

第 1 章 退火相关文献

1.1 退火相关：方向接近

1.1.1

1. [Finnila 等 \(1994\)](#):

- 工作内容概述：最先提出基于扩散蒙特卡罗方法（没有引导波函数）的模拟量子退火寻找最优解，在最多包含 19 个粒子的莱纳德-琼斯集群（连续模型）上进行了测试。

- 课题相关性：基于扩散蒙特卡罗方法的模拟量子退火。
- 核心创新点：最先提出基于扩散蒙特卡罗方法（没有引导波函数）的模拟量子退火。
- 先进性：最先提出基于扩散蒙特卡罗方法（没有引导波函数）的模拟量子退火。

- 影响力：引用次数：669。

- 相关代码：

2. [Inack 等 \(2015\)](#):

- 工作内容概述：
- 课题相关性：
- 核心创新点：
- 先进性：
- 影响力：引用次数：18。
- 相关代码：

3. [Santoro 等 \(2006\)](#):

- 工作内容概述：
- 课题相关性：
- 核心创新点：
- 先进性：
- 影响力：引用次数：344。
- 相关代码：

4. [Stella 等 \(2007\)](#):

-
- 工作内容概述:
 - 课题相关性:
 - 核心创新点:
 - 先进性: 基于格林函数蒙特卡罗方法的模拟量子退火在没有可靠的引导波函数情况下, 要劣于基于路径积分蒙特卡罗方法的模拟量子退火。

- 影响力: 引用次数: 22。

- 相关代码:

5. [Jarret 等 \(2016\)](#):

- 工作内容概述:
- 课题相关性: SSMC 属于 PQMC; MAX-k-SAT
- 核心创新点:
- 先进性:
- 影响力: 引用次数: 42。
- 相关代码:

1.2 退火相关: 方向较远

1. [Kirkpatrick 等 \(1983\)](#):

- 工作内容概述:
- 课题相关性:
- 核心创新点:
- 先进性:
- 影响力: 引用次数: 53969。
- 相关代码:

2. [Kadowaki 等 \(1998\)](#):

- 工作内容概述: 在小系统上对多种横向场伊辛模型的含时薛定谔方程进行了数值求解以获得量子退火结果, 与经典的拟退火结果进行对比, 最终表明量子退火到达基态的概率高于经典拟退火。

- 课题相关性: 数值求解小系统含时薛定谔方程以描述量子退火。

- 核心创新点: 在多种横向场伊辛模型上, 数值求解小系统含时薛定谔方程以描述量子退火。

- 先进性：量子退火在大多数情况下优于经典拟退火。
- 影响力：引用次数：1725。
- 相关代码：

3. [Brooke 等 \(1999\)](#):

• 工作内容概述：实验上对量子退火和经典退火在无序磁铁模型上进行了对比，表明量子退火得到的态更接近于基态。

- 课题相关性：实验上实现了量子退火。
- 核心创新点：实验上实现了量子退火。
- 先进性：在该实验模型上表明量子退火优于经典退火。
- 影响力：引用次数：553。
- 相关代码：

4. [Lee 等 \(2000\)](#):

- 工作内容概述：
- 课题相关性：
- 核心创新点：
- 先进性：
- 影响力：引用次数：
- 相关代码：

5. [Farhi 等 \(2000\)](#):

• 工作内容概述：提出基于路径积分蒙特卡罗方法的量子热退火 (QTA-PIMC)，在[Honeycutt 等 \(1992\)](#)提出的 BLN 蛋白质模型上进行了测试，与经典拟退火 (SA) 进行了比较，表明 QTA-PIMC 优于 SA。

- 课题相关性：PIMC 实现模拟量子退火。
- 核心创新点：提出基于路径积分蒙特卡罗方法的量子热退火 (QTA-PIMC)
- 先进性：传统的 SA 是 QTA-PIMC 的子集，QTA-PIMC 在大系统上表现更佳。

- 影响力：引用次数：1297。
- 相关代码：

6. [Lee 等 \(2001\)](#):

- 工作内容概述：

-
- 课题相关性: PIMC 实现模拟量子退火。
 - 核心创新点:
 - 先进性:
 - 影响力: 引用次数: 28。
 - 相关代码:

7. [Brooke 等 \(2001\)](#):

- 工作内容概述:
- 课题相关性:
- 核心创新点:
- 先进性:
- 影响力: 引用次数: 151。
- 相关代码:

8. [Farhi 等 \(2001\)](#):

• 工作内容概述: 在小系统上对随机生成的精确覆盖问题的含时薛定谔方程进行了数值求解以获得量子退火结果, 结果表明退火所需时间随着所需比特数增长缓慢, 为量子退火机解决 NPC 问题提供了有利证据。

- 课题相关性: 数值求解小系统含时薛定谔方程以描述量子退火。
- 核心创新点: 在随机生成的精确覆盖问题上, 数值求解小系统含时薛定谔方程以描述量子退火。
- 先进性: 绝热量子计算的权威文章, 为量子退火机解决 NPC 问题提供了有利证据, 一般涉及到绝热量子计算求解优化问题都会引用。
- 影响力: 引用次数: 2046。
- 相关代码:

9. [Farhi 等 \(2002\)](#):

• 工作内容概述: 在具体案例上通过理论分析对比研究了绝热量子演化和经典拟退火寻找最优解的能力。提供了两个量子绝热演化 (线性时间) 优于经典拟退火 (指数级时间) 的案例。给出结论经典拟退火难以优化的场景在绝热量子演化下或许可以有效解决。

- 课题相关性: 量子绝热演化优越性的理论分析。
- 核心创新点: 在具体案例上通过理论分析对比研究了绝热量子演化和经

典拟退火寻找最优解的能力。

- 先进性：量子绝热演化优于经典拟退火。
- 影响力：引用次数：106。
- 相关代码：

10. [Martoňák 等 \(2002\)](#):

- 工作内容概述：
- 课题相关性：基于 PIMC 的模拟量子退火
- 核心创新点：
- 先进性：
- 影响力：引用次数：157。
- 相关代码：

11. [Santoro 等 \(2002\)](#):

- 工作内容概述：在二维随机伊辛模型上对基于路径积分蒙特卡罗 (PIMC) 的模拟量子退火和经典拟退火进行了比较，结果表明二者剩余能量 ϵ 均满足 $\epsilon_{\text{res}}(\tau) = E_{\text{final}}(\tau) - E_{\text{GS}} \approx \log^{-\xi}(\tau)$ ，但模拟量子退火的 ξ 大于经典拟退火的，因此更为有效。同时针对模拟量子退火过程发生的朗道-泽纳隧穿进行了分析，表明能级间隙连续的模型会对退火产生不利影响。

- 课题相关性：基于 PIMC 的模拟量子退火。量子退火因能级间隙导致的局限性。

- 核心创新点：在二维随机伊辛模型上对基于 PIMC 的模拟量子退火剩余能量和退火时间的关系进行了分析。

- 先进性：表明基于 PIMC 的模拟量子退火优于经典拟退火。
- 影响力：引用次数：666。
- 相关代码：

12. [Bravyi 等 \(2006\)](#):

- 工作内容概述：
- 课题相关性：
- 核心创新点：
- 先进性：
- 影响力：引用次数：257。

-
- 相关代码:

13. [Jansen 等 \(2007\)](#):

- 工作内容概述: 对绝热量子计算提供了数学理论支持, 对能级间隙和演化时间的关系进行了解析分析: 演化时间 $\tau \approx 1/g_{\min}^2$ 才可以保证 $H(t/\tau)$ 的绝热演化。

- 课题相关性: 绝热量子计算的理论基础, 最小能级间隙对绝热演化时间的限制。

- 核心创新点: 对能级间隙和演化时间的关系进行了解析分析。

- 先进性: 对能级间隙和演化时间的关系进行了解析分析。

- 影响力: 引用次数: 361。

- 相关代码:

14. [Aharonov 等 \(2008\)](#):

- 工作内容概述: 绝热量子计算等价于基于门的标准量子计算。

- 课题相关性:

- 核心创新点:

- 先进性:

- 影响力: 引用次数: 653。

- 相关代码:

15. [Bravyi 等 \(2010\)](#):

- 工作内容概述:

- 课题相关性:

- 核心创新点:

- 先进性:

- 影响力: 引用次数: 133。

- 相关代码:

16. [Altshuler 等 \(2010\)](#):

- 工作内容概述:

- 课题相关性: 绝热量子优化因能级间隙导致的局限性。

- 核心创新点:

- 先进性:

- 影响力：引用次数：226。

- 相关代码：

17. [Farhi 等 \(2012\)](#):

- 工作内容概述：
- 课题相关性：绝热量子算法局限性。
- 核心创新点：
- 先进性：
- 影响力：引用次数：122。

- 相关代码：

18. [Elgart 等 \(2012\)](#):

- 工作内容概述：
- 课题相关性：
- 核心创新点：
- 先进性：
- 影响力：引用次数：52。

- 相关代码：

19. [Hastings 等 \(2013\)](#):

● 工作内容概述：构造了一类无符号问题的 stoquastic 哈密顿量模型，基于路径积分蒙特卡罗方法的模拟量子退火在此类问题上受到拓扑阻碍不能有效得到基态（线性小的能量间隙却需要指数增长的演化时间）。

- 课题相关性：基于路径积分蒙特卡罗方法的模拟量子退火的局限性。

● 核心创新点：构造了基于路径积分蒙特卡罗方法的模拟量子退火的受限模型。

● 先进性：指出了路径积分蒙特卡罗的局限性，在该类模型上量子绝热优化可能指数级优于 PIMC。

- 影响力：引用次数：55。

- 相关代码：

20. [Boixo 等 \(2014\)](#):

- 工作内容概述：

- 课题相关性：

-
- 核心创新点：
 - 先进性：
 - 影响力：引用次数：749。
 - 相关代码：

21. [Rønnow 等 \(2014\)](#):

- 工作内容概述：
- 课题相关性：
- 核心创新点：
- 先进性：
- 影响力：引用次数：587。
- 相关代码：

22. [Smolin 等 \(2014\)](#):

- 工作内容概述：对[Boixo 等 \(2014\)](#)的工作质疑。
- 课题相关性：
- 核心创新点：
- 先进性：
- 影响力：引用次数：89。
- 相关代码：

23. [King 等 \(2015\)](#):

- 工作内容概述：
- 课题相关性：
- 核心创新点：
- 先进性：
- 影响力：引用次数：92。
- 相关代码：

24. [Heim 等 \(2015\)](#):

- 工作内容概述：通过数值研究调解了[Santoro 等 \(2002\)](#)对基于 PIMC 的模拟量子退火实现量子加速的期望与[Rønnow 等 \(2014\)](#)没能探测到量子加速实验。
- 课题相关性：
- 核心创新点：

- 先进性:
- 影响力: 引用次数: 210。
- 相关代码:

25. [Jarret 等 \(2015\)](#):

• 工作内容概述: 提出了一种没有局域较小值但能级间隙随着变量数指数增长的问题, 在该类问题下, 量子绝热优化不如传统的梯度下降法有效。

- 课题相关性: 量子绝热优化的局限性。
- 核心创新点: 提出了一种没有局域较小值但能级间隙随着变量数指数增长的问题。
- 先进性: 量子绝热优化在特定问题上(能级间隙随着变量数指数增长, 却没有局域较小值)并不一定比传统的梯度下降法有效。

- 影响力: 引用次数: 9
- 相关代码:

26. [Liu 等 \(2015\)](#):

• 工作内容概述: 对[Boixo 等 \(2014\)](#)的工作质疑。

- 课题相关性:
- 核心创新点:
- 先进性:
- 影响力: 引用次数:
- 相关代码:

27. [Knysh \(2016\)](#):

- 工作内容概述:
- 课题相关性: 量子退火的局限性。
- 核心创新点:
- 先进性:
- 影响力: 引用次数:
- 相关代码:

28. [Denchev 等 \(2016\)](#):

• 工作内容概述: 对比研究了 D-Wave 2X 量子退火机、基于路径积分蒙特卡罗方法的模拟量子退火、经典拟退火在解决优化问题上的速度表现。结果表

明，D-Wave 量子退火机的速度 10^8 快于经典拟退火（单核处理器），且 SA 退火时间随着问题规模的增长速率远高于 D-Wave 量子退火机。D-Wave 量子退火机的速度同样远快于基于 PIMC 的 SQA（单核处理器），最快甚至达到 10^8 倍，但是二者退火时间随着问题规模的增长速率相当。

- 课题相关性：量子退火与基于路径积分蒙特卡罗方法的模拟量子退火对比。

- 核心创新点：对比研究了 D-Wave 2X 量子退火机、基于路径积分蒙特卡罗方法的模拟量子退火、经典拟退火在解决优化问题上的速度表现。

- 先进性：速度上 D-Wave 量子退火机具有明显的优势，同时表明模拟量子退火与量子退火的退火时间随着问题规模的增长速率相当。由于经典算法采用的都是单核处理器，文中的速度倍率仅供参考。

- 影响力：引用次数：453。谷歌团队提供的量子退火优越性的权威文章，同时也显示出了模拟量子退火的潜力。

- 相关代码：

29. [Brady 等 \(2016\)](#):

- 工作内容概述：对量子绝热优化和路径积分蒙特卡罗方法的隧穿强度进行了数值分析，表明量子蒙特卡罗方法同样受能级间隙的影响。

- 课题相关性：路径积分蒙特卡罗方法的隧穿强度。

- 核心创新点：之前 [Liu 等 \(2015\)](#) 的研究表明量子蒙特卡罗方法和量子退火的动力学过程不尽相同，该研究确定了量子蒙特卡罗方法同样受能级间隙的影响。

- 先进性：

- 影响力：引用次数：32。

- 相关代码：

30. [Hibat-Allah 等 \(2021\)](#):

- 工作内容概述：

- 课题相关性：

- 核心创新点：

- 先进性：

- 影响力：引用次数：17。

- 相关代码：

31. [Inack 等 \(2022\)](#):

- 工作内容概述：
- 课题相关性：
- 核心创新点：
- 先进性：
- 影响力：引用次数： 1。
- 相关代码：

第2章 神经网络相关文献

2.1 神经网络相关：方向接近

1. Carleo 等 (2017):

- 工作内容概述：利用受限玻尔兹曼机描述量子多体系统的波函数，并利用基于随机重配 (Sorella 等, 2007) 的 VMC 方法求解了一维、二维的横向场伊辛模型以及海森堡反铁磁模型的基态。最后利用时间依赖的 VMC 方法 (Carleo 等, 2012, 2014) 研究了 RBM 表示遵循含时薛定谔方程演化的波函数的能力。

- 课题相关性：基于 RBM 的 VMC 方法求解量子系统的基态；基于时间依赖的 VMC 方法优化参数含时的 RBM 也是一种模拟量子退火的方法。

- 核心创新点：RBM 表示量子多体系统波函数

- 先进性：作者声明在这个研究案例上，随机重配法优于 Harju 等 (1997) 所采用的随机梯度下降法。

- 影响力：引用次数：1580。用 RBM 表示量子多体系统的权威文章，发表在 science，相关领域基本都会引用。

- 相关代码：提供开源代码 C++ 格式，github 上有很多复现工作。

2.2 神经网络相关：方向较远

1. Saito (2017):

- 工作内容概述：受 Carleo 等 (2017) 用神经网络表示量子态并优化的启发，提出使用全连接的前馈神经网络作为试探波函数，并利用基于标准最速梯度下降（如 Becca 等 (2017) 介绍的）的 VMC 方法求解了玻色子哈伯德模型的基态。

- 课题相关性：基于神经网络的 VMC 方法求解量子系统基态。

- 核心创新点：全连接的前馈神经网络描述量子态。

- 先进性：结果与精确对角化的结果符合，未与其他方法比较。

- 影响力：引用次数：123。

- 相关代码：

2. Huang 等 (2017):

- 工作内容概述：一般人们采用局部更新配置的蒙特卡罗方法对试探波函

数进行采样，然而这种方式在大规模、挑战性很高（处在相变临界点、强阻挫等等）的量子系统中效率往往很低（新配置和原配置的改变小，互相转变的接受概率几乎相等）。文中提出改进方法：首先用监督学习方法训练受限玻尔兹曼机来描述（试探）波函数，用训练得到的受限玻尔兹曼机提出新配置，再用梅特罗波利斯-黑斯廷斯算法 (Metropolis 等, 1953; Hastings, 1970) 对原（试探）波函数进行采样。文章采用上述改进方法对 alicov-Kimball 模型 (Falicov 等, 1969) 进行了求解，结果表明在相变临界点附近的量子系统中，马尔科夫链新配置的接受概率和自修正时间都有所改善。

- 课题相关性：常规局部更新配置的蒙特卡罗方法难以对复杂的（试探）波函数进行采样，文中提出的方式能够提高效率。

- 核心创新点：利用机器学习改进对复杂（试探）波函数的蒙特卡罗采样。

- 先进性：优于常规局部更新配置的蒙特卡罗采样方法

- 影响力：引用次数：257。通用的方法论，在统计物理、凝聚态领域比较重要。

- 相关代码：

3. Liu 等 (2017):

- 工作内容概述提出了自学习蒙特卡罗方法 (SLMC)，原理类似于 Huang 等 (2017) 的工作，但是采用的是线性回归方法训练等效哈密顿量来描述原哈密顿量。其在二维方格的铁磁体伊辛模型上进行了测试，大大减小了在相变点附近的自修正时间（因为更新方式变为 RBM 提供的全局更新方式）。

- 课题相关性：对二维方格的铁磁体伊辛模型进行了测试，线性回归方法训练 RBM 也可以借鉴。

- 核心创新点：利用机器学习改进蒙特卡罗采样。

- 先进性：优于常规局部更新配置的蒙特卡罗采样方法

- 影响力：引用次数：240。通用的方法论，在统计物理、凝聚态领域比较重要。

- 相关代码：

4. Inack 等 (2018b):

- 工作内容概述：采用非受限玻尔兹曼机 (uRBM) 作为试探波函数（仅三个参数），并用标准的随机梯度下降法（如 Becca 等 (2017) 介绍的）进行优化，继

而在 PQMC 上对铁磁体量子伊辛链进行模拟（由于 uRBM 不能对隐藏变量解析求和，参考 Vitiello 等 (1991) 的工作进行了额外修改），得到了精确的基态能量。

- 课题相关性：神经网络用作试探波函数予以优化，并用于 PQMC 进行进一步优化得到量子体系基态能量。参数少，便于训练，可用在模拟量子退火过程中多次训练作为引导波函数（没有符号问题的模型上），代价是对隐藏变量进行额外采样。

- 核心创新点：非受限玻尔兹曼机作为试探波函数，并用于 PQMC 进行进一步优化。

- 先进性：uRBM 的优化结果优于传统的玻尔兹曼函数，仅三个参数取得了 RBM 中隐藏变量数等同于可见变量数的结果（但需要额外对隐藏变量采样）；减小了 PQMC 中有限 walker 所导致的误差。

- 影响力：引用次数：26。

- 相关代码：

5. Saito 等 (2018):

- 工作内容概述：继 Saito (2017) 的工作，研究了多层全连接的前馈神经网络和卷积神经网络作为试探波函数，并利用 AdaGrad 方法 (Duchi 等, 2011)、Adam 方法 (Kingma 等, 2014) 进行优化，求解了玻色子哈伯德模型的基态。

- 课题相关性：用神经网络表示量子态，并进行优化来求解量子系统基态。

- 核心创新点：采用多层全连接的前馈神经网络和卷积神经网络表示量子态，研究其效果。

- 先进性：卷积神经网络表现最好；AdaGrad 方法 (Duchi 等, 2011)、Adam 方法 (Kingma 等, 2014) 优于标准最速梯度下降法（如 Becca 等 (2017) 介绍的）。

- 影响力：引用次数：97。

- 相关代码：

6. Freitas 等 (2018):

- 工作内容概述：用非受限玻尔兹曼机表示量子态，通过增加隐藏变量和更新参数的方式来表征量子算符的作用。然后通过两种近似方法将非受限玻尔兹曼机投影到了受限玻尔兹曼机上，用以提取信息，实现了不依赖高算力要求的蒙特卡洛对神经网络量子态进行优化。

- 课题相关性：非受限玻尔兹曼机表示量子态并进行优化。

- 核心创新点：通过增加隐藏变量和更新参数的方式来表征量子算符的作用，实现了不依赖高算力要求的蒙特卡洛对神经网络量子态进行优化。

- 先进性：

- 影响力：引用次数：20。

- 相关代码：

7. [Carleo 等 \(2018\)](#):

- 工作内容概述：用深（两层）玻尔兹曼机（DBM）表示量子态，通过改变 DBM 参数和隐藏变量数量的方式表征量子系统的虚时间演化，得以用线性增长的神经网络表示最后的量子系统基态。在横向场伊辛模型和反铁磁体海森堡模型上进行了测试。

- 课题相关性：深（两层）玻尔兹曼机（DBM）表示量子态，并进行优化来求解量子系统基态。

- 核心创新点：通过改变 DBM 参数和隐藏变量数量的方式表征量子系统的虚时间演化，用以得到基态。

- 先进性：

- 影响力：引用次数：146。

- 相关代码：提供了 python 格式的部分（构建 DBM）开源代码。

第3章 蒙卡相关文献

3.1 蒙卡相关：方向接近

1. [Anderson \(1975\)](#):

- 工作内容概述：提出了扩散蒙特卡罗方法（DMC）
- 课题相关性：DMC
- 核心创新点：最先提出了 DMC
- 先进性：最先提出了 DMC
- 影响力：引用次数：1188。
- 相关代码：

2. [Reynolds 等 \(1982\)](#):

- 工作内容概述：
- 课题相关性：
- 核心创新点：
- 先进性：
- 影响力：引用次数：1283。
- 相关代码：

3. [Ceperley 等 \(1986\)](#):

• 工作内容概述：对基于随机游走求解多体薛定谔方程的各种方法进行了概述，其中对扩散蒙特卡罗方法（DMC）作了较为详细的介绍，并对各种量子蒙特卡罗方法在凝聚态物理中的应用进行了说明。

- 课题相关性：DMC；格林函数蒙特卡罗方法（GFMC）；
- 核心创新点：
- 先进性：表明格林函数蒙特卡罗方法（GFMC）的先进性，应用广泛。
- 影响力：引用次数：419。
- 相关代码：

4. [Trivedi 等 \(1990\)](#):

- 工作内容概述：
- 课题相关性：格林函数蒙特卡罗方法

-
- 核心创新点：
 - 先进性：
 - 影响力：引用次数：309。
 - 相关代码：

5. [Umrigar 等 \(1993\)](#):

- 工作内容概述：
- 课题相关性：
- 核心创新点：
- 先进性：
- 影响力：引用次数：659。
- 相关代码：

6. [Sorella 等 \(2000\)](#):

- 工作内容概述：
- 课题相关性：
- 核心创新点：
- 先进性：
- 影响力：引用次数：111。
- 相关代码：

7. [Nightingale 等 \(2001\)](#):

- 工作内容概述：提出了线性方法优化试探波函数，将其用于关联函数蒙特卡罗方法，在最多七个粒子的范德瓦尔斯集群模型上进行了测试，得到了基态和激发态能量。

- 课题相关性：线性方法优化试探波函数。
- 核心创新点：最先提出线性方法优化试探波函数。
- 先进性：
- 影响力：引用次数：126。线性方法优化试探波函数。
- 相关代码：

8. [Foulkes 等 \(2001\)](#):

- 工作内容概述：对 VMC 和固定节点 DMC 进行了教科书式详细的介绍，并在一些案例上（如：固体和集群的基态和激发态）进行了展示。

- 课题相关性: VMC 和固定节点 DMC 教科书式详细的介绍。
- 核心创新点:
- 先进性:
- 影响力: 引用次数: 2446。
- 相关代码:

9. [Casula 等 \(2005\)](#):

- 工作内容概述:
- 课题相关性:
- 核心创新点:
- 先进性:
- 影响力: 引用次数: 121。
- 相关代码:

10. [Umrigar 等 \(2005\)](#):

• 工作内容概述: 提出了一种改进版的牛顿法来优化试探波函数。在 NO_2 和 $C_{10}H_{12}$ 分子上对贾斯特罗试探波函数进行了测试。

• 课题相关性: 在能量减小的方向更新试探波函数参数的方法论。但仍有对海森矩阵求逆等计算量大的操作。

- 核心创新点: 改进版的牛顿法来优化试探波函数。
- 先进性: 优于常规的 VMC 方法中减小方差和局域能量的方法。
- 影响力: 引用次数: 233。
- 相关代码:

11. [Sorella \(2005\)](#):

• 工作内容概述: 将[Casula 等 \(2004\)](#)中的随机重配法和标准的牛顿法结合, 称为 SRH。在一维海森堡环和二维 t-J 模型上进行了测试。

- 课题相关性: 随机重配法和标准的牛顿法结合优化试探波函数。
- 核心创新点: 将随机重配法和标准的牛顿法结合, 称为 SRH
- 先进性: 优于传统的牛顿法。
- 影响力: 引用次数: 234。
- 相关代码:

12. [Schmidt 等 \(2005\)](#):

-
- 工作内容概述:
 - 课题相关性:
 - 核心创新点:
 - 先进性:
 - 影响力: 引用次数: 16。
 - 相关代码:

13. [Scemama 等 \(2006\)](#):

- 工作内容概述: 将能量涨落势 (EFP) 方法进行改进, 用于优化试探波函数行列式部分中的参数, 在丙酮基态和已三烯 1^1B_u 态上进行了测试。
- 课题相关性: 微扰法优化试探波函数。
- 核心创新点: 将能量涨落势 (EFP) 方法进行改进。
- 先进性: 传统的能量涨落势 (EFP) 方法稳定、高效, 但是算力要求很高, 基于此进行简化。
- 影响力: 引用次数: 27。
- 相关代码:

14. [Sorella 等 \(2007\)](#):

- 工作内容概述: 将[Sorella \(2001\)](#)提出的随机重配法进行了改进, 用于优化 JAGP 试探波函数, 继而用于[Casula 等 \(2005\)](#)提出的晶格正规化扩散蒙卡方法 (LRDMC) 对两个苯分子间弱化学键的研究。
- 课题相关性: 改进的随机重配法优化试探波函数, 结合晶格正规化扩散蒙卡方法
- 核心创新点: 改进的随机重配法, 对两个苯分子间弱化学键的模拟研究结果与实验结果相符
- 先进性: 改进的随机重配法
- 影响力: 引用次数: 235。
- 相关代码:

15. [Umrigar 等 \(2007\)](#):

- 工作内容概述: 改进了[Nightingale 等 \(2001\)](#)的线性优化方法, 试探波函数的参数增加了非线性项。在 C_2 分子上进行了测试。
- 课题相关性: 改进的线性方法优化含非线性参数的试探波函数。

- 核心创新点：改进的线性方法优化含非线性参数的试探波函数。
- 先进性：比Umrigar 等 (2005) 的牛顿法计算量小，容易实现。优于常规的VMC方法中减小方差和局域能量的方法。

- 影响力：引用次数：519。

- 相关代码：

16. Toulouse 等 (2007):

- 工作内容概述：对牛顿法 (Umrigar 等, 2005)、线性法 (Umrigar 等, 2007)、微扰法 (Scemama 等, 2006) 优化贾斯特罗试探波函数的方式在 C_2 分子进行了测试比较和说明。

- 课题相关性：优化试探波函数参数方式的比较。

- 核心创新点：

- 先进性：牛顿法和线性法比较高效，微扰法算力要求低，优化部分参数低效。

- 影响力：引用次数：299。

- 相关代码：

17. Nemec (2010):

- 工作内容概述：

- 课题相关性：

- 核心创新点：

- 先进性：

- 影响力：引用次数：42。

- 相关代码：

18. Boninsegni 等 (2012):

- 工作内容概述：

- 课题相关性：

- 核心创新点：

- 先进性：

- 影响力：引用次数：

- 相关代码：54。

19. Pollet 等 (2018):

-
- 工作内容概述:
 - 课题相关性:
 - 核心创新点:
 - 先进性:
 - 影响力: 引用次数: 5。
 - 相关代码:

20. [Inack 等 \(2018a\)](#):

- 工作内容概述:
- 课题相关性: 量子隧穿, DMC
- 核心创新点:
- 先进性:
- 影响力: 引用次数: 14。
- 相关代码:

3.2 蒙卡相关: 方向较远

1. [Bravyi \(2015\)](#):

- 工作内容概述:
- 课题相关性:
- 核心创新点:
- 先进性:
- 影响力: 引用次数: 1。
- 相关代码:

2. [Isakov 等 \(2016\)](#):

- 工作内容概述: 通过数值实验表明路径积分蒙特卡罗方法和非相干隧穿的跃迁时间随着系统规模指数增加的系数相同 $\propto \mathcal{O}(\Delta^2)$ (Δ 是最小能级间隙)。

- 课题相关性: 路径积分蒙特卡罗方法中跃迁几率。

- 核心创新点: 尽管路径积分蒙特卡罗方法和非相干隧穿的动力学过程不同, 数值实验表明二者的跃迁时间随着系统规模指数增加的系数相同。

- 先进性: 表明基于 PIMC 的模拟量子退火可以有效地预测量子退火机的结果。

- 影响力：引用次数：94。

- 相关代码：

3. Jiang 等 (2017):

● 工作内容概述：通过理论分析，解析的表明路径积分蒙特卡罗方法的逃脱几率与热辅助量子隧穿几率随着系统规模指数级减小的系数相同。

- 课题相关性：路径积分蒙特卡罗方法中跃迁几率。

● 核心创新点：解析的分析了描述平衡涨落的 PIMC 和描述非平衡过程非相干隧穿衰减的量子隧穿效应，表明二者的跃迁几率随着系统规模指数级减小的系数相同。

- 先进性：为 PIMC 描述量子绝热演化提供了有利理论支持。

- 影响力：引用次数：51。

- 相关代码：

4. Mazzola 等 (2017):

● 工作内容概述：量子蒙卡模拟连续模型中质子转移反应的量子隧穿效应研究。

- 课题相关性：量子隧穿，PIMC

- 核心创新点：

- 先进性：

- 影响力：引用次数：28。

- 相关代码：

5. Bravyi 等 (2017):

- 工作内容概述：

- 课题相关性：

- 核心创新点：

- 先进性：

- 影响力：引用次数：34。

- 相关代码：

第 4 章 组合优化相关文献

4.1 组合优化相关：方向接近

1. Barahona (1982):

- 工作内容概述：对计算伊辛模型的基态和磁配分函数的复杂度进行了研究。表明计算在二维随机伊辛模型（无磁场）中是一个线性问题；在三维以及二维带磁场伊辛模型中是 NP-hard 问题。

- 课题相关性：伊辛模型；复杂度。
- 核心创新点：对计算伊辛模型的基态和磁配分函数的复杂度进行了研究。
- 先进性：
- 影响力：引用次数：1422。
- 相关代码：

4.2 组合优化相关：方向较远

1. :

- 工作内容概述：
- 课题相关性：
- 核心创新点：
- 先进性：
- 影响力：引用次数：
- 相关代码：

参考文献

- Aharonov D, Van Dam W, Kempe J, et al. Adiabatic quantum computation is equivalent to standard quantum computation [J]. SIAM review, 2008, 50(4): 755-787. 6
- Altshuler B, Krovi H, Roland J. Anderson localization makes adiabatic quantum optimization fail [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2010, 107(28): 12446-12450. 6
- Anderson J B. A random-walk simulation of the schrödinger equation: $H+3$ [J]. The Journal of Chemical Physics, 1975, 63(4): 1499-1503. 17
- Barahona F. On the computational complexity of ising spin glass models [J]. Journal of Physics A: Mathematical and General, 1982, 15(10): 3241. 25
- Becca F, Sorella S. Quantum monte carlo approaches for correlated systems [M]. Cambridge University Press, 2017. 13, 14, 15
- Boixo S, Rønnow T F, Isakov S V, et al. Evidence for quantum annealing with more than one hundred qubits [J]. Nature physics, 2014, 10(3): 218-224. 7, 8, 9
- Boninsegni M, Moroni S. Population size bias in diffusion monte carlo [J]. Physical Review E, 2012, 86(5): 056712. 21
- Brady L T, van Dam W. Quantum monte carlo simulations of tunneling in quantum adiabatic optimization [J]. Physical Review A, 2016, 93(3): 032304. 10
- Bravyi S. Simulación de monte carlo de hamiltonianos estoquásticos [J]. Quantum Information & Computation, 2015, 15(13-14): 1122-1140. 22
- Bravyi S, Gosset D. Polynomial-time classical simulation of quantum ferromagnets [J]. Physical review letters, 2017, 119(10): 100503. 23
- Bravyi S, Terhal B. Complexity of stoquastic frustration-free hamiltonians [J]. Siam journal on computing, 2010, 39(4): 1462-1485. 6
- Bravyi S, Divincenzo D P, Oliveira R I, et al. The complexity of stoquastic local hamiltonian problems [J]. arXiv preprint quant-ph/0606140, 2006. 5
- Brooke J, Bitko D, Rosenbaum, et al. Quantum annealing of a disordered magnet [J]. Science, 1999, 284(5415): 779-781. 3
- Brooke J, Rosenbaum T, Aeppli G. Tunable quantum tunnelling of magnetic domain walls [J]. Nature, 2001, 413(6856): 610-613. 4
- Carleo G, Troyer M. Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks [J]. Science, 2017, 355(6325): 602-606. 13
- Carleo G, Becca F, Schiró M, et al. Localization and glassy dynamics of many-body quantum systems [J]. Scientific reports, 2012, 2(1): 1-6. 13

-
- Carleo G, Becca F, Sanchez-Palencia L, et al. Light-cone effect and supersonic correlations in one- and two-dimensional bosonic superfluids [J]. *Physical Review A*, 2014, 89(3): 031602. 13
- Carleo G, Nomura Y, Imada M. Constructing exact representations of quantum many-body systems with deep neural networks [J]. *Nature communications*, 2018, 9(1): 1-11. 16
- Casula M, Attaccalite C, Sorella S. Correlated geminal wave function for molecules: An efficient resonating valence bond approach [J]. *The Journal of chemical physics*, 2004, 121(15): 7110-7126. 19
- Casula M, Filippi C, Sorella S. Diffusion monte carlo method with lattice regularization [J]. *Physical review letters*, 2005, 95(10): 100201. 19, 20
- Ceperley D, Alder B. Quantum monte carlo [J]. *Science*, 1986, 231(4738): 555-560. 17
- Denchev V S, Boixo S, Isakov S V, et al. What is the computational value of finite-range tunneling? [J]. *Physical Review X*, 2016, 6(3): 031015. 9
- Duchi J, Hazan E, Singer Y. Adaptive subgradient methods for online learning and stochastic optimization. [J]. *Journal of machine learning research*, 2011, 12(7). 15
- Elgart A, Hagedorn G A. A note on the switching adiabatic theorem [J]. *Journal of Mathematical Physics*, 2012, 53(10): 102202. 7
- Falicov L, Kimball J. Simple model for semiconductor-metal transitions: Sm b 6 and transition-metal oxides [J]. *Physical Review Letters*, 1969, 22(19): 997. 14
- Farhi E, Goldstone J, Gutmann S, et al. Quantum computation by adiabatic evolution [J]. *arXiv preprint quant-ph/0001106*, 2000. 3
- Farhi E, Goldstone J, Gutmann S, et al. A quantum adiabatic evolution algorithm applied to random instances of an np-complete problem [J]. *Science*, 2001, 292(5516): 472-475. 4
- Farhi E, Goldstone J, Gutmann S. Quantum adiabatic evolution algorithms versus simulated annealing [J]. *arXiv preprint quant-ph/0201031*, 2002. 4
- Farhi E, Gosset D, Hen I, et al. Performance of the quantum adiabatic algorithm on random instances of two optimization problems on regular hypergraphs [J]. *Physical Review A*, 2012, 86(5): 052334. 7
- Finnila A B, Gomez M, Sebenik C, et al. Quantum annealing: A new method for minimizing multidimensional functions [J]. *Chemical physics letters*, 1994, 219(5-6): 343-348. 1
- Foulkes W, Mitas L, Needs R, et al. Quantum monte carlo simulations of solids [J]. *Reviews of Modern Physics*, 2001, 73(1): 33. 18
- Freitas N, Morigi G, Dunjko V. Neural network operations and susuki-trotter evolution of neural network states [J]. *International Journal of Quantum Information*, 2018, 16(08): 1840008. 15
- Harju A, Barbiellini B, Siljamäki S, et al. Stochastic gradient approximation: An efficient method to optimize many-body wave functions [J]. *Physical review letters*, 1997, 79(7): 1173. 13

- Hastings M B, Freedman M H. Obstructions to classically simulating the quantum adiabatic algorithm [J]. arXiv preprint arXiv:1302.5733, 2013. 7
- Hastings W K. Monte carlo sampling methods using markov chains and their applications [J]. 1970. 14
- Heim B, Rønnow T F, Isakov S V, et al. Quantum versus classical annealing of ising spin glasses [J]. Science, 2015, 348(6231): 215-217. 8
- Hibat-Allah M, Inack E M, Wiersema R, et al. Variational neural annealing [J]. Nature Machine Intelligence, 2021, 3(11): 952-961. 10
- Honeycutt J, Thirumalai D. The nature of folded states of globular proteins [J]. Biopolymers: Original Research on Biomolecules, 1992, 32(6): 695-709. 3
- Huang L, Wang L. Accelerated monte carlo simulations with restricted boltzmann machines [J]. Physical Review B, 2017, 95(3): 035105. 13, 14
- Inack E, Pilati S. Simulated quantum annealing of double-well and multiwell potentials [J]. Physical Review E, 2015, 92(5): 053304. 1
- Inack E, Giudici G, Parolini T, et al. Understanding quantum tunneling using diffusion monte carlo simulations [J]. Physical Review A, 2018, 97(3): 032307. 22
- Inack E, Santoro G, Dell'Anna L, et al. Projective quantum monte carlo simulations guided by unrestricted neural network states [J]. Physical Review B, 2018, 98(23): 235145. 14
- Inack E M, Morawetz S, Melko R G. Neural annealing and visualization of autoregressive neural networks in the newman–moore model [J]. Condensed Matter, 2022, 7(2): 38. 11
- Isakov S V, Mazzola G, Smelyanskiy V N, et al. Understanding quantum tunneling through quantum monte carlo simulations [J]. Physical review letters, 2016, 117(18): 180402. 22
- Jansen S, Ruskai M B, Seiler R. Bounds for the adiabatic approximation with applications to quantum computation [J]. Journal of Mathematical Physics, 2007, 48(10): 102111. 6
- Jarret M, Jordan S P. Adiabatic optimization without local minima [J]. Quantum Information & Computation, 2015, 15(3-4): 181-199. 9
- Jarret M, Jordan S P, Lackey B. Adiabatic optimization versus diffusion monte carlo methods [J]. Physical Review A, 2016, 94(4): 042318. 2
- Jiang Z, Smelyanskiy V N, Isakov S V, et al. Scaling analysis and instantons for thermally assisted tunneling and quantum monte carlo simulations [J]. Physical Review A, 2017, 95(1): 012322. 23
- Kadowaki T, Nishimori H. Quantum annealing in the transverse ising model [J]. Physical Review E, 1998, 58(5): 5355. 2
- King J, Yarkoni S, Nevisi M M, et al. Benchmarking a quantum annealing processor with the time-to-target metric [J]. arXiv preprint arXiv:1508.05087, 2015. 8

-
- Kingma D P, Ba J. Adam: A method for stochastic optimization [J]. arXiv preprint arXiv:1412.6980, 2014. 15
- Kirkpatrick S, Gelatt Jr C D, Vecchi M P. Optimization by simulated annealing [J]. science, 1983, 220(4598): 671-680. 2
- Knysh S. Zero-temperature quantum annealing bottlenecks in the spin-glass phase [J]. Nature communications, 2016, 7(1): 1-9. 9
- Lee Y H, Berne B. Global optimization: Quantum thermal annealing with path integral monte carlo [J]. The Journal of Physical Chemistry A, 2000, 104(1): 86-95. 3
- Lee Y H, Berne B. Quantum thermal annealing with renormalization: Application to a frustrated model protein [J]. The Journal of Physical Chemistry A, 2001, 105(2): 459-464. 3
- Liu C W, Polkovnikov A, Sandvik A W. Quantum versus classical annealing: Insights from scaling theory and results for spin glasses on 3-regular graphs [J]. Physical Review Letters, 2015, 114 (14): 147203. 9, 10
- Liu J, Qi Y, Meng Z Y, et al. Self-learning monte carlo method [J]. Physical Review B, 2017, 95 (4): 041101. 14
- Martoňák R, Santoro G E, Tosatti E. Quantum annealing by the path-integral monte carlo method: The two-dimensional random ising model [J]. Physical Review B, 2002, 66(9): 094203. 5
- Mazzola G, Smelyanskiy V N, Troyer M. Quantum monte carlo tunneling from quantum chemistry to quantum annealing [J]. Physical Review B, 2017, 96(13): 134305. 23
- Metropolis N, Rosenbluth A W, Rosenbluth M N, et al. Equation of state calculations by fast computing machines [J]. The journal of chemical physics, 1953, 21(6): 1087-1092. 14
- Nemec N. Diffusion monte carlo: Exponential scaling of computational cost for large systems [J]. Physical Review B, 2010, 81(3): 035119. 21
- Nightingale M, Melik-Alaverdian V. Optimization of ground-and excited-state wave functions and van der waals clusters [J]. Physical review letters, 2001, 87(4): 043401. 18, 20
- Pollet L, Prokof'ev N V, Svistunov B V. Stochastic lists: Sampling multivariable functions with population methods [J]. Physical Review B, 2018, 98(8): 085102. 21
- Reynolds P J, Ceperley D M, Alder B J, et al. Fixed-node quantum monte carlo for molecules a) b) [J]. The Journal of Chemical Physics, 1982, 77(11): 5593-5603. 17
- Rønnow T F, Wang Z, Job J, et al. Defining and detecting quantum speedup [J]. science, 2014, 345 (6195): 420-424. 8
- Saito H. Solving the bose-hubbard model with machine learning [J]. Journal of the Physical Society of Japan, 2017, 86(9): 093001. 13, 15
- Saito H, Kato M. Machine learning technique to find quantum many-body ground states of bosons on a lattice [J]. Journal of the Physical Society of Japan, 2018, 87(1): 014001. 15

- Santoro G E, Tosatti E. Optimization using quantum mechanics: quantum annealing through adiabatic evolution [J]. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 2006, 39(36): R393. 1
- Santoro G E, Martonák R, Tosatti E, et al. Theory of quantum annealing of an ising spin glass [J]. *Science*, 2002, 295(5564): 2427-2430. 5, 8
- Scemama A, Filippi C. Simple and efficient approach to the optimization of correlated wave functions [J]. *Physical Review B*, 2006, 73(24): 241101. 20, 21
- Schmidt K, Niyaz P, Vaught A, et al. Green's function monte carlo method with exact imaginary-time propagation [J]. *Physical Review E*, 2005, 71(1): 016707. 19
- Smolin J A, Smith G. Classical signature of quantum annealing [J]. *Frontiers in physics*, 2014, 2: 52. 8
- Sorella S. Generalized lanczos algorithm for variational quantum monte carlo [J]. *Physical Review B*, 2001, 64(2): 024512. 20
- Sorella S. Wave function optimization in the variational monte carlo method [J]. *Physical Review B*, 2005, 71(24): 241103. 19
- Sorella S, Capriotti L. Green function monte carlo with stochastic reconfiguration: An effective remedy for the sign problem [J]. *Physical Review B*, 2000, 61(4): 2599. 18
- Sorella S, Casula M, Rocca D. Weak binding between two aromatic rings: Feeling the van der waals attraction by quantum monte carlo methods [J]. *The Journal of chemical physics*, 2007, 127(1): 014105. 13, 20
- Stella L, Santoro G E. Quantum annealing of an ising spin-glass by green's function monte carlo [J]. *Physical Review E*, 2007, 75(3): 036703. 1
- Toulouse J, Umrigar C J. Optimization of quantum monte carlo wave functions by energy minimization [J]. *The Journal of chemical physics*, 2007, 126(8): 084102. 21
- Trivedi N, Ceperley D. Ground-state correlations of quantum antiferromagnets: A green-function monte carlo study [J]. *Physical Review B*, 1990, 41(7): 4552. 17
- Umrigar C, Filippi C. Energy and variance optimization of many-body wave functions [J]. *Physical review letters*, 2005, 94(15): 150201. 19, 21
- Umrigar C, Nightingale M, Runge K. A diffusion monte carlo algorithm with very small time-step errors [J]. *The Journal of chemical physics*, 1993, 99(4): 2865-2890. 18
- Umrigar C, Toulouse J, Filippi C, et al. Alleviation of the fermion-sign problem by optimization of many-body wave functions [J]. *Physical review letters*, 2007, 98(11): 110201. 20, 21
- Vitiello S A, Whitlock P A. Green's-function monte carlo algorithm for the solution of the schrödinger equation with the shadow wave function [J]. *Physical Review B*, 1991, 44(14): 7373.