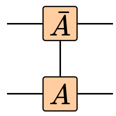
1. 標準形

定義 1.1. 転送行列 (Transfer matrix)

テンソル $A \in \mathrm{L}(\mathcal{V}) \otimes \mathcal{H}$ に対して転送行列 (transfer matrix) $\mathcal{E}_A \in \mathrm{L}(\mathcal{V} \otimes \mathcal{V})$ が以下のように定義される。

$$\mathcal{E}_A := \sum_s A^s \otimes \bar{A}^s = \tag{1.1}$$



これを $\mathcal{E}_A : \mathrm{L}(\mathcal{V}) \to \mathrm{L}(\mathcal{V})$ として表すと

$$\mathcal{E}_A : X \mapsto \sum_s A^s X A^{s\dagger} \tag{1.2}$$

となる。

定義 1.2. Positive map

線形写像 $\mathcal{E} : \mathrm{L}(\mathcal{V}) \to \mathrm{L}(\mathcal{V})$ が半正定値性を保つとき、positive map であると言う。

定義 1.3. 既約性 (Irreducibility)

テンソル $A \in \mathrm{L}(\mathcal{V}) \otimes \mathcal{H}$ が $A^s P = P A^s P$ となるような非自明な直交射影 P を持たないとき、A は既約 (irreducibile) であるという。

定義 1.4. 既約性 (Irreducibility)

線形写像 $\mathcal{E} : \mathrm{L}(\mathcal{V}) \to \mathrm{L}(\mathcal{V})$ が $\mathcal{E}(P\mathrm{L}(\mathcal{V})P) \subset P\mathrm{L}(\mathcal{V})P$ となるような非自明な直交射影 P を持たないとき、$\mathcal{E}$ は既約 (irreducibile) であるという。

補題 1.1.

A が既約 $\Leftrightarrow$ $\mathcal{E}_A$ が既約

Proof. まず $\Leftarrow$ の対偶を示す。A が既約でないならば直交射影 P が存在して

$$\mathcal{E}_A(PXP) = \sum_s A^s PXPA^{s\dagger} = \sum_s PA^s PXPA^{s\dagger} P \in P\mathrm{L}(\mathcal{V})P \tag{1.3}$$

となる。よって $\mathcal{E}_A$ は既約でない。

次に $\Rightarrow$ の対偶を示す。$\mathcal{E}_A$ が既約でないとき、$\mathcal{E}_A(P\mathrm{L}(\mathcal{V})P) \subset P\mathrm{L}(\mathcal{V})P$ を満たす非自明な直交射影 P が存在する。すると $\mathrm{im}\, P$ の正規直交基底 $\{|a\rangle\}_a$ が存在して

$$\mathcal{E}_A(P) = \sum_a \sum_s A^s|a\rangle\langle a|A^{s\dagger} = \sum_a \lambda_a |a\rangle\langle a| \tag{1.4}$$

と表せる。ここから $\mathrm{Span}\{A^s|a\rangle\}_{s,a} = \mathrm{Span}\{|a\rangle\}_a$ が言える。よって $A^sP = PA^sP$ が成り立つ。 $\square$

定理 1.1. 有限次元 Krein–Rutman の定理

線形写像 $\mathcal{E}$ が positive かつ既約であるとき、

1. $\mathcal{E}$ のスペクトル半径 $\rho_{\mathcal{E}}$ は $\mathcal{E}$ の固有値である。
2. $\rho_{\mathcal{E}}$ は非縮退で固有ベクトルは正定値
3. $\rho_{\mathcal{E}}$ 以外の固有値をもつ固有ベクトルは半正定値ではない。

定義 1.5. 強既約性 (Strong irreducibility)

線形写像 $\mathcal{E} : \mathrm{L}(\mathcal{V}) \to \mathrm{L}(\mathcal{V})$ が以下の条件を満たすとき強既約 (strongly irreducibile) であると言う。

1. $\mathcal{E}$ は既約
2. $\mathcal{E}$ の固有値で絶対値がスペクトル半径 $\rho_{\mathcal{E}}$ に一致するものは $\rho_{\mathcal{E}}$ だけであり、かつ $\rho_{\mathcal{E}}$ は縮退しない。

さらに $\rho_{\mathcal{E}} = 1$ のとき、正規テンソル (normal tensor) と呼ばれることがある。また転送行列 $\mathcal{E}_A$ が強既約なときテンソル A が強既約であると言う。

Remark 1.1.

以下のゲージ変換に対し MPS は不変

$$A^s \mapsto XA^sX^{-1}, \quad X \in \mathrm{GL}(\mathcal{V}). \tag{1.5}$$

また周期境界条件が課されているため、A^s がブロックごとに三角化されているとき

$$A^s = \begin{pmatrix} A_1^s & * \\ 0 & A_2^s \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} A_1^s & 0 \\ 0 & A_2^s \end{pmatrix} \tag{1.6}$$

としても TI-MPS は不変。

定義 1.6. TI-MPS の標準形 (canonical form)

任意の TI-MPS $|\psi(A)\rangle$ に対し、ゲージ変換と非対角ブロックの削除によって同じ状態を生成する以下のテンソルが得られる。

$$B^s = \bigoplus_{a=1}^{\mathcal{N}} \lambda_a B_a^s, \quad \lambda_a \in \mathbb{C}. \tag{1.7}$$

これを TI-MPS の標準形 (canonical form) と呼ぶ。ただし、各ブロック B_a に対する転送行列 $\mathcal{E}_{B_a}$ は以下の条件を満たす。

- B_a は既約である。
- $\mathcal{E}_{B_a}$ のスペクトル半径は 1 である。
- $\mathcal{E}_{B_a}$ は右固有ベクトル $\mathcal{E}_{B_a}\mathbb{1} = \mathbb{1}$ をもつ。
- $\mathcal{E}_{B_a}$ は左固有ベクトル $\Lambda_a \mathcal{E}_{B_a} = \Lambda_a$ をもつ。ここで Λ_a は正定値な対角行列である。

Proof. A に対し非自明な射影 $A^s P = PA^s P$がある場合、

$$\mathrm{Tr}[A \cdots AP] = \mathrm{Tr}[A \cdots APAP] = \cdots = \mathrm{Tr}[PAPA \cdots PAP]. \tag{1.8}$$

また $A^s P^\perp = PA^s P^\perp + P^\perp A^s P^\perp$ から

$$\mathrm{Tr}[A \cdots AP^\perp] = \mathrm{Tr}[A \cdots APAP^\perp] + \mathrm{Tr}[A \cdots AP^\perp AP^\perp]. \tag{1.9}$$

右辺第 1 項は (1.8) と同様の議論で $\mathrm{Tr}[PAP \cdots APAP^\perp] = 0$ となるから、この変形を繰り返すことで

$$\mathrm{Tr}[A \cdots AP^\perp] = \mathrm{Tr}[P^\perp AP^\perp A \cdots P^\perp AP^\perp] \tag{1.10}$$

を得る。よって $A \mapsto PAP + P^\perp AP^\perp$ と置き換えてよい。この操作を繰り返すことで、A はブロック対角化されており全てのブロックは既約だと仮定できる。

次に既約なテンソル A に対し一般性を失わずに $\mathcal{E}_A$ のスペクトル半径を 1 とする。$\mathcal{E}_A$ は既約な positive map であるから、Krein-Rutman の定理により最大固有値 $(= 1)$ の固有ベクトルは正定値である。よって $\mathcal{E}_A$ の固定点を $X > 0$ とし、$B^s := X^{-1/2} A^s X^{1/2}$ を考えると

$$\sum_s B^s \mathbb{1} B^{s\dagger} = \sum_s X^{-1/2} A^s X A^{s\dagger} X^{-1/2} = \mathbb{1} \tag{1.11}$$

である。次に X の対角化を $X = U^\dagger \Lambda^{1/2} U$ とおく。ここで U はユニタリ行列で Λ は正定値な対角行列である。$B^s = UX^{-1/2} A^s X^{1/2} U^\dagger = \Lambda^{-1/4} U A^s U^\dagger \Lambda^{1/4}$ と置き直すと、

$$\sum_s B^s \mathbb{1} B^{s\dagger} = UU^\dagger = \mathbb{1} \tag{1.12}$$

かつ

$$\begin{aligned}\sum_s B^{s\dagger} \Lambda B^s &= \sum_s (\Lambda^{1/4} U A^{s\dagger} U^\dagger \Lambda^{-1/4}) \Lambda (\Lambda^{-1/4} U A^s U^\dagger \Lambda^{1/4}) \\ &= \sum_s \Lambda^{1/4} U A^{s\dagger} X A^s U^\dagger \Lambda^{1/4} \\ &= \Lambda \end{aligned} \tag{1.13}$$

となる。 □

定義 1.7. TI-MPS の強い標準形

任意の TI-MPS $|\psi(A)\rangle$ に対し、$p \in \mathbb{N}$ が存在して、p 個の A を連結し、ゲージ変換と非対角ブロックの削除をすることで同じ状態を生成する以下のテンソルが得られる。

$$B^{s_1,\ldots,s_p} = \bigoplus_{a=1}^{\mathcal{N}} \lambda_a B_a^{s_1,\ldots,s_p}, \quad \lambda_a \in \mathbb{C}. \tag{1.14}$$

ただし、各ブロック B_a は以下の条件を満たす。

- B_a は強既約である。
- 転送行列のスペクトル半径は 1 である。
- 転送行列 $\mathcal{E}_{B_a}$ は右固有ベクトル $\mathcal{E}_{B_a} \mathbb{1} = \mathbb{1}$ をもつ。
- 転送行列 $\mathcal{E}_{B_a}$ は左固有ベクトル $\Lambda_a \mathcal{E}_{B_a} = \Lambda_a$ をもつ。ここで Λ_a は正定値な対角行列である。

Proof. 大まかなアイディアだけ述べる。一般性を失わずに転送行列 $\mathcal{E}_A$ のスペクトル半径が 1 であると仮定する。CP 写像 $\mathcal{E}$ が $\mathbb{1}$ のみを固定点にもつ場合、$\{\omega^k\}_{k=1,\ldots,p}, \omega = \exp(2\pi\mathrm{i}/p)$ が全ての絶対値 1 の固有値になるような $p \in \mathbb{N}$ が存在することを示すことができる。よって p 個の A を連結させた B を構成すると $\mathcal{E}_B$ の絶対値 1 の固有値は 1 以外に存在しない。これを既約分解していくことで強い標準形を得る。 □

定理 1.2.

以下の 2 つは同値

1. 有限の長さ L が存在して、$\overbrace{A\cdots A}^{L}$ が injective
2. A が強既約

定理 1.3. 標準形の一意性

強既約なテンソル $B\in \mathrm{L}(\mathbb{C}^D)\otimes\mathcal{H}$ に対し $\overbrace{B\cdots B}^{L}$ が injective となるような最小の L を L_0 とする。テンソル $B,C\in \mathrm{L}(\mathbb{C}^D)\otimes\mathcal{H}$ から構成される MPS に対しある $N>2L_0+D^4$ が存在して

$$\mathrm{Tr}[\overbrace{B\cdots B}^{N}]=\mathrm{Tr}[\overbrace{C\cdots C}^{N}] \tag{1.15}$$

ならば、$U\in \mathrm{U}(D)$ と $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}\in \mathrm{U}(1)$ が存在して

$$B^s=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}UC^sU^\dagger \tag{1.16}$$

が成り立つ。