

semi-injective PEPS レビュー

齊藤巧磨

2026年4月24日

目次

第 I 部 結果	2
1 Formalism	2
1.1 Injective PEPS	2
1.2 Semi-injective PEPS	2
2 Results	3
3 Canonical form	6
4 SPT Phases	8
4.1 Third cohomology labelling of MPO representations	8
4.2 Third cohomology labelling of semi-injective PEPS	11
5 Parent Hamiltonian	12
第 II 部 proofs	12
6 Parent Hamiltonian	12
7 証明で有益な MPS に関する知識	14
7.1 定義	14
7.2 MPS の blocking と積	16
7.3 MPS の分解	17
7.4 NTI-MPS	18
8 Canonical form	20
9 SPT Phases	31
9.1 MPO 表現の 3rd cohomology	31

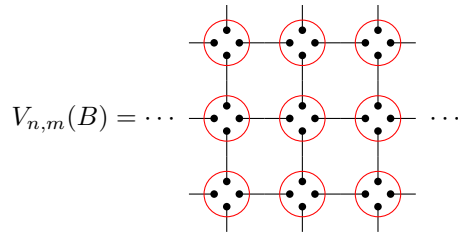
全て [MGSC18] に書いている。

第 I 部 結果

1 Formalism

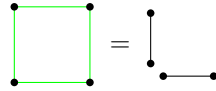
1.1 Injective PEPS

virtual particle が 4 つ集まった PEPS を考えて、



と表す。ここに、黒で表した線は maximally entangled state を表し、赤丸は 4 つの virtual particle に作用する演算子である。演算子が単射であるとき、PEPS は **injective** であるという。

以下では **four-partite state** によって生成される PEPS を考える。上の状態は

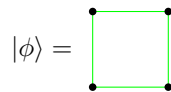


とすることによって書ける。

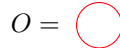
1.2 Semi-injective PEPS

Def. 1: semi-injective PEPS

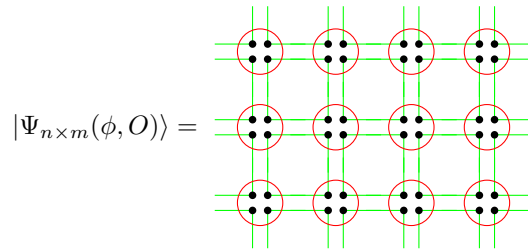
$|\phi\rangle$ は spin-1/2 が 4 つまとまった full rank^a の縮約密度行列が全てのサイトに割り振られている状態で



と表し、 O は逆を持つ演算子で



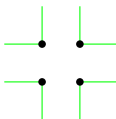
と表す。このとき $n \times m$ torus 上で semi-injective PEPS $|\Psi_{n \times m}(\phi, O)\rangle$ を、



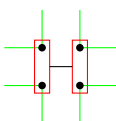
と定義する。

^a full rank であることは議論の面倒から要請している。どんな状態が semi-injective PEPS で書けるかには影響しない。

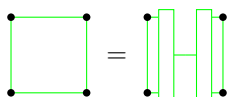
minimal rank decomposition をよく行うので、記法を整えておく。たとえば



の minimal rank decomposition を



と書くことにする。これを踏まえて minimal rank decomposition を



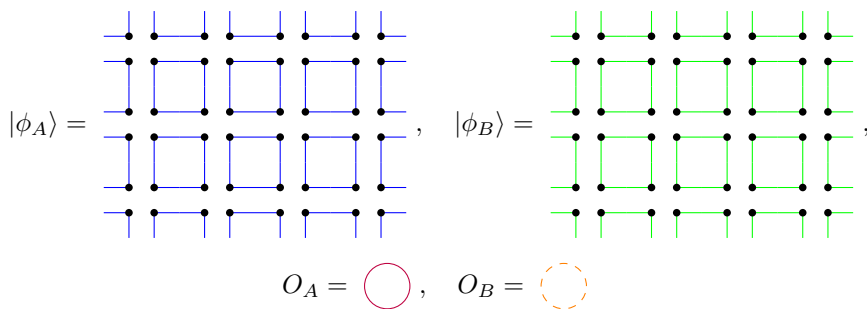
with Schmidt vector



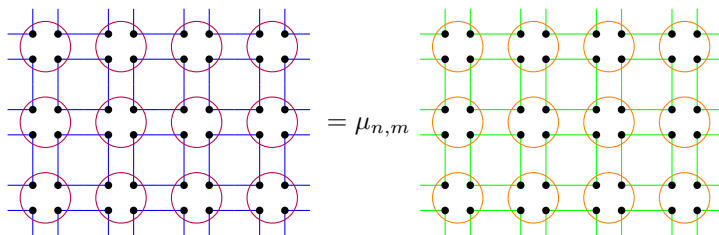
で表す。

2 Results

$(\phi_A, O_A), (\phi_B, O_B)$ で生成される 2 つの semi-injective PEPS を考察する。この二つにより生成される PEPS が比例すると仮定する。すなわち



と書いたとき、



である。このとき、両辺に O_B^{-1} を作用させて

である。このセットアップで、以下を証明する。

Thm. 1: Fundamental theorem for semi-injective PEPS

ある $n_0, m_0 \geq 3$ にて (2.1) が成り立つとき、任意の $n, m \in \mathbb{N}$ にて、以下が成立する。

1. (2.1) が $\mu_{n,m} = \mu^{nm}$ の形で成り立つ
2. (2.1) 左辺に作用する $O = O_B^{-1}O_A$ の作用は boundary に作用する MPO として以下のものに対応する: minimal rank decomposition を

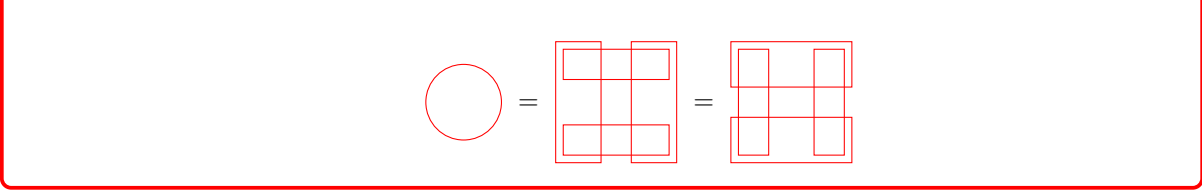
としたとき、MPO tensor X, Y が存在して、

ただし $\mu \in \mathbb{C}$ は 1 の μ であり、任意のサイズ n で $V_n(Y) = (V_n(X))^{-1}$ で、2つのテンソルを blocking した

にて X, Y は injective.

3. 半分に切断するのが minimal rank decomposition に対応するような、4つの spin-1/2 に作用する non-translationally invariant な MPO が演算子 O に対応する
4. 演算子 O は 2体の可逆な演算子の積で書ける:

$$O = (O_{14} \otimes O_{23}) \cdot (O_{12} \otimes O_{34}) = (\tilde{O}_{12} \otimes \tilde{O}_{34}) \cdot (\tilde{O}_{14} \otimes \tilde{O}_{23})$$



Thm. 1 から 2D SPT の 3rd cohomology group を導出することができる。 G を群として、 O_g を (unitary とは限らない) 忠実な表現とする。 $|\phi\rangle$ は spin-1/2 が 4 つまとまった full rank の一粒子縮約密度行列で表せる状態とする。 任意の $g \in G$ で O_g が $|\phi\rangle$ と id により構成される semi-injective PEPS $|\Psi(\phi, \text{id})\rangle$ の対称性とする。

ここに、青の格子は $|\phi\rangle$ を、赤丸は O_g を表す。ユニタリ表現にするには、semi-injective PEPS を可逆な演算子 A を用いて $|\Psi(\phi, A)\rangle$, ユニタリ表現 $U^?g$ として、(2.2) 左辺の演算子を $O_g = A^{-1}U_gA$ とすれば良い。この設定のもと、以下を証明することになる。

Thm. 2

(2.2) がある $n, m \geq 3$ で成り立つとき以下が成立する。

1. $g \mapsto \mu(g)$ は G の 1 次元表現
2. 任意の $g \in G$ に対して MPO tensor X_g, Y_g が存在して、

ここに、任意の n で $V_n(Y_g) = (V_n(X_g))^{-1}$ であり、 $V_n(X_g), V_n(Y_g)$ は G の 2-cocycle λ を乗数系とする射影表現

$$V_n(X_g)V_n(X_h) = \lambda^n(g, h)V_n(X_hX_g)$$

を組む。特に $V_n(X_g)V_n(X_h)$ は canonical form でブロックは 1 つだけ。

3. $H^3(G, \mathbb{C}^*)$ の元を one-block MPO rep. $g \mapsto X_g$ に割り当てる canonical な方法が存在する
4. O_g は spin-1/2 4 つに作用する non-translationally invariant な MPO として、 $O_g^{(1)}, O_g^{(2)}, O_g^{(3)}, O_g^{(4)}$ を使った形で表せる (Thm. 1 の 3 と同様)。ただし、 $V_n(O_g^{(1)}O_g^{(2)}O_g^{(3)}O_g^{(4)})$ は one-block projective MPO 表現を組んで、 cohomology label は boundary と一致する。特に縦横境界の MPO label は一致する。

3 Canonical form

Prop. 3: semi-injective PEPS が等しいなら 3×3 の比較で十分

ある $n_0, m_0 \geq 3$ にて

$$\text{Left side} = \mu_{n,m} \text{ Right side} \quad (3.1)$$

が成立するとき、任意の $n, m \in \mathbb{N}$ で成立し、 $\mu_{n,m} = \mu^{nm}$ となる。

Thm. 4: 等価な semi-injective PEPS は端に local gauge を残す

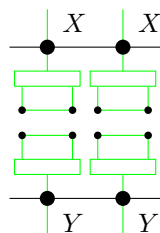
(3.1) がある $n_0, m_0 \geq 3$ で成り立つとき、テンソル X, Y と $\mu \in \mathbb{C}$ が存在して、

$$\text{Left side} = \mu^n \times \dots \text{ Right side} \quad (3.2)$$

および

$$V_n(Y) = (V_n(X))^{-1}$$

が任意の $n \in \mathbb{N}$ で成立する。さらに二つのテンソルを blocking した



にて X, Y は injective.

Lem. 5: semi-injective PEPS は blocking で injective

(3.2) 左辺は 2 つのテンソルを blocking すると、MPS は injective になる。

ここまでの議論で等価な semi-injective PEPS の境界と MPO O が関係していることがわかった。逆に等価な semi-injective PEPS を与える MPO O がどのようなものかを調べる定理を証明できる。

Prop. 6: MPO O は 2 体への可逆な演算子の積

(3.1) の演算子 O は 2 体には作用する可逆な演算子の積で書ける:

$$O = (O_{14} \otimes O_{23}) \cdot (O_{12} \otimes O_{34}) = (\tilde{O}_{12} \otimes \tilde{O}_{34}) \cdot (\tilde{O}_{14} \otimes \tilde{O}_{23})$$

絵で描けば、

(3.3)

より強い主張として、等価な semi-injective PEPS を与える必要十分条件を列挙できる。

Thm. 7: semi-injective PEPS が等価である必要十分条件

二つの semi-injective PEPS が等価 ((3.1) が成立) であることの必要十分条件は、以下をすべて満たすことである。

- 演算子 O が two-body operator に分割する

- four-partite state の Schmidt ベクトルが以下を満たす

(3.4)

ただし、four-partite state $|\phi_A\rangle$ の横方向/縦方向の swap をそれぞれ

$$H : \begin{matrix} 1 & \cdot & 2 & \cdot & 2 & \cdot & 1 & \cdot & 1 & \cdot & 2 & \cdot & 4 & \cdot & 3 & \cdot \\ & & & & & & & & & & & & & & & \\ 4 & \cdot & 3 & \cdot & 3 & \cdot & 4 & \cdot & 4 & \cdot & 3 & \cdot & 1 & \cdot & 2 & \cdot \end{matrix} \mapsto \begin{matrix} 1 & \cdot & 2 & \cdot & 1 & \cdot & 1 & \cdot & 2 & \cdot & 4 & \cdot & 3 & \cdot \\ & & & & & & & & & & & & & & \\ 4 & \cdot & 3 & \cdot & 3 & \cdot & 4 & \cdot & 4 & \cdot & 3 & \cdot & 1 & \cdot & 2 & \cdot \end{matrix}, \quad V : \begin{matrix} 1 & \cdot & 2 & \cdot & 4 & \cdot & 3 & \cdot \\ & & & & & & & \\ 4 & \cdot & 3 & \cdot & 1 & \cdot & 2 & \cdot \end{matrix} \mapsto \begin{matrix} 1 & \cdot & 2 & \cdot & 4 & \cdot & 3 & \cdot \\ & & & & & & & \\ 4 & \cdot & 3 & \cdot & 1 & \cdot & 2 & \cdot \end{matrix}$$

で定義し、

$$\text{horizontal oval} = HOH, \quad \text{vertical oval} = VOV$$

とする。^a

^a HOH と書いたときに、右側の H と左側の H は一般に異なる Hilbert 空間にかかるので同一の演算子とは限らない。具体的には、右側の H は青の PEPS の Hilbert 空間にかかり、 $O : \mathcal{H}_A \rightarrow \mathcal{H}_B$ の作用ののち左側の H は緑の PEPS の Hilbert 空間にかかる。

(??) は二つの状態が $n \times 1$ トーラスと $1 \times n$ トーラスで同じ状態を与えることを意味している。そのため Thm. 4 と合わせて必要条件であることは自明。virtual particle の Hilbert 空間は一般に異なっても良いので、 $H_A = H_B$ などが成り立つとは限らない。

4 SPT Phases

以下、 $G \curvearrowright \mathbb{C}^*$ は trivial とする。

4.1 Third cohomology labelling of MPO representations

群 G と MPO 射影表現 X_g s.t. $V_n(X_g)V_n(X_h) = \lambda^n(g, h)V_n(X_{gh})$ を考える。このような MPO 射影表現を”one-block projective MPO representation”と呼ぶ。本節では $H^3(G, \mathbb{C}^*)$ の元を one-block projective MPO representation に割り当てる canonical な方法を考える。

4.1.1 下準備

まず、以下の補題によって X_g は normal としても一般性を失わない。

Lem. 8: one-block proj. MPO rep. なら normal にできる

$g \mapsto \tilde{X}_g$ を G の one-block projective MPO representation とする。すなわち、任意の $g, h \in G$ に対してある $\lambda(g, h) \in \mathbb{C}^*$ が存在して、

$$V_n(\tilde{X}_g)V_n(\tilde{X}_h) = \lambda^n(g, h)V_n(\tilde{X}_{gh})$$

が成り立つとする。このとき、 $\forall g \in G$ で $V_n(\tilde{X}_g) = V_n(X_g)$ となる normal tensor X_g が存在する。

Prop. 9: 物理的に等価な MPS における reduction の存在

A を normal MPS tensor, B をある $\lambda \in \mathbb{C}$ によって

$$V_n(B) = \lambda^n V_n(A)$$

を満たす MPS tensor とする。このとき、以下を満たす行列 V, W が存在する。

- $VW = \text{Id}$
- $\forall n \in \mathbb{N}$ and $(i_1, i_2, \dots, i_n) \in \{1, 2, \dots, d\}^n$,

$$VB^{i_1} \dots B^{i_n} W = A^{i_1} \dots A^{i_n}$$

ただし λ は物理的に意味をなさないとして B のスケールに吸収している。^a

^a この記述は少なくとも元論文にはないが、状態の $U(1)$ 位相を同一視する量子力学の公理を踏まえると妥当。

Def. 2: reduction

Prop. ?? の V, W を B から A への reduction と呼ぶ。

Prop. 10: reduction との差は冪零

V, W を B から A への reduction とする。 $N^i = B^i - WA^iV$ としたとき、 N^i により生成される代数 $\langle N^i \rangle$ は nilpotent である。 すなわち任意の元 $x \in \langle N^i \rangle$ に対して $x^k = 0$ となる $k \in \mathbb{N}$ が存在する。

Def. 3: nilpotency length

V, W を B から A への reduction とする。 $N^i = B^i - WA^iV$ としたとき、 $\forall n \geq N_0$ で

$$N^{i_1} \dots N^{i_n} = 0$$

を満たす最小の N_0 を nilpotency length という。

Thm. 11: reduction の一意性 (Theorem 22)

V, W と \tilde{V}, \tilde{W} を共に B から normal tensor A への reduction とする。 それぞれの reduction length が高々 N_0 のとき、ある $\lambda \in \mathbb{C}$ が存在して、任意の $n > 2N_0$ で

$$VB^{i_1} \dots B^{i_n} = \lambda \tilde{V}B^{i_1} \dots B^{i_n} \tag{4.1}$$

$$B^{i_1} \dots B^{i_n}W = \lambda^{-1}B^{i_1} \dots B^{i_n}\tilde{W}^{-1} \tag{4.2}$$

が成り立つ。

4.1.2 3rd cohomology の one-block projective MPO rep. への割り当て

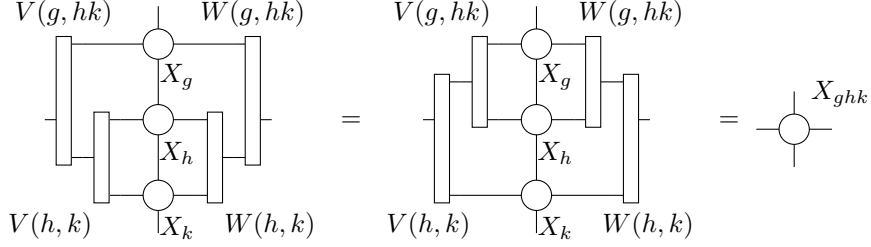
$$X_{g,h} = \sum_{ijk} X_g^{ij} \otimes X_h^{jk} \otimes |i\rangle \langle k|$$

を MPO2 つの積を表す MPO tensor とする。 $X_{g,h}$ と X_{gh} が同じ状態を表すこと、 X_{gh} が injective であることを要請すると、 Prop. ?? より、 $X_{g,h}$ は X_{gh} に reduce できる。 任意の $g, h \in G$ に対してこの reduction を $V(g, h), W(g, h)$ とし、これに複素スカラー値を割り当てる。 以下ではこの reduction が

- reduction は 3-cocycle である
- 異なる reduction は異なる 3-cocycle である
- 異なる reduction の比率は 3-coboundary である
- 同値類は 3rd cohomology group である

ことをみる。

3つの MPO を reduce する素朴な方法は 2 通りある。



Thm. 11 から、複素スカラー値 $\lambda(g, h, k) \in \mathbb{C}$ が存在して、十分長い系で

$$(4.3)$$

associativity を踏まえると λ が 3-cocycle になることを示す。 V と W を fix した上で、(4.3) 左辺を $[g[hk]]$, 右辺を $[[gh]k]$ と書く。4つの MPO の積について pentagon equation

$$\begin{array}{ccc} [[g[h]k]l] & \xrightarrow{\lambda(g,h,k)} & [[g[hk]]l] & \xrightarrow{\lambda(g,hk,l)} & [g[[hk]l]] \\ & \searrow \lambda(gh,k,l) & & & \downarrow \lambda(h,k,l) \\ & & [[gh][kl]] & \xrightarrow{\lambda(g,h,kl)} & [g[h[kl]]] \end{array}$$

が consistent になることから、

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

で $\lambda : G^3 \rightarrow \mathbb{C}^*$ は 3-cocycle となる。

この λ は V, W に依存している。異なる V, W に対して λ は変わりうるが、勝手気ままに変わっていいわけではない。reduction \tilde{V}, \tilde{W} が 3-cocycle $\tilde{\lambda}$ を誘導するとき、この reductionm を丸括弧 () で表せば、Thm. 11 から

$$(gh) = \omega(g, h)[gh]$$

なる $\omega(g, h) \in \mathbb{C}$ が存在する。よって

$$((gh)k) = \omega(g, h)\omega(gh, k)[[gh]k]$$

$$(g(hk)) = \omega(h, k)\omega(g, hk)[g[hk]]$$

の関係式が成り立つため、

$$\tilde{\lambda}(g, h, k) = \frac{\omega(g, h)\omega(gh, k)}{\omega(h, k)\omega(g, hk)}\lambda(g, h, k)$$

すなわち $\tilde{\lambda}/\lambda : G^3 \rightarrow \mathbb{C}^*$ は 3-coboundary となる。これを同一視すれば、この PEPS に 3rd cohomology group の元を割り当てることができる。

4.1.3 並進対称性がある場合

テンソル X, Y を blocking して並進対称性を与えた場合の MPO 表示を考える。先述の方法では XY と YX に異なるコホモロジーが割り当てられ得る。しかし実際にはこの二つのラベルは一致することを見る。

Prop. 12

$V_n(X_g Y_g)$ を G の one-block projective MPO representations とする。このとき、 $V_n(Y_g X_g)$ も同じ群コホモロジーの one-block projective MPO representations である。

4.2 Third cohomology labelling of semi-injective PEPS

G を群、 O_g を (ユニタリとは限らない) 忠実な表現とする。 $|\phi\rangle$ は spin-1/2 が 4 つまとまった full rank の一粒子縮約密度行列で表せる状態とする。 $\forall g \in G$ で O_g が PEPS $|\Psi(\phi, \text{Id})\rangle$ の対称性になっていて、

$$\text{Diagram 1} = \mu_{n,m}(g) \text{Diagram 2} \quad (4.4)$$

となるとする。semi-injective PEPS の unitary 表現に適用するには、semi-injective PEPS が $|\Psi(\phi, A)\rangle$ 、ユニタリ表現が U_g となっているとして、 $O_g = A^{-1}U_g A$ とすれば (4.4) は満たされる。

Prop. 13

(4.4) がある $n, m \geq 3$ で成り立つとき、任意の n, m にて

$$\mu_{n,m}(g) = \mu^{nm}(g)$$

ただし μ は G の 1 次元表現。

boundary に現れる群作用は G の projective MPO representation になっていることを確認する。

Prop. 14

(4.4) が任意の $g \in G$ で成立するなら、MPO tensor X_g, Y_g が存在して、

$$\dots = \mu^n(g) \times \dots$$

および

$$V_n(Y_g) = (V_n(X_g))^{-1}$$

が任意の n で成立する。さらに $V_n(X_g), V_n(Y_g)$ は G の射影表現を組み、2-cocycle λ を乗数系として

$$V_n(X_g)V_n(X_h) = \lambda^n(g, h)V_n(X_hX_g)$$

である。特に $V_n(X_g)V_n(X_h)$ は canonical form でブロックは1つだけ。

以下、boundary の MPO 表現 $V_g(X_g)$ もまた O_g で定義される MPO として現れることを見る。まずは spin-1/2 4 つに作用するような、 O_g から決定される TI-MPO $V_n(\tilde{O}_g)$ を定義する。 O_g を MPO として

$$O = (O_{j_1j_2}^{13} \otimes O_{j_1j_2}^{24})O^{-1}(O_{i_1i_2}^{12} \otimes O_{i_1i_2}^{34}) = \begin{array}{c} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} \circ \text{---} \text{---} \circ \\ | \quad | \\ \circ \text{---} \text{---} \circ \end{array}$$

と、minimal rank decomposition を用いて表す。この縮約された足のうち一本を切断して

$$\tilde{O}_g = \begin{array}{c} \circ \text{---} \text{---} \circ \\ | \quad | \\ \square \quad \square \end{array}$$

を定義する。semi-injective PEPS から 3rd cohomology を出すにはこの \tilde{O}_g が重要な役割を果たす。

Prop. 15

$V_n(\tilde{O}_g)$ は G の one-block projective MPO representation であり、3rd cohomology group のラベルは $V_n(X_g)$ と同一である。

5 Parent Hamiltonian

Prop. 16: semi-injective PEPS は parent Hamiltonian の unique な基底状態

semi-injective PEPS は parent Hamiltonian の unique な基底状態である。

第II部

proofs

6 Parent Hamiltonian

さっさと片付けられる命題から片付ける。

Prf. Prop. 16 (semi-injective PEPS は parent Hamiltonian の unique GS)

■2種類の Hamiltonian の構成 semi-injective PEPS $|\psi\rangle$ に対し parent Hamiltonian を二つ用意する。 S として、任意の境界条件でテンソルにより生成される部分空間

$$S = \left\{ \left(\begin{array}{c} \text{Diagram: A 2x2 grid of plaquettes with indices } \lambda \text{ on the edges.} \\ \lambda \end{array} \right) \mid \lambda \in \mathbb{C}^{D_v^4 D_h^4} \right\} \quad (6.1)$$

Hamiltonian の各項 \tilde{h}_i は位置 i の周りの plaquette を囲んで S^\perp へ射影する演算子とする。すなわち、

$$\tilde{h}_i = \text{Proj}(S^\perp)_i \otimes \text{Id}, \quad \tilde{h}_i \left(\begin{array}{c} \text{Diagram: A 2x2 grid of plaquettes with index } \lambda \text{ on the edges.} \\ \lambda \end{array} \right) = 0 \quad \forall \lambda \in \mathbb{C}^{D_v^4 D_h^4}$$

これにより与えられる

$$\tilde{H} = \sum_i \tilde{h}_i$$

を第一の parent Hamiltonian とする。

第二の parent Hamiltonian は、local term として

$$h_i = \left(\prod_{\langle j|i \rangle} O_j^{-1} \right)^\dagger P_i \left(\prod_{\langle j|i \rangle} O_j^{-1} \right)$$

ここに、 $P_i = (\text{Id}_i - |\phi\rangle\langle\phi|_i) \otimes \text{Id}$ は i における plaquette state $|\phi\rangle$ の直交補空間への射影で、

$$P_i \left(\begin{array}{c} \text{Diagram: A single plaquette with index } i \text{ on the edges.} \\ i \end{array} \right) = 0$$

となる。 j は plaquette i に非自明に当たる O_j を実現する全ての位置 (i の四隅) を走る。これを用いて

$$H = \sum_i h_i$$

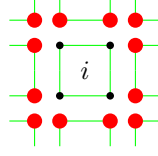
とする。

以下では、任意のサイズで $|\psi\rangle$ がこの二つの Hamiltonian の基底状態になることを示す。

■ H の基底状態は unique 変換

$$\left(\prod_j O_j \right)^\dagger H \left(\prod_j O_j \right) = \sum_i (P_i \otimes \text{Id}) \otimes \left(\bigotimes_{j \notin i} O_j^\dagger O_j \right) \quad (6.2)$$

を考える。右辺の j は P_i に隣接しない全てのサイトを走り、Id は four-partite state $|\phi\rangle$ に隣接する全ての virtual particle、すなわち



の赤丸部分に作用する。(6.2) 右辺の左の括弧は図の filled circle の自由度に作用し、右の括弧は上の図で描かれていない部分に作用していることに注意。 O_j が invertible なので、総和の各項の kernel は $|\phi\rangle_i \otimes \bigotimes_{j \neq i} \mathcal{H}_j$ である。全ての i について共通部分は $\bigotimes_i |\phi\rangle_i$ なので、 H の基底状態は 1 次元。

■ \tilde{H} の kernel は H の kernel に含まれる (6.1) で定義された S_i の全ての状態が h_i の kernel に含まれるので、 $\ker \tilde{h}_i \leq \ker h_i$ である。 $\ker H = \bigcap_i \ker h_i$ と $\ker \tilde{H} = \bigcap_i \ker \tilde{h}_i$ であることから、 $\ker \tilde{H} \leq \ker H$ が従う。

7 証明で有益な MPS に関する知識

以降の議論は MPS に写して行いがちなので、MPS に関する知識をまとめておく。

7.1 定義

Def. 4: irreducible, primitive

Completely positive map $T : \rho \mapsto T(\rho) = \sum_i A_i \rho A_i^\dagger$ が

- reducible であるとは、非自明な射影 P であって、 $\rho = P\rho P^\dagger$ となる任意の ρ に対し $T(\rho) = PT(\rho)P^\dagger$ を満たすものが存在すること
- irreducible であるとは、reducible でないこと
- primitive であるとは、ある n が存在して、任意の $\rho \geq 0$ に対し、 $T^n(\rho) > 0$ を満たすこと

Prop. 17

$T : \rho \mapsto T(\rho) = \sum_i A_i \rho A_i^\dagger$ をスペクトル半径 r の completely positive map とする。このとき r は少なくとも一つの正定値固有ベクトルの固有値である。さらに、

- T が primitive であることと
 - r が縮退しない
 - 対応する固有ベクトルが正定値
 - 大きさ r の固有値が他に存在しない
を満たすことは同値
- T が irreducible だが primitive でないとき、 r の縮退度は 1 だが、大きさ r の他の固有値がある K と $n \in \mathbb{Z}_K$ により $r \cdot \exp(2\pi i n / K)$ と表せる。この K を periodicity と呼ぶ。

- T が reducible で d あることと、ある非自明な射影 P が存在して $A^i P = P A^i P$ を満たすことは同値

証明は [EHK78, Wol12] にある。

Def. 5: MPS

MPS テンソルとは、テンソル $A \in \mathbb{C}^D \otimes (\mathbb{C}^D)^* \otimes \mathbb{C}^d$ であって、

$$A = \sum_{i,\alpha,\beta} A_{\alpha,\beta}^i |\alpha\rangle \langle \beta| \otimes |i\rangle = \sum_i A^i \otimes |i\rangle$$

となるもの。任意の $n \in \mathbb{N}$ に対し、状態 $V_n(A) \in (\mathbb{C}^d)^{\otimes n}$ は

$$V_n(A) = \sum_{i_1, \dots, i_n} \text{Tr}(A^{i_1} \dots A^{i_n}) |i_1, \dots, i_n\rangle$$

で定義される。 A の転送行列 (transfer matrix) T_A は completely positive map $\rho \mapsto T_A(\rho) = \sum_i A^i \rho (A^i)^\dagger$ で定義される。 A が

- injective であるとは、 $\sum_i \text{Tr}\{A^i \rho\} |i\rangle = 0$ ならば $\rho = 0$ であること
- normal であるとは、 T_A が primitive であること
- periodic であるとは、 T_A が irreducible だが primitive でないこと

A が injective のとき転送行列が単射になるので left inverse C が存在して $\sum_i A^i \otimes C^i = \text{Id}$ を満たす。

Def. 6: MPO

matrix product operator (MPO) とは、MPS form で

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

と書かれる演算子のこと。

MPO は MPS の特別な場合であるから、MPS に関する全ての定義と構成が適用できる。

7.2 MPS の blocking と積

Def. 7: blocking

MPS tensor B が A の blocking であるとは、

$$V = \sum_{i_1, \dots, i_k} A^{i_1} \dots A^{i_k} \otimes |i_1, \dots, i_k\rangle$$

と表せること。直ちに $V_n(B) = V_{kn}(A)$ が成り立つ。

normal (転送行列が何乗かすると positive definite になる) な MPS テンソルは blocking しても normal であることに注意。さらに injectivity と normality は blocking しても保たれる。

Prop. 18: 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。

証明は例えば [SPGWC10] にある。

blocking だけでなく、異なる MPS テンソルの積をとっても normality と injectivity は保たれる。

Prop. 19: テンソルの縮約で 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 $\sigma(T)$ と書くと、 $\sigma(T_A \otimes T_B) = \sigma(T_A) \cdot \sigma(T_B)$ 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 ρ_A, ρ_B とすれば、対応する固有ベクトルは $\rho_A \otimes \rho_B$ である。 $\rho_A \otimes \rho_B$ は正定値かつ full rank なので、 $T_A \otimes T_B$ は primitive である。

■injective の積は 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。

7.3 MPS の分解

Prop. 20: 熱力学極限で injective になる MPS テンソルは極限で比例するか直交する

injectivity length が高々 L の 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、

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

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

証明は [CPGSV17] にある。

Cor. 21: 本質的に異なる injective MPS テンソルは極限で線型独立

どれをとっても本質的に異なる injective MPS テンソル A_i を与えると、ある $N \in \mathbb{N}$ が存在して、MPS $V_n(A_i)$ は任意の $n \geq N$ で線形独立になる。

Prop. 22: 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 normal 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。よって 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 irreducible なら、 A は periodic または normal MPS テンソルに比例。 T_A が reducible なら、Prop. 17 により非自明な射影 P が存在して、 $A_i P = P A_i$ とできる。この時 $V_n(A) = V_n(PAP) + V_n(QAQ)$ w/ $Q = \text{Id} - P$ である。 PAP のボンド次元が $\text{rank } P$ になるので、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 $P = YX$, $XY = \text{Id}_D$ が成り立つ。結果、得られる

MPS のボンド次元が D_0 未満になるので、帰納法の仮定から主張が従う。

Prop. 23

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 サイトに作用するものである。さらに $n \notin K\mathbb{N}$ に対して $V_n(A) = 0$ 。

この命題は [CSW⁺13] の Lem. 5 にある。 [CPGSV17] の Prop. 9 はこの Cor. である。

Cor. 24: 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 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。

次の命題と Cor. 21 を合わせると分解の一意性が得られる。

Prop. 25

$\mu_1, \dots, \mu_r \in \mathbb{C}^\times$ 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。

この命題は [DICCC⁺16] Lem. 9 で証明されている。

7.4 NTI-MPS

並進変換で対称とならない MPS テンソルについても考察する。

Def. 8: NTI-MPS

d_i と D_i ($i = 1, \dots, k$) を正の整数とする。 $X_i = \sum_{j=1}^{d_i} X_i^j \otimes |j\rangle \in \mathbb{C}^{D_i} \otimes (\mathbb{C}^{D_{i+1}})^* \otimes \mathbb{C}^{d_i}$ をテンソルとして $k+1$ を 1 と同一視する。この時、このテンソルに non-translationally invariant MPS

(NTI-MPS) を

$$V(X_1, \dots, X_k) = \sum_{i_1, \dots, i_k} \text{Tr}\{X_1^{i_1} \cdots X_k^{i_k}\} |i_1, \dots, i_k\rangle$$

で定義する。

NTI-MPS の injectivity は、 l 回の blocking により任意の $i = 1, \dots, k$ に対してテンソル $X_i X_{i+1} \cdots X_{i+l}$ が

$$\text{Tr}\left[\rho X_i^{j_1} X_{i+1}^{j_2} \cdots X_{i+l-1}^{j_l}\right] |j_1, \dots, j_l\rangle = 0 \Rightarrow \rho = 0$$

を満たすことと定義される。

Prop. 26

$X_1 \dots X_k$ を l 回の blocking により injective な MPS とする。この MPS は $m \geq l$ 回の blocking でも injective である。

Prf.

m の帰納法で示す。 $m = l$ の時、主張は by definition で正しい。 MPS が m 回の blocking で injective であると仮定する。 $\rho \in \mathbb{C}^{D_{i+m}} \otimes \mathbb{C}^{D_i}$ がある i から始まる $m + 1$ 個の連続するサイトにおいて

$$\sum_{j_1, \dots, j_{m+1}} \text{Tr}\left[\rho X_i^{j_1} X_{i+1}^{j_2} \cdots X_{i+m}^{j_{m+1}}\right] |j_1, \dots, j_{m+1}\rangle = 0$$

を満たすとする。 $X_i \dots X_{i+m-1}$ が injective なので、

$$X_{i+m}^{j_{m+1}} \rho = 0 \quad \forall j_{m+1} \in \{1, \dots, d_{i+m}\}$$

である。任意の行列 $M \in \mathbb{C}^{D_i} \otimes \mathbb{C}^{D_{i+1}}$ に対して

$$0 = X_{i+1}^{j_2} \cdots X_{i+m}^{j_{m+1}} \rho M \in \mathbb{C}^{D_{i+1}} \otimes \mathbb{C}^{D_{i+1}}$$

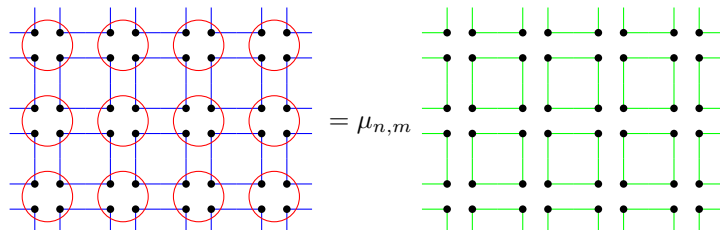
となるので、

$$\sum_{j_2, \dots, j_{m+1}} \text{Tr}\left[X_{i+1}^{j_2} \cdots X_{i+m}^{j_{m+1}} \rho M\right] |j_1, \dots, j_{m+1}\rangle = 0.$$

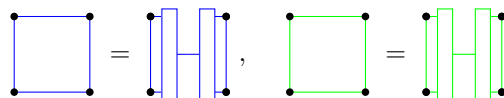
m 個の連続するブロック $X_{i+1} \cdots X_{i+m}$ が injective なので、 $\rho M = 0$ である。 M は任意に取っていたので、 $\rho = 0$ が従う。 よって、 MPS は $m + 1$ 回の blocking でも injective である。

8 Canonical form

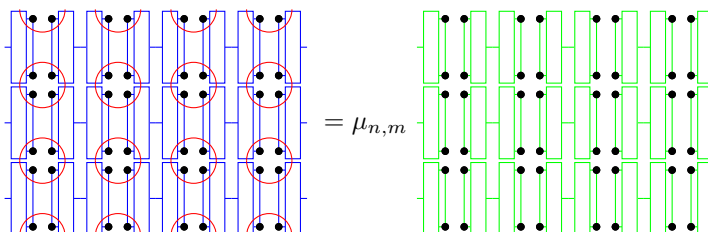
Prf. Prop. 3 (semi-injective PEPS が等しいなら 3×3 の比較で十分)



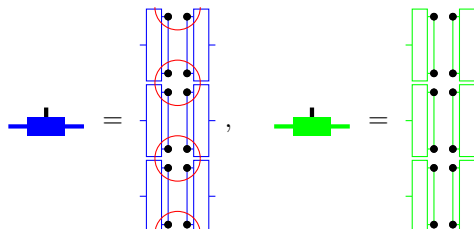
を仮定する。four-partite state の minimal rank decomposition を vertical cut で行う。



これにより



これは MPS による表示で



とする。黒の縦線は physical な足を全てまとめたもの、色付きの太線は virtual な足をまとめたものである。緑のテンソルは Schmidt ベクトルの積なので injective であり、線型独立になるので全体として injective である。青は Schmidt ベクトルの積に可逆な演算子がかかってできるので、これもまた injective である。

よって Prop. 20 により $n_0 \geq 3, m_0 \geq 3$ で仮定が成り立てば横方向に blocking しても成り立つ。比例定数は m_0 に依存する形で $\mu_{n,m} = \mu_{m_0}^n$ とできる。同様に横方向に minimal rank decomposition をとって議論できる。

Prop. 20 により

(8.1)

とできる。しかし X_n, X_n^{-1} はシステムサイズに依存する global な量なので、local な量に分解したい。Thm. 4 (等価な semi-injective PEPS は端に local gauge を残す) はそれを実現した定理である。証明に先立ち Lem. 5 (semi-injective PEPS は blocking で injective) を先に示す。

Prf. Lem. 5 (semi-injective PEPS は blocking で injective)

演算子 O の minimal rank decomposition を

とすると、semi-injective PEPS テンソルは

(8.2)

の MPS テンソルになる。このテンソル 2 つを blocking したものが injective であることを示す。二つ MPS を並べると真ん中の演算が O に戻ることに注意。

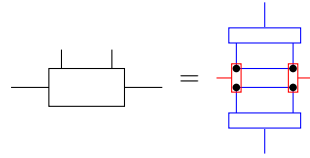
これに O^{-1} を作用させても injectivity は変わらない。よって

$$= v_i \otimes w_j$$

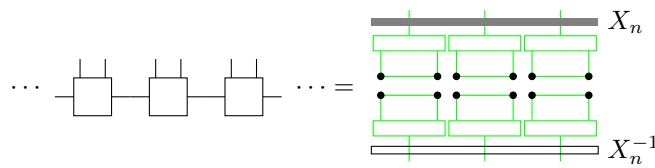
が injective であることを示せばよい。 O の Schmidt ベクトルは線型独立であるし、four-partite state の reduced density matrix は full rank なので、 v_i, w_j も線型独立である。よって $v_i \otimes w_j$ も線型独立であり、対応する MPS テンソルは injective である。

Prf. Thm. 4 (等価な semi-injective PEPS は端に local gauge を残す)

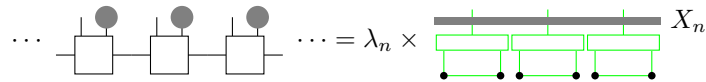
■(8.1) の X_n, X_n^{-1} (端に現れる global gauge) が MPS に比例すること



とする。左辺の上に伸びる線は physical な脚で、特に左の線は右辺で上に伸びるもの、右の線は右辺で下に伸びるものと対応させる。この記法によれば (8.1) は



となる。右辺で下半分を 1 にするような演算子を作用させることは、左辺の上に伸びる右側の線に対応する演算子を作用させることと対応し、 $\lambda_n \in \mathbb{C}$ により

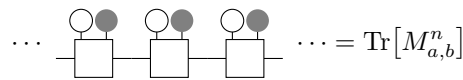


とできる。さらに Schmidt ベクトルが線型独立であることから、virtual な脚を physical な脚に変換する写像として単射なので逆写像が存在して

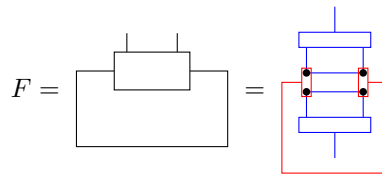


とできる。白丸は $|\phi\rangle$ の Schmidt ベクトルの inverse である。左辺が 0 でなければ、 X_n は MPS テンソルを \tilde{X} とする MPS に比例する。同様に X_n^{-1} もテンソル \tilde{Y} による MPS に比例する。したがって、左辺の黒丸に対応する、並進不変な線型汎関数であって左辺を 0 にせず n にも依存しないようなものが存在することを示せばいい。

■MPS テンソルを 0 にしない局所ゲージの存在 二つの線型汎関数が MPS テンソルに作用して



となっているとする。このとき $\text{Tr}[M_{a,b}] \neq 0$ なる a, b が存在することを示す。写像 $F : (a, b) \mapsto \text{Tr}[M_{a,b}]$ は



と表せる。この作用は Schmidt ベクトルの左右を反転させて O をかけたのに等しい。 O が invertible なので $F \neq 0$ である。よって $F(b) = \text{Tr}[M_{a,b}] \neq 0$ なる a, b が存在する。このとき $M_{a,b}$ は冪零でないことが保証され、^a

$$\text{Tr}[M_{a,b}^n] = \sum_{i=1}^R \xi_i^n$$

なる $\xi_1, \dots, \xi_R \in \mathbb{C}^\times$ が存在する。 $S := \{n \in \mathbb{N} \mid \text{Tr}[M_{a,b}^n] \neq 0\}$ とする。 $|S| = \infty$ に注意。(8.3) で出てきた黒丸を b に選べば左辺は任意の $n \in S$ で 0 にならない。**NOT CHECKED YET!!!** よって X_n は $n \in S$ で MPO として表せる。同様に X_n^{-1} も同じ S にて MPO として表せる。**NOT CHECKED YET!!!** したがって $\lambda_n \in \mathbb{C}$ により $\forall n \in S$ で

とできる。ここに μ は Prop. 3 で出てきた定数。また $V_n(\tilde{X})$ と $V_n(\tilde{Y})$ は並進不変な MPO で、

$$V_n(\tilde{Y}) = [V_n(\tilde{X})]^{-1} / \lambda_n$$

を満たす。MPO 自体は $\forall n \in \mathbb{N}$ で定義できるが、(8.4) はまだ $n \in S$ でしか成り立っていない。

■任意の長さで成立するゲージの存在 以下、(8.4) が任意の $n \in \mathbb{N}$ で成り立つこと及び $\lambda_n = 1$ であることを示す。Cor. 24 によれば、 $K \in \mathbb{N}$ が存在して K 回の blocking により $V_n(\tilde{X}), V_n(\tilde{Y})$ ($n \in k\mathbb{Z}$) が共に normal MPO の線型結合になる。Prop. 19 により normal MPS のテンソル積は normal であるから、 $V_n(\tilde{X}) \otimes V_n(\tilde{Y})$ もテンソル積で構成される normal MPO の線型結合になる。この MPO を X, Y で表す。より正確には、

$$V_n(\tilde{X}) \otimes V_n(\tilde{Y}) = \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^{M_i} \zeta_{ij}^n V_n(X_i) \otimes V_n(Y_i) \quad (8.5)$$

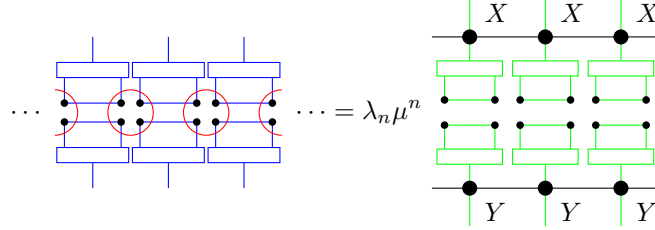
とし、異なる i に対して $V_n(X_i) \otimes V_n(Y_i)$ は本質的に異なる MPO とする。(8.4) でこの分解を用いると、Lem. 5 (semi-injective PEPS は blocking で injective) により左辺は normal MPO で表せ、右辺は (8.5) の和になる。Cor. 21 から十分大きい系では本質的に異なる MPS が線型独立になるので、(8.5) が normal MPO で表せるのは、 $L = 1$ のときかもしくは一つの i を除いて

$$\sum_{j=1}^{M_i} \zeta_{ij}^n = 0 \quad \forall n \in S \cap K\mathbb{N}$$

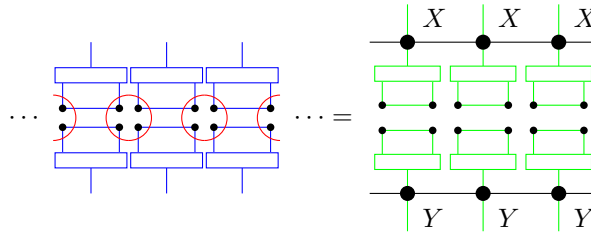
が成り立つときに限る。**NOT CHECKED YET!!! normal の sum は normal ではないことが保証される? (??)** は任意の $n \in \mathbb{N} \setminus S$ で 0 になるので、一つの i を除いて

$$\sum_{k=1}^R \xi_k^n \sum_{j=1}^{M_i} \zeta_{ij}^n = \sum_{kj} (\xi_k \zeta_{ij})^n = 0 \quad \forall n \in \mathbb{N}$$

を得る。この式に Prop. 25 を適用すると、 $(\xi_k \zeta_{ij})^K = 0$ すなわち $\zeta_{ij} = 0$ を任意の j と一つを除く i で得る。よって (8.5) で $L = 1$ とできる。Prop. 23 から $V_n(\tilde{X}) \otimes V_n(\tilde{Y})$ は periodic MPO を含まないことがわかり、 $K = 1$ として良い。故に (8.4) の両辺は共に normal MPO に比例する。Prop. 20 を使うと、(8.4) が任意の $n \in \mathbb{N}$ で成り立つことがわかる。以上、(8.5) で unique に現れる MPO X, Y により



とできる。この MPO テンソルも $V_n(Y) = (V_n(X))^{-1}/\lambda_n$ を全ての $n \in S$ で満たす。 $V_n(Y)$ も $V_n(X)$ も normal なので全ての $n \in \mathbb{N}$ でこの関係を満たし、 $\lambda_n = \lambda^n$ とできる。定数を Y に吸収して $V_n(Y) = (V_n(X))^{-1}$ とすることで、



を得る。

^a 冪零行列なら固有値は 0 のみなので対角和は常に 0 になる。

この系として、ゲージの選び方に関する自由度がある。

Cor. 27: 等価な semi-injective PEPS のゲージの自由度

任意の $n \in \mathbb{N}$ で (3.2) が成り立つ $V_n(\tilde{X}), V_n(\tilde{Y}) = [V_n(\tilde{X})]^{-1}$ が存在すれば、ある定数 $\lambda \in \mathbb{C}$ により

$$V_n(\tilde{X}) = \lambda^n V_n(X), \quad V_n(\tilde{Y}) = \lambda^{-n} V_n(Y)$$

とできる。

Prf.

(8.1) のゲージの uniqueness から、 $V_n(\tilde{X}) = \lambda_n V_n(X)$ および $V_n(\tilde{Y}) = \lambda_n^{-1} V_n(Y)$ とできる。 $V_n(\tilde{X}), V_n(\tilde{Y})$ を canonical form に分解すると、出てくる normal MPS は $V_n(X), V_n(Y)$ しかない。また (8.5) あたりの議論を繰り返すと

$$\lambda_n = \sum_i \lambda_i^n, \quad \lambda_n^{-1} = \sum_i \eta_i^n$$

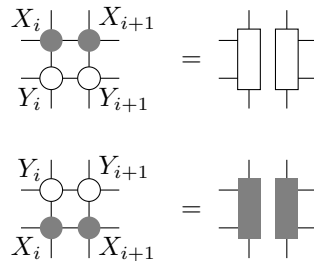
となり、この時 $\sum_{i,j} (\lambda_i \eta_j)^n = 1$ が任意の $n \in \mathbb{N}$ で成り立つことまで言える。よって Prop. 25 から $\lambda_n = \lambda^n$.

Prop. 6 (MPO O は 2 体への可逆な演算子の積) はこのようなゲージを与える演算子の形の制限である。これを証明する前に、 O と O^{-1} が共に Schmidt 分解できる場合は (3.3) のような 2 層構造になることを示す。

Lem. 28

サイト数 $n = 2k$ で定義される二つの NTI-MPO がテンソル X_1, \dots, X_n と Y_1, \dots, Y_n で与えられ、さらに

1. $V(X_1, \dots, X_n) \cdot V(Y_1, \dots, Y_n) = \text{Id}$
2. $X_i X_{i+1}, Y_i Y_{i+1}$ は全ての $i = 1, \dots, n$ で injective
3. $X_i X_{i+1}, Y_i Y_{i+1}$ は



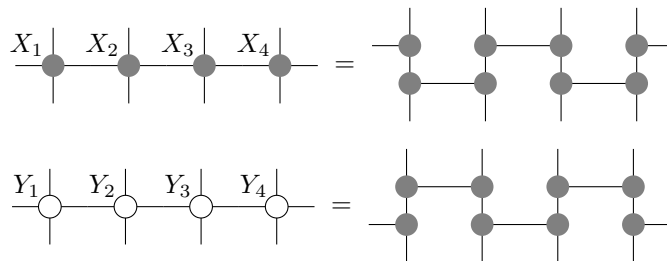
を満たすとする。このとき、MPO は

(8.6)

のように depth 2 の形で書ける。2 体へ作用する演算子は全て可逆。X も同様。

Prf.

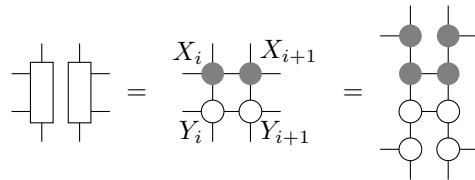
テンソル X_i, Y_i の Schmidt 分解を片方の端から順に行って



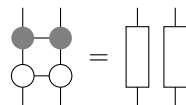
とする。この形で定義された 2 体演算子が invertible であることを示す。この演算子の上下から真ん中へ行く操作は単射である (でなければ $V(X_1, \dots, X_n)$ が単射でない)。

中段から外側へ向かう操作が可逆であることを背理法で証明する。例えば中段から下段へ行く操作が

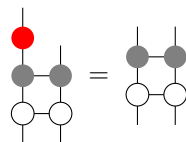
injective でないと仮定する。MPO の 2 サイト部分は



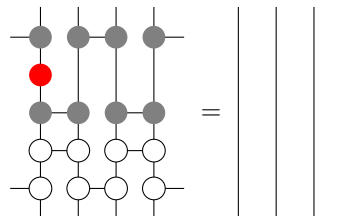
である。この minimal rank decomposition をとると左辺の外側のテンソルは invertible であり、真ん中の演算子は



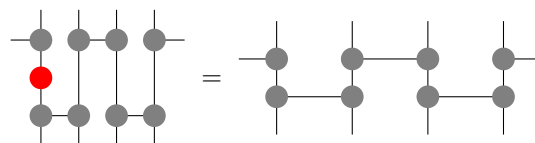
と書き直せる。もし背理法の仮定通り黒の演算子が上から下にかけて単射でなければ、非自明な kernel は左右に分割される。右辺の左側の演算子が非自明な kernel を持つと仮定すると、kernel の直交補空間への射影 y をかけても値は変わらない。



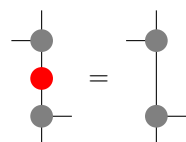
これを $V(X_1, \dots, X_n) \cdot V(Y_1, \dots, Y_n) = \text{Id}$ へ戻すと、



となる。補題の仮定から $V(Y_1, \dots, Y_n)$ が可逆なので left inverse は $V(X_1, \dots, X_n)$ しかない。よって



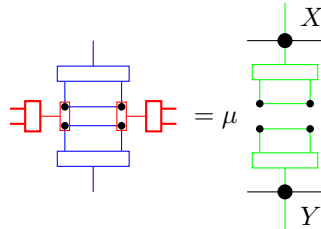
である。仮定によれば MPO が定義するテンソルは 2 サイト以上の blocking で injective なので、1 つを除いて全てのテンソルに inverse をかけて



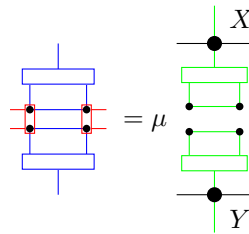
となるが、これは赤いテンソルが identity であることを意味して、背理法の仮定と反する。よって 2 サイトに作用する演算子は可逆。

Prf. Prop. 6 (MPO O は 2 体への可逆な演算子の積)

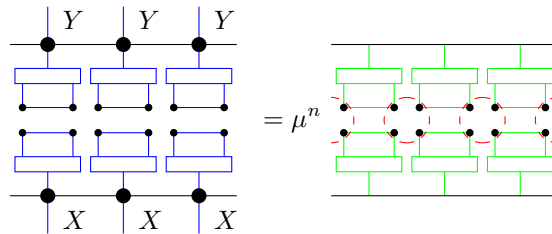
(3.2) 左辺を (8.2) で定義したテンソルによる injective MPS で表す。(3.2) 右辺も injective になるので、operator のゲージ自由度を用いて



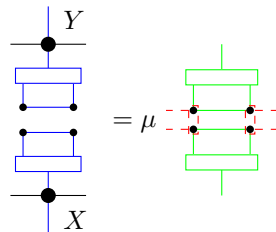
と書ける。左辺赤線の横に張り出しているものが演算子のゲージである。演算子のゲージを O の Schmidt 分解の定義に吸収させると



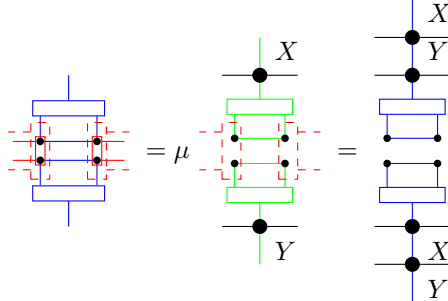
となる。ただし赤の四角形は O の minimal rank decomposition のテンソルである。 $V_n(X)$ と $V_n(Y)$ が共に互いの inverse なので、(3.2) は



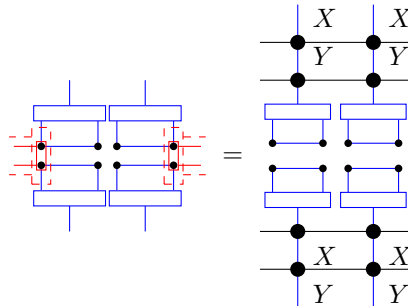
と変形できる。右辺の赤の破線は O^{-1} を表す。よって O^{-1} の適切な minimal rank decomposition で



と書ける。 O, O^{-1} の Schmidt 分解を PEPS $|\phi_A\rangle$ の Schmidt ベクトルに作用させると、



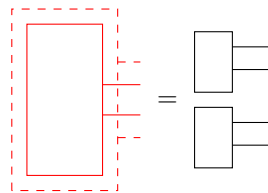
であり、これを二つ横に並べると中央に作用する演算子が自明になって



である。左辺は独立なベクトルが左右に並んでおり、右辺は上下に並んでいるため、両辺は上下の積と左右の積で書ける。このとき $V_n(X), V_n(Y)$ は Lem. 28 の条件を満たし、(8.6) のように 2 体の invertible operator の積として表せる。同様に左辺の両方の term も上下に分割できる。片方だけに注目すると、PEPS テンソルの 1 体 Schmidt ベクトル $|\phi_A\rangle$ はフルランクなので、 O, O^{-1} の Schmidt ベクトルの積も分解できて

$$(O^{-1})_{kl}^{(13)} O_{ij}^{(13)} = A_{ik}^{(1)} \otimes A_{jl}^{(3)}$$

となる。図式で表せば、



となる。ここで演算子として

$$Z = \left(O_{j_1 j_2}^{(13)} \otimes O_{j_3 j_4}^{(24)} \right) O^{-1} \left(O_{i_1 i_2}^{(12)} \otimes O_{i_3 i_4}^{(34)} \right) =$$

を考える。ここで O^{-1} の minimal rank decomposition を用いて

$$O^{-1} \left(O_{i_1 i_2}^{(12)} \otimes O_{i_3 i_4}^{(34)} \right) = \begin{array}{c} \boxed{} \\ \text{---} \\ \boxed{} \end{array} = \begin{array}{cc} \boxed{} & \boxed{} \\ \text{---} & \text{---} \\ \boxed{} & \boxed{} \end{array}$$

と左右に分割した形にできるので、 Z も左右に分割される。同様に上下にも分割できて、4つの部分の積

$$Z = \begin{array}{c} \boxed{} \\ \text{---} \\ \boxed{} \end{array} = \begin{array}{cc} \circ & \circ \\ \text{---} & \text{---} \\ \circ & \circ \end{array}$$

として表せる。open index をつなげると $OO^{-1}O = O$ となり、 Z はテンソル積の構造を有している
ので、 O の MPO 表示になっている。同様の議論で、縦方向の脚をつなげると内側のレイヤーから
 $O^{-1}O = \text{Id}$ が、横方向の脚をつなげると外側のレイヤーから $OO^{-1} = \text{Id}$ が得られるので、 O の縦横
方向の minimal rank decomposition を得たことになる。Schmidt ベクトルが線型独立なので、MPO
テンソルは二つ blocking して injective になる。

この構成は O^{-1} に対しても繰り返すことができ、 O^{-1} の MPO 表示を与える。

それぞれの MPO は Lem. 28 の条件を満たし、MPO は二つ blocking して injective になる。また隣
接する二つのテンソル O, O^{-1} は分解できて、 O は 2 体演算子の積となる。

Prf. Thm. 7 (semi-injective PEPS が等価である必要十分条件)

定理の直下で述べたように必要性は自明なので、十分性を示す。

まず

$$\begin{aligned} O^{-1} &= \text{---} \circ \text{---} \\ HOH &= \text{---} \\ VO^{-1}V &= \text{---} \\ SOS &= \square \end{aligned}$$

とする。 $S := HV = VH$ とした。(3.3) のように O は 2 層構造になっているので、これを

$$\text{---} \circ \text{---} = \begin{array}{c} \boxed{l} \\ \text{---} \\ \boxed{r} \end{array} \circ \begin{array}{c} \boxed{u} \\ \text{---} \\ \boxed{d} \end{array}$$

と分解する。 u と d が先に作用する。直ちに

$$\text{---} \circ \text{---} = \begin{array}{c} \boxed{u} \\ \text{---} \\ \boxed{d} \end{array} \circ \begin{array}{c} \boxed{l} \\ \text{---} \\ \boxed{r} \end{array} .$$

このとき、水平方向の入れ替え H によって挟むと

$$\text{○} = \begin{array}{|c|} \hline r \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline l \\ \hline \end{array} \circ \begin{array}{c} HuH \\ \text{---} \\ HdH \end{array}$$

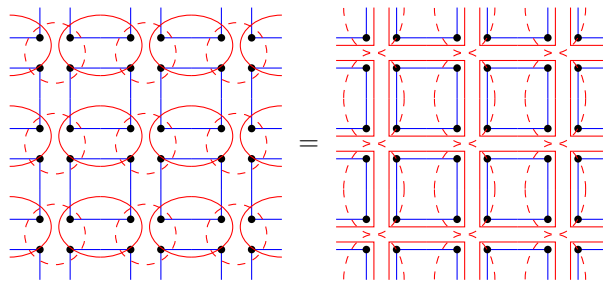
となるので、

$$\begin{aligned} \text{---} \text{○} \text{---} &= \begin{array}{|c|} \hline \bar{u} \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \bar{u} \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \bar{d} \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \bar{d} \\ \hline \end{array} \circ \begin{array}{|c|} \hline l \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline r \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline l \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline r \\ \hline \end{array} \circ \begin{array}{c} HuH \\ \text{---} \\ HdH \end{array} \\ &= \begin{array}{|c|} \hline \bar{u} \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \bar{u} \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \bar{d} \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \bar{d} \\ \hline \end{array} \circ \begin{array}{c} HuH \\ \text{---} \\ HdH \end{array} \end{aligned}$$

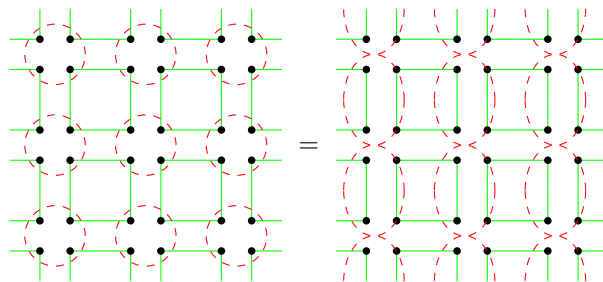
となって演算子が上下で分かれる。同様に、 SOS を下層、 $(VOV)^{-1}$ を上層に作用させて計算すると、

$$\begin{aligned} \text{---} \text{---} &= \begin{array}{|c|} \hline \bar{d} \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \bar{d} \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \bar{u} \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \bar{u} \\ \hline \end{array} \circ \begin{array}{c} V r V \\ \text{---} \\ V i V \end{array} \begin{array}{c} V r V \\ \text{---} \\ V i V \end{array} \circ \begin{array}{c} HdH \\ \text{---} \\ HuH \end{array} \\ &= \begin{array}{|c|} \hline \bar{d} \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \bar{d} \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \bar{u} \\ \hline \end{array} \begin{array}{|c|} \hline \bar{u} \\ \hline \end{array} \circ \begin{array}{c} HdH \\ \text{---} \\ HuH \end{array} \end{aligned}$$

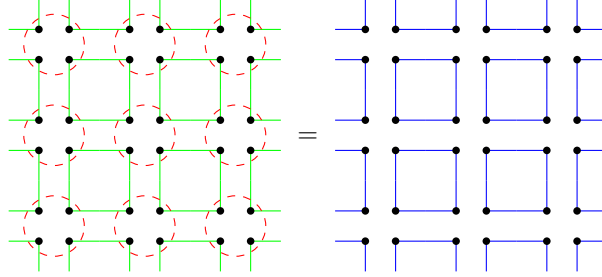
となるので、先ほど計算した演算子を上に $1/2$ ずらしたものになっている。これを踏まえて、 $|\phi_A\rangle$ と恒等演算子から定義される semi-injective PEPS にそれぞれ作用させると



となる。(??) を踏まえると、下段の作用はそれぞれ



である. 右辺を (3.4) で変形すると



であり、両辺に O を作用させると (3.1) が得られる。

9 SPT Phases

9.1 MPO 表現の 3rd cohomology

Prf. ?? (one-block proj. MPO rep. なら normal にできる)

■ $V_n(\tilde{X}_e) = \mu^n \text{Id}$ とできること $V_n(\tilde{X}_e)$ は等価な MPO を与える群作用なので、 $V_n(\tilde{X}_e) = \mu^n \text{Id}$. 2 回作用させると $V_n(\tilde{X}_e)V_n(\tilde{X}_e) = \mu_n^2 \text{Id} = \mu_n \lambda^n(e, e) \text{Id}$ なので、 $\mu_n = \lambda^n(e, e)$.

$V_n(\tilde{X}_g)$ と $V_n(\tilde{X}_{g^{-1}})$ を K 回 blocking させるとそれぞれ N, M 個の MPO の和になると仮定する。すなわち、

$$V_n(\tilde{X}_g) = \sum_{i=1}^N V_n(\tilde{X}_g^{(i)}),$$

$$V_n(\tilde{X}_{g^{-1}}) = \sum_{j=1}^M V_n(\tilde{X}_{g^{-1}}^{(j)}).$$

このとき、二つの積 $\lambda^n(g, g^{-1})\mu^n \text{Id}$ は少なくとも MN 個の、必ずしも本質的に異なるとは限らない normal MPO の和になる。

$$\lambda^n(g, g^{-1})\mu^n \text{Id} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M V_n(\tilde{X}_g^{(i)})V_n(\tilde{X}_{g^{-1}}^{(j)})$$

L 個の blocking によってこの MPO が全て normal テンソル Z_g^{ijk} による MPO の和になると仮定する。

$$\forall n \in KLN, \quad \lambda^n(g, g^{-1})\mu^n \text{Id} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \sum_{k=1}^{K_{ij}} V_n(Z_g^{ijk})$$

$i \neq i'$ または $j \neq j'$ であっても、 Z_g^{ijk} と $Z_g^{i'j'k'}$ が本質的に異なるとは限らない。本質的に異なる項をまとめることで

$$\lambda^n(g, g^{-1})\mu^n \text{Id} = \sum_{i=1}^R \sum_{j=1}^{S_i} \sum_{k=1}^{K_{ij}} V_n(Z_g^i)$$

とできる。\$S_i\$ は本質的に異なる項の数、\$Z_g^i\$ は \$\{Z_g^{ijk}\}\$ のうち本質的に異なる組を構成するものであり、\$S_i\$ は \$Z_g^i\$ の重複度。構成から

$$\sum_{i=1}^R S_i = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M K_{ij}$$

である。本質的に異なる normal MPO は十分大きなサイズで線型独立になる (Cor. 21) ので、Prop. 25 からこの分解には項がただ一つしかなく、\$R = 1, S_1 = 1\$ である。\$K_{ij} \ge 1\$ なので \$N = M = 1\$ すなわち \$V_n(\tilde{X}_g)\$ は normal. よって \$V_n(\tilde{X}_g)\$ は normal MPO tensor \$X_g\$ によって表される。

Prf. Prop. 9

\$A\$ の injectivity length を \$L\$ とする。\$L\$ 個 blocking した MPS テンソルをそれぞれ \$\tilde{A}, \tilde{B}\$ とすると、\$\tilde{A}\$ は injective なので left inverse \$\tilde{A}^{-1}\$ が存在。このとき Jordan 分解により semi-simple な \$S\$ と冪零の \$N\$ に

$$\lambda^L \begin{array}{c} \boxed{\tilde{A}^{-1}} \\ | \\ \boxed{\tilde{B}} \end{array} = \begin{array}{c} \boxed{S} \\ | \\ \boxed{} \end{array} + \begin{array}{c} \boxed{N} \\ | \\ \boxed{} \end{array}$$

とする。すなわち \$S\$ は対角化可能であり、\$N\$ はある \$n \in \mathbb{N}\$ によって \$N^n = 0\$。ここで

$$\overbrace{\begin{array}{c} \boxed{\tilde{A}^{-1}} \quad \boxed{\tilde{A}^{-1}} \quad \boxed{\tilde{A}^{-1}} \\ | \quad | \quad | \\ \boxed{\tilde{A}} \quad \boxed{\tilde{A}} \quad \boxed{\tilde{A}} \end{array}}^n = \lambda^{Ln} \overbrace{\begin{array}{c} \boxed{\tilde{A}^{-1}} \quad \boxed{\tilde{A}^{-1}} \quad \boxed{\tilde{A}^{-1}} \\ | \quad | \quad | \\ \boxed{\tilde{B}} \quad \boxed{\tilde{B}} \quad \boxed{\tilde{B}} \end{array}}^n$$

が任意の \$n \in \mathbb{N}\$ で成り立つ。右辺は \$\text{Tr}[(S + N)^n] = (\text{Tr}[S + N])^n\$ であり、左辺は

$$\overbrace{\begin{array}{c} \boxed{} \quad \boxed{} \quad \boxed{} \\ | \quad | \quad | \\ \boxed{} \quad \boxed{} \quad \boxed{} \end{array}}^n = \text{Tr}[I]^n = D^n$$

である。Prop. 25 により \$\text{rank}(S + N) = 1\$ であり、Jordan 標準形にてランク 1 の行列は

$$S + N = \begin{pmatrix} S_1 & & \\ & 0 & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \text{ or } \begin{pmatrix} 0 & 1 & \\ & 0 & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$$

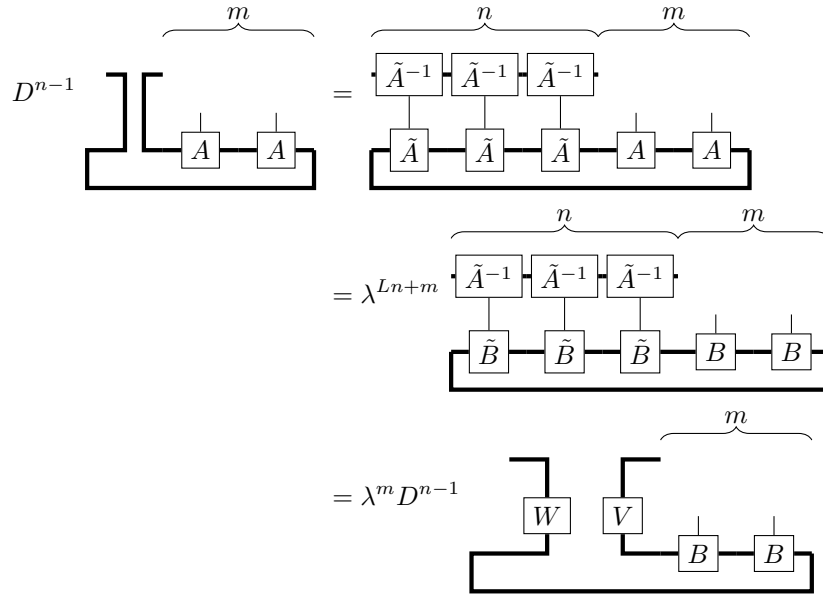
のいずれか。特に今はトレースが非ゼロなので前者であり、\$N = 0\$ とわかる。\$S\$ のランクが 1 なのでランク分解によって

$$\boxed{S} = \boxed{W} \boxed{V}$$

と表せる。\$\text{Tr}[S] = D\$ を踏まえて

$$\boxed{V} \boxed{W} = \boxed{} = D.$$

A, B は同じ状態を組むため、任意の $n, m \in \mathbb{N}$ で



となる。 λ は各サイトで共通なゲージとして B の定義に吸収できる。少なくとも物理的には考察の必要はない。よって題意を満たす。

Lem. 29: reduction の差に関する補題: $VN \cdots NW = 0$ (Lemma 27)

V, W を B から injective MPS テンソル A への reduction とし、 $N^i = B^i - WA^iV$ を定義すると、任意の $n > 0$ について

$$VN^{i_1}N^{i_2} \cdots N^{i_n}W = 0.$$

Prf.

n についての帰納法。 $n = 1$ では

$$VN^iW = VB^iW - VWA^iVW = VA^iW - VA^iW = 0.$$

任意の $m < n$ にて題意を満たすと仮定する。この仮定と N の定義により

$$VN^{i_1}N^{i_2} \cdots N^{i_m}W = VB^{i_1}N^{i_2} \cdots N^{i_m}W$$

で、続く N も B に書き換えて

$$VN^{i_1}N^{i_2} \cdots N^{i_m}W = VB^{i_1}B^{i_2} \cdots B^{i_{m-1}}N^{i_m}W.$$

最後の N も同様に書き換えると

$$VN^{i_1}N^{i_2} \cdots N^{i_n}W = VB^{i_1}B^{i_2} \cdots B^{i_n}W - VB^{i_1}B^{i_2} \cdots B^{i_{n-1}}WA^{i_n}VW = 0.$$

Prf. Prop. 10 (reduction の差は冪零)

B と A は同じ状態を生成するので

$$\mathrm{Tr}[B^{i_1} B^{i_2} \dots B^{i_n}] = \mathrm{Tr}[A^{i_1} A^{i_2} \dots A^{i_n}]$$

が任意の $n \in \mathbb{N}$ で成り立つ。左辺を $B^i = WA^iV + N^i$ で展開したとき、Prop. 10 より N が V と W で挟まれると 0 になるので、残る項は

$$\mathrm{Tr}[A^{i_1} A^{i_2} \dots A^{i_n}] + \mathrm{Tr}[N^{i_1} N^{i_2} \dots N^{i_n}] = \mathrm{Tr}[A^{i_1} A^{i_2} \dots A^{i_n}]$$

すなわち $\mathrm{Tr}[N^{i_1} N^{i_2} \dots N^{i_n}] = 0$ 。特に、生成された代数 \mathcal{A} の元 $Z \in \mathcal{A}$ は常に $\mathrm{Tr}[Z^n] = 0$ を任意の n で満たすが、これは Z が非ゼロの固有値を持たないことを表す。Jordan 分解により Z は上三角で対角が 0 の行列になり、結果ある $n_0 \in \mathbb{N}$ で $Z_0^{n_0} = 0$ 。つまり N で生成される代数の任意の元は冪零である。

Lem. 30: reduction による冪の分解 (Lem. 28)

V, W を B から normal MPS テンソル A への reduction とし、 $N^i = B^i - WA^iV$ を定義する。 N_0 を reduction の nilpotency length とすると、

$$B^{i_1} B^{i_2} \dots B^{i_n} = \sum_{0 \leq k \leq l \leq n} N^{i_1} \dots N^{i_k} W A^{i_{k+1}} \dots A^{i_l} V N^{i_{l+1}} \dots N^{i_n}$$

$$V B^{i_1} B^{i_2} \dots B^{i_n} = \sum_{\max(0, n-N_0) \leq l \leq n} A^{i_1} \dots A^{i_l} V N^{i_{l+1}} \dots N^{i_n}$$

$$B^{i_1} B^{i_2} \dots B^{i_n} W = \sum_{0 \leq k \leq \min(n, N_0)} N^{i_1} \dots N^{i_k} W A^{i_{k+1}} \dots A^{i_n}$$

Prf.

$B^i = WA^iV + N^i$ と書いて展開するだけ。適切に Prop. 10 (reduction の差は冪零) や Thm. 31 (reduction の差に関する補題: $VN \dots NW = 0$), nilpotency length の定義を用いて不要な項を消す。

Thm. 31: 22

V, W および \tilde{V}, \tilde{W} をそれぞれ B から normal MPS テンソル A への reduction とする。二つの reduction の nilpotency length を N_0 としたとき、ある $\lambda \in \mathbb{C}$ によって任意の $n > 2N_0$ にて

$$\begin{aligned} V B^{i_1} B^{i_2} \dots B^{i_n} &= \lambda \tilde{V} B^{i_1} B^{i_2} \dots B^{i_n} \\ B^{i_1} B^{i_2} \dots B^{i_n} W &= \lambda^{-1} B^{i_1} B^{i_2} \dots B^{i_n} \tilde{W} \end{aligned}$$

が成り立つ。

Prf. Thm. 31 (reduction の一意性)

L を A の injectivity length, $m = 2N_0 + L$ として

$$C^{i_1 \dots i_m} = VB^{i_1} B^{i_2} \dots B^{i_m} \tilde{W}$$

を定義する。Lem. 30 (reduction による冪の分解) と $B^i = WA^iV + N^i$ を使って

$$C^{i_1 \dots i_m} = \sum_{k=N_0+L}^m A^{i_1} \dots A^{i_k} VN^{i_{k+1}} \dots N^{i_m} \tilde{W}$$

を得る。項数は $N_0 + 1$ であることに注意。同様に Lem. 30 と $B^i = \tilde{W}A^i\tilde{V} + \tilde{N}^i$ を使って

$$C^{i_1 \dots i_m} = \sum_{k=0}^{m-N_0} V\tilde{N}^{i_1} \dots \tilde{N}^{i_k} \tilde{W}A^{i_{k+1}} \dots A^{i_m}$$

である。 $k = N_0 + 1$ から $k = N_0 + L$ までのテンソルは両方とも A^{i_k} であり、仮定よりその部分は injective. よって left inverse を作用させて

$$\begin{aligned} & \left[\begin{array}{c} i_1 \\ \boxed{A} \end{array} \right] \dots \left[\begin{array}{c} i_{N_0} \\ \boxed{A} \end{array} \right] \sum_{k=N_0+L}^m \left[\begin{array}{c} i_{N_0+L+1} \\ \boxed{A} \end{array} \right] \dots \left[\begin{array}{c} i_k \\ \boxed{A} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} i_{k+1} \\ \boxed{V} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} i_{k+1} \\ \boxed{N} \end{array} \right] \dots \left[\begin{array}{c} i_m \\ \boxed{N} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \\ \boxed{\tilde{W}} \end{array} \right] \\ &= \sum_{k=0}^{N_0} \left[\begin{array}{c} \\ \boxed{V} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} i_1 \\ \boxed{\tilde{N}} \end{array} \right] \dots \left[\begin{array}{c} i_k \\ \boxed{\tilde{N}} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} \\ \boxed{\tilde{W}} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} i_{k+1} \\ \boxed{A} \end{array} \right] \dots \left[\begin{array}{c} i_{N_0} \\ \boxed{A} \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} i_{N_0+L+1} \\ \boxed{A} \end{array} \right] \dots \left[\begin{array}{c} i_m \\ \boxed{A} \end{array} \right] \end{aligned}$$

である。両辺の積はテンソル積を表すので個別に比較できて、ある定数 $\lambda \in \mathbb{C}$ により

$$\sum_{k=0}^{N_0} V\tilde{N}^{i_1} \dots \tilde{N}^{i_k} \tilde{W}A^{i_{k+1}} \dots A^{i_{N_0}} = \lambda A^{i_1} \dots A^{i_{N_0}} \quad (9.1)$$

$$\sum_{k=0}^{N_0} A^{i_1} \dots A^{i_k} VN^{i_{k+1}} \dots N^{i_{N_0}} \tilde{W} = \lambda^{-1} A^{i_1} \dots A^{i_{N_0}} \quad (9.2)$$

が成り立つ。しかしこのとき Lem. 30 (reduction による冪の分解) の第 1 式を $B^i = \tilde{W}A^i\tilde{V} + \tilde{N}^i$ で適用すると

$$VB^{i_1} B^{i_2} \dots B^{i_n} = \sum_{k=0}^{N_0} \sum_{l=n-N_0}^n V\tilde{N}^{i_1} \dots \tilde{N}^{i_k} \tilde{W}A^{i_{k+1}} \dots A^{i_l} \tilde{V}\tilde{N}^{i_{l+1}} \dots \tilde{N}^{i_n}$$

となり、 $n \geq 2N_0$ では $l \geq N_0$ なので右辺を (9.1) を使って書き換えることで

$$VB^{i_1} B^{i_2} \dots B^{i_n} = \lambda \sum_{l=n-N_0}^n A^{i_1} \dots A^{i_l} \tilde{V}\tilde{N}^{i_{l+1}} \dots \tilde{N}^{i_n} = \lambda \tilde{V}B^{i_1} B^{i_2} \dots B^{i_n}.$$

ただし、二つ目の等号では Lem. 30 第 2 式を $B^i = \tilde{W}A^i\tilde{V} + \tilde{N}^i$ で適用した。これはまさしく (4.1) に他ならない。(4.2) も同様に (9.2) を使って示せる。

参考文献

- [CPGSV17] J.I. Cirac, D. Pérez-García, N. Schuch, and F. Verstraete. Matrix product density operators: Renormalization fixed points and boundary theories. *Annals of Physics*, 378:100–149, March 2017.
- [CSW⁺13] Andrea Cadarso, Mikel Sanz, Michael M. Wolf, J. Ignacio Cirac, and David Pérez-García. Entanglement, fractional magnetization, and long-range interactions. *Physical Review B*, 87(3), January 2013.
- [DICCC⁺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(7), July 2016.
- [EHK78] David E. Evans and Raphael Høegh-Krohn. Spectral properties of positive maps on c^* -algebras. *Journal of the London Mathematical Society*, s2-17(2):345–355, 1978.
- [MGSC18] Andras Molnar, Yimin Ge, Norbert Schuch, and J. Ignacio Cirac. A generalization of the injectivity condition for projected entangled pair states. *Journal of Mathematical Physics*, 59(2), February 2018.
- [SPGWC10] Mikel Sanz, David Perez-Garcia, Michael M. Wolf, and Juan I. Cirac. A quantum version of wielandt’ s inequality. *IEEE Transactions on Information Theory*, 56(9):4668–4673, September 2010.
- [Wol12] Michael M Wolf. Quantum channels and operations-guided tour. lecture note, 2012. Lecture notes, Niels-Bohr Institute (Copenhagen), 2008/2009.