

テンソルネットワークと 量子情報・可解性・重力の関わり¹

仙台高等専門学校

松枝 宏明²

¹この原稿は「第 61 回物性若手夏の学校」の講義ノートである。

²matsueda@sendai-nct.ac.jp

はじめに

この原稿は「第61回物性若手夏の学校」の講義ノートである。講義タイトルは「テンソルネットワークと量子情報・可解性・重力の関わり」である。テンソルネットワークは、相互作用する量子多体系に対する変分波動関数である。従来、物性のための場の量子論のテキストで紹介されている諸方法と異なり、この方法では対象とする系の臨界性や空間次元に応じて適切なネットワーク構造が自然に定まるところにその特徴がある。それを統制している機構が、エンタングルメント・エントロピーと呼ばれる量子情報量の普遍的なスケーリング特性である。このネットワーク構造とスケーリング特性を深く理解することで、物性の変分理論としてのテンソルネットワークが、勿論、情報理論をはじめとして、数理物理やストリング理論など多方面の最先端課題と非常に深く結びついていることが分かる。本講義では、テンソルネットワークの技術的な側面に加えて、そのような分野横断的な視点を持つことの面白さや意義を若い学生の皆様にお伝えしたい。先ず初日にテンソルネットワークの分類学 (PEPS クラスと MERA クラス) と諸性質について整理する。それを統制しているエンタングルメント・エントロピーの面積則について丁寧に解説する。2日目には、MERA ネットワークの量子回路的構造と最適化、そのウェーブレット変換との関わりについて詳しく述べる。また MERA と PEPS の間の変換について議論する。最終日には、空間1次元のテンソルネットワーク (行列積状態) がベータ仮設法と等価であることを述べる。また、テンソルネットワークと量子古典変換の関わりを論じ、ストリング理論分野で大きなテーマとなっているゲージ・重力対応やホログラフィックくりこみ群の視点から、テンソルネットワークの位置づけを再考する。最後にこの分野融合研究に対する私のアプローチである特異値分解の応用的話題を述べて全体のまとめとする。

講義を依頼された段階では、先ずは私の著作である「量子系のエンタングルメントと幾何学」 [1] の中核部分を丁寧に講義しようと考えていたのであるが、分野の進展を鑑みると、それだけではなく「ウェーブレット・量子回路的視点に基づくテンソルネットワークの展開」という視点もあった方が教育的なのではないかと考え直し、追加ノートをお配りして講義計画を再構成した (追加資料のほうがはるかに多くなってしまった...)。この物性研究の記事は、実際にはそれら2つのノートを整理したものである。テンソルネットワークや量子論理回路が絡む分野では、最近、ウェーブレット変換に基づいた物理系の表現が興味を持たれつつある。またこのテーマがエンタングルメント・くりこみ群・ベータ仮設法などと深い関わりあいを持つことも見出されつつある。更に特異値分解の機能性の中にも類似の数理構造が潜んでいるようである。ウェーブレットとくりこみの関わりあ

いを調べていくと、結局は化学の軌道混成から固体のバンド形成に至る道筋のように、極めて素朴なボトムアップ的なアプローチがどのように量子情報論の言葉で解釈できるのかという問題に行きつくことが分かる。基礎的な問題を繰り返し勉強することの意味を改めて痛感し、皆さんと一緒に勉強を深めたいというのが私の素直な思いである。

目次

第1章	テンソルネットワーク型変分関数の分類学	7
1.1	はじめに	7
1.2	変分関数の設定指針：エンタングルメント・エントロピーのスケールリング則	8
1.3	行列積状態 (MPS)	9
1.3.1	行列積による状態の因子化	9
1.3.2	PEPS 形式	11
1.3.3	変分理論としての指標：有限 χ スケーリング	11
1.4	テンソル積状態	12
1.5	階層的テンソル積状態	14
1.5.1	エンタングルメントくりこみ群 (MERA)	14
1.5.2	因果円錐 (Causal Cone)	16
第2章	量子論理回路 (テンソル・ネットワーク) の多様な演算機能	17
2.1	量子計算アルゴリズムの歴史的経緯	17
2.2	量子論理ゲートとエンタングルメント・ウェーブレットとの関わり	18
2.3	階層型ネットワークの具体例	19
2.3.1	高速フーリエ変換のユニタリー・ネットワーク	19
2.3.2	Grover 検索アルゴリズム	21
2.4	MERA ネットワーク	22
2.4.1	MERA ネットワークの量子回路表現	22
2.4.2	厳密対角化との比較	27
第3章	くりこみ群および階層型テンソルネットワークとウェーブレットの関わり	30
3.1	指数変形による波束の形成	30
3.2	「二原子分子の軌道混成」を信号処理分野では結局「ハール・ウェーブレット」あるいは「アダマール変換」と呼んでいるらしい	32
3.3	Exact Holographic Mapping (EHM)	33

3.3.1	EHM	33
3.3.2	ハール・ウェーブレット	35
3.4	MERA ネットワークによるウェーブレットの表現	36
3.4.1	フェルミ面のウェーブレットによる再構成	36
3.4.2	Daubechies D4 ウェーブレットのユニタリー回路表現	36
第 4 章	階層型テンソルネットワークと相互結合型ネットワークの間の変換	40
4.1	MERA から MPS への変換	40
4.2	TNR から MERA への変換	41
第 5 章	テンソルネットワークと量子可解性	44
5.1	MPS の変形	44
5.2	行列積 Bethe 仮説	46
第 6 章	テンソルネットワークと量子古典変換：くりこみ群の現代的視点とその分野横断的広がり	49
6.1	AdS/CFT 対応	49
6.1.1	AdS 時空とその境界	49
6.1.2	GKP-Witten 関係式	51
6.1.3	Brown-Henneaux の公式	52
6.1.4	ホログラフィック・エンタングルメント・エントロピー	52
6.2	MERA ネットワークと AdS 計量	54
6.3	物性諸問題におけるバルク境界対応	54
6.3.1	サイン二乗変形	55
第 7 章	特異値分解の様々な機能性（松枝の最近の研究）	59
7.1	スナップショット・エントロピーの計算	59
7.1.1	Typicality としての画像	59
7.1.2	スケール分解の基本的な考え方	60
7.1.3	スピン構造の特異値分解	62
7.1.4	厳密なフラクタルの場合	63
7.2	特異値分解の連続極限とメリン逆変換	64
7.3	現在興味があること	68
付録 A	ウェーブレット理論	77
A.1	ハール関数による離散的ウェーブレット変換の基本的性質の検討	77
A.1.1	信号の多重解像度分解	77

A.1.2	スケーリング関数とウェーブレット母関数	77
A.1.3	スケーリング関数による近似	78
A.1.4	ウェーブレット母関数による揺らぎの表現	79
A.1.5	ウェーブレット変換	80
A.2	High Pass/Low Pass Filtering	81
A.2.1	スケーリング係数とウェーブレット係数のフーリエ表示 . . .	81
A.2.2	正規直交系の条件	83
A.2.3	Haar wavelet の場合	84
A.3	Daubechies ウェーブレット	86
A.3.1	スケーリング方程式	86
A.3.2	モーメント条件	87
A.3.3	D4 ウェーブレットの係数の決め方	89
A.4	ウェーブレット行列による表現	91
A.4.1	ウェーブレット行列	91
A.4.2	Haar ウェーブレット	91
A.4.3	D4 ウェーブレット	92

第1章 テンソルネットワーク型変分関数の分類学

1.1 はじめに

近年の量子物性分野における実験技術の進展は、非常に素晴らしいものがある。特に、エネルギー・運動量・実空間の分解能が優れた動的物理量測定は、フェルミ準位近傍の電子状態を詳細に解析するための必須の実験技術となっている。エネルギー分解能が上がることで、より低エネルギーの、すなわち空間的により広がった、コヒーレントな励起モードの性質を捉えることが可能になる。また最近のトレンドとしては、限られたデータやノイズの多いデータから本質的に重要な情報を抽出・推定する技術、そのための統計数理の専門家とのコラボレーションも望まれている。実験・解析の質が相補的に向上している。

このような状況に対応して、理論家も新たな概念・技術を積極的に導入していく必要がある。最近は社会の変化がそうさせるのか、理論物理においても「情報」は中心的なキーワードのようである。本講義も、情報理論と物理学の本質的な融合を目指す一端を解説する。

本章ではテンソルネットワーク型の変分理論を学ぶ。従来の変分法の学習は、皆さんが量子力学の授業でお馴染みのように、調和振動子から始める。このような基礎的問題の基底状態では、ポテンシャルの底付近に量子力学的粒子があり、不確定性のためにその存在確率に空間的広がりがあると考えれば、波動関数の関数形はほぼ確定する（常識的にはロレンチアンかガウシアンを取る）。ハミルトニアンを H 、変分波動関数を $|\psi(\theta)\rangle$ とし、エネルギー期待値

$$E_{exp}(\theta) = \frac{\langle \psi(\theta) | H | \psi(\theta) \rangle}{\langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle} \quad (1.1)$$

が最小となるように変分パラメータ θ （これはベクトル量でもよい）を選ぶ。答えが類推できる系はこれでよいが、多体系ではそれが非自明なために、なかなか繁用的なツールになりにくいという事情がある。したがって、変分波動関数のより一般的な設計指針が求められる。以下ではそこから話を進めよう。

1.2 変分関数の設定指針：エンタングルメント・エントロピーのスケーリング則

テンソルネットワーク理論では、局在スピンや伝導電子などの間の空間的・時間的な相関の情報を明確に考慮しながら変分波動関数を設定する。すなわち、系の臨界性や空間次元 d に着目した変分法と行うことができる。この「相関の情報」というのが、実は量子情報理論分野の基礎的な概念である「エンタングルメント・エントロピー」で特徴づけられる。このエントロピーは、実際に相関関数の対数と似た振る舞いをする事が分かっている。

初めに全系の状態 $|\psi\rangle$ を導入し、これを部分系 A と環境 B に分ける。「分ける」という操作がその間の相関を調べる出発点となる。部分系と環境の基底をそれぞれ $|x\rangle, |y\rangle$ とすると、 $|\psi\rangle$ は

$$|\psi\rangle = \sum_{x,y} \psi(x,y) |x\rangle \otimes |y\rangle \quad (1.2)$$

と表される。ここで波動関数 $\psi(x,y)$ を特異値分解し、

$$\psi(x,y) = \sum_l U_l(x) \sqrt{\lambda_l} V_l(y) \quad (1.3)$$

と表すと ($\sqrt{\lambda_l}$ は特異値、 $U_l(x)$ および $V_l(y)$ はユニタリ行列)、

$$|\psi\rangle = \sum_{x,y} \sum_l U_l(x) \sqrt{\lambda_l} V_l(y) |x\rangle \otimes |y\rangle = \sum_l \sqrt{\lambda_l} |U_l\rangle \otimes |V_l\rangle \quad (1.4)$$

が得られる。ただし $|U_l\rangle = \sum_x U_l(x) |x\rangle$ 、 $|V_l\rangle = \sum_y V_l(y) |y\rangle$ 。式(1.4)は Schmidt 分解と呼ばれる。特異値 $\sqrt{\lambda_l}$ が部分系 A と環境 B の量子的もつれの大きさに対応する。

この特異値の二乗は、部分系或いは環境を縮約した密度行列の固有値となる。すなわち、密度行列を

$$\rho_A(x,x') = \sum_y \psi(x,y) \psi^*(x',y) = \sum_l U_l(x) \lambda_l U_l^*(x') \quad (1.5)$$

$$\rho_B(y,y') = \sum_x \psi(x,y) \psi^*(x,y') = \sum_l V_l(y) \lambda_l V_l^*(y') \quad (1.6)$$

と定義すると、明らかに λ_l が ρ_A と ρ_B の固有値になっていることが分かる。また ρ_A と ρ_B の固有値は要素数が違っててもゼロでない部分は互いに一致する。

これらの縮約密度行列を用いて、システム A にいる観測者にとってのエンタングルメント・エントロピー S_A を

$$S_A = -\text{tr}_A(\rho_A \log \rho_A) = -\sum_l \lambda_l \log \lambda_l \quad (1.7)$$

と定義する（特異値は規格化する）．定義より明らかに

$$S_A = S_B \quad (1.8)$$

が成り立つ．この関係式は極めて重要で，エンタングルメント・エントロピーが示量的ではないことを示している．なぜかというところ、一般に空間 d 次元の全系において、大きさの異なる部分系と環境の間で共通している量は「 $d-1$ 次元境界」だからである．

エンタングルメント・エントロピーは、一般的にはシステムの線形サイズ L （格子定数を単位として測る）と空間次元 d の増加関数である．非臨界系では L が相関長 ξ を越えるあたりで頭打ちになる．また $L < \xi$ であれば、

$$S \sim L^{d-1} \quad (1.9)$$

となる [2-9]．この振る舞いは、 $d=3$ の場合を念頭において「面積則 (Area Law)」と呼ばれる．一方、一次元量子臨界系に関しては、共形場理論から比例係数まで含めて正確な表現が得られており、中心電荷 c と境界の数 A を用いて

$$S = \frac{1}{6} c A \log L \quad (1.10)$$

となる [10-12]．より正確には、有限の長さ N の 1 次元系において、サイズ L の部分系がそれ以外の領域とやり取りする量子情報は ($A=1$)、

$$S(L) = \frac{c}{6} \log \left(\frac{N}{\pi} \sin \left(\frac{\pi L}{N} \right) \right) \quad (1.11)$$

で与えられる．ここで $N \rightarrow \infty$ とすれば、式 (1.10) が得られる．このとき $S(N-L) = S(L)$ が示せるので、特異値分解によって得られた式 (1.8) は、対数補正がある場合にも成立する．なお、物性で興味のある $d=2, 3$ でフェルミ面を持つ系などでは、スケーリング則が

$$S \sim L^{d-1} \log L \quad (1.12)$$

となり、対数補正を持つ場合がある [13-15]．対数補正は臨界系の特徴と言える．

1.3 行列積状態 (MPS)

1.3.1 行列積による状態の因子化

2 サイト・スピン $S=1/2$ の反強磁性ハイゼンベルグ模型を例にとって、量的にもつれた状態の特徴を調べよう．基底状態はシングレット

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (1.13)$$

となる．はじめに，この状態は二つのスピンのエンタングルしているために，直積状態では表すことができないことを確認する．すなわち

$$|\phi\rangle = \sum_{s_1} c_{s_1} |s_1\rangle \otimes \sum_{s_2} d_{s_2} |s_2\rangle \quad (1.14)$$

に対して，これが一重項状態となる条件

$$c_{\uparrow}d_{\uparrow} = c_{\downarrow}d_{\downarrow} = 0, \quad c_{\uparrow}d_{\downarrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad c_{\downarrow}d_{\uparrow} = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad (1.15)$$

を課しても，これらを満たす係数の組は存在しないことが分かる．従って，式(1.14)では厳密な波動関数である式(1.13)を表現することはできない．ところが，状態ベクトルを

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{s_1, s_2 = \uparrow, \downarrow} A^{s_1} B^{s_2} |s_1 s_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{s_1, s_2} (a^{s_1} \quad b^{s_1}) \begin{pmatrix} c^{s_2} \\ d^{s_2} \end{pmatrix} |s_1 s_2\rangle \quad (1.16)$$

と表現してみると，例えば

$$A^{\uparrow} = (1 \quad 0), \quad A^{\downarrow} = (0 \quad -1), \quad B^{\uparrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad B^{\downarrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.17)$$

が正しくシングレットを記述することが分かる．すなわち，ベクトルの内部自由度を導入すると，表向きには直積状態であっても実効的には非局所相関を表すことができる．

上記で述べた内部自由度の導入法を参考にすれば，一般的な量子状態

$$|\psi\rangle = \sum_{\{s_j\}} T^{s_1 s_2 \dots s_n} |s_1 s_2 \dots s_n\rangle \quad (1.18)$$

の係数 $T^{s_1 s_2 \dots s_n}$ が持つべき性質は明らかであろう．空間一次元（開放端条件）の場合，相互作用が隣接サイト間で支配的な場合には

$$T^{s_1 s_2 \dots s_n} = \sum_{\alpha, \beta, \dots, \omega} (B_1^{s_1})_{\alpha} (A_2^{s_2})_{\alpha\beta} (A_3^{s_3})_{\beta\gamma} \dots (A_{n-1}^{s_{n-1}})_{\psi\omega} (B_n^{s_n})_{\omega} \quad (1.19)$$

という分解が適切である．ここで量子相関を表わす仮想的なインデックス $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ を行列の足と見ると，分解後の係数 $A_2^{s_2}, A_3^{s_3}, \dots$ は行列積で表わされている．したがって，このような状態は行列積状態 (Matrix Product State, MPS) と呼ばれる [16, 17]．以降では行列は $\chi \times \chi$ 次元であるとする．MPS を変分関数として用いる場合には，各行列要素が変分パラメータ，望みの数値精度を与える χ が適切な値となる．境界が周期的である場合には，全て行列を使って

$$T^{s_1 s_2 \dots s_n} = \text{Tr} (A_1^{s_1} A_2^{s_2} \dots A_n^{s_n}) \quad (1.20)$$

と書くことができる．行列のトレースが含まれているので，この波動関数は行列の巡回に対して不変で，これは系の並進対称性に対応している．

1.3.2 PEPS 形式

MPS に現れる行列積 $(A_j^{s_j})_{\alpha\beta} (A_{j+1}^{s_{j+1}})_{\beta\gamma}$ には, 仮想的なインデックス β で最隣接スピン間のエンタングルメントを表現して, それを物理的空間 s_j, s_{j+1} にマップする働きがある. したがって, 先に仮想的なエンタングルメント対を各ボンド上に乗っけておいて, そのあとに物理的空間に射影するという見方をとることもできる. この見方で構成された状態は Projected Entangled-Pair State (PEPS) と呼ばれる [18–20]. PEPS を数学的に表現するためには, まずサイト i とサイト $i+1$ のリンク上に maximally entangled pair

$$|\phi\rangle_{i,i+1} = \sum_{\alpha=1}^{\chi} \frac{1}{\sqrt{\chi}} |\alpha\rangle_i \otimes |\alpha\rangle_{i+1} \quad (1.21)$$

を導入する. 一方の仮想自由度を縮約したときに, 他方の仮想自由度の部分密度行列から定義されるエンタングルメント・エントロピーは $S = \log \chi$ となる. 系全体に maximally entangled pairs を導入すると

$$|\Phi\rangle = \underbrace{|\phi\rangle_{1,2} \otimes |\phi\rangle_{2,3} \otimes \cdots \otimes |\phi\rangle_{N-1,N} \otimes |\phi\rangle_{N,1}}_{N \text{ 個}} \quad (1.22)$$

となる. 次にサイト j 上の二つの仮想的自由度を物理空間に射影する演算子 P_j を以下のように定義する.

$$P_j = \sum_{s=1}^d \sum_{\alpha,\beta=1}^{\chi} (A_j^s)_{\alpha\beta} |s\rangle_j \otimes \langle\alpha|_j \otimes \langle\beta|_j \quad (1.23)$$

これらを用いて MPS は次のテンソル積状態で表される.

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1, \dots, s_N} \text{Tr} (A_1^{s_1} \cdots A_N^{s_N}) |s_1 \cdots s_N\rangle = \chi^N (P_1 \otimes P_2 \otimes \cdots \otimes P_N) |\Phi\rangle \quad (1.24)$$

この見方は MPS の高次元化に際して応用される.

1.3.3 変分理論としての指標：有限 χ スケーリング

MPS のエンタングルメント・エントロピーは $S \sim \log \chi$ と見積もられる. これより, 適切な数値計算に必要な χ の値は,

$$\chi_{\text{periodic}} \sim e^S = e^{(cA/6) \log L + \gamma} = e^{\gamma} L^{cA/6} \quad (1.25)$$

となる. 即ち周期境界条件の場合には, 開放端の場合よりも多くの状態数 χ を取らなければならない. 同様に, MPS による変分解析は, 空間次元の場合に

精度が高いが空間二次元以上になると計算効率が落ちることも説明ができる．すなわち，

$$\chi_{\text{nc}} \propto e^{L^{d-1}} \quad (1.26)$$

となり， $d = 2$ の段階で必要な状態が指数関数的に増加してしまう．このため，取り扱う模型の空間次元に応じてエンタングルメント・エントロピーのスケール則を満たすような適切な変分関数を設定することが必要となる．

ちなみに，一次元臨界系については，より詳細なスケーリング公式が導出されている．臨界点近傍において，系の状態を行列次元が χ の MPS で近似した場合，その近似的状態で表現できるエンタングルメント・エントロピーは

$$S_\chi = \frac{c\kappa}{6} \log \chi \quad (1.27)$$

で与えられる． κ は有限エンタングルメント臨界指数と呼ばれており

$$\kappa = \frac{6}{c \left(\sqrt{\frac{12}{c}} + 1 \right)} \quad (1.28)$$

で定義される [21–25]．一方，共形場理論に従うと，臨界点近傍で相関長が ξ の系が持つエンタングルメント・エントロピーは

$$S = \frac{1}{6} c A \log \xi \quad (1.29)$$

で与えられる．有限 χ スケーリングは半無限系に対して導出されるので，ここでは $A = 1$ とした．これらが互いに等しいとすると，

$$\xi = \chi^\kappa \quad (1.30)$$

が導かれる．これが意味しているのは，MPS の行列次元 χ は系の相関という長さスケールに対応しているということである． χ は一次元量子系を二つに分断したときの境界での状態数なので，一見すると長さスケールとは全く関係ないように感じられるかもしれないが，ここが理論の肝となる部分である．

1.4 テンソル積状態

MPS の高次元への自然な拡張としてテンソル積状態 (Tensor Product State, TPS) あるいはテンソル・ネットワーク状態 (Tensor Network State, TNS) が考え

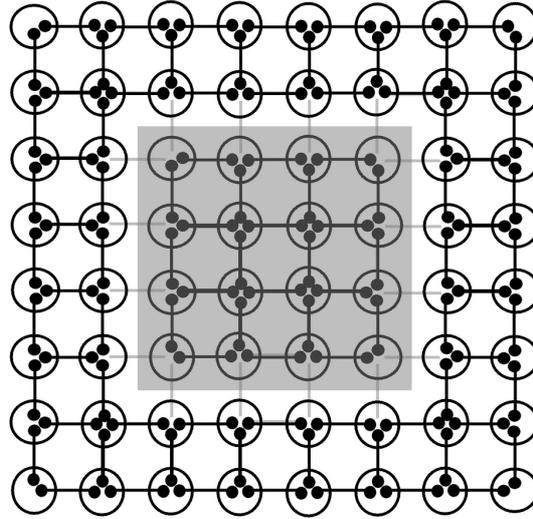


図 1.1: TPS の構造と面積則との対応

られる [18–20] . 各サイト j 上から伸びるボンド数 z_j と等しい階数をもつテンソル $(A_j^{s_j})_{m_1 m_2 \dots m_{z_j}}$ のセットを定義し, 波動関数 $T^{s_1 s_2 \dots s_n}$ をそれらの積で表現する .

$$|\psi\rangle = \sum_{\{s_j\}} T^{s_1 s_2 \dots s_n} |s_1 s_2 \dots s_n\rangle = \sum_{\{s_j\}} C(\{A_j^{s_j}\}) |s_1 s_2 \dots s_n\rangle \quad (1.31)$$

ここで C はテンソル $(A_j^{s_j})_{m_1 m_2 \dots m_{z_j}}$ の縮約を取ることを意味する . また各変数 m_1, m_2, \dots は, それぞれ χ 自由度を持つ . テンソル次元 χ は MPS の場合と同様, 非物理的な内部自由度である . しかしながら, テンソルの要素が変分パラメータであると見なせば, やはり χ を系統的に増加することで変分波動関数の精度をコントロールすることができる .

TPS の構造と面積則の関係を図 1.1 に示す . 二次元正方格子を考え, 点線で囲まれた領域が部分系, その外側がトレースアウトする環境自由度である . 各ボンド上には maximally entangled pair が導入されており, そのエントロピーは $\log \chi$ であるとする . 境界の長さは, ちょうど点線で分断されたエンタングルメント対の数 N_{bond} となる . このとき, エンタングルメント・エントロピーは

$$S = N_{bond} \log \chi \propto L^{d-1} \log \chi \quad (1.32)$$

で与えられる . すなわち, TPS (高次元系に対する PEPS) は面積則を満たすので, 非臨界系に対して適した変分関数であることが分かる .

1.5 階層的テンソル積状態

1.5.1 エンタングルメントくりこみ群 (MERA)

PEPS (MPS, TPS) は, テンソル次元 χ を十分大きくしていけば原理的には任意の状態を記述することができる. 一方, 臨界系の精密計算には $\chi = O(L)$ が必要で, PEPS 形式自体を改良する必要がある. 具体的にエントロピーの対数補正を記述可能な形式は, マルチスケール・エンタングルメントくりこみ群 (Multiscale Entanglement Renormalization Ansatz, MERA) と呼ばれている [26].

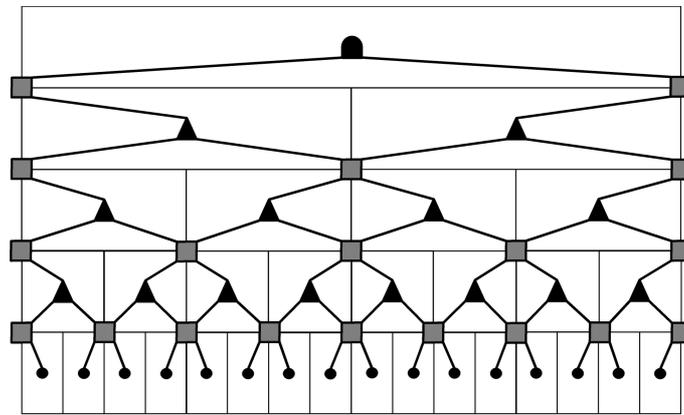


図 1.2: MERA ネットワーク

図 1.2 が $d = 1$ に対する基本的な MERA のテンソルネットワークである. 最下段の s_i がオリジナルのスピン自由度, U が 3 つ足テンソル (isometry), V がユニタリーな 4 つ足テンソル (disentangler, entangler) である. 横方向が空間方向で, テンソルは縦方向に伸びていることに特徴がある. すなわち, MERA は $d + 1$ 次元のテンソルネットワークである. 縦方向がくりこみ群の方向に対応していることが MERA の名前の由来である. $d > 1$ のネットワークが通常の実空間くりこみに対応する.

具体的な例を用いて各テンソルの機能を調べよう. 図 1.3 左に示した状態 (ツリー・テンソルネットワーク) は

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &= \sum_{s_1, s_2, s_3, s_4} \sum_{\beta_1, \beta_2} (w_1)_{\beta_1}^{s_1 s_2} (w_2)_{\beta_2}^{s_3 s_4} T^{\beta_1 \beta_2} |s_1 s_2 s_3 s_4\rangle \\
 &= \sum_{\beta_1, \beta_2} T^{\beta_1 \beta_2} |\beta_1\rangle \otimes |\beta_2\rangle
 \end{aligned} \tag{1.33}$$

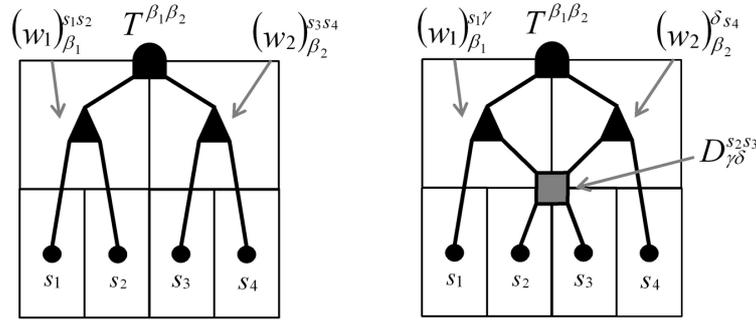


図 1.3: ツリー・テンソル (左) と MERA ネットワーク (右) の比較

と表される。ただし

$$|\beta_j\rangle = \sum_{s_1, s_2} (w_j)_{\beta_j}^{s_1 s_2} |s_1 s_2\rangle \quad (1.34)$$

と定義した。各テンソルが実空間くりこみのプロセスを表していることは視覚的に明らかであろう。

一方、図 1.3 右にあるように、途中に を挿入したネットワークは

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1, s_2, s_3, s_4} \sum_{\beta_1, \beta_2} \sum_{\gamma, \delta} (w_1)_{\beta_1}^{s_1 \gamma} (w_2)_{\beta_2}^{\delta s_4} D_{\gamma\delta}^{s_2 s_3} T^{\beta_1 \beta_2} |s_1 s_2 s_3 s_4\rangle \quad (1.35)$$

と表される。がない場合、 (s_1, s_2) ペアと (s_2, s_3) ペアが非等価であるため、実空間くりこみによって (s_2, s_3) ペアの相関が破壊されてしまう。それを補正するのが の役割である。その役割を定量的に見るために、テンソルを次のように特異値分解しよう。

$$D_{\gamma\delta}^{s_2 s_3} = D_{(\gamma s_2)(\delta s_3)} = \sum_{i=1}^{\chi} U_i(\gamma s_2) \lambda_i V_i(\delta s_3) \quad (1.36)$$

このとき

$$|\beta_1\rangle_i = \sum_{s_1, s_2, \gamma} U_i(\gamma s_2) (w_1)_{\beta_1}^{s_1 \gamma} |s_1 s_2\rangle \quad (1.37)$$

$$|\bar{\beta}_2\rangle_i = \sum_{s_3, s_4, \delta} V_i(\delta s_3) (w_2)_{\beta_2}^{\delta s_4} |s_3 s_4\rangle \quad (1.38)$$

とおくと、状態ベクトルは

$$|\psi\rangle = \sum_{\beta_1, \beta_2} T^{\beta_1 \beta_2} \sum_{i=1}^{\chi} \lambda_i |\beta_1\rangle_i \otimes |\bar{\beta}_2\rangle_i \quad (1.39)$$

と表される。したがって、くりこんだ有効サイト間に非自明な相関が生じており、くりこみ操作におけるサイトの取り扱いの非対称性を緩和していることが分かる。

1.5.2 因果円錐 (Causal Cone)

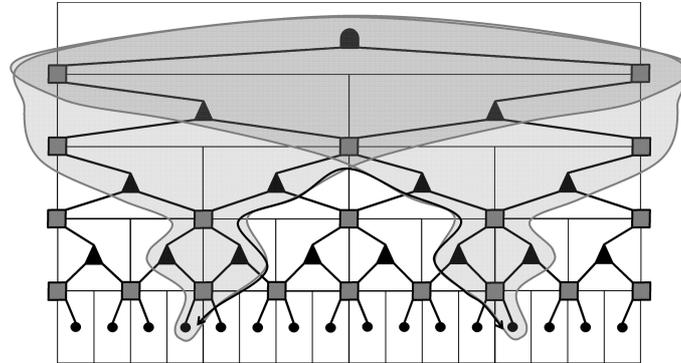


図 1.4: 因果円錐

図 1.4 の色で示した領域あるいはその間の領域は因果円錐 (causal cone) と呼ばれている。二つの離れたサイト間の量子相関は、二つのコーンが交わる領域の最小の距離で特徴づけられる。くりこみで有効サイトは指数関数的に減少するので、2 サイト間の距離が L であれば、コーンが交わる層までの距離は $\log L$ のオーダーになる。これが一次元臨界系における面積則の対数的破れと関係している。

そこで MERA ネットワークにおけるエンタングルメント・エントロピーのスケール関係式を考えよう。MERA ネットワークにおけるエントロピーは、各層での境界におけるエンタングルメント・エントロピーの和で与えられることが知られている。実際に、空間一次元系の場合で具体的に計算してみると、

$$S = \underbrace{1 + 1 + 1 + \cdots + 1}_{\log L \text{ 層}} \sim \log L \quad (1.40)$$

となり、対数補正が現れる。一方、空間二次元系の場合には、周長 L の正方形から出発すると

$$S_n = L + \frac{1}{2}L + \left(\frac{1}{2}\right)^2 L + \cdots + \left(\frac{1}{2}\right)^n L = 2L - \left(\frac{1}{2}\right)^n L \rightarrow 2L \quad (1.41)$$

また三次元系では、一辺 L の立方体から出発すると

$$S_n = 6L^2 + 6\frac{1}{4}L^2 + 6\left(\frac{1}{4}\right)^2 L^2 + \cdots \rightarrow 8L^2 \quad (1.42)$$

となり、面積則 $S \sim L^{d-1}$ を満たすことが分かる。

第2章 量子論理回路（テンソル・ネットワーク）の多様な演算機能

この一部は元々、高専の学生達向けの講義で使っていたノートだったのであるが、今読み返せば、局所構造を持ったり（量子フーリエ変換）持たなかったり（グローバー・アルゴリズム）の違いはあるものの、結局は階層的なユニタリ回路だったようである。教えていて最近まで気づかなかった...。基礎勉強のためには参考文献 [27, 28] をお勧めする（論文の多くは Physical Review などに掲載されているが、物理屋の観点からするとちょっと読みにくいところがある）。

2.1 量子計算アルゴリズムの歴史的経緯

量子的な論理回路に基づくアルゴリズムの研究は、1990年代に進展している。これはまさに我々の分野でテンソルネットワークと呼んでいるものに深く関わるものである。従って、これらの手法を詳細に理解することで、PEPS や MERA の理解が一層深まると期待される。有名なものをおおよそ時系列順に挙げると、

- Deutsch 問題 (1985)
- Deutsch-Jozsa アルゴリズム (1992)
- Bernstein-Vazirani アルゴリズム (1993)
- Simon アルゴリズム (1994)
- 量子フーリエ変換ゲート
- 位相推定・位数発見アルゴリズム
- 量子素因数分解 (1995)
- 量子探索アルゴリズム (1996)

などである．以降の節ではこれらの中で MERA などと同じ階層型の論理回路に着目する．それは量子フーリエ変換と量子探索アルゴリズムである．

上記の問題に加えて，量子通信プロトコル，量子テレポーテーション，誤り訂正アルゴリズムなどもその発展型として重要である．また最近では，量子アニーリング，Dウェーブ，量子ウォークなどにも進展が見られる．

2.2 量子論理ゲートとエンタングルメント・ウェーブレットとの関わり

量子アルゴリズムに頻出する重要公式は，量子フーリエ変換・アダマール変換・位相キックバックなどの組み合わせで構成される．この中でも，アダマール変換が本稿で重要な広帯域・低域フィルターに対応していることはすぐに分かる．

n キュービット ($N = 2^n$) に対するアダマール変換 $H^{\otimes n}$ は次のような量子論理ゲートのことである：

$$|x\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{y=0}^{N-1} (-1)^{xy} |y\rangle \quad (2.1)$$

特に量子ビットが $n = 1$ ($N = 2$) のとき，次のような変換となる：

$$|x\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + (-1)^x |1\rangle) \quad (2.2)$$

行列 H で表せば

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

となる．つまりこれはハール・ウェーブレット変換に等しいことが分かる．また純粋状態 $|x\rangle$ をエンタングルした状態 $|0\rangle + (-1)^x |1\rangle$ に変換することでもある．このような極めて基礎的な演算に，我々が理解したい問題のエッセンスが込められている．エンタングルメントやフィルタリングを自在に駆使して望みの演算を行うのが量子論理回路であるので，それは殆どそのまま我々の多体電子論にもあてはまる問題意識である．

* おそらく重要なことは，アダマールゲートが単にエンタングルメントを作り出すだけでなく，それと同時に高エネルギー・低エネルギーへの状態の分解を自然に行っていることであろうと思われる．

2.3 階層型ネットワークの具体例

ここではくりこみ群と階層型テンソルネットワークに特に興味があるので、上記に示した色々な量子アルゴリズムの中でも、階層型と呼んでよいものについてまとめる。ここで導入される技術は、MERA の理解にも重要なことであるので、異なる幾つかの問題で慣れて頂きたい。

2.3.1 高速フーリエ変換のユニタリー・ネットワーク

離散データ f_j ($j = 0, 1, \dots, N - 1$) のフーリエ変換は

$$F(k) = \sum_{j=0}^{N-1} e^{i(2\pi k/N)j} f_j \quad (2.4)$$

と表される。古典的データ f_j の代わりに量子状態 $|f_j\rangle$ を用いれば

$$|F(k)\rangle = \sum_{j=0}^{N-1} e^{i(2\pi k/N)j} |f_j\rangle \quad (2.5)$$

と表され、これは量子フーリエ変換と呼ばれる。

数値計算の演習でよく学ぶ高速フーリエ変換 (FFT) のバタフライ演算は典型的な階層型ユニタリーネットワークである。これは行列で表現するとよく分かる (最近、文献 [29,30] で議論がされているが、ずいぶん前からあるように思われる)。具体的に $N = 4$ の場合で調べてみよう。

計算を見やすくするために、1 の N 乗根を ω_N と表す。このとき $(\Omega_N)_{kj} = e^{i(2\pi k/N)j}$ を成分とする $N \times N$ 行列 Ω_N を考えると、

$$\begin{pmatrix} F(0) \\ F(1) \\ F(2) \\ F(3) \end{pmatrix} = \Omega_4 \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & \omega_4^2 & \omega_4 & \omega_4^3 \\ 1 & 1 & \omega_4^2 & \omega_4^2 \\ 1 & \omega_4^3 & \omega_4^3 & \omega_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

となるが、偶数と奇数の添え字を持つ f_1, f_2 を入れ替えると

$$\begin{pmatrix} F(0) \\ F(1) \\ F(2) \\ F(3) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & \omega_4 & \omega_4^2 & \omega_4^3 \\ 1 & \omega_4^2 & 1 & \omega_4^2 \\ 1 & \omega_4^3 & \omega_4^3 & \omega_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_0 \\ f_2 \\ f_1 \\ f_3 \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

と表すことができる．これは次のように分解できることに気づく：

$$\begin{pmatrix} F(0) \\ F(1) \\ F(2) \\ F(3) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \omega_4 \\ 1 & 0 & \omega_4^2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \omega_4^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & \omega_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & \omega_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_0 \\ f_2 \\ f_1 \\ f_3 \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

つまり，

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & \omega_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & \omega_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Omega_2 & \\ & \Omega_2 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

となるので，半分のサイズのデータ（フーリエ空間ではより解像度の粗いデータ）のフーリエ変換の入れ子構造を持っていることが分かる．つまりこのアルゴリズムは階層的なネットワークを構成している．

この性質は一般的に成り立っており，その原理は次のように証明することができる． $N = PQ = Q^k$ ($P = Q^{k-1}$) とする． N 次離散量子フーリエ変換

$$|F(n)\rangle = \sum_{k=0}^{N-1} e^{-i(2\pi n/N)k} |f(k)\rangle \quad (2.10)$$

を $n = 0, 1, \dots, N-1$ について計算することを考える．ここでパラメータを以下のように書き換える．

$$n = sQ + r, \quad 0 \leq s \leq P-1, \quad 0 \leq r \leq Q-1 \quad (2.11)$$

$$k = qP + p, \quad 0 \leq p \leq P-1, \quad 0 \leq q \leq Q-1 \quad (2.12)$$

ただし $0 \leq k \leq N-1$ とする．このとき

$$\begin{aligned} |F(n)\rangle &= |F(sQ + r)\rangle \\ &= \sum_{p=0}^{P-1} \sum_{q=0}^{Q-1} \exp \left\{ -2\pi i \frac{(qP + p)(sQ + r)}{PQ} \right\} |f(qP + p)\rangle \\ &= \sum_{p=0}^{P-1} \sum_{q=0}^{Q-1} \exp \left\{ -2\pi i \left(\frac{rq}{Q} + \frac{sp}{P} + \frac{pr}{PQ} \right) \right\} |f(qP + p)\rangle \\ &= \sum_{p=0}^{P-1} \exp \left\{ -2\pi i \left(\frac{sp}{P} + \frac{pr}{PQ} \right) \right\} \sum_{q=0}^{Q-1} e^{-2\pi i rq/Q} |f(qP + p)\rangle \quad (2.13) \end{aligned}$$

と変形できる．すなわち Q 次のフーリエ変換（+位相シフト）

$$|f_1(p, r)\rangle = e^{-2\pi i pr/PQ} \sum_{q=0}^{Q-1} e^{-2\pi i rq/Q} |f(qP + p)\rangle \quad (2.14)$$

を先ず行い, 続いて P 次のフーリエ変換

$$|F(sQ + r)\rangle = \sum_{p=0}^{P-1} e^{-2\pi i s p / P} |f_1(p, r)\rangle \quad (2.15)$$

を行えばよい. この方法で次数を下げながら k 段階繰り返せば最低次まで計算を落とすことができる.

2.3.2 Grover 検索アルゴリズム

N 個のファイルがあり, その中から目当てのファイルを 50 パーセントの成功確率で探し出したい. 古典的には最低 $N/2$ ステップの検索が必要だが, 量子並列性と干渉効果をうまく使うと, \sqrt{N} 程度の量子ステップ数で正しいファイルを検出できる [31].

N 個の互いに直交する状態 $|n\rangle$ から, ある状態 $|p\rangle$ を検索したいとする. 始状態を

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N |n\rangle \quad (2.16)$$

と仮定し, 次のユニタリ演算子を導入する:

$$U_p = 1 - 2|p\rangle\langle p| \quad (2.17)$$

$$U_\Psi = 2|\Psi\rangle\langle\Psi| - 1 \quad (2.18)$$

U_p は状態 $|p\rangle$ の符号を変える演算子, U_Ψ は始状態を変えない演算である. 始状態は次のように表される:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} |p\rangle + \sqrt{\frac{N-1}{N}} |\Psi'\rangle = \sin\theta |p\rangle + \cos\theta |\Psi'\rangle \quad (2.19)$$

これにユニタリ演算 U_p, U_Ψ を施すと

$$U_p |p\rangle = -|p\rangle \quad (2.20)$$

$$U_p |\Psi'\rangle = |\Psi'\rangle \quad (2.21)$$

$$U_\Psi |p\rangle = -\cos 2\theta |p\rangle + \sin 2\theta |\Psi'\rangle \quad (2.22)$$

$$U_\Psi |\Psi'\rangle = \sin 2\theta |p\rangle + \cos 2\theta |\Psi'\rangle \quad (2.23)$$

従って,

$$U_p |\Psi\rangle = -\sin\theta |p\rangle + \cos\theta |\Psi'\rangle \quad (2.24)$$

$$(U_p U_\Psi) U_p |\Psi\rangle = -\sin 3\theta |p\rangle + \cos 3\theta |\Psi'\rangle \quad (2.25)$$

数学的帰納法より

$$(U_p U_\Psi)^k U_p |\Psi\rangle = -\sin(2k+1)\theta |p\rangle + \cos(2k+1)\theta |\Psi'\rangle \quad (2.26)$$

が証明できる． k を量子ステップ数と呼ぶ．したがって

$$(2k+1)\theta = \frac{\pi}{2} \quad (2.27)$$

に最も近い整数 k を選べば，1 に近い確率で状態 $|p\rangle$ を取り出すことができる． $N \rightarrow \infty$ の場合には $\theta \sim 1/\sqrt{N}$ なので

$$k \sim \frac{\pi}{4} \sqrt{N} \ll N \quad (2.28)$$

であることが分かる．

2.4 MERA ネットワーク

2.4.1 MERA ネットワークの量子回路表現

次の章で議論する準備のために，MERA ネットワークをユニタリー演算回路とみなしたときの性質について調べよう [32]．最も簡単な 4 サイト系について考える．系は自由電子でも局在スピン系でもよく，計算基底をサイト自由度として，そのテンソル積でヒルベルト空間を張る．開放端条件における変分波動関数は

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1, s_2, s_3, s_4} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\gamma, \delta} T^{\gamma\delta} L_\gamma^{s_1\alpha} R_\delta^{s_4\beta} U_{\alpha\beta}^{s_2 s_3} |s_1 s_2 s_3 s_4\rangle \quad (2.29)$$

と表される． T がトップ・テンソル， L, R がアイソメトリー・テンソル， U がエンタングラー・テンソルである．

上記の波動関数を以下のように変形することを考える：

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\gamma, \delta} T^{\gamma\delta} \left(\sum_{s_1} L_\gamma^{s_1\alpha} |s_1\rangle \right) \otimes \left(\sum_{s_2, s_3} U_{\alpha\beta}^{s_2 s_3} |s_2 s_3\rangle \right) \otimes \left(\sum_{s_4} R_\delta^{s_4\beta} |s_4\rangle \right) \quad (2.30)$$

MERA の階層構造を念頭に置いて，これを

$$T \implies L \otimes R \implies 1 \otimes U(\theta) \otimes 1 \quad (2.31)$$

というくりこみフローの逆の流れと見る．つまり，トリビアルな（エンタングルメントの小さい古典的な）状態から出発して， U によってエンタングルメントの強い境界状態を構成することを考える．

今、有限系を考えているので、くりこみ固定点の性質を見ても、有限サイズによるカットオフが自然に入る。つまり、有限系では MERA ネットワークの上部は必ずしもキャップしなくて良い。そこで

$$|\psi\rangle \simeq \sum_{\alpha,\beta} \left(\sum_{s_1} L^{s_1\alpha} |s_1\rangle \right) \otimes \left(\sum_{s_2,s_3} U_{\alpha\beta}^{s_2s_3} |s_2s_3\rangle \right) \otimes \left(\sum_{s_4} R^{s_4\beta} |s_4\rangle \right) \quad (2.32)$$

と近似を試みる (γ, δ は特定の状態のみ取るとした)。これは U に特異値分解を施せば実質的には MPS なのであるが、それは考えている系が小さすぎるため、ここで言いたいことは、上記で述べたフローの構造に従ってエンタングルメントを導入したときの時系列変化を見たいということである。これを MPS と見なすと L, U, R は等価に扱われるが、ここでは先に L, R を T に演算し、続いて U を演算するという順序を導入するということである。また U にユニタリー変換、 L, R にアイソメトリという明確な構造を入れるということでもある。

今、階層的ユニタリー回路を考える立場を取っていて $\alpha, \beta = 0, 1$ であり、つまり $|\psi\rangle$ は今の近似では $\chi = 2$ の MPS である。 $\chi = 2$ は 2 スピンの場合の正確なエンタングルメントしか表せないのが正しい表現である。ただここで導入した見方は後で分かりやすいので、トップ・テンソルを無視してしまった影響は後程言及することにする。

周期境界条件の場合には $|s_1\rangle$ と $|s_4\rangle$ にもエンタングラーが入る。

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1, s_2, s_3, s_4} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\gamma, \delta} \sum_{a, b} T^{\gamma\delta} U_{ab}^{s_4s_1} L_{\gamma}^{a\alpha} R_{\delta}^{b\beta} U_{\alpha\beta}^{s_2s_3} |s_1s_2s_3s_4\rangle \quad (2.33)$$

この場合には階層的表現のために少し工夫がいるが、スワップ・ゲート（あるいは置換演算）

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad S(|s\rangle \otimes |s'\rangle) = |s'\rangle \otimes |s\rangle \quad (2.34)$$

を導入して

$$(S \otimes S) \cdot (1 \otimes U(\theta) \otimes 1) \cdot (S \otimes S) \cdot (1 \otimes U(\theta) \otimes 1) \cdot (L \otimes R) \quad (2.35)$$

とすればよい。ここで二つのユニタリー演算は等価であると仮定した。本当は違う角度にして調整した方が良い変分状態になる可能性があるが、ここでは簡単のためにこのままにしておく（スケール不変 MERA などを想定している）。 $S \otimes S$

によってスワップして, $|s_1\rangle$ と $|s_4\rangle$ に対して $1 \otimes U(\theta) \otimes 1$ の形の素朴な演算ができるようにしている. この技法は可解模型でヤン・バクスター方程式に関わるところには頻出するのだが, これも「スワップ・ゲート」と呼んだ瞬間にドライなものに変化して, 認識が変わるものの典型例であって非常に面白い.

置換演算子は殆どハイゼンベルグ模型のハミルトニアンであるので, スワップを繰り返す操作はランチョス法や運動方程式の展開と少なからず関係がある. このことは, 運動方程式で作られる複合励起演算子にくりこみ的な構造が自然に備わっていることを示唆している.

各演算層を行列で表現する. 先ず $L \otimes R$ は

$$\begin{pmatrix} L^{00} \\ L^{01} \\ L^{10} \\ L^{11} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} R^{00} \\ R^{01} \\ R^{10} \\ R^{11} \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

である. アイソメトリーの条件から

$$(L^{00})^2 + (L^{01})^2 + (L^{10})^2 + (L^{11})^2 = 1 \quad (2.37)$$

$$(R^{00})^2 + (R^{01})^2 + (R^{10})^2 + (R^{11})^2 = 1 \quad (2.38)$$

が成り立つ. ちなみに 16 個の基底は

$$\begin{array}{l} 0000 \\ 0001 \\ 0010 \\ 0011 \\ 0100 \\ 0101 \\ 0110 \\ 0111 \\ 1000 \\ 1001 \\ 1010 \\ 1011 \\ 1100 \\ 1101 \\ 1110 \\ 1111 \end{array} \quad (2.39)$$

と並んでいる. 添え字 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ もこれにしたがっている. つぎに $1 \otimes U(\theta) \otimes 1$ は

ユニタリ変換であることから

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_8 & 0 \\ 0 & R_8 \end{pmatrix} \quad (2.40)$$

と表せる(ここでは粒子数・スピン量子数は変えない変換だけを考える)。ただし

$$\begin{aligned} R_8 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \theta & 0 & \sin \theta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos \theta & 0 & \sin \theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sin \theta & 0 & \cos \theta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\sin \theta & 0 & \cos \theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.41) \end{aligned}$$

とした。これもテンソル積を正しく計算すれば、基底の並びからは上記に従っていることが分かる。

以上より変分波動関数は

$$|\psi\rangle = (S \otimes S) \begin{pmatrix} R_8 & \\ & R_8 \end{pmatrix} (S \otimes S) \begin{pmatrix} R_8 & \\ & R_8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} W_L \\ W_R \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

となる。ただし W_L, W_R は

$$W_L = \begin{pmatrix} L^{00} R^{00} \\ L^{00} R^{01} \\ L^{00} R^{10} \\ L^{00} R^{11} \\ L^{01} R^{00} \\ L^{01} R^{01} \\ L^{01} R^{10} \\ L^{01} R^{11} \end{pmatrix}, \quad W_R = \begin{pmatrix} L^{10} R^{00} \\ L^{10} R^{01} \\ L^{10} R^{10} \\ L^{10} R^{11} \\ L^{11} R^{00} \\ L^{11} R^{01} \\ L^{11} R^{10} \\ L^{11} R^{11} \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

と定義した．ここで $S \otimes S$ は

$$S \otimes S = \begin{pmatrix} S & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S & 0 \\ 0 & S & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

となることが分かる．したがって，

$$\begin{pmatrix} S & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S & 0 \\ 0 & S & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} R_8 & 0 \\ 0 & R_8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} R_8 & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ S & 0 \end{pmatrix} R_8 \\ \begin{pmatrix} 0 & S \\ 0 & 0 \end{pmatrix} R_8 & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & S \end{pmatrix} R_8 \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

より

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} |\psi_L\rangle \\ |\psi_R\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} R_8 & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ S & 0 \end{pmatrix} R_8 \\ \begin{pmatrix} 0 & S \\ 0 & 0 \end{pmatrix} R_8 & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & S \end{pmatrix} R_8 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} W_L \\ W_R \end{pmatrix} \quad (2.46)$$

が得られる． $|\psi_L\rangle$ と $|\psi_R\rangle$ の対称性から $|\psi_L\rangle$ のみ考えるとして，これは以下のよう
に評価できる．

$$\begin{aligned} |\psi_L\rangle &= \left[\begin{pmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} R_8 \begin{pmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} R_8 + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ S & 0 \end{pmatrix} R_8 \begin{pmatrix} 0 & S \\ 0 & 0 \end{pmatrix} R_8 \right] W_L \\ &+ \left[\begin{pmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} R_8 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ S & 0 \end{pmatrix} R_8 + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ S & 0 \end{pmatrix} R_8 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & S \end{pmatrix} R_8 \right] W_R \end{aligned} \quad (2.47)$$

鍵括弧の部分をも具体的に成分表示すると

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c & 0 & s & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c^2 & 0 & cs & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -s & 0 & c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -cs & 0 & c^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c \end{pmatrix} W_L + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ s & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & cs & 0 & s^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -s^2 & 0 & cs & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s & 0 \end{pmatrix} W_R \quad (2.48)$$

となる．ただし $c = \cos \theta, s = \sin \theta$ と略記した．0011 と 0101 が混成してエンタングルメント・エントロピーが増加していることが分かる．これはエンタングラーでシングレットを作ろうとする操作に対応する．対称性から

$$(W_L)_h = (W_R)_{8-h}, \quad h = 1, 2, \dots, 8 \quad (2.49)$$

であることを考慮して並び順を入れ替えて足しあげると，

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s \\ 0 & 0 & c & 0 & s & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 2cs & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -s & 0 & c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c^2 - s^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & s & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L^{00}R^{00} \\ L^{00}R^{01} \\ L^{00}R^{10} \\ L^{00}R^{11} \\ L^{01}R^{00} \\ L^{01}R^{01} \\ L^{01}R^{10} \\ L^{01}R^{11} \end{pmatrix} \quad (2.50)$$

となる

ここで例えば $L^{00} = R^{00} = R^{11} = 0$ と仮定すると

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & s \\ 0 & 0 & c & 0 & s & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 2cs & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -s & 0 & c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c^2 - s^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & s & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ L^{01}R^{01} \\ L^{01}R^{10} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 2csL^{01}R^{01} \\ 0 \\ (c^2 - s^2)L^{01}R^{01} \\ L^{01}R^{10} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.51)$$

が得られる．演算回路を通すと最初は係数がゼロだった基底 0011 が有限に混成するので，明らかにエンタングルメント・エントロピーは増加していることが分かる．

2.4.2 厳密対角化との比較

変数 θ を変分パラメータと見たときに，この波動関数がどれだけ正確かということ調べるために，4サイトの反強磁性ハイゼンベルグ模型 ($S_z^{tot} = 0$)

$$H = \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_3 + \vec{S}_3 \cdot \vec{S}_4 \quad (2.52)$$

を対角化し，厳密な固有値・固有ベクトルを求めてみる．周期境界条件の場合のハミルトニアン行列は

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & -1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -1 & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow \\ \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \\ \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow \\ \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow \\ \downarrow\uparrow\downarrow\uparrow \\ \downarrow\downarrow\uparrow\uparrow \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 0011 \\ 0101 \\ 0110 \\ 1001 \\ 1010 \\ 1100 \end{pmatrix} \quad (2.53)$$

で与えられる．この基底状態は解析的に求めることができ

$$|\psi\rangle = A|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + B|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + C|\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + D|\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + E|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + F|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \quad (2.54)$$

に対して

$$A = 1, B = -2, C = 1, D = 1, E = -2, F = 1 \quad (2.55)$$

という係数を持つ（最後に波動関数の規格化は必要）．これは RVB 状態

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - 2|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - 2|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\ &= (|\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_4 - |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_4) (|\uparrow\rangle_2 \otimes |\downarrow\rangle_3 - |\downarrow\rangle_2 \otimes |\uparrow\rangle_3) \\ &\quad + (|\uparrow\rangle_1 \otimes |\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1 \otimes |\uparrow\rangle_2) (|\uparrow\rangle_3 \otimes |\downarrow\rangle_3 - |\downarrow\rangle_3 \otimes |\uparrow\rangle_3) \end{aligned} \quad (2.56)$$

で書き直すことができる．一方，開放端条件の場合には手動で対角化することは難しいので，ハウスホルダー法で対角化すると

$$A = 0.149429, B = -0.557678, C = 0.408248 \quad (2.57)$$

$$D = 0.408248, E = -0.557678, F = 0.149429 \quad (2.58)$$

が得られる（規格化済み）．

前節の変分関数はこの基底状態と同じ基底にノンゼロの係数を持つことが分かる．実際に，

$$A = 2csL^{01}R^{01}, B = (c^2 - s^2)L^{01}R^{01}, C = L^{01}R^{10} \quad (2.59)$$

と対応する． $r = -R^{01}/R^{10}$ とおくと，規格化因子を除いて

$$A = r \sin(-2\theta), B = -r \cos(-2\theta), C = 1 \quad (2.60)$$

と簡略化できる．具体的には

$$\sin(-2\theta) = \frac{1}{\sqrt{5}}, \cos(-2\theta) = \frac{2}{\sqrt{5}}, r = \sqrt{5} \quad (2.61)$$

となるので, θ を決めることができる.

ちなみに, $\theta = -5\pi/12$ というユニタリ変換が後の MERA の研究で出てくるが,

$$\sin\left(\frac{5}{6}\pi\right) = \frac{1}{2}, \quad \cos\left(\frac{5}{6}\pi\right) = \frac{\sqrt{3}}{2} \quad (2.62)$$

であるので, 厳密解の比率に比較的近いことが分かる. ここにも何か Daubechies D4 ウェーブレットの片鱗が見え隠れしている.

なお, トップ・テンソルの添え字の自由度を $\gamma, \delta = 0.1$ に拡張した場合には

$$L^{01}R^{01} \rightarrow L_0^{01}(T_{00}R_0^{01} + T_{01}R_1^{01}) + L_1^{01}(T_{10}R_0^{01} + T_{11}R_1^{01}) \quad (2.63)$$

および

$$L^{01}R^{10} \rightarrow L_0^{01}(T_{00}R_0^{10} + T_{01}R_1^{10}) + L_1^{01}(T_{10}R_0^{10} + T_{11}R_1^{10}) \quad (2.64)$$

と変更すればよい. 変分パラメータが増えるので, より細かいコントロールはできそうである.

第3章 くりこみ群および階層型テンソルネットワークとウェーブレットの関わり

階層型テンソルネットワーク形式は実空間くりこみ群なので、フーリエ変換よりはむしろウェーブレット変換と相性が良い。加えて、強相関電子系では波動的性質よりは粒子的性質が顕在化してくるので、実空間表現が好ましい。そこで、これらの関わりあいを調べようという流れは自然である。この数年、ウェーブレット的な見方が重要となりつつある。

3.1 指数変形による波束の形成

双曲的に曲がった座標系上での量子論、くりこみ群、波束の形成などは、物性理論サイドでもその関連性が指摘されている。ここではその概略について述べる。

格子変形の問題として有名なものは、近藤模型に対する Wilson のくりこみ群的アプローチである。近藤模型は金属電子と不純物スピンの相互作用する量子多体系である。そこでは空間座標に対して指数関数的に変化する変形因子を導入することで、赤外発散の正則化を行うことが格子変形の主な機能である。つまり格子変形が臨界系に対するくりこみ群におけるスケールフリー性を特徴づけていることが重要なことである。以下ではこのときの波動関数の性質について注目して見ていく [33]。

指数変形された自由フェルミオンのハミルトニアンは

$$H_\lambda = \sum_{n=1}^{N-1} e^{\lambda n} \left(c_{n+1}^\dagger c_n + c_n^\dagger c_{n+1} \right) \quad (3.1)$$

と表される（ここでは二重交換相互作用は考えなくても本質が抽出できるので、上記のような自由フェルミオンを考える）。ここでは一粒子状態

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi_n c_n^\dagger |0\rangle \quad (3.2)$$

を考えるとすると、波動方程式 $H_\lambda |\psi\rangle = E |\psi\rangle$ は

$$e^{-\lambda}\psi_{n-1} + \psi_{n+1} = Ee^{-\lambda n}\psi_n \quad (3.3)$$

と表される．ここで

$$\psi_n = e^{-\lambda n/2}\phi_n \quad (3.4)$$

と変形すると、 ϕ_n は

$$\phi_{n-1} + \phi_{n+1} = \bar{E}e^{-\lambda n}\phi_n \quad (3.5)$$

を満たす．ただし

$$\bar{E} = Ee^{\lambda/2} \quad (3.6)$$

と定義した．

ここで格子点を $n = i + j$ と表して

$$\phi_{i+j} \rightarrow \phi_i \quad (3.7)$$

とシフトすると、

$$\phi_{i-1} + \phi_{i+1} = \bar{E}e^{-\lambda(i+j)}\phi_i \quad (3.8)$$

となることが分かる．つまり並進操作に対してエネルギー固有値を

$$\bar{E}e^{-\lambda j} \rightarrow \bar{E} \quad (3.9)$$

と置き換えれば、波動方程式は不変に保たれることが分かる．言い換えると、波動関数の並進操作は、その並進の量 j に応じて $e^{-\lambda j}$ だけスケールされたエネルギー固有値と一対対応があるということである．したがって波動方程式の解が一つ求まると、並進操作とエネルギーのリスケールで他の固有状態も構成することが可能である．

波動方程式の $\lambda = 0$ の解はもちろん平面波であるが、それが $\lambda > 0$ に対してどのように変形されるか見てみよう．そのために、式 (3.5) の連続極限をとる． $x = \lambda n$ とすると、

$$\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) = \frac{d}{dx} \frac{\phi(x+\lambda) - \phi(x)}{\lambda} = \frac{\phi(x+\lambda) - 2\phi(x) + \phi(x-\lambda)}{\lambda^2} \quad (3.10)$$

と表せるので、式 (3.5) の連続極限は

$$\lambda^2 \frac{d^2}{dx^2}\phi(x) + (2 - \bar{E}e^{-x})\phi(x) = 0 \quad (3.11)$$

となる． $x \rightarrow x + a$ と並進して $\bar{E}e^{-a} \rightarrow \bar{E}$ とリスケールすれば，離散系の場合と同様に波動方程式は不変である．これは Bessel の微分方程式であるので，解は (変形) Bessel 関数となる．したがって有限の λ を導入することで波束が形成される．このことは，解が局在的になることで，有限サイズ効果が顕著に現れる境界の影響が非常に弱くなるということを示唆している．

3.2 「二原子分子の軌道混成」を信号処理分野では結局「ハール・ウェーブレット」あるいは「アダマール変換」と呼んでいるらしい

一度ウェーブレットということ強く意識すると，二原子分子のような極めて簡単な問題に，既にウェーブレットというかフィルタリングの芽生えがあることが分かる．そうするとこれもまたエンタングルメントの極めて基礎的な性質であるということがよく理解できる．局所的な軌道構成を繰り返して次第にバルクのバンド構造を追っていくような分子論からの一種ボトムアップ的な香りが感じられる．そういうものかと思って眺めると，MERA のネットワークによるくりこみがようやく俯瞰的に見えた気がした（ホログラフィーでもそのような認識はあったわけだが，何だか妙に腑に落ちたという感覚．多分具体的な解析計算が伴っているからだろうと思う）．昔はちょっと疎遠だった論理回路も急に親しみのあるものになってきた感がある（工学部生時代の教科書を取り出したりする...）．

皆さんが物理化学で最初に習った二つの原子軌道が接近して分子軌道を作る問題を考える．系に電子は1つあるとして，いずれかの軌道に属するサイト基底を取ると，ハミルトニアン行列は

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon & -t \\ -t & \epsilon \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

となり，二つの固有状態（結合性軌道と反結合性軌道）は

$$|h\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad E_h = \epsilon - t \quad (3.13)$$

$$|g\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad E_g = \epsilon + t \quad (3.14)$$

と表される．ウェーブレットを意識して $|h\rangle$ や $|g\rangle$ などと表す．そうするとこれらは結局，計算基底を

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

ととれば

$$|h\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = h_0 |0\rangle + h_1 |1\rangle \quad (3.16)$$

$$|g\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = g_0 |0\rangle + g_1 |1\rangle \quad (3.17)$$

ということなので，

$$\begin{pmatrix} |h\rangle \\ |g\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_0 & h_1 \\ g_0 & g_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |0\rangle \\ |1\rangle \end{pmatrix} = W_2 \begin{pmatrix} |0\rangle \\ |1\rangle \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

とハール・ウェーブレット変換で表すことができる．ここでベクトルの成分にベクトルが入っていることは少し注目してよいのかもしれない．代数的ベータ仮説法を思い出すと，この表記で状態をエンタングルさせる機能が可解模型の性質と関係がありそうである．

このときハミルトニアンはどのように変換されたかと言うと勿論対角化されたので，それはつまり，その基底で表したらトリビアルな状態になったわけである．

このような変換をハバード模型のような強相関電子系に拡張できるかは興味のあるところである．クラスター摂動論みたいな感じにして，クラスターのつなぎ目をもうちょっと精密にユニタリ変換してエンタングルさせるのかな... .

3.3 Exact Holographic Mapping (EHM)

3.3.1 EHM

私には前節で議論したような当たり前すぎる例題しか作れなかったのだが，通常のフーリエ変換ではなくハール・ウェーブレット基底で物理系を書き下すことは，例えば文献 [34, 35] で試みられている．これらはあくまでホログラフィーの幾何学を念頭に置いた論文であるが，ウェーブレット解析の応用という意味で非常に分かりやすいので一読することをお勧めする¹．

¹自分がスタンフォードに滞在した時に Ching Hua が Xiao-Liang のところの学生さんで，その時に博士課程の論文としてこの研究をしていました．画像エントロピーの研究プロジェクトに混ぜてほしいと彼から希望があり，共同研究を始めたのもこの滞在がきっかけでした．

EHM は TTN の形式でユニタリ変換を繰り返して境界自由度から有効模型を作る方法である．系が $L = 2^N$ サイトで構成されており，各サイトのヒルベルト空間は n 次元であるとする．

ある 2 サイト (サイト 1 ・ サイト 2 とする) の状態を $|s_1 s_2\rangle$ ($s_1 s_2 = 1, 2, \dots, n$) とラベルし，これを仮想自由度 a (IR に向かうフロー) とバルク自由度 b (バルクの幾何を作る自由度，ここでターミネートされる) に変換するユニタリー演算子を U_{12} と表すと

$$U_{12} |s_1 s_2\rangle = \sum_{t, \alpha=1, \dots, n} U_{s_1 s_2}^{t\alpha} |t\rangle_a \otimes |\alpha\rangle_b \quad (3.19)$$

が得られる．これを全てのサイト対について行くと，

$$V_1 = U_{12} \otimes U_{34} \otimes \dots \otimes U_{2^{N-1}, 2^N} \quad (3.20)$$

が得られる．この操作によって，仮想自由度・バルク自由度の各 2^{N-1} 状態に分解することができる．次に 2^{N-1} 状態の仮想自由度に同様の操作 V_2 を施す．これらの過程を繰り返す．それは次の変換

$$M = V_N V_{N-1} \dots V_1 \quad (3.21)$$

で表すことができる．ここで V_2 は正確には $V_2 \otimes \mathbb{I}$ と考えるべきで， V_2 が仮想自由度に作用し，一方の \mathbb{I} がバルク自由度に作用する恒等演算子である．例えばある直積状態 $|0\rangle = \prod_x |0\rangle_x$ から出発すると，対応する TTN の境界状態は $|\Psi\rangle = M^{-1} |0\rangle$ となり，これはある意味 MERA で通常仮定される変分関数である．

1 次元のフェルミオン模型に上記の考え方を応用するためには，次のようなユニタリー変換を考える：

$$\begin{pmatrix} a_{i,1} \\ b_{i,1} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{2i-1} \\ c_{2i} \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

このイタレーションは

$$\begin{pmatrix} a_{i,n+1} \\ b_{i,n+1} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{2i-1,n} \\ b_{2i,n} \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

によって定義される．バルク演算子と境界演算子は

$$b_x = \sum_i \phi_i^*(x) c_i \quad (3.24)$$

の関係で結ばれているが，これがハール・ウェーブレット変換で表される．

3.3.2 ハール・ウェーブレット

以下では具体的にマッピングの表現を与える．先ずスケーリング方程式は

$$\begin{aligned}
 a_{j,n} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{2j-1,n-1} + a_{2j,n-1}) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{l=4j-3}^{4j} a_{l,n-2} \\
 &= \dots \\
 &= 2^{-n/2} \sum_{l=2^n(j-1)+1}^{2^n j} c_l
 \end{aligned} \tag{3.25}$$

と表せる．またバルクサイトは

$$b_{j,n} = 2^{-n/2} \left[- \sum_{l=2^n(j-1)+1}^{2^n(j-1)+2^{n-1}} c_l + \sum_{l=2^n(j-1)+2^{n-1}+1}^{2^n j} c_l \right] = \sum_l \phi_{j,n}(l) c_l \tag{3.26}$$

となる．この式によって $\phi_{j,n}(l)$ を定義する．これをフーリエ変換すると

$$b_{j,n} = \sum_{q=2\pi n/2^N, n=1,2,\dots,2^N} \phi_{j,n}^*(q) c(q) \tag{3.27}$$

および

$$\phi_{j,n}(q) = 2^{-N/2} \sum_l \phi_{j,n}(l) e^{-iq l} \tag{3.28}$$

が得られる．このフーリエ表示は明示的に与えることができる．そのために

$$\phi_{j,n}(l+1) - \phi_{j,n}(l) = 2^{-n/2} [-\delta_{l,2^n(j-1)} - \delta_{l,2^n j} + 2\delta_{l,2^n j - 2^{n-1}}] \tag{3.29}$$

を念頭に置いてこれをフーリエ変換すると

$$\phi_{j,n}(q) (e^{iq} - 1) = 2^{-N/2} 2^{-n/2} [-e^{-iq 2^n(j-1)} - e^{-iq 2^n j} + 2e^{-iq(2^n j - 2^{n-1})}] \tag{3.30}$$

が得られるので $\phi_{j,n}(q)$ は

$$\phi_{j,n}(q) = - \frac{2^{-(n+N)/2} e^{-iq 2^n j} (e^{iq 2^{n-1}} - 1)^2}{e^{iq} - 1} \tag{3.31}$$

となることが分かる．これはハール・ウェーブレットの式そのものである．

3.4 MERA ネットワークによるウェーブレットの表現

3.4.1 フェルミ面のウェーブレットによる再構成

自由電子の基底状態（ここではハーフ・フィリングの場合を考える）はフェルミ面以下の状態が完全に占有された状態

$$|\psi_0\rangle = \prod_{|k| \leq \pi/2} c_k^\dagger |0\rangle \quad (3.32)$$

である．これを平面波よりもより局在した波のモード z を用いてやはり

$$|\psi_0\rangle \simeq \prod_x (c_x^{low})^\dagger |0\rangle \quad (3.33)$$

という形に表したい．つまりウェーブレット変換である状態を c_z^{low} と c_z^{high} に分解し， c_z^{low} がフェルミ面の下， c_z^{high} がフェルミ面の上来るようにしたい．アイデアとしてはこれに尽きているが，注意すべきことが幾つかある．フェルミ面に近づくほど，占有・非占有がシャープに分離されなければならないので，ちょうど $k = \pm\pi/2$ をターゲットするようなウェーブレットを構成する必要があるが，ここで気にしている通常の Daubechies ウェーブレットは $k = 0$ のフィルタリングに着目しているので，単純にこのウェーブレットを使う訳にはいかない．少し変形が必要である．実際に文献 [36,37] でそのことが検討されており，二つの変形 Daubechies ウェーブレットを使えばそれが実現できることが分かっている．

3.4.2 Daubechies D4 ウェーブレットのユニタリー回路表現

MERA ネットワークによるウェーブレットの表現は，文献 [36,37] で検討されている．くりこみの構造を持つネットワークにおいて，各階のユニタリー変換を

$$\mathcal{U} = U_N \times U_{N-1} \times \cdots \times U_2 \times U_1 \quad (3.34)$$

と表す．それぞれの U_k は

$$U_k = \bigoplus_{r:\text{odd}} u_{r,r+1}(\theta_k) \quad (3.35)$$

と表され，より細かいユニタリー行列

$$u(\theta_k) = \begin{pmatrix} \cos \theta_k & \sin \theta_k \\ -\sin \theta_k & \cos \theta_k \end{pmatrix} = \cos \theta_k \begin{pmatrix} 1 & \tan \theta_k \\ -\tan \theta_k & 1 \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

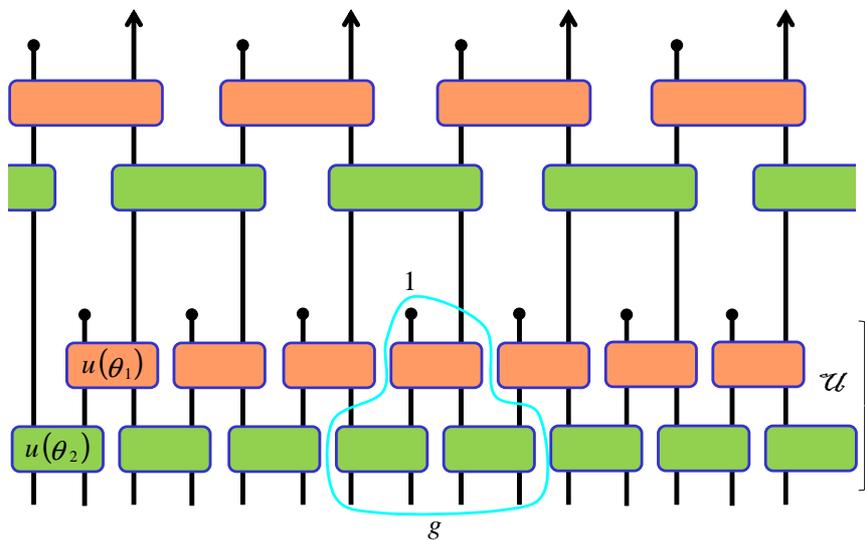


図 3.1: D4 ウェーブレットのユニタリー回路表現

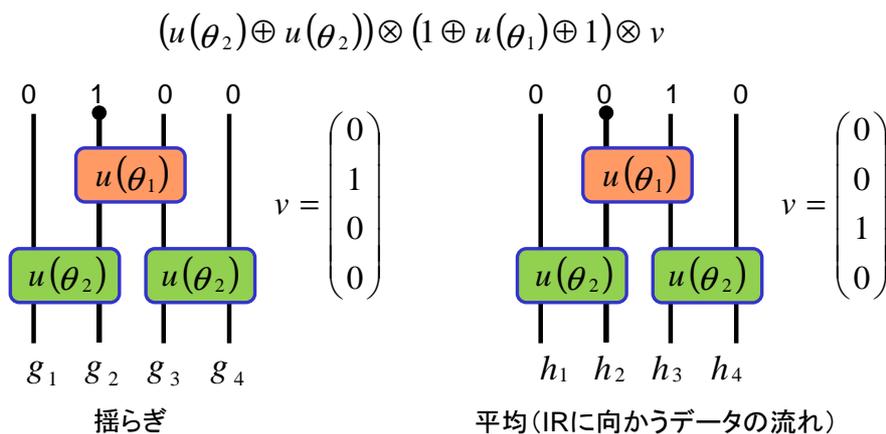


図 3.2: D4 ウェーブレットのユニタリー回路表現

の集まりとして表現されている .

図に示された回路の骨格部分の演算は

$$\mathbf{h} = (u(\theta_2) \oplus u(\theta_2)) \times (1 \oplus u(\theta_1) \oplus 1) \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

と表すことができる . $t_k = \tan \theta_k$ と略記して成分表示で表すと

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} h_0 \\ h_1 \\ h_2 \\ h_3 \end{pmatrix} &= A \begin{pmatrix} 1 & t_2 & 0 & 0 \\ -t_2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & t_2 \\ 0 & 0 & -t_2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & t_1 & 0 \\ 0 & -t_1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} t_1 t_2 \\ t_1 \\ 1 \\ -t_2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.38)$$

である . 一方 , ウェーブレットの係数は

$$g_k = (-1)^{k+1} h_{3-k} \quad (3.39)$$

で与えられているので (ここでは便宜上 , 符号を反転して再定義した) ,

$$\begin{pmatrix} g_0 \\ g_1 \\ g_2 \\ g_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_2 \\ 1 \\ -t_1 \\ t_1 t_2 \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

となるが , これは

$$\mathbf{g} = (u(\theta_2) \oplus u(\theta_2)) \times (1 \oplus u(\theta_1) \oplus 1) \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

と表せるので , ウェーブレット関数は IR 領域に向かう流れとして残ることが分かる .

以上をモーメント条件に代入すると

$$t_2 + 1 - t_1 + t_1 t_2 = 0 \quad (3.42)$$

$$1 - 2t_1 + 3t_1 t_2 = 0 \quad (3.43)$$

が得られる．これらを解くと

$$t_1 = 2 + \sqrt{3}, t_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad (3.44)$$

となる．したがって規格化してオーバーオール係数 A を決めてからユニタリー変換を角度表示すると

$$\theta_1 = \frac{5}{12}\pi, \theta_2 = \frac{\pi}{6} \quad (3.45)$$

となり，これらの値は Daubechies の D4 ウェーブレット係数そのものである．

第4章 階層型テンソルネットワーク と相互結合型ネットワークの 間の変換

このタイトルはいずれも私の造語であるが(「階層型」は私の教科書で使っているのでもういいのかもしれない), 勿論, ニューラルネットワークのワードを気にしてつけたものである.

特異値分解を活用すれば, テンソルネットワークの形状は幾らでも変形することができる. あるクラスのネットワークが他のクラスのネットワークとどのように対応するのかを調べることができる. そのときに, トランケーション数の少ないネットワークが効率的な計算を行うためには採用したいものである.

例えば量子臨界系であるハイゼンベルグ模型はベータ仮説法で解けるが, 代数的ベータ仮説解は行列積ベータ仮説で等価に表現できるので, クラス分け的には MPS あるいは PEPS クラスに属している. しかしながら臨界系は MERA クラスで表現するのが好ましいわけなので, これらの違いは単に表現上の違いということになる. そのようなことを念頭に置くと, MERA を分解して等価な MPS で表現したときに, それがどれだけ計算機上の困難さを伴うのかということ調べておくべきである.

4.1 MERA から MPS への変換

MERA ネットワークによる変分計算が実際に MPS よりも効果的であることを調べよう. そのために, 特異値分解を用いて MERA ネットワークを等価な MPS に変換する. このとき, 変換後の MPS のボンド次元がオリジナルの MERA のボンド次元よりも極めて大きくなるのが分かる.

図 4.1 では 8 サイト開放端条件の MERA を考え, テンソルを分解・再合成しながら MPS に変換する過程を示している. 分解の様子から分かるように, 8 サイト MERA (ボンド次元を m とする) の場合には, 変換で得られる MPS が大雑把には m^2 のボンド次元を持つ. 一般に, システムサイズが $L = 2^N$ の場合には,

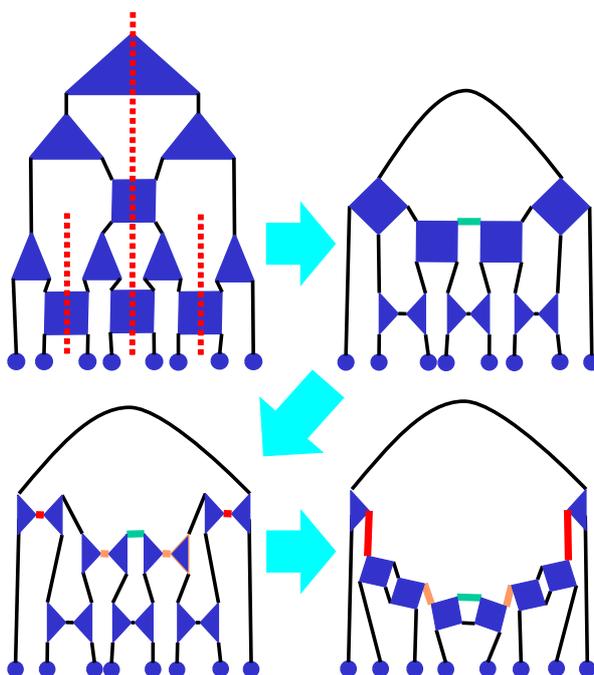


図 4.1: MERA から MPS への変換

disentangler の層数が $N - 1$ となることを反映して、MPS のボンド次元が m^{N-1} となる。従って、 $N \geq 2$ の場合には明らかに MERA の方が数値計算的に優位であると言える。

4.2 TNR から MERA への変換

TNR は Tensor Network Renormalization の略で、最近注目されている形式である [38–40]。これは相互結合型に分類されるが disentangler の自由度を持っているので、適切な変換で MERA に移行できる。以下の図は実際の変換プロセスの一部を図示したものである。この操作を段階的に行うことによって最終的に MERA まで持っていくことができる。

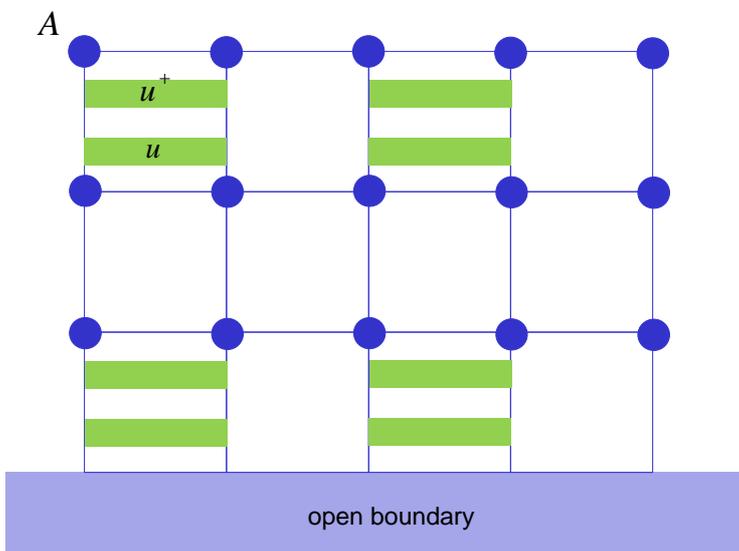


図 4.2: TNR から MERA への変換 1

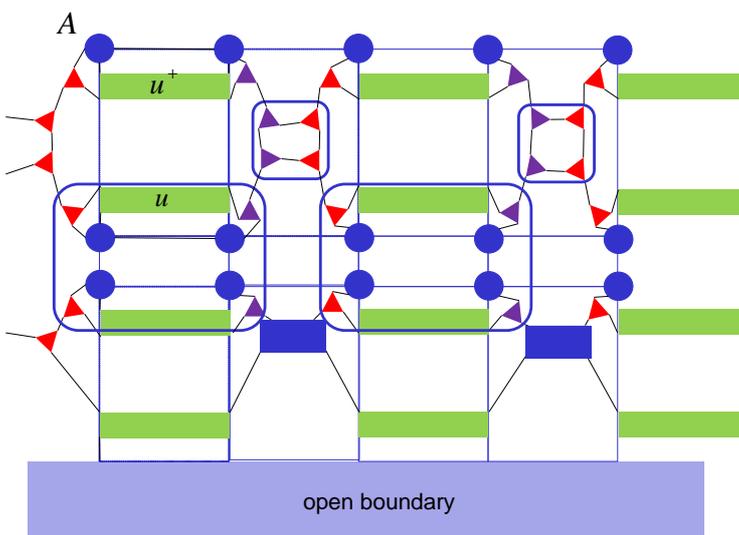


図 4.3: TNR から MERA への変換 2

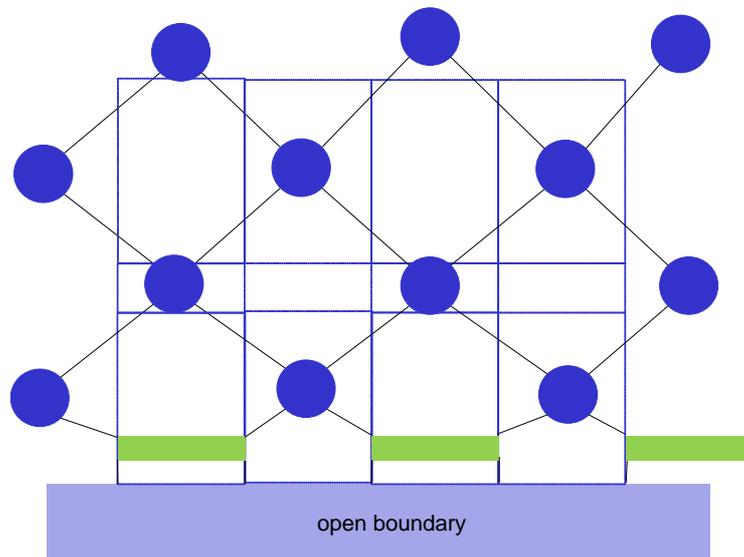


図 4.4: TNR から MERA への変換 3

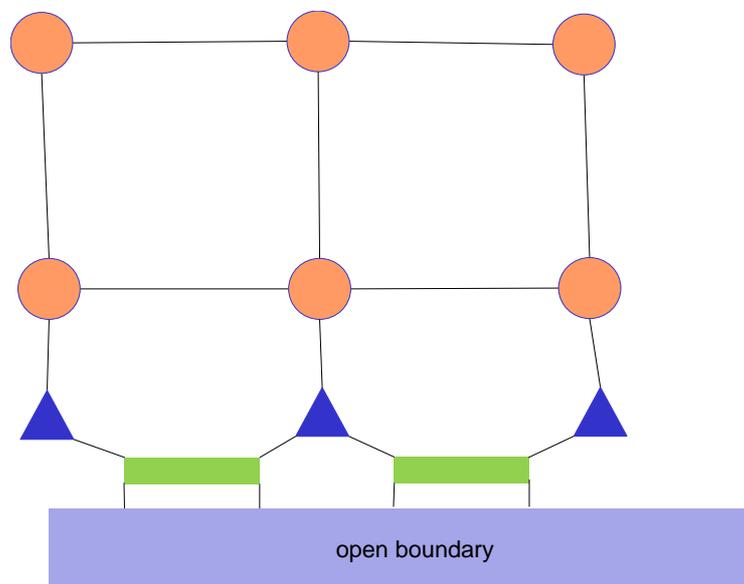


図 4.5: TNR から MERA への変換 4

第5章 テンソルネットワークと量子可解性

5.1 MPS の変形

第2章ではテンソルネットワークと量子可解性の関わりについて概観する。目的は、代数的 Bethe 仮説の本格的な数理を持ち出さなくても、MPS の構造自体にそれが内在しているということを理解することである。

その感覚を掴むために、まずは MPS の変形から始めよう。MPS は一般に

$$|\psi_Q\rangle = \sum_{\{s_j\}} \text{Tr} (A_1^{s_1} A_2^{s_2} \cdots A_n^{s_n} Q) |s_1 s_2 \cdots s_n\rangle \quad (5.1)$$

と表すのがよりコンパクトで、これで任意の境界条件に対応できる。\$Q\$ を境界演算子と呼ぶ。\$Q\$ も \$\chi \times \chi\$ 行列であり、

$$Q = \sum_{a,b} Q_{ab} |a\rangle \langle b| \quad (5.2)$$

と表すとき、

$$|\psi_Q\rangle = \sum_{s_1, \dots, s_n} \sum_{a,b} Q_{ab} \langle b| A_1^{s_1} A_2^{s_2} \cdots A_n^{s_n} |a\rangle |s_1 s_2 \cdots s_n\rangle \quad (5.3)$$

となる。したがって、仮想的な境界状態も含めた \$(n+1)\$ 重ベクトル \$|b\rangle \otimes |s_1 s_2 \cdots s_n\rangle\$ が、系のエンタングルメント構造を記述する基底表現である。この場合、行列 \$A_j^{s_j}\$ は仮想空間 \$V_0\$ に作用する行列で、その成分が \$V^{\otimes n}\$ の \$j\$ 番目の局所ベクトル空間に作用する。状態空間のテンソル積を \$V_0 \otimes V^{\otimes n}\$ と表して \$V_0\$ を左においておけば、その構造は理論に自然に入る。この構造は実は代数的 Bethe 仮説と同等のものである。

状態 \$|\psi_Q\rangle\$ に内在するエンタングルメント構造を理解するために

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1, \dots, s_n} \langle \alpha_0 | A^{s_1} \cdots A^{s_n} | \alpha_{n+1} \rangle |s_1 \cdots s_n\rangle \quad (5.4)$$

$$\begin{aligned}
&= \langle \alpha_0 | \left(\sum_{s_1} A^{s_1} |s_1\rangle \right) \dot{\otimes} \left(\sum_{s_2} A^{s_2} |s_2\rangle \right) \dot{\otimes} \\
&\quad \dots \dot{\otimes} \left(\sum_{s_{n-1}} A^{s_{n-1}} |s_{n-1}\rangle \right) \dot{\otimes} \left(\sum_{s_n} A^{s_n} |s_n\rangle \right) | \alpha_{n+1} \rangle \quad (5.5)
\end{aligned}$$

と変形する．ここで記号 $\dot{\otimes}$ の定義は，状態ベクトルを成分として持つ行列の掛け算であり，全体の行列演算としては通常の行列積 \cdot で，その成分を状態のテンソル積 \otimes とするような演算である．ここで重要な因子は各サイト上に定義された

$$\sum_s A^s |s\rangle = \begin{pmatrix} a_{11}^\uparrow |\uparrow\rangle + a_{11}^\downarrow |\downarrow\rangle & \cdots & a_{1\chi}^\uparrow |\uparrow\rangle + a_{1\chi}^\downarrow |\downarrow\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{\chi 1}^\uparrow |\uparrow\rangle + a_{\chi 1}^\downarrow |\downarrow\rangle & \cdots & a_{\chi\chi}^\uparrow |\uparrow\rangle + a_{\chi\chi}^\downarrow |\downarrow\rangle \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

という行列型演算子である．これは局所的なインデックスを持っているが，系の大域的な情報も同時に担っている．内部自由度 χ がより詳しくどのような物理的意味かということは非常に興味のあるところなので，以下でそれについて議論する．

系のエンタングルメントに最も重要な事実は，まずは $\chi > 1$ であるということである．そこで試みに $\chi = 2$ とし，

$$\sum_{s=\uparrow,\downarrow} A^s |s_i\rangle = \begin{pmatrix} a_{11}^\uparrow |\uparrow\rangle + a_{11}^\downarrow |\downarrow\rangle & a_{12}^\uparrow |\uparrow\rangle + a_{12}^\downarrow |\downarrow\rangle \\ a_{21}^\uparrow |\uparrow\rangle + a_{21}^\downarrow |\downarrow\rangle & a_{22}^\uparrow |\uparrow\rangle + a_{22}^\downarrow |\downarrow\rangle \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

としてみる．ここで

$$\sum_s A^s |s\rangle = \begin{pmatrix} a |\uparrow\rangle & b |\downarrow\rangle \\ 0 & |\uparrow\rangle \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

という少し特殊な組み合わせを考える．係数に対する条件は，

$$\sum_s A^s A^{s\dagger} = \begin{pmatrix} |a|^2 + |b|^2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

より， $|a|^2 + |b|^2 = 1$ となる．

以上の表記を用いると MPS は

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \langle \alpha_0 | \left(\begin{pmatrix} a_1 |\uparrow\rangle & b_1 |\downarrow\rangle \\ 0 & |\uparrow\rangle \end{pmatrix} \dot{\otimes} \begin{pmatrix} a_2 |\uparrow\rangle & b_2 |\downarrow\rangle \\ 0 & |\uparrow\rangle \end{pmatrix} \dot{\otimes} \right. \\
&\quad \left. \dots \dot{\otimes} \begin{pmatrix} a_{n-1} |\uparrow\rangle & b_{n-1} |\downarrow\rangle \\ 0 & |\uparrow\rangle \end{pmatrix} \dots \dot{\otimes} \begin{pmatrix} a_n |\uparrow\rangle & b_n |\downarrow\rangle \\ 0 & |\uparrow\rangle \end{pmatrix} \right) | \alpha_{n+1} \rangle \quad (5.10)
\end{aligned}$$

となる．例えば， $n = 3$ の場合は

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} a_1 |\uparrow\rangle & b_1 |\downarrow\rangle \\ 0 & |\uparrow\rangle \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} a_2 |\uparrow\rangle & b_2 |\downarrow\rangle \\ 0 & |\uparrow\rangle \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} a_3 |\uparrow\rangle & b_3 |\downarrow\rangle \\ 0 & |\uparrow\rangle \end{pmatrix} \\ & = \begin{pmatrix} a_1 a_2 a_3 |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle & a_1 a_2 b_3 |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + a_1 b_2 |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + b_1 |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\ 0 & |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.11)$$

となる．非対角要素にエンタングルした状態が現れる．ここで境界状態を

$$\langle \alpha_0 | = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad |\alpha_4\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

と仮定すると， \uparrow が 2 個， \downarrow が 1 個の状態を取り出すことができる．従って，境界演算子は粒子数を確定する役割を持っていることが分かる．

二つ以上の \downarrow スピン励起を作り出すためには， $\chi \geq 3$ とすることが必要である．例えば $n = 3$ の場合には

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle & |\downarrow\rangle & 0 \\ 0 & |\uparrow\rangle & |\downarrow\rangle \\ 0 & 0 & |\uparrow\rangle \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle & |\downarrow\rangle & 0 \\ 0 & |\uparrow\rangle & |\downarrow\rangle \\ 0 & 0 & |\uparrow\rangle \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} |\uparrow\rangle & |\downarrow\rangle & 0 \\ 0 & |\uparrow\rangle & |\downarrow\rangle \\ 0 & 0 & |\uparrow\rangle \end{pmatrix} \\ & = \begin{pmatrix} |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle & \underbrace{|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle}_{\downarrow\text{スピン 1 個}} & \underbrace{|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle}_{\downarrow\text{スピン 2 個}} \\ 0 & |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle & \underbrace{|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle}_{\downarrow\text{スピン 1 個}} \\ 0 & 0 & |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.13)$$

となる．行列の右上に進むほど，励起される \downarrow スピンの数が増えていき，スピンの異なる状態が階層的に因子化されていることが分かる． \downarrow スピン数の固定条件は，相変わらず境界状態が担っている．

5.2 行列積 Bethe 仮説

再び $S = 1/2$ 反強磁性ハイゼンベルグ模型を例にとろう．全てのサイトのスピンの \uparrow である強磁性状態を真空（あるいは最高ウェイト状態）

$$|\psi_0\rangle = |\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \cdots \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.14)$$

と呼ぶことにする．サイト n_1, \dots, n_M ($1 \leq n_1 < \cdots < n_M \leq N$) 上の M 個のスピンの \downarrow に反転した状態を

$$|n_1 \cdots n_M\rangle = S_{n_1}^- \cdots S_{n_M}^- |\psi_0\rangle \quad (5.15)$$

と表すと、一般的な状態ベクトルは次のように表される。

$$|\psi_M\rangle = \sum_{1 \leq n_1 < \dots < n_M \leq N} \psi(n_1, \dots, n_M) |n_1 \dots n_M\rangle \quad (5.16)$$

ここで波動関数 $\psi(n_1, \dots, n_M)$ が

$$\psi(n_1, \dots, n_M) = \sum_{P \in S_M} A(P) \exp\left(i \sum_{j=1}^M k_{P(j)} n_j\right) \quad (5.17)$$

と因子化される解を考え、これを Bethe 波動関数と呼ぶ。 S_M は次数 M の置換群で、 P はその要素である。 j に対する置換操作 P を $P(j)$ と表す。

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & M \\ P(1) & P(2) & \dots & P(M) \end{pmatrix} \quad (5.18)$$

置換演算の存在が、エンタングルメントの存在を暗に示している。 k_1, \dots, k_M は異なる M 個の運動量であるが、Bethe 波動関数が正しい解になるように自己無撞着に決める。通常の結晶運動量とは異なって、相互作用の効果が取り込まれているので、擬運動量と呼ぶ。

座標 Bethe 仮説と行列積が同等のものであることは、比較的簡単な代数で証明できる。この方法を行列積仮説解 (Matrix Product Ansatz, MPA) と呼ぶ [41–43]。例えば 2 粒子の場合、Bethe 波動関数を以下のように因子化する。

$$|\psi_\Omega\rangle = \sum_{1 \leq x_1 \leq x_2 \leq L} \psi_\Omega(x_1, x_2) |x_1, x_2\rangle, \quad (5.19)$$

$$\psi_\Omega(x_1, x_2) = \text{Tr} (E^{x_1-1} A E^{x_2-x_1-1} A E^{L-x_2} \Omega) \quad (5.20)$$

ここで 2 粒子は x_1 および x_2 の位置にいるものとし、そのサイトには散乱・位相シフトを表す行列 A 、粒子がないサイトには行列 E が定義されている。 Ω は適当な境界演算子である。これが厳密解になるように、 A と E の満たす条件を見出すことが目的である。

そこで、行列 E と A は以下の非可換な代数に従うと仮定してみる。

$$A = \sum_{j=1}^2 A_{k_j} E \quad (5.21)$$

$$E A_{k_j} = e^{ik_j} A_{k_j} E \quad (5.22)$$

$$A_{k_1} A_{k_1} = A_{k_2} A_{k_2} = 0 \quad (5.23)$$

$$A_{k_2} A_{k_1} = s(k_2, k_1) A_{k_1} A_{k_2} \quad (5.24)$$

境界条件は

$$E\Omega = e^{-ip}\Omega E, \quad p = \sum_{j=1}^2 k_j \quad (5.25)$$

とする．式 (5.22) は並進操作，式 (5.23) は最大・最小ウェイト状態の自然な表現，式 (5.24) は2体散乱を表す．以上の交換関係が成り立つとき， ψ は明らかに Bethe 波動関数になることが分かる．

$$\begin{aligned} \psi &= \text{Tr} \left(E^{x_1-1} \sum_{j=1}^2 A_{k_j} E^{x_2-x_1} \sum_{l=1}^2 A_{k_l} E^{L-x_2+1} \Omega \right) \\ &= \text{Tr} (A_{k_1} A_{k_2} E^L \Omega) e^{-ip} \{ e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + s(k_2, k_1) e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2)} \} \end{aligned} \quad (5.26)$$

式 (5.21)-(5.24) を満足する E 及び A の行列表示は，

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-ik_1} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-ik_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-ik_2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-ik_1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i(k_1+k_2)} \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

$$A_{k_1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes id = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.28)$$

$$A_{k_2} = \begin{pmatrix} s(k_2, k_1) & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & s(k_2, k_1) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.29)$$

$$\Omega = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.30)$$

と取ることができる．Bethe 波動関数は， E の形から分かるように先ず個々の励起モードを平面波で展開し，その後にそれらの散乱を A_{k_1}, A_{k_2} によってエンタングルメントという形で取り入れる．実際に散乱行列 $s(k_2, k_1)$ が A_{k_2} の非対角要素に入っていることからそれが分かる．

なおこの構造が代数的ベーテ仮説と等価であることの証明は文献 [44–46] で与えられている．

第6章 テンソルネットワークと量子古典変換：くりこみ群の現代的視点とその分野横断的広がり

6.1 AdS/CFT 対応

6.1.1 AdS 時空とその境界

最終章では、関連他分野の先端課題を概観して、MERA のくりこみ群的側面をもう一段深く調べよう。

MERA においては、ネットワークの端に元の量子系の自由度が定義されており、それを一次元高い空間のテンソルネットワークで表現した。また同じ量子系を PEPS で表したときの適切な内部自由度 χ に比べれば、MERA で必要な χ の値は非常に小さなものなので、より古典的なエンタングルメントの弱い系にマップするというのも MERA の重要な性質と言える。これらの事情は、よく知られている鈴木・Trotter 変換と非常に類似した性質と言える。更に言えば、ネットワークの形状が元の量子系の臨界性に起因しているということである。実はこれらの物理はストリング理論分野でも大きな注目を集めており、「ゲージ・重力対応」あるいは「AdS/CFT 対応」などと呼ばれている [47–50]。これは、「時空 $d+1$ 次元の量子臨界系 (CFT) が、負曲率を持つ曲がった $d+2$ 次元時空上の一般相対論と等価である」ということを主張する対応原理である。AdS 空間とはその負曲率の時空間で、その空間が持つ対称性が共形対称性とマッチしているところにポイントがある。メトリックは

$$ds^2 = \frac{l^2}{z^2} (dz^2 - dx_0^2 + dx_1^2 + dx_2^2 + \dots) \quad (6.1)$$

と表され ($x_0 = t$ は時間), l は曲率半径, z は動径方向と呼ばれる。 $z = 0$ をこの空間の境界と呼ぶ。このメトリックがスケール不変であることは明らかであろう。更に特殊共形変換に対しても不変であることが分かる。

さて、バルク AdS 空間の無限小座標変換を考える。

$$ds'^2 = ds^2 + (\nabla_\mu \xi_\nu + \nabla_\nu \xi_\mu) dx^\mu dx^\nu \quad (6.2)$$

時空が曲がっているので、微分は共変微分で定義されている。添え字に関しては、動径部分を z 、それ以外を i, j で表わす。

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = \frac{l^2}{z^2} (dz^2 + \eta_{ij} dx^i dx^j) = g_{zz} dz^2 + g_{ij} dx^i dx^j \quad (6.3)$$

共変微分を具体的に書き下すと

$$\nabla_\mu \xi_\nu + \nabla_\nu \xi_\mu = \partial_\mu \xi_\nu + \partial_\nu \xi_\mu - 2\Gamma_{\mu\nu}^\lambda \xi_\lambda \quad (6.4)$$

となる。ここで無限小座標変換に際して、境界は動径方向に変動しないという条件をつけることにして、

$$\xi_z(x, z) = z\zeta(x), \quad \xi_i(x, z) = \xi_i(x, 0) \quad (6.5)$$

とおく。 ζ は x のみの関数である。このとき

$$\begin{aligned} (\nabla_\mu \xi_\nu + \nabla_\nu \xi_\mu) dx^\mu dx^\nu &= (\partial_i \xi_j + \partial_j \xi_i) dx^i dx^j + 2\partial_z \xi_z dz^2 \\ &\quad + 2(\partial_z \xi_i + \partial_i \xi_z) dx^i dz - 2\Gamma_{\mu\nu}^\lambda \xi_\lambda dx^\mu dx^\nu \end{aligned} \quad (6.6)$$

となるので、ちょうど境界上 $z = 0$ では

$$(\nabla_\mu \xi_\nu + \nabla_\nu \xi_\mu) dx^\mu dx^\nu = (\partial_i \xi_j + \partial_j \xi_i) dx^i dx^j + 2\zeta dz^2 - 2\Gamma_{\mu\nu}^\lambda \xi_\lambda dx^\mu dx^\nu \quad (6.7)$$

となることが分かる。クリストッフェル記号を具体的に評価すると、

$$(\nabla_\mu \xi_\nu + \nabla_\nu \xi_\mu) dx^\mu dx^\nu = (\partial_i \xi_j + \partial_j \xi_i - 2\zeta \eta_{ij}) dx^i dx^j + 4\zeta dz^2 \quad (6.8)$$

が得られる。以上より、バルクで一般座標変換に対する不変性 $ds'^2 = ds^2$ を課すと、境界 $z = 0$ において

$$\partial_i \xi_j + \partial_j \xi_i = 2\zeta \eta_{ij} \quad (6.9)$$

という条件が得られる。これはちょうど共形 Killing 方程式であることが分かる。従って、AdS 時空の境界には共形場理論が誘導されることが期待される。

以上は非常に簡単な理解の方法の一つで、より詳細な解析は色々と知られている。

6.1.2 GKP-Witten 関係式

AdS/CFT 対応が主張することは, AdS_{d+2} 時空中における重力場の古典的作用が (赤外カットオフ z_0 を持つ), この時空の $d+1$ 次元境界に「住んで」いる CFT (紫外カットオフを持つ) の生成汎関数になるということである. すなわち

$$\exp\left(-\frac{1}{2\kappa^2}I(\phi(x))\right)\Big|_{\phi(z\rightarrow z_0)=\phi_0} = \left\langle \exp\left(\int d^{d+1}x\phi_0(x)\mathcal{O}(x)\right) \right\rangle_{CFT} \quad (6.10)$$

ここで $I(\phi(x))$ は AdS_{d+2} の古典的作用, $\kappa^2 = 8\pi G$, G は Newton 定数, $\mathcal{O}(x)$ は, AdS_{d+2} の境界での場 $\phi_0(x)$ と結合する CFT のスケール演算子である. この式は GKP(Gubser-Klebanov-Polyakov)-Witten 関係式と呼ばれる [51, 52]. CFT の相関関数は重力場の古典作用を用いて

$$\langle \mathcal{O}(x_1)\cdots\mathcal{O}(x_n) \rangle_{CFT} = \frac{\delta}{\delta\phi(x_1)}\cdots\frac{\delta}{\delta\phi(x_n)} \exp\left(-\frac{1}{2\kappa^2}I(\phi(x))\right)\Big|_{\phi=0} \quad (6.11)$$

と表すことができる. 従って, 重力場の古典解を求めて $z \rightarrow z_0 \sim 0$ の極限をとった結果, CFT の相関関数が出てくるかということが問題となる.

例として, AdS 時空中を伝搬する自由スカラー場を考える. 作用は

$$I(\phi) = \frac{1}{2} \int d^{d+2}X \sqrt{g} g^{\mu\nu} \partial_\mu \phi \partial_\nu \phi \quad (6.12)$$

$$= \frac{1}{2} \int d^{d+1}\vec{x} \int dz \frac{1}{z^d} \left\{ (\partial_z \phi)^2 + \eta^{\mu\nu} \partial_\mu \phi \partial_\nu \phi \right\} \quad (6.13)$$

で与えられる. 座標を $X = (z, x^\mu) = (z, \vec{x})$, $\mu = 0, 1, \dots, d$ と表す. 計量テンソル $g^{\mu\nu}$ の添え字は $g^{\mu\nu} g_{\nu\lambda} = \delta_\lambda^\mu$ と取り, g は $g_{\mu\lambda}$ の行列式を意味する. はじめに $I(\phi)$ を変分して Lagrange 方程式を作ると

$$\left(z^d \partial_z \frac{1}{z^d} \partial_z + \eta^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu \right) \phi = 0 \quad (6.14)$$

が得られる. これに対応して $I(\phi)$ を以下のように変形する.

$$I(\phi) = \frac{1}{2} \int d^{d+1}\vec{x} \int_{z_0}^{\infty} dz \frac{1}{z^d} \left\{ z^d \partial_z \left(\phi \frac{1}{z^d} \partial_z \phi \right) - \phi \left(z^d \partial_z \frac{1}{z^d} \partial_z + \eta^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu \right) \phi \right\} \quad (6.15)$$

$$= \frac{1}{2} \int d^{d+1}\vec{x} \left[\phi \frac{1}{z^d} \partial_z \phi \right]_{z_0}^{\infty} \quad (6.16)$$

Lagrange 方程式を境界近傍 $z \rightarrow z_0 \sim 0$ において解いて, 上の式に代入したいのだが, それにはスカラー場 ϕ の境界値 ϕ_0 を導入して

$$\phi(z_0, \vec{x}) \sim \int d^{d+1}\vec{x}' \frac{z_0^{d+1}}{(z_0^2 + |\vec{x} - \vec{x}'|^2)^{d+1}} \phi_0(\vec{x}') \quad (6.17)$$

と表わせればよいことが分かる．このように仮定すると， $\phi(z_0) \sim z_0^{d+1} \phi_0$ より $\partial_{z_0} z_0^{-d} \partial_{z_0} \phi(z_0) \sim 0$ が得られる．このとき

$$\partial_{z_0} \phi(z_0) \sim z_0^d \int d^{d+1} \vec{x}' \frac{\phi_0(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{2(d+1)}} \quad (6.18)$$

となるので，最終的に $I(\phi_0)$ は

$$I(\phi_0) \sim \int d^{d+1} \vec{x} d^{d+1} \vec{x}' \frac{\phi_0(\vec{x}) \phi_0(\vec{x}')}{|\vec{x} - \vec{x}'|^{2(d+1)}} \quad (6.19)$$

のように振舞うことが分かる．これを指数関数の肩に乗せて汎関数微分を取れば，二点相関関数が冪的に振る舞うことを示すことができる．

6.1.3 Brown-Henneaux の公式

AdS/CFT 対応を考える上で非常に重要な関係式に

$$c = \frac{3l}{2G} \quad (6.20)$$

がある．これは Brown-Henneaux 中心電荷と呼ばれる [53]．つまり CFT における中心電荷が AdS 空間の曲率半径 l に変換される．通常，中心拡大は量子アノマリーに起因するので，これは物理的意味合いの異なるものである．これは先ほどから述べているように，境界条件の処理の方法に起因する問題である．詳細の数学を述べる紙数の余力はないが，経路積分量子化の立場からは，通常量子アノマリーが経路積分測度が一般座標変換不変ではないことに起因するのに対して，Brown-Henneaux 中心電荷は経路積分の境界条件が一般座標変換不変ではないことに起因している．

6.1.4 ホログラフィック・エンタングルメント・エントロピー

MERA におけるエンタングルメント・エントロピーの連続版は，笠・高柳の公式あるいはホログラフィック・エンタングルメント・エントロピーと呼ばれている [54–56]．これはストリング理論の立場からはブラックホール・エントロピーの拡張である．ブラックホールは熱的な存在で固有のエントロピーを持つが，その表面積を A_{BH} としたとき，その熱エントロピーは

$$S_{BH} = \frac{A_{BH}}{4G} \quad (6.21)$$

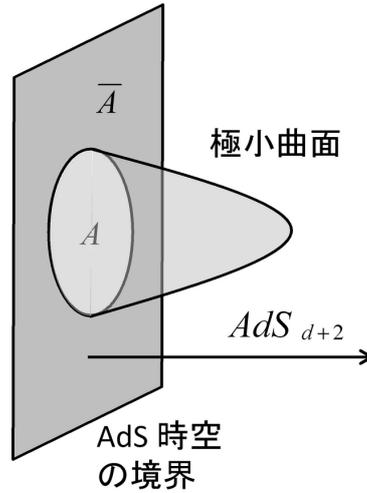


図 6.1: エンタングルメント・エントロピーのホログラフィックな計算

で与えられる．これは Bekenstein-Hawking の法則と呼ばれており，面積則の名前はここに由来する．これを念頭に置いて，AdS 空間の時間一定面の境界に部分系 A を取るとき，それを AdS 空間のバルク側から取り囲む極小曲面 γ_A を考える (図 6.1 参照)．このとき，量子系のエンタングルメント・エントロピーが

$$S_A = \frac{\text{Area}(\gamma_A)}{4G} \quad (6.22)$$

で与えられるというのが笠・高柳の公式である．特に $d = 1$ の場合には， $\text{Area}(\gamma_A)$ は測地線の長さとなる．

実際に，二点間 $X = (x, z) = (-L/2, a), Y = (y, z) = (L/2, a)$ の測地距離 $d(X, Y)$ を計算しよう．パラメータの定義は $\epsilon \leq \theta \leq \pi - \epsilon$, $(L/2) \sin \epsilon = a$ で ($z = 0$ で諸量が発散するので，紫外カットオフ a を入れる)，測地線の軌道は

$$(x, z) = \left(\frac{L}{2} \cos \theta, \frac{L}{2} \sin \theta \right) \quad (6.23)$$

と表される．このとき

$$d(X, Y) = 2 \int_{\epsilon}^{\pi/2} \frac{l}{z} d\theta \sqrt{(\partial_{\theta} z)^2 + (\partial_{\theta} x)^2} = l \log \left(\frac{\left(L + \sqrt{L^2 - (2a)^2} \right)^2}{(2a)^2} \right) \quad (6.24)$$

となり， a が充分小さいときに $d(X, Y) = 2l \log(L/a)$ となる．これに Brown-Henneaux の式を代入すると

$$S_A = \frac{c}{3} \log \left(\frac{L}{a} \right) \quad (6.25)$$

が得られることが分かる．

6.2 MERA ネットワークと AdS 計量

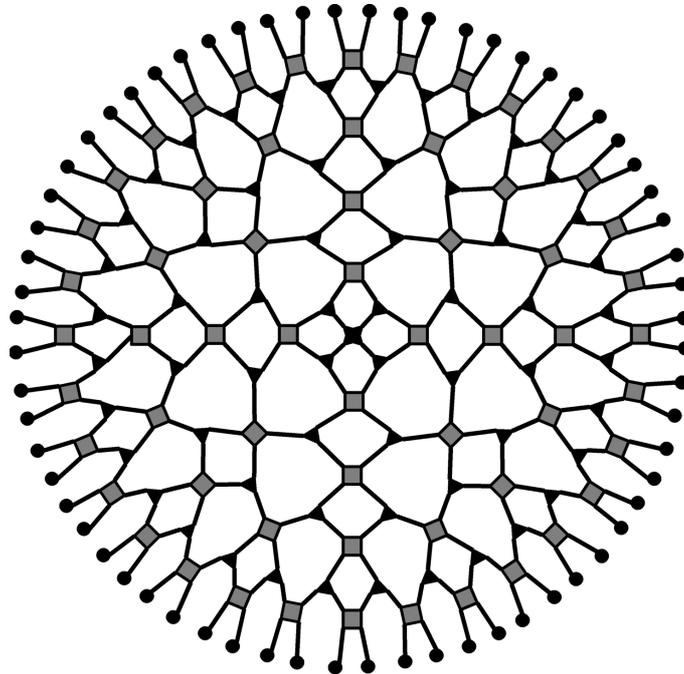


図 6.2: Poincare disk の離散版

以上の議論から，MERA のテンソルネットワークにおいて重要な点は，離散的 AdS 計量が隠れていることであると思われる [57]．図 6.2 は周期的にオリジナル量子系のサイトを接続した MERA ネットワークである．この連続極限がポアンカレ円板になりそうであることが容易に想像できるだろう．ネットワークの接続が 2 サイト間を結ぶ測地線に対応する．第 2 章で述べたエンタングルメント・エントロピーの計算は，笠・高柳公式の離散版であることも明らかであろう．

6.3 物性諸問題におけるバルク境界対応

トポロジカル量子系のバルク境界対応は，この数理の最低次元のトイ模型であることも古くからよく知られている．バルクの Chern-Simons 作用から出発して，端の励起を調べると，そのモード展開の要素が CFT の Virasoro 代数を満たすことを示すことができる．すなわち，端にギャップレスの励起が出現することを示唆している．トポロジカル量子系の最近の隆盛は，そのような不思議な物理系が現実にスピントロニクスなどにおいて重要な概念であると実証されたということが背景にあるともいえる．

その他には、VBS/CFT 対応・サイン二乗変形・双曲変形・指数変形なども関連のある数理である。VBS/CFT 対応とは、2次元 VBS 状態を表すテンソル積状態を MPS へコンパクト化し、等価な一次元量子臨界系としての性質を調べるものである。またサイン二乗変形とは、DMRG のように開放端条件で精度の良い数値計算において、特殊な境界条件を施すと、基底状態が厳密に周期境界条件のものに一致するという手法である。これも共形場理論からの理解が得られている。物性では重力や幾何学を主題として取り扱うことはあまりないが、曲がった幾何学を導入するということは色々な長さのスケールを自然に導入するということなので、臨界系の性質を自在に制御する一つの有効な手段ということなのであろう。

6.3.1 サイン二乗変形

サイン二乗変形 (Sine Square Deformation, SSD) とは、電子系のホッピングをサイン二乗関数に従って変形すると、開放端を持つ系の基底状態が周期境界条件のものに一致するというものである [58–65]。以下ではその基本的な性質を見ていこう。自由電子 (簡単のためにスピンは考えない) の SSD ハミルトニアンを

$$H_{SSD} = - \sum_{j=1}^N t_j \left(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j \right) - \sum_{j=1}^N \mu_j c_j^\dagger c_j \quad (6.26)$$

と表す。ここで

$$t_j = t f \left(j + \frac{1}{2} \right) \quad (6.27)$$

および

$$\mu_j = \mu f(j) \quad (6.28)$$

であり、SSD を特徴づけるスケール関数 $f(j)$ は

$$f(j) = \sin^2 \left\{ \frac{\pi}{N} \left(j - \frac{1}{2} \right) \right\} \quad (6.29)$$

と定義される。このスケール関数は、系の中央 $j = (N + 1)/2$ から離れるにつれてスムーズに減少する関数で、両端でゼロとなることが分かる。

空間一様な成分を

$$H_0 = -t \sum_{j=1}^N \left(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j \right) - \mu \sum_{j=1}^N c_j^\dagger c_j \quad (6.30)$$

と表すと, H_{SSD} は以下のように変形することができる:

$$\begin{aligned}
H_{SSD} &= -t \sum_{j=1}^N f\left(j + \frac{1}{2}\right) \left(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j\right) - \mu \sum_{j=1}^N f(j) c_j^\dagger c_j \\
&= -t \sum_{j=1}^N \sin^2\left(\frac{\pi}{N} j\right) \left(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j\right) - \mu \sum_{j=1}^N \sin^2\left\{\frac{\pi}{N}\left(j - \frac{1}{2}\right)\right\} c_j^\dagger c_j \\
&= -\frac{1}{2}t \sum_{j=1}^N \left[1 - \cos\left(\frac{2\pi}{N} j\right)\right] \left(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j\right) \\
&\quad - \frac{1}{2}\mu \sum_{j=1}^N \left[1 - \cos\left\{\frac{2\pi}{N}\left(j - \frac{1}{2}\right)\right\}\right] c_j^\dagger c_j \\
&= \frac{1}{2}H_0 + \frac{1}{4}t \sum_{j=1}^N \left(e^{i\delta j} + e^{-i\delta j}\right) \left(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j\right) \\
&\quad + \frac{1}{4}\mu \sum_{j=1}^N \left(e^{i\delta j} e^{-i\delta/2} + e^{-i\delta j} e^{i\delta/2}\right) c_j^\dagger c_j
\end{aligned} \tag{6.31}$$

ただし

$$\delta = \frac{2\pi}{N} \tag{6.32}$$

とした. ここでカイラル・ハミルトニアンを

$$H^\pm = -t \sum_{j=1}^N e^{\pm i\delta j} \left(c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j\right) - \mu \sum_{j=1}^N e^{\pm i\delta j} e^{\mp i\delta/2} c_j^\dagger c_j \tag{6.33}$$

と定義すると, H_{SSD} は

$$H_{SSD} = \frac{1}{2}H_0 - \frac{1}{4}(H^+ + H^-) \tag{6.34}$$

と表される.

カイラル・ハミルトニアンを空間一様成分の固有モード

$$c_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikj} c_j \tag{6.35}$$

および固有エネルギー

$$\epsilon(k) = -2t \cos k - \mu \tag{6.36}$$

で表すと,

$$H^\pm = \sum_k e^{\mp i\delta/2} \epsilon(k \mp \delta/2) c_k^\dagger c_{k \mp \delta} \tag{6.37}$$

となる．これは波数を 1 ユニット δ だけシフトさせる演算子である．このことから H_{SSD} の効果が見えてくる． H_{SSD} を一様周期系の基底状態 $|\Psi_G\rangle$ に作用することを考える．このとき， H_0 の項に対しては固有関数なので単に固有値を返す．一方， H^\pm の項を作用すると，フェルミ面の下に詰まっている電子はこの操作で基本的に動けないので，フェルミ面 $k = k_F$ での電子励起のみが重要である．

$$H \simeq e^{\mp i\delta/2} \epsilon(k_F \mp \delta/2) c_{k_F}^\dagger c_{k_F \mp \delta} \quad (6.38)$$

したがって

$$\epsilon(k_F \mp \delta/2) = 0 \quad (6.39)$$

となるように μ を選べば， $|\Psi_G\rangle$ が H_{SSD} の厳密な固有状態であることが分かる．共形場理論的には，上記で現れた H_0, H_\pm が，Virasoro 代数の生成元 $L_0, L_{\pm 1}$ に対応していることは，それらの波数表示の形から容易に類推できるであろう．

シリンダー上のハミルトニアン (SSD を施していない周期境界条件のモデル) は

$$\omega = \tau + ix = \frac{L}{2\pi} \log z \quad (6.40)$$

の共形変換から

$$H_0 = \int_0^L \frac{dx}{2\pi} (T_{cyl}(\omega) + \bar{T}_{cyl}(\omega)) \quad (6.41)$$

と表される．ここでエネルギー・運動量テンソルは

$$T_{cyl}(\omega) = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \left(T(z)z^2 - \frac{c}{24}\right) \quad (6.42)$$

と表される．エネルギー・運動量テンソルはヴィラソロ生成子を用いて

$$T(z) = \sum_n z^{-n-2} L_n \quad (6.43)$$

と表されるので，ハミルトニアンは

$$H_0 = \frac{2\pi}{L} (L_0 + \bar{L}_0) - \frac{\pi c}{6L} \quad (6.44)$$

となる．

SSD では H_\pm が重要で，これらはヴィラソロ生成子を用いると

$$H_\pm = \frac{2\pi}{L} (L_{\pm 1} + \bar{L}_{\mp 1}) \quad (6.45)$$

と表されるので, SSD ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_{SSD} &= \frac{1}{2}H_0 - \frac{1}{4}(H_+ + H_-) \\ &= \frac{\pi}{L} \left(L_0 + \bar{L}_0 - \frac{L_1 + L_{-1} + \bar{L}_1 + \bar{L}_{-1}}{2} \right) - \frac{\pi c}{12L} \end{aligned} \quad (6.46)$$

と表される.

CFT の基底状態について $SL(2, \mathbb{C})$ 不変性を課すことは自然であるので, 基底状態 $|0\rangle$ が大域的共形変換の生成子によって生成される変換について不変であるとする,

$$H_0 |0\rangle = E_0 |0\rangle \quad (6.47)$$

および

$$H_{SSD} |0\rangle = \frac{E_0}{2} |0\rangle \quad (6.48)$$

が成り立つ. ここで

$$E_0 = \frac{\pi c}{6L} \quad (6.49)$$

である. したがって H_0 と H_{SSD} は共に同じ固有状態を持つ (固有エネルギーは 2 倍異なっている).

ここで L_0 と $L_0 - (L_1 + L_{-1})/2$ の変換について調べておくことは重要である.

$$L_n = z^{n+1} \partial_z \quad (6.50)$$

を代入すると

$$L_0 - \frac{L_1 + L_{-1}}{2} = \frac{1}{2} (2z - 1 - z^2) \partial_z = -\frac{1}{2} (z - 1)^2 \partial_z \quad (6.51)$$

が得られる. 一方, 別の複素変数 u を用いて

$$L_0 = u \partial_u \quad (6.52)$$

と表し $u = f(z)$ を課すと,

$$u = e^{2/(z-1)} \quad (6.53)$$

が得られる. すなわちこれは $z = 1$ に特異点を持つ. 従って通常の本ビウス変換

$$u = \frac{az + b}{cz + d} \quad (6.54)$$

とは異なるクラスに属するものである. 従って単に $SL(2, \mathbb{C})$ 変換を H_0 に施して H_{SSD} が導かれるわけではなさそうである. この問題の解析は, 最新の論文にあたって頂きたい.

第7章 特異値分解の様々な機能性 (松枝の最近の研究)

本稿を通して最も重要な技術である特異値分解であるが、個人的には、エンタングルメントを記述する方法論というよりはむしろホログラフィーとの深い関わりという観点から興味を持って研究を進めている。以下は研究成果の一例である。

7.1 スナップショット・エントロピーの計算

7.1.1 Typicality としての画像

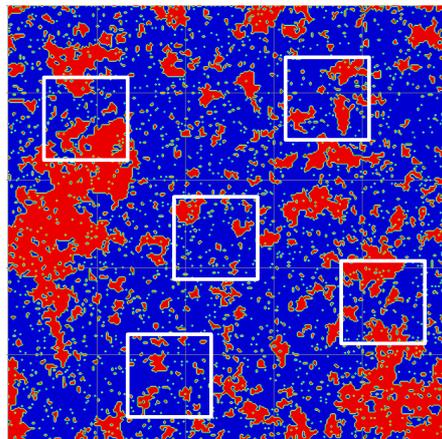


図 7.1: イジング・スナップショットの部分系の集合

特異値分解は画像処理と非常に相性が良い。その画像処理を臨界点での物理の問題に応用することは非常に興味深いことである。例えば、2次元イジング模型の臨界点でのモンテカルロ・スナップショットを考えよう。臨界点ではスナップショットがフラクタル的であり、様々なサイズのクラスターが分布している。システムサイズが充分大きいと仮定して、ある有限サイズの部分系を色々な位置から充分沢山取り出すことを考える。元のスナップショットがフラクタル的であれば各部分

系もフラクタルであるが、取り出す位置が異なれば画像自体は各々異なる。したがって、その有限サイズ系のデータセットは近似的に分配関数の自由度を持つと考えられる。つまり元の大きな画像一枚で、ある有限系の分配関数の自由度を持つということになる。したがって一枚の画像から臨界点の情報（例えば臨界指数など）が取り出せるはずである。これは最近はやりの「Typicality」とも符合するような概念である。システムサイズが $L \times L$ の場合、スピン配置は全部で 2^{L^2} 通りあるが、言い方を変えると、この情報がたった一枚の画像で表現可能ということになり、情報の超圧縮とは何かということを考える上でも非常に興味深いこととなっている。

7.1.2 スケール分解の基本的な考え方

画像の問題を考えるには、画像データを $M \times N$ 行列 A と考え、 $A(x, y)$ がピクセル (x, y) における色の値を表すものとする。画像が白黒の場合、行列要素は $(0, 1)$ あるいは $(+1, -1)$ とすればよい。グレースケールの場合には $0 \sim 255$ の間の整数値をとる。縦横のサイズ M, N は一般には異なっても構わない。

初めに画像データを特異値分解を用いて異なる要素に分解する。すなわち

$$r = \text{rank} A \quad (7.1)$$

とおくと、

$$A(x, y) = \sum_{l=1}^r U_l(x) \sqrt{\lambda_l} V_l(y) = \sum_{l=1}^r A^{(l)}(x, y) \quad (7.2)$$

と表す。ここで

$$A^{(l)}(x, y) = U_l(x) \sqrt{\lambda_l} V_l(y) \quad (7.3)$$

である。データの分解で現れた添え字 l は、分解の「階層構造」を特徴づけるパラメータと呼ぶことにする。その意味はあとでゆっくり考える。この中で重要な成分は $\sqrt{\lambda_l}$ が大きい l である。そのため $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_\chi$ に対して ($\chi \leq r$)

$$A_\chi(x, y) = \sum_{l=1}^{\chi} A^{(l)}(x, y) \quad (7.4)$$

を導入すると、これが $A(x, y)$ に対する最適の χ 次近似となる。 $A_\chi(x, y)$ が持つ情報量が $S(\chi)$ で表されることになる。

特異値分解に隠れたスケール制御の機構を調べよう [66]。図 7.2 に示された 2×4 ピクセルのサンプル画像を例にとる。色のついたピクセルによって構成されている

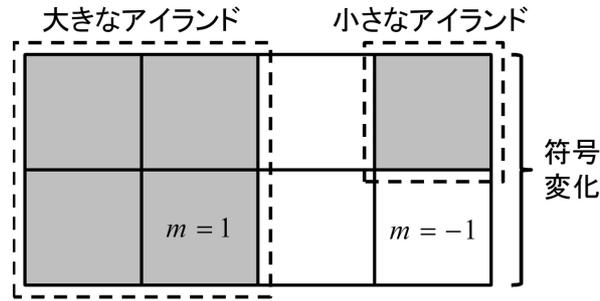


図 7.2: 大きな構造と小さな構造が共存する 2×4 格子模型 .

部分を便宜上「構造」とよぶ．図では左半分に大きな構造 (2×2 の正方形) があり．右上にはそれよりも小さな構造がある．色のついたピクセルを $A(x, y) = +1$, それ以外のピクセルを $A(x, y) = -1$ で代表させると，サンプル画像は

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \quad (7.5)$$

と表される．ここで画像の部分密度行列 ρ_X および ρ_Y を次のように計算する．

$$\rho_X = A^t A = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}, \quad \rho_Y = {}^t A A = \begin{pmatrix} 2 & 2 & -2 & 0 \\ 2 & 2 & -2 & 0 \\ -2 & -2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \quad (7.6)$$

これらのゼロでない固有値は一致しており，それぞれ

$$\lambda_1 = 6, \quad \lambda_2 = 2 \quad (7.7)$$

となる．ここで考えている模型では， ρ_Y がブロック対角化されていることが分かる．その意味合いを考えてみると，ゼロとなっている非対角項は，小さい構造を含んだ 4 列目のベクトルと大きな構造に含まれる列ベクトルの内積から来ており，お互いの内積を計算した場合に，符号の変化によって値が打ち消してしまうことになっている．物性論の方法で言うと，乱雑位相近似の精神に似ていると言えるかもしれない． 3×3 のブロックは，符号の一定したベクトル同士の内積から生ずるので，ブロック内の非対角要素も，対角要素と絶対値は等しい．したがってこれで対角化を行うと，バンド理論におけるエネルギー準位の混成と同様に，固有値が大きなものとゼロにスプリットする．

具体的に画像の再構成を行おう．部分密度行列 ρ_X の固有ベクトルは

$$\vec{U}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{U}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (7.8)$$

であり，部分密度行列 ρ_Y の固有ベクトルは

$$\vec{V}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{V}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (7.9)$$

である．元画像を再構成するための各階層の情報は，次の行列で表される．

$$m^{(1)} = \sqrt{6} \vec{U}_1^t \vec{V}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.10)$$

$$m^{(2)} = \sqrt{2} \vec{U}_2^t \vec{V}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (7.11)$$

以上より確かに

$$\sum_{n=1}^2 m^{(n)} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} = m \quad (7.12)$$

が得られる．

7.1.3 スピン構造の特異値分解

筆者らはこの方法を2次元古典イジングスピンのスナップショットに応用し，そこから系の臨界的性質が抽出できるか調べた [66–70]．特に臨界点でのスナップショットはフラクタル的であるため，様々なスケールの秩序化したクラスターが混在している．そのため，特異値分解により分解されたデータは，典型スケールが連続的に変化する3次元的数据として表現することができる．このことは，臨界点のデータはより簡便な形である種の計量を持った高次元空間上で表現されうること示唆しており，その空間の幾何学を調べることで元のデータの特徴を理解することができると思われる．

分解方向の特異値スペクトルの挙動を調べることで，一枚のスナップショットから臨界指数を抽出することができる．実際に

$$\lambda_n \propto \frac{1}{n^{1-\eta}} \quad (7.13)$$

というスケーリング特性を示すことが分かっている． $\eta = 1/4$ はイジング模型の異常次元である．

7.1.4 厳密なフラクタルの場合

フラクタル画像は厳密なスケール変換により定義されるので、特異値分解の性質を理解するのに特に都合がよい。ここではフラクタル画像のエントロピーが持つ意味について考えよう [71]。後のエンタングルメントの議論との相補性を考慮して、以下のようにテンソル積を用いてフラクタルを定義する。

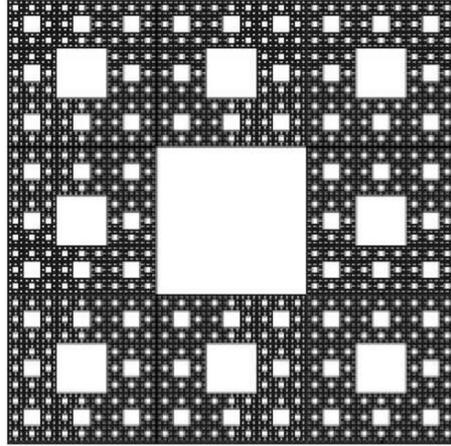


図 7.3: シェルピンスキーのカーペット

はじめに、フラクタルの単位格子を $h \times h$ 行列 H とする。例えばシェルピンスキーのカーペットに対しては、白いピクセルを 0、黒いピクセルを 1、 $h = 3$ とする。

$$H = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (7.14)$$

である。これを単位格子として、 N 回スケール変換を施すと、それによって生成されるフラクタル画像 (行列 M) は

$$M = \underbrace{H \otimes H \otimes \cdots \otimes H}_{N \text{ 個}} \quad (7.15)$$

とテンソル積で表すことができる。テンソル演算を繰り返していけばフラクタルのより細かい構造が生成される。行列 M を $L \times L$ 行列とすると $L = h^N$ となる。今、単位格子行列のゼロでない固有値は二つあり、それらは $1 \pm \sqrt{3}$ となっていることが分かる。

テンソル積で因子化された行列 M の二乗は

$$M = \underbrace{H^2 \otimes H^2 \otimes \cdots \otimes H^2}_{N \text{ 個}} \quad (7.16)$$

と表すことができる．この固有値は，行列 H^2 の固有値のあらゆる組み合わせで与えられる．ゼロでない固有値はやはり二つあり，後々のために規格化すると

$$\gamma_{\pm} = \frac{1}{2} \pm \frac{\sqrt{3}}{4} \quad (7.17)$$

となる．すなわち

$$\gamma_{-} = 1 - \gamma_{+} \quad (7.18)$$

が成り立つ．このとき，固有値は

$$\lambda_j = \gamma_{+}^j \gamma_{-}^{N-j} = \gamma_{+}^j (1 - \gamma_{+})^{N-j} \quad (7.19)$$

となる．但し各 j の縮重度は二項係数で与えられる．このときエントロピーは，

$$S = - \sum_{j=1}^N {}_N C_j \lambda_j \log \lambda_j = \left(- \sum_{i=\pm} \gamma_i \log \gamma_i \right) N \propto \log L \quad (7.20)$$

となることが確かめられる．すなわち，画像のエントロピーの大きさは，その画像中に異なるスケールの情報が何通り含まれているかを表している．システムサイズ L に対して対数の依存性を示すということが，笠・高柳の公式と非常に類似している．

7.2 特異値分解の連続極限とメリン逆変換

量子エンタングルメントとホログラフィーは，近年の情報物理分野では非常に相補的なモノであることが分かってきている．前者（エンタングルメント）に関して統計力学・物性理論の立場からは，特異値分解によるエンタングルメント・エントロピーの定式化が良く知られており，密度行列くりこみ群やテンソルネットワーク形式の変分理論では必須の技術となっている．一方，特異値分解と後者（ホログラフィー）の関係性は必ずしも自明ではない．筆者の幾つかの研究（古典系に対する画像エントロピー）でその関わりが認識されつつあるものの，まだ非常に未成熟なレベルであり，数学的に精密な定式化は見出されていない．量子系に至っては研究例すらない状態であるが，現象論的には MERA がそれに相当すると

考えられる．技術上の大きな問題は，特異値分解が離散的な分解であるということである．このため，一次元高い疑似的なデータ空間を考えているというイメージはできるものの，きちんとした幾何学あるいは座標という捉え方がまだできていないということが現状である．そこで本稿では特異値分解の連続極限をどのように定義するのが適切か考察する [72]．

結論としては，臨界系のスナップショット・データの SVD には自然な形でくりこみ群の構造や双曲幾何が内包されているようである．特に SVD の分解インデックスの連続極限は，双曲空間の動径方向に対応している．本研究は先ずは古典・古典変換の範囲の話であるが，いずれ量子・古典変換のバージョンも調べれば，ゲージ重力対応とのつながりも見えてくるかもしれない．

2次元の強磁性イジング模型を考える．

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (7.21)$$

モンテカルロ法でスナップショットを一枚作り，それを $L_x \times L_y$ の行列 $M(x, y)$ と見なして特異値分解しよう．

$$M(x, y) = \sum_{n=1}^L U_n(x) \sqrt{\lambda_n} V_n(y) \quad (7.22)$$

但し $L = \min(L_x, L_y)$ で $U_n(x)$ と $V_n(y)$ はユニタリー行列である． $U_n(x)V_n(y)$ を n 番目の層データと呼ぶことにする．これは特異値を $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_L$ と並べたときに n 番目に大きなスピン・クラスターの情報である．次に部分密度行列を次のように定義する．

$$\rho(x, x') = \sum_y M(x, y) M(x', y) = \sum_{n=1}^L U_n(x) \lambda_n U_n(x') \quad (7.23)$$

重要なことは，部分密度行列 $\rho(x, x') = \rho(x', x)$ が本質的には2点相関関数 $C(l)$ (ただし $l = |x - x'|$) に対応することである [67]．これはスピン配置の行列の積を取ることからも容易に類推されるだろう．より詳細には，一枚の画像では並進対称性がないので，サンプル平均を取ってサンプル依存性を落とす必要がある．幸いなことに，特異値スペクトルの漸近形はサンプルに依存しないことが数値的に確かめられているので [68, 69]，

$$C(l) = \rho_\eta(l) = \langle \rho(x, x') \rangle = \sum_{n=1}^L \langle U_n(x) U_n(x') \rangle \lambda_n \quad (7.24)$$

が成り立つ．以降， $\langle U_n(x) U_n(x') \rangle$ を $R_n(l)$ と表す．

これまでの研究 [68,69] で, 臨界点画像に対する特異値スペクトルの代数的減衰 $\lambda_n = \lambda_1 n^{-\Delta}$ が明らかとなっている. そこで添え字が熱力学極限で

$$\lambda_n = \frac{\lambda_1}{n^\Delta} \rightarrow \lambda(z) = \frac{\lambda_1}{z^\Delta} \quad (7.25)$$

と連続変数 z ($0 \leq z < \infty$) で表せると仮定する. また $R_n(l)$ を $R(l, z)$ と表す. このとき

$$\rho_\Delta(l) = \lambda_1 \int_0^\infty dz R(l, z) z^{-\Delta} \quad (7.26)$$

となる. 特に2次元イジング模型の臨界点では, 指数 Δ が異常次元 $\eta (= 1/4)$ を用いて

$$\Delta = 1 - \eta \quad (7.27)$$

と表せることが数値計算の結果から分かっているので,

$$\rho_\eta(l) = \lambda_1 \int_0^\infty dz R(l, z) z^{\eta-1} \quad (7.28)$$

が得られる.

ここで一つ注意すべきは, 式 (7.25) の規格化の問題である. 今 $\Delta = 1 - \eta \leq 1$ のために積分が発散してしまう. 数値計算の結果を注意深く検討して, ある減衰関数 $f(z)$ を用いて

$$\lambda(z) = \frac{f(z)}{z^{1-\eta}} \quad (7.29)$$

とするのが良い. このとき, 規格化条件

$$\int_0^\infty f(z) z^{\eta-1} dz = 1. \quad (7.30)$$

に対して

$$\rho_\eta(l) = \int_0^\infty dz R(l, z) f(z) z^{\eta-1} \equiv \int_0^\infty dz \mathcal{R}(l, z) z^{\eta-1} \quad (7.31)$$

を考えることになる. この逆変換がユニークに定まれば, $\rho_\eta(l)$ から $\mathcal{R}(l, z)$ の明示公式が直接得られる. 規格化条件から, 減衰関数 $f(z)$ は

$$f(z) = \frac{\beta^\eta}{\Gamma(\eta)} e^{-\beta z} \quad (7.32)$$

とガンマ関数を用いて表されるべきである. この形は, もしも $z = \xi^{-1}$ 及び $\beta = l$ と仮定すれば, 臨界点から離れた時に指数関数的に減衰する2点相関を表現しているように思われる.

ポイントは、式(7.31)の積分をくりこみフローに関わるデータの和と見なすことである。この場合、ある特定の z に対するデータは、ある有限相関長 ξ の相関関数に対応する。後により一般的な場合を考察するが、まずは単純に $z \propto \xi^{-1}$ としてみる。なぜかと言うと、 z の小さい領域のデータは大きなクラスターの情報に対応するためである。一般に臨界点近傍の2点相関関数は Ornstein-Zernike 公式は

$$C(l) = \frac{A}{l^{d-2+\eta}} e^{-l/\xi} = \frac{A}{l^\eta} e^{-l/\xi} \quad (7.33)$$

で与えられる。ここで d は空間次元、 A は適当な定数である。この公式に従えば、

$$\mathcal{R}(l, z) = \frac{Ae^{-zl}}{(zl)^{\eta'}} \quad (7.34)$$

となることが容易に期待される ($\eta' \rightarrow \eta$)。このとき部分密度行列は実際に次のように与えられ、臨界点での2点相関に一致する。

$$\rho_\eta(l) = \frac{A}{l^{\eta'}} \int_0^\infty dz e^{-zl} z^{\eta-\eta'-1} = \frac{A}{l^\eta} \Gamma(\eta - \eta') \quad (7.35)$$

現状では η' は現象論的パラメータであり、積分の収束のために η' は厳密には η に一致していないとしておく。その意味はもう少し検討の余地がある。ガンマ関数の存在は、このあと逆変換を考えるときに重要になる。

あらためて重要な結果を述べよう。くりこみのフローを与える変数は相関長と次のように関係している：

$$z = \frac{1}{\xi} \quad (7.36)$$

従って、特異値分解は異なる相関長を持つデータの集合であると言える。

次のステップに行く前に、減衰因子 $f(z)$ の拡張を行う。ここまでは特殊な形を仮定していたのであるが、より一般的には

$$f(z) \propto e^{-\beta z^\kappa} \quad (7.37)$$

とする方がベターである。 κ は現象論的パラメータである [70]。ここで $R(l, z) = Ae^{-\beta z^\kappa} / (zl)^{\eta'}$ と仮定すると、we find

$$\rho_\eta(z) = \lim_{\eta' \rightarrow \eta} \frac{A}{l^{\eta'}} \int_0^\infty dz e^{-\beta z^\kappa} z^{\eta-\eta'-1} = \lim_{\eta' \rightarrow \eta} \frac{A}{\kappa \beta^{(\eta-\eta')/\kappa} l^{\eta'}} \Gamma\left(\frac{\eta-\eta'}{\kappa}\right) \quad (7.38)$$

が得られ、 $\eta' \rightarrow \eta$ の場合に臨界点での相関関数の幂的減衰 l^η が表現できる、このとき $\beta = l$ に対して

$$z^\kappa = \frac{1}{\xi} \quad (7.39)$$

が得られる．この場合も，相関長が伸びればくりこみのフローが進むことが分かる．

式 (7.31) は関数 $\mathcal{R}(l, z)$ のメリン変換と呼ばれる．その特徴は，異常次元 η 自身がスケール・パラメータ z に共役な量となっていることである．そこで我々の目的は，メリン逆変換を実行することである．この目的のために， $\rho_\eta(l)$ を解析接続して，複素変数 η の関数と見なす．メリン逆変換は Bromwich 積分

$$\mathcal{R}(l, z) = \lim_{p \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} \int_{c-ip}^{c+ip} z^{-\eta} \rho_\eta(l) d\eta \quad (7.40)$$

の形で表される．留数定理を適用して積分するためには，ガンマ関数は次のような無限積公式で表すと都合がよい：

$$\Gamma(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(n-1)! n^z}{z(z+1)(z+2)\cdots(z+n-1)} \quad (7.41)$$

これはゼロと負の整数のところに一位の極を持つ．それらの留数は

$$\text{Res}(\Gamma, -n) = \lim_{z \rightarrow -n} (z+n)\Gamma(z) = \frac{(-1)^n}{n!} \quad (7.42)$$

と表すことができる ($n = 0, 1, 2, \dots$)．これより

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(l, z) &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C z^{-\eta} \frac{A}{l^\eta} \Gamma(\eta - \eta') d\eta \\ &= \sum_{n \geq 0} \frac{A}{(lz)^\eta} \text{Res}(\Gamma, -n) \delta(\eta - \eta' + n) \\ &= \frac{A}{(lz)^{\eta'}} e^{-lz} \end{aligned} \quad (7.43)$$

が得られる．但し積分路 C は全ての極を囲う．これは式 (7.34) に一致することが分かる．論文 [72] では，系が臨界点から外れた場合の解析も行っており，ブラックホール理論との関わりが示唆されている．これも AdS/CFT 対応と通じるところがあるようである．

7.3 現在興味があること

以上の研究の自然な流れとして，特異値分解とウェーブレット変換の関わりを研究することには意味があるだろう．より具体的にはメリン基底をどのように座標変換すれば，どのようなウェーブレット基底に変換されるのかを調べることかと思われる．また画像と共形場理論をつなぐためには Schramm–Loewner evolution (SLE) やパーコレーションに関わる確率過程論が重要になることは疑いないところであろう．いずれにしてもようやく数理的な精密化の方向性が見えてきたという段階で，まだまだ調べることは沢山ありそうである．

おわりに

この業界，何だか論理回路的な仕事が多くなってきた気がする。「演算」ということを一步深くとらえ，エンタングルメントとの関連づけがクリアになったことは素直にいいことだと思う．概念自体は30年昔からあるのであるが，最近ようやく分かるようになってきた気がする．最新の論文レベルの話ではあるが，色々な例題も出て来ているので，これを使って学生達と色々調べてみるのは楽しそうである．特に強相関電子論の立場からは，物理的に妥当な議論ができそうなら考える前に使って見るということが必要だと思われる．ただし，回路的にし過ぎると，与えられたハミルトニアンの正しい電子状態をそれこそ素直に見たいという思いに対して，何だかバイアスを設けているような気がしてならない．いつぞやの基研研究会のコーヒー・ブレイクで田崎晴明さんと話した折，田崎さんが「自分達がVBS理論を作ったけど，ハミルトニアンから離れすぎていて，分野の傾向として必ずしもいいとは限らない気がする」的なことを話していたことを思い出す．このあたりの注意は私の教科書のあとがきにひっそり書いておいた．それは物性屋さんにしてみれば（私自身も），対象とする系のくりこみ固定点情報が分かったからといって，必ずしもその系が全て分かったことにはならないからと感ずるからではないだろうか．その系を特徴づけるオペレータで具体的な物理量を書き下さないとしっくりこないものである．

テンソルネットワークと書くどうしても離散系が中心となってしまうが，連続系の相補的な研究も必要である．特にホログラフィー原理やバルク境界対応の観点からは，メリン変換やサイン二乗変形が重要な意味を持つと思われる．メリン変換については，スナップショット・エントロピーの画像处理的な解析をようやく積分変換の土壌に載せることができたという意味で，この後の発展が見込まれる．また画像はSLEなどを通じて共形場理論とも理論の深い部分でつながりがあるはずであると考えている．そちらの方面の研究も数理物理としてはかなり重要であると考えている．くりこみの色々な見方があってよいのだというよい例である．

いずれにしてもこれを契機に更に精進が必要である．

謝辞

まずは夏の学校で私の講義を受講して下さいました学生の皆様方に感謝いたします。また講師の機会を下さった運営サイドの皆様，特に講義世話人の 村一航さん（京大）に感謝いたします。会場では私の教科書持参で参加してくれた熱心な学生さんも多く見かけて大変感激しました。「よく勉強しているな」と感じさせる質問も講義中に幾つもあり，感心しました。「エンタングルメント」や「テンソル積変分」というキーワードは，物理分野でだいぶ市民権を得てきたと感じていますが，単に惰性で流行を追うことなく，どのようなことが研究テーマになり得るのか，冷静に考えて頂きたいと思います。くりこみ群の情報論的な見方は極めて強力でありながら，具体的問題はその外にあることを改めて認識して頂きたいと思います。私個人としては，講義に向けて準備をしながら新たに得た知見なども幾つかあり，今後の研究上も非常に意味のある機会を頂いたと思っています。ありがとうございました。

関連図書

- [1] 松枝宏明著「量子系のエンタングルメントと幾何学 ホログラフィー原理に基づく異分野横断の数理」, 森北出版 (2016) .
- [2] Jacob D. Bekenstein, "Black Holes and Entropy", *Phys. Rev. D* **7**, 2333 (1973).
- [3] S. W. Hawking, "Black holes and thermodynamics", *Phys. Rev. D* **13**, 191 (1976).
- [4] L. Bombelli, R. Koul, J. Lee, and R. Sorkin, "Quantum source of entropy for black holes", *Phys. Rev. D* **34**, 373 (1986).
- [5] Mark Srednicki, "Entropy and area", *Phys. Rev. Lett.* **71**, 666 (1993).
- [6] M. B. Plenio, J. Eisert, J. Dreißig, and M. Cramer, "Entropy, Entanglement, and Area: Analytical Results for Harmonic Lattice Systems", *Phys. Rev. Lett.* **94**, 060503 (2005).
- [7] T. Barthel, M. -C. Chung, and U. Schollwöck, "Entanglement scaling in critical two-dimensional fermionic and bosonic systems", *Phys. Rev. A* **74**, 022329 (2006).
- [8] A. Riera and J. I. Latorre, "Area law and vacuum reordering in harmonic networks", *Phys. Rev. A* **74**, 052326 (2006).
- [9] Weifei Li, Leitan Ding, Rong Yu, Tommaso Roscilde, and Stephan Haas, "Scaling behavior of entanglement in two- and three-dimensional free-fermion systems", *Phys. Rev. B* **74**, 073103 (2006).
- [10] Christoph Holzhey, Finn Larsen, and Frank Wilczek, "Geometric and Renormalized Entropy in Conformal Field Theory", *Nucl. Phys.* **B424**, 443 (1994).
- [11] Pasquale Calabrese and John Cardy, "Entanglement entropy and quantum field theory", *J. Stat. Mech.* **0406**, P002 (2004).

- [12] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev, "Entanglement in Quantum Critical Phenomena", *Phys. Rev. Lett.* **90**, 227902 (2003).
- [13] Michael M. Wolf, "Violation of the Entropic Area Law for Fermions", *Phys. Rev. Lett.* **96**, 010404 (2006).
- [14] Brian Swingle, "Entanglement Entropy and the Fermi Surface", *Phys. Rev. Lett.* **105**, 010404 (2010).
- [15] Dimitri Gioev and israel Klich, "Entanglement Entropy of Fermions in Any Dimension and the Widom Conjecture", *Phys. Rev. Lett.* **96**, 100503 (2006).
- [16] S. Östlund and S. Rommer, "Thermodynamic Limit of Density Matrix Renormalization", *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3537 (1995).
- [17] S. Rommer and S. Östlund, "Class of ansatz wave functions for one-dimensional spin systems and their relation to the density matrix renormalization group", *Phys. Rev. B* **55**, 2164 (1997).
- [18] F. Verstraete and J. I. Cirac, "Renormalization algorithms for Quantum-Many Body Systems in two and higher dimensions", *arXiv:0407066* (2004).
- [19] F. Verstraete, M. M. Wolf, D. Perez-Garcia, and J. I. Cirac, "Criticality, the Area Law, and the Computational Power of Projected Entangled Pair States", *Phys. Rev. Lett.* **96**, 220601 (2006).
- [20] V. Murg, F. Verstraete, and J. I. Cirac, "Variational study of hard-core bosons in a 2-D optical lattice using Projected Entangled Pair States (PEPS)", *Phys. Rev. A* **75**, 033605 (2007).
- [21] M. Andersson, M. Boman, and S. Östlund, "Densite-matrix renormalization group for a gapless system of free fermions", *Phys. Rev. B* **59**, 10493 (1999).
- [22] L. Tagliacozzo, Thiago. R. de Oliveira, S. Iblisdir, and J. I. Latorre, "Scaling of entanglement support for matrix product states", *Phys. Rev. B* **78**, 024410 (2008).
- [23] F. Pollmann, S. Mukerjee, A. Turner, and J. E. Moore, "Theory of Finite-Entanglement Scaling at One-Dimensional Quantum Critical Points", *Phys. Rev. Lett.* **102**, 255701 (2009).

- [24] Ching-Yu Huang and Feng-Li Lin, "Multiparticle entanglement measures and quantum criticality from matrix and tensor product states", *Phys. Rev. A* **81**, 032304 (2010).
- [25] Tzu-Chieh Wei, "Entanglement under the renormalization-group transformations on quantum states and in quantum phase transitions", *Phys. Rev. A* **81**, 062313 (2010).
- [26] G. Vidal, "Entanglement Renormalization", *Phys. Rev. Lett.* **99**, 220405 (2007).
- [27] 細谷暁夫著「量子コンピュータの基礎」, 数理科学 SGC ライブラリ 69, サイエンス社 (1999) .
- [28] 中山茂著「量子アルゴリズム」, 技報堂出版 (2014) .
- [29] A. J. Ferris, "Fourier Transform for Fermionic Systems and the Spectral Tensor Network", *Phys. Rev. Lett.* **113**, 010401 (2014).
- [30] A. J. Ferris and D. Poulin, "Tensor Networks and Quantum Error Correction", *Phys. Rev. Lett.* **113**, 030501 (2014).
- [31] L. K. Grover, "Quantum Mechanics Helps in Searching for a Needle in a Haystack", *Phys. Rev. Lett.* **79**, 325 (1997).
- [32] H. Matsueda, "Analytic Optimization of a MERA Network and its Relevance to Quantum Integrability and Wavelet", *arXiv:1608.02205* (2016).
- [33] K. Okunishi and T. Nishino, "Scale-free property and edge state of Wilson's numerical renormalization group", *Phys. Rev. B* **82**, 144409 (2010).
- [34] Xiao-Liang Qi, "Exact holographic mapping and emergent space-time geometry", *arXiv:1309.6282* (2013).
- [35] Ching Hua Lee and Xiao-Liang Qi, "Exact holographic mapping in free fermion systems", *Phys. Rev. B* **93**, 035112 (2016).
- [36] G. Evenbly and S. R. White, "Entanglement Renormalization and Wavelets", *Phys. Rev. Lett.* **116**, 140403 (2016).
- [37] G. Evenbly and S. R. White, "Representation and design of wavelets using unitary circuits", *arXiv:1605.07312* (2016).

- [38] G. Evenbly and G. Vidal, "Tensor Network Renormalization", *Phys. Rev. Lett.* **115**, 180405 (2015).
- [39] G. Evenbly and G. Vidal, "Tensor Network Renormalization Yields the Multiscale Entanglement Renormalization Ansatz", *Phys. Rev. Lett.* **115**, 200401 (2015).
- [40] G. Evenbly and G. Vidal, "Local Scale Transformation on the Lattice with Tensor Network Renormalization", *Phys. Rev. Lett.* **116**, 040401 (2016).
- [41] Francisco C. Alcaraz and Matheus J. Lazo, "The Bethe ansatz as a matrix product ansatz", *J. Phys. A* **37**, L1, (2004).
- [42] Francisco C. Alcaraz and Matheus J. Lazo, "Exact solutions of exactly integrable quantum chains by a matrix product ansatz", *J. Phys. A: Math. Gen.* **37**, 4149, (2004).
- [43] Francisco C. Alcaraz and Matheus J. Lazo, "Generalization of the matrix product ansatz for integrable chains", *J. Phys. A* **39**, 11335, (2006).
- [44] Hosho Katsura and Isao Maruyama, "Derivation of Matrix Product Ansatz for the Heisenberg Chain from Algebraic Bethe Ansatz", *J. Phys. A: Math. Theor.* **43**, 175003 (2010).
- [45] V. Murg, V. E. Korepin, and F. Verstraete, "Algebraic Bethe ansatz and tensor networks", *Phys. Rev. B* **86**, 045125 (2012).
- [46] Isao Maruyama and Hosho Katsura, "Continuous Matrix Product Ansatz for the One-Dimensional Bose Gas with Point Interaction", *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 073002 (2010).
- [47] G. 't Hooft, "Dimensional Reduction in Quantum Gravity", *arXiv:gr-qc/9310026* (1993).
- [48] L. Susskind, "The World as an Hologram", *J. Math. Phys.* **36**, 6377 (1995).
- [49] Juan Maldacena, "The Large N limit of superconformal field theories and supergravity", *Adv. Theor. Math. Phys.* **2**, 231 (1998).

- [50] Ofer Aharony, Steven S. Gubser, Juan M. Maldacena, Hiroshi Ooguri, and Yaron Oz, "Larve N Field Theories, String Theory and Gravity", *Phys. Rept.* **323**,183 (2000).
- [51] S. S. Gubser, I. R. Klebanov, and A. M. Polyakov, "Gauge Theory Correlators from Non-Critical String Theory", *Phys. Lett. B* **428**, 115 (1998).
- [52] Edward Witten, "Anti De Sitter Space And Holography", *Adv. Theor. Math. Phys.* **2**, 253 (1998).
- [53] J. D. Brown and M. Henneaux, "Central Charges in the Canonical Realization of Asymptotic Symmetries: An Example from Three Dimensional Gravity", *Comm. Math. Phys.* **104**, 207 (1986).
- [54] Shinsei Ryu and Tadashi Takayanagi, "Holographic Derivation of Entanglement Entropy from the anti-de Sitter Space/Conformal Field Theory Correspondence", *Phys. Rev. Lett.* **96**, 181602 (2006).
- [55] Shinsei Ryu and Tadashi Takayanagi, "Aspects of Holographic Entanglement Entropy", *JHEP* **0608**, 45 (2006).
- [56] Tatsuma Nishioka, Shinsei Ryu, and Tadashi Takayanagi, "Holographic Entanglement Entropy: An Overview", *J. Phys. A* **42**, 504008 (2009).
- [57] Brian Swingle, "Entanglement renormalization and holography", *Phys. Rev. D* **86**, 065007 (2012).
- [58] A. Gendiar, R. Krcmar and T. Nishino, *Prog. Theor. Phys.* **122**, 953 (2009).
- [59] T. Hikihara and T. Nishino, "Connecting distant ends of one-dimensional critical systems by a sine-square deformation", *Phys. Rev. B* **83**, 060414 (2011).
- [60] H. Katsura, "Sine-square deformation of solvable spin chains and conformal field theories", *J. Phys. A: Math. Theor.* **45**, 115003 (2012).
- [61] T. Tada, "Sine-Square Deformation and its Relevance to String Theory", *Mod. Phys. Lett. A* **30**, 1550092 (2015).
- [62] N. Ishibashi and T. Tada, "Infinite circumference limit of conformal field theory", *J. Phys. A: Math. Theor.* **48**, 315402 (2015).

- [63] N. Ishibashi and T. Tada, "Dipolar quantization and the infinite circumference limit of two-dimensional conformal field theories", *arXiv:1602.01190* (2016).
- [64] K. Okunishi, "Sine-square deformation and Möbius quantization of two-dimensional conformal field theory", *arXiv:1603.09543* (2016).
- [65] H. Katsura and K. Okunishi, "Sine-square deformation and supersymmetric quantum mechanics", *arXiv:1505.07904* (2015).
- [66] H. Matsueda, "Holographic Entanglement Entropy in Suzuki-Trotter Decomposition of Spin Systems", *Phys. Rev. B* **85**, 031101 (2012).
- [67] Y. Imura, T. Okubo, S. Morita, and K. Okunishi, "Snapshot spectrum and critical phenomenon for two-dimensional classical spin systems", *J. Phys. Soc. Jpn.* **83**, 114002 (2014).
- [68] H. Matsueda and D. Ozaki, "Proper encoding for snapshot-entropy scaling in two-dimensional classical spin models", *Phys. Rev. E* **92**, 042167 (2015).
- [69] H. Matsueda, C. H. Lee, and Y. Hashizume, "Comment on "Snapshot spectrum and critical phenomenon for two-dimensional classical spin systems"", *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 086001 (2016).
- [70] C. H. Lee, Dai Ozaki, and H. Matsueda, "Random Fractal Ansatz for the configuration of Two-Dimensional Critical Systems", *arXiv:1608.04113* (2016).
- [71] C. H. Lee, Y. Yamada, T. Kumamoto, and H. Matsueda, "Exact Mapping from Singular-Value Spectrum of Fractal Images to Entanglement Spectrum of One-Dimensional Quantum Systems", *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 013001 (2015).
- [72] H. Matsueda, "Inverse Mellin Transformation of Continuous Singular Value Decomposition: A Route to Holographic Renormalization", *arXiv:1607.03552* (2016), accepted for publication in JPSJ.
- [73] David K. Ruch and Patrick J. van Fleet, "Wavelet Theory: An Elementary Approach with Applications", Wiley (2009).

付録A ウェーブレット理論

近年、情報物理やホログラフィーに関わる問題において、ウェーブレット的な見方の重要度が増してきている。また種々の物性実験においても、スペクトログラムを取り扱う場面が増えてきている。しかしその割には、日本の大学でウェーブレットを学ぶ機会はあまりないような気がする。本稿は体系的な記述ではないものの、関連の論文を読むために最低限必要な知識をまとめたものである。分かりやすい参考書としては文献 [73] などをお勧めする。

A.1 ハール関数による離散的ウェーブレット変換の基本的性質の検討

A.1.1 信号の多重解像度分解

任意の信号 $f_0(x)$ を、近似値 $f_1(x)$ と誤差 $g_1(x)$ に分解する。それを繰り返して以下の式を得る：

$$\begin{aligned}
 f_0(x) &= g_1(x) + f_1(x) \\
 &= g_1(x) + (g_2(x) + f_2(x)) \\
 &= g_1(x) + (g_2(x) + (g_3(x) + f_3(x))) \\
 &\quad \dots \\
 &= \sum_{i=1}^n g_i(x) + f_n(x)
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

A.1.2 スケーリング関数とウェーブレット母関数

はじめにスケーリング関数 $\phi(x)$ とウェーブレット母関数 $\psi(x)$ という2種類の関数を導入する。これらは互いに直交し、次の関係を満たすものとする：

- $\phi(x)$ を横に2倍広げたものは、 $\phi(x)$ を平行移動したものの線形結合で表される。

- $\psi(x)$ を横に 2 倍広げたものは, $\phi(x)$ を平行移動したものの線形結合で表される.

最も簡単なものがハール関数である. ハール・ウェーブレットのスケーリング関数は

$$\phi(x) = \begin{cases} 1 & 0 \leq x < 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

と定義され, ウェーブレット母関数は

$$\psi(x) = \begin{cases} 1 & 0 \leq x < 1/2 \\ -1 & 1/2 \leq x < 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

と定義される.

A.1.3 スケーリング関数による近似

連続的な信号 $f_0(x)$ を離散化し, c_0, c_1, \dots, c_{N-1} と N 個サンプリングする. これを

$$f_0(x) = \sum_{k=0}^{N-1} c_{0,k} \phi(x - k) \quad (\text{A.4})$$

と表す. ただし $c_{0,k} = c_k$ である. 次に $f_1(x)$ は

$$f_1(x) = \sum_{k=0}^{N/2-1} c_{1,k} \phi(x/2 - k) \quad (\text{A.5})$$

となる. ただし $c_{1,k} = (c_{0,2k} + c_{0,2k+1})/2$ である. 更に

$$f_2(x) = \sum_{k=0}^{N/4-1} c_{2,k} \phi(x/4 - k) \quad (\text{A.6})$$

となり ($c_{2,k} = (c_{1,2k} + c_{1,2k+1})/2$), 最終的に

$$f_j(x) = \sum_{k=0}^{N/2^j-1} c_{j,k} \phi(x/2^j - k) \quad (\text{A.7})$$

が得られる. 展開係数は

$$c_{j,k} = (c_{j-1,2k} + c_{j-1,2k+1})/2 \quad (\text{A.8})$$

となる．以下では

$$\phi_{j,k}(x) = \phi(x/2^j - k) \quad (\text{A.9})$$

と表す． $k \neq k'$ に対して，明らかに以下の直交性の条件が満たされていることを述べておく：

$$\int_0^N \phi(x)_{j,k}(x) \phi_{j,k'}(x) dx = 0 \quad (\text{A.10})$$

つまり平行移動が直交性を与えることになる．物理の問題で，直交な波動関数は異なる固有エネルギーに属するから，平行移動とエネルギースケールの階層性が関係あるということになる（奥西さんの論文参照）．

A.1.4 ウェーブレット母関数による揺らぎの表現

次に揺らぎの成分をウェーブレット母関数で表す．始めに

$$\begin{aligned} g_1(x) &= f_0(x) - f_1(x) \\ &= \sum_{k=0}^{N-1} c_{0,k} \phi(x-k) - \sum_{k=0}^{N/2-1} c_{1,k} \phi(x/2-k) \\ &= \sum_{k=0}^{N-1} c_{0,k} \phi(x-k) - \sum_{k=0}^{N/2-1} \frac{1}{2} (c_{0,2k} + c_{0,2k+1}) \phi(x/2-k) \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

と表すと，例えば右边第1項の $k=0, 1$ 成分と右边第2項の $k=0$ 成分の差は

$$c_{0,0} \phi(x) + c_{0,1} \phi(x-1) - \frac{1}{2} (c_{0,0} + c_{0,1}) \phi(x/2) = \frac{1}{2} (c_{0,0} - c_{0,1}) \psi(x/2) \quad (\text{A.12})$$

となり，ウェーブレット母関数で表すことができる．これを繰り返すと，最終的に

$$g_1 = \sum_{k=0}^{N/2-1} d_{1,k} \psi(x/2-k) \quad (\text{A.13})$$

となることが分かる．ただし展開係数は $d_{1,k} = (c_{0,2k} - c_{0,2k+1})/2$ である．以上を一般化すると，

$$g_j = \sum_{k=0}^{N/2^j-1} d_{j,k} \psi(x/2^j - k) \quad (\text{A.14})$$

が得られる．展開係数は

$$d_{j,k} = (c_{j-1,2k} - c_{j-1,2k+1})/2 \quad (\text{A.15})$$

で定義される．ここで

$$\psi_{j,k}(x) = \psi(x/2^j - k) \quad (\text{A.16})$$

とおくと，再び $k \neq k'$ に対して，

$$\int_0^N \psi(x)_{j,k}(x) \psi_{j,k'}(x) dx = 0 \quad (\text{A.17})$$

という直交性の条件が得られる．加えて

$$\int_0^N \psi(x)_{j,k}(x) \phi_{j,k'}(x) dx = 0 \quad (\text{A.18})$$

という関係もある．

A.1.5 ウェーブレット変換

$N/2^n = 1$ なる n に対して， $f_n(x)$ は以下のように評価できる：

$$f_n(x) = \sum_{k=0}^{N/2^n-1} c_{n,k} \phi_{n,k}(x) = c_{n,0} \phi_{n,0}(x) \quad (\text{A.19})$$

ここで $\phi_{n,0}(x) = 1$ である．従って，

$$f_0(x) = \sum_{j=1}^n g_j(x) + f_n(x) = \sum_{j=1}^n \sum_{k=0}^{N/2^j-1} d_{j,k} \psi_{j,k}(x) + c_{n,0} \quad (\text{A.20})$$

$\psi_{j,k}$ と $\phi_{j,k}$ の二乗ノルムは

$$|\psi_{j,k}|^2 = \int_0^N \psi_{j,k}^2(x) dx = \int_0^{2^j} dx = 2^j \quad (\text{A.21})$$

および

$$|\phi_{n,0}|^2 = \int_0^N \phi_{n,0}^2(x) dx = \int_0^N dx = N \quad (\text{A.22})$$

$\{\psi_{j,k}/2^{j-1}\}$ および $\phi_{n,0}/\sqrt{N}$ が正規直交基底となり，展開係数は

$$d_{j,k} = \frac{1}{2^j} \int_0^N f(x) \psi_{j,k}(x) dx \quad (\text{A.23})$$

$$c_{n,0} = \frac{1}{N} \int_0^N f(x) dx \quad (\text{A.24})$$

と表すことができる．

A.2 High Pass/Low Pass Filtering

A.2.1 スケーリング係数とウェーブレット係数のフーリエ表示

スケーリング関数は，次のスケーリング方程式

$$\phi(t) = \sqrt{2} \sum_{k=0}^{M-1} h_k \phi(2t - k) \quad (\text{A.25})$$

を満たすように定められる．ハール関数の場合にもスケーリング方程式が満たされている．偶数 M の値は色々に設定することができる．ハール関数の場合には $M = 2$ であり，この後で考えるのは DM Daubechies ウェーブレットである．信号処理の言葉では M はタップ数と呼ばれる．このフーリエは以下のように表せる：

$$\begin{aligned} \Phi(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \phi(t) \\ &= \sqrt{2} \sum_k h_k \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \phi(2t - k) \\ &= \sqrt{2} \sum_k h_k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2} e^{-i\omega(x+k)/2} \phi(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k h_k e^{-i(\omega/2)k} \Phi\left(\frac{\omega}{2}\right) \\ &= H\left(\frac{\omega}{2}\right) \Phi\left(\frac{\omega}{2}\right) \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

すなわち

$$\begin{aligned} \Phi(\omega) &= H\left(\frac{\omega}{2}\right) \Phi\left(\frac{\omega}{2}\right) \\ &= H\left(\frac{\omega}{2}\right) H\left(\frac{\omega}{4}\right) \Phi\left(\frac{\omega}{4}\right) \\ &= \dots \\ &= \prod_{j=1}^n H\left(\frac{\omega}{2^j}\right) \Phi\left(\frac{\omega}{2^n}\right) \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

特に $n \rightarrow \infty$ の場合には

$$\Phi(\omega) = \prod_{j=1}^{\infty} H\left(\frac{\omega}{2^j}\right) \Phi(0) = \prod_{j=1}^{\infty} H\left(\frac{\omega}{2^j}\right) \quad (\text{A.28})$$

となる．

一方，ウェーブレット母関数も次のように表すことができる：

$$\psi(t) = \sqrt{2} \sum_{k=0}^{M-1} g_k \phi(2t - k) \quad (\text{A.29})$$

ただし係数は

$$g_k = (-1)^k h_{M-1-k} \quad (\text{A.30})$$

と定義する．教科書によって添え字の取り方に幾つかの流儀があるので注意すること．このフーリエ変換は以下のように表せる：

$$\begin{aligned} \Psi(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \psi(t) \\ &= \sqrt{2} \sum_k g_k \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \phi(2t - k) \\ &= \sqrt{2} \sum_k g_k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2} e^{i\omega(x+k)/2} \phi(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k g_k e^{-i(\omega/2)k} \Phi\left(\frac{\omega}{2}\right) \\ &= G\left(\frac{\omega}{2}\right) \Phi\left(\frac{\omega}{2}\right) \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

ここで $H(\omega)$ と $G(\omega)$ は以下の関係で結ばれている：

$$\begin{aligned} G(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{k=0}^{M-1} g_k e^{-i\omega k} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{k=0}^{M-1} (-1)^k h_{M-1-k} e^{-i\omega k} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{k=0}^{M-1} h_{M-1-k} e^{-i(\omega+\pi)k} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{l=0}^{M-1} h_l e^{-i(\omega+\pi)(M-1-l)} \\ &= -e^{-i\omega(M-1)} \bar{H}(\omega + \pi) \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

ここで g_k と h_k を結ぶ関係式が変わると位相因子が変わるが，それはこの後の結果自体に影響は及ぼさないので，どのようにとっても実際には構わない．以上より次の式が証明できる：

$$H(\omega)\bar{G}(\omega) + H(\omega + \pi)\bar{G}(\omega + \pi) = 0 \quad (\text{A.33})$$

$$G(\omega)\bar{G}(\omega) + G(\omega + \pi)\bar{G}(\omega + \pi) = 1 \quad (\text{A.34})$$

$$H(\omega)\bar{H}(\omega) + H(\omega + \pi)\bar{H}(\omega + \pi) = 1 \quad (\text{A.35})$$

つまり、次の行列

$$U = \begin{pmatrix} G(\omega) & G(\omega + \pi) \\ H(\omega) & H(\omega + \pi) \end{pmatrix} \quad (\text{A.36})$$

はユニタリーで、

$$U \cdot U^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.37})$$

が成り立つ。

以上が成り立つと、ウェーブレット母関数が振動的であることが示せる。まず

$$H(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k h_k e^{-i\omega k} \rightarrow H(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k h_k = 1 \quad (\text{A.38})$$

から出発し、

$$|H(0)|^2 + |H(\pi)|^2 = 1 \rightarrow H(\pi) = 0 \quad (\text{A.39})$$

を導出する。そうすると

$$H(0)\bar{G}(0) + H(\pi)\bar{G}(\pi) = 0 \quad (\text{A.40})$$

より

$$\bar{G}(0) = 0, \quad |G(\pi)| = 1 \quad (\text{A.41})$$

が得られる。これを用いると、ウェーブレット母関数のフーリエ表示が

$$\Psi(0) = G(0)\Psi(0) = 0 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) dx \quad (\text{A.42})$$

と表せるので、 $\psi(x)$ は振動的であることが分かる。

A.2.2 正規直交系の条件

$\{\phi(x - k) : k \in \mathbb{Z}\}$ が正規直交系を成すための必要十分条件が

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} |\Phi(\omega + 2k\pi)|^2 = \frac{1}{2\pi}, \quad \omega \in \mathbb{R} \quad (\text{A.43})$$

となることが証明できる。この定理は前節で議論してきた内容と等価である。

具体的には以下の計算を行ってみる：

$$\begin{aligned}
 \delta_{k,l} &= \int dx \bar{\phi}(x-k)\phi(x-l) \\
 &= \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp e^{ip(x-k)} \bar{\phi}(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dq e^{-iq(x-l)} \phi(q) \\
 &= \int dq e^{-iq(k-l)} |\phi(q)|^2 \\
 &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_0^{2\pi} du e^{-iu(k-l)} |\phi(u+2n\pi)|^2
 \end{aligned} \tag{A.44}$$

つまり

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} |\phi(u+2n\pi)|^2 = \frac{1}{2\pi} \tag{A.45}$$

が成り立つ必要がある．ここで

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2\pi} &= \sum_k |\Phi(\omega+2k\pi)|^2 \\
 &= \sum_k \left| \Phi\left(\frac{\omega}{2}+k\pi\right) \right|^2 \left| H\left(\frac{\omega}{2}+k\pi\right) \right|^2 \\
 &= \sum_k \left| \Phi\left(\frac{\omega}{2}+2k\pi\right) \right|^2 \left| H\left(\frac{\omega}{2}+2k\pi\right) \right|^2 \\
 &\quad + \sum_k \left| \Phi\left(\frac{\omega}{2}+(2k+1)\pi\right) \right|^2 \left| H\left(\frac{\omega}{2}+(2k+1)\pi\right) \right|^2 \\
 &= \left| H\left(\frac{\omega}{2}\right) \right|^2 \sum_k \left| \Phi\left(\frac{\omega}{2}+2k\pi\right) \right|^2 \\
 &\quad + \left| H\left(\frac{\omega}{2}+\pi\right) \right|^2 \sum_k \left| \Phi\left(\frac{\omega}{2}+(2k+1)\pi\right) \right|^2 \\
 &= \frac{1}{2\pi} \left| H\left(\frac{\omega}{2}\right) \right|^2 + \frac{1}{2\pi} \left| H\left(\frac{\omega}{2}+\pi\right) \right|^2
 \end{aligned} \tag{A.46}$$

という変形が可能なので，最終的に

$$|H(\omega)|^2 + |H(\omega+\pi)|^2 = 1 \tag{A.47}$$

となる．これは前節で得た結果に等しい．

A.2.3 Haar wavelet の場合

ハール関数の場合のフーリエ表示を調べる．先ず

$$\Phi(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^1 e^{-i\omega x} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\omega/2} \frac{\sin\left(\frac{\omega}{2}\right)}{\left(\frac{\omega}{2}\right)} \tag{A.48}$$

また

$$\Psi(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i(\omega-\pi)/2} \frac{1 - \cos\left(\frac{\omega}{2}\right)}{\left(\frac{\omega}{2}\right)} \quad (\text{A.49})$$

ここで

$$H\left(\frac{\omega}{2}\right) = \frac{\Phi(\omega)}{\Phi\left(\frac{\omega}{2}\right)} = \frac{1}{2} (1 + e^{-i\omega/2}) \quad (\text{A.50})$$

であるが,

$$H(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k h_k e^{-i\omega k} \quad (\text{A.51})$$

と比較することにより

$$h_0 = h_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (\text{A.52})$$

が得られる。また

$$g_k = (-1)^k h_{1-k} \quad (\text{A.53})$$

より

$$g_0 = h_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad g_1 = -h_0 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad (\text{A.54})$$

となる。したがって

$$H(\omega) = \frac{1}{2} (1 + e^{-i\omega}) \quad (\text{A.55})$$

$$G(\omega) = \frac{1}{2} (1 - e^{-i\omega}) \quad (\text{A.56})$$

であるが,

$$|H(\omega)|^2 = \frac{1}{2} (1 + \cos \omega) \quad (\text{A.57})$$

$$|G(\omega)|^2 = \frac{1}{2} (1 - \cos \omega) \quad (\text{A.58})$$

となるため、 $|H|^2$ は低周波フィルタ、 $|G|^2$ は高周波フィルタとして働いている。

物性の問題に応用するためには、例えば基底状態の電子状態を考えるのであれば、フェルミ面を境に電子の占有・非占有を議論したい。そのためにフィルター関数のフィルター域を自由に調整して非占有側やフェルミ面から離れた領域をカットするなどの操作が自由にできるウェーブレットを構成したいものである。またフィルターリングの精度は有限温度のボケと対応していると思われるので、そのシャープさも制御できれば好ましいが、少なくともハール関数の場合にはそれは充分ではないように見受けられる。より高次の機能を持ったウェーブレット波形を導入する必要がある。

A.3 Daubechies ウェーブレット

A.3.1 スケーリング方程式

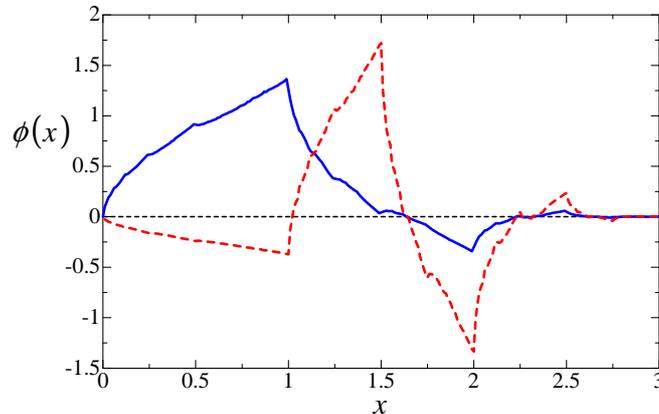


図 A.1: D4 ウェーブレットのスケール関数 (青い実線) とウェーブレット母関数 (赤い破線)

Daubechies ウェーブレットはハール・ウェーブレットの拡張版である。1.2.2. 節で、「 $\Phi(x)$ を横に 2 倍広げたものは、 $\Phi(x)$ を平行移動したものの線形結合で表される」ということをハール関数導入の一条件とした。これを一般化して、

$$\phi(x) = \sqrt{2} \sum_{k=0}^{M-1} h_k \phi(2x - k) \quad (\text{A.59})$$

とする。Haar 基底では $M = 2$ (「 M タップ」と呼ぶ) つまり

$$\phi(x) = \phi(2x) + \phi(2x - 1), \quad h_0 = h_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (\text{A.60})$$

である。またスケール関数についても同様に「 $\Psi(x)$ を横に 2 倍広げたものは、 $\Phi(x)$ を平行移動したものの線形結合で表される」を考慮して

$$\psi(x) = \sqrt{2} \sum_{k=0}^{M-1} g_k \phi(2x - k) \quad (\text{A.61})$$

および

$$g_k = (-1)^k h_{M-1-k} \quad (\text{A.62})$$

と表す． Haar 基底では

$$\psi(x) = \phi(2x) - \phi(2x - 1), \quad g_0 = h_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad g_1 = -h_0 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad (\text{A.63})$$

である． これらより

$$\Phi_{j,k}(x) = \phi(x/2^j - k) \quad (\text{A.64})$$

および

$$\Psi_{j,k}(x) = \psi(x/2^j - k) \quad (\text{A.65})$$

を導入し，多重解像度分解を行う．

本文では scale-invariant MERA への応用などを考える訳であるが，そのとき量子ゲートの入力はずしも 2 入力ではないので，そこを一般化しておきたい． Daubechies ウェーブレットはそのような要請にピッタリである． またこの M の値を $M = 2$ 以外に一般化することで得られる基底を用いれば， Haar 基底の不連続性を回避して，現実の画像処理でより自然な圧縮が可能である． 例えば D4 ウェーブレット (4 タップ) では

$$\phi(x) = \sqrt{2}h_0\phi(2x) + \sqrt{2}h_1\phi(2x - 1) + \sqrt{2}h_2\phi(2x - 2) + \sqrt{2}h_3\phi(2x - 3) \quad (\text{A.66})$$

となる．

A.3.2 モーメント条件

Daubechies によるコンパクト・サポートを持つウェーブレット関数 ψ について，以下の定理が成り立つ．

【定理 1】

整数 m について，以下の条件を満たす数列 $\{h_k; k \in \mathbb{Z}\}$ と対応する g_k が存在する．

$$h_k = 0, \quad k < 0 \text{ or } k > M \quad (\text{A.67})$$

$$\sum_{k=0}^{M-1} h_k h_{k+2m} = \delta_{0,m} \quad (\text{A.68})$$

$$\sum_{k=0}^{M-1} h_k = \sqrt{2} \quad (\text{A.69})$$

$$\sum_{k=0}^{M-1} g_k \cdot k^m = 0, \quad 0 \leq m < \frac{M}{2} - 1 \quad (\text{A.70})$$

第2式はウェーブレット行列の直交性の条件, 最後の式はモーメントに対する条件である(ウェーブレット関数が急減衰関数であることによる)。

【定理2】(定理1と本質的には同じ)

$M \geq 4$ についてスケーリング方程式 $\phi(x) = \sqrt{2} \sum_{k=0}^{M-1} h_k \phi(2x - k)$ を満たし, コンパクト・サポートで

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) dx = 1 \quad (\text{A.71})$$

を満たす解がただ一つ存在する. このスケーリング関数 ϕ のサポートは $[0, M-1]$ である. 更に, $\psi(x) = \sqrt{2} \sum_{k=0}^{M-1} g_k \phi(2x - k)$ を満たすウェーブレット関数もコンパクト・サポートであり, 次の条件を満たす.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) x^m dx = 0, \quad 0 \leq m < \frac{M}{2} - 1 \quad (\text{A.72})$$

証明のアウトライン(2段階)は以下の通り.

まずモーメント条件そのものの存在について整理する. $N = m2^{-m}$ および $j > m > 0$ として次の式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(t) \bar{\psi}(2^{-j}t + N) dt = 0 \quad (\text{A.73})$$

から出発する. これは $t' = t + N2^j$ と変換して

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(t' - N2^j) \bar{\psi}(2^{-j}t') dt' = 0 \quad (\text{A.74})$$

と表せば正しいことがすぐに確認できる.

さて ψ が C^r 級であるとして

$$\bar{\psi}(N + 2^{-j}t) = \bar{\Psi}(N) + \sum_{k=1}^{r-1} \frac{1}{k!} \bar{\psi}^{(k)}(N) (2^{-j}t)^k + \frac{1}{r!} \bar{\psi}^{(r)}(N + \theta(t)2^{-j}t) 2^{-jr} t^r \quad (\text{A.75})$$

と展開する. このとき

$$0 = \sum_k \frac{1}{k!} \bar{\psi}^{(k)}(N) 2^{-jk} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(t) t^k dt + \dots \quad (\text{A.76})$$

となるので, r 次までのモーメントはゼロでなければならない. ただし $\theta(t) \in [0, 1]$ である.

次に定理 1 と定理 2 の同等性について証明する．そのために

$$\Psi(\omega) = G\left(\frac{\omega}{2}\right) \Phi\left(\frac{\omega}{2}\right) \quad (\text{A.77})$$

から出発し，両辺を ω で微分すると，

$$\partial_\omega \Psi(\omega) = \left(\partial_\omega G\left(\frac{\omega}{2}\right)\right) \Phi\left(\frac{\omega}{2}\right) + G\left(\frac{\omega}{2}\right) \left(\partial_\omega \Phi\left(\frac{\omega}{2}\right)\right) \quad (\text{A.78})$$

より

$$\begin{aligned} -i \int e^{-i\omega t} (t\psi(t)) dt &= -i \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k k g_k e^{-i(\omega/2)k} \Phi\left(\frac{\omega}{2}\right) \\ &\quad + G\left(\frac{\omega}{2}\right) \left(-i \frac{1}{2}\right) \int e^{-i\omega t} (t\phi(t)) dt \end{aligned} \quad (\text{A.79})$$

が得られる．

ここで $\omega = 0$ とすると，

$$\int (t\psi(t)) dt = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k k g_k \Phi(0) + G(0) \frac{1}{2} \int t\phi(t) dt \quad (\text{A.80})$$

が得られる． $\Phi(0) = 1$ および $G(0) = 0$ であることから， $\int (t\psi(t)) dt = 0$ であれば $\sum_k k g_k = 0$ が成り立つ．

A.3.3 D4 ウェーブレットの係数の決め方

以下では 4 タップの場合を具体的に調べてみる．このとき，

$$h_0^2 + h_1^2 + h_2^2 + h_3^2 = 1 \quad (\text{A.81})$$

および

$$h_0 h_2 + h_1 h_3 = 0 \quad (\text{A.82})$$

更に

$$h_0 + h_1 + h_2 + h_3 = \sqrt{2} \quad (\text{A.83})$$

が成り立つ．一方 $m = 0, 1$ としてモーメント条件 $\sum_{k=0}^3 g_k \cdot k^m = 0$ を

$$g_0 \cdot 0^m + g_1 \cdot 1^m + g_2 \cdot 2^m + g_3 \cdot 3^m = 0 \quad (\text{A.84})$$

と表す．ここに $g_m = (-1)^m h_{3-m}$ を代入すると (ただし $0^0 = 1$ とする)

$$h_3 \cdot 0^m - h_2 \cdot 1^m + h_1 \cdot 2^m - h_0 \cdot 3^m = 0 \quad (\text{A.85})$$

となるので

$$h_3 - h_2 + h_1 - h_0 = 0 \quad (\text{A.86})$$

および

$$-h_2 + 2h_1 - 3h_0 = 0 \quad (\text{A.87})$$

が得られ, 最終的に次の系列が得られる.

$$h_0 = 0.4829, h_1 = 0.8365, h_2 = 0.2241, h_3 = -0.1294 \quad (\text{A.88})$$

上記を具体的に求めるためには,

$$h_0 = \frac{\nu(\nu-1)}{\sqrt{2}(\nu^2+1)}, h_1 = \frac{1-\nu}{\sqrt{2}(\nu^2+1)} \quad (\text{A.89})$$

$$h_2 = \frac{\nu+1}{\sqrt{2}(\nu^2+1)}, h_3 = \frac{\nu(\nu+1)}{\sqrt{2}(\nu^2+1)} \quad (\text{A.90})$$

或いはより一般的に

$$h_0(\theta) = \frac{1 + \cos \theta - \sin \theta}{2\sqrt{2}}, h_1(\theta) = \frac{1 + \cos \theta + \sin \theta}{2\sqrt{2}} \quad (\text{A.91})$$

$$h_2(\theta) = \frac{1 - \cos \theta + \sin \theta}{2\sqrt{2}}, h_3(\theta) = \frac{1 - \cos \theta - \sin \theta}{2\sqrt{2}} \quad (\text{A.92})$$

として $\theta = \pi/6$ とおけばよい. 実際に

$$h_0\left(\frac{\pi}{6}\right) = \frac{1 + \sqrt{3}}{4\sqrt{2}} = 0.4829, h_1\left(\frac{\pi}{6}\right) = \frac{3 + \sqrt{3}}{4\sqrt{2}} = 0.8365 \quad (\text{A.93})$$

$$h_2\left(\frac{\pi}{6}\right) = \frac{3 - \sqrt{3}}{4\sqrt{2}} = 0.2241, h_3\left(\frac{\pi}{6}\right) = \frac{1 - \sqrt{3}}{4\sqrt{2}} = -0.1294 \quad (\text{A.94})$$

が得られる.

A.4 ウェーブレット行列による表現

A.4.1 ウェーブレット行列

スケーリング関数とウェーブレット関数を

$$W_N = \begin{pmatrix} H_{N/2} \\ G_{N/2} \end{pmatrix} \quad (\text{A.95})$$

と行列で表す．境界条件を適切に選べば

$$W_N \cdot W_N^\dagger = \mathbb{I}_N \quad (\text{A.96})$$

と表せるので

$$W_N^\dagger = W_N^{-1} \quad (\text{A.97})$$

となり， W_N はユニタリ変換（実数しか取り扱わないので実質的には直交行列）である．従ってユニタリー回路の構成がこのあと重要となる．

A.4.2 Haar ウェーブレット

例えば $N = 2$ の場合には

$$W_2 = \begin{pmatrix} h_0 & h_1 \\ g_0 & g_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.98})$$

この構造はこのあと頻繁に登場する．量子アルゴリズムの分野ではアダマール・ゲートと呼ばれている．

例えば $N = 8$ の場合には

$$W_8 = \begin{pmatrix} H_4 \\ G_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_0 & h_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_0 & h_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_0 & h_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h_0 & h_1 \\ \hline g_0 & g_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g_0 & g_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & g_0 & g_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g_0 & g_1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.99})$$

となる．

A.4.3 D4 ウェーブレット

例えば $N = 8$ の場合には

$$W_8 = \left(\frac{H_4}{G_4} \right) = \begin{pmatrix} h_0 & h_1 & h_2 & h_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_0 & h_1 & h_2 & h_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_0 & h_1 & h_2 & h_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h_0 & h_1 \\ \hline g_0 & g_1 & g_2 & g_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g_0 & g_1 & g_2 & g_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & g_0 & g_1 & g_2 & g_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g_0 & g_1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.100})$$

あるいはもしも最後の行のフィルタ係数をトランケートするのではなくワープさせるなら

$$W_8 = \left(\frac{H_4}{G_4} \right) = \begin{pmatrix} h_0 & h_1 & h_2 & h_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_0 & h_1 & h_2 & h_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_0 & h_1 & h_2 & h_3 \\ h_2 & h_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & h_0 & h_1 \\ \hline g_0 & g_1 & g_2 & g_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g_0 & g_1 & g_2 & g_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & g_0 & g_1 & g_2 & g_3 \\ g_2 & g_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & g_0 & g_1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.101})$$

となる。