



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 L ^A T _E X 使用说明	5
3.1 先试试效果	5
3.2 文档目录简介	5
3.2.1 Thesis.tex	5
3.2.2 编译脚本	6
3.2.3 Tmp 文件夹	6
3.2.4 Style 文件夹	6
3.2.5 Tex 文件夹	6
3.2.6 Img 文件夹	7
3.2.7 Biblio 文件夹	7
3.3 数学公式、图表、参考文献等功能	7
3.3.1 数学公式	7
3.3.2 数学环境	8
3.3.3 表格	8
3.3.4 图片插入	8
3.3.5 算法	9
3.3.6 参考文献引用	11
3.4 常见使用问题	12
第 4 章 总结与展望	15
附录 A 车间调度问题中翻转关键路径更新方式的收敛性	17
A.1 证明: 翻转有向图中的关键路径得到的一定是一个非循环图	17
参考文献	19
致谢	21
作者简历及攻读学位期间发表的学术论文与研究成果	23

图形列表

3.1 Q 判据等值面图，同时测试一下一个很长的标题，比如这真的是一个 很长很长很长很长很长很长很长很长的标题。	9
3.2 激波圆柱作用。	9
3.3 总声压级。(a) 这是子图说明信息，(b) 这是子图说明信息，(c) 这是子 图说明信息，(d) 这是子图说明信息。	10

表格列表

3.1 这是一个样表。	8
-------------------	---

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 L^AT_EX 使用说明

为方便使用及更好地展示 L^AT_EX 排版的优秀特性，ucasthesis 的框架和文件体系进行了细致地处理，尽可能地对各个功能和板块进行了模块化和封装，对于初学者来说，众多的文件目录也许一开始让人觉得有些无所适从，但阅读完下面的使用说明后，会发现原来使用思路是简单而清晰的，而且，当对 L^AT_EX 有一定的认识和了解后，会发现其相对 Word 类排版系统极具吸引力的优秀特性。所以，如果是初学者，请不要退缩，请稍加尝试和坚持，以领略到 L^AT_EX 的非凡魅力，并可以通过阅读相关资料如 L^AT_EX Wikibook (?) 来完善自己的使用知识。

3.1 先试试效果

1. 安装软件：根据所用操作系统和章节 ?? 中的信息安装 L^AT_EX 编译环境。
2. 获取模板：下载 [ucasthesis](#) 模板并解压。ucasthesis 模板不仅提供了相应的类文件，同时也提供了包括参考文献等在内的完成学位论文的一切要素，所以，下载时，推荐下载整个 ucasthesis 文件夹，而不是单独的文档类。
3. 编译模板：
 - (a) Windows：双击运行 artratex.bat 脚本。
 - (b) Linux 或 MacOS：terminal -> `chmod +x ./artratex.sh -> ./artratex.sh xa`
 - (c) 任意系统：都可使用 L^AT_EX 编辑器打开 Thesis.tex 文件并选择 xelatex 编译引擎进行编译。
4. 错误处理：若编译中遇到了问题，请先查看“常见问题”（章节 3.4）。

编译完成即可获得本 PDF 说明文档。而这也完成了学习使用 ucasthesis 撰写论文的一半进程。什么？这就学成一半了，这么简单???，是的，就这么简单！

3.2 文档目录简介

3.2.1 Thesis.tex

Thesis.tex 为主文档，其设计和规划了论文的整体框架，通过对其的阅读可以了解整个论文框架的搭建。

3.2.2 编译脚本

• Windows: 双击 Dos 脚本 artratex.bat 可得全编译后的 PDF 文档, 其存在是为了帮助不了解 L^AT_EX 编译过程的初学者跨过编译这第一道坎, 请勿通过邮件传播和接收此脚本, 以防范 Dos 脚本的潜在风险。

- Linux 或 MacOS: 在 terminal 中运行
 - ./artratex.sh xa: 获得全编译后的 PDF 文档
 - ./artratex.sh x: 快速编译, 不会生成文献引用

全编译指运行 xelatex+bibtex+xelatex+xelatex 以正确生成所有的引用链接, 如目录, 参考文献及引用等。在写作过程中若无添加新的引用, 则可用快速编译, 即只运行一遍 L^AT_EX 编译引擎以减少编译时间。

3.2.3 Tmp 文件夹

运行编译脚本后, 编译所生成的文档皆存于 Tmp 文件夹内, 包括编译得到的 PDF 文档, 其存在是为了保持工作空间的整洁, 因为好的心情是很重要的。

3.2.4 Style 文件夹

包含 ucasthesis 文档类的定义文件和配置文件, 通过对它们的修改可以实现特定的模版设定。

1. ucasthesis.cls: 文档类定义文件, 论文的最核心的格式即通过它来定义的。
2. ucasthesis.cfg: 文档类配置文件, 设定如目录显示为“目 录”而非“目录”。
3. artratex.sty: 常用宏包及文档设定, 如参考文献样式、文献引用样式、页眉页脚设定等。这些功能具有开关选项, 常只需在 Thesis.tex 中进行启用即可, 一般无需修改 artratex.sty 本身。
4. artracom.sty: 自定义命令以及添加宏包的推荐放置位置。

3.2.5 Tex 文件夹

文件夹内为论文的所有实体内容, 正常情况下, 这也是使用 ucasthesis 撰写学位论文时, 主要关注和修改的一个位置, 注: 所有文件都必须采用 UTF-8 编码, 否则编译后将出现乱码文本, 详细分类介绍如下:

- Frontinfo.tex: 为论文中英文封面信息。论文封面会根据英文学位名称如 Bachelor, Master, Doctor, Postdoctor 自动切换为相应的格式。

- Frontmatter.tex：为论文前言内容如中英文摘要等。
- Mainmatter.tex：索引需要出现的 Chapter。开始写论文时，可以只索引当前章节，以快速编译查看，当论文完成后，再对所有章节进行索引即可。
- Chap_xxx.tex：为论文主体的各章，可根据需要添加和撰写。**添加新章时，可拷贝一个已有的章文件再重命名，以继承文档的 UTF8 编码。**
- Appendix.tex：为附录内容。
- Backmatter.tex：为发表文章信息和致谢部分等。

3.2.6 Img 文件夹

用于放置论文中所需要的图类文件，支持格式有：.jpg, .png, .pdf。其中，ucas_logo.pdf为国科大校徽。不建议为各章节图片建子目录，即使图片众多，若命名规则合理，图片查询亦是十分方便。

3.2.7 Biblio 文件夹

1. ref.bib：参考文献信息库。

3.3 数学公式、图表、参考文献等功能

3.3.1 数学公式

比如 Navier-Stokes 方程（方程 (3.1)）：

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = 0 & \text{times math test : 1, 2, 3, 4, 5, 1, 2, 3, 4, 5} \\ \frac{\partial (\rho \mathbf{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \mathbf{V}) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} & \text{times text test: 1, 2, 3, 4, 5} \\ \frac{\partial (\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho E \mathbf{V}) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{V}) \end{cases} \quad \dots (3.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} u \, d\Omega + \int_S \mathbf{n} \cdot (u \mathbf{V}) \, dS = \phi \quad \dots (3.2)$$

$$\mathcal{L}\{f\}(s) = \int_{0-}^{\infty} f(t) e^{-st} \, dt, \quad \mathcal{L}\{f\}(s) = \int_{0-}^{\infty} f(t) e^{-st} \, dt$$

$$\mathcal{F}(f(x + x_0)) = \mathcal{F}(f(x)) e^{2\pi i \xi x_0}, \quad \mathcal{F}(f(x + x_0)) = \mathcal{F}(f(x)) e^{2\pi i \xi x_0}$$

数学公式常用命令请见 [WiKibook Mathematics](#)。artracom.sty 中对一些常用数据类型如矢量矩阵等进行了封装，这样的好处是如有一天需要修改矢量的显示形式，只需单独修改 artracom.sty 中的矢量定义即可实现全文档的修改。

3.3.2 数学环境

公理 3.1. 这是一个公理。

定理 3.2. 这是一个定理。

引理 3.3. 这是一个引理。

推论 3.4. 这是一个推论。

断言 3.5. 这是一个断言。

命题 3.6. 这是一个命题。

证明. 这是一个证明。 □

定义 3.1. 这是一个定义。

例 3.1. 这是一个例子。

注. 这是一个注。

3.3.3 表格

请见表 3.1。

表 3.1 这是一个样表。

Table 3.1 This is a sample table.

行号	跨多列的标题							
Row 1	1	2	3	4	5	6	7	8
Row 2	1	2	3	4	5	6	7	8
Row 3	1	2	3	4	5	6	7	8
Row 4	1	2	3	4	5	6	7	8

制图制表的更多范例，请见 [ucasthesis 知识小站](#) 和 [WiKibook Tables](#)。

3.3.4 图片插入

论文中图片的插入通常分为单图和多图，下面分别加以介绍：

单图插入：假设插入名为c06h06（后缀可以为.jpg、.png、.pdf，下同）的图片，其效果如图 3.1。



图 3.1 Q 判据等值面图，同时测试一下一个很长的标题，比如这真的是一个很长很长很长很长很长很长很长很长的标题。

Figure 3.1 Isocontour of Q criteria, at the same time, this is to test a long title, for instance, this is a really very long very long very long very long very long title.

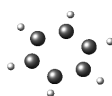


图 3.2 激波圆柱作用。

Figure 3.2 Shock-cylinder interaction.

如果插图的空白区域过大，以图片c06h06为例，自动裁剪如图 3.2。

多图的插入如图 3.3，多图不应在子图中给文本子标题，只要给序号，并在主标题中进行引用说明。

3.3.5 算法

如见算法 1，详细使用方法请参见文档 [algorithmicx](#)。

算法 1 Euclid's algorithm

1: procedure EUCLID(a, b)	▷ The g.c.d. of a and b
2: $r \leftarrow a \bmod b$	
3: while $r \neq 0$ do	▷ We have the answer if r is 0
4: $a \leftarrow b$	
5: $b \leftarrow r$	
6: $r \leftarrow a \bmod b$	
7: end while	
8: return b	▷ The gcd is b
9: end procedure	

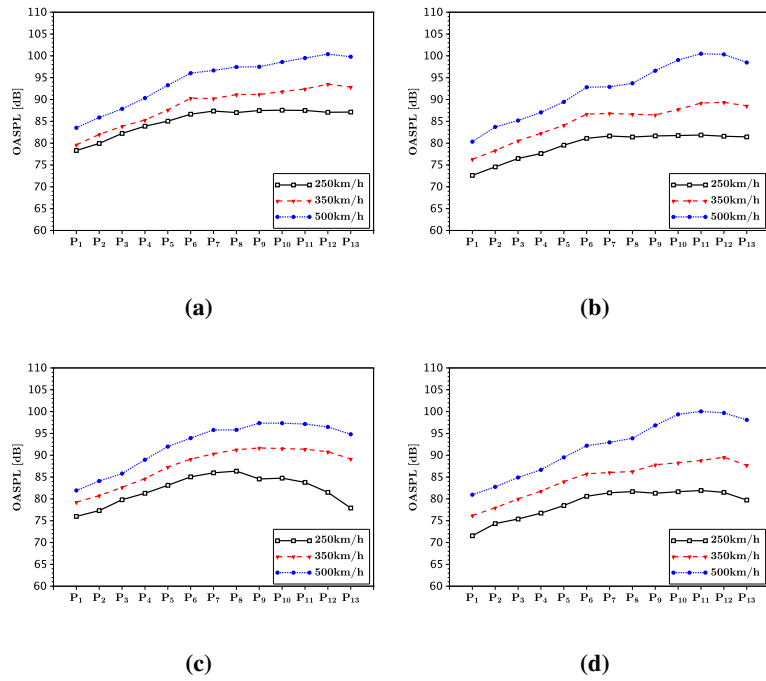


图 3.3 总声压级。(a) 这是子图说明信息，(b) 这是子图说明信息，(c) 这是子图说明信息，(d) 这是子图说明信息。

Figure 3.3 OASPL.(a) This is the explanation of subfig, (b) This is the explanation of subfig, (c) This is the explanation of subfig, (d) This is the explanation of subfig.

3.3.6 参考文献引用

参考文献引用过程以实例进行介绍,假设需要引用名为”Document Preparation System”的文献,步骤如下:

1) 使用 Google Scholar 搜索 Document Preparation System, 在目标条目下点击 Cite, 展开后选择 Import into BibTeX 打开此文章的 BibTeX 索引信息, 将它们 copy 添加到 ref.bib 文件中 (此文件位于 Biblio 文件夹下)。

2) 索引第一行 @article{lamport1986document, 中 lamport1986document 即为此文献的 label (**中文文献也必须使用英文 label**, 一般遵照: 姓氏拼音 + 年份 + 标题第一字拼音的格式), 想要在论文中索引此文献, 有两种索引类型:

文本类型: \citet{lamport1986document}。正如此处所示 ?;

括号类型: \citep{lamport1986document}。正如此处所示 (?)。

多文献索引用英文逗号隔开:

\citep{lamport1986document, chu2004tushu, chen2005zhulu}。正如此处所示 (???)

更多例子如:

? 根据 ? 的研究, 首次提出...。其中关于... (??), 是当前中国... 得到迅速发展的研究领域 (??)。引用同一著者在同一年份出版的多篇文献时, 在出版年份之后用英文小写字母区别, 如: (???) 和 ???。同一处引用多篇文献时, 按出版年份由近及远依次标注。例如 (????)。

使用著者-出版年制 (authoryear) 式参考文献样式时, 中文文献必须在 BibTeX 索引信息的 **key** 域 (请参考 ref.bib 文件) 填写作者姓名的拼音, 才能使得文献列表按照拼音排序。参考文献表中的条目 (不排序号), 先按语种分类排列, 语种顺序是: 中文、日文、英文、俄文、其他文种。然后, 中文按汉语拼音字母顺序排列, 日文按第一著者的姓氏笔画排序, 西文和俄文按第一著者姓氏首字母顺序排列。如中 (?), 日 (?), 英 (?), 俄 (?)。

如此, 即完成了文献的索引, 请查看下本文档的参考文献一章, 看看是不是就是这么简单呢? 是的, 就是这么简单!

不同文献样式和引用样式, 如著者-出版年制 (authoryear)、顺序编码制 (numbers)、上标顺序编码制 (super) 可在 Thesis.tex 中对 artratex.sty 调用实现,

详见 [ucasthesis 知识小站之文献样式](#)

参考文献索引的更多知识，请见 [WiKibook Bibliography](#)。

3.4 常见使用问题

1. 模板每次发布前，都已在 Windows, Linux, MacOS 系统上测试通过。下载模板后，若编译出现错误，则请见 [ucasthesis 知识小站](#) 的 [编译指南](#)。

2. 模板文档的编码为 UTF-8 编码。所有文件都必须采用 UTF-8 编码，否则编译后生成的文档将出现乱码文本。若出现文本编辑器无法打开文档或打开文档乱码的问题，请检查编辑器对 UTF-8 编码的支持。如果使用 WinEdt 作为文本编辑器（**不推荐使用**），应在其 Options -> Preferences -> wrapping 选项卡下将两种 Wrapping Modes 中的内容：

TeX;HTML;ANSI;ASCIIIDTX...

修改为：TeX;**UTF-8**ACP;HTML;ANSI;ASCIIIDTX...

同时，取消 Options -> Preferences -> Unicode 中的 Enable ANSI Format。

3. 推荐选择 xelatex 或 lualatex 编译引擎编译中文文档。编译脚本的默认设定为 xelatex 编译引擎。你也可以选择不使用脚本编译，如直接使用 \LaTeX 文本编辑器编译。注： \LaTeX 文本编辑器编译的默认设定为 pdflatex 编译引擎，若选择 xelatex 或 lualatex 编译引擎，请进入下拉菜单选择。为正确生成引用链接和参考文献，需要进行**全编译**。

4. Texmaker 使用简介

- (a) 使用 Texmaker “打开 (Open)” Thesis.tex。
- (b) 菜单 “选项 (Options)” -> “设置当前文档为主文档 (Define as Master Document)”
- (c) 菜单 “自定义 (User)” -> “自定义命令 (User Commands)” -> “编辑自定义命令 (Edit User Commands)” -> 左侧选择 “command 1”，右侧 “菜单项 (Menu Item)” 填入 Auto Build -> 点击下方 “向导 (Wizard)” -> “添加 (Add)” : xelatex + bibtex + xelatex + xelatex + pdf viewer -> 点击 “完成 (OK)”
- (d) 使用 Auto Build 编译带有未生成引用链接的源文件，可以仅使用 xelatex 编译带有已经正确生成引用链接的源文件。
- (e) 编译完成，“查看 (View)” PDF，在 PDF 中 “ctrl+click” 可链接到相对应的源文件。

5. 模版的设计可能地考虑了适应性。致谢等所有条目都是通过最为通用的

`\chapter{item name}` and `\section*{item name}`

来显式实现的 (请观察 Backmatter.tex)，从而可以随意添加，放置，和修改，如同一般章节。对于图表目录名称则可在 ucasthesis.cfg 中进行修改。

6. 设置文档样式: 在 `artratex.sty` 中搜索关键字定位相应命令, 然后修改

(a) 正文行距: 启用和设置 `\linespread{1.5}`, 默认 1.5 倍行距。

(b) 参考文献行距: 修改 `\setlength{\bibsep}{0.0ex}`

(c) 目录显示级数: 修改 `\setcounter{tocdepth}{2}`

(d) 文档超链接的颜色及其显示: 修改 `\hypersetup`

7. 文档内字体切换方法:

- 宋体: 国科大论文模板 `ucasthesis` 或 国科大论文模板 `ucasthesis`
- 粗宋体: 国科大论文模板 **`ucasthesis`** 或 国科大论文模板 **`ucasthesis`**
- 黑体: 国科大论文模板 `ucasthesis` 或 国科大论文模板 `ucasthesis`
- 粗黑体: 国科大论文模板 **`ucasthesis`** 或 国科大论文模板 **`ucasthesis`**
- 仿宋: 国科大论文模板 `ucasthesis` 或 国科大论文模板 `ucasthesis`
- 粗仿宋: 国科大论文模板 **`ucasthesis`** 或 国科大论文模板 **`ucasthesis`**
- 楷体: 国科大论文模板 *`ucasthesis`* 或 国科大论文模板 *`ucasthesis`*
- 粗楷体: 国科大论文模板 ***`ucasthesis`*** 或 国科大论文模板 ***`ucasthesis`***

第 4 章 总结与展望

附录 A 车间调度问题中翻转关键路径更新方式的收敛性

A.1 证明：翻转有向图中的关键路径得到的一定是一个非循环图

参考文献

Van Laarhoven P J, Aarts E H, Lenstra J K. Job shop scheduling by simulated annealing [J]. Operations research, 1992, 40(1): 113-125.

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.

