通过有限状态机生成 MPO

Q. X. Fang
fangqixuan23@mails.ucas.ac.cn
KITS, UCAS

2025-09-19

Abstract

这是关于张量网络方法的笔记

1 MPO 算符

在 DMRG 中，应当有哈密顿量对应的矩阵乘积算符，一般来说，最直接的方式就是把哈密顿写出来做 SVD 分解（或者 QR）

对于局域相互作用求和的算符，可以利用有限状态自动机生成

2 有限状态自动机

一个确定性的有限状态自动机是：$M(\Sigma, S, \delta, s_0, F)$，含义分别如下：

- Σ：输入符号表
- S：状态集合
- δ：状态转移函数，$\delta : S \times \Sigma to S$
- s_0：初始状态
- F：接受状态集合

可以表示成有向图：

- 状态对应着图上的点
- 状态转移对应着有向边
- 无起点的箭头表示初始状态
- 无终点的箭头或者双圈表示接受状态

比如一个简单的有限状态自动机：

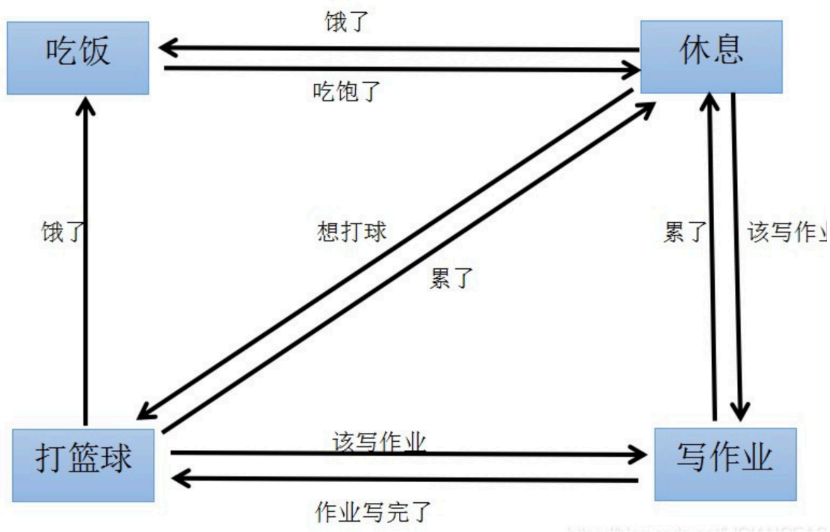


Figure 1: 一个简单的有限状态自动机

3 矩阵乘法的有向图表示

- 节点：一个指标的取值
- 边：非零矩阵元行标到列标的转移函数，其权重为矩阵元

例如一个3×3的矩阵乘法：

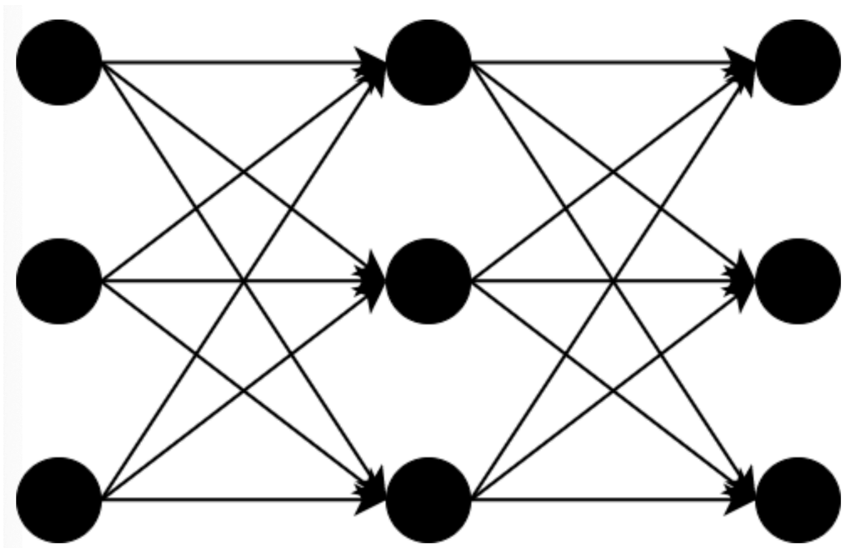


Figure 2: 矩阵乘法的有向图表示

读图：表示的乘法是

$$C_{ik}=\sum_j A_{ij}B_{jk} \tag{1}$$

第一列是A_i，从上向下三个节点是A_1,A_2,A_3，中间是公共索引j，右侧是B_k列索引，从上到下是B_1,B_2,B_3，每个边的权重是矩阵元。从第一列到第二列

的边权重A_{ij}，从第二列到第三列的边权重B_{jk}。因此，最终矩阵元的计算是所有从初态到同一末态的路径权重之和。

比如从(1,1)经过(2,1)到达(3,1)的路径权重是$A_{11}B_{11}$

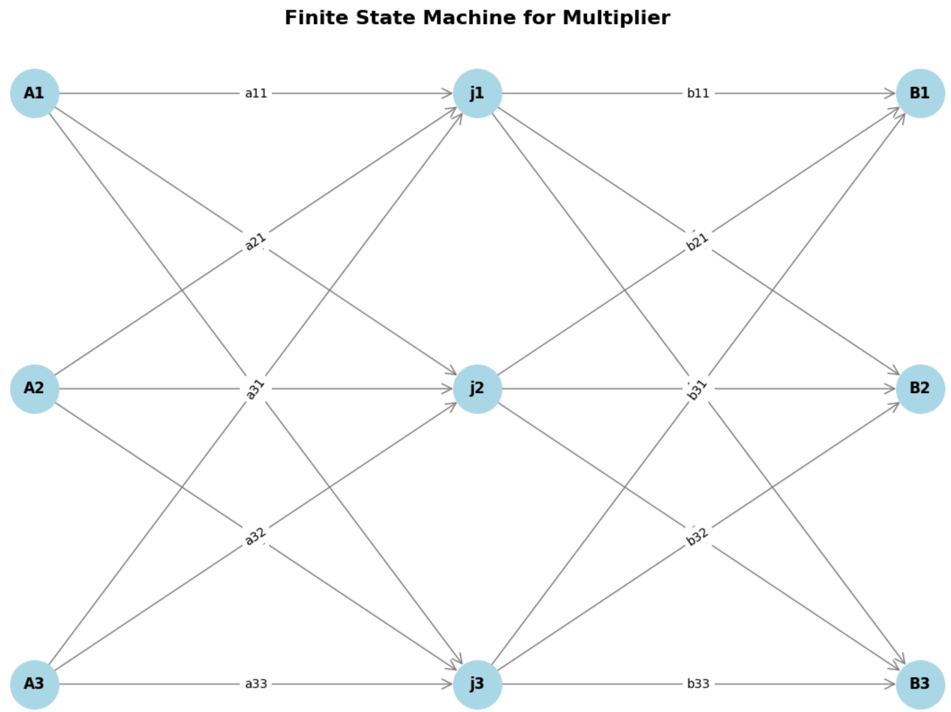


Figure 3: 矩阵乘法的有向图表示(含权重)

又比如一个更长的乘积算法:

$$\sum_{ijk} A_i B_{ij} C_{jk} D_k \tag{2}$$

对应有向图:

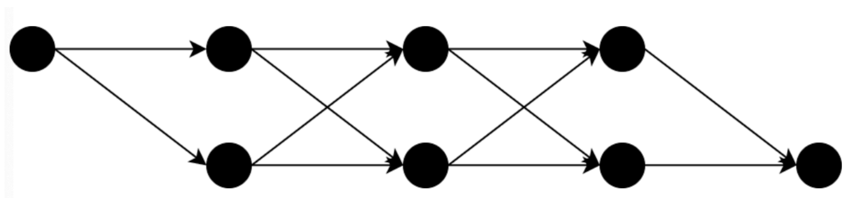


Figure 4: 更长的矩阵乘法的有向图表示

可以擦除 0 元，比如:

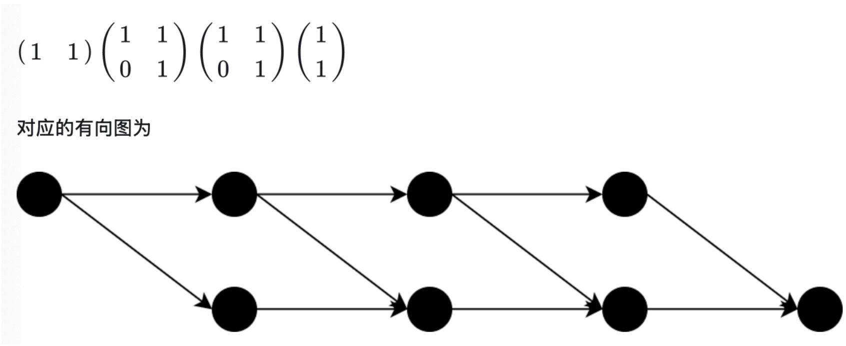


Figure 5: 可以擦除 0 元

4 有向图表示的 MPO

上面的有向图可以看作是没有激活函数的神经网络

扩展矩阵元为 vector、matrix、tensor 等，乘法改为直积，就得到了 MPO

4.1 Example: 3-site TFI chain

$$
\begin{aligned}
H &= (-Z_0 Z_1 + gX_0) + (-Z_1 Z_2 + gX_1) + gX_2 \\
&= -ZZI + gXII - IZZ + gIXI + gIIX
\end{aligned}
\tag{3}
$$

图像是:

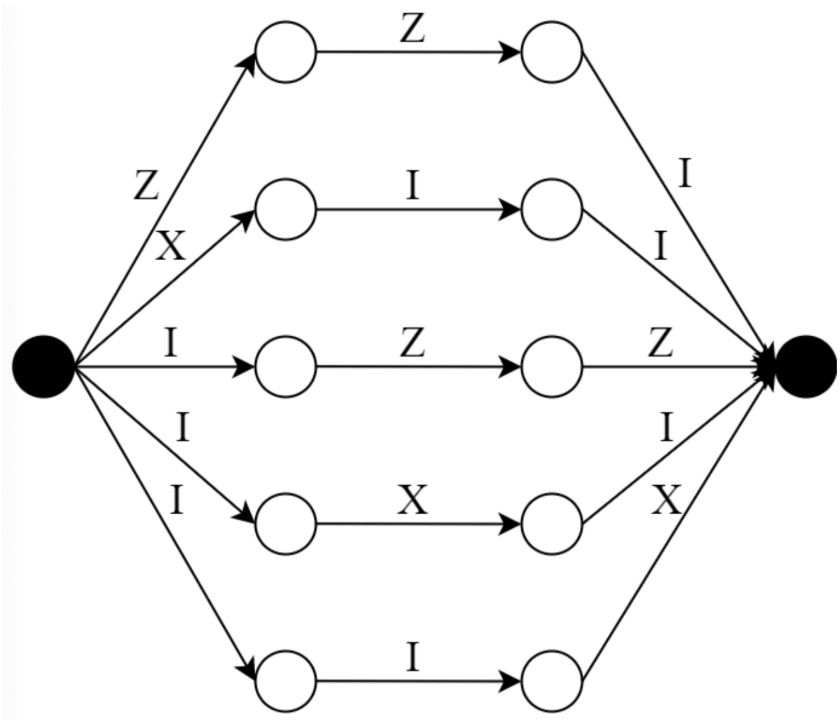


Figure 6: 3-site TFI chain 的 MPO

这有冗余路径，因此:

这就和一开始的矩阵乘法有向图一模一样了

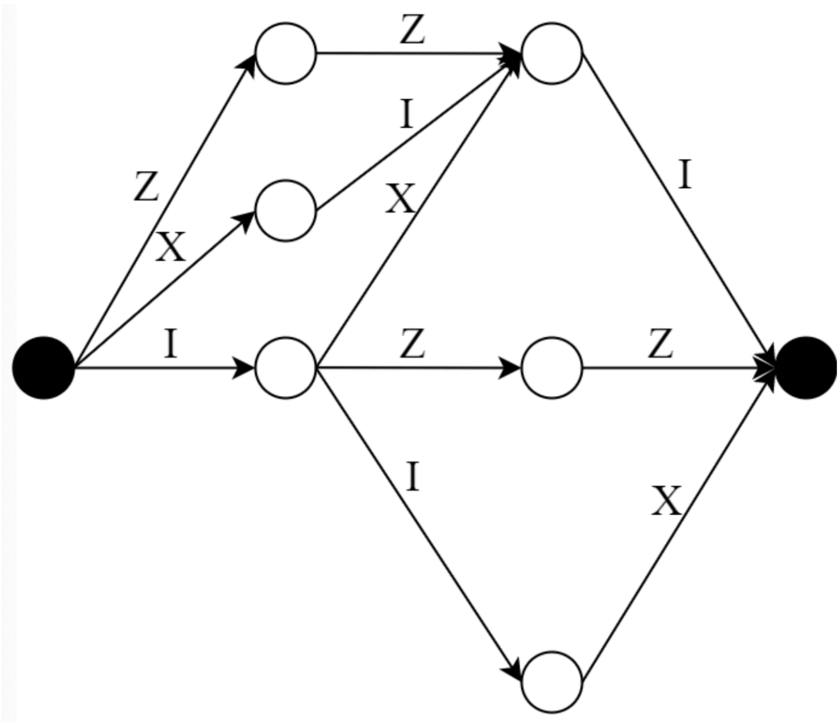


Figure 7: 3-site TFI chain 的 MPO(去除冗余路径)

于是有:

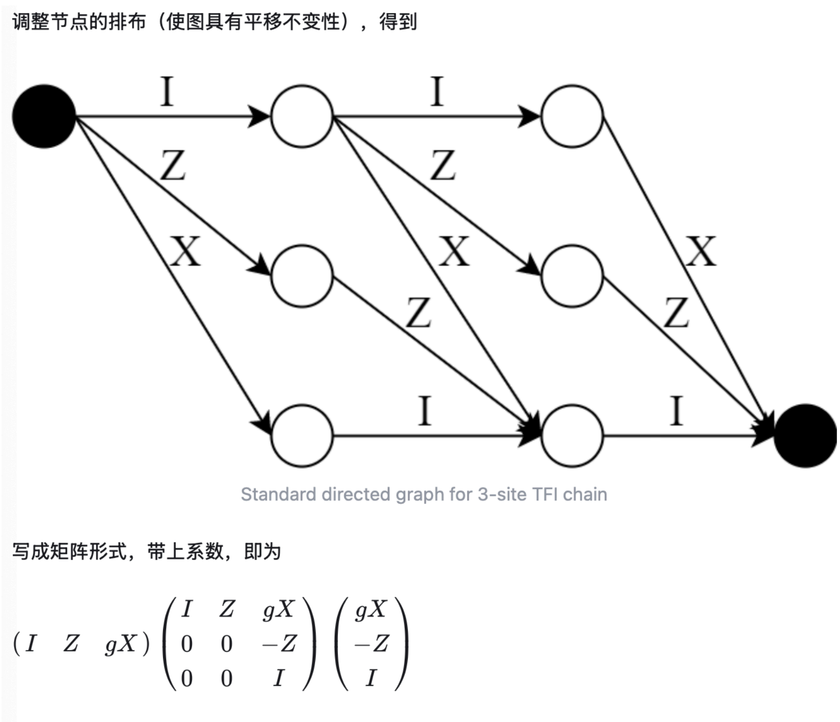


Figure 8: 3-site TFI chain 的 MPO(对边进行 grouping)

这就和一开始的矩阵乘法有向图一模一样了

5 平移不变的 MPO 的写法

- 在初始/终点建立一条通过单位元回到自己的路径，即平移对称性
- 对平移对称内求和的每一项，建立一条从初始到终点的路径

5.1 Example： 无限长的 TFI chain

$$H = \sum_j \left(-Z_j Z_{j+1} + g X_j\right) \tag{4}$$

用 有限状态自动机 的语言来说，以上 FA 只接受

> 有且仅有两个 Z 或 有且仅有一个 X （其它全是 identity）的指令序列。

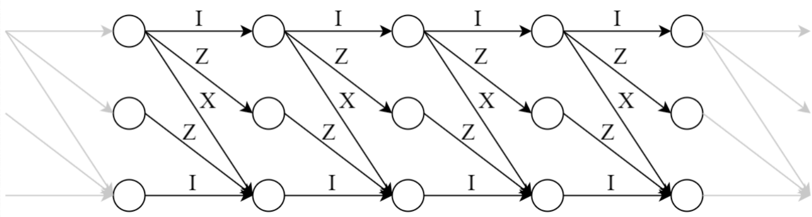
根据

> 节点=指标，边指令=矩阵元

可以写出 TFI chain 的 MPO 为

$$\begin{pmatrix} I & Z & gX \\ 0 & 0 & -Z \\ 0 & 0 & I \end{pmatrix}$$

实际上，把该 FA 展开成重复的平移单元



Translational copies of FA for TFI chain

就是上一节得到的有限大小的有向图。

Figure 9: 无限长的 TFI chain 的 MPO