DMRG附录:用自动机来计算MPO

2021年10月8日 18:22

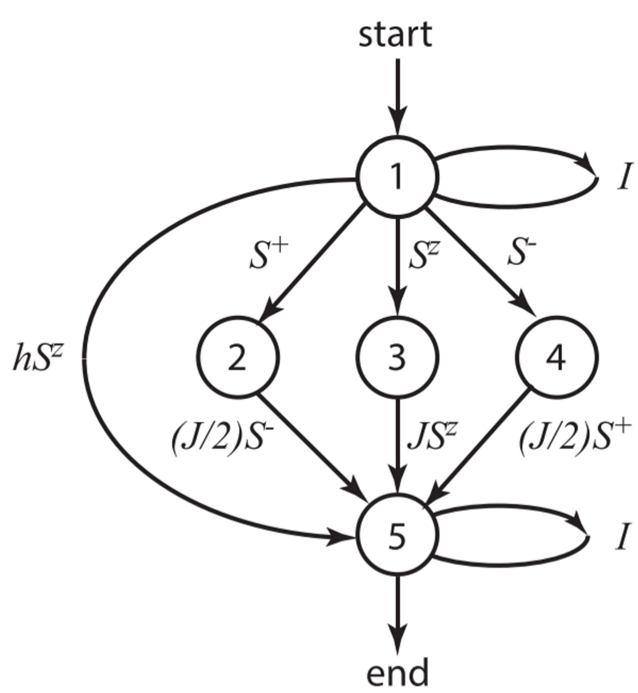
在这一小节中，我们讨论如何从 **Hamiltonian** 出发，得到其对应的**MPO**表示。本文所使用的方法，是借助于“自动机”的一种方法。首先，我们考虑一个简单的 **Heisenberg** 自旋模型：

$$\hat{H} = J\sum_{i=1}^{L-1}\left(\frac{1}{2}(\hat{S}_i^+\hat{S}_{i+1}^- + \hat{S}_i^-\hat{S}_{i+1}^+) + \hat{S}_i^z\hat{S}_{i+1}^z\right) + h\sum_{i=1}^{L}\hat{S}_i^z.$$

我们以第一项为例，当 i 不在边界上的时候，其中任何一项都可以写成下面的这种形式：

$$\hat{I}\otimes\hat{I}\otimes\hat{S}^+\otimes\hat{S}^-\otimes\hat{I}\otimes\hat{I}\ldots.$$

让我们想象一个自动机，他从这条链的右端出发，然后一直移动到左端。这个自动机有如下几种内部状态：$1(\hat{I})$ $2(\hat{S})$ $4(\hat{S}^+)$. 注意1代表链条右边的$\hat{I}$，链条左边的$\hat{I}$我们用状态5来表示。如下图所示，当我们从状态1转换到状态1的时候，中间会经过一个$\hat{I}$. 而从状态1转换到状态4的时候，中间需要经过一个$\hat{S}^-$. 而从状态2转换到状态5的时候，中间会经过一个J/2$\hat{S}^-$



其他的项都是类似的，我们在上图中画出了所有可能的状态、和状态转移的方式。比如磁场项 $h\hat{S}^z$ 可以实现状态从1到5的转变。任何一项，我们总是以状态1开始，然后到状态5而结束。然后根据这张状态转移图，我们就可以写出 **Hamiltonian** 的 **MPO** 表示了，分别用状态1,2,3,4,5作为矩阵的行和列，状态转移时所经过的算符作为矩阵元素的值，则可以写出**MPO**矩阵：

$$\hat{M}^{[i]} = \begin{bmatrix} \hat{I} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hat{S}^+ & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hat{S}^z & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hat{S}^- & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h\hat{S}^z & (J/2)\hat{S}^- & J^z\hat{S}^z & (J/2)\hat{S}^+ & \hat{I} \end{bmatrix}$$

对于边界上的格点来说，比如右边界的 L 格点，他的右边没有其他的格点了，因此可以看作是从$\hat{I}()$出发，然后转移到其他所有可能的状态。格点1也是同理的，所以我们可以得到边界上的**MPO**为

$$\hat{M}^{[1]} = \begin{bmatrix} h\hat{S}^z & (J/2)\hat{S}^- & J^z\hat{S}^z & (J/2)\hat{S}^+ & \hat{I} \end{bmatrix} \qquad \hat{M}^{[L]} = \begin{bmatrix} \hat{I} \\ \hat{S}^+ \\ \hat{S}^z \\ \hat{S}^- \\ h\hat{S}^z \end{bmatrix}$$