

第 1 章 组合优化相关文献

1.1 组合优化相关：方向接近

1.1.1

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:

2. :

- 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:

1.2 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:

2. :

- 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：

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，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。

- 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：优于传统的 PQMC，减小了 PQMC 中有限 walker 所导致的误差。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）。效果优于传统的玻尔兹曼试探波函数。

- 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卡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卡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. 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:

2. 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:

3. Finnila 等 (1994):

- 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:

4. 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：

5. [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：

6. [Santoro 等 \(2002\)](#):

- 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：

7. [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：

8. [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：

9. 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：

10. 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：

11. 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：

12. [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：

13. [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：

14. [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：
- 相关代码：

15. [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:
- 相关代码:

16. Heim 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:
- 相关代码:

17. Isakov 等 (2016):

- 工作内容概述:
- 课题相关性: 量子隧穿
- 核心创新点:
- 先进性:
- 影响力: 引用次数: 94。
- 相关代码:

18. Jiang 等 (2017):

- 工作内容概述:
- 课题相关性: 路径积分蒙特卡罗方法中的热辅助隧穿。
- 核心创新点:
- 先进性:
- 影响力: 引用次数: 51
- 相关代码:

19. Mazzola 等 (2017):

- 工作内容概述: 量子蒙卡模拟连续变量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：

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

参考文献

- Becca F, Sorella S. Quantum monte carlo approaches for correlated systems [M]. Cambridge University Press, 2017.
- 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.
- Carleo G, Troyer M. Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks [J]. Science, 2017, 355(6325): 602-606.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- Casula M, Filippi C, Sorella S. Diffusion monte carlo method with lattice regularization [J]. Physical review letters, 2005, 95(10): 100201.
- Duchi J, Hazan E, Singer Y. Adaptive subgradient methods for online learning and stochastic optimization. [J]. Journal of machine learning research, 2011, 12(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.
- 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.
- Foulkes W, Mitas L, Needs R, et al. Quantum monte carlo simulations of solids [J]. Reviews of Modern Physics, 2001, 73(1): 33.
- 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.
- 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.
- Hastings W K. Monte carlo sampling methods using markov chains and their applications [J]. 1970.
- 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.

-
- Huang L, Wang L. Accelerated monte carlo simulations with restricted boltzmann machines [J]. Physical Review B, 2017, 95(3): 035105.
- Inack E, Pilati S. Simulated quantum annealing of double-well and multiwell potentials [J]. Physical Review E, 2015, 92(5): 053304.
- Inack E, Giudici G, Parolini T, et al. Understanding quantum tunneling using diffusion monte carlo simulations [J]. Physical Review A, 2018, 97(3): 032307.
- 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.
- 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.
- 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.
- Kingma D P, Ba J. Adam: A method for stochastic optimization [J]. arXiv preprint arXiv:1412.6980, 2014.
- Liu J, Qi Y, Meng Z Y, et al. Self-learning monte carlo method [J]. Physical Review B, 2017, 95(4): 041101.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- Saito H. Solving the bose–hubbard model with machine learning [J]. Journal of the Physical Society of Japan, 2017, 86(9): 093001.
- 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.
- 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.
- Scemama A, Filippi C. Simple and efficient approach to the optimization of correlated wave functions [J]. Physical Review B, 2006, 73(24): 241101.
- Sorella S. Generalized lanczos algorithm for variational quantum monte carlo [J]. Physical Review B, 2001, 64(2): 024512.

- Sorella S. Wave function optimization in the variational monte carlo method [J]. Physical Review B, 2005, 71(24): 241103.
- 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.
- 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.
- Umrigar C, Filippi C. Energy and variance optimization of many-body wave functions [J]. Physical review letters, 2005, 94(15): 150201.
- 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.
- 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.