相を網羅することが大きな目標になっている。研究の数で言えば物質の数だけ調査対象がある前者が圧倒的に多い。が、理論物理学において相の分類問題といったときは通常後者を指し、本稿でも後者を考察する。

対称性の破れによる相の分類は Landau 理論により整理されており、標語的には「相 = 対称性の線形既約表現」と言える。線形既約表現については appendix C を参照。

3.3 AKLT 模型

物理的に理解が容易な SPT 相の例として、AKLT 模型 [25, 26] を紹介する。1 次元格子 Λ の各点にスピン 1 の Hilbert 空間 \mathbb{C}^3 を配置し、全系の Hilbert 空間はテンソル積で与える。Hamiltonian は

$$H_{\text{AKLT}} = \sum_{i \in \Lambda} \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \frac{1}{3} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2 \right)$$

で与える。この模型の特徴として、

- 周期境界条件のもと、熱力学極限で励起ギャップがある
- 基底状態における期待値 $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle$ は $|i - j|$ について指数関数的に減衰する
- 周期境界条件で基底状態は縮退していない
- 開放端条件の基底状態では端にスピン 1/2 の自由度が現れ、端ごとに 2 重縮退する

がある。周期境界条件は全てのサイトがバルクになるため、上 3 つはバルクの性質を表している。バルクの振る舞いだけ見ると AKLT 模型の基底状態は横磁場が強い Ising 模型の基底状態に似ている。しかし系に境界を作った途端に振る舞いが大きく変わる。開放端条件で端から分数スピンが現れることは、

3.3.1 基底状態の具体的構成

AKLT 模型では基底状態を具体的に記述できる。各サイトにスピン 1 が住んでいるので 2 サイトの合成スピンが 0, 1, 2 のいずれかになることに注意すると、

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} &= \frac{1}{2}[(\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1})^2 - \mathbf{S}_i^2 - \mathbf{S}_{i+1}^2] \\ &= \frac{1}{2}[2(2+1)P_2[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] + 1(1+1)P_1[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] - 1(1+1) - 1(1+1)] \\ &= 3P_2[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] + P_1[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] - 2\end{aligned}$$

となる。ここに、 $P_J[\mathbf{K}]$ は合成スピン \mathbf{K} を大きさ J の空間に射影する演算子である ($\mathbf{K}^2 P_J[\mathbf{K}] = J(J+1)P_J[\mathbf{K}]$)。従って Hamiltonian は

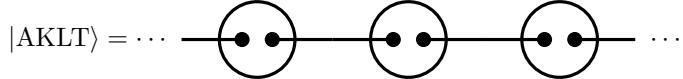
$$\begin{aligned}H_{\text{AKLT}} &= \sum_{i \in \Lambda} \left[3P_2[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] + P_1[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] - 2 + \frac{-3P_2[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] - 3P_1[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] + 4}{3} \right] \\ &= \sum_{i \in \Lambda} \left(2P_2[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] - \frac{2}{3} \right)\end{aligned}$$

となる。すなわち隣接サイトの合成スピンが全て 1 または 0 であれば基底状態になる。

トップダウンではあるが、具体的に基底状態を構成する。

- スピン 1 は 2 つのスピン 1/2 を対称に合成させて作れる
- 4 つのスピン 1/2 を合成するとき、一つでもシングレット (2 つのスピン 1/2 の合成スピン 0 状態) があると合成スピンが 1 または 0 になる

という事実に着目し、以下のような状態を与える。



ここに、実線で繋がれた 2 つの点はシングレットを表し、円で囲まれた 2 つの点は対称に合成されてスピン 1 を表す。円で囲まれた部分が 1 サイトを構成する。演算子を用いて明示的に記述するには、まずサイト i のスピン 1 を構成する 2 つの 1/2 スピンを対称化する演算子 \mathcal{S}_i を

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_i |\psi_{i,L}^\uparrow\rangle |\psi_{i,R}^\uparrow\rangle &= |\psi_{i,L}^\uparrow\rangle |\psi_{i,R}^\uparrow\rangle \\ \mathcal{S}_i |\psi_{i,L}^\uparrow\rangle |\psi_{i,R}^\downarrow\rangle &= \mathcal{S}_i |\psi_{i,L}^\downarrow\rangle |\psi_{i,R}^\uparrow\rangle = \frac{1}{2}(|\psi_{i,L}^\uparrow\rangle |\psi_{i,R}^\downarrow\rangle + |\psi_{i,L}^\downarrow\rangle |\psi_{i,R}^\uparrow\rangle) \\ \mathcal{S}_i |\psi_{i,L}^\downarrow\rangle |\psi_{i,R}^\downarrow\rangle &= |\psi_{i,L}^\downarrow\rangle |\psi_{i,R}^\downarrow\rangle\end{aligned}\quad (3.3.1)$$

により定義し、これにより

$$|\text{AKLT}\rangle = \left(\bigotimes_{i \in \Lambda} \mathcal{S}_i \right) \bigotimes_{i \in \Lambda} \frac{|\psi_{i,R}^\downarrow\rangle |\psi_{i+1,L}^\uparrow\rangle - |\psi_{i,R}^\uparrow\rangle |\psi_{i+1,L}^\downarrow\rangle}{\sqrt{2}}$$

と書ける。隣接 2 サイトの合成スピンは、シングレット (スピン 0) が 1 つ含まれるので 1 または 0 になる。よってこの状態は AKLT 模型の基底状態になる。このようにスピン一

重項の重ね合わせで記述される状態を一般に valence bond solid state (VBS 状態) と呼ぶ。CITE SOMETHING!!!!!!

AKLT 模型の基底状態はこのほかにないことが証明できる。方針は [27, 23] に従う。

Lem. 5: AKLT 相互作用の基底状態は AKLT 状態に限られる

周期境界条件下で $S = 1$ スピン鎖の状態 $|\psi\rangle$ が $P_2[S_i + S_{i+1}]|\psi\rangle = 0$ を満たすことと、任意の状態 $|\Xi\rangle$ によって

$$|\psi\rangle = (\mathcal{S}_i \otimes \mathcal{S}_{i+1}) \left[\left(|\psi_{i,R}^\downarrow\rangle \langle \psi_{i+1,L}^\uparrow| - |\psi_{i,R}^\uparrow\rangle \langle \psi_{i+1,L}^\downarrow| \right) \otimes |\Xi\rangle \right]$$

と書けることは等価。ここに \mathcal{S}_i は (3.3.1) で定義する。

この補題により全ての隣接サイトで $P_2[S_i + S_{i+1}]|\psi\rangle = 0$ を満たす AKLT 状態は AKLT 模型の unique な基底状態であることが従う。

Proof. 必要性は AKLT 状態を構成した直後の議論から従うので十分性を示す。全系サイト数を L とする。2 サイトにおけるスピン 1 の状態が張る Hilbert 空間は、合成スピン 0,1,2 の部分空間それぞれで次元 1, 3, 5 なので、 $P_2[S_i + S_{i+1}]|\psi\rangle = 0$ なる $|\psi\rangle$ が張る Hilbert 空間の次元は $(1+3) \times 3^{L-2} = 4 \times 3^{L-2}$ である。一方 $|\Xi\rangle$ の一般的な形は

$$|\Xi\rangle = |\psi_{i,L}^\sigma\rangle \langle \psi_{i+1,R}^{\sigma'}| \left(\bigoplus_{j \in \Lambda \setminus \{i, i+1\}} |\psi_j^{\Sigma_j}\rangle \right) \quad (\sigma, \sigma' \in \{\uparrow, \downarrow\}, \Sigma_j \in \{0, 1, 2\})$$

と書けて、これが入る Hilbert 空間の次元は $2 \times 2 \times 3^{L-2} = 4 \times 3^{L-2}$ となり、 $|\psi\rangle$ が張る Hilbert 空間の次元と一致するため、上述の形に限られる。□

3.3.2 励起ギャップの存在

基底状態と第 1 励起状態の間のエネルギーギャップが熱力学極限をとっても有限になることを示す。方針は [28] による。定数シフトによって最低エネルギーを厳密に 0 とした Hamiltonian H がある $\varepsilon > 0$ により任意の状態期待値で $\langle H^2 \rangle \geq \langle \varepsilon H \rangle$ とできる場合、第 1 励起状態のエネルギーは ε 以上である。逆にギャップレスなら任意の $\varepsilon > 0$ に対して熱力学極限で $\langle H^2 \rangle < \langle \varepsilon H \rangle$ となる状態が存在する。

本節では $P_{i,i+1} := P_2[S_i + S_{i+1}]$ と略記する。定数シフトにより基底エネルギーを 0 にした Hamiltonian を記号の濫用で $H_{\text{AKLT}} = \sum_{i \in \Lambda} P_{i,i+1}$ とする。サイト数 L が偶数の周期境界条件を仮定するが、奇数の場合も同様に議論できる。まず $P_{i,j}^2 = P_{i,j}$ を踏まえると

$$H_{\text{AKLT}}^2 = H_{\text{AKLT}} + \sum_{r=1}^{L/2} C_r \quad (3.3.2)$$

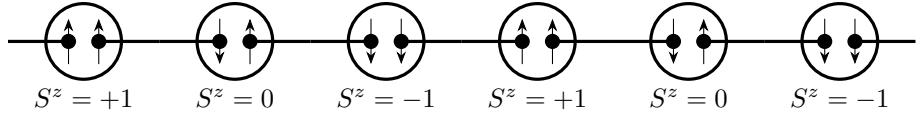


図 3.5: 基底状態における S^z 固有値の配位。ボンドの両側で $1/2$ スピンが反転するため、 $S^z = +1$ 同士や $S^z = -1$ 同士が $S^z = 0$ を挟んでも隣接することはない。

ここに

$$\begin{aligned} C_1 &= \sum_{i=1}^L (P_{i,i+1}P_{i+1,i+2} + P_{i+1,i+2}P_{i,i+1}), \\ C_r &= 2 \sum_{i=1}^L (P_{i,i+1}P_{i+r,i+r+1}) \quad (r = 2, 3, \dots, L/2 - 1), \\ C_{L/2} &= \sum_{i=1}^{L/2} P_{i,i+1}P_{i+L/2,i+L/2+1} \end{aligned}$$

とした。 $(3.3.2)$ の右辺第 2 項では $C_{L/2}$ の中の同じ項が 2 回ずつ現れることに注意する。また距離が 2 以上離れた射影演算子は可換なので $C_r \geq 0$ である。

3.3.3 基底状態における string order parameter

基底状態が单一で励起ギャップがあるため、基底状態は模型の対称性を全て保ち、??により 2 点相関関数 $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ は指数関数的に減衰することが保証されている。

しかし 2 サイトの合成スピンが 2 にならないので、スピン $S^z = +1$ が 2 つ隣接したり $S^z = -1$ が 2 つ隣接したりすることはない。また $S^z = 0$ を挟んでも $S^z = +1$ は連続しない (Fig. 3.5)。つまり $S^z = 0$ を無視すると反強磁的な秩序が存在することになる。この秩序は string order parameter

$$O_{i,j}^{\text{str}} := \left\langle S_i^z (-1)^{\sum_{k=i+1}^j S_k^z} S_j^z \right\rangle$$

により検出できる。局所演算子の 2 点相関関数の形ではないので、一般に指数減衰するとは限らない。

3.3.4 端状態

ここまで議論は全て周期境界条件のもとで行った。周期境界条件における AKLT 模型の特性は、理論的には整理されているが、string order parameter をはじめとして実験的検証に向きなものが多い。SPT 相を特徴として物理的に最も重要な性質は端状態の存在だろう。周期境界条件では全てのサイトがバルクになるが、開放端条件を課すと両端のサイトが境界になり、バルクとは異なる振る舞いを示す。

開放端条件の Hamiltonian は

$$H_{\text{AKLT}}^{\text{open}} = \sum_{i=1}^{L-1} \left(2P_2[\mathbf{S}_i + \mathbf{S}_{i+1}] - \frac{2}{3} \right)$$

で記述できる。Lem. 5 により基底状態は

$$|\text{AKLT}\rangle^{\text{OBC}} = \text{Diagram showing a chain of circles connected by horizontal lines, each circle containing two dots. Ellipses indicate the chain continues. The first and last circles have one dot on the left and one on the right, while intermediate circles have both dots on the same side (either both left or both right).}$$

と書ける。両端にはシングレットを組んでいないスピン $1/2$ が 1 つずつ残っている。両端のスピン $1/2$ は互いに独立に振る舞うので、基底状態は 4 重縮退する。スピン $1/2$ を合成して組んだ模型でエンタングルメントを切断しているので、端にスピン $1/2$ の自由度が現れることは自然に見える。しかし AKLT 模型はスピン 1 の系に定義されていた。スピン 1 の鎖を切断したことで端に「分数スピン」 $1/2$ の自由度が現れるのは非自明な現象だろう。

このように境界条件の取り方によって縮退度が変わることは、自明相や SSB 相では発生しない特筆すべき現象である。またこのような縮退度の変更がシステムサイズに依存せず、格子が埋め込まれている空間の形状 (周期境界条件なら S^1 , 開放端条件なら線分) のみに依存する点は特に注目に値する。物理現象が局所的性質だけでなく、系の大域的な位相的性質に依存することはトポロジカル相を特徴づける重要な要素である。

3.3.5 AKLT 状態の MPS 表現

AKLT 模型は MPS で基底状態を表現できる。

3.4 クラスター模型

AKLT 模型は物理的直感が働きやすい一方、計算を行う上ではやや複雑である。そこで SPT 相を考察する上で計算が最も簡単であり、以降たびたび応用するクラスター模型を導入する。⁶

1 次元格子 Λ の各点にスピン $1/2$ の Hilbert 空間 \mathbb{C}^2 を配置し、全系の Hilbert 空間はテンソル積で与える。 X_i, Z_i は $i \in \Lambda$ の上ではそれぞれ Pauli X , Pauli Z として作用し、その他の格子点には恒等演算子として作用する演算子とする。 $Z_i X_j = (-1)^{\delta_{i,j}} X_j Z_i$, $Z_i^2 = X_i^2 = 1$ である。

クラスター模型を

$$H_{\text{cluster}} := - \sum_{i \in \Lambda} Z_{i-1} X_i Z_{i+1}$$

で定義する。クラスター模型の各項は 2 乗すると 1 となるので、各項の固有値は ± 1 。また各項は互いに交換する。

$$[Z_{i-1} X_i Z_{i+1}, Z_{j-1} X_j Z_{j+1}] = 0 \quad (\forall i, j \in \Lambda).$$

従って各項の同時固有状態が取れて、基底状態は全ての項の +1 固有状態、第 1 励起状態はいずれか 1 つの項だけが -1 固有値を取る状態である。

特に周期境界条件、すなわち $Z_i = Z_{i+L}$, $X_i = X_{i+L}$ の同一視のもとでは、全系の Hilbert 空間の次元が $2^{|\Lambda|}$ であるのに対し、各項 ± 1 固有状態が張る空間の次元も $2^{|\Lambda|}$ なので、全ての固有値を指定して得られるエネルギー基底状態に縮退はない。またエネルギーギャップは $\Delta = 2$ となり、系の大きさに依存しない定数である。

⁶ クラスター状態については [29, 30] で導入されているらしい。模型としての初出は不明。

開放端条件を課して $\Lambda = \{1, 2, \dots, L\}$ とする。Hamiltonian は各項が 3 サイトに非自明に作用するので、

$$H_{\text{open}} = - \sum_{i=2}^{L-1} Z_{i-1} X_i Z_{i+1}$$

と修正される。Hamiltonian の中に項は $L - 2$ 個しかないので、全ての項の固有値を指定しても 2^2 次元が余分に現れ、基底状態は 4 重縮退する。

縮退の起源を探るために、微小磁場を両端のスピンに加えて

$$H_{\text{open}}(h) := H_{\text{open}} - h(Z_1 + Z_L)$$

とする。磁場項は H_{open} 各項と交換するため、やはり同時固有状態が取れる。 $h > 0$ の場合、両端の Z_1, Z_L 固有値を $+1$ とすることで基底状態になり、ギャップ $2h$ が開いて縮退が解ける。

磁場の導入により縮退が解けるこの状況は SSB に似ている。クラスター模型にはスピン反転対称性 $X_i \mapsto X_i, Z_i \mapsto -Z_i$ がある。さらに、スピン反転対称性は偶数サイトのみに作用させるものと奇数サイトのみに作用させるものに分割して

$$U_{\text{odd}} = \prod_{i \in \Lambda: \text{odd}} X_i, \quad U_{\text{even}} = \prod_{i \in \Lambda: \text{even}} X_i$$

としても良い。⁷ スピン反転は \mathbb{Z}_2 で表せるので、クラスター模型は対称性として $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ を有する。開放端条件における両端のスピンの縮退は、この $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ の自発的破れとして解釈できる。一方、バルクのスピンの状態は周期境界条件の場合と完全に同じであるため、対称性を破ることはない。

このように、周期境界条件では基底状態が縮退せずギャップが開いていた模型が、開放端条件では端の自由度が対称性を自発的に破り縮退するという挙動は Ising 模型で現れなかった。しかも以上の議論は系の大きさには依存せず、純粋に形状のみに依存している。系の挙動が局所的な情報だけでなく格子系全体の形状に依存するため、クラスター模型は何かしらトポロジカルな性質を有していることが期待される。

クラスター模型が AKLT 模型と同様のトポロジカルネスを持つことは、string order parameter の存在からも確認できる。

$$O_{i,j}^{\text{loc}} := Z_i Z_j$$

$$O_{i,j}^{\text{str}} := \begin{cases} Z_i \left(\prod_{k=i+1}^{j-1} X_k \right) Z_j & (i \neq j \pmod{2}) \\ Z_i Z_{i+1} \left(\prod_{k=i+1}^{j-1} X_k \right) Z_{j-1} Z_j & (i = j \pmod{2}) \end{cases}$$

i が十分バルクにあれば、 $O_{i,j}^{\text{loc}}$ の期待値は

$$\langle O_{i,j}^{\text{loc}} \rangle_{\text{cluster}} = \langle (Z_{i-1} X_i Z_{i+1}) O_{i,j}^{\text{loc}} \rangle_{\text{cluster}}$$

$$= - \langle O_{i,j}^{\text{loc}} (Z_{i-1} X_i Z_{i+1}) \rangle_{\text{cluster}}$$

を満たすので 0 となる。一方で string order parameter の期待値は

$$\langle O_{i,j}^{\text{str}} \rangle_{\text{cluster}} = \left\langle \prod_{k=i+1}^{j-1} Z_{k-1} X_k Z_{k+1} \right\rangle_{\text{cluster}} = 1$$

⁷ 奇数サイトの周期境界条件では $U_{\text{odd}} = U_{\text{even}}$ となり、全スピン反転を分割できない。以下議論を簡単にするためこの場合は除外する。

と、 i, j の距離に依存しない。これは AKLT 模型における string order parameter と同様の振る舞いである。

Ising 模型とクラスター模型の離散的な区別は、二つの模型を連続的につなぐことでより明白に理解できる。 $\lambda \in [0, 1]$ をパラメーターとして

$$H(\lambda) = \lambda H_{\text{Ising}} + (1 - \lambda) H_{\text{cluster}}$$

を与える。 $\lambda = 0$ で Ising 模型、 $\lambda = 1$ でクラスター模型になるため、ある種の摂動によって二つの模型が繋がれていると理解される。開放端条件の縮退度などの離散不变量が $\lambda = 0, 1$ で異なるため、途中に離散不变量が不連続に変わる相転移点があることが期待される。実際、 $H(\lambda)$ のギャップをプロットすると図のようになる。

3.5 SPT 相の物理的定義

3.6 SPT 相の分類

SPT 相はその名の通り物質の相である。

本節の議論は [31] に従う。

はじめに基底状態を与える並進対称な MPS を定義する。上述のように境界条件によって物理が変わることを踏まえ、 L サイトの MPS テンソルに加えて境界条件を制御する virtual なテンソル X を加えて

$$|\psi_{A,X}^L\rangle = \sum_{i_k} \text{Tr}[XA^{i_1}A^{i_2}\cdots A^{i_L}] |i_1, i_2, \dots, i_L\rangle$$

とする。 $A = \sum_i A^i \otimes |i\rangle$ は MPS テンソルで、 A^i はボンド次元 D 次元の行列である。 X として任意の $D \times D$ 行列を与えることで、様々な境界条件を表現できる。 $X = 1_D$ のときは周期境界条件に対応する。 X を任意にとって得られる集合を

$$\mathcal{S}_A^L := \{|\psi_{A,X}^L\rangle \mid X \in \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})\}$$

とする。任意の MPS テンソルは連結することで injective になり、また熱力学極限で異なる MPS は比例するか直交するので、 A として injective なものを考え、異なる MPS は直交するとしても一般性を失わない (cf. ??)。

MPO も同様に

$$O_{T,B}^L := \sum_{i_k, j_k} \text{Tr}[BT^{i_1, j_1}T^{i_2, j_2}\cdots T^{i_L, j_L}] |i_1, i_2, \dots, i_L\rangle \langle j_1, j_2, \dots, j_L|$$

とする。 $T = \sum_{i,j} T^{i,j} \otimes |i\rangle \langle j|$ は MPO テンソル。MPS の場合と同様に T は injective としてもよい。異なる MPO テンソルをラベル $\{a, b, \dots\}$ で区別して T_a などと表し、ボンド次元を χ_a などと表す。MPO についても

$$\mathcal{A}_T^L := \{O_{T,B}^L \mid B \in \text{Mat}_{\chi \times \chi}(\mathbb{C}), O_{T,B}^L\}$$

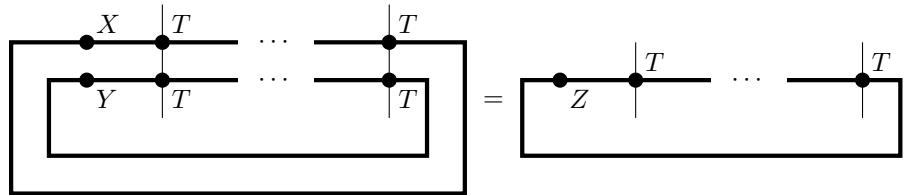
とする。

3.6.1 MPO の満たす代数

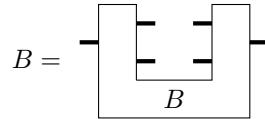
MPO が対称性を表すように、任意の $X, Y \in \text{Mat}_{\chi \times \chi}(\mathbb{C})$, 任意の L に対して

$$O_{T,X}^L O_{T,Y}^L = O_{T,Z}^L$$

なる Z が存在することを要請する。図式で書くと



と表せる。^{*8}この式は二つのテンソル X, Y を Z に移す線形変換とみなせるので、 $B(X \otimes Y) = Z$ と書く。図式で表すと



のように、内側に $X \otimes Y$ を入れると Z になる。 U 字型の B の右側から生えている 3 本を 1 本に、左側の 3 本を 1 本にまとめて行列とみなせば、ランク分解??により $B = \sum_{\mu} W^{\mu} \otimes V^{\mu}$ と書ける。

$$B = \boxed{\begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \text{---} \\ | \\ \text{---} \\ B \end{array}} = \boxed{\begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ W \end{array}} \quad \boxed{\begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ V \end{array}} = \sum_{\mu} \boxed{\begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \mu \end{array}} \quad \boxed{\begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \mu \end{array}}$$

μ が新たに挿入したボンド変数である。左右の 3 脚テンソルをそれぞれフュージョンテンソルと呼ぶ。後の議論を簡単にするため、 μ に対応する新たなボンドだけでなく、フュージョンテンソルの全てのボンドで成分を指定する。具体的には、射影演算子 P_a, P_b, P_c を用いて

$$W_{ab}^{c,\mu} = P_c W^{\mu} (P_a \otimes P_b) = c \boxed{\begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \mu \\ --- \\ b \end{array}}^a$$

のように表す。ランク分解は一意ではなく、

$$W_{ab}^{c,\mu} \rightarrow \sum_{\mu'} (Y_{ab}^c)_{\mu'}^{\mu} W_{ab}^{c,\mu},$$

$$V_{ab}^{c,\mu} \rightarrow \sum_{\mu'} (\hat{Y}_{ab}^c)_{\mu'}^{\mu} V_{ab}^{c,\mu}$$

のゲージ変換自由度が残されている。ゲージ Y_{ab}^c は μ のボンドを足とする行列であり、 a, b, c を定めるごとに行列として 1 つに定まる。 \hat{Y}_{ab}^c は Y_{ab}^c の逆行列である。上述の図で

^{*8} chapter 2 では行列を黒丸で表したときはもっぱら対角行列を指していたが、ここでは X, Y, T いずれも対角に限らない一般のテンソルであることに注意。

表せば

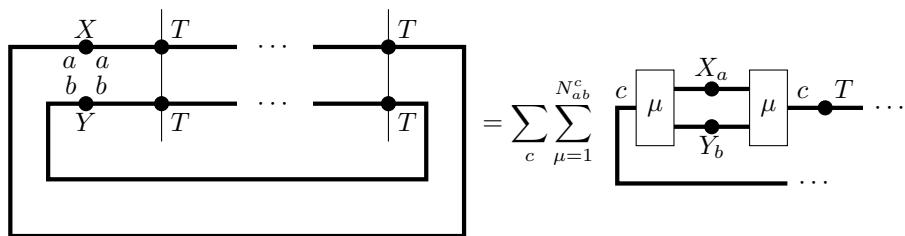
$$\begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{W} \\ | \\ \text{---} \end{array} \quad \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{V} \\ | \\ \text{---} \end{array} = \quad c \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{W} \\ | \\ b \\ | \\ a \\ | \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \boxed{V} \\ | \\ c \\ | \\ \text{---} \end{array} \quad (3.6.1)$$

に対応する。

a, b, c を指定して μ を走らせたとき、全ての $W_{ab}^{c,\mu}$ が線型独立になるとは限らない。線型独立な $W_{ab}^{c,\mu}$ を与える μ の最大ラベル数を N_{ab}^c とする。任意の $Z \in \text{Mat}_{\chi \times \chi}(\mathbb{C})$ に対して $Z_c = P_c Z P_c$ とすると、

$$Z_c = \sum_{a,b} \sum_{\mu=1}^{N_{ab}^c} W_{ab}^{c,\mu} (X_a \otimes Y_b) V_{ab}^{c,\mu}$$

と書ける。 X, Y として任意の行列をとって良いので、 X の代わりに $X_a = P_a X P_a$ を、 Y の代わりに $Y_b = P_b Y P_b$ を入れても良い。このとき、 $O_{T,X_a}^L O_{T,Y_b}^L = \sum_c O_{T,Z_c}^L$ は



とかけて、これが任意の X, Y と任意の長さで成り立つので、MPO テンソル T の合成は

$$\begin{array}{c} \text{Diagram 1} \\ \hline \text{Diagram 2} \end{array} = \sum_{\mu} \quad \begin{array}{c} \text{Diagram 3} \\ \hline \text{Diagram 4} \end{array} \quad (3.6.2)$$

とできる。特に $L = 1$ では

$$\begin{array}{c} a \\ \bullet \\ a \\ \hline b \\ \bullet \\ b \end{array} = \sum_c \sum_{\mu=1}^{N_{ab}^c} \begin{array}{c} a \\ b \\ \hline \mu \\ c \\ | \\ c \\ \mu \\ b \end{array}$$

なので、 $L = 2$ の (3.6.2) 左辺にこれを用いると

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \text{---} \\ | \\ \text{---} \\ | \\ \text{---} \end{array} = \sum_{c,d} \sum_{\mu,\nu=1}^{N_{ab}^c} \begin{array}{ccccccccc} a & & & c & & a & & d & a \\ \text{---} & & & | & & \text{---} & & | & \text{---} \\ | & & & \text{---} & & | & & \text{---} & | \\ | & & & | & & | & & | & | \\ b & & b & & c & & b & & b \\ \text{---} & & \text{---} & & \text{---} & & \text{---} & & \text{---} \\ | & & & | & & | & & | & | \\ \text{---} & & & \text{---} & & \text{---} & & \text{---} & | \\ | & & & | & & | & & | & | \\ b & & b & & b & & b & & b \end{array}$$

とできる。MPO テンソルが全て injective であると仮定しているので、

$$\delta_{c,d} \sum_{\mu,\nu=1}^{N_{ab}^c} \begin{array}{c} a \\ b \\ \hline \mu \\ \hline c \end{array} - \begin{array}{c} c \\ \hline c \end{array} - \begin{array}{c} c \\ \hline \mu \\ \hline a \\ b \end{array} = \sum_{\mu,\nu=1}^{N_{ab}^c} \begin{array}{c} a \\ b \\ \hline \mu \\ \hline c \end{array} - \begin{array}{c} c \\ \hline c \end{array} - \begin{array}{c} a \\ b \\ \hline \mu \\ \hline a \\ \nu \\ d \\ b \\ \hline d \\ \nu \\ b \end{array}$$

である。残っている左右のテンソルは線型独立としていたので、

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} \mu \begin{array}{c} a \\ \text{---} \\ b \end{array} \begin{array}{c} \nu \\ \text{---} \\ | \end{array} \begin{array}{c} d \\ \text{---} \\ | \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} c \delta_{c,d} \delta_{\mu,\nu} \quad (3.6.3)$$

を得る。

3本のボンドについて、上から順に潰すのと下から順に潰すのとで結果が変わらないこと(結合律)を要請する。

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} \nu \begin{array}{c} \mu \\ \text{---} \\ \mu \end{array} \begin{array}{c} \nu \\ \text{---} \\ | \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} = \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} \nu \begin{array}{c} \mu \\ \text{---} \\ \mu \end{array} \begin{array}{c} \nu \\ \text{---} \\ | \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} \quad (3.6.4)$$

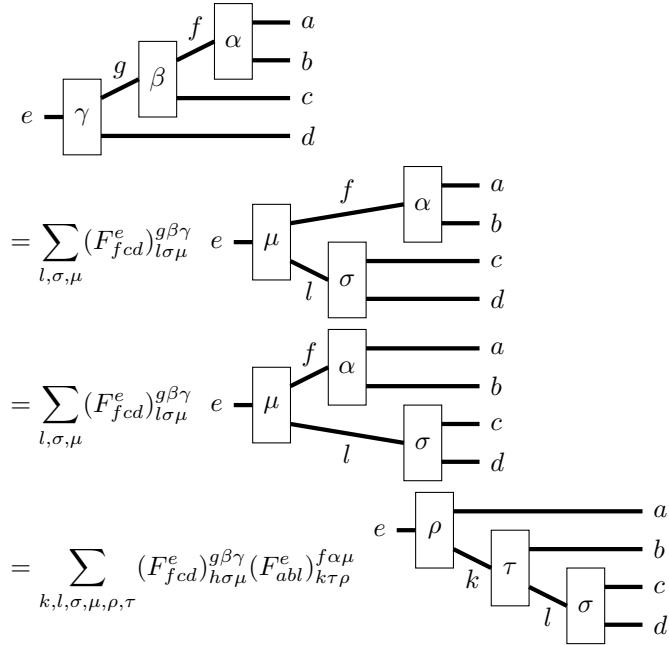
(3.6.3) を踏まえるとこれは自明だが、左半分にだけ着目すると、

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} \nu \begin{array}{c} e \\ \text{---} \\ \mu \end{array} \begin{array}{c} a \\ \text{---} \\ b \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} c = \sum_{f,x,\eta} (F_{abc}^d)_{fx\eta}^{e\mu\nu} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} \eta \begin{array}{c} f \\ \text{---} \\ \chi \end{array} \begin{array}{c} a \\ \text{---} \\ b \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} c \quad (3.6.5)$$

のような変換の自由度が許される。(3.6.12) 右辺の係数は F -シンボルと呼ばれる。

(3.6.4) 両辺の右半分についても同様の係数が現れるが、(3.6.3) を課すことで F -シンボルを打ち消すように調整されるので、以降左半分から生じる F -シンボルのみを考えることにする。ボンド4本の結合の組み換えを考えると、

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} \gamma \begin{array}{c} g \\ \text{---} \\ \beta \end{array} \begin{array}{c} f \\ \text{---} \\ \alpha \end{array} \begin{array}{c} a \\ \text{---} \\ b \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} c \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} d = \sum_{h,\lambda,\mu} (F_{abc}^g)_{h\lambda\mu}^{f\alpha\beta} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} \gamma \begin{array}{c} g \\ \text{---} \\ \mu \end{array} \begin{array}{c} h \\ \text{---} \\ \lambda \end{array} \begin{array}{c} a \\ \text{---} \\ b \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} c \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} d = \sum_{h,k,\lambda,\mu,\nu,\rho} (F_{abc}^g)_{h\lambda\mu}^{f\alpha\beta} (F_{ahd}^e)_{k\nu\rho}^{g\mu\gamma} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} \rho \begin{array}{c} h \\ \text{---} \\ k \end{array} \begin{array}{c} \nu \\ \text{---} \\ \tau \end{array} \begin{array}{c} a \\ \text{---} \\ b \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} c \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} d = \sum_{h,k,l,\lambda,\mu,\nu,\rho,\sigma,\tau} (F_{abc}^g)_{h\lambda\mu}^{f\alpha\beta} (F_{ahd}^e)_{k\nu\rho}^{g\mu\gamma} (F_{bcd}^k)_{l\sigma\tau}^{h\lambda\nu} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} \rho \begin{array}{c} h \\ \text{---} \\ k \end{array} \begin{array}{c} \tau \\ \text{---} \\ l \end{array} \begin{array}{c} \sigma \\ \text{---} \\ \sigma \end{array} \begin{array}{c} a \\ \text{---} \\ b \end{array} \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} c \begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \square \end{array} d$$



の 2 通りの変換がある。互いの最左辺が同一なので最右辺も等価でなければならない。したがって F -シンボルは

$$\sum_{h,\lambda,\mu,\nu} (F^g_{abc})^{f\alpha\beta}_{h\lambda\mu} (F^e_{ahd})^{g\mu\gamma}_{k\nu\rho} (F^k_{bcd})^{h\lambda\nu}_{l\sigma\tau} = \sum_{\mu} (F^e_{fcd})^{g\beta\gamma}_{h\sigma\mu} (F^e_{abl})^{f\alpha\mu}_{k\tau\rho} \quad (3.6.6)$$

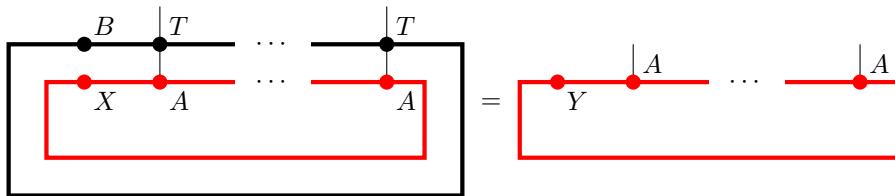
の pentagon identity を満たさなければならない。ゲージ変換 (3.6.1) により F -シンボルも

$$(F^d_{abc})^{e\mu\nu}_{f\chi\eta} \rightarrow (F^d_{abc})^{e\mu'\nu'}_{f\chi'\eta'} (Y^e_{ab})^{\mu}_{\mu'} (Y^d_{ec})^{\nu}_{\nu'} (\hat{Y}^f_{bc})^{\chi'}_{\chi} (\hat{Y}^d_{af})^{\eta'}_{\eta} \quad (3.6.7)$$

と変更を受けるが、これは (3.6.12) のようなボンドの切り替えにより生じるものではなく、フュージョンテンソル単体の基底の変換に過ぎないため、定義の式で得ようとしている情報ではない。そこで F -シンボルと言ったときは (3.6.7) によるゲージ変換を同一視した同値類を指すことにする。

3.6.2 MPO で対称な MPS

MPS が MPO で対称であるとは、任意の長さ L に対して $\mathcal{A}_T^L \cdot \mathcal{S}_A^L = \mathcal{S}_A^L$ が成り立つことである。より具体的には、 $X \in \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$, $B \in \text{Mat}_{\chi \times \chi}(\mathbb{C})$ から MPO \mathcal{A}_T^L と MPS \mathcal{S}_A^L を構成したとき、常に $Y \in \text{Mat}_{D \times D}(\mathbb{C})$ が存在して



が成り立つことをいう。MPS とそのボンドを赤で、MPO とそのボンドを黒で描いている。Sec. 3.6.1 の議論をそのまま繰り返すことで、3 脚のアクションテンソル $V_{ax}^{y,i}$:

$\mathbb{C}^{\chi_a} \otimes \mathbb{C}^{D_X} \rightarrow \mathbb{C}^{D_Y}$ と $\hat{V}_{ax}^{y,i} : \mathbb{C}^{D_X} \rightarrow \mathbb{C}^{\chi_a} \otimes \mathbb{C}^{D_Y}$ が

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ | \\ \bullet \quad a \\ | \\ \text{---} \\ | \\ \bullet \quad x \end{array} = \sum_{i,y} \begin{array}{c} a \\ | \\ i \quad y \quad y \quad i \\ | \\ x \quad x \end{array} \quad (3.6.8)$$

を満たすように構成される。 a, x, y を決めるごとに線型独立なアクションテンソルが $M_{a,x}^y$ 個あるとすると、 $i, j = 1, \dots, M_{a,x}^y$ を走る。 a, x, y を決めるごとにゲージ変換

$$V_{ax}^{y,i} \rightarrow \sum_{i'} (X_{ax}^y)_{i'}^i V_{ax}^{y,i'}, \quad \hat{V}_{ax}^{y,i} \rightarrow \sum_{i'} (\hat{X}_{ax}^y)_{i'}^i \hat{V}_{ax}^{y,i'} \quad (3.6.9)$$

の自由度がある。(3.6.3) と同様にして

$$\begin{array}{c} a \\ | \\ y \quad i \quad j \quad z \\ | \\ x \end{array} = \underline{z} \delta_{i,j} \delta_{y,z}$$

が成り立つ。結合律により L -シンボル

$$\begin{array}{c} a \\ | \\ y \quad i \quad z \quad j \quad x \\ | \\ b \end{array} = \sum_{c,\mu,k} (L_{abx}^y)_{c,k\mu}^{z,ij} \begin{array}{c} a \\ | \\ y \quad k \quad c \quad \mu \\ | \\ b \quad x \end{array}$$

が定義される。独立基底の個数を数えると、

$$\sum_z M_{a,z}^y M_{b,x}^z = \sum_c N_{ab}^c M_{c,x}^y \quad (3.6.10)$$

が成り立つ。 F -シンボルと同様に 4 本のボンドの組み替えを考えることで、pentagon identity

$$\sum_{d,n,\eta,\chi} (L_{abt}^y)_{d,n\eta}^{z,ij} (L_{dcx}^y)_{e,m\chi}^{t,nk} (F_{abc}^e)_{f,\nu\mu}^{d,\chi\eta} = \sum_l (L_{bcx}^z)_{f,l\mu}^{t,jk} (L_{afx}^y)_{e,m\nu}^{z,il} \quad (3.6.11)$$

が要請される。ゲージ変換 (3.6.9) はやはりアクションテンソル単体の基底変換に過ぎないため、 L -シンボルのゲージ変換

$$(L_{abx}^y)_{c,k\mu}^{z,ij} \rightarrow \sum_{i',j',k',\mu'} (X_{az}^y)_{i'}^i (X_{bx}^z)_{j'}^j (\hat{X}_{cx}^y)_{k'}^k (\hat{Y}_{ab}^c)_{\mu'}^\mu (L_{abx}^y)_{c,k'\mu'}^{z,i'j'}$$

を同一視した同値類を L -シンボルと呼ぶこととする。

3.6.3 例

例 1: SPT 相

SPT 相、すなわち基底状態が单一 ($M_{a,x}^y = \delta_{x,y}$) の場合を例にする。(3.6.10) により $\sum_{c=1}^{\chi} N_{ab}^c = 1$ すなわち a, b のフュージョンで現れる c はただ一つ c_{ab} である。injective ブロック x が单一であることを念頭に、 L -シンボルは

$$\begin{array}{c} a \\ | \\ x \quad i \quad i \quad x \\ | \\ b \quad x \\ | \\ x \end{array} = \sum_{c=1}^{\chi} \sum_{\mu=1}^{N_{ab}^c} (L_{abx}^x)_{c,x\mu}^{x,ii} \begin{array}{c} a \\ | \\ x \quad i \quad c \quad \mu \\ | \\ b \quad x \\ | \\ x \end{array}$$

$$= (L_{abx}^x)_{c_{ab},x\mu}^{x,ii} \begin{array}{c} a \\ | \\ x \quad i \quad c_{ab} \quad \mu \\ | \\ b \quad x \\ | \\ x \end{array}$$

で与えられる。すなわち、

$$\begin{array}{ccc} \text{Diagram showing a circuit with input } x, \text{ output } a, b, x; \text{ a red box labeled } i; \text{ a white box labeled } \mu; \text{ and a label } c_{ab} & = & \text{Diagram showing a circuit with input } x, \text{ output } a, b, x; \text{ two red boxes labeled } i; \text{ and a label } x \end{array}$$

を得る。これにより pentagon identity (3.6.11) は

$$(F_{abc}^e)_{f,x\eta}^{d,\nu\mu} = \frac{(\hat{L}_{abx}^x)_{d,x\mu}^{x,ii} (\hat{L}_{dcx}^x)_{e,x\nu}^{x,ii}}{(\hat{L}_{bcx}^x)_{f,x\chi}^{x,ii} (\hat{L}_{afx}^x)_{e,x\eta}^{x,ii}}$$

と簡略化される。NOT CHECKED YET!!! F -シンボルは 1 とゲージ同値になっているので自明。すなわち、非自明な MPO による作用で不变にならない单一相の injective MPS は存在しない。逆に、 F -シンボルが非自明な MPO と交換する Hamiltonian は unique gapped な基底状態を持たない。

例 2: 群作用による MPO と MPS

MPO の代数のブロックが有限群 G の群元でラベルされている場合を考える。フュージョンテンソルの作用には

$$\begin{array}{ccc} \text{Diagram showing two black dots labeled } g \text{ and } h \text{ connected by a vertical line} & = & \text{Diagram showing a block labeled } g \text{ followed by a black dot labeled } gh \text{ followed by a block labeled } h \end{array}$$

を要請する。この設定により、対称性が on-site に作用する G のユニタリ表現 $O_g = (u_g)^{\otimes L}$ ($g \in G$) で与えられる場合の SPT が完全に分類される。ブロックは 1 次元で フュージョンテンソルは自明で $N_{g,h}^k = \delta_{gh,k}$ である。^{*9} F -シンボルは

$$\begin{array}{ccc} \text{Diagram showing a block labeled } gh \text{ followed by a block labeled } g \text{ and } h \text{ connected by a vertical line} & = & \omega(g, h, k) \quad \text{Diagram showing a block labeled } g \text{ followed by a block labeled } hk \text{ followed by a block labeled } h \text{ connected by a vertical line} \\ g \quad h \quad k & & g \quad hk \quad h \quad k \end{array} \quad (3.6.12)$$

の形で書くことができ、pentagon identity (3.6.6) は

$$\omega(g, h, k)\omega(g, hk, l)\omega(h, k, l) = \omega(gh, k, l)\omega(g, h, kl)$$

である。ゲージ $Y_{g,h}^{gh} =: \beta_{g,h}$ によって F -シンボルには

$$\omega(g, h, k) \sim \omega(g, h, k) \frac{\beta_{h,k}\beta_{g,hk}}{\beta_{gh,k}\beta_{g,h}}$$

の同一視が入る。この 2 本の式は 3 次の群コホモロジーの定義そのものなので、 F -シンボルの同値類は $H^3(G, \mathbb{C}^*)$ によって分類される。

この MPO $\{O_g\}_{g \in G}$ の作用によって不变な MPS の張る部分空間を考える。単位元は対称性操作を何もしないことに対応するため、 O_e の作用は自明でなければならず、 $M_{e,x}^y = \delta_{x,y}$ である。MPS の重複度は (3.6.10) により

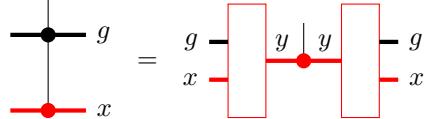
$$\sum_z M_{g,z}^y M_{h,x}^z = M_{gh,x}^y$$

^{*9} 単位元の作用は $O_e O_g = O_g O_e = O_g$ だが、MPO の表示としては一般に relevant な PBC subspace への射影である。?? したがって O_g は表現 $O_e \cdot \mathcal{H}_{loc}^{\otimes L}$ を組む。

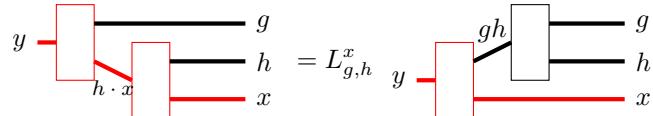
となるため、行列

$$M_g := \sum_{x,y} M_{g,x}^y |y\rangle\langle x|$$

は G の線形表現を組む。 M_g は可逆で、そのものも逆行列も行列要素 $M_{g,x}^y$ が非負整数なので、各行・各列にただ一つの 1 が存在する置換行列である。よって (3.6.8) の帰結として、 $g \in G$ と MPS block x を決めるごとに



を満たす MPS ブロック y がただ一つ存在する。MPS ブロックへの群作用 $g \cdot x = y$ とみなすことができるので、アクションテンソルを $V_{gx}^y = V_{g,x}$ と書くことにする。 L -シンボルも簡略化して



と書くことにする。Pentagon identity (3.6.11) は

$$L_{h,k}^x L_{g,hk}^x = \omega(g, h, k) L_{g,h}^{k \cdot x} L_{gh,k}^x$$

である。アクションテンソルのゲージ変換は $V_{g,x} \rightarrow \gamma_{g,x} V_{g,x}$ ($\gamma_{g,x} \in \mathbb{C}^*$) で表せるので、先ほどのフュージョンテンソルのゲージ β と合わせて

$$L_{g,h}^x \rightarrow L_{g,h}^x \frac{\gamma_{g,h \cdot x} \gamma_{h,x}}{\gamma_{gh,x} \beta_{g,h}}$$

の同一視が入る。

3.6.4 分類

Hamiltonian の対称性を MPO の言葉で書き換える。本節では周期境界条件における MPO (PBC MPO) で対称な系に興味があるが、ここでは任意の境界条件を課す。そこで対称性の定義を以下のようにする。

Def. 7: MPO を用いた Hamiltonian の対称性

周期境界条件の Hamiltonian H と fusion category の表現である MPO $\{O_a \mid a \in \mathcal{C}\}$ をとる。 $\forall a \in \mathcal{C}$ について $[H, O_a] = 0$ が成り立つとき、 H は \mathcal{C} に対して対称であるという。

局所項のたしあわせで書かれる gapped な周期境界条件の Hamiltonian H_0, H_1 を考える。

Def. 8

Hamiltonian H_0, H_1 が同じフュージョン圏 \mathcal{C} のもとで対称とする。

- 同じく局所項のたしあわせで書かれる gapped な周期境界条件の Hamilto-

nian $H(\gamma)$ が存在して、 $H(0) = H_0 |_{\mathcal{H}_0^{\otimes L}}, H(1) = H_1 |_{\mathcal{H}_1^{\otimes L}}$. ただし \mathcal{H}_p は局所 Hilbert 空間。

- Hamiltonian の経路 $H(\gamma)$ は \mathcal{C} の injective MPO 表現 $O_a = O_a^0 \oplus O_a^1 \oplus O_a^{\text{path}}$ と可換。

を満たすとき、 H_0, H_1 は同じ相に属すると言う。

(対称とは限らない) injective MPS により張られた部分空間から、その parent Hamiltonian を \mathcal{C} で対称にすることができる。

3.7 Decorated domain wall 構成

SPT 相を系統的に構成する方法として decorated domain wall construction [32] が知られている。

第4章

多極子対称性下のトポロジカル相

本章では空間位置に依存する対称性のもとでのトポロジカル相分類の最も簡単な例として、 $1+1$ 次元多極子対称性下の SPT 相の分類を取り上げる。多極子対称性 (multipole symmetry) とは通常の電荷だけでなく、双極子や四重極子などの高次多極子を保存する対称性である。電荷の運動に制限を与えるため、フラクトンを生じる例が多い。本章の内容は主に [33, 34] に基づく。

4.1 多極子対称性

電磁気学において、静電ポテンシャル ϕ の多重極展開は

$$\phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi\epsilon} \sum_{n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}} \frac{1}{x^{n+1}} \int d^3r \rho(\mathbf{r}) r^n P_n(\cos\theta)$$

と記述される。ここに ϵ は真空の誘電率、 $x = |\mathbf{x}|$ と $r = |\mathbf{r}|$ はベクトルの大きさ、 P_n は n 次の Legendre 多項式、 θ は \mathbf{x} と \mathbf{r} の間の角度である。簡単のため、電荷が直線上にのみ存在するとして直線上の静電ポテンシャルに着目すると、 n 次の多極子として

$$Q_n = \int dr \rho(r) r^n$$

を定義することで、Coulomb の法則を拡張した

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon} \sum_{n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}} \frac{Q_n}{r^{n+1}}$$

を得る。

後の議論のため 1 次元格子 $\Lambda \subset \mathbb{Z}$ に議論を移す。多極子電荷は

$$Q_n = \sum_{x \in \Lambda} \rho(x) x^n$$

で表される。例えば U(1) の n 次多極子を保存する対称性 (degree n multipole symmetry) を有するボゾン系の Hamiltonian は、decorated domain wall の構成法 [32] を用いて minimal に

$$\hat{H}_n = \sum_{x \in \Lambda} \prod_{y=0}^n \hat{b}_{x+y}^{(-1)^y \binom{n}{y}} + \text{h.c.}$$

図 4.1: dipole symmetry を有する 1 次元格子ボゾン系の理論 H_1 でのダイナミクス。

と書ける。[35] 実際、ボゾン系にて $\rho(x) = \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_x$ なので

$$[\hat{H}_n, \hat{Q}_m] = \sum_{x,y \in \Lambda} \prod_{z=0}^n \left[\hat{b}_{y+z}^{(-1)^z \binom{n}{z}}, x^m \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_x \right] + \text{h.c.}$$

となる。 $n = 1$ の dipole symmetry では

$$\hat{H}_1 = \sum_{x \in \Lambda} \hat{b}_{x-1}^\dagger \hat{b}_x^2 \hat{b}_{x+1}^\dagger + \text{h.c.}$$

となるが、これにより生成されるダイナミクス $e^{i\hat{H}_1 t}$ では Fig. 4.1 に示すように四重極子の生成と消失しか生じないことがわかる。特に、粒子が運動するときは必ず複数の粒子がペアを組んで逆向きに移動し、孤立粒子の運動が許されない。これはまさしくフラクトン系に度々現れる現象である。

以下、対称性 G を有限可換群とする。ボゾン系やスピン系といった模型の具体形に依存しない議論を行うために、 G の忠実な表現を用いる。有限可換群の基本定理から、 G は \mathbb{Z}_N の直積で表せる。 \mathbb{Z}_N の忠実な表現として Hilbert 空間を \mathbb{C}^N とする \mathbb{Z}_N qudit

$$X |n\rangle = |(n+1) \bmod N\rangle, \quad Z |n\rangle = \omega^n |n\rangle \quad (n \in \mathbb{Z}_N, \omega = e^{2\pi i/N})$$

を取る。以下は簡単のため $G = \mathbb{Z}_N$ とするが、直積群の場合は qudit のフレーバーを増やせば同じ議論が可能である。

空間 1 次元の格子 $\Lambda \subset \mathbb{Z}$ の各点に \mathbb{Z}_N qudit を配置する。全系の Hilbert 空間は $\prod_{x \in \Lambda} \mathbb{C}^N$ である。 $x \in \Lambda$ の qudit の演算子は X_x, Z_x で表し、 $Z_x X_y = \omega^{\delta_{x,y}} X_y Z_x$ である。

計算の利便性を考慮し、 G から構成される n 次の多極子対称性 (multipole symmetry) を

$$U_g^{(n)} := \prod_{x \in \Lambda} X_x^{x(x+1)\cdots(x+n-1)/n!}$$

で定義する。第一の注意として、右辺の指数 $x(x+1)\cdots(x+n-1)/n! = \binom{x+n-1}{n}$ は整数値関数である。また、任意の G 作用は $U_g^{(n)}$ の組み合わせで表せる。これは、一般に n 次までの整数値関数が $\binom{x+m-1}{m}$ ($m = 0, 1, \dots, n$) の整数係数の線型結合で一意に展開できる (Prop. 17) ことから示される。第三に、 $U_g^{(n)}$ は n 次の多極子を保存し、 $n+1$ 次の多極子を生成、消滅させる操作である。実際、 n 次多極子対称性を有する系の minimal な Hamiltonian をボゾン系で構成したのと同様に、qudit 系でも decorated domain wall を用いて

$$H_n = \sum_{x \in \Lambda} \prod_{y=0}^n Z_{x+y}^{(-1)^y \binom{n}{y}} + \text{h.c.}$$

とする。各項は X の固有空間における $n+1$ 次多極子の生成及び消滅を表している。 $m \leq n$ にて $[H_n, U_g^{(m)}] = 0$ となるが、一般に $m > n$ では交換しない。実際、

4.2 MPS を用いた多極子 SPT 相の分類

(1+1) 次元 SPT 相は MPS を用いて分類できる。本節では

4.2.1 多極子 SPT 相の MPS のゲージ

有限可換群の基本定理から、 G は \mathbb{Z}_N の直積で表せることを念頭に、以下簡単のため $G = \mathbb{Z}_N$ とする。直積因子が複数ある場合も議論は同様である。 G の忠実な表現として Hilbert 空間を \mathbb{C}^N とする \mathbb{Z}_N スピン系を 1 次元格子 Λ の各点に配置する。

$$X |n\rangle = |(n+1) \bmod N\rangle, \quad Z |n\rangle = e^{2\pi i n/N} |n\rangle$$

とし、 $ZX = e^{2\pi i/N} XZ$ である。

SPT 基底状態として MPS

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_{\{i_x\}} \text{Tr} [\dots A^{i_{x-1}} A^{i_x} A^{i_{x+1}} \dots] | \dots, i_{x-1}, i_x, i_{x+1}, \dots \rangle \\ &= \dots \xrightarrow{\quad} \boxed{A} \xrightarrow{\quad} \boxed{A} \xrightarrow{\quad} \boxed{A} \xrightarrow{\quad} \dots \end{aligned}$$

をとり、次数 r の多極子対称性

$$U_g^{(r)} = \prod_{x \in \Lambda} (g_x)^{x(x+1)\dots(x+r-1)/r!}$$

と並進対称性を要請する。並進対称性と次数 r の多極子対称性から低次の多極子対称性も自動的に満たされる:

$$U_g^{(r)} T (U_g^{(r)})^{-1} T^{-1} = \prod_{x \in \Lambda} g_x^{\binom{x+r-1}{r} - \binom{x+r-2}{r}} = \prod_{x \in \Lambda} g_x^{\binom{x+r-2}{r-1}} = U_g^{(r-1)}$$

帰納的に、次数 0 すなわち群作用が位置に依存しない一様な対称性も有する。MPS の基本定理によって、あるユニタリ $X_g^{(0)}$ が存在して

$$\xrightarrow{\quad} \boxed{A^{(i)}} \xrightarrow{\quad} \stackrel{g}{=} \xrightarrow{\quad} \boxed{X_g^{(0)\dagger}} \boxed{A^{(i)}} \boxed{X_g^{(0)}} \xrightarrow{\quad}$$

が成り立つ。 $\stackrel{g}{=}$ は両辺が $U(1)$ 位相因子を除いて等しいことを表し、 A の肩についている (i) はサイト番号を表す。並進対称性を仮定しているので全ての MPS テンソルを同一に $A^{(i)} = A^{(0)}$ とできることに注意。 $r = 1$ の dipole symmetry $U_g^{(1)}$ による作用は

$$\begin{aligned} &\dots \xrightarrow{\quad} \boxed{g^i} \xrightarrow{\quad} \boxed{g^{i+1}} \xrightarrow{\quad} \dots \\ &= \dots \xrightarrow{\quad} \boxed{(X_g^{(0)\dagger})^i} \xrightarrow{\quad} \boxed{A^{(i)}} \xrightarrow{\quad} \boxed{(X_g^{(0)})^i} \xrightarrow{\quad} \boxed{(X_g^{(0)\dagger})^{i+1}} \xrightarrow{\quad} \boxed{A^{(i+1)}} \xrightarrow{\quad} \boxed{(X_g^{(0)})^{i+1}} \xrightarrow{\quad} \dots \\ &= \dots \xrightarrow{\quad} \boxed{A^{(i)}} \xrightarrow{\quad} \boxed{X_g^{(0)\dagger}} \xrightarrow{\quad} \boxed{A^{(i+1)}} \xrightarrow{\quad} \boxed{X_g^{(0)\dagger}} \xrightarrow{\quad} \dots \end{aligned}$$

のように、MPS テンソルの間に $(X_g^{(0)})^\dagger$ が混じる。SPT 相では定義から基底状態が縮退しないので、

$$\boxed{- X_g^{(0)\dagger} \boxed{A^{(i)}} -} = \boxed{- X_g^{(1)\dagger} \boxed{A^{(x)}} \boxed{X_g^{(1)}} -} \quad (4.2.1)$$

が成り立つ。転送行列を用いた厳密な証明は appendix E.4 を参照。

同様にして帰納的にランク r のゲージが導出される。ランク $r-1$ までのゲージ $\{X_g^{(k)} \mid g \in G\}_{k=0,1,\dots,r-1}$ が存在すると仮定する。 r 次多極子対称性の作用により

$$U_g^{(r)} \sum \text{Tr}[\cdots A \cdots] |\cdots\rangle \doteq \sum \text{Tr} \left[\prod_{i=1}^L (X_g^{(0)\dagger})^{B_r(i)} A (X_g^{(0)})^{B_r(i)} \right] |\cdots\rangle$$

となるが、係数の Tr の中身は $B_r(i) := \binom{i+r-1}{r}$ を用いて

$$\begin{aligned} \prod_i (X_g^{(0)\dagger})^{B_r(i)} A (X_g^{(0)})^{B_r(i)} &= \prod_i (X_g^{(0)\dagger})^{-B_r(i-1)+B_r(i)} A \\ &= \prod_i (X_g^{(0)\dagger})^{B_{r-1}(i)} A \end{aligned} \quad (4.2.2)$$

と書ける。¹ 最後の等号では Pascal の等式

$$B_r(i+1) - B_r(i) = \binom{i+r}{r} - \binom{i+r-1}{r} = \binom{i+r}{r-1} = B_{r-1}(i+1)$$

を用いた。 $(4.2.1)$ を用いて

$$\prod_i (X_g^{(0)\dagger})^{B_{r-1}(i)} A \doteq \prod_i (X_g^{(1)\dagger})^{B_{r-1}(i)} A (X_g^{(1)})^{B_{r-1}(i)}$$

となり、 $(4.2.2)$ 左辺にてゲージのランクを 1 つ上げ、多項式 $B_r(i)$ の次数を 1 つ下げた形になる。帰納的に

$$\prod_i (X_g^{(0)\dagger})^{B_r(i)} A (X_g^{(0)})^{B_r(i)} \doteq \prod_i (X_g^{(r-1)\dagger})^{B_1(i)} A$$

を得る。基底状態が縮退を許さないことから

$$\boxed{- X_g^{(r-1)\dagger} \boxed{A^{(i)}} -} = \boxed{- X_g^{(r)\dagger} \boxed{A^{(x)}} \boxed{X_g^{(r)}} -} \quad (4.2.3)$$

によりランク r のゲージが定義できる。転送行列を用いた議論による厳密な証明は appendix E.4 を参照。

4.2.2 開放端条件への作用とゲージ自由度

SPT 相はバルクでは自明だが、境界に非自明な自由度を持つ。多極子 SPT でも非自明な自由度が現れる。

¹ ここではバルクに対する作用を考えているので、境界項は無視している。境界でもこの表式が整合するためには対称性の有限可換群 $G = \prod_i \mathbb{Z}_{N_i}$ の各直積因子に対して $L = 0 \pmod{N_i}$ を満たす必要がある。[36] では、周期境界条件の 1 次元系を幾つかの連結成分に分割してパッチごとに対称性を考慮する bundle symmetry を導入しており、境界項を無視する妥当性を考察している。

L を任意にとって具体的に $U_g^{(k)} |\psi\rangle$ の係数を計算すると、

$$\begin{aligned}
& \left(X_g^{(0)} \right)^{-B_k(1)} A^{(1)} \left(X_g^{(0)} \right)^{B_k(1)} \left(X_g^{(0)} \right)^{-B_k(2)} A^{(2)} \dots \\
& \quad \dots A^{(L-1)} \left(X_g^{(0)} \right)^{B_k(L-1)} \left(X_g^{(0)} \right)^{-B_k(L)} A^{(L)} \left(X_g^{(0)} \right)^{B_k(L)} \\
& = \left(X_g^{(0)} \right)^{-B_{k-1}(1)} A^{(1)} \left(X_g^{(0)} \right)^{-B_{k-1}(2)} A^{(2)} \dots \\
& \quad \dots A^{(L-1)} \left(X_g^{(0)} \right)^{-B_{k-1}(L)} A^{(L)} \left(X_g^{(0)} \right)^{B_k(L)} \\
& \doteq \left(X_g^{(1)} \right)^{-B_{k-1}(1)} A^{(1)} \left(X_g^{(1)} \right)^{B_{k-1}(1)} \left(X_g^{(1)} \right)^{-B_{k-1}(2)} A^{(2)} \left(X_g^{(1)} \right)^{B_{k-1}(2)} \dots \\
& \quad \dots \left(X_g^{(1)} \right)^{-B_{k-2}(L)} A^{(L-1)} \left(X_g^{(1)} \right)^{B_{k-2}(L)} \left(X_g^{(1)} \right)^{-B_{k-1}(L)} A^{(L)} \\
& \quad \times \left(X_g^{(1)} \right)^{B_{k-1}(L)} \left(X_g^{(0)} \right)^{B_k(L)} \\
& \quad \vdots \dots \\
& \doteq \left(X_g^{(l)} \right)^{-B_{k-l-1}(1)} A^{(1)} \left(X_g^{(l)} \right)^{-B_{k-l-1}(2)} A^{(2)} \dots \\
& \quad \dots A^{(L-1)} \left(X_g^{(l)} \right)^{-B_{k-l-1}(L)} A^{(L)} \prod_{n=0}^l \left(X_g^{(n)} \right)^{B_{k-n}(L)} \\
& \doteq \left(X_g^{(k-1)} \right)^\dagger A^{(1)} \left(X_g^{(k-1)} \right)^\dagger A^{(2)} \dots \\
& \quad \dots \left(X_g^{(k-1)} \right)^\dagger A^{(L-1)} \left(X_g^{(k-1)} \right)^\dagger A^{(L)} \prod_{n=0}^{k-1} \left(X_g^{(n)} \right)^{B_{k-n}(L)} \\
& \doteq \left(X_g^{(k)} \right)^\dagger A^{(1)} A^{(2)} \dots A^{(L)} \left(\prod_{n=0}^k \left(X_g^{(n)} \right)^{B_{k-n}(L)} \right).
\end{aligned}$$

よって対称性 $U_g^{(k)}$ の全系への作用が端にゲージとして局在する。

4.2.3 可換群多極子 SPT 相の分類

本節では簡単のため G を有限可換群とする。

■ゲージの交換関係の制限 1 次元 SPT 相の端に現れるゲージは G 射影表現であり、分類は $H^2(G, U(1))$ で与えられた（射影表現については appendix C.2 を参照）。 $X_g^{(k)}$ は群元 $g \in G$ とランク k の自由度があるので、この表示だけから推察すると、素朴には $r+1$ 種類の独立な G 作用がある対称性の射影表現、すなわち $G^{\times r}$ の射影表現になって、分類は $H^2(G^{\times(r+1)}, U(1))$ になると予想される。しかし対称性作用が端にゲージとして現れるので、 U の可換性は端のゲージの可換性に対応し、分類は制限される。具体的には、

$$\begin{aligned}
& X_h^{(l)\dagger} X_g^{(k)\dagger} A \cdots A \prod_{m=0}^k (X_g^{(m)})^{B_{k-m}(L)} \prod_{n=0}^l (X_h^{(n)})^{B_{l-n}(L)} \\
& = X_g^{(k)\dagger} X_h^{(l)\dagger} A \cdots A \prod_{n=0}^l (X_h^{(n)})^{B_{l-n}(L)} \prod_{m=0}^k (X_g^{(m)})^{B_{k-m}(L)}
\end{aligned} \tag{4.2.4}$$

を要請する。

G が有限可換群であることに注意して、

$$X_g^{(k)} X_h^{(l)} =: e^{i\theta_{g,h}(k,l)} X_h^{(l)} X_g^{(k)} \tag{4.2.5}$$

表 4.1: $r = 3$ のときの $\theta_{g,h}(k,l)$ の表。赤字で示した部分が独立な成分であり、他は (4.2.7) と (4.2.8) により決定される。

$k \setminus l$	0	1	2	3
0	0	0	0	$\theta(0,3)$
1	0	0	$-\theta(0,3)$	$\theta(1,3)$
2	0	$\theta(0,3)$	$-\theta(0,3) - \theta(1,3)$	$\theta(2,3)$
3	$-\theta(0,3)$	$2\theta(0,3) + \theta(1,3)$	$-\theta(0,3) - \theta(1,3) - \theta(2,3)$	$\theta(3,3)$

とおく。??でみたように、 $e^{i\theta_{g,h}(k,l)}$ は $H^2(G^{\times(r+1)}, U(1))$ と同型である。よって (4.2.4) を満たす θ を全て列挙すれば SPT 相を分類したことになる。対称性の可換性条件は

$$\exp \left[i \sum_{m=0}^k \sum_{n=0}^l \theta_{g,h}(m,n) B_{k-m}(L) B_{l-n}(L) - i\theta_{g,h}(k,l) \right] = 1 \quad (4.2.6)$$

と整理できる。以下の命題により条件は大幅に簡約される。

Prop. 8

(4.2.6) が任意の $L \in \mathbb{N}$ 及び $g, h \in G$ に対して成り立つことと、

$$\theta_{g,h}(m,n) = \theta_{g,h}(m+1,n) + \theta_{g,h}(m,n+1) \quad (\text{for } m, n < r) \quad (4.2.7)$$

$$\theta_{g,h}(m,n) = 0 \quad (\text{for } m+n < r) \quad (4.2.8)$$

が共に成り立つことは同値。

証明は技術的なので appendix E.5 に回すが、この命題により任意の $g, h \in G$ に対して $\theta_{g,h}(k,l)$ を k, l の表にまとめると、 $l = r$ の 1 列により表全体が決定される (Tbl. 4.1)。加えて、(4.2.5) にて再度ゲージを交換することで

$$e^{i\theta_{g,h}(k,l)} = e^{-i\theta_{h,g}(l,k)} \quad (4.2.9)$$

が成り立つ。

■自由度のカウント これにより Tbl. 4.1 のような表の最右列に残る自由度が計算できる。具体的に $r = 3$ の場合を例に取るが、一般の r でも同様の議論が可能である。

(4.2.8) により任意の g, h で $\theta_{g,h}(0,0) = \theta_{g,h}(0,1) = \theta_{g,h}(1,0) = \theta_{g,h}(0,2) = \theta_{g,h}(1,1) = \theta_{g,h}(2,0) = 0$ である。最初に現れる非自明な自由度は $\theta_{g,h}(0,3)$ であり、これを決定すると (4.2.7) により

$$\theta_{g,h}(0,3) = -\theta_{g,h}(1,2) = \theta_{g,h}(2,1) = -\theta_{g,h}(3,0)$$

である。さらに (4.2.9) により

$$\theta_{g,h}(0,3) = -\theta_{h,g}(3,0) \stackrel{(4.2.7)}{=} \theta_{h,g}(0,3)$$

となるので、 $\theta_{g,h}(0,3)$ は g, h の交換に関して対称となる。

続いての自由度 $\theta_{g,h}(1,3)$ を決定すると、(4.2.7) により

$$\theta_{g,h}(2,2) = -\theta_{g,h}(1,3) - \theta_{g,h}(0,3)$$

であり、右辺はすでに決定した自由度 $\theta_{g,h}(0,3)$ を除いて $\theta_{g,h}(1,3)$ の逆符号になる。同様に

$$\theta_{g,h}(3,1) = \theta_{g,h}(1,3) + 2\theta_{g,h}(0,3)$$

は $\theta_{g,h}(0,3)$ を除いて $\theta_{g,h}(1,3)$ と等価。(4.2.9) を考慮すると

$$\theta_{g,h}(1,3) = -\theta_{h,g}(3,1) \stackrel{(4.2.7)}{=} -\theta_{h,g}(1,3) - 2\theta_{h,g}(0,3)$$

となり、既出の自由度 $\theta_{g,h}(0,3)$ を除いて $\theta_{g,h}(1,3)$ は g, h の交換に関して反対称になる。より厳密に言えば、 $\theta_{g,h}(1,3)$ の g, h に関する対称性分が

$$\theta_{g,h}(1,3) + \theta_{h,g}(1,3) = -2\theta_{g,h}(0,3)$$

となるため、 $\theta_{g,h}(0,3)$ の自由度で完全に決定される。

$\theta_{g,h}(2,3)$ を決定すると、(4.2.7) により $\theta_{g,h}(3,2)$ が決定され、(4.2.9) から

$$\theta_{g,h}(2,3) - \theta_{h,g}(2,3) = -\theta_{g,h}(0,3) - \theta_{g,h}(1,3)$$

となり、すでに決めている自由度を除いて $\theta_{g,h}(2,3)$ は g, h の交換に関して本質的に対称。

最後に $\theta_{g,h}(3,3)$ を決定すると Tbl. 4.1 の全ての成分が決定される。(4.2.9) により

$$\theta_{g,h}(3,3) = -\theta_{h,g}(3,3)$$

なので、 $\theta_{g,h}(3,3)$ は g, h の交換に関して反対称。

以上の議論から、 $r = 3$ の multipole SPT 相は g, h 対称な $\theta_{g,h}(0,3), \theta_{g,h}(2,3)$ と g, h 反対称な $\theta_{g,h}(1,3), \theta_{g,h}(3,3)$ の 4 種類の独立な自由度で決定される。一般のランク r についても同様の議論が成り立ち、

- $\text{Span}\{\theta_{g,h}(k,l) \mid g, h \in G, 0 \leq k, l \leq r\} = \text{Span}\{\theta_{g,h}(k,r) \mid g, h \in G, 0 \leq k \leq r\}$
- $\theta_{g,h}(k,r)$ は $k+r$ が偶数のとき本質的に g, h 反対称、奇数のとき本質的に g, h 対称

である。

■自由度の代数による記述 $\{X_g^{(k)} \mid g \in G, 0 \leq k \leq r\}$ は並進対称性の作用を除けば内部対称性 $G^{\times(r+1)}$ の射影表現を組んでいるので、その乗数系は $H^2(G^{\times(r+1)}, U(1))$ で分類される。Künneth の公式により

$$H^2(G^{\times(r+1)}, U(1)) \cong (H^2(G, U(1)))^{\oplus(r+1)} \oplus (H^1(G, H^1(G, U(1))))^{\oplus(\frac{r+1}{2})}$$

と分解される。 $H^2(G, U(1))$ は同ランクのゲージ同士の交換関係 $[X_g^{(k)}, X_h^{(l)}]$ から現れて Tbl. 4.1 の対角成分に対応し、残りは非対角成分に対応する。

非対角成分 $\theta_{g,h}(k,l)$ ($k \neq l$) が本質的に g, h 対称なとき、対角部分群 $G \leq G \times G$ の表現 $\{X_g^{(k)} X_g^{(l)} \mid g \in G\}$ の分だけ自由度が自明になる。具体的には

$$\begin{aligned} X_g^{(k)} X_g^{(l)} X_h^{(k)} X_h^{(l)} &= e^{i\theta_{g,h}(l,l)} e^{i\theta_{g,h}(k,k)} e^{i(\theta_{g,h}(k,l) + \theta_{h,g}(l,k))} X_h^{(k)} X_h^{(l)} X_g^{(k)} X_g^{(l)} \\ &= e^{i\theta_{g,h}(l,l)} e^{i\theta_{g,h}(k,k)} e^{i(\theta_{g,h}(k,l) - \theta_{h,g}(k,l))} X_h^{(k)} X_h^{(l)} X_g^{(k)} X_g^{(l)} \end{aligned}$$

にて、 $e^{i(\theta_{g,h}(k,l) - \theta_{h,g}(k,l))}$ がより低ランクの自由度のみで表される。低ランクから順に自由度を決定していくと、対角部分群の射影表現の乗数系は全て既出の自由度で決定され

る。対角部分群の射影表現は 1-フレーバー G での分類 $H^2(G, U(1))$ で与えられるので、本質的に g, h 対称な $\theta_{g,h}(k, l)$ の自由度は $H^1(G, H^1(G, U(1)))/H^2(G, U(1))$ で与えられる。一方、本質的に g, h 反対称な $\theta_{g,h}(k, l)$ は対称の自由度で割り直せばいいので、

$$\frac{H^1(G, H^1(G, U(1)))}{H^1(G, H^1(G, U(1)))/[H^2(G, U(1))]} \cong H^2(G, U(1))$$

で与えられる。まとめると、ランク r の多極子 SPT 相の分類は

$$\mathcal{C}^{(r)}(G) = \begin{cases} H^2(G, U(1)) \oplus \bigoplus_{i=0}^{r/2} \left(H^2(G, U(1)) \oplus \frac{H^1(G, H^1(G, U(1)))}{H^2(G, U(1))} \right) & (r : \text{even}) \\ \bigoplus_{i=0}^{(r+1)/2} \left(H^2(G, U(1)) \oplus \frac{H^1(G, H^1(G, U(1)))}{H^2(G, U(1))} \right) & (r : \text{odd}) \end{cases}$$

で与えられる。

4.2.4 decorated domain wall の構成法による多極子 SPT 相の具体例

ランク r の多極子 SPT 相は \mathbb{Z}_N スピン系における decorated domain wall 構成により具体例を系統的に組むことができる [36, ?]。 Z, X を \mathbb{Z}_N 、 \mathcal{Z}, \mathcal{X} を \mathbb{Z}_M スpin の一般化 Pauli 行列とする。すなわち

$$ZX = e^{2\pi i/N} XZ, \quad \tilde{Z}\tilde{X} = e^{2\pi i/M} \tilde{X}\tilde{Z}.$$

これらは $G = \mathbb{Z}_N \times \mathbb{Z}_M$ の忠実な射影表現を構成する。

4.2.5 ランク $r = 2n + 1$ の多極子 SPT 相

$\eta \in \mathbb{Z}_N$ を用いた Hamiltonian として

$$\begin{aligned} a_j^{(2n+1,\eta)} &= X_j \left(Z_{j-n-1} Z_{j-n}^{-\binom{2n+2}{1}} Z_{j-n+1}^{\binom{2n+2}{2}} \times \cdots \times Z_{j+n}^{-\binom{2n+2}{2n+1}} Z_{j+n+1}^{\binom{2n+2}{2n+2}} \right)^\eta \\ &= X_j \prod_{k=0}^{2n+2} Z_{j-(n+1)+k}^{(-1)^k \binom{2n+2}{k} \eta} \\ H_\eta^{(2n+1)} &= - \sum_j \left(a_j^{(2n+1,\eta)} + \text{h.c.} \right) \end{aligned}$$

をとる。任意の i, j で $a_i a_j = a_j a_i$ を満たすので同時対角化が可能で、基底状態は $a_j^{(2n+1,\eta)} = 1$ を全ての j で満たす状態である。この Hamiltonian は $r = 2n + 1$ 以下のランクの多極子対称性

$$U^{(r_0)} := \prod_{i \in \Lambda} X_i^{\binom{i+r_0-1}{r_0}}$$

を持つ。詳細の計算は全て appendix E.6 を参照。

長さ $L \gg r$ の open boundary condition を考える。 a_1, a_2, \dots, a_{n+1} および a_{L-n}, \dots, a_L は Hamiltonian に現れず、

$$H_{\eta, \text{OBC}}^{(2n+1)} = - \sum_{j=n+2}^{L-n-1} \left(a_j^{(2n+1,\eta)} + \text{h.c.} \right)$$

となる。バルクにおける a_j の積は

$$\left. \prod_{j \in \Lambda} \left(a_j^{(2n+1,\eta)} \right)^{\binom{j+r_0-1}{r_0}} \right|_{x \in \text{bulk}} = X_x^{\binom{x+r_0-1}{r_0}}$$

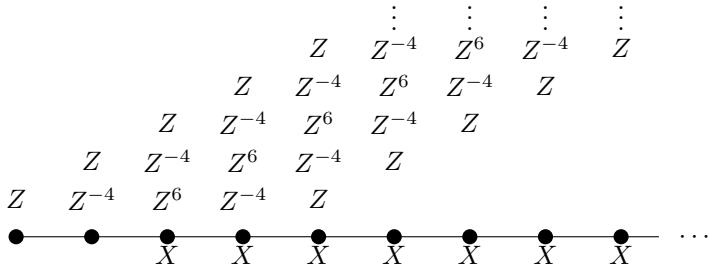


図 4.2: $r = 3, r_0 = 0$ における左端への a_j の作用。 $x \geq 5 = r + 2$ では Z による作用が自明になる。

表 4.2: ランク $2n + 1$ 多極子 SPT における非自明な交換関係の位相因子 n_{r_1, r_2} 要確認!!!!!!

$r_1 \setminus r_2$	\cdots	$n - 3$	$n - 2$	$n - 1$	n	$n + 1$	$n + 2$	$n + 3$	$n + 4$	\cdots
\vdots										\cdots
$n - 3$								-1		\cdots
$n - 2$							1	$\binom{3}{1}$		\cdots
$n - 1$						-1	$-\binom{2}{1}$	$-\binom{3}{2}$		\cdots
n					1	1	1	1		\cdots
$n + 1$				-1						
$n + 2$			1	-1						
$n + 3$		-1	$\binom{2}{1}$	-1						
$n + 4$		1	$-\binom{3}{1}$	$\binom{3}{2}$	-1					
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots					

となり、 Z による作用が相殺する。Fig. 4.2 を参照。これを踏まえると

$$1 = \prod_{j=n+2}^{L-n-1} \left(a_j^{(r, \eta)} \right)^{\binom{j+r_0-1}{r_0}} =: \mathcal{L}_{r_0}^{\eta\dagger} U^{(r_0)} \mathcal{R}_{r_0}^{\eta\dagger}$$

と表すことができる。すなわちランク r_0 の多極子対称性の基底状態空間への作用は $U^{(r_0)} = \mathcal{L}_{r_0}^{\eta} \cdot \mathcal{R}_{r_0}^{\eta}$ のように台が離れた演算子の積へ分解される。 \mathcal{L}_{r_0} を具体的に計算してランクごとに交換関係を見ると、

$$\mathcal{L}_{r_1}^{\eta} \mathcal{L}_{r_2}^{\eta} = \exp \left[\frac{2\pi i}{N} \eta n_{r_1, r_2} \right] \mathcal{L}_{r_2}^{\eta} \mathcal{L}_{r_1}^{\eta}$$

の形で書けて、 $n_{r_1, r_2} \in \mathbb{Z}$ が Tbl. 4.2 のように与えられる。(??) を満たすことに注意せよ。 $U^{(r_1)}$ と $U^{(r_2)}$ は可換であることから、

$$\mathcal{R}_{r_1}^{\eta} \mathcal{R}_{r_2}^{\eta} = \exp \left[-\frac{2\pi i}{N} \eta n_{r_1, r_2} \right] \mathcal{R}_{r_2}^{\eta} \mathcal{R}_{r_1}^{\eta}$$

によって位相を相殺する。このようにトポロジカル相において線形表現で与えられた対称性演算子が部分系への射影表現へ分裂する性質は symmetry fractionalization として知られる [?].

4.2.6 ランク $r = 2n$ の多極子 SPT 相

$K = \gcd(N, M)$ と $\xi \in \mathbb{Z}_K$ により

$$\begin{aligned} a_j^{(2n,\xi)} &= X_{j+1}^\dagger \left(\tilde{Z}_{j-n} \tilde{Z}_{j-n+1}^{-\binom{2n+1}{1}} \tilde{Z}_{j-n+2}^{\binom{2n+1}{2}} \cdots \tilde{Z}_{j+n}^{\binom{2n+1}{2n}} \tilde{Z}_{j+n+1}^{-\binom{2n+1}{2n+1}} \right)^{M\xi} \\ &= X_{j+1}^\dagger \prod_{k=0}^{2n+1} \tilde{Z}_{j-n+k}^{(-1)^k \binom{2n+1}{k} M\xi} \\ \tilde{a}_j^{(2n,\xi)} &= \tilde{X}_j \left(Z_{j-n} Z_{j-n+1}^{-\binom{2n+1}{1}} Z_{j-n+2}^{\binom{2n+1}{2}} \cdots Z_{j+n}^{\binom{2n+1}{2n}} Z_{j+n+1}^{-\binom{2n+1}{2n+1}} \right)^{N\xi} \\ &= \tilde{X}_j \prod_{k=0}^{2n+1} Z_{j-n+k}^{(-1)^k \binom{2n+1}{k} N\xi} \\ H_\xi^{(2n)} &= - \sum_j (a_{j,\xi} + \tilde{a}_{j,\xi} + \text{h.c.}) \end{aligned}$$

と定めると、 $H_\xi^{(2n)}$ はランク $2n$ 以下の多極子対称性を有する commuting projector Hamiltonian である。

第5章

1+1 次元 modulated symmetry のも とのトポロジカル相の分類

一般の modulated symmetry を有する 1+1 次元系トポロジカル相の分類が [?] にて示された。本章ではその結果を概説する。

付録 A

線型代数に関する命題と証明

本文で用いた線型代数に関する命題とその証明をまとめる。明記しない限り有限次元の複素数体上のベクトル空間を考える。本章は主に????を元にしている。

A.1 行列の分解と幾何学的解釈

$m \times n$ 行列 A は、 \mathbb{C}^n 空間から \mathbb{C}^m 空間への線形写像である。線形性から、本質的に \mathbb{C}^n の基底が \mathbb{C}^m へどのように移されるかだけで決定される。また行列のランクは \mathbb{C}^m に移された基底の次元、すなわち残存する基底ベクトルの本数である。そこで、

1. 変換で残存する \mathbb{C}^m の正規直交基底 $r = \text{rank } A$ 本を指定する
2. r 本の正規直交基底へ移る \mathbb{C}^n の基底を指定する

の 2 段階に分解できる。1 段階目は m 成分を有するベクトル r 本を指定する操作であり、 $m \times r$ 行列で表される。2 段階目は \mathbb{C}^n の基底から r 本を適切に選び、拡大縮小して \mathbb{C}^r 部分空間に制限する操作であり、 $r \times n$ 行列で表される。これを踏まえて、以下の命題が成り立つ。

Prop. 9: 階数分解

任意の $m \times n$ 行列 M は、 $r = \text{rank } M$ とすると、 $m \times r$ 行列 B , $r \times n$ 行列 C を用いて $M = BC$ と分解できる。特に $B^\dagger B = 1_r$ とできる。^a ^b

^a 特に適切なユニタリを間に挟んで C を半正定値行列 (Def. 16) にすることができる。具体的には、特異値分解 (Thm. 4) $M = U\Sigma V^\dagger$ の結果を用いて $B = UV^\dagger$, $C = V\Sigma V^\dagger$ とすればよい。この場合後述する議論から C が基底ベクトルの拡大を含み、 B が基底ベクトルの回転のみで構成されているので、複素数の極座標表示 $z = re^{i\theta}$ になぞらえて極分解とも呼ばれる。

^b B の代わりに $CC^\dagger = 1$ とすることもできる。

Prf.

M の列ベクトル $\{\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_n\}$ は r 次元の線形部分空間 V に属する。 V の正規直交基底 $\{\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_r\}$ をとると、各 \mathbf{a}_j は

$$\mathbf{a}_j = \sum_{k=1}^r \mathbf{b}_k c_{kj}$$

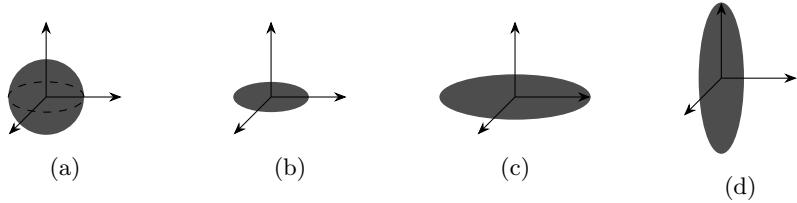


図 A.1: 線形変換 $A : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^m$ の幾何学的解釈。 $n = m = 3, r = 2$ の場合を示す。(a) \mathbb{C}^n の単位球 B^n 。標準基底が表面に配置されている。(b) V によって B^n が r 次元球 B^r に潰される。(c) Σ によって r 次元球が r 次元楕円体に伸縮される。(d) U によって r 次元楕円体が \mathbb{C}^m に埋め込まれる。

と一意に表せる。 B を (b_1, \dots, b_r) を列に持つ $m \times r$ 行列、 C を (c_{kj}) を成分とする $r \times n$ 行列とすれば $M = BC$ と分解できる。構成から $B^\dagger B = 1_r$ である。

Sec. 2.1.1 の流れを追うと、 M の特異値分解も類似の解釈ができることがわかる。Sec. 2.1.1 に記法を合わせれば、ユニタリ U, V は階数分解 $\tilde{M} = \tilde{B}\tilde{C}$ の結果と $r \times r$ ユニタリ行列 \tilde{D} を用いて $U = \tilde{B}\tilde{D}, V = \tilde{D}^\dagger\tilde{C}$ と表された。階数分解と同様に解釈すれば、 V は \mathbb{C}^n の標準基底を \mathbb{C}^r 部分空間の正規直交基底に移す操作、 U は \mathbb{C}^r 部分空間の正規直交基底を \mathbb{C}^m の正規直交基底に埋め込む操作であり、 Σ は基底の長さの拡大、縮小を表す。

より直感的な解釈として、 \mathbb{C}^n の単位球 B^n の A による変換を考える (Fig. A.1)。 \mathbb{C}^n の標準基底は B^n の表面に配置しており、 A はこの球を \mathbb{C}^m の楕円体に変換する。まず V によって B^n は r 次元球 B^r に潰される。ユニタリ性から、 r 次元空間では厳密に球体になることに注意。次に Σ によってこの r 次元球は各基底ベクトルの方向に Σ の対角成分の値で伸縮され、 r 次元楕円体になる。最後にこの r 次元楕円体はユニタリ U によって \mathbb{C}^m 空間に埋め込まれる。ここでもユニタリ性から、楕円体の形は変わらない。

A.2 ノルム

本稿で扱う種々のノルムの定義と性質を概観する。

Def. 9: ノルム

ベクトル空間 V 上のノルムとは、写像 $\|\cdot\| : V \rightarrow \mathbb{R}$ であって、任意の $v, w \in V$ と $\alpha \in \mathbb{C}$ に対し以下を満たすものをいう。

非負性 $\|v\| \geq 0$ かつ $\|v\| = 0$ ならば $v = 0$

齊次性 $\|\alpha v\| = |\alpha| \|v\|$

三角不等式 $\|v + w\| \leq \|v\| + \|w\|$

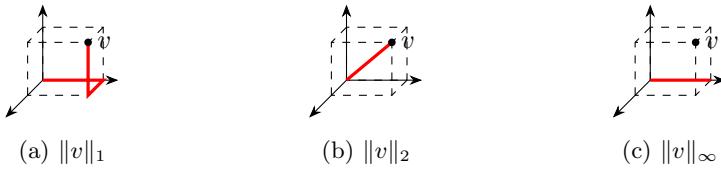
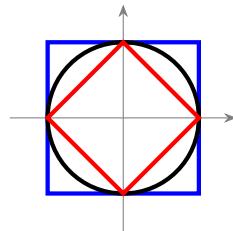


図 A.2: ノルムの幾何学的解釈

図 A.3: L_1 ノルム (赤), L_2 ノルム (黒), L_∞ ノルム (青) で定義される \mathbb{R}^2 上の半径 1 の円周

A.2.1 ベクトルノルム

ベクトル空間のノルムで最もメジャーな定義は Euclid ノルムだが、性質に応じて他のノルムも用いられる。

Def. 10: L_p ノルム

$v \in \mathbb{C}^n$ に対し、 L_p ノルムを

$$\|v\|_p := \left(\sum_{i=1}^n |v_i|^p \right)^{1/p}$$

と定義する。

L_p ノルムは明らかにノルムの公理 (Def. 9) を満たす。特に L_2 ノルムが Euclid 距離、 L_1 ノルムが Manhattan 距離を与える。 L_2 ノルムは $\|v\|_2 = \sqrt{v^\dagger v}$ と表すことができる。 L_∞ ノルムは $p \rightarrow \infty$ の自然な極限として $\max_i |v_i|$ で定義される。本稿で使うのはこの 3 つのみ。Fig. A.2 を見てもわかるように、

$$\|v\|_\infty \leq \|v\|_2 \leq \|v\|_1 \quad (\text{A.2.1})$$

が成り立つ。本稿では明示しない限り L_2 ノルムを用い、 $\|v\|$ と略記する。 L_1, L_∞ ノルムは基底の選び方に依存することに注意。逆に長さ 1 のノルムによる球面を考えることも示唆的である。それぞれのノルムで定義される \mathbb{R}^2 上半径 1 の円周を描画すると Fig. A.3 のようになる。

内積と双対

Def. 11: 内積

ベクトル空間 V 上の内積とは、写像 $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{C}$ であって、任意の $u, v, w \in V$ と $\alpha \in \mathbb{C}$ に対し以下を満たすものをいう。

双線形性 $(u+v, w) = (u, w) + (v, w)$, $(u, v+w) = (u, v) + (u, w)$

入れ替えが複素共役 $(v, u) = \overline{(u, v)}$

正定値性 $(v, v) \geq 0$ かつ $(v, v) = 0$ ならば $v = 0$

齊次性 $(u, \alpha v) = \alpha(u, v)$

内積が定義されたベクトル空間ではノルムを内積により $\|v\| := \sqrt{(v, v)}$ と定義できる。この定義によると、中線定理

$$\|u - v\|^2 + \|u + v\|^2 = 2(\|u\|^2 + \|v\|^2)$$

が成り立つことが簡単に示せる。逆にノルムを誘導する内積が存在する条件は上述の中線定理を満たすことであることが [37] にて示されている。

Thm. 10: 中線定理はノルムが内積から誘導されることの必要十分条件

内積 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ が定義されたベクトル空間 V にて、ノルム $\|\cdot\|$ がこの内積から誘導されたものである必要十分条件は、このノルムが中線定理

$$\|u + v\|^2 + \|u - v\|^2 = 2(\|u\|^2 + \|v\|^2) \quad (\text{A.2.2})$$

を満たすことである。また中線定理を満たすノルム $\|\cdot\|$ を誘導する内積は一意に定まる。

Prf.

まず直ちに

$$(u + v, u + v) + (u - v, u - v) = 2(u, u) + 2(v, v)$$

を得るので、内積から誘導されるノルムは中線定理を満たす。

$$(u + v, u + v) - (u - v, u - v) = 2(u, v) + 2(v, u) = 2 \operatorname{Re}(u, v)$$

および $\operatorname{Re}(u, iv) = -\operatorname{Im}(u, v)$ により、内積から誘導されるノルムから再度内積を構成できることもわかる。あとは (A.2.2) を満たすノルムが内積により誘導されることを示せば良い。

ノルム $\|\cdot\|$ が (A.2.2) を満たすとする。演算 $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{C}$ を新たに

$$\operatorname{Re} \langle u, v \rangle := \frac{1}{4}(\|u+v\|^2 - \|u-v\|^2), \quad \langle u, v \rangle := \operatorname{Re} \langle u, v \rangle - i \operatorname{Re} \langle u, iv \rangle \quad (\text{A.2.3})$$

としたとき、 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ が内積の公理 (双線形性、入れ替えが複素共役、正定値性、齊次性) を満たすことを示せば良い。中線定理の式 (A.2.2) にて $u \rightarrow u \pm v_1$, $v \rightarrow v_2$

と置いた式の引き算により

$$\begin{aligned} (\|u + v_1 + v_2\|^2 + \|u + v_1 - v_2\|^2) - (\|u - v_1 - v_2\|^2 + \|u - v_1 + v_2\|^2) \\ = 2(\|u + v_1\|^2 - \|u - v_1\|^2) \end{aligned}$$

となるので、

$$\operatorname{Re} \langle u, v_1 + v_2 \rangle + \operatorname{Re} \langle u, v_1 - v_2 \rangle = 2 \operatorname{Re} \langle u, v_1 \rangle. \quad (\text{A.2.4})$$

(A.2.3) にて $v = 0$ を入れると $\operatorname{Re} \langle u, 0 \rangle = 0$ が得られるので、(A.2.4) にて $v_1 = v_2$ とすることで $\operatorname{Re} \langle u, 2v \rangle = 2 \operatorname{Re} \langle u, v \rangle$ が成り立つ。再度 (A.2.4) は、

$$\operatorname{Re} \langle u, v_1 + v_2 \rangle + \operatorname{Re} \langle u, v_1 - v_2 \rangle = \operatorname{Re} \langle u, 2v_1 \rangle$$

となり、 $v_1 \rightarrow (v_1 + v_2)/2, v_2 \rightarrow (v_1 - v_2)/2$ と置き換えることで

$$\operatorname{Re} \langle u, v_1 \rangle + \operatorname{Re} \langle u, v_2 \rangle = \operatorname{Re} \langle u, v_1 + v_2 \rangle$$

が示される。(A.2.3) から直ちに、第 2 引数に関する線形性

$$\langle u, v_1 \rangle + \langle u, v_2 \rangle = \langle u, v_1 + v_2 \rangle$$

を得る。

三角不等式により

$$|\|u \pm \alpha v\| - \|u \pm \beta v\|| \leq \|(\alpha - \beta)v\|$$

であり、 $\beta \rightarrow \alpha$ の極限を取ることで $\|u \pm \alpha v\|$ は α に関して連続であることがわかる。よって (A.2.3) で定義される $\langle u, \alpha v \rangle$ も α に関して連続。 $S := \{\alpha \in \mathbb{C} \mid \langle u, \alpha v \rangle = \alpha \langle u, v \rangle \forall u, v \in V\}$ とすると、まず自明に $1 \in S$ である。 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ の第 1 引数に関する線形性から $\alpha, \beta \in S$ ならば $\alpha \pm \beta \in S$ なので、 $\mathbb{Z} \subseteq S$. $\beta \in S$ ならば $\langle u, v \rangle = \langle u, \beta(\beta^{-1}v) \rangle = \beta \langle u, \beta^{-1}v \rangle$ なので、両辺 β^{-1} をかけば $\beta^{-1} \in S$ も成り立つ。直ちに $\mathbb{Q} \subseteq S$. 上述の連続性から $\mathbb{R} \subseteq S$. (A.2.3) 第 2 式から

$$\langle u, iv \rangle = \operatorname{Re} \langle u, iv \rangle - i \operatorname{Re} \langle u, iv \rangle = i(\operatorname{Re} \langle u, v \rangle - i \operatorname{Re} \langle u, iv \rangle) = i \langle u, v \rangle$$

なので $i \in S$. 以上より $\mathbb{C} \subseteq S$ が示され、第 2 引数に関する齊次性が成り立つ。

(A.2.3) 第 1 式により

$$\operatorname{Re} \langle iu, iv \rangle = \operatorname{Re} \langle u, v \rangle = \operatorname{Re} \langle v, u \rangle$$

なので、この結果を組みあせて

$$\operatorname{Re} \langle u, iv \rangle = \operatorname{Re} \langle iu, iiv \rangle = -\operatorname{Re} \langle iu, v \rangle = -\operatorname{Re} \langle v, iu \rangle$$

すなわち $(u, v) = \overline{(v, u)}$ が成り立つ。

最後に、(A.2.3) で

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \langle v, v \rangle &= \frac{1}{4}(\|v + v\|^2 - \|v - v\|^2) = \|v\|^2 \\ \operatorname{Re} \langle v, iv \rangle &= \frac{1}{4}(\|v + iv\|^2 - \|v - iv\|^2) = 0 \end{aligned}$$

により $\langle v, v \rangle = \|v\|^2$ が成り立つ。以上で $\langle \cdot, \cdot \rangle$ が内積の公理を全て満たすことが示された。

単位ベクトル $(1, 0, 0, \dots), (0, 1, 0, \dots)$ を用いて L_p ノルムによる中線定理を計算すると、

$$0 = \|(1, -1)\|_p^2 + \|(1, 1)\|_p^2 - 2(\|(1, 0)\|_p^2 + \|(0, 1)\|_p^2) = 2^{2/p} + 2^{2/p} - 4$$

なので、 L_p ノルムと整合する内積は $p = 2$ のときにのみ存在する。上記証明での構成から、 L_2 ノルムに対応する内積は

$$\begin{aligned}\text{Re}(u, v) &= \frac{1}{4}((u+v)^\dagger(u+v) - (u-v)^\dagger(u-v)) = \frac{1}{2}(u^\dagger v + v^\dagger u) \\ (u, v) &= \text{Re}(u, v) - i\text{Re}(u, iv) = u^\dagger v\end{aligned}$$

で、通常の内積であることがわかる。

有限次元ベクトル空間 V の内積 $(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{C}$ は $V \cong V^*$ を念頭に $V^* \times V \rightarrow \mathbb{C}$ の双対性を表すことができた。双対性に基づいて V^* 上のノルムを以下のように与えることができる。

Def. 12: 双対ノルム

ノルムを $\|\cdot\|$ とするベクトル空間 V の双対空間 V^* 上のノルム（双対ノルム）を

$$\|f\|_* := \sup_{v \in V; \|v\|=1} |f(v)|$$

と定義する。^a

^a 定義式右辺のノルムは L_2 に限らなくても良い。

V のノルムを L_2 ノルムにとったときこの定義が $V \cong V^*$ のノルムと整合的であることは、 $w \in V$ の双対を f_w としたとき

$$\|f_w\|_* = \sup_{v \in V} |f_w(v)|/\|v\|_2 = \sup_{v \in V} |(w, v)|/\|v\|_2 = |(w, w)|/\|w\|_2 = \|w\|_2$$

からわかる。 L_2 ノルムの代わりに L_∞ ノルムの双対ノルムを計算してみると、

$$\sup_{v \in V; \|v\|_\infty=1} |f_w(v)| = \sup_{v \in V; \max_i |v_i|=1} \left| \sum_i w_i v_i \right|$$

である。Fig. A.3 のように $\|v\|_\infty = 1$ の単位円は超立方体の表面であり、 w との内積を最大にする v は各成分が $w_i = \text{sgn}(v_i)$ とすれば良い。このとき $\|f_w\|_* = \sum_i |w_i| = \|w\|_1$ となるので、 L_∞ ノルムの双対ノルムは L_1 ノルムであることがわかる。

A.2.2 行列ノルム

本稿で用いるのは以下の 3 つである。

Def. 13: 行列ノルム

$m \times n$ 行列 A に対し、誘導ノルムを

$$\|A\| := \sup_{v \in \mathbb{C}^n; \|v\|=1} \|Av\|,$$

	誘導ノルム	Frobenius ノルム	トレースノルム
定義	$\sup_{\ v\ =1} \ Av\ $	$\sqrt{A^\dagger A}$	$\text{Tr} \sqrt{A^\dagger A}$
σ による表現	$\ A\ = \ \sigma\ _\infty$	$\ A\ _F = \ \sigma\ _2$	$\ A\ _{\text{tr}} = \ \sigma\ _1$
楕円体による解釈	楕円体の最長半径	主軸の二乗平均長	全主軸の合計長

表 A.1: 行列ノルムの比較

Frobenius ノルムを

$$\|A\|_F := \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2} = \sqrt{\text{Tr}(A^\dagger A)},$$

トレースノルムを

$$\|A\|_{\text{tr}} := \text{Tr} \sqrt{A^\dagger A}$$

と定義する。^a

^a トレースノルムの三角不等式は非自明だが、(A.2.10) により示せる。それ以外でノルムの公理 Def. 9 を満たすことは straightforward に示せる。

appendix A.1 で述べたように、行列は幾何学的解釈が可能で、特に特異値分解はその解釈を明確にする。行列 A の特異値分解を $A = U\Sigma V^\dagger$, 特異値の順序を $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots > 0$ としてそれぞれのノルムを比較する。ユニタリ U, V は $\mathbb{C}^r \subset \mathbb{C}^n$ のベクトルの 2 ノルムを変えず、 $\mathbb{C}^n \setminus \mathbb{C}^r$ のベクトルを潰すので、

$$\|A\| = \sup_{\|v\|=1} \|U\Sigma V^\dagger v\| = \sup_{\|v\|=1} \|\Sigma v\| = \sigma_1 = \|\sigma\|_\infty$$

が成り立つ。Frobenius ノルムは

$$\|A\|_F = \sqrt{\text{Tr}(V\Sigma U^\dagger U\Sigma V^\dagger)} = \sqrt{\text{Tr}(\Sigma^2)} = \sqrt{\sum_k \sigma_k^2} = \|\sigma\|_2$$

となる。トレースノルムは

$$\|A\|_{\text{tr}} = \text{Tr} \sqrt{V\Sigma U^\dagger U\Sigma V^\dagger}$$

と計算される。ここに、 \sqrt{A} は $A = BB$ なる行列 B である。平方根の内部は固有値を Σ^2 の対角成分とするエルミート行列なので (cf. Sec. 2.1.1)、ユニタリ行列 W と Σ^2 を用いて $V\Sigma U^\dagger U\Sigma V^\dagger = W\Sigma^2 W^\dagger$ と対角化できて、

$$\|A\|_{\text{tr}} = \text{Tr} \sqrt{W\Sigma^2 W^\dagger} = \text{Tr}(W\Sigma W^\dagger) = \text{Tr}(\Sigma) = \|\sigma\|_1$$

となる。appendix A.1 の楕円体を用いた解釈と照合すると、Tbl. A.1 のようにまとめられる。3 種のベクトルノルム間の不等式 (A.2.1) と同様に、

$$\|A\|_{\text{tr}} \geq \|A\|_F \geq \|A\|$$

が成り立つ。ベクトルノルムと異なり上記のノルムはいずれも基底の取り方に依存しない。また m 行 1 列の行列すなわち列ベクトルでは、3 つのノルムは全て L_2 ノルムに一致する。

内積と双対

Thm. 10 を踏まえ上記 3 つの行列ノルムの中線定理を調べると、

$$\begin{aligned} & \left\| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\|^2 + \left\| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\|^2 - 2 \left(\left\| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right\|^2 + \left\| \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\|^2 \right) \\ &= 1 + 1 - 2(1 + 1) \neq 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \|A + B\|_F^2 + \|A - B\|_F^2 - 2(\|A\|_F^2 + \|B\|_F^2) \\ &= \text{Tr}[(A^\dagger + B^\dagger)(A + B)] + \text{Tr}[(A^\dagger - B^\dagger)(A - B)] - 2 \text{Tr}(A^\dagger A) + 2 \text{Tr}(B^\dagger B) = 0 \\ & \left\| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\|_{\text{tr}}^2 + \left\| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\|_{\text{tr}}^2 - 2 \left(\left\| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right\|_{\text{tr}}^2 + \left\| \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right\|_{\text{tr}}^2 \right) \\ &= (1 + 1)^2 + (1 + 1)^2 - 2(1^2 + 1^2) \neq 0 \end{aligned}$$

なので、Frobenius ノルムのみが内積から誘導されるノルムである。Thm. 10 の証明の構成法に従い、

$$\begin{aligned} \text{Re}(A, B) &:= \frac{1}{4}(\|A + B\|_F^2 - \|A - B\|_F^2) = \frac{1}{2} \text{Tr}(A^\dagger B + B^\dagger A) \\ (A, B) &:= \text{Re}(A, B) - i \text{Re}(A, iB) = \text{Tr}(A^\dagger B) \end{aligned}$$

が内積となる。

Def. 14: Hilbert-Schmidt 内積

$m \times n$ 行列 A, B に対し、Hilbert-Schmidt 内積を

$$\langle A, B \rangle_{HS} := \text{Tr}(A^\dagger B)$$

と定義する。

ベクトルの余弦定理同様、

$$\|A - B\|_F^2 = \|A\|_F^2 + \|B\|_F^2 - 2 \text{Re} \langle A, B \rangle_{HS}$$

なので、特に A と B のノルムを固定すると $\text{Re} \langle A, B \rangle_{HS}$ は A と B の間の“角度の小ささ”に相当する。

ベクトルの内積から双対ノルムを定義したように、行列の内積から双対ノルムを定義したい。双対ノルムの定義式では内積の上限を求めるので、一般に Hilbert-Schmidt 内積の上限を評価する不等式が欲しい。一旦導出の直感的な方針を概説する。 $A = U_A \Sigma_A V_A^\dagger$, $B = U_B \Sigma_B V_B^\dagger$ と特異値分解したとき、

$$\langle A, B \rangle_{HS} = \text{Tr} \left[\Sigma_A U_A^\dagger U_B \Sigma_B V_B^\dagger V_A \right]$$

なので、 $A = \Sigma_A$, $B = U_A^\dagger U_B \Sigma_B V_B^\dagger V_A = U \Sigma_B V^\dagger$ としても一般性を失わない。これまでと同様、特異値は降順に $\Sigma_A = \text{diag}(\sigma_1(A), \sigma_2(A), \dots)$, $\Sigma_B = \text{diag}(\sigma_1(B), \sigma_2(B), \dots)$ とする。

$$|\langle A, B \rangle_{HS}| = \left| \sum_i \sigma_i(A) B_{ii} \right| \quad (\text{A.2.5})$$

であり、この値を最大にするには大きい $\sigma_1(A)$ に大きい B の成分を対応させるのが良い。はじめに最大の $\sigma_1(A)$ に対応する B_{11} を最大に取る。

$$|B_{11}| = |\langle e_1, Be_1 \rangle| \leq \|e_1\| \|Be_1\| \leq \|B\| = \sigma_1(B)$$

であり、等号成立条件は e_1 が $\sigma_1(B)$ に対応する特異ベクトルに平行なことである。続く $\sigma_2(A)$ に対応する B_{22} も同様に $|B_{22}| \leq \|e_2\| \|Be_2\|$ を通して最大化できるが、 $e_2 \in \text{Span}\{e_1\}^\perp$ であることに注意すると、 e_2 が $\sigma_2(B)$ に対応する特異ベクトルに平行なときに最大値を達成する。この議論を続けることで、(A.2.5) は

$$|\langle A, B \rangle_{HS}| \leq \sum_i |\sigma_i(A) B_{ii}| \leq \sum_i \sigma_i(A) \sigma_i(B)$$

と評価される。等号成立は

1. $\sigma_i(A) B_{ii}$ の符号が全ての i で同じ
2. e_i が $\sigma_i(B)$ に対応する特異ベクトルに平行

を共に満たす場合である。2番目の条件は U, V が標準基底を不变にするユニタリ行列すなわち単位行列であることを意味し、 $U_A^\dagger U_B = V_B^\dagger V_A = I$ である。ここまで直感的な議論は以下のようにまとめられる。

Thm. 11: von Neumann のトレース不等式 [?]

$m \times n$ 行列 A, B の特異値をそれぞれ降順に $\sigma(A) = (\sigma_1(A), \sigma_2(A), \dots)$, $\sigma(B) = (\sigma_1(B), \sigma_2(B), \dots)$ とする。このとき

$$|\text{Tr}(A^\dagger B)| \leq \sum_i \sigma_i(A) \sigma_i(B)$$

が成り立つ。等号成立条件は A と B が同じ特異ベクトルを持つとき、すなわち特異値分解 $A = U_A \Sigma_A V_A^\dagger$, $B = U_B \Sigma_B V_B^\dagger$ において $U_A = e^{i\theta} U_B$, $V_A = e^{i\phi} V_B$ と表されること [?, ?]。

不等式に関する精密・厳密な証明は [?] が有名である。あらかじめ以下の補題を示す。

Lem. 6: 二重確率行列の期待値は 1 以下

$D = (d_{ij})$ を成分が非負で各行・各列の和が 1 である行列（二重確率行列）とする。実数列 $x_1 \geq \dots \geq x_n \geq 0$, $y_1 \geq \dots \geq y_n \geq 0$ に対し、

$$\sum_{i,j=1}^n d_{ij} x_i y_j \leq \sum_{i=1}^n x_i y_i.$$

Prf. Lem. 6

数列 $(x_i), (y_i)$ の構成から非負の実数列 ξ_i, η_i によって

$$x_r = \sum_{r \leq i \leq n} \xi_i, \quad y_r = \sum_{r \leq j \leq n} \eta_j$$

と表せるので、

$$\begin{aligned} \sum_{r=1}^n x_r y_r - \sum_{r,s=1}^n d_{rs} x_r y_s &= \sum_{r,s=1}^n (\delta_{r,s} - d_{rs}) x_r y_s \\ &= \sum_{1 \leq r, s \leq n} (\delta_{r,s} - d_{rs}) \sum_{r \leq i \leq n} \xi_i \sum_{s \leq j \leq n} \eta_j \\ &= \sum_{1 \leq i, j \leq n} \xi_i \eta_j \sum_{1 \leq r \leq i; 1 \leq s \leq j} (\delta_{r,s} - d_{rs}). \end{aligned}$$

ここで $\sum_s d_{rs} = 1$ により、 $i \leq j$ のときは

$$\sum_{1 \leq r \leq i; 1 \leq s \leq j} (\delta_{r,s} - d_{rs}) \geq \sum_{1 \leq r \leq i; 1 \leq s \leq n} (\delta_{r,s} - d_{rs}) = 0$$

であり、同様に $i \geq j$ のときも左辺は非負である。よって題意を満たす。

Prf. Thm. 11

■ A, B が半正定値の場合の不等式 A, B が半正定値行列の場合に不等式を証明する。半正定値行列の固有値は特異値に一致し、正規直交基底 $\{v_i\}, \{\tilde{v}_i\}$ により $A = \sum_i \sigma_i(A) v_i v_i^\dagger, B = \sum_i \sigma_i(B) \tilde{v}_i \tilde{v}_i^\dagger$ と対角化できる。

$$\text{Tr}(A^\dagger B) = \sum_{i,j} \sigma_i(A) \sigma_j(B) |v_i^\dagger \tilde{v}_j|^2$$

であり、右辺で $M_{ij} := |v_i^\dagger \tilde{v}_j|^2$ とおくと、

$$\begin{aligned} \sum_i M_{ij} &= \sum_i \tilde{v}_j^\dagger v_i v_i^\dagger \tilde{v}_j = \tilde{v}_j^\dagger \tilde{v}_j = 1 \\ \sum_j M_{ij} &= \sum_j \tilde{v}_j^\dagger v_i v_i^\dagger \tilde{v}_j = v_i^\dagger v_i = 1 \end{aligned}$$

のように計算できるので、 M は二重確率行列である。よって Lem. 6 より

$$|\text{Tr}(A^\dagger B)| = \sum_{i,j} \sigma_i(A) \sigma_j(B) M_{ij} \leq \sum_i \sigma_i(A) \sigma_i(B). \quad (\text{A.2.6})$$

■一般の場合不等式 A, B が一般の複素 $m \times n$ 行列とする。特異値分解をそれぞれ $A = \sum_i \sigma_i(A) u_i v_i^\dagger, B = \sum_i \sigma_i(B) \tilde{u}_i \tilde{v}_i^\dagger$ とすると、Cauchy-Schwarz の不等式により

$$\begin{aligned} |\text{Tr}(A^\dagger B)| &= \left| \sum_{i,j} \sigma_i(A) \sigma_j(B) (u_i^\dagger \tilde{u}_j)(\tilde{v}_j^\dagger v_i) \right| \\ &\leq \sqrt{\sum_{i,j} \sigma_i(A) \sigma_j(B) |u_i^\dagger \tilde{u}_j|^2} \sqrt{\sum_{i,j} \sigma_i(A) \sigma_j(B) |\tilde{v}_j^\dagger v_i|^2}. \end{aligned} \quad (\text{A.2.7})$$

ここで、

$$\begin{aligned}
 (A^\dagger A)^{1/2} &= \left(\sum_i \sigma_i(A)^2 v_i v_i^\dagger \right)^{1/2} = \sum_i \sigma_i(A) v_i v_i^\dagger, \\
 (B^\dagger B)^{1/2} &= \sum_i \sigma_i(B) \tilde{v}_i \tilde{v}_i^\dagger, \\
 (AA^\dagger)^{1/2} &= \sum_i \sigma_i(A) u_i u_i^\dagger, \\
 (BB^\dagger)^{1/2} &= \sum_i \sigma_i(B) \tilde{u}_i \tilde{u}_i^\dagger
 \end{aligned} \tag{A.2.8}$$

は全て半正定値なので、(A.2.7) は

$$\begin{aligned}
 |\mathrm{Tr}(A^\dagger B)| &\leq \sqrt{\mathrm{Tr}((A^\dagger A)^{1/2}(B^\dagger B)^{1/2})} \sqrt{\mathrm{Tr}((AA^\dagger)^{1/2}(BB^\dagger)^{1/2})} \\
 &\leq \sqrt{\sum_i \sigma_i((A^\dagger A)^{1/2}) \sigma_i((B^\dagger B)^{1/2})} \\
 &\quad \times \sqrt{\sum_i \sigma_i((AA^\dagger)^{1/2}) \sigma_i((BB^\dagger)^{1/2})} \\
 &= \sum_i \sigma_i(A) \sigma_i(B)
 \end{aligned}$$

と評価できる。

■等号成立条件 A, B が同じ特異ベクトルを持つとき、すなわち $A = U\Sigma_A V^\dagger$, $B = U\Sigma_B V^\dagger$ が成り立つとき、

$$\mathrm{Tr}(A^\dagger B) = \mathrm{Tr}(V\Sigma_A U^\dagger U\Sigma_B V^\dagger) = \mathrm{Tr}(\Sigma_A \Sigma_B)$$

となり、等号が成立し、十分性が得られる。

必要条件であることを示す。以下では特異値に縮退がない場合を考える。特異値に縮退がある場合は適切な基底の選択により同じ議論に帰着できる。

A, B が共に半正定値の場合、(A.2.6) での等号成立条件は $M_{ij} = |v_i^\dagger \tilde{v}_j|^2 = \delta_{ij}$ なので、 v_i と \tilde{v}_i は $U(1)$ 位相自由度を除いて一致することであり、これは A, B が同時に対角化可能であることと等価。縮退がある場合も適切な並べ替えで同じ条件に帰着する。よって等号成立条件は $[A, B] = 0$ 。 A, B が一般の $m \times n$ 行列の場合、この条件は $[A^\dagger A, B^\dagger B] = 0$ かつ $[AA^\dagger, BB^\dagger] = 0$ である。(A.2.8) および特異値の降順に特異ベクトルがすでに並び替えられていることに注意すると、それぞれの可換性は $u_i = e^{i\theta_i} \tilde{u}_i$, $v_i = e^{i\phi_i} \tilde{v}_i$ を全ての i について満たすことと同値。

(A.2.7) の Cauchy-Schwarz の不等式での等号成立条件は、 $\lambda \in \mathbb{C}$ が存在して、全ての i, j について

$$\lambda \sigma_i(A) \sigma_j(B) (\tilde{u}_j^\dagger u_i) = \sigma_i(A) \sigma_j(B) (\tilde{v}_j^\dagger v_i)$$

となること。上記の等号成立条件と組み合わせると $\theta_i - \phi_i = \theta_1 - \phi_1$ である。

以上、等号成立の必要条件は $U_A = e^{i\theta} U_B$, $V_A = e^{i\phi} V_B$ であることがわかる。

この不等式を念頭に、各ノルムの双対ノルムを計算する。Frobenius ノルムの双対ノルムは

$$\|A\|_{F*} := \sup_{B; \|B\|_F=1} |\mathrm{Tr}(B^\dagger A)| = \frac{1}{\|A\|_F} \sup_{\tilde{A}; \|\tilde{A}\|_F=1} |\mathrm{Tr}(\tilde{A}^\dagger A)|$$

であり、右辺の最大値は $\tilde{A} = A$ のときに

$$|\mathrm{Tr}(A^\dagger A)| = \sum_i \sigma_i(A)^2 = \|A\|_F^2$$

で達成される。よって Frobenius ノルムの双対ノルムは Frobenius ノルム。誘導ノルムの双対ノルムは Thm. 11 により

$$\|A\|_* := \sup_{B; \|B\|=1} |\mathrm{Tr}(B^\dagger A)| \leq \sup_{B; \|B\|=1} \sum_i \sigma_i(B) \sigma_i(A)$$

と評価される。 B は最大特異値を 1 として A と特異ベクトルを共有する行列を取れば良いので、 $A = U\Sigma V^\dagger$ に対して右辺を最大にするには $B = UV^\dagger$ とすれば上限かつ等号成立。このとき右辺は $\|A\|_{\mathrm{tr}}$ に一致するので、誘導ノルムの双対ノルムはトレースノルムであることがわかる。逆にトレースノルムの双対は

$$\|A\|_{\mathrm{tr}*} := \sup_{B; \|B\|_{\mathrm{tr}}=1} |\mathrm{Tr}(B^\dagger A)| \leq \sup_{B; \|B\|_{\mathrm{tr}}=1} \sum_i \sigma_i(B) \sigma_i(A)$$

A.2.3 演算子ノルム

最後に演算子ノルムを定義する。本稿で用いるのは以下のもののみである。

Def. 15: 演算子ノルム

線形変換 $T : \mathrm{Mat}_m(\mathbb{C}) \rightarrow \mathrm{Mat}_n(\mathbb{C})$ に対し、演算子ノルムを

$$\|T\| := \sup_{A \in \mathrm{Mat}_m(\mathbb{C}); \|A\|=1} \|T(A)\|$$

と定義する。

A.2.4 ノルムに関する公式

本稿で登場するノルムの計算に有用な公式を導出する。まずははじめに、誘導ノルム・演算子ノルムに関する以下の性質を示す。

Cor. 4: 誘導ノルム・演算子ノルム中の積

適切なサイズの行列 A, B , ベクトル v に対し、以下が成り立つ。

$$\|Av\| \leq \|A\| \|v\|$$

$$\|T(A)\| \leq \|T\| \|A\|$$

$$\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$$

$$\|T_1 T_2\| \leq \|T_1\| \|T_2\|$$

第1式は左辺が線形変換したとのベクトルのノルム、右辺は A による拡大の最大値を v のノルムにかけたものである。第2式も同じ解釈が可能。第3式右辺は A によるベクトルの拡大の最大値と B によるベクトルの拡大の最大値をかけたものであり、 AB による拡大の最大値を下回らない。この解釈に従えば、第1式ではベクトル v が A の主軸に沿うとき、第2式では B の主軸が A の主軸に沿うときに等号が成り立つことがわかる。

Prf.

第1式は

$$\|Av\| = \|A(v/\|v\|)\|\|v\| \leq \sup_{\|v'\|=1} \|Av'\|\|v\| = \|A\|\|v\|$$

から得られる。第2式も同様。またこれを用いて、

$$\|AB\| = \sup_{\|v\|=1} \|ABv\| \leq \sup_{\|v\|=1} \|A\|\|Bv\| \leq \sup_{\|v\|=1} \|A\|\|B\|\|v\|$$

から第3式を得る。第4式も同様に示される。

以下の不等式評価は頻繁に登場するが、von Neumann のトレース不等式??を用いると直ちに導ける。

Prop. 10: 行列積トレースの上限

$A \in \text{Mat}_{m \times n}(\mathbb{C}), B \in \text{Mat}_{n \times m}(\mathbb{C})$ に対し、

$$|\text{Tr } AB| \leq \|A\|_{tr}\|B\|. \quad (\text{A.2.9})$$

等号成立は $A = U\sqrt{A^\dagger A}$ を極分解として $B = U^\dagger$ の時。

Prf.

von Neumann のトレース不等式 Thm. 11 より

$$|\text{Tr } AB| \leq \sum_i \sigma_i(A)\sigma_i(B) \leq \sum_i \sigma_i(A)\sigma_1(B) = \|A\|_{tr}\|B\|.$$

等号成立は A, B^\dagger の特異ベクトルが一致し、かつ B の全ての固有値が最大固有値に等しいときに成り立つ。すなわち $A = U\Sigma V^\dagger$ に対して $B = (U\sigma_1(B)V^\dagger)^\dagger = \|B\|VU^\dagger$ のとき。

これによりトレースノルムの変分表示が可能になる。

Cor. 5: トレースノルムの変分表示

行列 $A \in \text{Mat}_{m \times n}(\mathbb{C})$ に対し、

$$\|A\|_{tr} = \sup_{B \in \text{Mat}_{n \times m}(\mathbb{C}); \|B\|=1} |\text{Tr } AB|.$$

トレースノルムが誘導ノルムの双対ノルムであること (cf. appendix A.2.2) と合わせ

ると、トレースノルムの三角不等式が得られる。

$$\begin{aligned}\|A + B\|_{tr} &= \sup_{\|C\|=1} |\mathrm{Tr}(A + B)C| \\ &\leq \sup_{\|C\|=1} |\mathrm{Tr} AC| + \sup_{\|C\|=1} |\mathrm{Tr} BC| = \|A\|_{tr} + \|B\|_{tr}\end{aligned}\quad (\text{A.2.10})$$

A.2.5 Steinspring 拡張

Thm. 12: Steinspring 拡張定理

単位元を持つ C^* -代数 \mathcal{A} , Hilbert 空間 \mathcal{H} , \mathcal{H} 上の有界線形作用素全体の成す C^* -代数 $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ をとる。任意の CP 写像 $\Phi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{H})$ に対して、Hilbert 空間 \mathcal{K} と、単位元を単位元に、 \dagger を \dagger に移す準同型 $\pi : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{B}(\mathcal{K})$ および線形写像 $V : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{K}$ が存在して、

$$\Phi(A) = V^\dagger \pi(A) V \quad \forall A \in \mathcal{A}$$

とできる。さらに、 $\|\Phi(1_{\mathcal{A}})\| = \|V\|^2$ が成り立つ。

証明スケッチ。 $\mathcal{K} = \mathcal{A} \otimes \mathcal{H}$ とする。任意の $A \otimes h, B \otimes g \in K$ に対して

$$\langle A \otimes h, B \otimes g \rangle_{\mathcal{K}} := \langle \Phi(B^\dagger A)h, g \rangle_{\mathcal{H}} = \langle h, \Phi(A^\dagger B)g \rangle_{\mathcal{H}}$$

と定義し、semi-linearity により \mathcal{K} 全体に拡張する。 Φ は \dagger を保存するので、この内積は Hermitian sesquilinear form である。 Φ が CP であることから、この内積は正定値であることが示せる。正定値な Hermitian sesquilinear form は Cauchy-Schwarz 不等式を満たすので

$$\mathcal{K}' = \{x \in \mathcal{K} \mid \langle x, x \rangle_{\mathcal{K}} = 0\} \subset \mathcal{K}$$

は subspace である。 \mathcal{K}/\mathcal{K}' を考えれば degeneracy を消せて、これを完備化すれば Hilbert 空間が得られる（これを \mathcal{K} と書き換える）。 $\pi(A)(B \otimes g) = AB \otimes g$, $Vh = 1_{\mathcal{A}} \otimes h$ と定義すると π, V が欲しい性質を満たすことが確かめられる。

V は \mathcal{H} の \mathcal{K} への自然な埋め込みであり、 $V^\dagger(A \otimes h) = \Phi(A)h$ となる。特に $V^\dagger V = \Phi(1_{\mathcal{A}})$ が成り立ち、 V is isometry $\iff \Phi(1) = 1$.

A.3 正写像

Def. 16: 半正定値・正定値行列

正方行列 $A \in \mathrm{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ は

半正定値: $(v, Av) \geq 0 \quad \forall v \in \mathbb{C}^n$

正定値: $(v, Av) > 0 \quad \forall v \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$

特に、 A が半正定値行列であることを $A \geq 0$, 正定値行列であることを $A > 0$ と表す。

定義から直ちに半正定値行列は全ての固有値が非負のエルミート行列であることがわかる。

Def. 17: 正写像

線形変換 $T : \text{Mat}_{m \times m}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ が半正定値性を保存する、すなわち

$$A \geq 0 \implies T(A) \geq 0$$

ならば、 T は正写像であるという。特に任意の $A \geq 0, A \neq 0$ なる行列に対して $T(A) > 0$ が成り立つとき、 T は真に正 (strictly positive) であると言って $T > 0$ と表す。また任意の $n \in \mathbb{N}$ に対して正写像 T と n 次元恒等演算子のテンソル積 $T \otimes I_n$ もまた正写像であるとき、 T は完全正値写像 (completely positive map: CP map) であるという。

半正定値行列は正方行列に対して定義されるので、正写像は正方行列を正方行列に移す変換である。さらに、以下の補題によって正写像はエルミート共役を保存する。

Lem. 7

任意の正方行列は半正定値行列の線型結合として表される。

Prf.

$A \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ に対し、 $A = (A + A^\dagger)/2 + i(A - A^\dagger)/2i$ と分解できる。さらにエルミート行列 $H \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ は対角化によって

$$H = U \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) U^\dagger = \sum_{k: \lambda_k \geq 0} \lambda_k (u_k u_k^\dagger) - \sum_{k: \lambda_k < 0} |\lambda_k| (u_k u_k^\dagger)$$

と表される。

A.3.1 CP 写像の表現

CP 写像は本稿で頻出する MPS の転送行列のほか、量子情報理論における量子操作 (量子チャネル) にも現れるためよく解析されている。

Thm. 13: CP 写像の Kraus 表現

$T : \text{Mat}_{m \times m}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ を正線型写像とすると以下は同値。

- T は CP 写像である。
- 任意の CP 写像は行列の組 $\{A^i \in \text{Mat}_{n \times m}(\mathbb{C})\}_i$ を用いて

$$T(X) = \sum_i A^i X (A^i)^\dagger$$

と表される (Kraus 表現)。

Prf.

■CP \implies Kraus 表現 $S = \mathbb{C}^m$ とし、 $T : S \otimes S^* \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ を CP 写像とする。 $R \otimes \mathbb{C}^m$ の正規直交基底を $\{|i\rangle_S \otimes |j\rangle_R \mid 1 \leq i, j \leq m\}$ として Bell 状態

$$|\Omega\rangle = \sum_{i=1}^m |i\rangle_S \otimes |i\rangle_R$$

を定め、これにより Choi 行列

$$C_T := (T \otimes I_R)(|\Omega\rangle\langle\Omega|) = \sum_{i,j=1}^m T(|i\rangle\langle j|) \otimes |i\rangle\langle j|$$

を定義する。

$$\begin{aligned} \text{Tr}_R[(I_R \otimes X^T)C_T] &= \sum_{i,j=1}^m T(|i\rangle\langle j|) \text{Tr}[X^T |i\rangle\langle j|] \\ &= \sum_{i,j=1}^m T(|i\rangle\langle i| T |j\rangle\langle j|) = T(X) \end{aligned}$$

であり、 T は CP 写像なので $C_T \geq 0$ 。よって C_T を対角化して

$$C_T = \sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \sum_i |A^i\rangle\langle A^i|, \quad (|A^i\rangle := \sqrt{\lambda_i} |\psi_i\rangle)$$

と表せば、

$$\begin{aligned} T(X) &= \text{Tr}_R[(I_R \otimes X^T)C_T] \\ &= \sum_i \text{Tr}_R[(I_R \otimes X^T) |A^i\rangle\langle A^i|] \\ &= \sum_i A^i X(A^i)^\dagger. \end{aligned}$$

■Kraus 表現 \implies CP $T : \text{Mat}_{m \times m}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ を

$$T(X) := \sum_i A^i X(A^i)^\dagger$$

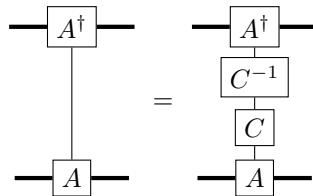
と定めると明らかに線形。任意の整数 $k \geq 0$ と $X \in \text{Mat}_{m' \times m'}(\mathbb{C})$, $v \in \mathbb{C}^{n+k}$ に対し、

$$\begin{aligned} \langle v, (T \otimes I_k)(X)v \rangle &= \sum_i \left\langle v, (A^i \otimes I_k) \sqrt{X} \sqrt{X} (A^i \otimes I_k)^\dagger v \right\rangle \\ &= \sum_i \|\sqrt{X} (A^i \otimes I_k)^\dagger v\|^2 \geq 0 \end{aligned}$$

なので T は CP 写像である。

Kraus 表現を MPS で描画すると、つぶれている physical な脚に XX^{-1} を挿入しても

明らかに不变である。



Kraus 表現はテンソル C とそのエルミート共役 A^\dagger によって構成するので、 $C^{-1} = C^\dagger$ すなわち C としてユニタリのみが許される。一方で virtual な脚に非自明な自由度を追加すると一般に線型写像は保存されない。この観察から以下の定理が導かれる。

Prop. 11: Kraus 表現は physical な脚についてのユニタリ自由度を持つ

CP 写像の Kraus 表現として線型独立な行列の組 $\{A^i\}_{i=1}^r$ と $\{B^j\}_{j=1}^{r'}$ による

$$T(X) = \sum_{i=1}^r A^i X (A^i)^\dagger = \sum_{j=1}^{r'} B^j X (B^j)^\dagger$$

があるとき、 $r = r'$ かつあるユニタリ行列 $U \in \text{Mat}_{r \times r}(\mathbb{C})$ が存在して

$$B^j = \sum_{i=1}^r U_{ji} A^i, \quad \forall 1 \leq j \leq r.$$

逆にこのようなユニタリ変換で Kraus 演算子を変換しても CP 写像は不变である。

Prf.

上記のユニタリ変換で Kraus 表現が不变であることは自明。

T の Kraus 表現として A と B による 2 通りが与えられたとき、Choi 行列はそれぞれ

$$C_T = \sum_{i=1}^r |A^i\rangle\langle A^i| = \sum_{j=1}^{r'} |B^j\rangle\langle B^j|$$

と表される。したがって $\{|A^i\rangle\}_{i=1}^r$ と $\{|B^j\rangle\}_{j=1}^{r'}$ は同じ部分空間の基底である。

よって $r = r'$ かつあるユニタリ行列 $U \in \text{Mat}_{r \times r}(\mathbb{C})$ が存在して

$$|B^j\rangle = \sum_{i=1}^r U_{ji} |A^i\rangle, \quad \forall 1 \leq j \leq r.$$

A.3.2 トレースノルムの縮小性

Def. 18: 双対写像

正方行列の間の線型写像 $T : \text{Mat}_{m \times m}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ の双対写像 $T^* : \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{m \times m}(\mathbb{C})$ を、

$$\forall X \in \text{Mat}_{m \times m}(\mathbb{C}), Y \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}), \quad \text{Tr}[YT(X)] = \text{Tr}[T^*(Y)X]$$

により定義する。^a

^a ベクトル空間 V, W 間の写像 $T : V \rightarrow W$ をとる。 V, W それぞれの双対空間を V^*, W^* としたとき、

$$\begin{array}{ccc} T^* : & W^* & \rightarrow & V^* \\ & \Downarrow & & \Downarrow \\ f & \mapsto & f \circ T \end{array}$$

を一般に T の双対写像という。上記の定義は $(X, Y) := \text{Tr}[XY]$ によって双対空間を対応させたときの随伴写像に他ならない。通常の Hilbert-Schmidt 内積により双対空間を対応させるのではないかため、一般に $T^\dagger \neq T^*$ である。例えば $T : \text{Mat}_2(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_2(\mathbb{C})$ を

$$T(X) = AX, \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

と定めると、 $\text{Tr}[T^*(X)Y] = \text{Tr}[XT(Y)] = \text{Tr}[XAY]$ より双対写像は $T^*(X) = XA$ で定まる。一方 Hilbert-Schmidt 随伴は

$$\text{Tr}[(T^\dagger(X))^\dagger Y]_{HS} = \langle T^\dagger(X), Y \rangle_{HS} \stackrel{\text{def}}{=} \langle X, T(Y) \rangle_{HS} = \text{Tr}[X^\dagger AY] = \text{Tr}[(A^\dagger X)^\dagger Y]$$

より $T^\dagger(X) = A^\dagger X \neq T^*(X)$ となる。

双対写像を導入することで、トレースや Hilbert-Schmidt 内積の中の行列に対する線型写像の作用を“剥がす”ことができる。例えばトレースノルムの変分表示 (Cor. 5) に適用すると、以下の不等式を得る。

Lem. 8: トレースノルムの縮小性 1

$T : \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ に対して、任意の $X \in \text{Mat}_m(\mathbb{C})$ について

$$\|T(X)\|_{tr} \leq \|T^*\| \|X\|_{tr}$$

が成り立つ。

Prf.

トレースノルムの変分表示 (Cor. 5) を用いて

$$\begin{aligned} \|T(X)\|_{tr} &= \max_{\substack{U \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \\ \|U\|=1}} |\text{Tr}[UT(X)]| \\ &= \max_{\substack{U \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \\ \|U\|=1}} |\text{Tr}[T^*(U)X]| \\ &= \max_{\substack{U \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \\ \|U\|=1}} |\text{Tr}[(T^*(U))^\dagger X]| \\ &\leq \max_{\substack{U \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \\ \|U\|=1}} \|T^*(U)\| \|X\|_{tr} = \|T^*\| \|X\|_{tr}. \end{aligned}$$

右辺で得られた $\|T^*\|$ をさらに評価したい。というのも、行列の誘導ノルム $\|A\|$ は $A^\dagger A$ の固有値から最大特異値を簡単に計算できるのに対し、線型写像のノルム、しかも T の双対のノルムは計算が難しいからである。行列の誘導ノルムがトレースノルムの双対

であることを思い出すと、

$$\begin{aligned}
 \|T^*\| &= \sup_{\substack{X \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \\ \|X\|=1}} \|T^*(X)\| \\
 &= \sup_{\substack{X \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \\ \|X\|=1}} \sup_{\substack{Y \in \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \\ \|Y\|_{tr}=1}} |\text{Tr}[YT^*(X)]| \\
 &= \sup_{\substack{X \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \\ \|X\|=1}} \sup_{\substack{Y \in \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \\ \|Y\|_{tr}=1}} |\text{Tr}[T(Y)X]| \\
 &\leq \sup_{\substack{X \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \\ \|X\|=1}} \sup_{\substack{Y \in \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \\ \|Y\|_{tr}=1}} \sum_i \sigma_i(T(Y))\sigma_i(X) \\
 &\leq \sup_{\substack{X \in \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \\ \|X\|=1}} \sup_{\substack{Y \in \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \\ \|Y\|_{tr}=1}} \|T(Y)\|_{tr}\|X\| = \sup_{\substack{Y \in \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \\ \|Y\|_{tr}=1}} \|T(Y)\|_{tr}
 \end{aligned}$$

と変形できる。第1の不等号は von Neumann のトレース不等式 (Thm. 11)、第2の不等号は $\sigma_i(X) \leq \|X\|$ を用いた。

さて、もし上限を与える Y が半正定値なら最右辺は $T(Y)$ のトレースに一致する。加えて T がトレース不变な正写像であれば $\|T(Y)\|_{tr} = \text{Tr}[T(Y)] = \text{Tr } Y = \|Y\|_{tr} = 1$ となるので、 $\|T^*\| \leq 1$ となる。しかし、 Y が半正定値であるとは限らないので、この議論は不十分である。とはいっても、 T がトレース不变な (TP: trace preserving) 正写像であるという条件を加えることによって不等式評価の方針が見えることは示唆的である。途中式に $\sup_X \sup_Y |\text{Tr}[T(Y)X]|$ が現れていた。もしここで $X \in CI$ と特定できればトレース不变性から値は 1 と評価できる。すなわち、 $\|T^*(X)\|$ の最大を与える X が CI に属することを示せねばよい。

観察として、エルミート行列 X が $\|X\| \leq 1$ を満たすとき、

$$-I \leq X \leq I$$

が成り立つことに注目する。^{*1} 正写像 T はこの不等式を保存し、 $-T(I) \leq T(X) \leq T(I)$ が成り立つ。最大特異値の比較により、

$$\|T(A)\| \leq \|T(I)\|$$

である。この関係式は A がエルミートな場合にしか成立しないが、より一般に $A \in \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ で成り立てば演算子ノルム $\|T\| := \sup_{\|X\|=1} \|T(X)\|$ は $\|T(I)\|$ に等しいと期待される。実際、 A はエルミートに限らなくてもこの評価が正しいことが知られている。

Thm. 14: Russo-Dye の定理

正写像 T に対して $\|T\| = \|T(I)\|$.

証明に先立ち以下の補題を示す。

Lem. 9

$$\|A\| \leq 1 \iff \begin{pmatrix} I & A \\ A^\dagger & I \end{pmatrix} \geq 0$$

^{*1} 行列の不等式 $A \leq B$ は $B - A \geq 0$ で定義する。

Prf. Lem. 9

特異値分解を $A = U\Sigma V^\dagger$ と書くと、

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} I & A \\ A^\dagger & I \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & \Sigma \\ \Sigma & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U^\dagger & 0 \\ 0 & V^\dagger \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} U & 0 \\ 0 & V \end{pmatrix} \bigoplus_i \begin{pmatrix} 1 & \sigma_i \\ \sigma_i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U^\dagger & 0 \\ 0 & V^\dagger \end{pmatrix} \end{aligned}$$

なので固有値は $\{1 \pm \sigma_i\}$ である。よって $\begin{pmatrix} I & A \\ A^\dagger & I \end{pmatrix} \geq 0 \iff \sigma_1 = \|A\| \leq 1$.

Prf. Thm. 14

■ $T(I) = I \implies \|T\| = 1$ 一般のユニタリ行列 $U \in \mathrm{U}(n)$ を射影 P_i により

$$U = \sum_i e^{i\theta_i} P_i$$

と固有値分解する。 $\sum_i P_i = 1$ に注意して

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} I & T(U) \\ T(U)^\dagger & I \end{pmatrix} &= \sum_i \begin{pmatrix} T(P_i) & e^{i\theta_i} T(P_i) \\ e^{-i\theta_i} T(P_i) & T(P_i) \end{pmatrix} \\ &= \sum_i \begin{pmatrix} 1 & e^{i\theta_i} \\ e^{-i\theta_i} & 1 \end{pmatrix} \otimes T(P_i). \end{aligned}$$

右辺について任意の $a, b \in \mathbb{C}$ に対し

$$\det \begin{pmatrix} 1 & e^{i\theta_i} \\ e^{-i\theta_i} & 1 \end{pmatrix} = 0, \quad \mathrm{Tr} \begin{pmatrix} 1 & e^{i\theta_i} \\ e^{-i\theta_i} & 1 \end{pmatrix} = 2$$

なので、固有値は $0, 2$ であり、半正定値行列である。Lem. 9 より $\|T(U)\| \leq 1$.

一般に $\|A\| = 1$ なる行列 A を固有値分解して $A = U\Sigma V^\dagger$ と書くと、 $\sigma_i(A) = \cos \theta_i$ なる θ_i が存在する。

$$A = \frac{1}{2} U \mathrm{diag} \left(\frac{e^{i\theta_i} + e^{-i\theta_i}}{2} \right) V^\dagger = \frac{1}{2} (U \mathrm{diag}(e^{i\theta_i}) V^\dagger + U \mathrm{diag}(e^{-i\theta_i}) V^\dagger)$$

なので、

$$\begin{aligned} \|T(A)\| &= \sup_{\|A\|=1} \|T(A)\| \\ &= \left\| \frac{1}{2} T(U \mathrm{diag}(e^{i\theta_i}) V^\dagger) + \frac{1}{2} T(U \mathrm{diag}(e^{-i\theta_i}) V^\dagger) \right\| \leq 1 \end{aligned}$$

$T(I) = I$ ならば $\|T(I)\| = \|I\| = 1$ なので、 $\|T\| = 1$.

■ $T(I) > 0$ の場合 $T'(A) := T(I)^{-1/2} T(A) T(I)^{-1/2}$ と定めると $T'(I) = I$. 従って

$$\begin{aligned} \|T(A)\| &= \|T(I)^{1/2} T'(A) T(I)^{1/2}\| \\ &\leq \|T(I)\|^{1/2} \|T'(A)\| \|T(I)\|^{1/2} \\ &= \|T(I)\| \|T'(A)\| \leq \|T(I)\| \|T'\| \|A\| = \|T(I)\| \|A\| \end{aligned}$$

よって $\|T\| = \sup_{A \neq 0} \|T(A)\| / \|A\| \leq \|T(I)\|$. 上限を導く際 $A = I$ とすれば等号が成り立つので、 $\|T\| = \|T(I)\|$.

我々はトレースノルムの縮小性 (Lem. 8) に端を発して $\|T^*\|$ の評価を目指していた。 Russo-Dye の定理 (Thm. 14) を適用するために、 T^* が正写像であることが必要である。

Cor. 6: 正写像の双対も正写像

$T : \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ が正写像であれば、その双対写像 $T^* : \text{Mat}_n(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_m(\mathbb{C})$ も正写像である。

Prf.

$X \geq 0$ とする。任意の $v \in \mathbb{C}^m$ に対して、

$$\langle v | T^*(X) | v \rangle = \text{Tr}[T^*(X) |v\rangle\langle v|] = \text{Tr}[XT(|v\rangle\langle v|)]$$

である。右辺 $|v\rangle\langle v|$ は射影なので半正定値、 X も半正定値なので、右辺は常に非負。

ここまで議論によって、トレース不变な正写像によりトレースノルムが縮小されることが導かれる。

Thm. 15: TP 正写像によるトレースノルムの縮小性

正写像 $T : \text{Mat}_m(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_n(\mathbb{C})$ がトレースを保存するなら $\|T(X)\|_{tr} \leq \|X\|_{tr}$.

Prf.

Cor. 6 により T^* にも Russo-Dye の定理 (Thm. 14) が適用でき、 $\|T^*\| = \|T^*(I)\|$ である。行列の誘導ノルムはトレースノルムの双対ノルムであるから、

$$\|T^*\| = \sup_{\|Y\|_{tr} \leq 1} |\text{Tr}[Y^\dagger T^*(I)]| = \sup_{\|Y\|_{tr} \leq 1} |\text{Tr}[IT(Y^\dagger)]|$$

だが、 T がトレースを保存するならば右辺は $\sup |\text{Tr}(Y)^*| = 1$ に等しい。Lem. 8 により題意を得る。

A.3.3 既約正写像のスペクトル

本稿にて正写像は主に MPS から構成される転送行列の表示に用いられる。特に 2 点相関関数の漸近的振る舞いを議論する際、同じ転送行列を何回も作用させる。古典 Ising 模型の厳密解では転送行列を無限回作用させる極限を取ることで最大固有値の寄与のみが残った。MPS から構成される転送行列でも同様の振る舞いが期待される。

行列同様、正写像についても固有方程式を考察することで、線型空間の基底に依存しない性質を抽出できると期待される。固有方程式は $T(X) = \lambda X$ の形で与えられるため、 $\lambda - T$ が可逆でないことを“固有値” λ の定義とできる。

Def. 19: スペクトル集合・スペクトル半径

線形変換 $T : \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ に対して、

スペクトル集合: $\text{Sp}(T) := \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \lambda - T \text{ is not invertible}\}$

スペクトル半径: $\rho_T := \sup_{\lambda \in \text{Sp}(T)} |\lambda|$

と定義する。

特に T が正写像であれば半正定値行列を半正定値行列に変換するので、“固有ベクトル”に半正定値行列 X があればスペクトル λ は非負実数になる：もし対応するスペクトル λ が負または虚数であれば、任意のベクトル v に対して $(v, T(X)v) = \lambda(v, Xv) \notin \mathbb{R}_{\geq 0}$ となって正値性に矛盾する。

TP 写像に限るとスペクトル半径が制限される。

Lem. 10: スペクトルは双対写像のスペクトル

正線形写像 T とその双対写像 T^* のスペクトルは一致する。

Prf.

$\ker(T - \lambda) \neq \{0\}$ のとき $\text{Im}(T - \lambda)^\perp \neq \{0\}$. すなわちある $B \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ が存在して任意の $A \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ に対し

$$0 = \text{Tr}[B(T - \lambda)(A)] = \text{Tr}[(T^* - \lambda^*)(B)A]$$

なので $\ker(T^* - \lambda^*) \neq 0$. したがって $\lambda \in \text{Sp}(T)$ ならば $\lambda \in \text{Sp}(T^*)$ が得られる。
 $T^{**} = T$ なので、 T と T^* のスペクトルは一致する。

Lem. 11: TP 写像のスペクトル半径は 1

正線形 TP 写像のスペクトル半径は 1.

Prf.

まず任意の $A \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ に対し

$$\text{Tr}[A] = \text{Tr}[T(A)] = \text{Tr}[AT^*(I)]$$

なので $T^*(I) = I$. Russo-Dye の定理 (Thm. 14) により $\|T^*\| = \|T^*(I)\| = 1$. したがって T^* のスペクトル半径は 1 である。Lem. 10 より T のスペクトル半径も 1.

続く議論のため、半正定値行列 A に対する Perron-Frobenius の定理で直感を醸成しておく。正規直交固有基底 $\{|v_i\rangle\}$ を選び、固有値の大きい順に (固有値 λ_i が $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots$ となるように) 並べる。Fig. A.4 のように、 A による変換によって最大固有値に対応する固有ベクトル方向が支配的になる。極端には、 $\lim_{n \rightarrow \infty} A^n / \|A^n\|$ は最大固有値に対応する固有ベクトルが張る部分空間への射影になる。途中の変換を観察すると、固有ベクトル以外のベクトルは最大固有値に対応する v_1 方向へ傾く。すなわち、原点を頂点として v_1

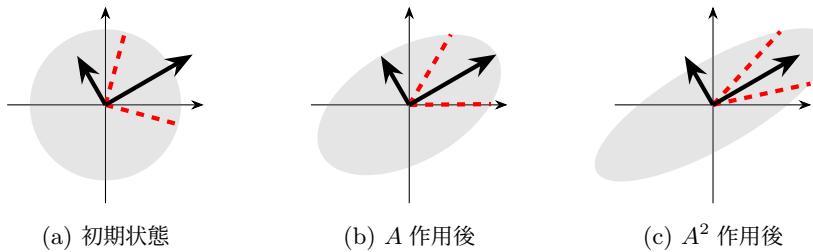


図 A.4: 半正定値行列 A による \mathbb{R}^2 上単位円の変換。太い黒矢印が固有ベクトルと固有値を表し、赤破線は最大固有値の固有ベクトル方向を主軸とする凸円錐の表面を表す。初期状態に A を作用すると最大固有値に対応する主軸へとつぶれていく。

方向に伸びる凸円錐が、 A による変換で鋭くなっていく。

最大固有値が縮退している場合凸円錐が 1 次元に潰れなくなるので、このような事例を排除したい。このような状況では 2 次元以上の空間が残るため、基底の張り替えによって最大固有値の固有ベクトルに $v = \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix}$ ($\alpha \in \mathbb{C}$) のようにいずれかの成分が 0 になるような固有ベクトルを選べる。行列の作用を成分ごとに観察すると、

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}\alpha \\ A_{21}\alpha \end{pmatrix}$$

だが、 v が固有ベクトルである仮定から $A_{21}\alpha = 0$ が成り立つ。このような上三角行列は射影 $P_2 = \text{diag}(0, 1)$ により $AP_2\mathbb{C}^2 \subseteq P_2\mathbb{C}^2$ を満たす。対偶を取れば、非自明な射影が存在しなければ最大固有値は非縮退となり、凸円錐は 1 次元に潰れるだろう。この射影の有無は群の表現における可約・既約の概念を想起させる。

本稿に直接関係しないため証明は省くが、上記の議論は以下の定理にまとめられる。

Thm. 16: Perron-Frobenius の定理

半正定値行列 A がある $m \in \mathbb{N}$ で $A^m > 0$ となるとする。このとき A の絶対値最大の固有値は正の実数であり、その対応する固有空間は 1 次元であり、すべての成分が正の固有ベクトルを持つ。

同様の議論を正写像 T についても適用する。ベクトル空間における円錐のアナロジーから、行列空間における凸円錐 \mathcal{K} は

- $X \in \mathcal{K}, \alpha \geq 0$ ならば $\alpha X \in \mathcal{K}$
- $X, Y \in \mathcal{K}$ ならば $X + Y \in \mathcal{K}$
- $X \in \mathcal{K}$ かつ $-X \in \mathcal{K}$ ならば $X = 0$

を満たす集合として定義できる。半正定値行列全体の集合 \mathcal{K}_{psd} は凸円錐を成しており、 $T(\mathcal{K}_{\text{psd}}) \subseteq \mathcal{K}_{\text{psd}}$ すなわち円錐の角度は広がらない。半正定値行列とのアナロジーから、少々飛躍はあるが、

- 凸円錐の“中心軸”は固有ベクトル
- 凸円錐の“中心軸”に対応する固有値が絶対値最大
- T が既約なら最大固有値は非縮退

であることが期待される。この直感を厳密にするのが Krein-Rutman の定理である。
はじめに、正写像の可約・既約性を定義する。

Def. 20: 正写像の可約・既約

正線形写像 T に対し非自明な射影 $P \neq 0, I$ であって

$$P\rho P = \rho \implies T(P\rho P) \subseteq PT(\rho)P$$

を満たすものが存在するとき、 T は可約 (reducible) であるという。可約でない T は既約 (irreducible) であるという。

この定義を使いやすいように変形した同値条件を以下に示す。

Lem. 12: 既約な正写像と等価な条件

線形正写像 $T : \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ に対し、以下は同値。

1. T は既約
2. 任意の $0 \neq A \geq 0$ に対し $(I + T)^{n-1}(A) > 0$
3. 任意の $0 \neq A, B \geq 0$ で $\langle A, B \rangle_{\text{HS}} = 0$ となるものに対し、 $k \in \{1, \dots, n-1\}$ によって $\text{Tr}[BT^k(A)] > 0$ が成り立つ

Prf.

■item 1 \implies item 2 $A > 0$ なら $(I + T)(A) > 0$ なので、 A には 0 固有値があると仮定して良い。任意の $v \in \mathbb{C}^n$ に対し

$$\langle v, (I + T)(A)v \rangle = \langle v, Av \rangle + \langle v, T(A)v \rangle$$

なので、 $\ker(I + T)(A) \subseteq \ker A$ 。この等号が成り立つと仮定すると、 $\text{supp } A = \text{supp}(A + T(A))$ なので $\text{supp } T(A) \subseteq \text{supp}(A)$ である。よって P を $\text{supp } A$ への射影とすることで $T(P\text{Mat}_{n \times n}(P)) \subseteq P\text{Mat}_{n \times n}(P)$ が成り立つ。 T は可約しているので $P = I$ であり、このとき A に 0 固有値はなく、仮定に矛盾する。したがって $\ker(I + T)(A) \subsetneq \ker A$ であり、 $\ker(I + T)$ の作用によってランクが真に増大する。高々 $n - 1$ 回繰り返せばフルランクになるので、 $(I + T)^{n-1}(A) > 0$ 。

■item 2 \implies item 3 $X > 0$ と $Y \geq 0$ はともにエルミート行列なので、

$$\langle X, Y \rangle_{\text{HS}} = \text{Tr}[XY] = \text{Tr}\left[\sqrt{Y^\dagger}X\sqrt{Y}\right] > 0 \quad (\text{A.3.1})$$

となる。よって

$$\begin{aligned} 0 < \langle B, (I + T)^{n-1}(A) \rangle_{\text{HS}} &= \sum_{k=0}^{n-1} \binom{n-1}{k} \langle B, T^k(A) \rangle_{\text{HS}} \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} \binom{n-1}{k} \langle B, T^k(A) \rangle_{\text{HS}}. \end{aligned}$$

右辺各項は非負なので、いずれかの $k \in \{1, \dots, n-1\}$ に対し $\langle B, T^k(A) \rangle_{\text{HS}} > 0$ が成り立つ。

■item 3 \implies item 1 射影 $P \neq 0, I$ が $T(P\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})P) \subseteq P\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})P$ を満たすと仮定すると、任意の $k \in \mathbb{N}$ に対し

$$\text{Tr}[(I - P)T^k(P)] = 0$$

なので $A = I - P, B = P$ とすれば対偶が示される。

以上の準備により、有限次元における Krein-Rutman の定理を示す。

Thm. 17: 有限次元における Krein-Rutman の定理

T を既約な正写像とする。半正定行列の空間 \mathcal{K}_{psd} において

$$r : \mathcal{K}_{\text{psd}} \rightarrow \mathbb{R}, \quad r(X) := \sup\{\lambda \geq 0 \mid T(X) \geq \lambda X\}$$

とその上限

$$r := \sup_{X \in \mathcal{K}_{\text{psd}}} r(X)$$

を定義したとき、

1. 上限 r を実現する Z は正定値 $Z > 0$
2. $T(Z) = rZ$
3. $\lambda = r$ なる固有空間は縮退しない
4. $r = \rho_T$ (スペクトル半径)
5. T 固有値 λ が正で固有ベクトル Y が半正定値のとき (i.e. $T(Y) = \lambda Y \geq 0$)、 $\lambda = r$

Prf.

■item 1 $a > 0$ に対して $r(aX) = ar(X)$ なので $\text{Tr}(X) = 1$ としても一般性を失わない。 $S = \{X \in \mathcal{K}_{\text{psd}} \mid \text{Tr}(X) = 1\}$ はコンパクトなので、 $r|_S$ が連続なら S 上で最大値を取る。

$X > 0$ なら $T(X) > 0$ なので、

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

とでき、正定値行列空間 $\{X \in \mathcal{K}_{\text{psd}} \mid X > 0\}$ 上で連続。

$$N := (1 + T)^{n-1}S = \{(1 + T)^{n-1}(X) > 0 \mid X \in \mathcal{K}_{\text{psd}}, \text{Tr}(X) = 1\}$$

は正定値行列空間のコンパクト部分集合なので、 $r|_N$ は $Z \in N$ で最大値を取る。

$X \in S, Y = (1 + T)^{n-1}(X) \in N$ をとる。by definition で $T(X) - r(X)X \geq 0$ なので

$$(T - r(X))(Y) = (T - r(X))(1 + T)^{n-1}(X) = (1 + T)^{n-1}(T - r(X))(X) \geq 0. \quad (\text{A.3.2})$$

よって $T(Y) \geq r(X)Y$ 。一方で $r(Y)$ の定義と照合すると、 $\forall X \in S$ で $r(Y) \geq$

$r(X)$. よって

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

より $r = \max_{X \in N} r(X)$ が成り立つ。よってある正定値行列 $Z > 0$ で上限 r が実現される。

■item 2 $T(Z) - rZ \neq 0$ を仮定する。 $W = (1 + T)^{n-1}(Z)$ とすると

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

だが、(A.3.2) 以下の議論を等号なしで繰り返すことで $r(W) > r(Z) = r$ となり、これは r の最大性に矛盾。よって $T(Z) = rZ$.

■item 3 Z に比例しない別の固有ベクトル Z' によって $T(Z') = rZ'$ が成り立つとする。 $r \in \mathbb{R}$ なので Z' はエルミート行列として良い。^a $Z^{-1/2}Z'Z^{-1/2}$ のスペクトル分解を

$$Z^{-1/2}Z'Z^{-1/2} = \sum_{a=1}^n \lambda_a P_a, \quad \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$$

とすれば、

$$\lambda_1 - Z^{-1/2}Z'Z^{-1/2} = \sum_{a=2}^n (\lambda_1 - \lambda_a) P_a \geq 0$$

はフルランクではない。よって $\lambda_1 Z - Z'$ もフルランクではないが、

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

に矛盾。

■item 4

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

は $\tilde{T}(I) = I$ を満たす正写像である。Russo-Dye の定理 (Thm. 14) により $\|\tilde{T}\| = 1$. T の固有方程式を $T(A) = \alpha A$ とすると、

$$\tilde{T}(Z^{-1/2} A Z^{-1/2}) = \frac{\alpha}{r} Z^{-1/2} A Z^{-1/2}$$

なので、

$$1 = \|\tilde{T}\| \geq \frac{|\alpha|}{r}$$

である。 $A = Z$ のとき $\alpha = r$ なので、 $r = \rho_T$.

■item 5 Lem. 10 より r は双対写像 T^* の正定値行列 X' を固有ベクトルとするスペクトルでもあるので、

$$r \operatorname{Tr}[X'Y] = \operatorname{Tr}[T^*(X')Y] = \operatorname{Tr}[X'T(Y)] = \lambda \operatorname{Tr}[X'Y].$$

(A.3.1) で見たように $\operatorname{Tr}[X'Y] > 0$ なので、 $\lambda = r$.

^a T の実固有値の固有ベクトルを A としたとき、 $A + A^\dagger$ も同じ固有値の固有ベクトル。

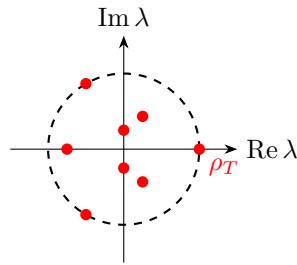


図 A.5: 既約正線型写像のスペクトルの分布

ここまで結果を踏まえ、正写像のスペクトルの性質をまとめておく。本節冒頭で見たように正写像はエルミート性を保存する。したがって $T(X) = \lambda X$ の固有方程式両辺のエルミート共役をとることで

$$T(X^\dagger) = \lambda^* X^\dagger$$

が成り立ち、固有値の複素共役も固有値になる。Krein-Rutman の定理 (Thm. 17) と合わせると、固有値の分布は Fig. A.5 のようになる。右端の赤点で表した $\lambda = \rho_T$ の固有値は縮退せず、固有ベクトルは正定値行列である。

MPS は物理的に等価でも virtual な足にゲージを与えた異なる表現を持つ。ゲージ変換でスペクトルの性質は変わってほしくない。これを念頭に、相似変換が既約性を保存することを示す。

Prop. 12: 相似変換は既約性を保存

$T : \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ を既約な正線形写像とする。任意の $c > 0$, 可逆行列 $C \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ に対し、

$$T'(\cdot) := cC^{-1}T(C \cdot C^\dagger)(C^\dagger)^{-1}$$

も既約な正線形写像である。

Prf.

T' が射影 $Q \neq 0$ によって $T'(Q\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})Q) \subseteq Q\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})Q$ を満たすとする。すなわち

$$\begin{aligned} &cC^{-1}T(CQ\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})QC^\dagger)(C^\dagger)^{-1} \\ &= cC^{-1}T(CQC^\dagger\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})CQC^\dagger)(C^\dagger)^{-1} \\ &= cC^{-1}T(P\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})P)(C^\dagger)^{-1} \\ &\subseteq Q\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})Q. \end{aligned}$$

ここに、 P は $\text{supp } CQC^\dagger$ への射影である。可逆行列はランクを変えないので $\text{rank}_{X \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})} T(PXP) \leq \text{rank } Q$ だが、 T は既約かつ $Q \neq 0$ なので $P = I$ に限られる。よって $Q = I$ となり、 T' も既約。

Krein-Rutman の定理は次の意味で逆を持つことを示す。

Thm. 18: スペクトルと既約性の同値条件

$T : \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ をスペクトル半径 ρ_T の正線型写像とする。以下は同値。

1. T は既約
2. スペクトル半径は縮退しない固有値で、対応する左右固有ベクトルは正定値 (i.e. $T(X) = \rho_T X > 0, T^*(Y) = \rho_T Y > 0$)

Prf.

■1. \implies 2. Krein-Rutman の定理 (Thm. 17) そのもの。

■2. \implies 1. 相似変換として Prop. 12 でいうところの $c = 1/\rho_T, C = Y^{-1/2}$ をとる。このとき $T'(\sqrt{Y}X\sqrt{Y}) = \sqrt{Y}X\sqrt{Y} > 0$ が直ちにわかる。Thm. 17 よりスペクトル半径が 1 であり、Lem. 11 と合わせると T' は TP 写像。さらに Prop. 12 より最大固有値 1 の縮退度は変わらない。ここで T' が可約、すなわち射影 $P \neq 0, I$ が存在して $T'(P\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})P) \subseteq P\text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})P$ を満たすとする。 T' は TP なので $T'|_{PDP} : PDP \rightarrow PDP$ が定義できて、Brouwer の不動点定理 CITE BROUWER FIXED POINT THEOREM!!!!!! より $\rho_0 \in PDP$ s.t. $T'(\rho_0) = \rho_0$ が存在する。 $\sqrt{Y}X\sqrt{Y} > 0$ なのでこれは $\rho_0 \in PDP$ と一致せず、スペクトル半径 1 の固有値が縮退して仮定に矛盾する。

peripheral spectrum

Fig. A.5 で表したように $\lambda = \rho_T$ となる固有値は縮退しないが、スペクトル半径上には他の固有値が存在しうる。このような固有値は凸円錐の回転や反転を含んだ変換に対応する。 T を何度も作用させても $\lambda = \rho_T$ の固有値と同じ大きさを持つため、 T^n の $n \rightarrow \infty$ 極限でも寄与が残る。このようなスペクトル $S = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \lambda \in \text{Sp}(T), |\lambda| = \rho_T\}$ を **peripheral spectrum** という。正写像を適切に規格化することで $\rho_T = 1$ とすれば、 S は単位円周上に配置できる。Thm. 17 より 1 は必ず S に入る。もし S の任意の元が有理数 k/m によって $e^{2\pi i k/m}$ の形で表せれば、 T^m を考えることでスペクトル半径上の固有値が 1 のみになって扱いやすい。代償として既約性が失われるが、再度既約分解すれば上述の議論を適用できる。しかし指数が無理数によって表される場合は peripheral spectrum の寄与を除去できない。実際にはこの懸念は解消されることが以下の定理により示される。

Prop. 13: Peripheral spectrum は整数乗根

$T : \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ を既約で $T(I) = I$ となる正線形写像で、Schwarz の不等式

$$\forall X \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}), \quad T(X^\dagger X) \geq T(X^\dagger)T(X)$$

を満たすとする。peripheral spectrum はある $m \in \{1, \dots, d^2\}$ により $\{\rho_T e^{2\pi i k/m} \mid k \in \mathbb{Z}_m\}$ の形で表される。

証明にあたり、以下の補題を示す。

Lem. 13

T が Schwarz の不等式を満たし、さらにある $X \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ にて

$$T(X^\dagger X) = T(X^\dagger)T(X), \quad T(X X^\dagger) = T(X)T(X^\dagger)$$

を満たすとき、任意の $Y \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ に対し

$$T(X^\dagger Y) = T(X^\dagger)T(Y), \quad T(Y X^\dagger) = T(Y)T(X^\dagger)$$

が成り立つ。

Prf. Lem. 13

$t \in \mathbb{R}$ に対して

$$f(t) := T((X + tY)^\dagger(X + tY)) - T(X + tY)^\dagger T(X + tY)$$

とおく。Schwarz の不等式より $f(t) \geq 0$. 展開すると

$$\begin{aligned} f(t) &= T(X^\dagger X) - T(X^\dagger)T(X) \\ &\quad + t(T(X^\dagger Y) - T(X^\dagger)T(Y) + T(Y^\dagger X) - T(Y^\dagger)T(X)) \\ &\quad + t^2(T(Y^\dagger Y) - T(Y^\dagger)T(Y)). \end{aligned}$$

第 1 項は仮定より 0, 第 3 項は Schwarz の不等式より半正定値なので、任意の $t \in \mathbb{R}$ で $f(t) \geq 0$ を満たすためには第 2 項の係数が 0 でなければならない。^a

$$T(X^\dagger Y) - T(X^\dagger)T(Y) + T(Y^\dagger X) - T(Y^\dagger)T(X) = 0.$$

t を it に置き換えると $f(it) \geq 0$ でなければならず、このとき 1 次の係数が

$$i(T(X^\dagger Y) - T(X^\dagger)T(Y) - T(Y^\dagger X) + T(Y^\dagger)T(X)) = 0$$

となる。上記の和と差から題意を得る。

^a より直接的には、任意のベクトル v を用意して $\langle v, f(t)v \rangle \geq 0$ を満たすことから。

Prf. Prop. 13

$\lambda \in S$ を固有値とする固有ベクトル $U \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ をとる。Schwarz の不等式は $U^\dagger U \leq T(U^\dagger U)$ である。 $r(U^\dagger U) = \sup\{\lambda \geq 0 \mid (T - \lambda)(U^\dagger U) \geq 0\} = 1$ なので、Schwarz の不等式で等号が成立して、 U をユニタリにできる。他の S の固有値に対応する固有ベクトル V も同様に Schwarz の不等式で等号が成立する。

Lem. 13 より任意の $X \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ に対し

$$T(U^\dagger X) = T(U^\dagger)T(X), \quad T(X U^\dagger) = T(X)T(U^\dagger).$$

特に X を S に属する固有値の固有ベクトルとすると、 X はユニタリで群を成す。 S の元は高々 n^2 個なのでこの群は位数 n^2 以下の有限群であり、ある

$m \in \{1, \dots, n^2\}$ によって T の peripheral spectrum の元は $\lambda = e^{2\pi ik/m}$ と表される。

primitive map

peripheral spectrum の面倒を避けるため、peripheral spectrum がスペクトル半径 ρ_T しかない正写像として primitive map を定義する。

Def. 21: Primitive map

既約な正線形写像 $T : \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ が peripheral spectrum としてスペクトル半径 $\{\rho_T\}$ のみを持つとき、 T は primitive であるという。

以降、 $0 \neq A \geq 0$ を $\rho_A := A/\|A\|_1$ とすることで $\text{Tr } \rho_A = 1$ とする。これにより密度行列を input とする命題は線形性から

$$T(A) = T(\rho_A) \text{Tr } A$$

を通して半正定値行列全体に拡張できる。以下、密度行列の集合を $\mathcal{D} := \{\rho \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \mid \rho \geq 0, \text{Tr}(\rho) = 1\}$ と表す。

Thm. 19: primitive map

既約な正線形 TP 写像 $T : \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C}) \rightarrow \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ について以下の同値。

1. T は primitive
2. 任意の密度行列 ρ にて極限 $\lim_{k \rightarrow \infty} T^k(\rho)$ が存在し、 ρ によらず同じ正定値行列の密度行列 ρ_∞ に収束する
3. ある $n \in \mathbb{N}$ が存在して、任意の密度行列 ρ に対し $T^n(\rho) > 0$
4. 任意の $k \in \mathbb{N}$ にて T^k は既約

以下の証明では TP 写像はスペクトル半径が 1 であること (Lem. 11) を活用している。

Prf.

■item 1 \implies item 2 仮定より T の peripheral spectrum は $S = \{1\}$ である。すなわちある密度行列 $\rho_\infty > 0$ が存在して $T(\rho_\infty) = \rho_\infty$ を満たす。他の固有値 $\lambda \in \text{Sp}(T)$ は $|\lambda| < 1$ なので、任意の密度行列 ρ に対し

$$\lim_{k \rightarrow \infty} T^k(\rho) = \rho_\infty$$

が成り立つ。

■item 2 \implies item 3 任意の $\rho \in \mathcal{D}$ を正定値とする。 $\rho_\infty > 0$ なので最小固有値 $\lambda_{\min} := \lambda_{\min}(\rho_\infty) > 0$ が存在し、十分大きい N では

$$\|T^N - T_\infty\| < \lambda_{\min}$$

である (左辺は $N \rightarrow \infty$ で 0 に収束する)。任意の $\rho \in \mathcal{D}$ に対して

$$T^N(\rho) = T_\infty(\rho) + (T^N - T_\infty)(\rho) = \rho_\infty + (T^N - T_\infty)(\rho)$$

だが、 $\|(T^N - T_\infty)(\rho)\| \leq \|T^N - T_\infty\| < \lambda_{\min}$ なので

$$\lambda_{\min}(T^N(\rho)) \geq \lambda_{\min}(\rho_\infty) - \|(T^N - T_\infty)(\rho)\| > 0$$

すなわち $T^N(\rho) > 0$.

■item 3 \implies item 4 背理法。ある $k \in \mathbb{N}$ にて非自明な射影 $P \neq 0, I$ が存在して $T^k(P\text{Mat}_n(\mathbb{C})P) \subseteq P\text{Mat}_n(\mathbb{C})P$ を満たすと仮定する。

$$T^{nk}(P\text{Mat}_n(\mathbb{C})P) \subseteq T^{(n-1)k}(P\text{Mat}_n(\mathbb{C})P) \subseteq \cdots \subseteq P\text{Mat}_n(\mathbb{C})P$$

だが、これは $T^n > 0$ の合成 $T^{nk} = (T^n)^k$ が真に正であることに矛盾。

■item 4 \implies item 1 背理法。 T の peripheral spectrum に $S \ni e^{2\pi i k/m} \neq 1$ が存在すると仮定する。これに対応する固有ベクトル $U \in \text{Mat}_{n \times n}(\mathbb{C})$ をとる。 T^m は固有値 1 の固有ベクトルとして少なくとも二つ I, U が存在し、Thm. 17 の対偶に矛盾する。

付録 B

対称性と表現論

本章では対称性の記述において重要な役割を占める群及びある種の圏とその表現論を数学的側面から扱う。本稿では離散対称性を主に扱っているため、ここでも離散対称性を念頭に記述する。群の表現論については主に

B.1 群

対称性を素朴に記述すると群が現れる。

付録 C

群の表現

量子力学は線形代数によって記述される。対称性を量子力学に組み込むには、必然的にその構造を線形代数に持ち込まなければならない。群の表現は、群の構造を線形空間や射影空間に持ち込むための枠組みである。量子力学において対称性を真正面から議論するには群の表現論を避けて通れない。本節では、はじめに appendix C.1 で群を線型空間で表現する線形表現を定義し、さらに表現の最も良い簡約である既約表現を導入する。加えて Landau paradigm に基づく相の分類との関係を議論する。続いて appendix C.2 で、

本節は主に [38] を参考にした。本節では群の有限次元表現のみを扱う。また群は特に有限群を念頭に置く。

C.1 線形表現

C.1.1 線形表現の定義

Def. 22: 線形表現

群 G に対し、準同型写像 $D : G \rightarrow \mathrm{GL}(d)$ を G の d 次元線形表現 (linear representation) または単に表現という。

直ちに

$$D(1_G) = \mathrm{id}_d, D(g^{-1}) = D(g)^{-1}$$

を得る。

Def. 23: 表現の基底 (basis)

線型空間 X に対し群 G が線型写像として左作用するものとする。このとき一次独立な d 個のベクトル $\{\psi_\mu \in X\}_{\mu=1,\dots,d}$ と G の d 次元表現 $D : G \rightarrow \mathrm{GL}(d; X)$ との間に

$$(g\psi)_\mu = \sum_{\nu=1}^d D(g)_{\mu\nu} \psi_\nu \quad (\forall g \in G)$$

が成り立つとき、 $\{\psi_\nu\}_{\nu=1,\dots,d}$ を表現 D の基底という。

量子力学では、表現 $D(g)$ が対称性演算子、基底 ψ_μ が状態ベクトルを表す。上の定義は、対称性操作 $g \in G$ に対応する対称性演算子 $D(g)$ の作用によって状態 ψ_μ が状態

$(g\psi)_\mu$ に変換されることを示している。量子力学で対称性が群の表現として現れるといったとき、上の描像で終始している。物理現象は観測するまで基底の選び方に依存しないという信念のもと、群の表現もしばしば基底の変換で同一視する。有限群 G の二つの d 次元線形表現 D_1, D_2 が

$$\exists T \in \mathrm{GL}(d), \forall g \in G, D_1(g) = TD_2(g)T^{-1}$$

を満たすとき、二つの表現 D_1, D_2 は同値であると言って $D_1 \sim D_2$ で表す。また D_1 から D_2 を導く操作を同値変換という。多くの場面で等価な表現を同一視するため、等価な表現に共通する量が欲しい。線形代数の知識から行列式や対角和がこれに該当することがわかる。群の表現論、特に物質の相分類に関わる表現論では対角和が特に有用で、指標 (character) と呼ばれる。

量子系において、確率の保存を満たすように線形表現もユニタリであることが望ましい。表現 D の値域が $\mathrm{U}(d)$ のとき D をユニタリ表現 (unitary representation) という。

Thm. 20: 表現のユニタリ化

有限群の任意の線形表現は同値変換でユニタリ表現にできる。

Prf.

群 G の任意の d 次元線形表現 $D : G \rightarrow \mathrm{GL}(d)$ に対し、

$$H := \sum_{g \in G} D(g)^\dagger D(g)$$

とすると、これは明らかにエルミート行列である。また $D(g)$ に対して逆元 $D(g)^{-1}$ が取れることから $\det D(g) \neq 0 (\forall g \in G)$ であり、 H は正定値である。従ってユニタリ行列 $U \in \mathrm{U}(d)$ により

$$H = U\Lambda U^\dagger, \quad \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_d)$$

と対角化できて、固有値 λ_i は全て正。

そこで D と等価な表現 D' を

$$D'(g) := V^{-1}D(g)V, \quad V := U\Lambda^{-1/2}$$

により与えると、

$$\begin{aligned} D'(g)^\dagger D'(g) &= V^\dagger D(g)^\dagger (V^{-1})^\dagger V^{-1} D(g) V \\ &= \Lambda^{-1/2} U^\dagger D(g)^\dagger U \Lambda^{1/2} \Lambda^{1/2} U^\dagger D(g) U \Lambda^{-1/2} \\ &= \Lambda^{-1/2} U^\dagger D(g) H D(g) U \Lambda^{-1/2} \end{aligned}$$

ここで

$$D(g)^\dagger H D(g) = \sum_{g'} D(g)^\dagger D(g')^\dagger D(g') D(g) = \sum_{g''(=g'g) \in G} D(g'g)^\dagger D(g'g) = H$$

なので、

$$D'(g)^\dagger D'(g) = \Lambda^{-1/2} U^\dagger H U \Lambda^{-1/2} = 1.$$

となり、 D' はユニタリ表現である。

この定理を踏まえ、以下では線形表現をユニタリ表現として扱う。

C.1.2 種々の表現の構成

量子力学の複合粒子系はテンソル積で記述される。Hilbert 空間 V_1, V_2 がそれぞれ d_1, d_2 次元の線形空間であるとき、複合系 $V_1 \otimes V_2$ は $d_1 d_2$ 次元である。これを反映して、 V_1 に作用する d_1 次元線形表現 $D^{(1)}$ と V_2 に作用する d_2 次元線形表現 $D^{(2)}$ から複合系 $V_1 \otimes V_2$ に作用する $d_1 d_2$ 次元線形表現を構成する。

まずは二つの系が完全に独立しており、それぞれが有する対称性 G, H すら別々であっても良い場合を考える。群 G, H の表現 $D^{(G)} : G \rightarrow V_1, D^{(H)} : H \rightarrow V_2$ をとる。 $V_1 \boxtimes V_2 := V_1 \otimes V_2$ は通常の線型空間のテンソル積として、

$$\begin{array}{ccc} D^{(G)} \boxtimes D^{(H)} : & G \times H & \rightarrow \\ & \Downarrow & \Downarrow \\ & (g, h) & \mapsto D^{(G)}(g) \otimes D^{(H)}(h) \end{array} \quad \begin{array}{c} V_1 \boxtimes V_2 \\ \Downarrow \\ D^{(G)}(g) \otimes D^{(H)}(h) \end{array}$$

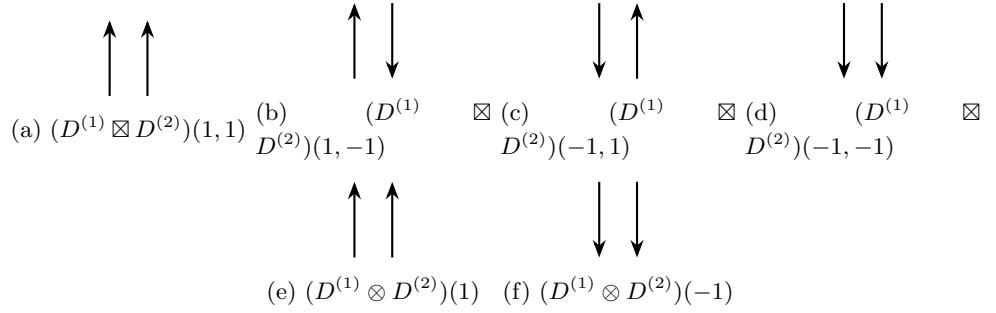


図 C.1: 2 粒子 \mathbb{Z}_2 スピン系における外部テンソル積表現 (a-d) とテンソル積表現 (e-f) それぞれで表せる対称性操作

で定義される $D^{(G)} \boxtimes D^{(H)}$ を $D^{(G)}$ と $D^{(H)}$ の外部テンソル積またはボックステンソル積 (box tensor product) と呼ぶ。ここに、 $D^{(G)}(g) \otimes D^{(H)}(h)$ は

$$V_1 \otimes V_2 \mapsto (D^{(G)}(g)V_1) \otimes (D^{(H)}(h)V_2)$$

と作用し、行列形式で書くと

$$\begin{pmatrix} D_{11}^{(G)}(g)D_{11}^{(H)}(h) & \cdots & D_{11}^{(G)}(g)D_{1d_2}^{(H)}(h) & D_{1d_1}^{(G)}(g)D_{11}^{(H)}(h) & \cdots & D_{1d_1}^{(G)}(g)D_{1d_2}^{(H)}(h) \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ D_{11}^{(G)}(g)D_{d_2 1}^{(H)}(h) & \cdots & D_{11}^{(G)}(g)D_{d_2 d_2}^{(H)}(h) & D_{1d_1}^{(G)}(g)D_{d_2 1}^{(H)}(h) & \cdots & D_{1d_1}^{(G)}(g)D_{d_2 d_2}^{(H)}(h) \\ \vdots & & \vdots & \ddots & & \vdots \\ D_{d_1 1}^{(G)}(g)D_{11}^{(H)}(h) & \cdots & D_{d_1 1}^{(G)}(g)D_{1d_2}^{(H)}(h) & D_{d_1 d_1}^{(G)}(g)D_{11}^{(H)}(h) & \cdots & D_{d_1 d_1}^{(G)}(g)D_{1d_2}^{(H)}(h) \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ D_{d_1 1}^{(G)}(g)D_{d_2 1}^{(H)}(h) & \cdots & D_{d_1 1}^{(G)}(g)D_{d_2 d_2}^{(H)}(h) & D_{d_1 d_1}^{(G)}(g)D_{d_2 1}^{(H)}(h) & \cdots & D_{d_1 d_1}^{(G)}(g)D_{d_2 d_2}^{(H)}(h) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_d \\ \vdots \\ \psi_{d_1} \end{pmatrix}$$

となる。すなわち $D^{(G)}$ の添え字で $d_1 \times d_1$ 個のブロックから一つが指定され、 $D^{(H)}$ の添え字でブロック内 $d_2 \times d_2$ 個の成分から一つが指定される。外部テンソル積は主に 2 つの系の stacking と呼ばれる操作で用いられる。

上で見たような外部テンソル積による複合系は複合系を独立な系の複合としか見ておらず、マクロな対称性の記述に適さない。我々が興味を持っているのは、個々の系が同じ対称性を有しており ($G = H$)、マクロな対称性操作を施す場合である。そこで、

$$D^{(1)} \otimes D^{(2)} : G \rightarrow \mathrm{GL}(d_1 d_2); g \mapsto D^{(1)}(g) \otimes D^{(2)}(g)$$

をテンソル積表現 (tensor product representation) または直積表現と呼ぶ。例えば 2 スピン系における外部テンソル積表現とテンソル積表現は Fig. C.1 のような違いがある。量子多体系で通常考察する大域的対称性は後者である。

スピン 1/2 粒子の 2 体系では、合計スピンとして $S = 0$ の状態と $S = 1$ の状態がある。このときスピン角運動量を保存するユニタリ変換で両者の間を繋ぐことはできない。これは、基底の適切な変換によって表現行列が以下のようにブロック対角化され、二つのセクターを混ぜる非対角項が存在しなくなることを意味する。

$$D^{(1)} \oplus D^{(2)}(g) = \begin{pmatrix} D^{(1)}(g) & 0 \\ 0 & D^{(2)}(g) \end{pmatrix}$$

このような表現を直和表現 (direct sum representation) と呼ぶ。対称性演算子 $D^{(1)} \oplus D^{(2)}(g)$ と交換する演算子もまた $d_1 \times d_1$ と $d_2 \times d_2$ のブロック対角行列で表される。**ホンマか???** 異なるブロックは互いに完全に独立しているため、直和表現の解析は個別のセクターに注目すれば良い。線形表現がある小さな表現の直和表現 (と同値な表現) であるとき、基底を適切に選ぶことでさらに直和分解し、別々のセクターとすると解析が容易になる。このように、さらに小さな表現の直和表現に分解できる表現を可約表現 (reducible representation)、それ以上小さな表現に直和分解できない表現を既約表現 (irreducible representation) と呼ぶ。任意の表現は既約表現から構成できるので、表現論の、すなわち量子力学における対称性の解析は既約表現の解析に帰着する。

C.1.3 Landau paradigm における相の分類と既約表現の分類

以下、詳細に立ち入る前に物理的背景を確認する。

Landau paradigm は対称性の自発的破れの有無と物質の相を対応させる指導原理である。熱力学極限の基底状態では、基底状態の対称性が自発的に破れ、理論すなわち Hamiltonian の対称性の部分群に落ちる場合がある。

Hamiltonian の対称性を群 G とする。群元 $g \in G$ は Hilbert 空間のユニタリ演算子 \hat{U}_g に対応する。対称性操作の結合性 $\hat{U}_{g_1} \hat{U}_{g_2} = \hat{U}_{g_1 g_2}$ を要請すると、 \hat{U} は G のユニタリ線形表現となる。Hamiltonian が G で対称であるとは、任意の $g \in G$ に対し Hamiltonian が同じ次元のユニタリ表現 \hat{U}_g と可換であることである。このとき Hamiltonian と $\{\hat{U}_g\}_{g \in G}$ は同時対角化可能なので、エネルギー固有状態をこれらの同時固有状態に取れる。

一方で基底状態の対称性を群 $H \leq G$ とする。 \hat{U} の H における表現は

$$\hat{U}_h^{(H)} := \begin{cases} \hat{U}_h & (h \in H) \\ 0 & (h \notin H) \end{cases}$$

で定義されるので、基底状態の対称性は

$$\hat{U}_h |\psi\rangle = |\psi\rangle$$

とする。^{*1}

C.1.4 Schur の補題と帰結

既約表現において以下の補題が有用である。

Lem. 14: Schur の補題 I

$D^{(1)}, D^{(2)}$ が群 G の既約表現で、次元がそれぞれ m, n のとき、

$$\forall g \in G, D^{(1)}(g)M = M D^{(2)}(g)$$

なる $m \times n$ 行列 M は

1. $M = 0$

^{*1} 基底への作用で生じうる位相因子の議論は appendix C.2 にて後述。

2. M は正方行列で $\det M \neq 0$ かつ $D^{(1)} \sim D^{(2)}$
のいずれか。

Lem. 15: Schur の補題 II

群 G の有限次元既約表現 D に対して、

$$D(g)M = MD(g) \quad (\forall g \in G)$$

を満たす行列 M は単位行列の定数倍に限る。

Proof of Lem. 14. 表現 $D^{(1)}$ の作用する線型空間を V_1 、 $D^{(2)}$ の作用する線型空間を V_2 とすると、 M は V_2 から V_1 への線形変換と捉えられる。 $\ker M = \{x \in V_2 | Mx = 0\}$ の任意の元は $MD^{(2)}x = D^{(1)}Mx = 0$ を満たすので、 $D^{(2)}x \in \ker M$ すなわち $D_2 \ker M = \ker M$ 。 $D^{(2)}$ が正則かつ既約なので $\ker M = V_2$ または $\ker M = 0$ に限られる。

$\ker M = V_2$ のとき $M = 0$ 。

$\ker M = 0$ のとき、 $M \neq 0$ は单射を成す。 $\forall x \in V_2$, $D_1(g)Mx = MD_2(g)x$ すなわち $D^{(1)}MV_2 = MV_2$ 。 $D^{(1)}$ が既約なので $MV_2 = V_1$ に限られ、 $M : V_2 \rightarrow V_1$ は全射。ゆえに $\det M \neq 0$ であり、直ちに $D^{(2)}(g) = M^{-1}D^{(1)}(g)M$ を得る。□

Proof of Lem. 15. 仮定により $\forall \lambda \in \mathbb{C}$ にて

$$D(g)(M - \lambda 1) = (M - \lambda 1)D(g)$$

が成り立つ。 D が既約表現なので Schur の補題 I により

1. $M - \lambda 1 = 0$
2. $\det(M - \lambda 1) \neq 0$

のいずれか。 λ を M の固有値とすれば $\det(M - \lambda 1) = 0$ なので M は単位行列の定数倍に限られる。□

この補題から直ちに得られる帰結として、本稿で用いている命題に以下がある。

Cor. 7: 有限 Abel 群の既約表現は 1 次元表現

Abel 群の既約表現は 1 次元表現。

Proof. Abel 群の表現行列は

$$D(g)D(g') = D(g')D(g)$$

を満たすので、Lem. 15 により $D(g)$ は単位行列の定数倍。特に既約表現なら $D(g)$ は 1 次元になる。□

Def. 24: 正則表現 (regular representation)

群 G から G への左作用

$$\rho : G \rightarrow \text{Aut } G; g \mapsto (g' \mapsto gg')$$

によって与えられる線形表現を正則表現という。

のちに Landau paradigm に基づく相分類を議論するため、部分群の表現も定義しなければならない。群の表現を部分群へ自然に落とし込むことは容易い。少しテクニカルだが、逆に部分群の表現をそれを含む群へ自然に拡張することもできる。

Def. 25: 表現の制限・誘導表現

群 G の表現 D の $H \leq G$ への制限を、

$$D \downarrow H := \{D(h) | h \in H\}$$

で定義する。また G が有限群であって、左剩余類で

$$G = g_1H \otimes \cdots \otimes g_kH \quad (g_1 = 1_G, k = |G/H|)$$

と分解できるとき、 H の表現 Δ による G の誘導表現 $\Delta \uparrow G$ を

$$[(\Delta \uparrow G)(g)]_{i\mu,j\nu} := \delta_{ij}(g)[\Delta(g_i^{-1}gg_j)]_{\mu\nu}$$

with $\delta_{ij}(g) = \begin{cases} 1 & (g_i^{-1}gg_j \in H) \\ 0 & (g_i^{-1}gg_j \notin H) \end{cases}, \begin{pmatrix} \mu, \nu \in \{1, \dots, \dim \Delta\} \\ i, j \in \{1, \dots, k = |G/H|\} \end{pmatrix}$ (C.1.1)

と定義する。

Prf. (C.1.1) が表現であること

$g, g' \in G$ を与える。 $g_i^{-1}gg'g_j \in H$ のとき、 $g'g_j \in g_mH, gg_m \in g_nH$ とすると、

$$g_iH \ni gg'g_j = gg_m(g_m^{-1}g'g_j) \in g_nH$$

なので $n = i$. 従って

$$\exists! m \in \{1, \dots, |G/H|\} \text{ s.t. } \delta_{ij}(gg') = \delta_{im}(g)\delta_{mj}(g').$$

これにより

$$\begin{aligned} [(\Delta \uparrow G)(gg')]_{i\mu,j\nu} &= \delta_{ij}(gg')\Delta(g_i^{-1}gg'g_j)_{\mu\nu} \\ &= \sum_{m=1}^{|G/H|} \delta_{im}(g)\delta_{mj}(g')[\Delta(g_i^{-1}gg_m)\Delta(g_m^{-1}gg_j)]_{\mu\nu}. \end{aligned}$$

Cor. 8: 誘導表現の指標

部分群 $H \leq G$ によって $G = g_1H \oplus \cdots \oplus g_{|G/H|}H$ と剩余類分解できるとする。 H の表現 Δ_H の指標 χ_H に対して $\Delta_H \uparrow G$ の指標は

$$\text{tr}(\Delta_H \uparrow G)(g) = \sum_{i\mu} \sum_{j\nu} \delta_{ij}\delta_{\mu\nu} (\Delta_H \uparrow G)(g)_{i\mu,j\nu} = \sum_{j=1}^{|G/H|} \delta_{jj}(g)\chi_H(g_j^{-1}gg_j).$$

C.2 射影表現

appendix C.1 では対称性演算子をユニタリ線形表現として扱い、Landau パラダイムが再現されることを確認した。しかし量子状態は常に U(1) 位相の同一視を受ける。線形表現は U(1) 位相自由度を許さないので、量子力学の対称性を記述するには不十分である。

対称性演算子を量子状態に作用させることで、一般に位相因子が生じ得る。この位相因子は、状態の位相自由度と捉えるよりも、演算子に U(1) 位相自由度があるした方が都合が良い。実際、スピン 1/2 粒子の π 回転を 2 回連続すると

$$\exp[i\pi\hat{\sigma}^z/2]\exp[i\pi\hat{\sigma}^z/2]|\psi\rangle = \exp[i\pi\hat{\sigma}^z]|\psi\rangle = -|\psi\rangle$$

となるが、この位相 -1 は両辺の $|\psi\rangle$ を U(1) 変換しても取り除くことができない。この現象に対する一つの解釈として、スピン演算子は Lie 代数 $\mathfrak{so}(3) \cong \mathfrak{su}(2)$ で生成される Lie 群 $SU(2)$ ($\neq SO(3)$) の表現、すなわち回転群 $SO(3)$ の普遍被覆 $SU(2)$ の表現とみなす方法があるが、

- 物理的操作と表現される群が一致しない
- 普遍被覆が有名でない群では記述が煩雑になる

といった説明上の問題が生じる。本稿ではより見通しの良い解決策として、表現に U(1) 位相自由度を許す射影表現を導入する。

Def. 26: 射影表現 (projective representation)

群 G と線型空間 V において、 $D : G \rightarrow GL(V)$ と $\omega : G \times G \rightarrow U(1)$ が

$$\begin{aligned} D(g)D(g') &= \omega(g, g')D(gg') \quad (\forall g, g' \in G) \\ (D(g_1)D(g_2))D(g_3) &= D(g_1)(D(g_2)D(g_3)) \end{aligned} \tag{C.2.1}$$

を満たすとき、 D は ω を乗数系 (multiplier) とする射影表現という。

Cor. 9: コサイクル条件

離散群 G に対して $\omega : G \times G \rightarrow U(1)$ が G のある射影表現の乗数系であること、

$$\omega(g_1, g_2)\omega(g_1g_2, g_3) = \omega(g_2, g_3)\omega(g_1, g_2g_3) \quad (\forall g_1, g_2, g_3 \in G) \tag{C.2.2}$$

を満たすことは同値。

Proof. (C.2.1) は

$$\begin{aligned} (D(g_1)D(g_2))D(g_3) &= \omega(g_1, g_2)D(g_1g_2)D(g_3) = \omega(g_1, g_2)\omega(g_1g_2, g_3)D(g_1g_2g_3) \\ D(g_1)(D(g_2)D(g_3)) &= D(g_1)\omega(g_2, g_3)D(g_2g_3) = \omega(g_2, g_3)\omega(g_1, g_2g_3)D(g_1g_2g_3) \end{aligned}$$

が等しいことを意味する。よって ω が乗数系なら (C.2.2) が成り立つ。

逆に (C.2.2) が成り立つとする。

□

今我々は演算子に $U(1)$ 位相自由度を与えているので、 $D(g) \sim D_\theta(g) := e^{i\theta(g)}D(g)$ の同一視を受ける。この変換合わせて乗数系 ω も同一視を与えるべきである。 $U(1)$ 変換によって

$$\omega(g_1, g_2) = D(g_1)D(g_2)D^{-1}(g_1g_2) \mapsto \frac{e^{i\theta(g_1)}e^{i\theta(g_2)}}{e^{i\theta(g_1g_2)}}D(g_1)D(g_2)D^{-1}(g_1g_2)$$

となるので、真に意味を持つ ω は $e^{i\theta(g_1)}e^{i\theta(g_2)}/e^{i\theta(g_1g_2)}$ の形で表せる自由度を 1 と同一視したものになる。すなわち、異なる乗数系 ω_1, ω_2 の間に

$$\omega_2(g_1, g_2) = \omega_1(g_1, g_2)e^{i\theta(g_1)}e^{i\theta(g_2)}/e^{i\theta(g_1g_2)}$$

なる $\theta : G \rightarrow \mathbb{R}^\times$ が存在するとき、 $\omega_1 \sim \omega_2$ とする。

appendix C.1 にて、同一視を考慮に入れて線形表現を分類したように、射影表現の乗数系も同一視を入れて分類する。この問題は、ある群 G を与えたとき、 G の射影表現の乗数系に上の同値関係で同一視を入れたとき、あり得るものすべてを列挙することを意味する。

C.2.1 射影表現の分類

C.2.2 有限可換群の射影表現の分類に関する既知の結果

G が有限可換群であれば、射影表現の乗数系を簡単に分類できることが知られている。

Def. 27: bicharacter

群 G に対して、 $\beta : G \times G \rightarrow U(1)$ が

$$\beta(g_1g_2, h) = \beta(g_1, h)\beta(g_2, h), \quad \beta(g, h_1h_2) = \beta(g, h_1)\beta(g, h_2)$$

を任意の $g, g_1, g_2, h, h_1, h_2 \in G$ 満たすとき、 β を G の bicharacter という。特に $\beta(g, h) = \beta(h, g)$ のとき β を symmetric bicharacter, $\beta(g, h) = [\beta(h, g)]^{-1}$ のとき anti-symmetric bicharacter という。

Lem. 16: 有限可換群の射影表現の乗数系は anti-symmetric bicharacter

有限可換群 G の射影表現の乗数系を ω とする。このとき、

$$\text{alt}(\omega)(g_1, g_2) := \frac{\omega(g_1, g_2)}{\omega(g_2, g_1)} \tag{C.2.3}$$

で定義される $\text{alt}(\omega)$ は anti-symmetric bicharacter である。

Prf.

Cocycle 条件 (C.2.2) および G が可換であることから、

$$\begin{aligned}\text{alt}(\omega)(g_1g_2, h) &= \frac{\omega(g_1g_2, h)}{\omega(h, g_1g_2)} = \frac{\omega(g_1, g_2h)\omega(g_2, h)/\omega(g_1, g_2)}{\omega(h, g_1)\omega(hg_1, g_2)/\omega(g_1, g_2)} \\ &= \frac{\omega(g_1, hg_2)\omega(g_2, h)}{\omega(h, g_1)\omega(g_1h, g_2)} \\ &= \frac{\omega(g_1h, g_2)\omega(g_1, h)/\omega(h, g_2) \cdot \omega(g_2, h)}{\omega(h, g_1)\omega(g_1h, g_2)} \\ &= \text{alt}(\omega)(g_1, h) \text{ alt}(\omega)(g_2, h)\end{aligned}$$

となり、 $\text{alt}(\omega)$ は第 1 変数について群準同型。同様に第 2 変数についても準同型。

また定義より

$$\text{alt}(\omega)(h, g) = \frac{\omega(h, g)}{\omega(g, h)} = (\text{alt}(\omega)(g, h))^{-1}.$$

[39] に以下の命題が示されている。

Prop. 14: 有限可換群射影表現の分類は群の反可換な bicharacter の分類と等価

G を有限可換群として、

$$X^2(G) := \{\text{bicharacters } G \times G \rightarrow \text{U}(1)\}$$

$$X_s^2(G) := \{\text{symmetric bicharacters } G \times G \rightarrow \text{U}(1)\}$$

$$X_a^2(G) := \{\text{anti-symmetric bicharacters } G \times G \rightarrow \text{U}(1)\}$$

とする。(C.2.3) により定義される alt は同型

$$X^2(G)/X_s^2(G) \cong H^2(G, \text{U}(1)) \cong X_a^2(G)$$

を誘導する。

Prf.

Lem. 16 より $\xi \in Z^2(G, \text{U}(1))$ なら $\text{alt}(\xi) \in X_a^2(G)$. また $\xi \in B^2(G, \text{U}(1))$ なら $\varphi \in C^1(G, \text{U}(1))$ が存在して $\xi(g_1, g_2) = \varphi(g_1)\varphi(g_2)/\varphi(g_1g_2)$ と書けるので

$$\text{alt}(\xi)(g_1, g_2) = \frac{\varphi(g_1)\varphi(g_2)/\varphi(g_1g_2)}{\varphi(g_2)\varphi(g_1)/\varphi(g_2g_1)} = 1.$$

よって alt は $H^2(G, \text{U}(1))$ から $X_a^2(G)$ への写像を誘導する。逆に $\xi \in Z^2(G, \text{U}(1))$ が $\text{alt}(\xi) = 1$ を満たすならば、 G の ξ による中心拡大は可換群になる。

付録 D

量子情報理論

本章では、本文で使った量子情報理論の知識を記載する。本章は主に [40] を参考にした。

D.1 純粹状態・混合状態

Hilbert 空間 \mathcal{H} の量子状態に対する以下の操作は \mathcal{H} の中で閉じない。

- 部分系の取り出し
- 古典的確率混合

純粹状態の部分トレースは一般に混合状態である。

逆に、混合状態をより広い Hilbert 空間における純粹状態の部分トレースとして表すことができる。この操作を**純粹化** (purification) という。物理的に扱いたいのは一般に混合状態だが、数学的に扱いやすいのは純粹状態であるため、混合状態を一度純粹化して議論を進め、最後に部分トレースを取るという手法がよく用いられる。状態を $\rho = \sum_{i=1}^n p_i |i\rangle\langle i|$ とスペクトル分解できるとき、参照系として新たに正規直交基底 $\{|i\rangle_R\}_{i=1}^n$ を導入して

$$|\psi\rangle := \sum_i \sqrt{p_i} |i\rangle_A |i\rangle_R$$

と定義すると、

$$\text{Tr}_R(|\psi\rangle\langle\psi|) = \sum_{ij} \sqrt{p_i p_j} |i\rangle\langle j| \text{Tr}_R(|i\rangle_R\langle j|_R) = \sum_i p_i |i\rangle\langle i| = \rho$$

が成り立つ。当然 $|i\rangle_R$ の選び方は一意ではなく、任意の n 次元の正規直交基底を選んで良い。すなわち $|i\rangle_R$ にはユニタリ変換 $|i\rangle_R \rightarrow |i\rangle_{R'} = \sum_j U_{ij} |j\rangle_R$ の自由度が許される。一方でこの変換により

$$|\rho'\rangle = \sum_{ij} \sqrt{p_i} |i\rangle_A \otimes U_{ij} |j\rangle_R = \sum_{ij} \sqrt{p_i} (U^T)_{ji} |i\rangle_A \otimes |j\rangle_R \quad (\text{D.1.1})$$

としてユニタリを物理系に押し付けることができる。この操作はユニタリの自由度によって物理が変更することを意味しない。実際、

$$\begin{aligned} \text{Tr}_R |\rho'\rangle\langle\rho'| &= \sum_{i_1, j_1, i_2, j_2} \sqrt{p_{i_1} p_{i_2}} (U^T)_{j_1 i_1} (U^T)_{i_2 j_2}^* |i_1\rangle\langle i_2| \text{Tr}_R (|j_1\rangle_R\langle j_2|_R) \\ &= \sum_i (U^{T\dagger} U^T)_{i_2 i_1} \sqrt{p_{i_1} p_{i_2}} |i_1\rangle\langle i_2| = \rho \end{aligned}$$

となる。

D.2 エントロピー

エントロピーは、系の不確定性や情報量を定量化する重要な概念である。量子情報理論においては、エントロピーは量子状態の情報量を測る指標として用いられる。

本節では特筆しない限り確率分布は離散的であるとする。¹

D.2.1 Shannon エントロピー

この直感に基づき、情報量を定義する。確率事象 E から実数への関数 I として、以下を満たすものを考える。

1. $I(E)$ は E の発生確率 $p(E)$ のみに依存し、 $0 \leq p(E) \leq 1$ により $I(p(E))$ と書ける
2. I は確率の連続関数
3. 独立事象が同時に発生する情報量は各事象の情報量の和に等しい ($I(p(E))q(E)) = I(p(E)) + I(q(E))$)

この条件を満たす関数は任意定数を用いて $I(p(E)) = k \ln p(E)$ の形で表される（自己情報量）。² 確率分布関数 $\{p(x)\}$ が与えられたとき、得られる情報量の期待値は $k \sum_x p(x) \ln p(x)$ で書ける。情報理論では対数の底を 2 とすることが多いため、以下の定義を採用する。

Def. 28: Shannon エントロピー

確率分布 $\{p(x)\}$ に対し、Shannon エントロピー（情報量） H を

$$H(\{p(x)\}) := - \sum_x p(x) \log_2 p(x)$$

と定義する。^a

^a 連続確率分布に対しても同様に $H(p(x)) = \int dx p(x) \log_2 p(x)$ で定義される。

関数の極限と整合するように、 $p(x) = 0$ のとき $0 \log_2 0 = 0$ とする。

重要な性質を列挙しておく。

Prop. 15: Shannon エントロピーの基本性質

1. $H(\{p(x)\}) \geq 0$. 特に $p(x) = \delta_{x,x_0}$ のとき等号成立。
2. n 個の排反事象に関する Shannon エントロピーは、確率分布が一様分布 $p(x) = 1/n$ のとき最大値 $H = \log_2 n$ を取る。

¹ 確率分布関数を $p(x)$ と書いても離散確率分布を表すことに注意。

² Cauchy の関数方程式の議論から解ける。具体的には、 $x, y \in \mathbb{R}$ に対して $f(x) := I(e^x)$ とすると

$$f(x+y) = I(e^{x+y}) = I(e^x) + I(e^y) = f(x) + f(y)$$

の線型方程式を得る。 I の連続性すなわち f の連続性からある定数 $k \in \mathbb{C}$ を用いて任意の $x \in \mathbb{R}$ で $f(x) = kx$ と書け、 $p = e^x$ と取り直すことで任意の $p > 0$ に対し $I(p) = k \ln p$ が導かれる。

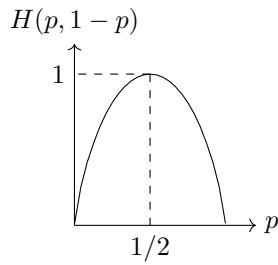


図 D.1: 2 つの排反事象のうち片方が生じる確率 p と Shannon エントロピー $H(p, 1 - p)$.

Prf.

確率事象が排反な 2 つの場合、Shannon エントロピーは

$$H(p(x), 1 - p(x)) = -p(x) \log_2 p(x) - (1 - p(x)) \log_2 (1 - p(x))$$

と書ける。Fig. D.1 のように、 $p(x) = 1/2$ で対称なグラフを描く。すなわち確率が一様分布のとき最大値を取り、確率が偏っているときに小さくなる。

確率分布が複数ある場合、二つの事象が同時に起こる確率分布 $p(x, y)$ を考えることができる。^{*3} これにより自然に結合エントロピー

$$H(X, Y) := - \sum_{x,y} p(x, y) \log_2 p(x, y)$$

が定まる。二つの確率事象が独立なときは $p(x, y) = p(x)p(y)$ なので、

$$H(X, Y) = - \sum_{x,y} p(x)p(y)(\log_2(p(x)) + \log_2(p(y))) = H(X) + H(Y)$$

と分解できる。逆に X が Y に完全に依存していれば条件付き確率 $p(x|y)$ は関数 f を用いて $p(x|y) = \delta_{x,f(y)}$ と書ける。このとき

$$H(X, Y) = - \sum_{x,y} p(y)p(x|y)(\log_2 p(y) + \log_2 p(x|y)) = H(Y)$$

が成り立つ。以上の極端な 2 例をもとにすると、 $H(X) + H(Y) - H(X, Y)$ は X, Y の依存性を測る指標になると予想される。

Def. 29: 相互情報量 (古典情報理論)

確率変数 X, Y に対し、相互情報量 $I(X : Y)$ を

$$I(X : Y) := H(X) + H(Y) - H(X, Y)$$

と定義する。

^{*3} 厳密には、はじめに条件付き確率 $p(x|y)$ を定義した上で $p(x, y) := p(y)p(x|y)$ と定義される。

D.2.2 von Neumann エントロピー

Shannon エントロピーは古典確率分布の情報量を表すが、量子状態の情報量を表す指標として von Neumann エントロピーを定義する。

Def. 30: von Neumann エントロピー

量子状態 ρ の von Neumann エントロピーを

$$S(\rho) := -\text{Tr}(\rho \log \rho)$$

と定義する。

基本的には Shannon エントロピーと同様の性質を持つ。

Prop. 16: von Neumann エントロピーの基本性質

1. $S(\rho) \geq 0$. 特に $S(\rho) = 0$ のとき ρ は純粋状態.
2. d 次元 Hilbert 空間上の状態 ρ に対し、 $S(\rho) \leq \ln d$. 特に $S(\rho) = \ln d$ のとき $\rho = I/d$.
3. 合成系 AB が純粋状態ならば、 $S(A) = S(B)$.
4. p_i を確率分布、 ρ_i を直行部分空間に台を持つ量子状態とするとき、

$$S\left(\sum_i p_i \rho_i\right) = H(\{p_i\}) + \sum_i p_i S(\rho_i)$$

が成り立つ。

5. p_i を確率分布、 $|i\rangle$ を A 系の正規直交基底、 ρ_i を B 系の量子状態とするとき、

$$S\left(\sum_i p_i |i\rangle_A \langle i|_A \otimes \rho_i\right) = H(\{p_i\}) + \sum_i p_i S(\rho_i)$$

が成り立つ。

Prf.

混合状態 $\sum_i p_i \rho_i$ の情報には状態 $\{\rho_i\}$ についての情報だけでなく確率分布 $\{p_i\}$ についての情報も含まれている。したがって混合状態の von Neumann エントロピーは $\{\rho_i\}$ の von Neumann エントロピーの荷重平均より大きくなることが期待される。この直感を表すのが以下の定理である。

Thm. 21: von Neumann エントロピーは凸関数

$\{p_i\}$ を ($\sum_i p_i = 1$) なる確率分布、 $\{\rho_i\}$ を量子状態の密度演算子の集合とする

とき、

$$S\left(\sum_i p_i \rho_i\right) \geq \sum_i p_i S(\rho_i)$$

が成り立つ。

Prf.

$\{\rho_i\}$ で表される量子系を A , 新たに正規直交基底 $\{|i\rangle\}$ から構成される量子系を B として

$$\rho_{AB} := \sum_i p_i \rho_i \otimes |i\rangle\langle i|$$

を定義すると見通しが良い。 ρ_i の固有値と固有ベクトルをそれぞれ $\lambda_i, |i\rangle$ として結合エントロピーを計算すると、

$$\begin{aligned} S_A &= -\text{Tr}\left[\left(\sum_i p_i \rho_i \otimes |i\rangle_B\langle i|\right) \ln\left(\sum_j p_j \rho_j \otimes |j\rangle_B\langle j|\right)\right] \\ &= -\sum_{klmn} \langle k|_A \langle l|_B \left(\sum_i p_i \rho_i \otimes |i\rangle\langle i|\right) |m\rangle_A |n\rangle_B \\ &\quad \times \langle m|_A \langle n|_B \ln\left(\sum_j p_j \rho_j \otimes |j\rangle\langle j|\right) |k\rangle_A |l\rangle_B \\ &= -\sum_{kmn} \langle k|_A p_n \rho_n |m\rangle_A \langle m|_A \ln(p_n \rho_n) |k\rangle_A \\ &= -\sum_k p_k \lambda_k \ln(p_k \lambda_k) = -\sum_k p_k \lambda_k \ln \lambda_k - \sum_k \lambda_k p_k \ln p_k \\ &= \sum_k p_k S(\rho_k) - \sum_k \lambda_k p_k \ln p_k \end{aligned}$$

Def. 31: エンタングルメントエントロピー

量子状態 ρ_{AB} の部分系 A に対するエンタングルメントエントロピー S_A を

$$S_A := -\text{Tr}_A(\rho_A \log \rho_A)$$

と定義する。

D.3 忠実度

二つの量子状態がどれだけ同じかを測る指標として忠実度 (fidelity) がある。

純粹状態 $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ の同一性は状態ベクトルの Hilbert 空間における内積で表せば良い。ただし状態ベクトルは U(1) 位相自由度をもつため、絶対値で評価するのが適切であろう。

$$\mathcal{F}(|\psi\rangle, |\phi\rangle) := |\langle\psi|\phi\rangle| = \sqrt{\langle\psi|\phi\rangle\langle\phi|\psi\rangle}.$$

状態ベクトルをそれぞれ規格化していれば $0 \leq \mathcal{F}(|\psi\rangle, |\phi\rangle) \leq 1$ であり、 $\mathcal{F}(|\psi\rangle, |\phi\rangle) = 1$

のとき $|\psi\rangle$ と $|\phi\rangle$ は同一の状態を表す。

混合状態の場合、一度純粹化してから上の定義を用いることで忠実度を定義できる。(一般に混合) 状態 $\rho = \sum_i p_i |i\rangle\langle i|$, $\sigma = \sum_j q_j |j\rangle\langle j|$ をとる。 ρ の純粹化を $|\rho\rangle = \sum_i \sqrt{p_i} |i\rangle |i\rangle_R$, σ の純粹化を $|\sigma\rangle = \sum_j \sqrt{q_j} |j\rangle |j\rangle_R$ とする。appendix D.1 で見たように、純粹化にはユニタリの自由度がある。もし元々用意していた混合状態 ρ, σ が等価だったとしても、異なる基底を選ぶことで $|\rho\rangle$ と $|\sigma\rangle$ が直交することもあり得る。例えば $|i\rangle_R$ と $|j\rangle_R$ を互いに直交する基底に取れば $\langle\rho|\sigma\rangle = 0$ となる。 ρ, σ が純粹状態の場合、 $|\langle i|j\rangle_R| = 1$ で純粹状態に対する忠実度が再現される。この観察から、 $|\rho\rangle, |\sigma\rangle$ には数ある純粹化の中でも $\mathcal{F}(|\rho\rangle, |\sigma\rangle)$ が最大になるものを選ぶのが妥当だろう。そこで

$$\mathcal{F}(\rho, \sigma) = \max_{|\rho\rangle, |\sigma\rangle} \mathcal{F}(|\rho\rangle, |\sigma\rangle) = \max_{U_R} |\langle\rho| (I \otimes U_R) |\sigma\rangle|$$

とする。最右辺では参照系へのユニタリ変換の自由度を変更して $\mathcal{F}(|\rho\rangle, |\sigma\rangle)$ を最大化するような $|\rho\rangle, |\sigma\rangle$ を選ぶ代わりに、ユニタリ変換で参照系の内積を最大にするものを選んでいる。(D.1.1) により

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\rho, \sigma) &= \max_{U_R} |\langle\rho| (U_R^T \otimes I) |\sigma\rangle| \\ &= \max_{U_R} \left| \sum_{i, j_1, j_2} \sqrt{p_i} \sqrt{q_{j_1}} (U_R^T)_{j_2, j_1} \langle i|j_1\rangle \langle i|j_2\rangle_R \right| \\ &= \max_{U_R} \left| \sum_i \sqrt{p_i} \sqrt{q_i} (U_R)_{i, i} \right| = \max_{U_R} |\text{Tr}(\sqrt{\rho} \sqrt{\sigma} U_R)|. \end{aligned}$$

(A.2.9) により $\mathcal{F}(\rho, \sigma) = \|\sqrt{\rho} \sqrt{\sigma}\|_{\text{tr}}$ を得る。ここまで議論をまとめると、以下のようにできる。^{*4}

Def. 32: 忠実度

量子状態の密度演算子 ρ, σ に対し、忠実度 $\mathcal{F}(\rho, \sigma)$ を

$$\mathcal{F}(\rho, \sigma) := \text{Tr} \sqrt{\rho^{1/2} \sigma \rho^{1/2}} = \|\rho^{1/2} \sigma \rho^{1/2}\|_{\text{tr}}$$

とする。

Thm. 22: Uhlmann の定理 [41]

ρ, σ を量子状態の密度演算子、 $|\rho\rangle, |\sigma\rangle$ をそれぞれの純粹化とするとき、

$$\mathcal{F}(\rho, \sigma) = \max_{|\rho\rangle, |\sigma\rangle} \mathcal{F}(|\rho\rangle, |\sigma\rangle)$$

が成り立つ。ここに、右辺は純粹化のユニタリの自由度を変更して最大値をとることを意味する。

Uhlmann の定理 Thm. 22 から直ちにわかるように、 ρ, σ の入れ替えで忠実度は対称である: $\mathcal{F}(\rho, \sigma) = \mathcal{F}(\sigma, \rho)$. また同一状態の忠実度は常に 1: $\mathcal{F}(\rho, \rho) = 1$. $0 \leq \mathcal{F}(\rho, \sigma) \leq 1$ も明らかである。

^{*4} [41] では C^* -代数を用いて無限次元系にも適用している。

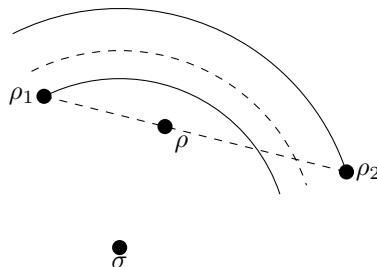


図 D.2: 状態空間における状態 ρ_1, ρ_2 の混合 ρ と比較対称 σ の位置関係の概念図。状態の混合は状態空間における内分点をとる操作と解釈できる。 ρ_1, ρ_2 までの距離を $p : (1 - p)$ に内分した長さと σ からの距離が一致するのは破線の円だが、内分点 ρ は必ずこの円の内側に位置する。

忠実度は状態の内積が根本概念であるから、状態空間の中での 2 状態間の近さと解釈できる。二つの状態の混合は状態空間の内分点をとると解釈すれば、Fig. D.2 のような位置関係に対応する不等式が成り立つ。

Cor. 10: 忠実度の凸性

$\{p_i\}$ を確率分布、 $\{\rho_i\}, \{\sigma_i\}$ を量子状態の密度演算子の集合とするとき、

$$\mathcal{F} \left(\sum_i p_i \rho_i, \sigma \right) \geq \sum_i p_i \mathcal{F}(\rho_i, \sigma)$$

が成り立つ。

混合状態の忠実度は密度行列の平方根で与えられているため解析が難しい。Affine 関数であれば評価が簡単なので、 $\mathcal{F}(\rho, \sigma)$ を概ね $A\rho + B\sigma + \text{const.}$ に変形したい。積の平方根を Affine 関数で評価するには相加相乗平均の不等式が有効だろう。Affine 関数を $\rho H + H^{-1}\sigma$ のように表せば、この下限には H が現れない期待される。忠実度の表式 $\sqrt{\rho^{1/2}\sigma\rho^{1/2}}$ を念頭において、適切に巡回性を使えるようにトレースの評価へ持ち込む。ここまでを踏まえ

$$\sqrt{\rho^{1/2}\sigma\rho^{1/2}} = \min_H \frac{1}{2} (\text{Tr}(\rho H) + \text{Tr}(\sigma H^{-1}))$$

を目指す。

右辺が ρ, σ の凸関数であることは直感的には Fig. D.3 のように解釈できる。実際、線型空間 X 上の Affine 関数族 $\{f_t : X \rightarrow \mathbb{R}\}_{t \in T}$ の下限を

$$g(x) := \inf_{t \in T} f_t(x)$$

と定義すると、 $\lambda \in \mathbb{C}$ に対し任意の $x, y \in X, t \in T$ で

$$f_t(\lambda x + (1 - \lambda)y) = \lambda f_t(x) + (1 - \lambda)f_t(y) \geq \lambda g(x) + (1 - \lambda)g(y)$$

となるため、左辺の下限をとることで $g(\lambda x + (1 - \lambda)y) \geq \lambda g(x) + (1 - \lambda)g(y)$ が成り立つ。

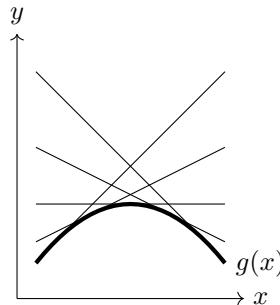


図 D.3: Affine 関数の下限が凸関数であること。各直線は x に関する Affine 関数族 $f_t(x)$ を表し、太線で示した包絡線がその下限 $g(x) = \inf_t f_t(x)$ を表す。

Prf. Cor. 10 (忠実度の凸性)

$X > 0, Y \geq 0$ を同一サイズのエルミート行列とする。

$$\begin{aligned} 0 &\leq (X^{1/2} - X^{-1/2}Y^{1/2})^\dagger(X^{1/2} - X^{-1/2}Y^{1/2}) \\ &= X + Y^{1/2}X^{-1}Y^{1/2} - 2Y^{1/2} \end{aligned}$$

であるから、両辺のトレースをとって巡回性を用いることで $\text{Tr}(X) + \text{Tr}(YX^{-1}) \geq 2\text{Tr}(Y^{1/2})$ を得る。 ρ, σ 同じサイズのエルミート行列 $H > 0$ を任意にとり、 $X = \sqrt{\rho}H\sqrt{\rho}, Y = \sqrt{\rho}\sigma\sqrt{\rho}$ とすれば

$$\text{Tr}(\rho H) + \text{Tr}(\sigma H^{-1}) \geq 2\text{Tr}(\sqrt{\rho}\sigma\sqrt{\rho})^{1/2} = 2\mathcal{F}(\rho, \sigma)$$

である。 $\tilde{H} := \rho^{-1/2}\sqrt{\rho^{1/2}\sigma\rho^{1/2}}\rho^{-1/2}$ とおくと

$$\text{Tr}(\rho\tilde{H}) + \text{Tr}(\sigma\tilde{H}^{-1}) = 2\text{Tr}(\sqrt{\rho}\sigma\sqrt{\rho})^{1/2}$$

となって等号成立。以上より

$$\mathcal{F}(\rho, \sigma) = \min_{H>0} \frac{1}{2}(\text{Tr}(\rho H) + \text{Tr}(\sigma H^{-1})).$$

右辺は ρ, σ について Affine 関数の下限になっており、凸関数である。

付録 E

本文で省略した証明

本文のいくつかの命題、特に数学的命題は、内容が技術的であることと議論の流れを妨げることを理由に証明を省略している。本章では保留した命題の証明を補完する。

E.1 ?? (Lieb-Robinson 限界) の証明

記法は Sec. 1.1.1 に従う。

$H = H_Y + H_{Y^c}$ の分割を

$$H_Y := \sum_{Z \cap Y \neq \emptyset} h_Z, \quad H_{Y^c} := \sum_{Z \cap Y = \emptyset} h_Z$$

で与える。 $[H_{Y^c}, B_Y] = 0$ であることに注意。 $f(t) := [A(t), B]$ とおくと、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} f(t) &= \frac{d}{dt} (e^{iHt} A e^{-iHt} B_Y - B_Y e^{iHt} A e^{-iHt}) \\ &= [i[H, A(t)], B_Y] \\ &= i[H_{Y^c}, [A(t), B_Y]] + [i[H_Y, A(t)], B_Y] \\ &= i[H_{Y^c}, f(t)] + [i[H_Y, A(t)], B_Y] \end{aligned}$$

となる。非齊次線形微分方程式であるから定数変化法により解けて、

$$f(t) = e^{iH_{Y^c} t} [A(0), B_Y] e^{-iH_{Y^c} t} + \int_0^t ds e^{iH_{Y^c}(t-s)} [i[H_Y, A(s)], B_Y] e^{-iH_{Y^c}(t-s)}$$

となる。ノルムをとると

$$\begin{aligned} \| [A(t), B_Y] \| &\leq \| [A(0), B_Y] \| + \int_0^t ds \| [i[H_Y, A(s)], B_Y] \| \\ &\leq \| [A_X, B_Y] \| + 2 \| B_Y \| \int_0^t ds \| [H_Y, A(s)] \| \\ &\leq \| [A_X, B_Y] \| + 2 \| B_Y \| \sum_{Z \cap Y \neq \emptyset} \int_0^t ds \| [A(s), h_Z] \| \end{aligned} \tag{E.1.1}$$

$C_A(Z, t) := \sup_{O_Z} \| [A(t), O_Z] \| / \| O_Z \|$ とおく。(E.1.1) から

$$\sup_{B_Y} \frac{\| [A(t), B_Y] \|}{\| B_Y \|} \leq \sup_{B_Y} \left(\frac{\| [A_X, B_Y] \|}{\| B_Y \|} + 2 \sum_{Z \cap Y \neq \emptyset} \int_0^t ds \| [A(s), h_Z] \| \right)$$

すなわち

$$C_A(Y, t) \leq C_A(Y, 0) + 2 \sum_{Z \cap Y \neq \emptyset} \int_0^t ds \|h_Z\| C_A(Z, s)$$

を得る。特に

$$C_A(Z, 0) \begin{cases} = 0 & (X \cap Z = \emptyset) \\ \leq 2\|A_X\| & (X \cap Z \neq \emptyset) \end{cases} =: 2\|A_X\|\delta(X, Z)$$

に注意すると、

$$\begin{aligned} & C_A(Y, t) \\ & \leq 0 + 2 \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \int_0^t ds_1 C_A(Z_1, s_1) \\ & \leq 2 \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \int_0^t ds_1 \left(C_A(Z_1, 0) + 2 \sum_{Z_2 \cap Z_1 \neq \emptyset} \|h_{Z_2}\| \int_0^{s_1} ds_2 C_A(Z_2, s_2) \right) \\ & \leq 2 \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \int_0^t ds_1 2\|A_X\|\delta(X, Z_1) \\ & \quad + 2^2 \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \sum_{Z_2 \cap Z_1 \neq \emptyset} \|h_{Z_2}\| \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 C_A(Z_2, s_2) \\ & \leq 2\|A_X\| \cdot 2t \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset, X \cap Z_1 \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \\ & \quad + 2^2\|A_X\| \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \sum_{Z_2 \cap Z_1 \neq \emptyset} \|h_{Z_2}\| \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 2\|A_X\|\delta(X, Z_2) \\ & \quad + 2^3 \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \sum_{Z_2 \cap Z_1 \neq \emptyset} \|h_{Z_2}\| \sum_{Z_3 \cap Z_2 \neq \emptyset} \|h_{Z_3}\| \\ & \quad \times \int_0^t ds_1 \int_0^{s_1} ds_2 \int_0^{s_2} ds_3 C_A(Z_3, s_3) \\ & \leq \dots \\ & \leq 2\|A_X\| \cdot 2t \sum_{\substack{Z_1 \cap Y \neq \emptyset \\ X \cap Z_1 \neq \emptyset}} \|h_{Z_1}\| + 2\|A_X\| \frac{(2t)^2}{2!} \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \sum_{\substack{Z_2 \cap Z_1 \neq \emptyset \\ X \cap Z_2 \neq \emptyset}} \|h_{Z_2}\| \\ & \quad + 2\|A_X\| \frac{(2t)^3}{3!} \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \sum_{Z_2 \cap Z_1 \neq \emptyset} \|h_{Z_2}\| \sum_{\substack{Z_3 \cap Z_2 \neq \emptyset \\ X \cap Z_3 \neq \emptyset}} \|h_{Z_3}\| + \dots \end{aligned}$$

すなわち、

$$C_A(Y, t) \leq 2\|A_X\| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2t)^n}{n!} \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \sum_{Z_2 \cap Z_1 \neq \emptyset} \|h_{Z_2}\| \dots \sum_{\substack{Z_n \cap Z_{n-1} \neq \emptyset \\ X \cap Z_n \neq \emptyset}} \|h_{Z_n}\|.$$

各項に対応するような X, Y をつなぐ長さ n の path がなければ、その項は 0 になる。

??の仮定のもとでは、

$$\begin{aligned}
& \sum_{Z_1 \cap Y \neq \emptyset} \|h_{Z_1}\| \sum_{Z_2 \cap Z_1 \neq \emptyset} \|h_{Z_2}\| \cdots \sum_{\substack{Z_n \cap Z_{n-1} \neq \emptyset \\ X \cap Z_n \neq \emptyset}} \|h_{Z_n}\| \\
& \leq \sum_{x \in X} \sum_{y \in Y} \sum_{z_{12}, \dots, z_{n-1,n} \in \Lambda_s} \sum_{Z_1 \ni y, z_{12}} \|h_{Z_1}\| \sum_{Z_2 \ni z_{12}, z_{23}} \|h_{Z_2}\| \cdots \sum_{Z_n \ni z_{n-1,n}, x} \|h_{Z_n}\| \\
& \leq \sum_{\substack{x \in X \\ y \in Y}} \sum_{z_{12}, \dots, z_{n-1,n} \in \Lambda_s} \sum_{Z_1 \ni y, z_{12}} \|h_{Z_1}\| \cdots \sum_{Z_{n-1} \ni z_{n-2,n-1}, z_{n-1,n}} \|h_{Z_{n-1}}\| \lambda_0 e^{-(\mu+\varepsilon) \operatorname{dist}(z_{n-1,n}, x)} \\
& \leq \sum_{\substack{x \in X \\ y \in Y}} \sum_{z_{12}, \dots, z_{n-1,n} \in \Lambda_s} \sum_{Z_1 \ni y, z_{12}} \|h_{Z_1}\| \cdots \sum_{Z_{n-1} \ni z_{n-2,n-1}, z_{n-1,n}} \|h_{Z_{n-1}}\| \frac{\lambda_0 \lambda'_0 e^{-\mu \operatorname{dist}(z_{n-1,n}, x)}}{[1 + \operatorname{dist}(z_{n-1,n}, x)]^\eta} \\
& \leq \cdots \\
& \leq \sum_{\substack{x \in X \\ y \in Y}} \sum_{z_{12}, \dots, z_{n-1,n} \in \Lambda_s} \frac{\lambda_0 \lambda'_0 e^{-\mu \operatorname{dist}(y, z_{12})}}{[1 + \operatorname{dist}(y, z_{12})]^\eta} \frac{\lambda_0 \lambda'_0 e^{-\mu \operatorname{dist}(z_{12}, z_{23})}}{[1 + \operatorname{dist}(z_{12}, z_{23})]^\eta} \cdots \frac{\lambda_0 \lambda'_0 e^{-\mu \operatorname{dist}(z_{n-1,n}, x)}}{[1 + \operatorname{dist}(z_{n-1,n}, x)]^\eta} \\
& \leq \sum_{\substack{x \in X \\ y \in Y}} (\lambda_0 \lambda'_0)^n \frac{p_0^{n-1} e^{-\mu \operatorname{dist}(x, y)}}{[1 + \operatorname{dist}(x, y)]^\eta} \leq |X||Y|p_0^{-1}(\lambda_0 \lambda'_0)^n e^{-\mu d(X, Y)}
\end{aligned}$$

と評価できるので、

$$\begin{aligned}
C_A(Y, t) & \leq 2p_0^{-1} \|A_X\| |X| |Y| e^{-\mu d(X, Y)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2tp_0 \lambda_0 \lambda'_0)^n}{n!} \\
& \leq \text{const.} \times \|A_X\| |X| |Y| e^{-\mu d(X, Y)} [e^{2tp_0 \lambda_0 \lambda'_0} - 1]
\end{aligned}$$

が成り立つ。 $\|[A(t), B_Y]\| / \|B_Y\| \leq C_A(Y, t)$ なので、定数 $v > 0$ を適切に取ることで

$$\|[A(t), B_Y]\| \leq \text{const.} \times \|A_X\| \|B_Y\| |X| |Y| e^{-\mu d(X, Y)} [e^{vt} - 1]$$

である。 \square

E.2 ?? (SPT は相関関数が指数減衰) の証明

E.2.1 証明

A_X, B_Y を、コンパクトな台 $X, Y \subset \Lambda_s$ を持つ bosonic な演算子とし、有限体積ハミルトニアン H_Λ による時間発展で $A_X(t) := e^{iH_\Lambda t} A_X e^{-iH_\Lambda t}$ を与える。 Φ を規格化した基底状態とする。

$$\begin{aligned}
\langle \Phi, [A_X(t), B_Y] \Phi \rangle & = \langle \Phi, A_X(t)(1 - P_{0,\Lambda})B_Y \Phi \rangle - \langle \Phi, B_Y(1 - P_{0,\Lambda})A_X(t)\Phi \rangle \\
& \quad + \langle \Phi, A_X(t)P_{0,\Lambda}B_Y \Phi \rangle - \langle \Phi, B_Y P_{0,\Lambda}A_X(t)\Phi \rangle
\end{aligned}$$

である。 q -重縮退した基底状態ベクトル $\Phi_{0,\nu}$ ($\nu = 1, \dots, q$) のエネルギー固有値を $E_{0,\nu}$, 励起状態のベクトルを Φ_n ($n \geq 1$), そのエネルギー固有値を E_n とする。基底状態 Φ の分解を

$$\Phi = \sum_{\nu} a_{\nu} \Phi_{0,\nu}$$

で与えると、

$$\langle \Phi, A_X(t)(1 - P_{0,\Lambda})B_Y \Phi \rangle = \sum_{\nu, \nu'} \sum_{n \neq 0} a_{\nu}^* a_{\nu'} \langle \Phi_{0,\nu}, A_X \Phi_n \rangle \langle \Phi_n, B_Y \Phi_{0,\nu'} \rangle e^{i(E_{0,\nu} - E_n)t}$$

$$\langle \Phi, B_Y(1 - P_{0,\Lambda})A_X(t)\Phi \rangle = \sum_{\nu, \nu'} \sum_{n \neq 0} a_\nu^* a_{\nu'} \langle \Phi_{0,\nu}, B_Y \Phi_n \rangle \langle \Phi_n, A_X \Phi_{0,\nu'} \rangle e^{i(E_n - E_{0,\nu'})t}$$

$$\langle \Phi, A_X(t)P_{0,\Lambda}B_Y\Phi \rangle = \sum_{\nu, \nu'} \sum_{\mu} a_\nu^* a_{\nu'} \langle \Phi_{0,\nu}, A_X \Phi_{0,\mu} \rangle \langle \Phi_{0,\mu}, B_Y \Phi_{0,\nu'} \rangle e^{i(E_{0,\nu} - E_{0,\mu})t}$$

$$\langle \Phi, B_Y P_{0,\Lambda} A_X(t)\Phi \rangle = \sum_{\nu, \nu'} \sum_{\mu} a_\nu^* a_{\nu'} \langle \Phi_{0,\nu}, B_Y \Phi_{0,\mu} \rangle \langle \Phi_{0,\mu}, A_X \Phi_{0,\nu'} \rangle e^{i(E_{0,\mu} - E_{0,\nu'})t}$$

である。

Lem. 17

$E \in \mathbb{R}$, $\alpha > 0$ に対して、

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{i}{2\pi} \int_{-T}^T dt \frac{e^{-iEt} e^{-\alpha t^2}}{t + i\epsilon} &= \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-\infty}^0 d\omega e^{-(\omega + E)^2 / 4\alpha} \\ &= \begin{cases} 1 + \mathcal{O}(\exp(-E^2 / 4\alpha)) & (E \geq \Delta E) \\ \mathcal{O}(\exp(-\Delta E^2 / 4\alpha)) & (E \leq -\Delta E) \end{cases} \end{aligned}$$

Prf.

$$I(E) = \frac{i}{2\pi} \int_{-T}^T dt \frac{e^{-iEt} e^{-\alpha t^2}}{t + i\epsilon} \quad (\text{E.2.1})$$

とする。Fourier 変換により

$$e^{-iEt} e^{-\alpha t^2} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega + E)^2}{4\alpha}\right] e^{i\omega t}$$

である。 $\Delta\omega = bT^{-1/2}$ ($b > 0$) とおいて、積分を

$$I_-(E) := \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-T}^T dt \frac{1}{t + i\epsilon} \int_{-\infty}^{-\Delta\omega} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega + E)^2}{4\alpha}\right] e^{i\omega t}$$

$$I_0(E) := \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-T}^T dt \frac{1}{t + i\epsilon} \int_{-\Delta\omega}^{\Delta\omega} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega + E)^2}{4\alpha}\right] e^{i\omega t}$$

$$I_+(E) := \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-T}^T dt \frac{1}{t + i\epsilon} \int_{\Delta\omega}^{\infty} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega + E)^2}{4\alpha}\right] e^{i\omega t}$$

の 3 つに分割し、 $I(E) = I_-(E) + I_0(E) + I_+(E)$ とする。

まず ϵ, T の極限をとる前であれば

$$\begin{aligned} &\int_{-T}^T dt \int_{\Delta\omega}^{\infty} d\omega \left| \frac{1}{t + i\epsilon} \exp\left[-\frac{(\omega + E)^2}{4\alpha}\right] e^{i\omega t} \right| \\ &= \text{const.} \times \alpha^{1/2} \int_{-T}^T dt \frac{1}{\sqrt{t^2 + \epsilon^2}} < \infty \end{aligned}$$

なので Fubini の定理により積分の順序を交換できる。

$I_0(E)$ について評価する。非広義積分は交換するので、

$$I_0(E) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-\Delta\omega}^{\Delta\omega} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega + E)^2}{4\alpha}\right] \int_{-T}^T dt \frac{e^{i\omega t}}{t + i\epsilon}$$

である。 t についての積分は、

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{t + i\epsilon} = P \frac{1}{t} - i\pi\delta(t)$$

により

$$\int_{-T}^T dt \frac{e^{i\omega t}}{t + i\epsilon} = P \int_{-T}^T dt \frac{\cos \omega t + i \sin \omega t}{t} - i\pi = 2i \int_0^T dt \frac{\sin \omega t}{t} - i\pi$$

である。第 1 項は $T = \pi$ にて最大値 (≈ 1.85) をとることが知られているので、 t 積分の絶対値は $T, \Delta\omega$ に依存しない定数で押さえられる。^a よって

$$\begin{aligned} |I_0(E)| &\leq \text{const.} \times \alpha^{-1/2} \int_{-\Delta\omega}^{\Delta\omega} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega + E)^2}{4\alpha}\right] \\ &\leq \text{const.} \times \alpha^{-1/2} \Delta\omega = \text{const.} \times \alpha^{-1/2} T^{-1/2} \end{aligned}$$

であり、 $T \rightarrow \infty$ で 0.

$I_+(E)$ について評価する。時間積分を先に実行すると、

$$\begin{aligned} \int_{-T}^T dt \frac{e^{i\omega t}}{t + i\epsilon} &= \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{i\omega t}}{t + i\epsilon} - \int_{|t|>T} dt \frac{e^{i\omega t}}{t + i\epsilon} \\ &= -2\pi i \Theta(-\omega) - \left[\frac{e^{i\omega t}}{i\omega(t + i\epsilon)} \right]_{\pm T}^{\infty} - \int_{|t|>T} dt \frac{e^{i\omega t}}{i\omega(t + i\epsilon)^2} \\ &= -2\pi i \Theta(-\omega) + \mathcal{O}(\omega^{-1} T^{-1}) \end{aligned}$$

である。ここに Θ は Heaviside の階段関数である。さらに ω 積分を評価すると

$$\begin{aligned} \left| \int_{\Delta\omega}^{\infty} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega + E)^2}{4\alpha}\right] \frac{1}{\omega} \right| &\leq \frac{1}{\Delta\omega} \left| \int_{\Delta\omega}^{\infty} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega + E)^2}{4\alpha}\right] \right| \\ &\leq \frac{1}{\Delta\omega} \left| \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega + E)^2}{4\alpha}\right] \right| \\ &= \text{const.} \times \alpha^{1/2} T^{1/2} \end{aligned}$$

となるので、全体として

$$|I_+(E)| \leq \text{const.} \times \alpha^{1/2} T^{-1/2} \rightarrow 0 \quad (T \rightarrow \infty)$$

である。

最後に $I_-(E)$ について評価する。上記の t 積分の評価により

$$\begin{aligned} I_-(E) &= \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-\infty}^{-\Delta\omega} d\omega \exp\left[-\frac{(\omega + E)^2}{4\alpha}\right] (-2\pi i + \mathcal{O}(\omega^{-1} T^{-1})) \\ &\rightarrow \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-\infty}^0 d\omega \exp\left[-\frac{(\omega + E)^2}{4\alpha}\right] \quad (\epsilon \rightarrow 0, T \rightarrow \infty) \\ &= \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-\infty}^E d\omega e^{-\omega^2/4\alpha}. \end{aligned}$$

$E \leq -\Delta E$ のとき、

$$(\text{LHS}) \leq \int_{-\infty}^E d\omega \frac{\omega}{|E|} e^{-\omega^2/4\alpha} = \mathcal{O}(\exp(-\Delta E^2/4\alpha))$$

であり、 $E \geq \Delta E$ のとき、

$$(LHS) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} - \int_E^{\infty} \right) d\omega e^{-\omega^2/4\alpha} = 1 + \mathcal{O}(\exp(-\Delta E^2/4\alpha))$$

である。

^a 正弦積分

$$Si(x) := \int_0^x dt \frac{\sin t}{t}$$

が $x = \pi$ で最大となることは、 $x > 0 \iff Si(x) > 0$ となること、 $x = (2\mathbb{Z} + 1)\pi$ で極大値をとること、および

$$\left| \int_{(n-1)\pi}^{n\pi} dt \frac{\sin t}{t} \right| \leq \left| \int_{(n+1)\pi}^{(n+2)\pi} dt \frac{\sin t}{t} \right|$$

となることから従う。

(E.2.1) の分解と Lem. 17 により、

$$\begin{aligned} & \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{i}{2\pi} \int_{-T}^T dt \frac{e^{-iEt} e^{-\alpha t^2}}{t + i\epsilon} \langle \Phi, [A_X(t), B_Y] \Phi \rangle e^{-\alpha t^2} \\ &= \langle \Phi, A_X(1 - P_{0,\Lambda}) B_Y \Phi \rangle + \mathcal{O}(\exp(-\Delta E^2/4\alpha)) \\ &+ \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{i}{2\pi} \int_{-T}^T dt \frac{1}{t + i\epsilon} [\langle \Phi, A_X(t) P_{0,\Lambda} B_Y \Phi \rangle - \langle \Phi, B_Y P_{0,\Lambda} A_X(t) \Phi \rangle] e^{-\alpha t^2} \end{aligned} \quad (E.2.2)$$

が成り立つ。左辺を Lieb-Robinson 限界 Thm. 1 により得られる

$$\left\| \frac{1}{t} [A_X(t), B_Y] \right\| \leq C \|A_X\| \|B_Y\| e^{-\mu d(X,Y)} \frac{e^{v|t|} - 1}{|t|}$$

で評価すれば、 $d = d(X, Y)$, $c > v/2\alpha$ によって

$$\begin{aligned} & \left\| \left(\int_{0 \leq |t| \leq cd} + \int_{cd < |t| \leq T} \right) dt \frac{\langle \Phi, [A_X(t), B_Y] \Phi \rangle}{t + i\epsilon} e^{-\alpha t^2} \right\| \\ & \leq \int_{0 \leq |t| \leq cd} dt C \|A_X\| \|B_Y\| e^{-\mu d} \frac{e^{v|t|} - 1}{|t|} + \int_{cd < |t| \leq T} dt \|A_X\| \|B_Y\| \frac{e^{-\alpha t^2}}{cd} \end{aligned}$$

である。ただし、第 1 項の導出に Lieb-Robinson 限界 (??) と $e^{-\alpha t^2} \leq 1$ を、第 2 項の導出に $1/|t| \leq 1/cd$ を用いた。第 1 項にはさらに $e^x - 1 = \sum_{n=1}^{\infty} x^n/n! < \sum_{n=1}^{\infty} x^n/(n-1)! = xe^x$ から得られる

$$\int_0^{cd} dt \frac{e^{vt} - 1}{t} \leq \int_0^{cd} dt \frac{vte^{vt}}{t} \leq e^{vcod}$$

によって、第 2 項は Gauss 積分によって評価できて、

$$(E.2.2) LHS \leq \text{const.} \times \|A_X\| \|B_Y\| e^{-\mu d} e^{vcod} + \text{const.} \times \|A_X\| \|B_Y\| \frac{e^{-\alpha c^2 d^2}}{\sqrt{\alpha cd}}$$

を得る。

(E.2.2) 右辺第 2 項を評価する。Lem. 17 により

$$\begin{aligned} & \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{i}{2\pi} \int_{-T}^T dt \langle \Phi_{0,\nu}, A_X(t) P_{0,\Lambda} B_Y \Phi_{0,\nu'} \rangle e^{-\alpha t^2} \\ &= \sum_{\mu} \langle \Phi_{0,\nu}, A_X \Phi_{0,\mu} \rangle \langle \Phi_{0,\mu}, B_Y \Phi_{0,\nu'} \rangle \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \frac{i}{2\pi} \int_{-T}^T dt \frac{e^{i(E_{0,\nu} - E_{0,\mu})t}}{t + i\epsilon} \\ &= \sum_{\mu} \langle \Phi_{0,\nu}, A_X \Phi_{0,\mu} \rangle \langle \Phi_{0,\mu}, B_Y \Phi_{0,\nu'} \rangle \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-\infty}^0 d\omega \exp \left[-\frac{(\omega + \Delta E_{\mu,\nu})^2}{4\alpha} \right] \\ &\rightarrow \langle \Phi_{0,\nu}, A_X P_{0,\Lambda} B_Y \Phi_{0,\nu'} \rangle \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \int_{-\infty}^0 d\omega \exp \left[-\frac{\omega^2}{4\alpha} \right] = \frac{1}{2} \langle \Phi_{0,\nu}, A_X P_{0,\Lambda} B_Y \Phi_{0,\nu'} \rangle \end{aligned}$$

である。ここに、 $\Delta E_{\mu,\nu} := E_{0,\nu} - E_{0,\mu}$ は格子のサイズ無限大極限 $|\Lambda_s| \rightarrow \infty$ にて 0 に収束することを使った。(E.2.2) 右辺第 3 項も全く同様である。

以上を総合して、

$$\begin{aligned} & \left| \langle \Phi, A_X B_Y \Phi \rangle - \frac{1}{2} [\langle \Phi, A_X P_{0,\Lambda} B_Y \Phi \rangle + \langle \Phi, B_Y P_{0,\Lambda} A_X \Phi \rangle] \right| \\ & \leq \text{const.} \times \|A_X\| \|B_Y\| e^{-(\mu - vc)d} + \text{const.} \times \|A_X\| \|B_Y\| \frac{e^{-\alpha c^2 d^2}}{\sqrt{\alpha} cd} + \mathcal{O}(e^{-\Delta E^2 / 4\alpha}) \end{aligned}$$

である。相加相乗平均の不等式を繰り返し用いると

$$e^{-x} + e^{-1/x} \geq 2e^{-(x+1/x)/2} \geq 2e^{-1}$$

で、等号成立は $x = 1$ のときに限る。これを踏まえると、 $\alpha = \Delta E / 2cd$ にて概ね最適な評価が得られ、

$$\begin{aligned} & \left| \langle \Phi, A_X B_Y \Phi \rangle - \frac{1}{2} [\langle \Phi, A_X P_{0,\Lambda} B_Y \Phi \rangle + \langle \Phi, B_Y P_{0,\Lambda} A_X \Phi \rangle] \right| \\ & \leq \text{const.} \times \|A_X\| \|B_Y\| e^{-(\mu - vc)d} \\ & \quad + \text{const.} \times \|A_X\| \|B_Y\| \left(\frac{1}{\sqrt{\Delta E cd / 2}} + \text{const.} \right) e^{-\Delta E cd / 2}. \end{aligned}$$

仮定より ΔE は定数により下から押さえられ、また $d \geq 1$ であるから、右辺第 2 項も $\|A_X\|, \|B_Y\|, \exp(-\Delta E cd / 2)$ と定数の積で押さえられる。先ほど同様に相加相乗平均を念頭に置くと

$$e^{-(\mu - vc)d} + e^{-\Delta E cd / 2} \geq 2 \exp \left[-\frac{\mu - (v - \Delta E / 2)c}{2} d \right]$$

である。等号成立は $\mu - vc = \Delta E cd / 2$ すなわち $c = \mu / (v + \Delta E / 2)$ のときに限り、またそのとき両辺各項は d について常に減少関数である。ゆえに $\tilde{\mu} = \mu / (1 + 2v / \Delta E)$ にて

$$\begin{aligned} & \left| \langle \Phi, A_X B_Y \Phi \rangle - \frac{1}{2} [\langle \Phi, A_X P_{0,\Lambda} B_Y \Phi \rangle + \langle \Phi, B_Y P_{0,\Lambda} A_X \Phi \rangle] \right| \\ & \leq \text{const.} \times \|A_X\| \|B_Y\| e^{-\tilde{\mu} d(X,Y)} \end{aligned}$$

が成り立つ。

E.2.2 最初の記載

記法は Sec. 1.1.2 に従う。また (1.1.3) の導出までは Sec. 1.1.2 で済んでいる。

図 E.1: $e^{-i\omega t}/t$ の積分路。図 E.2: $e^{-i\omega t}/(t - i\varepsilon)$ の積分路。

E.2.3 $\hat{\Theta}$ の具体形

まずは $\hat{\Theta}$ の具体形を与える。 $1/t$ の $t = 0$ 周りでの複素周回積分が定数になること、および Fourier 変換が階段関数になる関数を求めたいを念頭に置くと、 $e^{-i\omega t}/t$ の実数全体にわたる積分を考察するのが良いだろう。極 $t = 0$ を虚軸正側で回避するか負側で回避するかで積分値が変わる。Fig. E.1 の積分路をとって積分を実行すると、

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} P \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{-i\omega t}}{t} = -i \operatorname{sgn}(\omega) \sqrt{\frac{\pi}{2}}$$

である。Fig. E.2 のように極自体を虚軸に沿って移動させても類似の結果が得られる。

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{e^{-i\omega t}}{t - i\varepsilon} = -i\Theta(\omega) \sqrt{2\pi}.$$

両者の結果を比較すると、

$$-i\Theta(\omega) \sqrt{2\pi} = -i\sqrt{\frac{\pi}{2}} (\operatorname{sgn}(\omega) + 1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \left(P \frac{1}{t} - i\pi \delta(t) \right)$$

を得る。よって Θ の逆変換は

$$\hat{\Theta}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\delta(t) + P \frac{i}{\pi t} \right) \quad (\text{E.2.3})$$

である。[4] ではこの結果に π がかかっている。計算間違えたか？

E.2.4 相関関数の不等式評価

本文 Sec. 1.1.2 の議論から、 $\langle \phi_0 | A_X | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | B_Y | \phi_0 \rangle = 0$ と仮定しても一般性を失わない。本文では、相関関数と等価な形を目指して $\Theta(\omega)$ や Gaussian のフィルターをかけた結果 (1.1.4) が得られた。すなわち相関関数とこの値が近いことが望ましい。これを

踏まえ、相関関数を

$$\begin{aligned}
 & \langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle \\
 &= \langle \phi_0 | [\tilde{A}_X, B_Y] | \phi_0 \rangle + \langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle - \langle \phi_0 | [\tilde{A}_X, B_Y] | \phi_0 \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{\Theta}(-t) e^{-\alpha t^2} \langle \phi_0 | [A_X(t), B_Y] | \phi_0 \rangle \\
 &\quad - \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{\Theta}(-t) e^{-\alpha t^2} \langle \phi_0 | [A_X(t), B_Y] | \phi_0 \rangle - \langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle \right)
 \end{aligned} \tag{E.2.4}$$

と書き直す。最右辺の各項を評価する。

■(E.2.4) 第1項の評価 (E.2.3) を用いて

$$\begin{aligned}
 & \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{\Theta}(-t) e^{-\alpha t^2} \langle \phi_0 | [A_X(t), B_Y] | \phi_0 \rangle \right| \\
 &= \left| \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left(\delta(-t) - \frac{i}{\pi t} \right) e^{-\alpha t^2} \langle \phi_0 | [A_X(t), B_Y] | \phi_0 \rangle \right| \\
 &\leq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left(\delta(-t) + \frac{1}{\pi t} \right) e^{-\alpha t^2} \| [A_X(t), B_Y] \|
 \end{aligned}$$

とする。以降、主値積分の記号は省略する。 $d = d(X, Y)$ と略し、定数 $c > 0$ をとる。

$$\begin{aligned}
 (\text{LHS}) &\leq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{|t| \leq cd} dt \left(\delta(-t) + \frac{1}{\pi t} \right) e^{-\alpha t^2} \| [A_X(t), B_Y] \| \\
 &\quad + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \| A \| \| B \| \int_{|t| \geq cd} dt \frac{e^{-\alpha t^2}}{\pi c d} \\
 &\leq \sqrt{\frac{2}{\pi}} \| A \| \| B \| \min(|X|, |Y|) e^{-\mu d} \int_{|t| \leq cd} dt \left(\delta(t) + \frac{1}{\pi t} \right) (e^{2kst} - 1) \\
 &\quad + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \| A \| \| B \| \frac{2e^{-\alpha c^2 d^2}}{\sqrt{\alpha c d}}
 \end{aligned}$$

となる。最後の不等式では、第1項に Lieb-Robinson 限界を、第2項の導出には

$$\int_a^{\infty} dt e^{-x^2/2} < \int_a^{\infty} dt \frac{x}{a} e^{-x^2/2} = \frac{e^{-a^2}}{a} \tag{E.2.5}$$

を使っている。さらに $e^x - 1 = \sum_{n=1}^{\infty} x^n / n! < \sum_{n=1}^{\infty} x^n / (n-1)! = xe^x$ から

$$\int_{-a}^a dx \frac{e^x - 1}{x} < \int_{-a}^a dx \frac{xe^x}{x} < e^a$$

が成り立つので、

$$((\text{E.2.4}) \text{ 1st term}) \leq \sqrt{\frac{2}{\pi}} \| A \| \| B \| \left[\min(|X|, |Y|) e^{-\mu d} \frac{e^{2kscd}}{\pi} + \frac{2e^{-\alpha c^2 d^2}}{\sqrt{\alpha c d}} \right].$$

■(E.2.4) 第2項以降の評価 (E.2.4) 第2項以降では時間発展した演算子と時間発展していない演算子を比較しているので、時間発展の固有状態(エネルギー固有状態)で展開するのが簡単だろう。 $\langle \phi_0 | A_X | \phi_0 \rangle = \langle \phi_0 | B_Y | \phi_0 \rangle = 0$ に注意して、

$$\begin{aligned}
 & \langle \phi_0 | [A_X(t), B_Y] | \phi_0 \rangle \\
 &= \sum_n \left(\langle \phi_0 | e^{iHt} A_X e^{-iHt} | n \rangle \langle n | B_Y | \phi_0 \rangle - \langle \phi_0 | B_Y | n \rangle \langle n | e^{iHt} A_X e^{-iHt} | \phi_0 \rangle \right) \\
 &= \sum_{n \neq 0} \left(\langle 0 | A_X | n \rangle \langle n | B_Y | 0 \rangle e^{-i(E_n - E_0)t} - \langle 0 | B_Y | n \rangle \langle n | A_X | 0 \rangle e^{i(E_n - E_0)t} \right)
 \end{aligned}$$

となるので、

$$\begin{aligned}
 & ((E.2.4) \text{ 2nd term}) \\
 &= \sum_{n \neq 0} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{\Theta}(-t) e^{-\alpha t^2} e^{-i(E_n - E_0)t} \langle 0 | A_X | n \rangle \langle n | B_Y | 0 \rangle \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{\Theta}(-t) e^{-\alpha t^2} e^{i(E_n - E_0)t} \langle 0 | B_Y | n \rangle \langle n | A_X | 0 \rangle \right)
 \end{aligned}$$

と変形できる。 t 積分を実行すれば (E.2.4) 第 3 項との比較が可能になるだろう。時間積分が $\hat{\Theta}$ と Gaussian $G_\alpha(t) := e^{-\alpha t^2}$ の Fourier 変換になっていることを踏まえ、

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \hat{\Theta}(-t) G_\alpha(-t) e^{-iEt} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega (\Theta * \hat{G}_\alpha)(-E) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \Theta(-E - \omega) \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} e^{-\omega^2/4\alpha} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \Theta(\omega - E) \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} e^{-\omega^2/4\alpha} \\
 &= \frac{1}{2\sqrt{\alpha\pi}} \int_{-\infty}^E d\omega e^{-\omega^2/4\alpha} \\
 &= \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\alpha\pi}} \left(\int_{-\infty}^{\infty} - \int_E^{\infty} \right) d\omega e^{-\omega^2/4\alpha} & (E \geq 0) \\ \frac{1}{2\sqrt{\alpha\pi}} \int_E^{\infty} d\omega e^{-\omega^2/4\alpha} & (E \leq 0) \end{cases}
 \end{aligned}$$

と評価できる。(E.2.5) を使うと

$$\text{LHS} \leq \begin{cases} 1 + \mathcal{O}(e^{-E^2/4\alpha}) & (E \geq 0) \\ \mathcal{O}(e^{-E^2/4\alpha}) & (E \leq 0) \end{cases}$$

を得る。 $E_n - E_0 \geq \Delta$ ($n \neq 1$) を踏まえると

$$\begin{aligned}
 ((E.2.4) \text{ 2nd term}) &= \sum_{n \neq 0} \left[\langle 0 | A_X | n \rangle \langle n | B_Y | 0 \rangle \left(1 + \mathcal{O}(e^{-\Delta^2/4\alpha}) \right) \right. \\
 &\quad \left. - \langle 0 | B_Y | n \rangle \langle n | A_X | 0 \rangle \mathcal{O}(e^{-\Delta^2/4\alpha}) \right] \\
 &= \langle \phi_0 | A_X (1 - |\phi_0\rangle\langle\phi_0|) B_Y | \phi_0 \rangle + \mathcal{O}(\|A\|\|B\|e^{-\Delta^2/4\alpha}) \\
 &= \langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle + \mathcal{O}(\|A\|\|B\|e^{-\Delta^2/4\alpha})
 \end{aligned}$$

となる。

■定数の決定 以上の結果を全て統合すると、

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle &\leq \sqrt{\frac{2}{\pi}} \|A\| \|B\| \left[\min(|X|, |Y|) e^{-\mu d} \frac{e^{2kscd}}{\pi} + \frac{2e^{-\alpha c^2 d^2}}{\sqrt{\alpha} cd} \right] \\
 &\quad + \mathcal{O}(\|A\|\|B\|e^{-\Delta^2/4\alpha})
 \end{aligned}$$

である。相加相乗平均の不等式を繰り返し用いると

$$e^{-x} + e^{-1/x} \geq 2e^{-(x+1/x)/2} \geq 2e^{-1}$$

であり、等号成立は $x = 1$ のときに限る。これを踏まえ $\alpha = \Delta/(2cd)$ とおくと、概ね最適な評価が得られる。このとき、

$$\langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle \leq \mathcal{O} \left(\|A\|\|B\| \left[\min(|X|, |Y|) e^{(2ksc - \mu)d} + \left(1 + \frac{1}{\sqrt{\Delta cd/2}} \right) e^{-\Delta cd/2} \right] \right)$$

だが、大まかに $\min(|X|, |Y|) \geq 1 + 1/\sqrt{\Delta cd/2}$ を期待して

$$\langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle \leq \mathcal{O} \left(\|A\| \|B\| \min(|X|, |Y|) \exp \left[- \left(\mu - \left(2ks - \frac{\Delta}{2} \right) c \right) d \right] \right).$$

$c > 0$ と $\mu - (2ks - \Delta/2)c > 0$ が任意のパラメーターで成立するように c を選ぶと、

$$c = \frac{\mu}{\Delta/2 + 2ks}$$

とすることで、

$$\begin{aligned} \langle \phi_0 | A_X B_Y | \phi_0 \rangle &\leq \mathcal{O} \left(\|A\| \|B\| \min(|X|, |Y|) e^{-d(\mu + c(\Delta/2 - 2ks))} \right) \\ &= \mathcal{O} \left(\|A\| \|B\| \min(|X|, |Y|) e^{-\tilde{\mu}d} \right) \\ \tilde{\mu} &= \frac{\mu}{1 + 4ks/\Delta} \end{aligned}$$

を得る。

E.3 整数論に関する命題の証明

Prop. 17: 整数値関数は二項係数の線型結合で一意に表せること

任意の r 次までの有理数値関数の集合を $V_r := \{P : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Q} \mid \deg P \leq r\}$ 、整数値関数への制限を $V_r^{\mathbb{Z}} := \{P : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z} \mid \deg P \leq r\}$ とする。整数値関数 $P \in V_r^{\mathbb{Z}}$ は $\{n_m \in \mathbb{Z}\}_{m=0}^n$ を用いて

$$P(x) = \sum_{m=0}^r n_m \binom{x+m-1}{m}$$

という形で一意に表される。ただし $\binom{x+m-1}{m} = x(x+1)\cdots(x+m-1)/m!$ は二項係数である。

Proof.

■ $\binom{x+m-1}{m}$ が $V_r^{\mathbb{Z}}$ の独立な基底であること 任意の $f \in V_r$ に対して

$$\Delta f(x) = f(x+1) - f(x), \quad \Delta^0 f(x) = f(x), \quad \Delta^{k+1} f(x) = \Delta(\Delta^k f(x))$$

を定め、

$$B_k(x) = \binom{x+k-1}{k} = \frac{x(x+1)\cdots(x+k-1)}{k!}$$

とする。このとき、

$$\Delta B_k(x) = \frac{1}{k!} ((x+k)-x)(x+1)(x+2)\cdots(x+k-1) = \binom{x+k-1}{k-1}$$

なので

$$\Delta^m B_k(x) = \begin{cases} \binom{x+k-1}{k-m} & (k \geq m), \\ 0 & (k < m). \end{cases}$$

$x = 0$ にて評価すると、 $m \geq 1$ では

$$(\Delta^m B_k)(0) = \begin{cases} \binom{k-1}{k-m} = \binom{k-1}{m-1} & (k \geq m), \\ 0 & (k < m) \end{cases}$$

および $m = 0$ にて $(\Delta^0 B_k)(0) = \delta_{k,0}$ を得る。 $(r+1) \times (r+1)$ 行列

$$M = [(\Delta^m B_k)(0)]_{m,k=0}^r = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \binom{0}{0} & \binom{1}{0} & \cdots & \binom{r-1}{0} \\ 0 & 0 & \binom{1}{1} & \cdots & \binom{r-1}{1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \binom{r-1}{r-1} \end{pmatrix}$$

は上三角行列であり、対角成分はすべて 1 であるから $\det M = 1$ で、 \mathbb{Q} 上では M^{-1} を持つ。 $T : V_r \rightarrow \mathbb{Q}^{r+1}$ を $T[P] := ((\Delta^m P)(0))_{m=0}^r$ で与えると、

$$(T[B_k])_{k=0}^r = ((\Delta^m B_k)(0))_{m=0}^r = M$$

なので T は次元を変えず、 B_k は V_r の独立な基底を張る。

■整数値関数の一意的な分解 上記の事実から任意の $P \in V_r$ は

$$P(x) =: \sum_{k=0}^r n_k B_k(x), \quad n_k \in \mathbb{Q} \quad (\text{E.3.1})$$

と一意に分解できる。特に $P \in V_r^{\mathbb{Z}}$ のとき、 $P(\mathbb{Z}) \subset \mathbb{Z}$ であり、(E.3.1) を具体的に計算することで

$$n_0 = P(0), \quad n_k = (\Delta^k P)(0) = \sum_{m=k}^r n_m \binom{m-1}{k-1} \quad (k \geq 1)$$

とわかるので、

$$\begin{pmatrix} (\Delta^0 P)(0) \\ (\Delta^1 P)(0) \\ (\Delta^2 P)(0) \\ \vdots \\ (\Delta^r P)(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \binom{0}{0} & \binom{1}{0} & \cdots & \binom{r-1}{0} \\ 0 & 0 & \binom{1}{1} & \cdots & \binom{r-1}{1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \binom{r-1}{r-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_0 \\ n_1 \\ n_2 \\ \vdots \\ n_r \end{pmatrix}.$$

行列は正則なので、この方程式を解くことで係数が具体的に求まる。

■ n_k が整数であること 仮定より $n_r = (\Delta^r P)(0) \in \mathbb{Z}$ である。 k についての帰納法により、

$$n_k = b_k - \sum_{m=k+1}^r n_m \binom{m-1}{k-1} \in \mathbb{Z}$$

なので全ての k に対し $n_k \in \mathbb{Z}$ である。 \square

Prf. N 次差分は二項係数による線型結合

任意の $f : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{C}$ に対し、 $Tf(x) = f(x+1)$ と定める。差分要素は $\Delta = f(x+1) - f(x) = (T-1)f(x)$ であるから、

$$\Delta^N f(0) = (T-1)^N f(0) = \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} (-1)^{N-k} T^k f(0) = \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} (-1)^{N-k} f(k)$$

と展開できる。

E.4 (4.2.3) の転送行列を用いた議論による証明

証明するのは以下の命題である。方針は [42, 33] に従う。

Prop. 18: (4.2.3)

ランク r の多極子対称性を持つ系のバルクにおいて、任意の $k \leq r$ に対し、ランク k の多極子対称性の作用により (4.2.3) を満たすゲージが存在する。

帰納法により証明する。 $r = 1$ のときは本文で示した通り。 k で成り立つと仮定し、 $k + 1$ で成り立つことを示す。

A をランク r の多極子対称性を有する SPT 基底状態を構成する左標準形の injective MPS テンソルとする。すなわち、転送行列 $T(\mathcal{O}) = \sum_h A^{h\dagger} \mathcal{O} A^h$ の左固有ベクトルが単位行列、右固有ベクトルがフルランク行列 ρ である。

$$\begin{array}{c} \boxed{\text{Prop. 18: (4.2.3)}} \\ \text{ランク } r \text{ の多極子対称性を持つ系のバルクにおいて、任意の } k \leq r \text{ に対し、ランク } k \text{ の多極子対称性の作用により (4.2.3) を満たすゲージが存在する。} \end{array}$$

(E.4.1)

$U_g^{(k+1)} |\psi\rangle$ は (4.2.3) を繋げたものだが、SPT 相の定義から $|\psi\rangle$ はただ一つの基底状態なので、 $\langle\psi|U_g^{(k+1)}|\psi\rangle$ は $U(1)$ 位相因子である。この値は転送行列 $T_k(\mathcal{O}) := \sum_h A^{h\dagger} \mathcal{O} X_g^{(k)\dagger} A^h$ を繋げることで評価できる。転送行列 T_k が左固有値として $|\lambda| \neq 1$ を持てば、 $\langle\psi|U_g^{(k+1)}|\psi\rangle$ は熱力学極限 $L \rightarrow \infty$ で発散するか 0 となって不合理。よって T_k は $U(1)$ 固有値の左固有ベクトル $X_g^{(k+1)\dagger}$ がある。

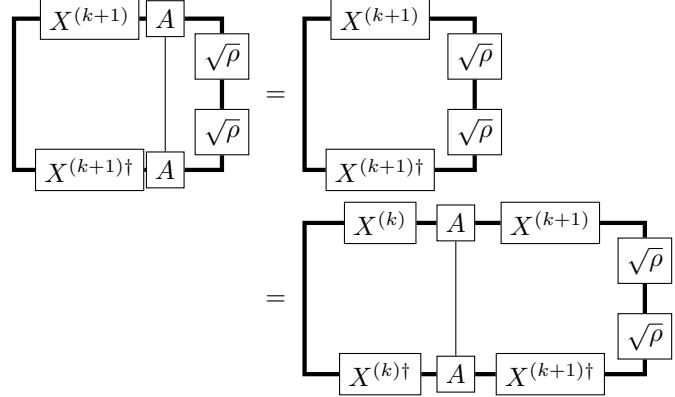
(E.4.2)

本文同様、 \approx は $U(1)$ 位相因子を除いて両辺が一致することを表す。

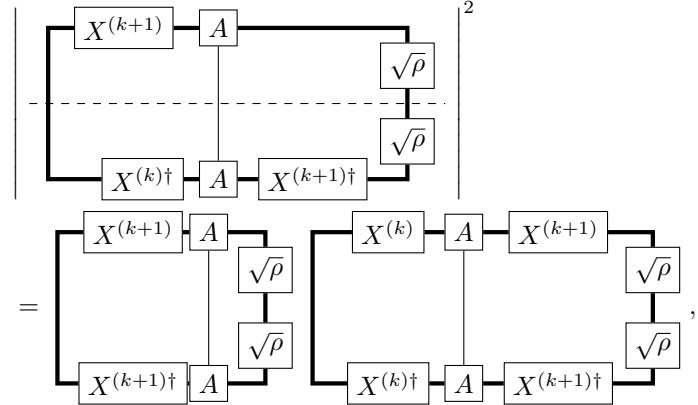
続いて以下の量を評価する。

(E.4.3)

(E.4.1) により、この右辺の上半分と下半分はノルムが等しいことがわかる。



最後の等号で $X_g^{(k)}$ のユニタリ性を利用した。(E.4.3) と比較すると、

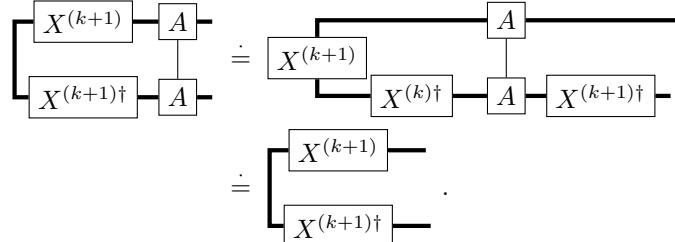


を得る。これは Cauchy-Schwarz の不等式であり、左辺の上半分と下半分は同じノルムを有しているので互いに比例する。よって、

$$\boxed{X^{(k+1)\dagger} \xrightarrow{A} \sqrt{\rho}} = \boxed{X^{(k)\dagger} \xrightarrow{A} X^{(k+1)\dagger} \xrightarrow{\sqrt{\rho}}}$$

となり、 $X_g^{(k+1)}$ がユニタリなら (4.2.3) と等価。

(4.2.3) と (E.4.2) により



が成り立つ。injective MPS テンソルから構成される転送行列の U(1) 固有値は常に 1 で、対応する固有ベクトルは常に単位行列であるから、 $X_g^{(k+1)}$ はユニタリ演算子である。

Prop. 8 を証明する。

E.5 Prop. 8 の証明

■証明で使う記法 証明に先立って記法を整理する。この証明では任意の $g, h \in G$ を固定するため、 $\theta_{g,h}(k, l)$ を $\theta(k, l)$ と略記する。また

$$S_L(k, l) := \sum_{m=0}^k \sum_{n=0}^l \theta(m, n) B_L(k-m) B_L(l-n), \quad B_L(t) := \binom{L+t-1}{t},$$

$$C_L(k, l) := S_L(k, l) - \theta(k, l),$$

を導入することで (4.2.6) は

$$\exp[iC_L(k, l)] = 1.$$

と書き直せる。与えられた関数 $f : \mathbb{Z}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ に対して差分作用素 Δ を

$$\Delta f(k, l) := f(k, l) - f(k-1, l) - f(k, l-1) + f(k-1, l-1)$$

とする。さらに Pascal の恒等式

$$\binom{L+t-1}{t} = \binom{L+t-2}{t-1} + \binom{L+t-2}{t},$$

を書き換えることで

$$B_L(t) = B_L(t-1) + B_{L-1}(t) \tag{E.5.1}$$

とできる。これにより $\Delta S_L(k, l)$ は次のように簡略化できる。

$$\Delta S_L(k, l) = S_{L-1}(k, l). \tag{E.5.2}$$

実際、

$$\begin{aligned} & \Delta S_L(k, l) \\ &= \sum_{m=0}^{k-1} \sum_{n=0}^{l-1} \theta(m, n) (B_L(k-m) B_L(l-n) - B_L(k-1-m) B_L(l-n) \\ &\quad - B_L(k-m) B_L(l-1-n) + B_L(k-1-m) B_L(l-1-n)) \\ &\quad + \left(\sum_{m=0}^{k-1} B_L(k-m) \delta_{n,l} + \sum_{n=0}^{l-1} \delta_{m,k} B_L(l-n) + \delta_{k,m} \delta_{l,n} \right. \\ &\quad \left. - \sum_{m=0}^{k-1} B_L(k-1-m) \delta_{n,l} - \sum_{n=0}^{l-1} \delta_{m,k} B_L(l-1-n) \right) \theta(m, n) \\ &= \sum_{m=0}^{k-1} \sum_{n=0}^{l-1} \theta(m, n) (B_L(k-m) - B_L(k-1-m))(B_L(l-n) - B_L(l-1-n)) \\ &\quad + \sum_{m=0}^{k-1} \theta(m, l)(B_L(k-m) - B_L(k-1-m)) \\ &\quad + \sum_{n=0}^{l-1} \theta(k, n)(B_L(l-n) - B_L(l-1-n)) + \theta(k, l) \\ &= \sum_{m=0}^{k-1} \sum_{n=0}^{l-1} \theta(m, n) B_{L-1}(k-m) B_{L-1}(l-n) + \sum_{m=0}^{k-1} \theta(m, l) B_{L-1}(k-m) \\ &\quad + \sum_{n=0}^{l-1} \theta(k, n) B_{L-1}(l-n) + \theta(k, l), \end{aligned}$$

によって確かめられる。最後の行では (E.5.1) を用いた。

■十分性 はじめに十分性を示す。

(4.2.6) が任意の L, g, h で成り立つとき、 $C_L(k, l) = 0$ と書き換えられるので、

$$\begin{aligned} 0 &= \Delta C_L(k, l) = \Delta S_L(k, l) - \Delta \theta(k, l) \\ &= S_{L-1}(k, l) - \Delta \theta(k, l) \\ &= \theta(k-1, l) - \theta(k, l-1) + \theta(k-1, l-1). \end{aligned}$$

2 行目では (E.5.2) を、3 行目では $C_{L-1} = S_{L-1} - \theta = 0$ を用いた。これは (4.2.7) と同値である。

(4.2.8) ($\theta(k, l) = 0$ for $k + l < r$) の証明を帰納法で行う。 $C_L(0, 1) = \theta(0, 0)L = 0$ により $\theta(0, 0) = 0$ が保証される。これは $k + l = 0$ の場合に対応する。 $s < r$ を固定し、 $k + l < s$ に対して $\theta(k, l) = 0$ となることを仮定する。 $\theta(k, l) = \theta(k+1, l) + \theta(k, l+1)$ が証明されているので、 $\theta(0, s)$ を決めるとき $k + l = s$ となる他の $\theta(k, l)$ が決定する。

$$\theta(0, s) = -\theta(1, s-1) = \theta(2, s-2) = \cdots = (-1)^s \theta(s, 0)$$

一方で、

$$0 = C_L(0, s+1) = \sum_{n=0}^s \theta(0, n) B_L(s+1-n) = L \theta(0, s)$$

となるので、任意の $k + l = s$ にて $\theta(k, l) = 0$.

■必要性 続いて (4.2.7) ($\theta(k, l) = \theta(k+1, l) + \theta(k, l+1)$ for $k, l < r$) および (4.2.8) ($\theta(k, l) = 0$ for $k + l < r$) を仮定する。前者は

$$\Delta \theta(k, l) = \theta(k, l), \quad \forall k, l < r+1 \tag{E.5.3}$$

と書き換えられる。(E.5.2) と (E.5.3) によって

$$\Delta C_L(k, l) = \Delta S_L(k, l) - \Delta \theta(k, l) = S_{L-1}(k, l) - \theta(k, l).$$

よって

$$\Delta C_L(k, l) = C_{L-1}(k, l)$$

である。

$L = 1$ を考えるのは物理的ではないが、 C_1 は数学的に well-defined なので、これを評価する。

$$C_1(k, l) = \sum_{m=0}^k \sum_{n=0}^l \theta(m, n) B_1(k-m) B_1(l-n) - \theta(k, l) = \sum_{m=0}^k \sum_{n=0}^l \theta(m, n) - \theta(k, l)$$

$k + l \leq r$ のとき、仮定から右辺は 0 となる。一方 $k + l > r$ のとき、

$$\begin{aligned} \Delta C_1(k, l) &= \left(\sum_{m=0}^k \sum_{n=0}^l - \sum_{m=0}^{k-1} \sum_{n=0}^l - \sum_{m=0}^k \sum_{n=0}^{l-1} + \sum_{m=0}^{k-1} \sum_{n=0}^{l-1} \right) \theta(m, n) - \Delta \theta(k, l) \\ &= \theta(k, l) - \theta(k, l) = 0. \end{aligned}$$

よって任意の $k, l \geq 0$ にて $C_1(k, l) = 0$ である。

L の帰納法により $C_L(k, l) = 0$ を示す。任意の $k, l \geq 0$ で $C_{L-1}(k, l) = 0$ となることを仮定する。(??) により

$$C_L(k, l) = C_L(k-1, l) + C_L(k, l-1) - C_L(k-1, l-1)$$

すなわち任意の $m+n < k+l$ で $C_L(m, n) = 0$ なら $C_L(k, l) = 0$ である。 $m+n \leq r$ をとると、

$$C_L(m, n) = \sum_{m'=0}^m \sum_{n'=0}^n \theta(m', n') B_L(m-m') B_L(n-n') - \theta(m, n) = 0$$

第 2 の等号では残っている $\theta(m', n')$ が仮定により 0 であることを用いた。よって $k+l$ の帰納法により、任意の $k, l \geq 0$ にて $C_L(k, l) = 0$ である。これは (4.2.6) と同値である。

E.6 decorated domain wall 構成による多極子 SPT 模型に関する証明

補題として、本節で多用する二項係数と差分演算子の関係式を示す。

Lem. 18: 差分演算子の累乗と二項係数

任意の関数 $f : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{C}$ に対して差分演算子 Δ を $\Delta f(k) := f(k+1) - f(k)$ と定義すると、

$$\Delta^N f(k) = \sum_{m=0}^N (-1)^{N-m} \binom{N}{m} f(k+m).$$

Prf.

並進演算子 T を $Tf(k) := f(k+1)$ と定義すると、 $\Delta = T - 1$ である。二項展開により

$$\begin{aligned} \Delta^N f(k) &= (T-1)^N f(k) = \sum_{m=0}^N (-1)^{N-m} \binom{N}{m} T^m f(k) \\ &= \sum_{m=0}^N (-1)^{N-m} \binom{N}{m} f(k+m). \end{aligned}$$

E.6.1 commuting projector Hamiltonian であること

$$a_j^{(2n+1, \eta)} = X_j \prod_{k=0}^{2n+2} Z_{j-(n+1)+k}^{(-1)^k \binom{2n+2}{k} \eta}$$

どうしの積の交換関係 $[U, V] := UVU^{-1}V^{-1}$ を計算する。 $j' = j+k$, $|k| \leq n+1$ ならば

$$\begin{aligned} &\left[a_j^{(2n+1, \eta)}, a_{j+k}^{(2n+1, \eta)} \right] \\ &= \left[X_j Z_{j+k}^{(-1)^{k+n+1} \binom{2n+2}{k+n+1} \eta}, X_{j+k} Z_j^{(-1)^{-k+n+1} \binom{2n+2}{-k+n+1} \eta} \right] \\ &= \exp \left[\frac{2\pi i \eta}{N} \left(-(-1)^{k+n+1} \binom{2n+2}{k+n+1} + (-1)^{-k+n+1} \binom{2n+2}{-k+n+1} \right) \right] = 1 \end{aligned}$$

を満たす。 $k > n + 1$ ならば $a_j^{(2n+1,\eta)}$ と $a_{j+k}^{(2n+1,\eta)}$ は台を共有しないので自明に可換。
ランクが偶数 $r = 2n$ の場合は局所ハミルトニアンが

$$a_j^{(2n,\xi)} = X_{j+1}^\dagger \prod_{k=0}^{2n+1} \tilde{Z}_{j-n+k}^{(-1)^k \binom{2n+1}{k} M\xi / K}$$

$$\tilde{a}_j^{(2n,\xi)} = \tilde{X}_j \prod_{k=0}^{2n+1} Z_{j-n+k}^{(-1)^k \binom{2n+1}{k} N\xi / K}$$

で与えられるが、 $|k| \leq n$ に対して

$$\begin{aligned} & \left[a_j^{(2n,\xi)}, \tilde{a}_{j+k}^{(2n,\xi)} \right] \\ &= \left[X_{j+1}^\dagger \prod_{l=0}^{2n+1} \tilde{Z}_{j-n+l}^{(-1)^l \binom{2n+1}{l} M\xi / K}, \tilde{X}_{j+k} \prod_{m=0}^{2n+1} Z_{j-n+k+m}^{(-1)^m \binom{2n+1}{m} N\xi / K} \right] \\ &= \exp\left[\frac{2\pi i}{K} (-1)^{k+n} \binom{2n+1}{k+n}\right] \exp\left[\frac{2\pi i}{K} (-1)^{n-k+1} \binom{2n+1}{n-k+1}\right] \\ &= \exp\left[\frac{2\pi i}{K} (-1)^{k+n} \left(\binom{2n+1}{n+k} - \binom{2n+1}{n+k}\right)\right] = 1 \end{aligned}$$

なので交換する。 $k > n$ ならば $a_j^{(2n,\xi)}$ と $\tilde{a}_{j+k}^{(2n,\xi)}$ は台を共有しないので自明に可換。

E.6.2 r 以下の対称性を持つこと

ランク r_0 の多極子対称性

$$U^{(r_0)} := \prod_{i \in \Lambda} X_i^{\binom{i+r_0-1}{r_0}}$$

との交換が以下の議論によってわかる。

ランク r における局所 Hamiltonian と $U^{(r_0)}$ の交換に非自明な寄与を与えるのは

$$\prod_{k=0}^{r+1} Z_{j-[{(r+1)/2}]+k}^{(-1)^k \binom{r+1}{k}}$$

の部分。ただし $[x]$ は x を超えない最大の整数を表す。Lem. 18 を用いると、

$$\begin{aligned} & \left[\prod_{k=0}^{r+1} Z_{j-[{(r+1)/2}]+k}^{(-1)^k \binom{r+1}{k}}, \prod_{i \in \Lambda} X_i^{\binom{i+r_0-1}{r_0}} \right] \\ &= \exp\left[\frac{2\pi i}{N} \sum_{k=0}^{r+1} (-1)^k \binom{r+1}{k} \binom{j - [(r+1)/2] + k + r_0 - 1}{r_0}\right] \\ &= \exp\left[\frac{2\pi i}{N} (-1)^{r+1} \Delta_k^{r+1} \binom{j - [(r+1)/2] + k + r_0 - 1}{r_0}\right]_{k=0} \end{aligned}$$

を得る。最右辺の二項係数は r_0 次であり、 $r_0 \leq r$ ならば Δ^{r+1} を作用させると 0 になる
ので $[a_j^{(r,\zeta)}, U^{(r_0)}] = 1$ が従う。一方 $r_0 > r$ では最右辺が非自明になるためランク $r+1$
以上の多極子対称性を持たない。

E.6.3 symmetry fractionalization

奇数ランク $r = 2n + 1$

十分パルクの格子点 x における作用を考えると、

$$\begin{aligned} \left. \prod_{j \in \Lambda} \left(a_j^{(2n+1, \eta)} \right)^{\binom{j+r_0-1}{r_0}} \right|_x &= \prod_{j \in \Lambda} \left[X_j^{\binom{j+r_0-1}{r_0}} \prod_{k=0}^{2n+2} Z_{j-(n+1)+k}^{(-1)^k \binom{2n+2}{k} \binom{j+r_0-1}{r_0} \eta} \right]_x \\ &= X_x^{\binom{x+r_0-1}{r_0}} \prod_{k=0}^{2n+2} Z_x^{(-1)^k \binom{2n+2}{k} \binom{x+n-k+r_0}{r_0} \eta} \end{aligned}$$

だが、 $r_0 < 2n + 2$ のので、Lem. 18 により

$$\sum_{k=0}^{2n+2} (-1)^k \binom{2n+2}{k} \binom{x+n-k+r_0}{r_0} = \Delta_k^{2n+2} \binom{x+n-k+r_0}{r_0}_{k=0} = 0.$$

故に十分境界から離れていれば Z による作用は自明になる。

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{r_0} &= \left(\prod_{j=1}^{n+1} X_j^{\binom{j+r_0-1}{r_0}} \right) \prod_{j_x=n+2}^{3(n+1)} \prod_{\substack{0 \leq k_z \leq 2n+2 \\ 1 \leq j_x-(n+1)+k_z \leq 2n+2}} Z_{j_x-(n+1)+k_z}^{-(-1)^{k_z} \binom{2n+2}{k_z} \binom{j_x+r_0-1}{r_0}} \\ &= \left(\prod_{j=1}^{n+1} X_j^{\binom{j+r_0-1}{r_0}} \right) \prod_{x=1}^{2n+2} \prod_{j_x=n+2}^{x+n+1} Z_x^{-(-1)^{x+n+1-j_x} \binom{2n+2}{x+n+1-j_x} \binom{j_x+r_0-1}{r_0}} \\ &= \left(\prod_{x=1}^{n+1} X_x^{\binom{x+r_0-1}{r_0}} \right) \prod_{x=1}^{2n+2} Z_x^{-\sum_{j=1}^x (-1)^{x-j} \binom{2n+2}{x-j} \binom{j+n+r_0}{r_0}} \end{aligned}$$

なので、交換関係

$$\begin{aligned} &[\mathcal{L}_{r_1}, \mathcal{L}_{r_2}] \\ &= \prod_{x=1}^{n+1} \left[Z_x^{-\sum_{j_1=1}^x (-1)^{x-j_1} \binom{2n+2}{x-j_1} \binom{j_1+n+r_1}{r_1}}, X_x^{\binom{x+r_2-1}{r_2}} \right] \\ &\quad \times \prod_{x=1}^{n+1} \left[X_x^{\binom{x+r_1-1}{r_1}}, Z_x^{-\sum_{j_2=1}^x (-1)^{x-j_2} \binom{2n+2}{x-j_2} \binom{j_2+n+r_2}{r_2}} \right] \\ &= \prod_{x=1}^{n+1} \exp \left[\frac{2\pi i}{N} \sum_{j=1}^x (-1)^{x-j} \binom{2n+2}{x-j} \binom{j+n+r_1}{r_1} \binom{x+r_2-1}{r_2} - (r_1 \leftrightarrow r_2) \right] \end{aligned}$$

が成り立つ。

$r_1 + r_2 < 2n + 1$ のとき交換関係は自明であることを示す。右辺第 1 項の総和部分は

$$\begin{aligned} &\sum_{j=1}^x (-1)^{x-j} \binom{2n+2}{x-j} \binom{j+n+r_1}{r_1} \binom{x+r_2-1}{r_2} \\ &= \sum_{k=0}^{x-1} (-1)^k \binom{2n+2}{k} \binom{x-k+n+r_1}{r_1} \binom{x+r_2-1}{r_2} \\ &= - \sum_{k=x}^{2n+2} (-1)^k \binom{2n+2}{k} \binom{x-k+n+r_1}{r_1} \binom{x+r_2-1}{r_2} \end{aligned}$$

である。ただし第 2 の等号では Lem. 18 から得られる

$$\begin{aligned} 0 &= (-1)^{2n+2} \Delta_k^{2n+2} \binom{x-k+n+r_1}{r_1}_{k=0} \binom{x+r_2-1}{r_2} \\ &= \sum_{k=0}^{2n+2} (-1)^k \binom{2n+2}{k} \binom{x-k+n+r_1}{r_1} \binom{x+r_2-1}{r_2} \end{aligned}$$

を使った。 $\alpha = 2n+2-k, \beta = k+x-n-1$ として

$$\begin{aligned} &\sum_{x=1}^{n+1} \sum_{j=1}^x (-1)^{x-j} \binom{2n+2}{x-j} \binom{j+n+r_1}{r_1} \binom{x+r_2-1}{r_2} \\ &= - \sum_{x=1}^{n+1} \sum_{(\alpha, \beta)} (-1)^\alpha \binom{2n+2}{\alpha} \binom{\alpha+\beta+r_1-1}{r_1} \binom{\beta+n+r_2}{r_2} \end{aligned}$$

参考文献

- [1] M. B. Hastings and T. Koma, “Spectral gap and exponential decay of correlations,” *Communications in Mathematical Physics* **265** no. 3, (Apr., 2006) 781–804, [cond-mat/0507008](#).
<http://dx.doi.org/10.1007/s00220-006-0030-4>.
- [2] M. B. Hastings, “Lieb-schultz-mattis in higher dimensions,” *Phys. Rev. B* **69** (Mar, 2004) 104431, [arXiv:cond-mat/0305505](#).
<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.69.104431>.
- [3] E. H. Lieb and D. W. Robinson, “The finite group velocity of quantum spin systems,” *Communications in Mathematical Physics* **28** (Sep, 1972) 251–257.
<https://doi.org/10.1007/BF01645779>.
- [4] T. S. Cubitt, “Advanced quantum information theory course.” Lecture notes for “advanced quantum information theory course”, for ucl quantum cdt, Jul, 2018. <https://www.dr-qubit.org/AQIT.html>.
- [5] M. B. Hastings, “An area law for one-dimensional quantum systems,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* **2007** no. 08, (Aug., 2007) P08024–P08024, [arXiv:0705.2024 \[quant-ph\]](#).
<http://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/2007/08/P08024>.
- [6] I. Arad, A. Kitaev, Z. Landau, and U. Vazirani, “An area law and sub-exponential algorithm for 1d systems,” 2013.
<https://arxiv.org/abs/1301.1162>.
- [7] F. G. S. L. Brandão and M. Horodecki, “An area law for entanglement from exponential decay of correlations,” *Nature Physics* **9** no. 11, (Sept., 2013) 721–726, [arXiv:1309.3789 \[quant-ph\]](#).
<http://dx.doi.org/10.1038/nphys2747>.
- [8] J. Cho, “Realistic area-law bound on entanglement from exponentially decaying correlations,” *Physical Review X* **8** no. 3, (July, 2018) , [arXiv:1706.09379 \[quant-ph\]](#). <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevX.8.031009>.
- [9] M. Fannes, B. Nachtergaelie, and R. F. Werner, “Finitely correlated states on quantum spin chains,” *Communications in Mathematical Physics* **144** (May, 1992) 443–490. [10.1007/BF02099178](https://doi.org/10.1007/BF02099178).
- [10] 塩. 謙, “ノート：行列積状態,” 2024. https://www2.yukawa.kyoto-u.ac.jp/~ken.shiozaki/doc/MPS_lec/MPS_lec.pdf.
- [11] A. Molnar, Y. Ge, N. Schuch, and J. I. Cirac, “A generalization of the

- injectivity condition for projected entangled pair states,” *Journal of Mathematical Physics* **59** no. 2, (Feb., 2018) , arXiv:1706.07329 [cond-mat.str-el]. <http://dx.doi.org/10.1063/1.5007017>.
- [12] J. I. Cirac, D. Pérez-García, N. Schuch, and F. Verstraete, “Matrix product states and projected entangled pair states: Concepts, symmetries, theorems,” *Rev. Mod. Phys.* **93** (Dec, 2021) 045003, arXiv:2011.12127 [quant-ph]. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.93.045003>.
- [13] M. Sanz, D. Perez-Garcia, M. M. Wolf, and J. I. Cirac, “A quantum version of wielandt’s inequality,” *IEEE Transactions on Information Theory* **56** no. 9, (Sept., 2010) 4668–4673, arXiv:0909.5347 [quant-ph]. <http://dx.doi.org/10.1109/TIT.2010.2054552>.
- [14] J. Cirac, D. Pérez-García, N. Schuch, and F. Verstraete, “Matrix product density operators: Renormalization fixed points and boundary theories,” *Annals of Physics* **378** (Mar., 2017) 100–149, arXiv:1606.00608 [quant-ph]. <http://dx.doi.org/10.1016/j.aop.2016.12.030>.
- [15] A. Cadarso, M. Sanz, M. M. Wolf, J. I. Cirac, and D. Pérez-García, “Entanglement, fractional magnetization, and long-range interactions,” *Physical Review B* **87** no. 3, (Jan., 2013) , arXiv:1209.3898 [quant-ph]. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.87.035114>.
- [16] G. De las Cuevas, T. S. Cubitt, J. I. Cirac, M. M. Wolf, and D. Pérez-García, “Fundamental limitations in the purifications of tensor networks,” *Journal of Mathematical Physics* **57** no. 7, (July, 2016) , arXiv:arXiv:1512.05709 [quant-ph]. <http://dx.doi.org/10.1063/1.4954983>.
- [17] S. R. White, “Density matrix formulation for quantum renormalization groups,” *Phys. Rev. Lett.* **69** (Nov, 1992) 2863–2866. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.69.2863>.
- [18] U. Schollwöck, “The density-matrix renormalization group,” *Reviews of Modern Physics* **77** no. 1, (Apr., 2005) 259–315, arXiv:cond-mat/0409292. <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.77.259>.
- [19] K. A. Hallberg, “New trends in density matrix renormalization,” *Advances in Physics* **55** no. 5–6, (July, 2006) 477–526, arXiv:cond-mat/0609039. <http://dx.doi.org/10.1080/00018730600766432>.
- [20] U. Schollwöck, “The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states,” *Annals of Physics* **326** no. 1, (Jan, 2011) 96–192, arXiv:1008.3477 [cond-mat.str-el]. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491610001752>. January 2011 Special Issue.
- [21] 西. 友年, **テンソルネットワークの基礎と応用**. サイエンス社, Jun, 2021.
- [22] 西. 友年, **テンソルネットワーク入門**. 讲谈社, Apr, 2023. <https://books.google.co.jp/books?id=1Nm5EAAAQBAJ>.
- [23] H. Tasaki, *Physics and Mathematics of Quantum Many-Body Systems*. Springer Cham, May, 2020.

- [24] 高. 和孝 and 西. 秀稔, **相転移・臨界現象と繰り込み群**. 丸善出版株式会社, Apr, 2017.
- [25] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, “Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets,” *Phys. Rev. Lett.* **59** (Aug, 1987) 799–802. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.59.799>.
- [26] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, “Valence bond ground states in isotropic quantum antiferromagnets,” *Communications in Mathematical Physics* **115** (9, 1988) 477–528. <https://doi.org/10.1007/BF01218021>.
- [27] T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, “A two-dimensional isotropic quantum antiferromagnet with unique disordered ground state,” *Journal of Statistical Physics* **53** (10, 1988) 383–415. <https://doi.org/10.1007/BF01011563>.
- [28] S. Knabe, “Energy gaps and elementary excitations for certain vbs-quantum antiferromagnets,” *Journal of Statistical Physics* **52** (08, 1988) 627–638. <https://doi.org/10.1007/BF01019721>.
- [29] H. J. Briegel, *Cluster States*, pp. 96–105. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2009. https://doi.org/10.1007/978-3-540-70626-7_30.
- [30] H. J. Briegel and R. Raussendorf, “Persistent entanglement in arrays of interacting particles,” *Physical Review Letters* **86** no. 5, (Jan., 2001) 910–913, quant-ph/0004051. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.86.910>.
- [31] J. Garre-Rubio, L. Lootens, and A. Molnár, “Classifying phases protected by matrix product operator symmetries using matrix product states,” *Quantum* **7** (Feb., 2023) 927, arXiv:2203.12563 [cond-mat.str-el]. <http://dx.doi.org/10.22331/q-2023-02-21-927>.
- [32] X. Chen, Y.-M. Lu, and A. Vishwanath, “Symmetry-protected topological phases from decorated domain walls,” *Nature Communications* **5** no. 1, (Mar., 2014) 3507, arXiv:1303.4301 [cond-mat.str-el]. <http://dx.doi.org/10.1038/ncomms4507>.
- [33] H. T. Lam, “Classification of dipolar symmetry-protected topological phases: Matrix product states, stabilizer hamiltonians, and finite tensor gauge theories,” *Phys. Rev. B* **109** (Mar, 2024) 115142, arXiv:2311.04962 [cond-mat.str-el]. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.109.115142>.
- [34] T. Saito, W. Cao, B. Han, and H. Ebisu, “Matrix product state classification of 1d multipole symmetry protected topological phases,” 2025. <https://arxiv.org/abs/2509.09244>.
- [35] H. Yan. private communication.
- [36] J. H. Han, E. Lake, H. T. Lam, R. Verresen, and Y. You, “Topological quantum chains protected by dipolar and other modulated symmetries,” *Phys. Rev. B* **109** (Mar, 2024) 125121, arXiv:2309.10036 [cond-mat.str-el]. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.109.125121>.
- [37] P. Jordan and J. V. Neumann, “On inner products in linear, metric spaces,” *Annals of Mathematics* **36** no. 3, (1935) 719–723.

- [http://www.jstor.org/stable/1968653.](http://www.jstor.org/stable/1968653)
- [38] 犬. 鉄郎, 田. 行人, and 小. 嘉孝, 応用群論 (増補版) -群表現と物理学-. 裳華房, 1980. <https://www.shokabo.co.jp/mybooks/ISBN978-4-7853-2801-6.htm>.
- [39] D. Tambara, “Representation of tensor categories with fusion rules of self-duality for abelian groups,” *Israel Journal of Mathematics* **118** no. 1, (12, 2000) 29–60. <https://doi.org/10.1007/BF02803515>.
- [40] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition*. Cambridge University Press, 2010.
- [41] A. Uhlmann, “The “transition probability” in the state space of a *-algebra,” *Reports on Mathematical Physics* **9** no. 2, (1976) 273–279. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0034487776900604>.
- [42] J. C. Bridgeman and C. T. Chubb, “Hand-waving and interpretive dance: an introductory course on tensor networks,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **50** no. 22, (May, 2017) 223001, [arXiv:1603.03039](https://arxiv.org/abs/1603.03039) [quant-ph]. <http://dx.doi.org/10.1088/1751-8121/aa6dc3>.

索引

- basis
 - of representation, 109
- bicharacter, 117
- blocking, 34
- box tensor product, → external tensor product
- canonical form, 24
- character
 - of group representation, 110
- CPTP 写像, 32
- CP 写像, 86
- density matrix renormalization group, → DRG41
- direct sum
 - representation, 113
- DMRG, 41
- essentially different, 36
- Euclid 距離, 75
- external tensor product, 112
- F-シンボル, 56
- fidelity, 123
- finitely correlated state, → 有限相関長状態
- Frobenius ノルム, 15, 79
- GHZ 状態, 21
- Hilbert-Schmidt 内積, 80
- injective
 - MPS, 32
 - NTI-MPS, 40
- injectivity length, 35
- irreducible
 - positive maps, 95
- irreducible representation, 113
- Jordan-Wigner 変換, 44
- k -local Hamiltonian, 6
- Kraus 表現, 87
- L -シンボル, 57
- linear representation, → representation
- L_p ノルム, 75
- Manhattan 距離, 75
- matrix product operator, → MPO
- matrix product state, → MS24
- MPO, 33
- MPS, → 行列積状態, 24
- multiplier, 116
- multipole symmetry, 63, 64
- normal
- MPS, 32
- NTI-MPS, 40
- pentagon identity
 - F -シンボルの—, 57
 - L -シンボルの—, 58
- periodic
 - MPS, 32
- peripheral spectrum, 100
- Perron-Frobenius の定理, 95
- primitive map, 101
- projective representation, 116
- purification, 119
- reducible
 - positive maps, 95
 - representation, 113
- regular
 - representation, 114
- representation
 - of group, 109
- Schmidt ランク, 20
- Schur の補題 I, 113
- Schur の補題 II, 114
- Shannon エントロピー, 120
- strictly positive
 - matrix, 86
- SVD, → 特異値分解
- tensor product
 - representation, 112
- TI-MPS, 30
- TP 写像, 90
- Uhlmann の定理, 124
- unitary
 - representation, 110
- von Neumann のトレース不等式, 81
- W 状態, 21
- 演算子ノルム, 84
- 階数分解, 73
- 外部テンソル積, 112
- 可約
 - 表現, 113
 - 正写像が—, 95
- 完全正值写像, → CP 写像
- 基底
 - 表現, 109
- 既約
 - 正写像が—, 95
 - 既約表現, 113
 - ギャップ, 10
- 行列積演算子, → MPO

- 行列積状態, 22, 24
極分解, → 階数分解
- クラスター性, 5
- 結合エントロピー, 121
結合律, 55
- 自己情報量, 120
指標
　群の表現の一, 110
射影表現, 116
Schmidt 分解, 20
純粹化, 119
乗数系, 116
情報量, → Shannon エントロピー
真に正
　—な行列, 86
- スペクトル集合, 93
スペクトル半径, 93
- 制限
　表現の一, 115
正写像, 86
正定値
　—行列, 86
正則
　—表現, 114
線形表現, → 表現
- 相互作用距離, 8
相互情報量
　古典情報理論の一, 121
双対写像, 89
双対ノルム, 78
- 台
　演算子の一, 6
多極子, 63
多極子対称性, 63, 64
- 忠実度, 123, 124
　純粹状態の一, 123
中線定理, 76
直積
　—表現, 112
直和
　—表現, 113
- 転送行列, 28
テンソル積
　—表現, 112
- 同値
　線形表現の一, 110
同値変換
　群の表現, 110
同値類
　 F -シンボルの一, 57
特異値, 17
特異値分解, 17
凸円錐, 95
トレースノルム, 28, 79
- 内積, 76
- 二重確率行列, 81
- ノルム, 74
- L_p —, 75
内積から誘導された—, 76
- virtual
　—な脚, 23
半正定値
　—行列, 86
- 表現, 109
標準形
　MPS の—, 24
- physical
　—な脚, 23
フュージョンテンソル, 54
- ボックステンソル積, → 外部テンソル積
本質的に異なる
　—MPS, 38
ボンド次元, 24
- 密度行列繰り込み群, 41
- 有限相関長状態, 104
誘導ノルム, 78
誘導表現, 115
ユニタリ性
　特異値分解の一, 17
ユニタリ表現
　群の一, 110
- 励起ギャップ, 10