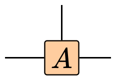
1. Injectivity MPS

定義 1.1. TI-MPS

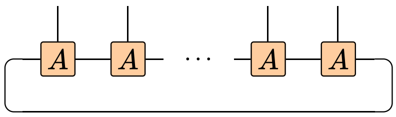
$\mathcal{V}, \mathcal{H}$ を有限次元 Hilbert 空間とする。$\mathcal{V}$ を virtual space, $\mathcal{H}$ を physical space または local Hilbert space と呼ぶことにする。テンソル $A \in \mathrm{L}(\mathcal{V}) \otimes \mathcal{H}$ を以下のように定義する。

$$A = \sum_{i,j,s} A^s_{ij} |i\rangle\langle j|_{\mathcal{V}} |s\rangle_{\mathcal{H}} = \tag{1.1}$$



このとき以下の状態を A から構成される translation invariant matrix product state (TI-MPS) と呼ぶ。

$$|\psi(A)\rangle = \mathrm{Tr}_{\mathcal{V}}[A \cdots A] = \tag{1.2}$$

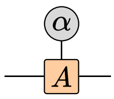


なおこのノートでは並進対称性のある場合しか扱わない。

定義 1.2. Injectivity

テンソル $A \in \mathrm{L}(\mathcal{V}) \otimes \mathcal{H}$ が

$$\mathrm{Span}\{A^s\}_s = \left\{ \quad \middle| \ \alpha \right\} = \mathrm{L}(\mathcal{V}) \tag{1.3}$$



を満たすとき、A が injective であると言う。

定義 1.3. 一般化逆行列

$m \times n$ 行列 X に対し $n \times m$ 行列 X^{g} が $XX^{\mathrm{g}}X = X$ を満たすとき、X^{g} は X の一般化逆行列 (generalized inverse) であるという。

定義 1.4. 擬逆行列

$m \times n$ 行列 X が特異値分解によって

$$X = U\Sigma V^\dagger \tag{1.4}$$

と書かれているとする。ここで U, V はユニタリ行列、Σ は対角行列である。このとき X の擬逆行列 (pseudoinverse) は以下のように定められる。

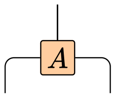
$$X^+ := V\Sigma^+ U^\dagger \tag{1.5}$$

ここで

$$\Sigma^+_{ij} = \begin{cases} (\Sigma_{ij})^{-1} & \Sigma_{ij} \neq 0 \\ 0 & \Sigma_{ij} = 0 \end{cases} \tag{1.6}$$

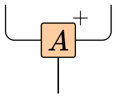
である。擬逆行列は一般化逆行列であり、X が正則なときは逆行列に一致する。$A \in \mathrm{L}(\mathcal{V}) \otimes \mathcal{H}$ に対し、対応する $\mathcal{V} \otimes \mathcal{V}$ から $\mathcal{H}$ への写像が以下のように定まる。

$$\mathcal{P}(A) = \sum_{i,j,s} A^s_{ij} |s\rangle_{\mathcal{H}} \langle i, j|_{\mathcal{V}\otimes\mathcal{V}} = \tag{1.7}$$



この擬逆行列 $\mathcal{P}(A)^+$ を与えるテンソルを A^+ とする。すなわち、

$$\mathcal{P}(A)^+ = \sum_{i,j,s} (A^+)^{ij}_s |i, j\rangle_{\mathcal{V}\otimes\mathcal{V}} \langle s|_{\mathcal{H}} = \tag{1.8}$$

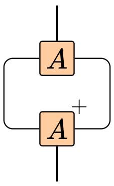


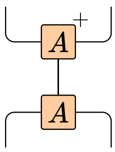
とする。

Remark 1.1.

$\mathcal{P}(A)\mathcal{P}(A)^+$ および $\mathcal{P}(A)^+\mathcal{P}(A)$ を図示すると

$$\mathcal{P}(A)\mathcal{P}(A)^+ = \quad , \quad \mathcal{P}(A)^+\mathcal{P}(A) = \tag{1.9}$$





である。これらは擬逆行列の定義から直交射影となる。これらの射影の像を考えよう。$\mathrm{im}(\mathcal{P}(A)\mathcal{P}(A)^+) = \mathrm{im}\,\mathcal{P}(A) \subsetneq \mathcal{H}$ の場合は local Hilbert space をとり直すことで常に $\mathrm{im}\,\mathcal{P}(A) = \mathcal{H}$ とできる。次に $\mathrm{im}(\mathcal{P}(A)\mathcal{P}(A)^+) \subset \mathcal{V}' \otimes \mathcal{V}' \subsetneq \mathcal{V} \otimes \mathcal{V}$ の場合、virtual space を $\mathcal{V}'$ に取り直す。しかし、それでも $\mathrm{im}(\mathcal{P}(A)\mathcal{P}(A)^+) \subsetneq \mathcal{V}' \otimes \mathcal{V}'$ となり得る。この空間を MPS および PEPS の特徴づけとして利用するのが injectivity の考え方である。さらに $\mathrm{im}(\mathcal{P}(A)^+\mathcal{P}(A))$ は

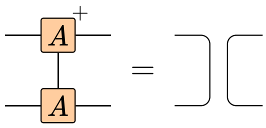
$$\mathrm{im}(\mathcal{P}(A)^+\mathcal{P}(A)) = \mathrm{im}(\mathcal{P}(A)^\dagger \mathcal{P}(A)^{+\dagger}) = \mathrm{im}\,\mathcal{P}(A)^\dagger = \mathrm{Span}\{\bar{A}^s\}_s \tag{1.10}$$

と表せる。多くの場合は $*$ 演算に対して閉じた行列代数を考えるので、$\mathrm{Span}\{A^s\}_s$ を考えれば良い。

補題 1.1.

テンソル $A \in \mathrm{L}(\mathcal{V}) \otimes \mathcal{H}$ について、以下は同値

1. $\mathrm{Span}\{A^s\}_s = \mathrm{L}(\mathcal{V}) = \mathrm{Span}\{\bar{A}^s\}_s$.
2. A から定まる写像 $\mathcal{P}(A) : \mathrm{L}(\mathcal{V}) \to \mathcal{H}$ が単射 (injective)
3. $\mathcal{P}(A)^+\mathcal{P}(A) = \mathbb{1}$. これは以下のように図示される。



(1.11)

Proof. (1. $\Leftrightarrow$ 2.) $\ker \mathcal{P}(A) = \operatorname{coker} \mathcal{P}(A)^\dagger = \mathrm{L}(\mathcal{V}) / \operatorname{im} \mathcal{P}(A)^\dagger$ より、$\mathrm{Span}\{\bar{A}^s\}_s = \operatorname{im} \mathcal{P}(A)^\dagger = \mathrm{L}(\mathcal{V})$ と $\ker \mathcal{P}(A) = 0$ は同値。(1. $\Leftrightarrow$ 3.) $\mathcal{P}(A)^+\mathcal{P}(A)$ が $\mathrm{Span}\{\bar{A}^s\}_s$ への射影であることから直ちに同値性が分かる。 □

補題 1.2. 連結 (Concatenation)

injectivity はテンソルの連結 (concatenation) によって保たれる。つまり injective なテンソル A^s_{ij}, B^s_{ij} に対し、$\sum_j A^s_{ij} B^t_{jk}$ は injective である。

Proof. $\mathrm{Span}\{A^s B^t\}_{s,t} = \mathrm{L}(\mathcal{V})\mathrm{L}(\mathcal{V}) = \mathrm{L}(\mathcal{V})$. □

Remark 1.2.

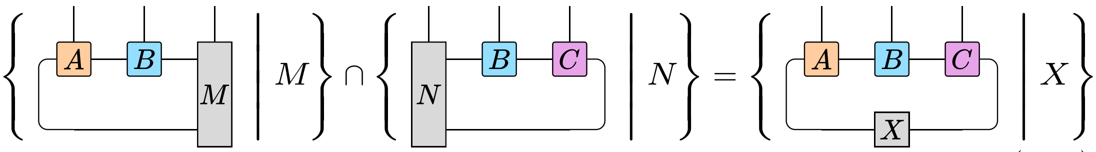
MPS $|\psi(A)\rangle$ が injective であるというとき、有限個の A の連結 $A \cdots A$ が injective であることを意味することがあるので注意。例えば Affleck–Keneddy–Lieb–Tasaki 模型の基底状態は

$$A^+ = \sqrt{\frac{3}{2}}\sigma^+, \quad A^0 = -\sqrt{\frac{1}{3}}\sigma^z, \quad A^- = -\sqrt{\frac{3}{2}}\sigma^- \tag{1.12}$$

による MPS として与えられるが、local Hilbert space の次元は 3、virtual space の次元は $2 \times 2 = 4$ であるから A は明らかに injective ではない。2 つの A を concatenate してはじめて injective になる。

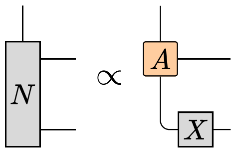
定理 1.1. Intersection property

$A, B \in \mathrm{L}(\mathcal{V}) \otimes \mathcal{H}$ を injective なテンソルとする。このとき、



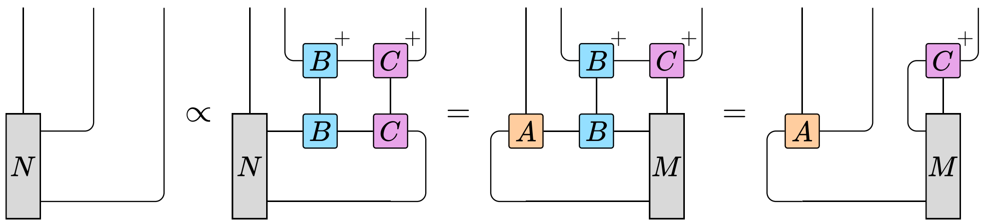
(1.13)

Proof. 右辺 $\subset$ 左辺は明らかなので左辺 $\subset$ 右辺を示す。左辺の元に対して、テンソル X が存在して



(1.14)

と書けるならば、右辺にも属することが示される。このような X は具体的に以下のように構成される。

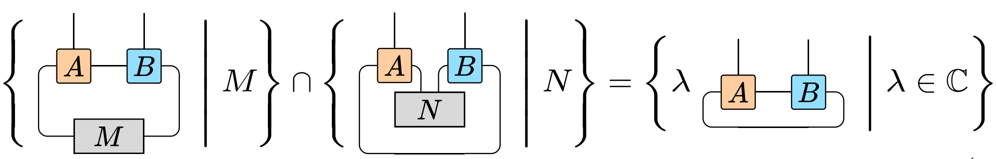


(1.15)

$\square$

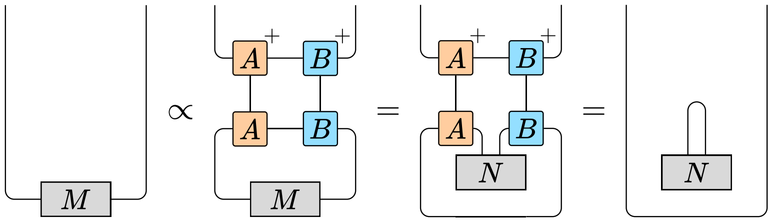
定理 1.2. Closure property

$A, B \in \mathrm{L}(\mathcal{V}) \otimes \mathcal{H}$ を injective なテンソルとする。このとき



(1.16)

Proof. 右辺 $\subset$ 左辺は明らか。左辺の元に対して等式



(1.17)

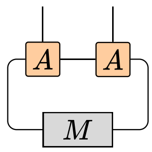
を代入することで、左辺 $\subset$ 右辺が得られる。 □

定義 1.5. Parent Hamiltonian

長さ L の周期的な 1 次元スピン系の Hilbert 空間を

$$\mathcal{H}_{\text{tot}} := \otimes_{i=1}^{L} \mathcal{H}_i, \quad \mathcal{H}_i = \mathcal{H}, \quad \mathcal{H}_{L+1} = \mathcal{H}_1 \tag{1.18}$$

とする。$\mathcal{H}_i \otimes \mathcal{H}_{i+1}$ のみに非自明に作用する直交射影 h_i を、injective なテンソル $A \in \mathrm{L}(\mathcal{V}) \otimes \mathcal{H}$ から以下のように定義する。

$\ker h_i = \Bigg\{$  $\Bigg|\ M \Bigg\} \otimes \left(\bigotimes_{j \neq i, i+1} \mathcal{H}_j \right)$ (1.19)

Hamiltonian $H = \sum_{i=1}^{L} h_i$ を (周期境界条件における) A に対する parent Hamiltonian と呼ぶ。

定理 1.3.

injective なテンソル $A \in \mathrm{L}(\mathcal{V}) \otimes \mathcal{H}$ に対する parent Hamiltonian の基底状態は TI-MPS $|\psi(A)\rangle$ のみである。

Proof. $\ker H = \bigcap_{i=1}^{L} \ker h_i$ を intersection property, closure property を用いて求める。まず、intersection property において $A = B = C$ とすることで、

$$\ker h_i \cap \ker h_{i+1} = \{\mathrm{Tr}[XAAA] \mid X \in \mathrm{L}(\mathcal{V})\} \otimes \left(\bigotimes_{j \neq i, i+1, i+2} \mathcal{H}_j \right) \tag{1.20}$$

を得る。同様の議論を帰納的に繰り返すことで、

$$\bigcap_{i=1}^{L-1} \ker h_i = \left\{ \mathrm{Tr}[X \overbrace{A \cdots A}^{L}] \;\middle|\; X \in \mathrm{L}(\mathcal{V}) \right\} \tag{1.21}$$

となる。また同様の議論から、

$$\bigcap_{i=0}^{L} \ker h_i = \left\{ \mathrm{Tr}[AX \overbrace{A \cdots A}^{L-1}] \,\middle|\, X \in \mathrm{L}(\mathcal{V}) \right\} \tag{1.22}$$

である。よって closure property において $B = \overbrace{A \cdots A}^{L-1}$ とすることで

$$\ker H = \left(\bigcap_{i=1}^{L-1} \ker h_i \right) \cap \left(\bigcap_{i=0}^{L} \ker h_i \right) = \left\{ \lambda \,\mathrm{Tr}[\overbrace{A \cdots A}^{L}] \,\middle|\, \lambda \in \mathbb{C} \right\}. \tag{1.23}$$

□

定理 1.4. Energy gap

injective なテンソルに対する parent Hamiltonian は gapped である。

Proof. 証明は [**fannesFinitelyCorrelatedStates1992**] にある。追っていない。 □