



中国科学院大学

University of Chinese Academy of Sciences

# 硕士学位论文

基于扩散蒙特卡洛方法的模拟量子退火研究

作者姓名: 李泽

指导教师: 乔从丰 教授 中国科学院大学物理科学学院

学位类别: 理学硕士

学科专业: 理论物理

培养单位: 中国科学院大学物理科学学院

2023 年 6 月



**Research of Simulated Quantum Annealing**  
**Based On**  
**Diffusion Monte Carlo Method**

**A thesis submitted to**  
**University of Chinese Academy of Sciences**  
**in partial fulfillment of the requirement**  
**for the degree of**  
**Master of Natural Science**  
**in Theoretical Physics**

**By**

**Li Ze**

**Supervisor: Professor Qiao Congfeng**

**School of Physical Sciences,**  
**University of Chinese Academy of Sciences**

**June, 2023**



## **中国科学院大学 学位论文原创性声明**

本人郑重声明：所呈交的学位论文是本人在导师的指导下独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的研究成果。对论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明或致谢。

作者签名：

日 期：

## **中国科学院大学 学位论文授权使用声明**

本人完全了解并同意遵守中国科学院有关保存和使用学位论文的规定，即中国科学院有权保留送交学位论文的副本，允许该论文被查阅，可以按照学术研究公开原则和保护知识产权的原则公布该论文的全部或部分内容，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存、汇编本学位论文。

涉密及延迟公开的学位论文在解密或延迟期后适用本声明。

作者签名：

日 期：

导师签名：

日 期：



## 摘 要

基于扩散蒙特卡洛方法的模拟量子退火研究,受限玻尔兹曼机,车间调度问题

**关键词:** 模拟量子退火, 扩散蒙特卡罗方法, 受限玻尔兹曼机, 车间调度问题





## **Abstract**

Research of simulated quantum annealing based on diffusion Monte Carlo method,  
Restricted Boltzmann Machine, Job Shop Scheduling Problem

**Keywords:** Simulated Quantum Annealing, Diffusion Monte Carlo Method, Restricted  
Boltzmann Machine, Job Shop Scheduling Problem



## 目 录

第 1 章 引言 .....	1
1.1 研究背景 .....	1
1.2 研究意义 .....	1
第 2 章 组合优化问题 .....	3
第 3 章 变分蒙特卡罗方法 .....	5
3.1 变分蒙特卡罗方法的原理 .....	5
3.2 蒙特卡罗采样方法 .....	6
3.3 试探波函数参数的更新 .....	6
3.3.1 直接梯度下降法 .....	6
3.4 试探波函数 .....	8
第 4 章 扩散蒙特卡罗方法 .....	9
4.1 扩散蒙特卡罗方法的原理 .....	9
第 5 章 车间调度问题 .....	11
5.1 车间调度问题的定义 .....	11
5.1.1 车间调度问题的描述 .....	11
5.1.2 车间调度问题的析取图表示 .....	11
5.2 变分蒙特卡罗方法求解车间调度问题 .....	11
5.2.1 模型构建 .....	11
第 6 章 总结与展望 .....	13
参考文献 .....	15
致谢 .....	17
作者简历及攻读学位期间发表的学术论文与研究成果 .....	19



## 图形列表



## 表格列表





## 第 1 章 引言

1.1 研究背景

1.2 研究意义



## 第 2 章 组合优化问题



### 第3章 变分蒙特卡罗方法

#### 3.1 变分蒙特卡罗方法的原理

考虑试探波函数  $|\psi_w\rangle = \sum_i a_i |\psi_i\rangle$ ，其中  $|\psi_i\rangle$  是该物理体系下包括  $\hat{H}$  在内的一组力学量完全集的共同本征态，相应的能量本征值为  $E_i$ 。 $a_i$  即为该试探波函数展开的系数。

该试探波函数的能量期望值  $E_w$  可以写为：

$$E_w = \frac{\langle \psi_w | \hat{H} | \psi_w \rangle}{\langle \psi_w | \psi_w \rangle} = \frac{\sum_i |a_i|^2 E_i}{\sum_i |a_i|^2} \geq E_0 \frac{\sum_i |a_i|^2}{\sum_i |a_i|^2} = E_0 \quad \dots (3.1)$$

式 (3.1) 表明， $E_w$  给出了体系基态能量的一个上限。因此我们可以通过调整试探波函数的参数来不断减小  $E_w$ ，使得其不断逼近基态能量  $E_0$ ，相应的试探波函数也会更加逼近于基态波函数  $\psi_0$ 。

同直接求解定态薛定谔方程一样， $E_w$  准确计算的复杂度随着物理系统中粒子的数量指数上升。因此通常采取蒙特卡罗采样的方法估算  $E_w$ ：

$$\begin{aligned} E_w &= \frac{\langle \psi_w | \hat{H} | \psi_w \rangle}{\langle \psi_w | \psi_w \rangle} \\ &= \sum_{s, s'} \frac{\langle \psi_w | s \rangle \langle s | \hat{H} | s' \rangle \langle s' | \psi_w \rangle \langle s | \psi_w \rangle}{\langle \psi_w | \psi_w \rangle \langle s | \psi_w \rangle} \\ &= \sum_s \frac{\langle \psi_w | s \rangle \langle s | \psi_w \rangle}{\langle \psi_w | \psi_w \rangle} \sum_{s'} \frac{\langle s | \hat{H} | s' \rangle \langle s' | \psi_w \rangle}{\langle s | \psi_w \rangle} \\ &= \sum_s P(s) E_{\text{loc}}(s) \end{aligned} \quad \dots (3.2)$$

其中， $|s\rangle$  是该物理系统下的一套完备基底，式中假设该物理系统是离散的，连续物理系统下的推导只是将式中求和改成积分，因此不再赘述。

$P(s) = |\psi_w(s)|^2 / (\sum_s |\psi_w(s)|^2)$  是采样的目标概率分布。

$E_{\text{loc}}(s) = \langle s | \hat{H} | \psi_w \rangle / \psi_w(s)$  称之为局域能量。

由式 (3.2) 可知， $E_w$  的值等于概率分布  $P(s)$  下局域能量  $E_{\text{loc}}(s)$  的期望。因此我们可以对概率分布  $P(s)$  进行蒙特卡罗采样，采样得到的态  $(s_1, s_2, \dots)$  相应的局域能量平均值即为  $E_w$  的估计值。

### 3.2 蒙特卡罗采样方法

### 3.3 试探波函数参数的更新

通过蒙特卡罗采样的方式估算  $E_w$  后, 仍需要对试探波函数的参数进行不断的迭代更新, 使得其不断逼近基态能量  $\psi_0$ 。最简单直接的方法是计算  $E_w$  对参数  $w_i$  的偏导  $\partial E_w / \partial w_i$ , 继而沿着梯度方向不断减小参数  $w_i$ , 当  $E_w$  收敛时, 得到最终的基态能量估计值以及相应的基态波函数, 这种方法称之为直接梯度下降法。除此之外还有许多更加高效的方法, 例如随机重配法 (Sorella, 2001), 共轭梯度下降法, 随机梯度下降法等等。

#### 3.3.1 直接梯度下降法

直接梯度下降法通过直接计算  $E_w$  对参数  $w_i$  的偏导  $\partial E_w / \partial w_i$  来更新参数, 因此其具有方便简单, 计算量小, 容易实现的优点。

但是, 仅根据梯度来更新参数的方式很容易陷入局部最优。在更新迭代过程伊始, 直接梯度下降法往往能取得较好的效果, 但对于复杂的优化情形, 例如试探波函数参数众多,  $E_w$  与各个参数关系复杂时, 直接梯度下降法往往会导致  $E_w$  止步于某一较小值, 难以继续优化。

考虑  $E_w$  对参数  $w_i$  偏导  $\partial E_w / \partial w_i$ , 有:

$$\frac{\partial E_w}{\partial w_i} = \sum_s (E_{\text{loc}}(s)) \frac{\partial P(s)}{\partial w_i} + P(s) \frac{\partial E_{\text{loc}}(s)}{\partial w_i} \quad \dots (3.3)$$

其中概率分布  $P(s)$  对参数  $w_i$  偏导  $\frac{\partial P(s)}{\partial w_i}$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(s)}{\partial w_i} &= \frac{\psi_w^*(s)}{\sum_s |\psi_w(s)|^2} \frac{\partial \psi_w(s)}{\partial w_i} - \frac{|\psi_w(s)|^2}{(\sum_s |\psi_w(s)|^2)^2} \sum_{s'} \psi_w^*(s') \frac{\partial \psi_w(s')}{\partial w_i} \\ &= P(s) \frac{\partial \psi_w(s)}{\psi_w(s) \partial w_i} - P(s) \sum_{s'} \frac{\psi_w^*(s') \psi_w(s')}{\sum_s |\psi_w(s)|^2} \frac{\partial \psi_w(s')}{\psi_w(s') \partial w_i} \\ &= P(s) \frac{\partial \psi_w(s)}{\psi_w(s) \partial w_i} - P(s) \sum_{s'} P(s') \frac{\partial \psi_w(s')}{\psi_w(s') \partial w_i} \\ &= P(s) \Delta_{w_i}(s) - P(s) \sum_{s'} P(s') \Delta_{w_i}(s') \end{aligned} \quad \dots (3.4)$$

其中第一步利用了  $|\psi_w(s)|^2 = \psi_w^*(s) \psi_w(s)$ , 由于采用的试探波函数的参数是复数, 有  $\partial \psi_w^*(s) / \partial w_i = 0$ 。第二、三步利用了  $P(s) = |\psi_w(s)|^2 / (\sum_s |\psi_w(s)|^2)$ 。第四步定义试探波函数取对数后对参数  $w_i$  偏导  $\Delta_{w_i}(s) = \partial \psi_w(s) / [\psi_w(s) \partial w_i]$

接下来考虑局域能量  $E_{\text{loc}}(s)$  对参数  $w_i$  偏导  $\partial E_{\text{loc}}(s)/(\partial w_i)$ :

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_{\text{loc}}(s)}{w_i} &= \sum_{s'} \langle s | \hat{H} | s' \rangle \frac{\partial(\psi_w(s')/\psi_w(s))}{\partial w_i} \\ &= \sum_{s'} \langle s | \hat{H} | s' \rangle \left[ \frac{\partial \psi_w(s')}{\psi_w(s) \partial w_i} - \frac{\psi_w(s')}{\psi_w(s)} \frac{\partial \psi_w(s)}{\psi_w(s) \partial w_i} \right] \quad \dots (3.5) \\ &= \sum_{s'} \langle s | \hat{H} | s' \rangle \Delta_{w_i}(s') \frac{\psi_w(s')}{\psi_w(s)} - \Delta_{w_i}(s) E_{\text{loc}}(s)\end{aligned}$$

将式 (3.4) 和式 (3.5) 的结果代入式 (3.3), 有:

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_w}{\partial w_i} &= \sum_s [E_{\text{loc}}(s) P(s) \Delta_{w_i}(s) - E_{\text{loc}}(s) P(s) \sum_{s'} P(s') \Delta_{w_i}(s')] \\ &\quad + P(s) \sum_{s'} \langle s | \hat{H} | s' \rangle \Delta_{w_i}(s') \frac{\psi_w(s')}{\psi_w(s)} - P(s) \Delta_{w_i}(s) E_{\text{loc}}(s)] \\ &= - \sum_s E_{\text{loc}}(s) P(s) \sum_{s'} P(s') \Delta_{w_i}(s') + \sum_s P(s) \sum_{s'} \langle s | \hat{H} | s' \rangle \Delta_{w_i}(s') \frac{\psi_w(s')}{\psi_w(s)} \\ &= - E_w \sum_s P(s) \Delta_{w_i}(s) + \sum_{s'} \Delta_{w_i}(s') |\psi_w(s')|^2 \sum_s \frac{P(s) \langle s | \hat{H} | s' \rangle}{\psi_w(s) \psi_w^*(s')} \\ &= - E_w \sum_s P(s) \Delta_{w_i}(s) + \sum_{s'} \Delta_{w_i}(s') P(s') \left[ \sum_s \frac{\langle s' | \hat{H} | s \rangle \psi_w(s)}{\psi_w(s')} \right]^* \\ &= - E_w \sum_s P(s) \Delta_{w_i}(s) + \sum_s \Delta_{w_i}(s) P(s) E_{\text{loc}}^*(s) \\ &= \sum_s P(s) \Delta_{w_i}(s) (E_{\text{loc}}^*(s) - E_w) \quad \dots (3.6)\end{aligned}$$

其中第三步利用了  $E_w = \sum_s P(s) E_{\text{loc}}(s)$ 。

第四步利用了  $P(s) = |\psi_w(s)|^2 / (\sum_s |\psi_w(s)|^2)$  以及哈密顿算符的厄米性。第五步利用了  $E_{\text{loc}}(s) = \langle s | \hat{H} | \psi_w \rangle / \psi_w(s)$ 。

由式 (3.6) 可知,  $E_w$  对参数  $w_i$  偏导  $\partial E_w / \partial w_i$  同样可以通过对概率分布  $P(s)$  进行蒙特卡罗采样进行计算, 采样得到的态  $(s_1, s_2, \dots)$  相应的  $\Delta_{w_i}(s)(E_{\text{loc}}^*(s) - E_w)$  平均值即为  $\partial E_{\text{loc}}(s)/(\partial w_i)$  的估计值。

因此在更新试探波函数参数的每一步, 我们都对概率分布  $P(s)$  进行蒙特卡罗采样, 根据采样结果计算  $E_w$  以及其对参数的偏导  $\partial E_w / \partial w_i$ , 进而沿着梯度方向不断减小参数  $w_i$ 。当  $E_w$  收敛时, 取  $E_w$  的实部作为最终的基态能量估计值, 相应的试探波函数即为近似的基态波函数。

### 3.4 试探波函数

近年来,许多种试探波函数被尝试用来描述量子多体系统,例如神经网络量子态,张量网络态以及传统的经验波函数等等。本文采用基于神经网络的受限玻尔兹曼机作为试探波函数。

受限玻尔兹曼机可以基于对目标概率分布的采样学习描述相应的概率分布。。。。。。。



## 第 4 章 扩散蒙特卡罗方法

### 4.1 扩散蒙特卡罗方法的原理



## 第 5 章 车间调度问题

### 5.1 车间调度问题的定义

#### 5.1.1 车间调度问题的描述

#### 5.1.2 车间调度问题的析取图表示

### 5.2 变分蒙特卡罗方法求解车间调度问题

我们首先采用变分蒙特卡罗方法求解车间调度问题，用受限玻尔兹曼机当作试探波函数描述对应系统的量子态。首先我们需要构建模型，将车间调度问题映射到一个量子系统，求解车间调度问题也就等价于求解该量子系统的基态。

#### 5.2.1 模型构建

设待求解车间调度问题总的工序数量为  $N$ ，对各个工件上的各个工序依次标号  $1 \sim N$ 。析取图中，虚拟的开始工序标号  $0$ ，虚拟的结束工序标号  $N + 1$

对于任意两个不属于同一工件但需要在同一机器上加工的工序  $\{i, j | i, j \in \{1, \dots, N\} \wedge J_i \neq J_j \wedge M_i = M_j\}$ ，定义二进制变量  $\{x_{i,j} | x_{i,j} \in \{0, 1\} \wedge (i < j)\}$ 。

$x_{i,j} = 1$  意味着在这个变量对应的方案下，工序  $i$  比工序  $j$  更早加工； $x_{i,j} = 0$  意味着在这个变量对应的方案下，工序  $i$  比工序  $j$  更晚加工。

对应析取图中，每个二进制变量  $x_{i,j}$  一对一对应于未确定方向的析取弧，因此当所有定义的二进制变量的值确定时，相应的调度方案也就确定了。我们将一个确定的调度方案对应的所有二进制变量取值的集合记作  $x$

然而，这样一个确定的调度方案并不一定是合理的，因为确定析取弧方向后的析取图可能是一个循环的有向图。我们不能从一个循环图中确定循环路径上工序的先后顺序。因此，相应的  $x$  是一个不合理解。

解决不合理解的方法有两种：一种是在目标函数上附加对不合理解的惩罚项，这种方式会趋使生成的解朝着可行解的方向更新，但不能杜绝不合理解，并且会使得目标函数更加复杂，增大优化的难度；另一种是在解的更新方式上作限制，使其总是在可行解的范围内迭代，这种方式构建难度大，需要保证解的收敛性，往往需要进行额外的限制。



## 第 6 章 总结与展望



## 参考文献

Sorella S. Generalized lanczos algorithm for variational quantum monte carlo [J]. Physical Review B, 2001, 64(2): 024512.





## 致 谢



## 作者简历及攻读学位期间发表的学术论文与研究成果

作者简历：

李泽，河南省商水县人，中国科学院大学物理科学学院硕士研究生。

已发表（或正式接受）的学术论文：

- 1.

