

テンソルネットワークと  
量子情報・可解性・重力の関わり  
(追加資料)

仙台高等専門学校

松枝 宏明

## はじめに

この原稿は「第 61 回物性若手夏の学校」の講義ノートに対する追加資料である（追加資料のほうがはるかに多くなってしまった...）。本講義のタイトルは「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。夏の学校の運営サイドから指定された紙数の制限上、正規の講義ノートで述べられなかったより進んだ話題や最新の成果について、この裏講義ノートにまとめた。このノートのメインの部分に改めてタイトルをつけるならば

「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」

ぐらいが妥当だろうか。全体としてみると意外なまとまりも出てきたし、夏の学校を受講された皆様やそれ以外の方々の利便性も考えて、もう少し整理したら物性研究に投稿するつもりである。特に以下の数点に興味がある：

- ウェーブレット変換に基づいた物理系の表現に興味を持たれつつあること
- テンソルネットワークの演算回路としての見方を強化すること
- 上記のテーマがエンタングルメント・くりこみ群・ベータ仮説などと深い関わりあいがあること
- 上記テーマと特異値分解との関わりあいも見えつつあること

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痛感する。自分の教科書 [1] に入れておけばよかったなという思いもあるが、ずっと引っ張っていた仕事なので、殆ど触れられぬまま最終的には 6 月にリリースした。でも次の教科書に向けての呼び水ぐらいにはなるかなという程度のレベルか...

皆様の研究モチベーション醸成のために、まだ未完の研究課題や素朴な疑問なども挙げている。せっかく 3 日間こってり一緒に勉強する訳なので、これを期に、一緒に仕事ができる若い仲間とかができるといいなと思ってのことです。

# 目次

第1章 ウェーブレット理論	5
1.1 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	5
1.1.1 信号の多重解像度分解	5
1.1.2 スケーリング関数とウェーブレット母関数	5
1.1.3 スケーリング関数による近似	6
1.1.4 ウェーブレット母関数による揺らぎの表現	7
1.1.5 ウェーブレット変換	8
1.2 High Pass/Low Pass Filtering	9
1.2.1 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	9
1.2.2 正規直交系の条件	11
1.2.3 Haar wavelet の場合	12
1.3 Daubechies ウェーブレット	14
1.3.1 スケーリング方程式	14
1.3.2 モーメント条件	15
1.3.3 D4 ウェーブレットの係数の決め方	17
1.4 ウェーブレット行列による表現	19
1.4.1 ウェーブレット行列	19
1.4.2 Haar ウェーブレット	19
1.4.3 Daubechies D4 ウェーブレット	20
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	21
2.1 量子計算アルゴリズムの歴史的経緯	21
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	22
2.3 階層型ネットワークの具体例	23
2.3.1 高速フーリエ変換のユニタリー・ネットワーク	23
2.3.2 Grover 検索アルゴリズム	25
2.4 MERA ネットワーク	26
2.4.1 MERA ネットワークの量子回路表現	26
2.4.2 厳密対角化との比較	32

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	34
3.1	指数変形による波束の形成	34
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	36
3.3	Exact Holographic Mapping (EHM)	37
3.3.1	EHM	37
3.3.2	ハール・ウェーブレット	39
3.4	MERA ネットワークによるウェーブレットの表現	40
3.4.1	フェルミ面のウェーブレットによる再構成	40
3.4.2	Daubechies D4 ウェーブレットのユニタリー回路表現	42
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	44
4.1	ネットワークの変形 (SVD の活用)	44
4.2	MERA から MPS への変換	44
4.3	TNR から MERA への変換	45
第 5 章	連続的 SVD と Mellin 逆変換を応用したホログラフィックくりこみ群の研究	48
5.1	この研究の目的	48
5.2	定式化	49
5.2.1	連続的特異値分解	49
5.2.2	Mellin 逆変換	53
5.2.3	非臨界領域の表現：ブラックホールとの関わり	55
5.3	量子系におけるくりこみ・AdS/CFT 対応へのコメント	57
第 6 章	ウェーブレット解析と特異値分解の関わり	60
6.1	スナップショット・エントロピーによる比較	60
6.2	特異値分解データのウェーブレット解析	60
6.3	双曲幾何における一般座標変換との関係	61
第 7 章	サイン二乗変形と共形場理論	62
7.1	サイン二乗変形	62
7.2	共形場理論	64
7.2.1	$SL(2, \mathbb{C})$ invariant vacuum	64
7.2.2	$H_{SSD}$ の非自明性	65

# 第1章 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 [2] などをお勧めする．

## 1.1 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

### 1.1.1 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：

$$\begin{aligned} f_0(x) &= g_1(x) + f_1(x) \\ &= g_1(x) + (g_2(x) + f_2(x)) \\ &= g_1(x) + (g_2(x) + (g_3(x) + f_3(x))) \\ &\quad \dots \\ &= \sum_{i=1}^n g_i(x) + f_n(x) \end{aligned} \tag{1.1}$$

### 1.1.2 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

$$\phi(x) = \begin{cases} 1 & 0 \leq x < 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1.2)$$

と定義され, ウェーブレット母関数は

$$\psi(x) = \begin{cases} 1 & 0 \leq x < 1/2 \\ -1 & 1/2 \leq x < 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1.3)$$

と定義される.

### 1.1.3 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

$$f_0(x) = \sum_{k=0}^{N-1} c_{0,k} \phi(x - k) \quad (1.4)$$

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

$$f_1(x) = \sum_{k=0}^{N/2-1} c_{1,k} \phi(x/2 - k) \quad (1.5)$$

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

$$f_2(x) = \sum_{k=0}^{N/4-1} c_{2,k} \phi(x/4 - k) \quad (1.6)$$

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

$$f_j(x) = \sum_{k=0}^{N/2^j-1} c_{j,k} \phi(x/2^j - k) \quad (1.7)$$

が得られる. 展開係数は

$$c_{j,k} = (c_{j-1,2k} + c_{j-1,2k+1})/2 \quad (1.8)$$

となる．以下では

$$\phi_{j,k}(x) = \phi(x/2^j - k) \quad (1.9)$$

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：

$$\int_0^N \phi(x)_{j,k}(x) \phi_{j,k'}(x) dx = 0 \quad (1.10)$$

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）．

#### 1.1.4 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

$$\begin{aligned} g_1(x) &= f_0(x) - f_1(x) \\ &= \sum_{k=0}^{N-1} c_{0,k} \phi(x - k) - \sum_{k=0}^{N/2-1} c_{1,k} \phi(x/2 - k) \\ &= \sum_{k=0}^{N-1} c_{0,k} \phi(x - k) - \sum_{k=0}^{N/2-1} \frac{1}{2} (c_{0,2k} + c_{0,2k+1}) \phi(x/2 - k) \end{aligned} \quad (1.11)$$

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

$$c_{0,0} \phi(x) + c_{0,1} \phi(x - 1) - \frac{1}{2} (c_{0,0} + c_{0,1}) \phi(x/2) = \frac{1}{2} (c_{0,0} - c_{0,1}) \psi(x/2) \quad (1.12)$$

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

$$g_1 = \sum_{k=0}^{N/2-1} d_{1,k} \psi(x/2 - k) \quad (1.13)$$

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，

$$g_j = \sum_{k=0}^{N/2^j-1} d_{j,k} \psi(x/2^j - k) \quad (1.14)$$

が得られる．展開係数は

$$d_{j,k} = (c_{j-1,2k} - c_{j-1,2k+1}) / 2 \quad (1.15)$$

で定義される．ここで

$$\psi_{j,k}(x) = \psi(x/2^j - k) \quad (1.16)$$

とおくと，再び  $k \neq k'$  に対して，

$$\int_0^N \psi(x)_{j,k}(x) \psi_{j,k'}(x) dx = 0 \quad (1.17)$$

という直交性の条件が得られる．加えて

$$\int_0^N \psi(x)_{j,k}(x) \phi_{j,k'}(x) dx = 0 \quad (1.18)$$

という関係もある．

### 1.1.5 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：

$$f_n(x) = \sum_{k=0}^{N/2^n-1} c_{n,k} \phi_{n,k}(x) = c_{n,0} \phi_{n,0}(x) \quad (1.19)$$

ここで  $\phi_{n,0}(x) = 1$  である．従って，

$$f_0(x) = \sum_{j=1}^n g_j(x) + f_n(x) = \sum_{j=1}^n \sum_{k=0}^{N/2^j-1} d_{j,k} \psi_{j,k}(x) + c_{n,0} \quad (1.20)$$

$\psi_{j,k}$  と  $\phi_{j,k}$  の二乗ノルムは

$$|\psi_{j,k}|^2 = \int_0^N \psi_{j,k}^2(x) dx = \int_0^{2^j} dx = 2^j \quad (1.21)$$

および

$$|\phi_{n,0}|^2 = \int_0^N \phi_{n,0}^2(x) dx = \int_0^N dx = N \quad (1.22)$$

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

$$d_{j,k} = \frac{1}{2^j} \int_0^N f(x) \psi_{j,k}(x) dx \quad (1.23)$$

$$c_{n,0} = \frac{1}{N} \int_0^N f(x) dx \quad (1.24)$$

と表すことができる．



## 1.2 High Pass/Low Pass Filtering

### 1.2.1 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

$$\phi(t) = \sqrt{2} \sum_{k=0}^{M-1} h_k \phi(2t - k) \quad (1.25)$$

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：

$$\begin{aligned} \Phi(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \phi(t) \\ &= \sqrt{2} \sum_k h_k \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \phi(2t - k) \\ &= \sqrt{2} \sum_k h_k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2} e^{-i\omega(x+k)/2} \phi(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k h_k e^{-i(\omega/2)k} \Phi\left(\frac{\omega}{2}\right) \\ &= H\left(\frac{\omega}{2}\right) \Phi\left(\frac{\omega}{2}\right) \end{aligned} \quad (1.26)$$

すなわち

$$\begin{aligned} \Phi(\omega) &= H\left(\frac{\omega}{2}\right) \Phi\left(\frac{\omega}{2}\right) \\ &= H\left(\frac{\omega}{2}\right) H\left(\frac{\omega}{4}\right) \Phi\left(\frac{\omega}{4}\right) \\ &= \dots \\ &= \prod_{j=1}^n H\left(\frac{\omega}{2^j}\right) \Phi\left(\frac{\omega}{2^n}\right) \end{aligned} \quad (1.27)$$

特に  $n \rightarrow \infty$  の場合には

$$\Phi(\omega) = \prod_{j=1}^{\infty} H\left(\frac{\omega}{2^j}\right) \Phi(0) = \prod_{j=1}^{\infty} H\left(\frac{\omega}{2^j}\right) \quad (1.28)$$

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：

$$\psi(t) = \sqrt{2} \sum_{k=0}^{M-1} g_k \phi(2t - k) \quad (1.29)$$

ただし係数は

$$g_k = (-1)^k h_{M-1-k} \quad (1.30)$$

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：

$$\begin{aligned} \Psi(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \psi(t) \\ &= \sqrt{2} \sum_k g_k \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\omega t} \phi(2t - k) \\ &= \sqrt{2} \sum_k g_k \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2} e^{i\omega(x+k)/2} \phi(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k g_k e^{-i(\omega/2)k} \Phi\left(\frac{\omega}{2}\right) \\ &= G\left(\frac{\omega}{2}\right) \Phi\left(\frac{\omega}{2}\right) \end{aligned} \quad (1.31)$$

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

$$\begin{aligned} G(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{k=0}^{M-1} g_k e^{-i\omega k} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{k=0}^{M-1} (-1)^k h_{M-1-k} e^{-i\omega k} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{k=0}^{M-1} h_{M-1-k} e^{-i(\omega+\pi)k} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{l=0}^{M-1} h_l e^{-i(\omega+\pi)(M-1-l)} \\ &= -e^{-i\omega(M-1)} \bar{H}(\omega + \pi) \end{aligned} \quad (1.32)$$

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：

$$H(\omega)\bar{G}(\omega) + H(\omega + \pi)\bar{G}(\omega + \pi) = 0 \quad (1.33)$$

$$G(\omega)\bar{G}(\omega) + G(\omega + \pi)\bar{G}(\omega + \pi) = 1 \quad (1.34)$$

$$H(\omega)\bar{H}(\omega) + H(\omega + \pi)\bar{H}(\omega + \pi) = 1 \quad (1.35)$$

つまり、次の行列

$$U = \begin{pmatrix} G(\omega) & G(\omega + \pi) \\ H(\omega) & H(\omega + \pi) \end{pmatrix} \quad (1.36)$$

はユニタリーで、

$$U \cdot U^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.37)$$

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。先ず

$$H(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k h_k e^{-i\omega k} \rightarrow H(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k h_k = 1 \quad (1.38)$$

から出発し、

$$|H(0)|^2 + |H(\pi)|^2 = 1 \rightarrow H(\pi) = 0 \quad (1.39)$$

を導出する。そうすると

$$H(0)\bar{G}(0) + H(\pi)\bar{G}(\pi) = 0 \quad (1.40)$$

より

$$\bar{G}(0) = 0, \quad |G(\pi)| = 1 \quad (1.41)$$

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

$$\Psi(0) = G(0)\Psi(0) = 0 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) dx \quad (1.42)$$

と表せるので、 $\psi(x)$  は振動的であることが分かる。

## 1.2.2 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

$$\sum_{k \in \mathbb{Z}} |\Phi(\omega + 2k\pi)|^2 = \frac{1}{2\pi}, \quad \omega \in \mathbb{R} \quad (1.43)$$

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：

$$\begin{aligned}
\delta_{k,l} &= \int dx \bar{\phi}(x-k)\phi(x-l) \\
&= \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dp e^{ip(x-k)} \bar{\phi}(p) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dq e^{-iq(x-l)} \phi(q) \\
&= \int dq e^{-iq(k-l)} |\phi(q)|^2 \\
&= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_0^{2\pi} du e^{-iu(k-l)} |\phi(u+2n\pi)|^2
\end{aligned} \tag{1.44}$$

つまり

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} |\phi(u+2n\pi)|^2 = \frac{1}{2\pi} \tag{1.45}$$

が成り立つ必要がある．ここで

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2\pi} &= \sum_k |\Phi(\omega+2k\pi)|^2 \\
&= \sum_k \left| \Phi\left(\frac{\omega}{2}+k\pi\right) \right|^2 \left| H\left(\frac{\omega}{2}+k\pi\right) \right|^2 \\
&= \sum_k \left| \Phi\left(\frac{\omega}{2}+2k\pi\right) \right|^2 \left| H\left(\frac{\omega}{2}+2k\pi\right) \right|^2 \\
&\quad + \sum_k \left| \Phi\left(\frac{\omega}{2}+(2k+1)\pi\right) \right|^2 \left| H\left(\frac{\omega}{2}+(2k+1)\pi\right) \right|^2 \\
&= \left| H\left(\frac{\omega}{2}\right) \right|^2 \sum_k \left| \Phi\left(\frac{\omega}{2}+2k\pi\right) \right|^2 \\
&\quad + \left| H\left(\frac{\omega}{2}+\pi\right) \right|^2 \sum_k \left| \Phi\left(\frac{\omega}{2}+(2k+1)\pi\right) \right|^2 \\
&= \frac{1}{2\pi} \left| H\left(\frac{\omega}{2}\right) \right|^2 + \frac{1}{2\pi} \left| H\left(\frac{\omega}{2}+\pi\right) \right|^2
\end{aligned} \tag{1.46}$$

という変形が可能なので，最終的に

$$|H(\omega)|^2 + |H(\omega+\pi)|^2 = 1 \tag{1.47}$$

となる．これは前節で得た結果に等しい．

### 1.2.3 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

$$\Phi(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^1 e^{-i\omega x} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\omega/2} \frac{\sin\left(\frac{\omega}{2}\right)}{\left(\frac{\omega}{2}\right)} \tag{1.48}$$

また

$$\Psi(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i(\omega-\pi)/2} \frac{1 - \cos\left(\frac{\omega}{2}\right)}{\left(\frac{\omega}{2}\right)} \quad (1.49)$$

ここで

$$H\left(\frac{\omega}{2}\right) = \frac{\Phi(\omega)}{\Phi\left(\frac{\omega}{2}\right)} = \frac{1}{2} (1 + e^{-i\omega/2}) \quad (1.50)$$

であるが，

$$H(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k h_k e^{-i\omega k} \quad (1.51)$$

と比較することにより

$$h_0 = h_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (1.52)$$

が得られる．また

$$g_k = (-1)^k h_{1-k} \quad (1.53)$$

より

$$g_0 = h_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad g_1 = -h_0 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad (1.54)$$

となる．したがって

$$H(\omega) = \frac{1}{2} (1 + e^{-i\omega}) \quad (1.55)$$

$$G(\omega) = \frac{1}{2} (1 - e^{-i\omega}) \quad (1.56)$$

であるが，

$$|H(\omega)|^2 = \frac{1}{2} (1 + \cos \omega) \quad (1.57)$$

$$|G(\omega)|^2 = \frac{1}{2} (1 - \cos \omega) \quad (1.58)$$

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．

## 1.3 Daubechies ウェーブレット

### 1.3.1 スケーリング方程式

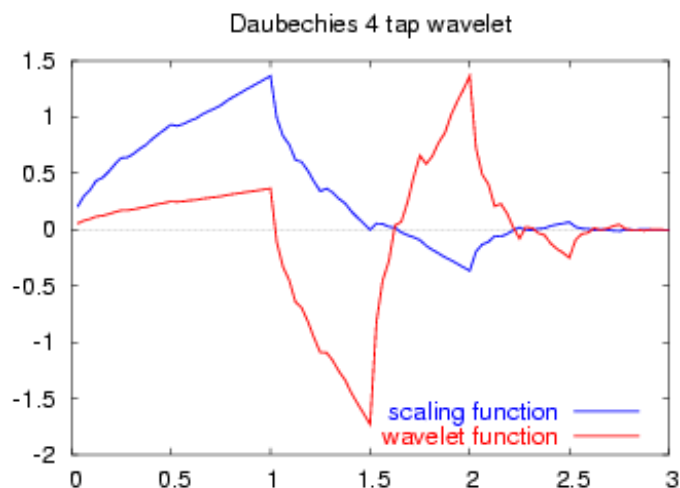


図 1.1: Daubechies D4 ウェーブレットのスケーリング関数とウェーブレット母関数

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、

$$\phi(x) = \sqrt{2} \sum_{k=0}^{M-1} h_k \phi(2x - k) \quad (1.59)$$

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

$$\phi(x) = \phi(2x) + \phi(2x - 1), \quad h_0 = h_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (1.60)$$

である。またスケーリング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

$$\psi(x) = \sqrt{2} \sum_{k=0}^{M-1} g_k \phi(2x - k) \quad (1.61)$$

および

$$g_k = (-1)^k h_{M-1-k} \quad (1.62)$$

と表す． Haar 基底では

$$\psi(x) = \phi(2x) - \phi(2x - 1), \quad g_0 = h_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad g_1 = -h_0 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \quad (1.63)$$

である． これらより

$$\Phi_{j,k}(x) = \phi(x/2^j - k) \quad (1.64)$$

および

$$\Psi_{j,k}(x) = \psi(x/2^j - k) \quad (1.65)$$

を導入し，多重解像度分解を行う．

これから scale-invariant MERA への応用などを後程考える訳であるが，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

$$\phi(x) = \sqrt{2}h_0\phi(2x) + \sqrt{2}h_1\phi(2x - 1) + \sqrt{2}h_2\phi(2x - 2) + \sqrt{2}h_3\phi(2x - 3) \quad (1.66)$$

となる．

### 1.3.2 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  $\psi$  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．

$$h_k = 0, \quad k < 0 \text{ or } k > M \quad (1.67)$$

$$\sum_{k=0}^{M-1} h_k h_{k+2m} = \delta_{0,m} \quad (1.68)$$

$$\sum_{k=0}^{M-1} h_k = \sqrt{2} \quad (1.69)$$

$$\sum_{k=0}^{M-1} g_k \cdot k^m = 0, \quad 0 \leq m < \frac{M}{2} - 1 \quad (1.70)$$

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) dx = 1 \quad (1.71)$$

を満たす解がただ一つ存在する．このスケーリング関数  $\phi$  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．

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) x^m dx = 0, \quad 0 \leq m < \frac{M}{2} - 1 \quad (1.72)$$

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(t) \bar{\psi}(2^{-j}t + N) dt = 0 \quad (1.73)$$

から出発する．これは  $t' = t + N2^j$  と変換して

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(t' - N2^j) \bar{\psi}(2^{-j}t') dt' = 0 \quad (1.74)$$

と表せば正しいことがすぐに確認できる．

さて  $\psi$  が  $C^r$  級であるとして

$$\bar{\psi}(N + 2^{-j}t) = \bar{\Psi}(N) + \sum_{k=1}^{r-1} \frac{1}{k!} \bar{\psi}^{(k)}(N) (2^{-j}t)^k + \frac{1}{r!} \bar{\psi}^{(r)}(N + \theta(t)2^{-j}t) 2^{-jr} t^r \quad (1.75)$$

と展開する．このとき

$$0 = \sum_k \frac{1}{k!} \bar{\psi}^{(k)}(N) 2^{-jk} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(t) t^k dt + \dots \quad (1.76)$$

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

$$\Psi(\omega) = G\left(\frac{\omega}{2}\right) \Phi\left(\frac{\omega}{2}\right) \quad (1.77)$$

から出発し，両辺を  $\omega$  で微分すると，

$$\partial_\omega \Psi(\omega) = \left(\partial_\omega G\left(\frac{\omega}{2}\right)\right) \Phi\left(\frac{\omega}{2}\right) + G\left(\frac{\omega}{2}\right) \left(\partial_\omega \Phi\left(\frac{\omega}{2}\right)\right) \quad (1.78)$$

より

$$\begin{aligned} -i \int e^{-i\omega t} (t\psi(t)) dt &= -i \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k k g_k e^{-i(\omega/2)k} \Phi\left(\frac{\omega}{2}\right) \\ &\quad + G\left(\frac{\omega}{2}\right) \left(-i \frac{1}{2}\right) \int e^{-i\omega t} (t\phi(t)) dt \end{aligned} \quad (1.79)$$

が得られる．

ここで  $\omega = 0$  とすると，

$$\int (t\psi(t)) dt = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k k g_k \Phi(0) + G(0) \frac{1}{2} \int t\phi(t) dt \quad (1.80)$$

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．

### 1.3.3 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，

$$h_0^2 + h_1^2 + h_2^2 + h_3^2 = 1 \quad (1.81)$$

および

$$h_0 h_2 + h_1 h_3 = 0 \quad (1.82)$$

更に

$$h_0 + h_1 + h_2 + h_3 = \sqrt{2} \quad (1.83)$$

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

$$g_0 \cdot 0^m + g_1 \cdot 1^m + g_2 \cdot 2^m + g_3 \cdot 3^m = 0 \quad (1.84)$$

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)

$$h_3 \cdot 0^m - h_2 \cdot 1^m + h_1 \cdot 2^m - h_0 \cdot 3^m = 0 \quad (1.85)$$

となるので

$$h_3 - h_2 + h_1 - h_0 = 0 \quad (1.86)$$

および

$$-h_2 + 2h_1 - 3h_0 = 0 \quad (1.87)$$

が得られ (上の 2 式も要確認), 最終的に次の系列が得られる .

$$h_0 = 0.4829, h_1 = 0.8365, h_2 = 0.2241, h_3 = -0.1294 \quad (1.88)$$

上記を具体的に求めるためには (順番が正しいか確認),

$$h_0 = \frac{\nu(\nu-1)}{\sqrt{2}(\nu^2+1)}, h_1 = \frac{1-\nu}{\sqrt{2}(\nu^2+1)} \quad (1.89)$$

$$h_2 = \frac{\nu+1}{\sqrt{2}(\nu^2+1)}, h_3 = \frac{\nu(\nu+1)}{\sqrt{2}(\nu^2+1)} \quad (1.90)$$

或いはより一般的に

$$h_0(\theta) = \frac{1 + \cos \theta - \sin \theta}{2\sqrt{2}}, h_1(\theta) = \frac{1 + \cos \theta + \sin \theta}{2\sqrt{2}} \quad (1.91)$$

$$h_2(\theta) = \frac{1 - \cos \theta + \sin \theta}{2\sqrt{2}}, h_3(\theta) = \frac{1 - \cos \theta - \sin \theta}{2\sqrt{2}} \quad (1.92)$$

として  $\theta = \pi/6$  とおけばよい . 実際に

$$h_0\left(\frac{\pi}{6}\right) = \frac{1 + \sqrt{3}}{4\sqrt{2}} = 0.4829, h_1\left(\frac{\pi}{6}\right) = \frac{3 + \sqrt{3}}{4\sqrt{2}} = 0.8365 \quad (1.93)$$

$$h_2\left(\frac{\pi}{6}\right) = \frac{3 - \sqrt{3}}{4\sqrt{2}} = 0.2241, h_3\left(\frac{\pi}{6}\right) = \frac{1 - \sqrt{3}}{4\sqrt{2}} = -0.1294 \quad (1.94)$$

が得られる .

## 1.4 ウェーブレット行列による表現

### 1.4.1 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

$$W_N = \begin{pmatrix} H_{N/2} \\ G_{N/2} \end{pmatrix} \quad (1.95)$$

と行列で表す．境界条件を適切に選べば

$$W_N \cdot W_N^\dagger = \mathbb{I}_N \quad (1.96)$$

と表せるので

$$W_N^\dagger = W_N^{-1} \quad (1.97)$$

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．

### 1.4.2 Haar ウェーブレット

例えば  $N = 8$  の場合には

$$W_2 = \begin{pmatrix} h_0 & h_1 \\ g_0 & g_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.98)$$

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

$$W_8 = \begin{pmatrix} H_4 \\ G_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_0 & h_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_0 & h_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_0 & h_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h_0 & h_1 \\ \hline g_0 & g_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g_0 & g_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & g_0 & g_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g_0 & g_1 \end{pmatrix} \quad (1.99)$$

となる．

### 1.4.3 Daubechies D4 ウェーブレット

例えば  $N = 8$  の場合には

$$W_8 = \left( \frac{H_4}{G_4} \right) = \begin{pmatrix} h_0 & h_1 & h_2 & h_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_0 & h_1 & h_2 & h_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_0 & h_1 & h_2 & h_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h_0 & h_1 \\ \hline g_0 & g_1 & g_2 & g_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g_0 & g_1 & g_2 & g_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & g_0 & g_1 & g_2 & g_3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & g_0 & g_1 \end{pmatrix} \quad (1.100)$$

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

$$W_8 = \left( \frac{H_4}{G_4} \right) = \begin{pmatrix} h_0 & h_1 & h_2 & h_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_0 & h_1 & h_2 & h_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_0 & h_1 & h_2 & h_3 \\ h_2 & h_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & h_0 & h_1 \\ \hline g_0 & g_1 & g_2 & g_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & g_0 & g_1 & g_2 & g_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & g_0 & g_1 & g_2 & g_3 \\ g_2 & g_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & g_0 & g_1 \end{pmatrix} \quad (1.101)$$

となる。

## 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，高専の学生達に向けて応用数学特論の講義で使っていたノートだったのだが，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（グローバール・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 [3, 4] をお勧めします（論文の多くは Physical Review に掲載されていますが，物理屋の観点からするとちょっと読みにくい）．

### 2.1 量子計算アルゴリズムの歴史的経緯

量子アルゴリズムの研究はこの 20 年で進歩している．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等しい．従って，これらの手法を深く理解することで，PEPS や MERA の理解が一層深まると期待される．有名なものを時系列順に挙げると，

- ドイチ問題（1985）
- ドイチ・ジョザ・アルゴリズム（1992）
- ベルンシュタイン・ヴァジラニ・アルゴリズム（1993）
- サイモン・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・離散対数問題（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 などの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．

補足であるが，量子論理ゲートに加えて，次のような問題はその発展型としても重要である．

- 量子通信プロトコル
- 量子テレポーテーション，量子デンスコーディング
- 量子誤り訂正アルゴリズム
- 関数傾斜推定アルゴリズム
- 断熱量子計算アルゴリズム，量子アニーリング，Dウェーブ
- 量子ウォーク

## 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はなく、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 [5,6] 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  $\omega_N$  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  $\Omega_N$  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

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



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

と変形できる．すなわち  $Q$  次のフーリエ変換（+位相シフト）

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

を先ず行い，続いて  $P$  次のフーリエ変換

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

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 [7]．

$N$  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， $U_\Psi$  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  $U_p, U_\Psi$  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. 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

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1, s_2, s_3, s_4} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\gamma, \delta} T^{\gamma\delta} L_\gamma^{s_1\alpha} R_\delta^{s_4\beta} U_{\alpha\beta}^{s_2s_3} |s_1 s_2 s_3 s_4\rangle \quad (2.29)$$

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：

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha,\beta} \sum_{\gamma,\delta} T^{\gamma\delta} \left( \sum_{s_1} L_{\gamma}^{s_1\alpha} |s_1\rangle \right) \otimes \left( \sum_{s_2,s_3} U_{\alpha\beta}^{s_2s_3} |s_2s_3\rangle \right) \otimes \left( \sum_{s_4} R_{\delta}^{s_4\beta} |s_4\rangle \right) \quad (2.30)$$

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（ $\gamma, \delta$  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， $L, R$  にアイソメトリー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)

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

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よ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．物性の問題としては文献 [8,9] を参照のこと．

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

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

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  $1 \otimes U(\theta) \otimes 1$  はユニタリー変換であることから

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

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

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

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．

$$|\psi_L\rangle = \left[ \begin{pmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} R_8 \begin{pmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} R_8 + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ S & 0 \end{pmatrix} R_8 \begin{pmatrix} 0 & S \\ 0 & 0 \end{pmatrix} R_8 \right] W_L$$

$$+ \left[ \left( \begin{pmatrix} S & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} R_8 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ S & 0 \end{pmatrix} R_8 + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ S & 0 \end{pmatrix} R_8 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & S \end{pmatrix} R_8 \right) W_R \right] \quad (2.47)$$

鍵括弧の部分を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  $\theta$  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

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

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、 $\theta$  を決めることができる。

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

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

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 [10]。

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， $\phi_n$  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ジング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  $\lambda$  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だいぶヒヨツた問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 [11, 12] 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<sup>1</sup>．

<sup>1</sup>自分がスタンフォードに滞在していた時に 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．自分と画像エントロピーの共同研究を始めたのもこの滞在がきっかけでした．

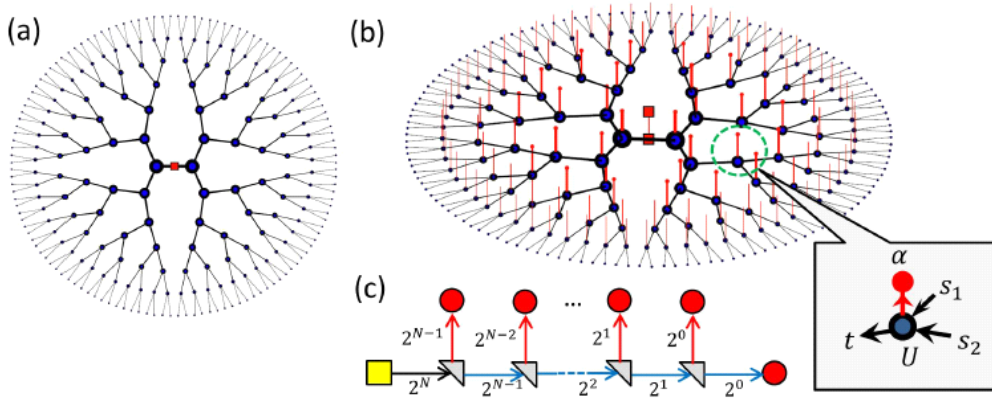


図 3.1: EHM のテンソル・ネットワーク (Xiao-Liang の論文から引用)

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うと，

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

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

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

と表せる．またバルクサイトは

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

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

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

および

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

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

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

を念頭に置いてこれをフーリエ変換すると

$$\phi_{j,n}(q) (e^{iq} - 1) = 2^{-N/2} 2^{-n/2} [-e^{-iq2^n(j-1)} - e^{-iq2^n j} + 2e^{-iq(2^n j - 2^{n-1})}] \quad (3.30)$$

が得られるので  $\phi_{j,n}(q)$  は

$$\phi_{j,n}(q) = -\frac{2^{-(n+N)/2} e^{-iq2^n j} (e^{iq2^{n-1}} - 1)^2}{e^{iq} - 1} \quad (3.31)$$

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 [13, 14] 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．



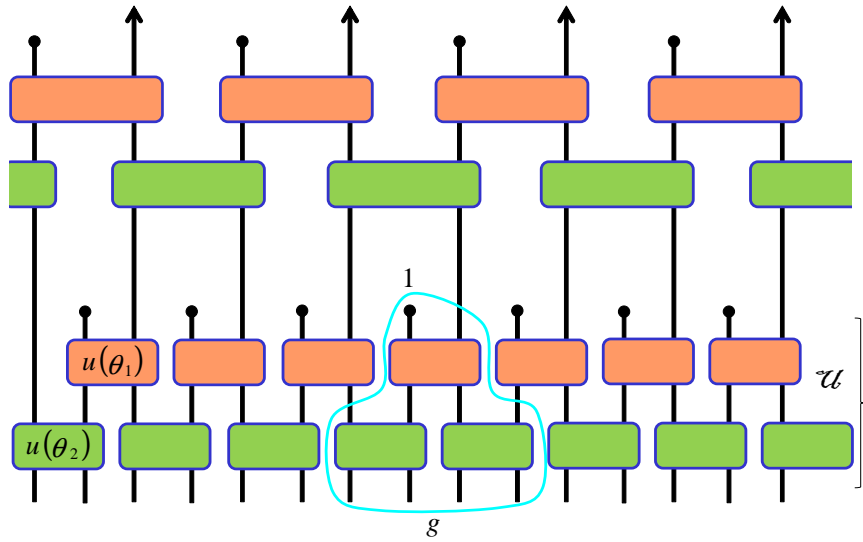


図 3.2: Daubechies D4 ウェーブレットのユニタリー回路表現

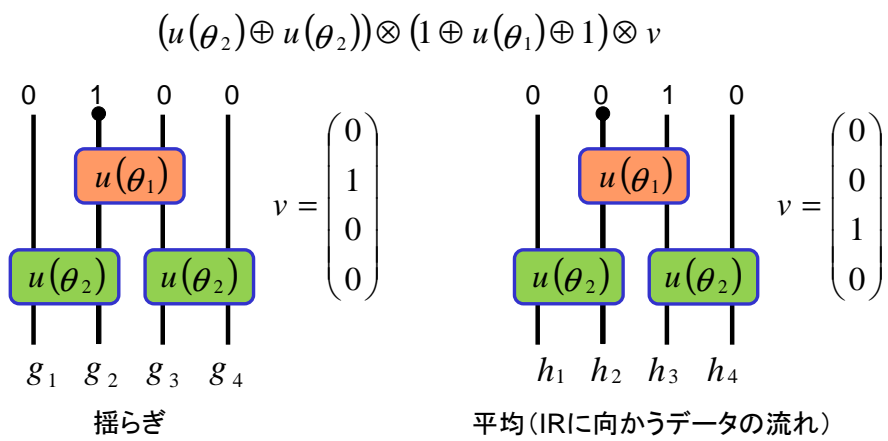


図 3.3: Daubechies D4 ウェーブレットのユニタリー回路表現

### 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 [13, 14] 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。  $N = 2$ : binary unitary circuit . 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

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

の集まりとして表現されている。 We denote  $t_k = \tan \theta_k$  in short.

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。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

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

$$2 - 3t_1 + t_2 + 4t_1 t_2 = 0 \quad (3.43)$$

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 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」は教科書で使っているの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.

### 4.1 ネットワークの変形 (SVD の活用)

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モデル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.

### 4.2 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ましょう. 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 に変換します. 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ります.

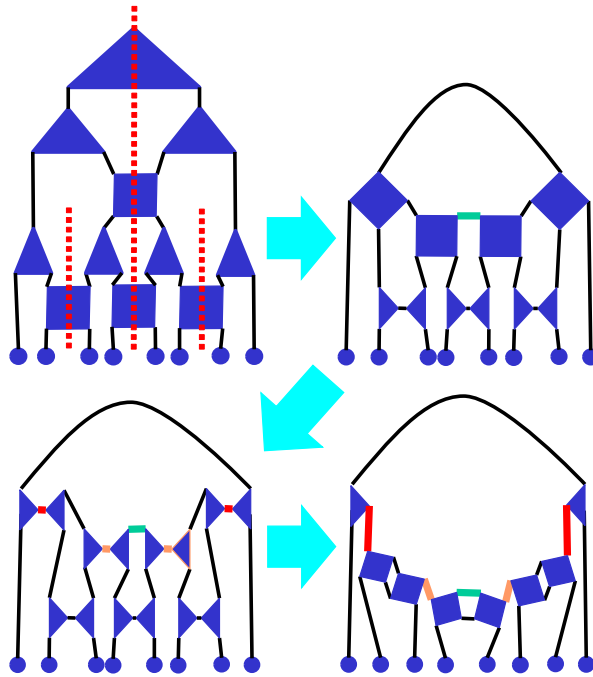


図 4.1: MERA から MPS への変換

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，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．

### 4.3 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 [15–17]．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．

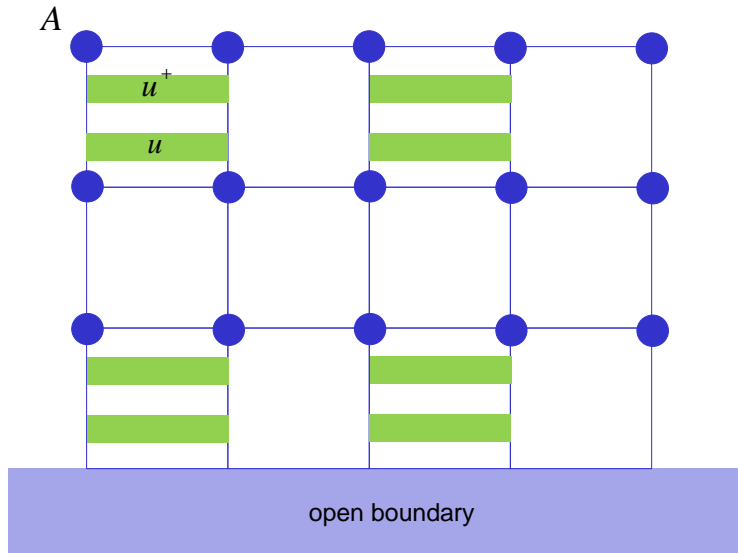


図 4.2: TNR から MERA への変換 1

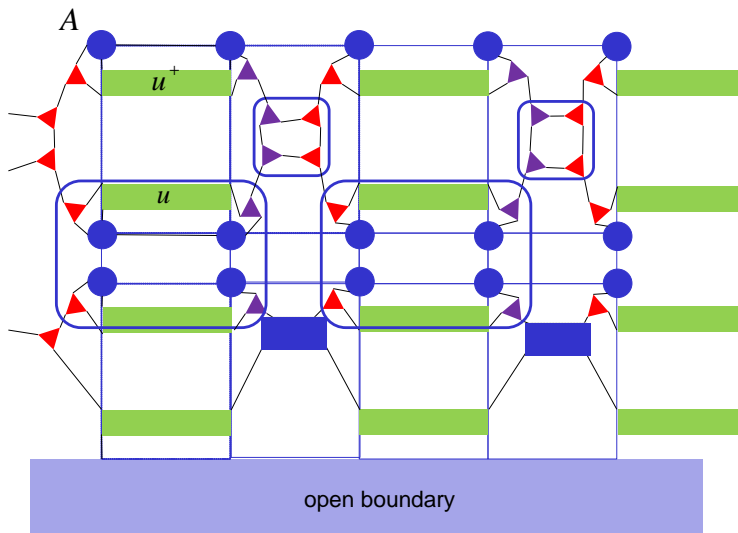


図 4.3: TNR から MERA への変換 2

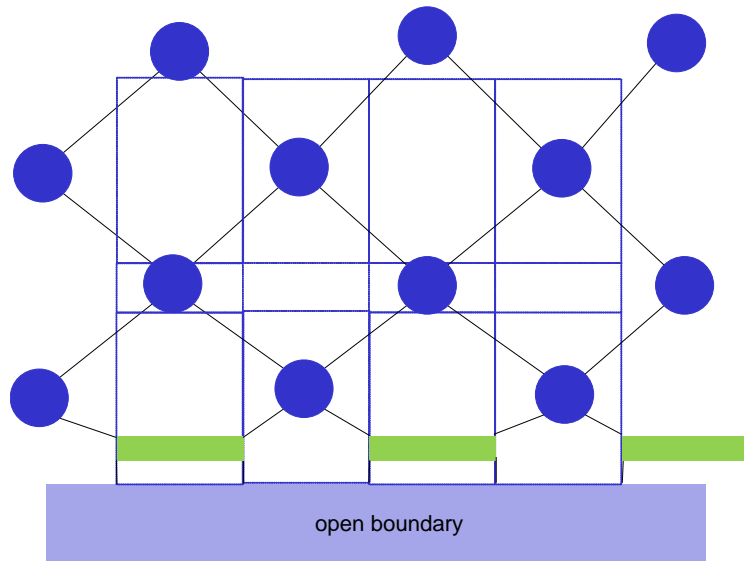


図 4.4: TNR から MERA への変換 3

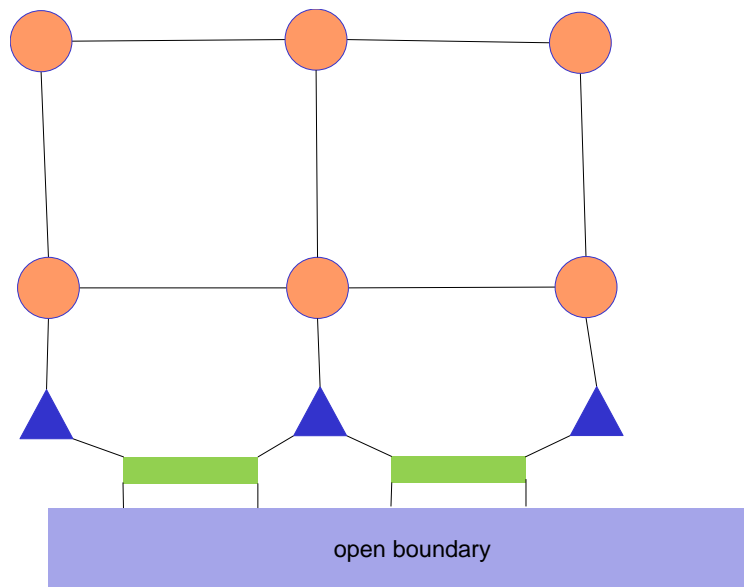


図 4.5: TNR から MERA への変換 4

# 第5章 連続的 SVD と Mellin 逆変換を応用したホログラフィックくりこみ群の研究

夏学に合わせて関連のある論文を最近執筆しました [18] . 原稿の日本語変換ができておらずすみません .

## 5.1 この研究の目的

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 [19, 20] . 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 [21–25] , 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 [27] . 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、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 . 加えて類似の概念であるウェーブレット変換の連続化とそれとの対応についても議論する .

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そうである . 本研究はまずは古典・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 [28–31] .



## 5.2 定式化

### 5.2.1 連続の特異値分解

Let us start with the Ising model on the 2D square lattice

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (5.1)$$

where we consider the ferromagnetic coupling  $J > 0$  and the Ising spin at site  $i$  takes  $\sigma_i = \pm 1$ . Here we take a snapshot of the spin configuration at  $T_c$  by the cluster Monte Carlo simulations, which is represented as a  $L_x \times L_y$  matrix  $M(x, y)$ . We apply SVD to decompose  $M$  into the following form

$$M(x, y) = \sum_{n=1}^L U_n(x) \sqrt{\lambda_n} V_n(y), \quad (5.2)$$

where we denote  $L = \min(L_x, L_y)$  and  $U_n(x)$  and  $V_n(y)$  are unitary matrices. We call  $U_n(x)V_n(y)$  as the  $n$ -th layer data, and find that  $U_n(x)V_n(y)$  represents the  $n$ -th largest cluster data in the snapshot when we label the data as  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \lambda_L$ . We also define the partial density matrix as

$$\rho(x, x') = \sum_y M(x, y)M(x', y) = \sum_{n=1}^L U_n(x) \lambda_n U_n(x'). \quad (5.3)$$

In this work, we focus on this quantity. There is a symmetry on  $\rho(x, x')$  associated with the exchange between  $x$  and  $x'$ ,  $\rho(x, x') = \rho(x', x)$ . As an important argument, it has been shown that this is essentially equal to the two-point correlator  $C(l)$  with  $l = |x - x'|$  due to self-averaging [22]. More precisely, a single snapshot does not have the translational invariance, and we need to take the same average by a set of various snapshots to reduce the sample dependence on  $\rho(x, x')$ . Fortunately, it has been found numerically that the asymptotic behavior of the SVD spectrum is independent of the sample difference in the large- $L$  cases [24, 25], and we expect that the average has a simple form. In this case, we can take

$$C(l) = \rho_\eta(l) = \langle \rho(x, x') \rangle = \sum_{n=1}^L \langle U_n(x) U_n(x') \rangle \lambda_n, \quad (5.4)$$

and thus the basic structure of the SVD spectrum still remains. Hereafter we denote  $\langle U_n(x) U_n(x') \rangle$  as  $R_n(l)$ .

In the previous works [24, 25], it was found that the SVD spectrum behaves as an algebraic function  $\lambda_n = \lambda_1 n^{-\Delta}$  with an exponent  $\Delta$ . Now we consider the continuous limit of the index  $n$ :

$$\lambda_n = \frac{\lambda_1}{n^\Delta} \rightarrow \lambda(z) = \frac{\lambda_1}{z^\Delta}, \quad (5.5)$$

and regard  $z$  as a continuous parameter ranged at  $0 \leq z < \infty$  in the thermodynamic limit. We also denote  $R_n(l)$  as  $R(l, z)$ , and then obtain

$$\rho_\Delta(l) = \lambda_1 \int_0^\infty dz R(l, z) z^{-\Delta}. \quad (5.6)$$

In particular, the result in the 2D classical Ising model at criticality is given by

$$\Delta = 1 - \eta, \quad (5.7)$$

with  $\eta = 1/4$ , and we find

$$\rho_\eta(l) = \lambda_1 \int_0^\infty dz R(l, z) z^{\eta-1}. \quad (5.8)$$

Only one point we should be careful for is about the normalization of the SVD spectrum. If we simply consider the thermodynamic limit of Eq. (5.5), the sum of all spectra diverges for the condition  $\Delta \leq 1$ . According to the author's previous works, it is better to assume

$$\lambda(z) = \frac{f(z)}{z^{1-\eta}} \quad (5.9)$$

with a decreasing function  $f(z)$ . Then we have

$$\rho_\eta(l) = \int_0^\infty dz R(l, z) f(z) z^{\eta-1} \equiv \int_0^\infty dz \mathcal{R}(l, z) z^{\eta-1}, \quad (5.10)$$

and the normalization condition

$$\int_0^\infty f(z) z^{\eta-1} dz = 1. \quad (5.11)$$

The form of Eq. (5.10) is the definition of the CSVD. If there exists the unique inverse transformation of the CSVD, we can obtain the explicit form of  $\mathcal{R}(l, z)$  from the definition of  $\rho_\eta(l)$  automatically. It is noted that this integral converges when the weight function  $f(z)$  is an exponentially decreasing function. Actually, we find

$$f(z) = \frac{\beta^\eta}{\Gamma(\eta)} e^{-\beta z}, \quad (5.12)$$

with use of the gamma function  $\Gamma(\eta)$  and a constant  $\beta$  to be determined so that this function matches well with the numerical result. This form reminds us with the exponential damping factor of the two-point spin correlator with a finite correlation length  $\xi$  away from the critical point, when we assume  $z = \xi^{-1}$  and  $\beta = l$ . We cannot exclude a possibility that more precise data fitting may indicate a different form of the decreasing function  $f(z)$ , but now we would like to construct a conceptual or phenomenological understanding of the data structure of the each SVD component. Thus, we believe that the essential result does not change even if we take another form of the function  $f(z)$ . In the end of this section, we mention some extension of that form.

The point here is to regard the integral of Eq. (5.10) as the sum of data associated with the RG flow. In this case, the data at a particular  $z$  corresponds to the correlator with a finite correlation length  $\xi$ . We simply imagine  $z \propto \xi^{-1}$ , since the small  $z$ -region represents a larger cluster scale in the snapshot of the 2D Ising model. In general, the Ornstein-Zernike form of the two-point correlator  $C(l)$  near  $T_c$  is given by

$$C(l) = \frac{A}{l^{d-2+\eta}} e^{-l/\xi} = \frac{A}{l^\eta} e^{-l/\xi}, \quad (5.13)$$

where  $d$  is the spatial dimension and  $A$  is an overall constant. According to this formula, it is natural to assume

$$\mathcal{R}(l, z) = \frac{Ae^{-zl}}{(zl)^{\eta'}}, \quad (5.14)$$

if the radial axis  $z$  represents  $\xi^{-1}$  and also represents the direction of the holographic renormalization. Then, the partial density matrix or the correlator is given by

$$\rho_\eta(l) = \frac{A}{l^{\eta'}} \int_0^\infty dz e^{-zl} z^{\eta-\eta'-1} = \frac{A}{l^\eta} \Gamma(\eta - \eta'). \quad (5.15)$$

We find that this form agrees well with the correlator at the critical point, although the result contains an additional regulator  $\Gamma(\eta - \eta')$ . Later, we will again mention the importance of this regulator in the inverse transformation of the CSVD. We expect that the power  $\eta'$  of the algebraic decay in the expression of  $\mathcal{R}(l, z)$  is basically equal to the original anomalous dimension  $\eta$ , but mathematically we should take a value slightly smaller one to  $\eta$  for keeping the convergence of the gamma function ( $\Gamma(0) = \infty$ ).

In the present stage,  $\eta'$  is a phenomenological parameter to be determined by the fitting with numerical results. If  $\eta'$  is exactly equal to  $\eta$ , it is even possible to eliminate the divergence by introducing the upper incomplete gamma function with the IR cut-off  $z_0$  as

$$\rho_\eta(l, z_0) = \frac{A}{l^\eta} \int_{z_0}^{\infty} dz e^{-zl} z^{-1} = \frac{A}{l^\eta} \Gamma(0, z_0 l). \quad (5.16)$$

The incomplete gamma function  $\Gamma(0, z_0 l)$  has several expansion formulae, and for instance we have

$$\begin{aligned} \Gamma(0, z_0 l) &= e^{-z_0 l} U(1, 1, z_0 l) \\ &= \frac{A}{l^\eta} \left( -\gamma - \ln(z_0 l) - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-z_0 l)^k}{k(k!)} \right), \end{aligned} \quad (5.17)$$

where  $U(1, 1, z_0 l) = \int_0^{\infty} du e^{-u} / (z_0 l + u)$  is the confluent hypergeometric function and  $\gamma$  is the Euler constant. This calculation also produces the  $l^{-\eta}$  term, but we also find the additional  $l$ -dependent factor  $\Gamma(0, z_0 l)$ . Particularly in the hypergeometric-function representation, we find the exponential damping factor  $e^{-z_0 l}$  with finite correlation length  $z_0 = \xi_0^{-1}$ . That is quite natural, since we have introduced the IR cut-off.

It depends on problems to decide one of which regularization is better. The latter is very straightforward except for the presence of the damping factor away from the critical point. However, when we consider the inverse transformation, it is necessary to use the former method. As will be discussed, the inversion is well-defined only for the former case. Then, a  $\eta$ -dependent regulator with poles on the complex- $\eta$  plane is necessary, and the gamma-function regulator plays a role on the presence of these poles.

We again argue that the RG flow parameter corresponds to the inverse correlation length

$$z = \frac{1}{\xi}. \quad (5.18)$$

Therefore, the data set of the SVD is that of different length scales. The new parameter  $z$  also acts as a parameter of the scale transformation. We call the condition  $z \rightarrow 0$  as the boundary of the  $(l, z)$ -space. The result can be briefly summarized as

$$\mathcal{R} \left( \left( \frac{\epsilon}{z} \right) l, z \right) = \mathcal{R}(l, \epsilon). \quad (5.19)$$

Before going into the next step, we consider some generalization of the damping factor  $f(z)$ . The most general form of  $f(z)$  seems to be

$$f(z) \propto e^{-\beta z^\kappa}, \quad (5.20)$$

where  $\kappa$  is a fitting parameter, and we have already examined the case that  $\kappa = 1$ . For instance, an Ising-spin configuration is in some sense a random fractal. In this case,  $\kappa$  deviates from unity and is rather close to  $\kappa = 2$  [32]. When we assume  $R(l, z) = Ae^{-\beta z^\kappa}/(zl)^{\eta'}$ , we find

$$\begin{aligned} \rho_\eta(z) &= \lim_{\eta' \rightarrow \eta} \frac{A}{l^{\eta'}} \int_0^\infty dz e^{-\beta z^\kappa} z^{\eta - \eta' - 1} \\ &= \lim_{\eta' \rightarrow \eta} \frac{A}{\kappa \beta^{(\eta - \eta')/\kappa} l^{\eta'}} \Gamma\left(\frac{\eta - \eta'}{\kappa}\right), \end{aligned} \quad (5.21)$$

or otherwise we can introduce a cut-off and then

$$\rho_\eta(l, z_0) = \frac{A}{l^\eta} \int_{z_0}^\infty dz e^{-\beta z^\kappa} z^{-1} = \frac{A}{\kappa l^\eta} \Gamma(0, \beta z_0^\kappa). \quad (5.22)$$

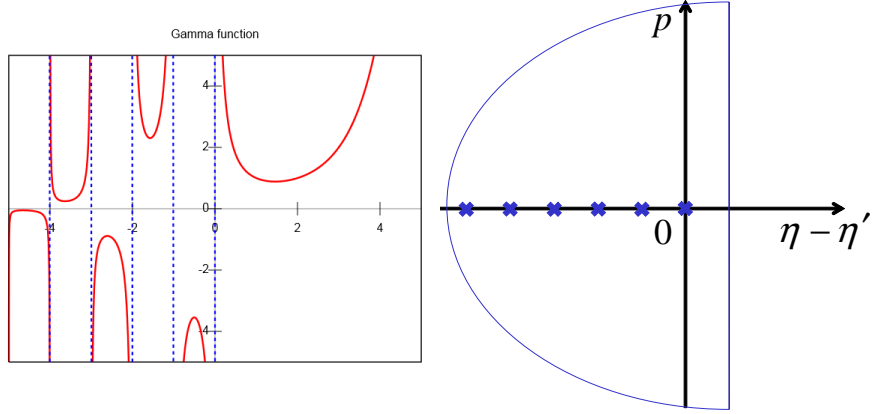
In both cases, we obtain the  $l^\eta$  term for  $\eta' \rightarrow \eta$ . Then, we identify

$$z^\kappa = \frac{1}{\xi}, \quad (5.23)$$

for  $\beta = l$ . In this case also, the correlation length  $\xi$  increases, as the RG flow proceeds by decreasing  $z$ .

## 5.2.2 Mellin 逆变换

The CSVD is a kind of the integral transformation, and the transformation in Eq. (5.10) is called as Mellin transformation of the function  $\mathcal{R}(l, z)$ . The peculiar feature of this transformation is that the anomalous dimension itself is the transformation parameter conjugate to the scale parameter  $z$ . An interesting view is that this scale/Mellin space approach was also found in the string theory side, as already mentioned in the introduction [28–31]. In order to examine more about the meaning of Eqs. (5.14) and (5.15) with respect of this conjugate relation, we consider the inverse Mellin transformation of the correlator  $\rho_\eta(l) = Al^{-\eta}\Gamma(\eta - \eta')$ . For this purpose, we analytically continue  $\rho_\eta(l)$  into a holomorphic function by using the complex variable  $\eta$ .



⊠ 5.1: Poles of the complex gamma function and the semi-circle contour added to the Bromwich path.

The inverse Mellin transformation is represented by the so-called Bromwich integral as

$$\mathcal{R}(l, z) = \lim_{p \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi i} \int_{c-ip}^{c+ip} z^{-\eta} \rho_{\eta}(l) d\eta. \quad (5.24)$$

This integral is well-defined, when we find parameters  $a$  and  $b$  so that

$$\int_0^{\infty} |\mathcal{R}(l, z)| z^{\Re(\eta)-1} dz < \infty, \quad (5.25)$$

for  $a < \Re(\eta) < b$ . Then, there exists a parameter  $c$  with the condition  $a < c < b$ . In the present case, it is enough to take  $a = 0$ . By adding some integral contour to the Bromwich path, we pick up the pole of the gamma function in the density matrix  $\rho_{\eta}(l)$  for this calculation. Since the gamma function is represented by the infinite product formula

$$\Gamma(z) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(n-1)! n^z}{z(z+1)(z+2) \cdots (z+n-1)}, \quad (5.26)$$

this has the poles on zero and negative intergers. The residues are given by

$$\text{Res}(\Gamma, -n) = \lim_{z \rightarrow -n} (z+n)\Gamma(z) = \frac{(-1)^n}{n!}, \quad (5.27)$$

with  $n = 0, 1, 2, \dots$ . This means

$$\mathcal{R}(l, z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C z^{-\eta} \frac{A}{l^{\eta}} \Gamma(\eta - \eta') d\eta$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n \geq 0} \frac{A}{(lz)^\eta} \text{Res}(\Gamma, -n) \delta(\eta - \eta' + n) \\
&= \frac{A}{(lz)^{\eta'}} e^{-lz},
\end{aligned} \tag{5.28}$$

where the integral path  $C$  encloses all poles by adding an infinitely large semi-circle to the Bromwich path (see Fig. 5.1). We know that this actually agrees well with Eq. (5.14). By summing up all possible poles of the gamma function, we realized the correct off-critical behavior of the SVD component  $\mathcal{R}(l, z = \xi^{-1})$  characterized by the exponential decay with the finite correlation length  $\xi$ . Therefore, the conjugate axis  $\eta$  of the RG flow parameter  $z$  acts as a source of such decay.

Now we start with Eq. (5.15) for the inverse transformation. However, the abovementioned calculation is impossible, if we start with Eq. (5.16). This is because there is no pole on the complex  $\eta$  space. Thus we think that the gamma-function regulator is necessary to realize the well-defined inverse transformation.

### 5.2.3 非臨界領域の表現：ブラックホールとの関わり

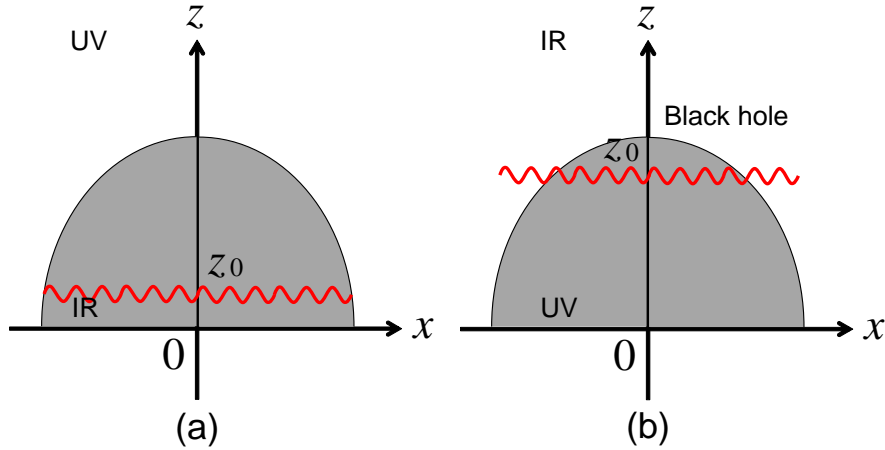


図 5.2: Cut-off of the integral: (a) present classical/classical case and (b) BTZ black hole in the usual AdS/CFT (classical/quantum) correspondence.

Up to now, we have examined the inverse Mellin transformation at the critical point by starting with  $\rho_\eta(l)$ . Furthermore, it is possible to extend this idea to the case away from the critical point. As already mentioned, we can introduce  $\rho_\eta(l, z_0)$

with the IR cut-off  $z_0$  that is obtained from  $\rho_\eta(l)$  by eliminating the large scale data. This situation is visualized in Fig. 5.2(a). The smaller  $z$  value is related to the larger spatial scale contained in the original data. Away from the critical point, the larger scale data tends to disappear except for the background data of the snapshot.

According to the definition of the SVD spectrum in the original discrete representation, the spectrum always starts from  $\lambda_1$  ( $n = 1$ ). Thus, we would like to keep the integration range of the parameter  $z$  as  $0 < z < \infty$ , even though the introduction of the IR cut-off  $z_0$  is a very convenient method to represent the exponential damping factor away from the critical point. Furthermore,  $\lambda_1$  becomes much larger than other  $\lambda_n$  away from the critical point, and this feature is not simply represented by introducing the cut-off. Such situation can be phenomenologically represented by the warp factor like a black hole that terminates the RG flow space at  $z = z_0$ . We select the factor as  $\sum_{k=0}^{\infty} (z_0/z)^k$ , since this is equivalent to  $(1 - (z_0/z))^{-1}$  for  $z_0 < z$  and this form is similar to the warp factor of the Schwarzschild black hole. We find

$$\begin{aligned}
\rho_\eta(l, z_0) &= \sum_{k=0}^{\infty} \int_0^{\infty} dz \left(\frac{z_0}{z}\right)^k \frac{Ae^{-zl}}{(zl)^{\eta'}} z^{\eta-1} \\
&= \frac{A}{l^{\eta'}} \sum_{k=0}^{\infty} z_0^k \int_0^{\infty} dz e^{-zl} z^{\eta-\eta'-k-1} \\
&= \frac{A}{l^\eta} \sum_{k=0}^{\infty} (z_0 l)^k \int_0^{\infty} dx e^{-x} x^{\eta-\eta'-k-1} \\
&= \frac{A}{l^\eta} \sum_{k=0}^{\infty} (z_0 l)^k \Gamma(\eta - \eta' - k). \tag{5.29}
\end{aligned}$$

Here, we need to define  $\Gamma(\eta - \eta' - k)$  by analytic continuation. Let us further transform Eq. (5.29). According to the following property of the Gamma function

$$\Gamma(y) = \frac{\Gamma(y+1)}{y}, \tag{5.30}$$

the abovementioned result in the case of  $\eta' \simeq \eta$  can be transformed into

$$\begin{aligned}
\rho_\eta(l, z_0) &\simeq \frac{A}{l^\eta} \sum_{k=0}^{\infty} (z_0 l)^k \frac{\Gamma(\eta - \eta')}{(-1)^k k!} \\
&= \frac{A}{l^\eta} e^{-z_0 l} \Gamma(\eta - \eta'). \tag{5.31}
\end{aligned}$$



We find that the result matches well with the two-point spin correlator away from the critical point (we must use Eq. (5.29) when considering the inverse transformation).

### 5.3 量子系におけるくりこみ・AdS/CFT 対応へのコメント

Let us finally discuss some implications of the present results to the holography concept such as the AdS/CFT correspondence. In particular, we would like to mention similarity of our results with the correspondence except for the difference associated with the UV/IR relation. Since the present work is based on the classical/classical correspondence, the UV/IR relation would be reversed in comparison with the standard AdS/CFT that is a kind of the quantum/classical correspondence. What we would like to argue about the similarity is that the SVD index is a kind of the RG flow parameter.

Based on the above prerequisite, we should remark two important aspects. The first one is the appearance of the warp factor  $(1 - z_0/z)^{-1}$  in Eq. (5.29) when we consider the inverse Mellin transformation of the off-critical behavior. Going back to Eq. (5.10), we find

$$\rho_\eta(l) = \int_0^\infty dz \mathcal{R}(l, z) z^{\eta-1} = \int_0^\infty \frac{dz}{z} \mathcal{R}(l, z) z^\eta, \quad (5.32)$$

and this simple transformation indicates that the factor  $dz/z$  represents the scale invariance of the hyperbolic geometry. We expect that the off-critical feature should be described by the black hole in quantum cases. For instance, the BTZ black hole geometry in 2 + 1 dimension is given by the following metric

$$ds^2 = \frac{l^2}{z^2} \left( -f(z) dt^2 + \frac{dz^2}{f(z)} + dx^2 \right), \quad (5.33)$$

where the warp factor  $f(z)$  is defined as

$$f(z) = 1 - \left( \frac{z}{z_0} \right)^2. \quad (5.34)$$

The event horizon is located at  $z = z_0$ . Then, the truncation of the space by  $f(z)$  occurs at  $z \geq z_0$ , as shown in Fig. 5.2(b). On the other hand, the warp factor in Eq. (5.29) terminates the RG flow for the region of  $z < z_0$ . Thus, the presence of

the truncation or the termination for the flow parameter axis is quite similar in both classical and quantum cases, although the UV/IR region is reversed. This would be a strong indication of the similarity.

The second aspect is about the relation between the correlation length and the SVD index. This relationship has been precisely examined in terms of the matrix product state (MPS) formulation of correlated systems. Let us introduce the uniform MPS defined by

$$|\psi\rangle = \sum_{\{s_j\}} \text{tr}(A[s_1] \cdots A[s_N]) |s_1\rangle \otimes \cdots \otimes |s_N\rangle, \quad (5.35)$$

where each matrix has  $\chi \times \chi$  dimension. The best  $\chi$  value is determined so that the entanglement entropy shows correct scaling behavior for a given model Hamiltonian. The two-point correlator for two local bosonic operators  $O_j$  and  $O_{j+l}$  (we can also define the fermionic case with some minor modification) is given by

$$C(l) = \frac{\langle \psi | O_j O_{j+l} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\text{tr}(\hat{O} E^{l-1} \hat{O} E^{N-l-1})}{\text{tr}(E^N)}, \quad (5.36)$$

where  $\hat{O}$  and  $E$  are respectively defined by

$$\hat{O} = \sum_{s',s} O_{s',s} A^*[s'] \otimes A[s], \quad (5.37)$$

and

$$E = \sum_s A^*[s] \otimes A[s]. \quad (5.38)$$

The MPS implies that in general a correlator takes the analytical form

$$C(l) = \sum_{i=1}^{\chi^2} \alpha_i \lambda_i^l = \sum_{i=1}^{\chi^2} \alpha_i e^{-l/\xi_i}, \quad (5.39)$$

where  $\lambda_i$  is the eigenvalue the  $\chi^2 \times \chi^2$  matrix  $E$  and

$$\xi_i = -\frac{1}{\ln|\lambda_i|}. \quad (5.40)$$

By using the above formulation, it is important to examine the  $\chi$  dependence on  $\xi$ , since  $\chi$  is closely related to the RG flow parameter  $z$ . The examination has been done, and we summarize the results in the following for their comparison with the present result.

In an earlier DMRG calculation [33], it was found that the particle-hole correlation in the 1D free fermion model (the central charge  $c = 1/2$ ) is given by

$$\xi_{ph} \simeq -\frac{1}{\ln |1 - k\chi^{-\beta}|} \simeq \frac{1}{k}\chi^\beta, \quad (5.41)$$

where  $|\lambda_{ph}| \simeq 1 - k\chi^{-\beta}$ . The numerical fit of this scaling suggests  $\beta \simeq 1.3$  and  $k \simeq 0.45$ . Furthermore, more precise analysis based on CFT tells us that the MPS with a finite dimension  $\chi$  can approximately represent the non-local correlation scaled by

$$\xi = \chi^\kappa, \quad (5.42)$$

where  $\kappa$  is the so-called the finite entanglement scaling exponent defined by

$$\kappa = \frac{6}{c \left( \sqrt{12/c} + 1 \right)}, \quad (5.43)$$

with the central charge  $c$  [34, 35]. In the Heisenberg model case  $c = 1$ , we obtain  $\kappa \simeq 1.344$  consistent with the abovementioned  $\beta$  value. This consistency would be related to the fact that there are two different carriers in the analysis of the  $\beta$  value. In both cases,  $\xi$  increases as  $\chi$  increases. These results also represent close connection between  $\xi$  and  $\chi$ , and the relation is opposite to the present classical case  $\xi^{-1} = z^\kappa$  where  $z$  corresponds to  $\chi$ . The Ising model case ( $c = 1/2$ ),  $\kappa$  in Eq. (5.43) is very close to 2. This result may indicate that the functional form is  $f(z) \propto e^{-lz^2}$  in the present classical case.

## 第6章 ウェーブレット解析と特異値分解の関わり

この章の内容も以前から調べてきて興味を持っているのですが、現実にはできていることは数値計算の範囲に留まっていて、まだ数学的にまとまっていません。解析的に取り扱える例があるといいのですが...。ウェーブレットだけでなく、メルン基底による物理系の表現も、今後検討の余地がありそうです。

### 6.1 スナップショット・エントロピーによる比較

アムラさんの卒論を載せる（まだ論文を書いていないので頑張ります...）。鈴木先生・橋爪君の所では何度かお話したことがある。

ある画像のウェーブレット変換と特異値分解を作り、途中までの解像度の画像に対してスナップショット・エントロピーを計算する。両手法は共に元データをスケールの異なるデータに分解する手法なのであるが、それらのエントロピーの値を比較することによって、ウェーブレット変換を施した回数とそれと同じエントロピーを持つ画像を構成するために必要な特異値の数の対応関係を調べる。そうすると、二つの手法で作られる各データ空間の幾何学的構造とその間の対応関係が分かる。

### 6.2 特異値分解データのウェーブレット解析

特異値分解とウェーブレットそれぞれで圧縮したスナップショットの画像エントロピーをこれまで比較しているのだが、より直接的に特異値分解の各層のデータをウェーブレット解析して、どのような成分が主要な状態を占めている直接見ればいいのではないかと（本科3年生の学生さんがもう研究室に出入りしているので、その彼の夏休み課題として与えようと思っています）。

## 6.3 双曲幾何における一般座標変換との関係

双曲空間を表す幾つかのメトリックの間の変換と非常に類似した性質が出てくる。

## 第7章 サイン二乗変形と共形場理論

最後の章では少し視点を変えて、共形場理論と格子変形との関わり合いを整理する。テンソルネットワークと曲がった時空間は互いに深い関連があると思われるが、MERA だけ見ていたのでは代数的な構造や可解模型との関わりは分かりにくい (MPA や disentangler と Yang-Baxter 関係式の関わりも見えつつあるので、これはちょっと言い過ぎか...)。単に臨界指数が良い近似で求まるという所までである。そこで共形場理論との関係性が分かれば非常に良いので、この方向性もやや間接的ではあるが相補的な問題のように思われる。最近の進展としては多田さんの論文 (ダイポール量子化) や奥西さんの論文 (メビウス量子化) を参照されたい。

### 7.1 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とは一致するというものである [36–43]。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

$$H_{SSD} = - \sum_{j=1}^N t_j (c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j) - \sum_{j=1}^N \mu_j c_j^\dagger c_j \quad (7.1)$$

と表す。ここで

$$t_j = t f \left( j + \frac{1}{2} \right) \quad (7.2)$$

および

$$\mu_j = \mu f(j) \quad (7.3)$$

であり、SSD を特徴づけるスケール関数  $f(j)$  は

$$f(j) = \sin^2 \left\{ \frac{\pi}{N} \left( j - \frac{1}{2} \right) \right\} \quad (7.4)$$

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

$$H_0 = -t \sum_{j=1}^N \left( c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j \right) - \mu \sum_{j=1}^N c_j^\dagger c_j \quad (7.5)$$

と表すと， $H_{SSD}$  は以下のように変形することができる：

$$\begin{aligned} H_{SSD} &= -t \sum_{j=1}^N f\left(j + \frac{1}{2}\right) \left( c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j \right) - \mu \sum_{j=1}^N f(j) c_j^\dagger c_j \\ &= -t \sum_{j=1}^N \sin^2\left(\frac{\pi}{N}j\right) \left( c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j \right) - \mu \sum_{j=1}^N \sin^2\left\{\frac{\pi}{N}\left(j - \frac{1}{2}\right)\right\} c_j^\dagger c_j \\ &= -\frac{1}{2}t \sum_{j=1}^N \left[ 1 - \cos\left(\frac{2\pi}{N}j\right) \right] \left( c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j \right) \\ &\quad - \frac{1}{2}\mu \sum_{j=1}^N \left[ 1 - \cos\left\{\frac{2\pi}{N}\left(j - \frac{1}{2}\right)\right\} \right] c_j^\dagger c_j \\ &= \frac{1}{2}H_0 + \frac{1}{4}t \sum_{j=1}^N \left( e^{i\delta j} + e^{-i\delta j} \right) \left( c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j \right) \\ &\quad + \frac{1}{4}\mu \sum_{j=1}^N \left( e^{i\delta j} e^{-i\delta/2} + e^{-i\delta j} e^{i\delta/2} \right) c_j^\dagger c_j \end{aligned} \quad (7.6)$$

ただし

$$\delta = \frac{2\pi}{N} \quad (7.7)$$

とした．ここでカイラル・ハミルトニアンを

$$H^\pm = -t \sum_{j=1}^N e^{\pm i\delta j} \left( c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j \right) - \mu \sum_{j=1}^N e^{\pm i\delta j} e^{\mp i\delta/2} c_j^\dagger c_j \quad (7.8)$$

と定義すると， $H_{SSD}$  は

$$H_{SSD} = \frac{1}{2}H_0 - \frac{1}{4}(H^+ + H^-) \quad (7.9)$$

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

$$c_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{ikj} c_j \quad (7.10)$$

および固有エネルギー

$$\epsilon(k) = -2t \cos k - \mu \quad (7.11)$$

で表すと,

$$H^\pm = \sum_k e^{\mp i\delta/2} \epsilon(k \mp \delta/2) c_k^\dagger c_{k \mp \delta} \quad (7.12)$$

となる．これは波数を 1 ユニット  $\delta$  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．

$$H \simeq e^{\mp i\delta/2} \epsilon(k_F \mp \delta/2) c_{k_F}^\dagger c_{k_F \mp \delta} \quad (7.13)$$

したがって

$$\epsilon(k_F \mp \delta/2) = 0 \quad (7.14)$$

となるように  $\mu$  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．

## 7.2 共形場理論

### 7.2.1 $SL(2, \mathbb{C})$ invariant vacuum

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

$$\omega = \tau + ix = \frac{L}{2\pi} \log z \quad (7.15)$$

の共形変換から

$$H_0 = \int_0^L \frac{dx}{2\pi} (T_{cyl}(\omega) + \bar{T}_{cyl}(\omega)) \quad (7.16)$$

と表される．ここでエネルギー・運動量テンソルは

$$T_{cyl}(\omega) = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \left(T(z)z^2 - \frac{c}{24}\right) \quad (7.17)$$



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

$$T(z) = \sum_n z^{-n-2} L_n \quad (7.18)$$

と表されるので，ハミルトニアンは

$$H_0 = \frac{2\pi}{L} (L_0 + \bar{L}_0) - \frac{\pi c}{6L} \quad (7.19)$$

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

$$H_{\pm} = \frac{2\pi}{L} (L_{\pm 1} + \bar{L}_{\mp 1}) \quad (7.20)$$

と表されるので，SSD ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H_{SSD} &= \frac{1}{2} H_0 - \frac{1}{4} (H_+ + H_-) \\ &= \frac{\pi}{L} \left( L_0 + \bar{L}_0 - \frac{L_1 + L_{-1} + \bar{L}_1 + \bar{L}_{-1}}{2} \right) - \frac{\pi c}{12L} \end{aligned} \quad (7.21)$$

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とき，

$$H_0 |0\rangle = E_0 |0\rangle \quad (7.22)$$

および

$$H_{SSD} |0\rangle = \frac{E_0}{2} |0\rangle \quad (7.23)$$

が成り立つ．ここで

$$E_0 = \frac{\pi c}{6L} \quad (7.24)$$

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）．

## 7.2.2 $H_{SSD}$ の非自明性

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．

$$L_n = z^{n+1} \partial_z \quad (7.25)$$

を代入すると

$$L_0 - \frac{L_1 + L_{-1}}{2} = \frac{1}{2} (2z - 1 - z^2) \partial_z = -\frac{1}{2} (z - 1)^2 \partial_z \quad (7.26)$$

が得られる．一方，別の複素変数  $u$  を用いて

$$L_0 = u \partial_u \quad (7.27)$$

と表し  $u = f(z)$  を課すと，

$$u = e^{2/(z-1)} \quad (7.28)$$

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

$$u = \frac{az + b}{cz + d} \quad (7.29)$$

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．

## 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20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遊んでみるのは楽しそうである．強相関電子論の立場からは，統計力学分野ほど厳密に臨界指数等が分からなくても，物理的に妥当な議論ができればひとまずOKなので，考える前に使ってみるとということが重要だと思われる．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．田崎さんが以前「自分がVBSの理論を作ったけど，ハミルトニアンから離れすぎていて，分野の傾向としてちょっと良くない気もする」的なことを話していたことと似た状況なのだろう．そのこと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，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（ここは自分も物性の立場からそう思う）．

ちょっと系統は違うがメリン変換の話はこれも自分で調べていてハッと分かった感覚であったのでそれなりに気に入っている（論文誌にアクセプトされるように頑張らないといけない...）．サイン二乗変形も共形場理論で解析できるので非常に安心感がある．これらの方向性は回路系とは関わりなく，連続な世界である（元々離散だったのだけれど強引に連続極限を取って見たら，そちらの方が分かりやすかったのでそちらで通すことにしている）．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．

## 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] David K. Ruch and Patrick J. van Fleet, "Wavelet Theory: An Elementary Approach with Applications", Wiley (2009).
- [3] 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) .
- [4] 中山茂著「量子アルゴリズム」, 技報堂出版 (2014) .
- [5] A. J. Ferris, Phys. Rev. Lett. **113**, 010401 (2014).
- [6] A. J. Ferris and D. Poulin, Phys. Rev. Lett. **113**, 030501 (2014).
- [7] L. K. Grover, Phys. Rev. Lett. **79**, 325 (1997).
- [8] T. Otaki, Y. Yahagi, and H. Matsueda, arXiv:1503.08291 (2015).
- [9] H. Matsueda and T. Tohyama, in preparation.
- [10] K. Okunishi and T. Nishino, "Scale-free property and edge state of Wilson's numerical renormalization group", Phys. Rev. B **82**, 144409 (2010).
- [11] Xiao-Liang Qi, "Exact holographic mapping and emergent space-time geometry", arXiv:1309.6282 (2013).
- [12] Ching Hua Lee and Xiao-Liang Qi, "Exact holographic mapping in free fermion systems", Phys. Rev. B **93**, 035112 (2016).
- [13] G. Evenbly and S. R. White, "Entanglement Renormalization and Wavelets", Phys. Rev. Lett. **116**, 140403 (2016).
- [14] G. Evenbly and S. R. White, "Representation and design of wavelets using unitary circuits", arXiv:1605.07312 (2016).

- [15] G. Evenbly and G. Vidal, "Tensor Network Renormalization", Phys. Rev. Lett. **115**, 180405 (2015).
- [16] G. Evenbly and G. Vidal, "Tensor Network Renormalization Yields the Multiscale Entanglement Renormalization Ansatz", Phys. Rev. Lett. **115**, 200401 (2015).
- [17] G. Evenbly and G. Vidal, "Local Scale Transformation on the Lattice with Tensor Network Renormalization", Phys. Rev. Lett. **116**, 040401 (2016).
- [18] H. Matsueda, arXiv:1607.03552 (2016).
- [19] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992); Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993).
- [20] F. Verstraete and J. I. Cirac, arXiv:0407066 (2004).
- [21] H. Matsueda, Phys. Rev. B **85**, 031101 (2012).
- [22] Y. Imura, T. Okubo, S. Morita, and K. Okunishi, J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 114002 (2014).
- [23] C. H. Lee, Y. Yamada, T. Kumamoto, and H. Matsueda, J. Phys. Soc. Jpn. **84**, 013001 (2015).
- [24] H. Matsueda and D. Ozaki, Phys. Rev. E **92**, 042167 (2015).
- [25] H. Matsueda, C. H. Lee, and Y. Hashizume, J. Phys. Soc. Jpn. **85**, 086001 (2016).
- [26] J. Maldacena, Adv. Theor. Math. Phys. **2**, 231 (1998).
- [27] G. Vidal, Phys. Rev. Lett. **99**, 220405 (2007).
- [28] G. Mack, arXiv:0907.2407, 0909.1024.
- [29] J. Penedones, JHEP **03**, 025 (2011).
- [30] M. F. Paulos, JHEP **10**, 074 (2011).
- [31] A. L. Fitzpatrick, J. Kaplan, J. Penedones, S. Raju, and B. C. van Rees, JHEP **11**, 095 (2011).
- [32] C. H. Lee and H. Matsueda, in preparation.

- [33] M. Andersson, M. Boman, and S. Östlund, Phys. Rev. B **59**, 10493 (1999).
- [34] L. Tagliacozzo, Thiago. R. de Oliveira, S. Iblisdir, and J. I. Latorre, Phys. Rev. B **78**, 024410 (2008).
- [35] F. Pollmann, S. Mukerjee, A. Turner, and J. E. Moore, Phys. Rev. Lett. **102**, 255701 (2009).
- [36] A. Gendiar, R. Kremer and T. Nishino, Prog. Theor. Phys. **122**, 953 (2009).
- [37] T. Hikihara and T. Nishino, Phys. Rev. B **83**, 060414 (2011).
- [38] H. Katsura, "Sine-square deformation of solvable spin chains and conformal field theories", J. Phys. A: Math. Theor. **45**, 115003 (2012).
- [39] T. Tada, "Sine-Square Deformation and its Relevance to String Theory", Mod. Phys. Lett. A **30**, 1550092 (2015).
- [40] N. Ishibashi and T. Tada, "Infinite circumference limit of conformal field theory", J. Phys. A: Math. Theor. **48**, 315402 (2015).
- [41] N. Ishibashi and T. Tada, "Dipolar quantization and the infinite circumference limit of two-dimensional conformal field theories", arXiv:1602.01190 (2016).
- [42] K. Okunishi, "Sine-square deformation and Möbius quantization of two-dimensional conformal field theory", arXiv:1603.09543 (2016).
- [43] H. Katsura and K. Okunishi, "Sine-square deformation and supersymmetric quantum mechanics", arXiv:1505.07904 (2015).