

量子蒙地卡羅數值模擬：演算法理論與實現

Ting-Kai Kuo

2025 年 11 月 29 日

目录

| | |
|---|---|
| 1 引言 | 3 |
| 2 神經網路量子態 (Neural Network Quantum States) | 3 |
| 2.1 受限玻爾茲曼機量子態 (RBM Quantum State) | 3 |
| 2.1.1 數學表示 | 3 |
| 2.1.2 理論有效性 | 3 |
| 2.1.3 對數振幅計算 | 4 |
| 2.2 多層感知器量子態 (MLP Quantum State) | 4 |
| 2.3 卷積神經網路量子態 (CNN Quantum State) | 4 |
| 3 變分蒙地卡羅 (Variational Monte Carlo, VMC) | 4 |
| 3.1 基本原理 | 4 |
| 3.2 重要性採樣 | 5 |
| 3.3 Metropolis 採樣演算法 | 5 |
| 3.4 梯度計算與參數優化 | 5 |
| 3.5 理論有效性 | 6 |
| 4 輔助場量子蒙地卡羅 (Auxiliary-Field QMC, AFQMC) | 6 |
| 4.1 Hubbard-Stratonovich 變換 | 6 |
| 4.2 路徑積分表示 | 6 |
| 4.3 符號問題 | 7 |
| 4.4 固定節點近似 | 7 |
| 5 路徑積分蒙地卡羅 (Path Integral Monte Carlo, PIMC) | 7 |
| 5.1 虛時間路徑積分 | 7 |

| | | |
|-----------|------------------------|-----------|
| 5.2 | 離散時間切片 | 7 |
| 5.3 | Worm 演算法 | 8 |
| 5.4 | 超流密度計算 | 8 |
| 6 | Hubbard 模型 | 8 |
| 6.1 | 哈密頓量 | 8 |
| 6.2 | 局部能量計算 | 9 |
| 7 | Bose-Hubbard 模型 | 9 |
| 7.1 | 哈密頓量 | 9 |
| 7.2 | 超流-絕緣體相變 | 9 |
| 7.3 | 序參數 | 9 |
| 8 | 數值實現細節 | 10 |
| 8.1 | 採樣效率 | 10 |
| 8.2 | 誤差估計 | 10 |
| 8.3 | 自相關時間 | 10 |
| 9 | 理論有效性總結 | 10 |
| 9.1 | 收斂性 | 10 |
| 9.2 | 誤差界限 | 11 |
| 9.3 | 計算複雜度 | 11 |
| 10 | 結論 | 11 |
| 11 | 參考文獻 | 11 |

1 引言

本文件詳細說明量子蒙地卡羅 (Quantum Monte Carlo, QMC) 方法的數學理論基礎、演算法實現步驟，以及理論有效性證明。本專案實現了多種最新的 QMC 技術，包括神經網路量子態 (Neural Network Quantum States, NQS)、變分蒙地卡羅 (Variational Monte Carlo, VMC)、輔助場量子蒙地卡羅 (Auxiliary-Field QMC, AFQMC) 以及路徑積分蒙地卡羅 (Path Integral Monte Carlo, PIMC)。

2 神經網路量子態 (Neural Network Quantum States)

2.1 受限玻爾茲曼機量子態 (RBM Quantum State)

受限玻爾茲曼機量子態是基於 Carleo & Troyer (2017) 的開創性工作，使用受限玻爾茲曼機 (Restricted Boltzmann Machine, RBM) 來表示量子多體系統的波函數。

2.1.1 數學表示

對於自旋-1/2 系統，RBM 量子態的波函數表示為：

$$\psi_{\text{RBM}}(\sigma) = \exp \left(\sum_{i=1}^N a_i \sigma_i \right) \prod_{j=1}^M \cosh \left(\sum_{i=1}^N W_{ij} \sigma_i + b_j \right) \quad (1)$$

其中：

- $\sigma = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$ 是自旋配置， $\sigma_i \in \{-1, +1\}$
- N 是可見單元數量 (晶格位點數)
- M 是隱藏單元數量
- a_i 是可見層偏置參數
- b_j 是隱藏層偏置參數
- W_{ij} 是連接可見單元 i 和隱藏單元 j 的權重矩陣

2.1.2 理論有效性

定理 2.1 (RBM 的通用近似性). 對於任意量子多體波函數 $\psi(\sigma)$ ，存在一個 RBM 量子態 $\psi_{\text{RBM}}(\sigma)$ ，使得對於任意 $\epsilon > 0$ ，有：

$$\sum_{\sigma} |\psi(\sigma) - \psi_{\text{RBM}}(\sigma)|^2 < \epsilon \quad (2)$$

當隱藏單元數量 M 足夠大時。

證明思路：RBM 可以表示任意布爾函數的組合，而量子波函數可以視為複值函數在離散配置空間上的映射。通過增加隱藏單元數量，RBM 可以任意逼近目標波函數。

2.1.3 對數振幅計算

在實際計算中，我們使用對數振幅以避免數值溢出：

$$\ln \psi_{\text{RBM}}(\sigma) = \sum_{i=1}^N a_i \sigma_i + \sum_{j=1}^M \ln \cosh \left(\sum_{i=1}^N W_{ij} \sigma_i + b_j \right) \quad (3)$$

這個表達式的計算複雜度為 $O(NM)$ ，對於中等大小的系統非常高效。

2.2 多層感知器量子態 (MLP Quantum State)

多層感知器量子態使用前饋神經網路來表示波函數：

$$\psi_{\text{MLP}}(\sigma) = \mathcal{N}(\sigma; \theta) \quad (4)$$

其中 \mathcal{N} 是一個多層神經網路， θ 是網路參數。網路輸出複數值，分別表示波函數的實部和虛部：

$$\psi_{\text{MLP}}(\sigma) = \text{Re}[\mathcal{N}(\sigma)] + i \cdot \text{Im}[\mathcal{N}(\sigma)] \quad (5)$$

2.3 卷積神經網路量子態 (CNN Quantum State)

對於具有空間結構的晶格系統，卷積神經網路可以更好地捕捉空間相關性：

$$\psi_{\text{CNN}}(\sigma) = \mathcal{F}_{\text{FC}} \circ \mathcal{F}_{\text{Conv}}(\sigma) \quad (6)$$

其中 $\mathcal{F}_{\text{Conv}}$ 是卷積層，用於提取局部特徵， \mathcal{F}_{FC} 是全連接層，用於組合全局信息。

3 變分蒙地卡羅 (Variational Monte Carlo, VMC)

3.1 基本原理

變分蒙地卡羅方法通過最小化能量期望值來優化變分波函數：

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\sum_{\sigma} |\psi(\sigma)|^2 E_{\text{loc}}(\sigma)}{\sum_{\sigma} |\psi(\sigma)|^2} \quad (7)$$

其中局部能量 (local energy) 定義為：

$$E_{\text{loc}}(\sigma) = \sum_{\sigma'} \frac{\langle \sigma | \hat{H} | \sigma' \rangle \psi(\sigma')}{\psi(\sigma)} \quad (8)$$

3.2 重要性採樣

使用重要性採樣，能量期望值可以寫為：

$$E[\psi] = \frac{\sum_{\sigma} |\psi(\sigma)|^2 E_{\text{loc}}(\sigma)}{\sum_{\sigma} |\psi(\sigma)|^2} = \frac{\int P(\sigma) E_{\text{loc}}(\sigma) d\sigma}{\int P(\sigma) d\sigma} \quad (9)$$

其中 $P(\sigma) = |\psi(\sigma)|^2$ 是配置的概率分布。

通過 Metropolis-Hastings 演算法從 $P(\sigma)$ 中採樣配置 $\{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_M\}$ ，能量估計為：

$$E[\psi] \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M E_{\text{loc}}(\sigma_i) \quad (10)$$

3.3 Metropolis 採樣演算法

對於當前配置 σ ，生成新配置 σ' 的接受概率為：

$$A(\sigma \rightarrow \sigma') = \min \left(1, \frac{|\psi(\sigma')|^2}{|\psi(\sigma)|^2} \right) = \min (1, \exp(2[\ln |\psi(\sigma')| - \ln |\psi(\sigma)|])) \quad (11)$$

3.4 梯度計算與參數優化

能量對參數 θ_k 的梯度使用對數導數技巧 (log-derivative trick) 計算：

$$\frac{\partial E}{\partial \theta_k} = 2\text{Re} [\langle E_{\text{loc}} O_k^* \rangle - \langle E_{\text{loc}} \rangle \langle O_k^* \rangle] \quad (12)$$

其中 O_k 是對數導數算符：

$$O_k(\sigma) = \frac{\partial \ln \psi(\sigma)}{\partial \theta_k} = \frac{1}{\psi(\sigma)} \frac{\partial \psi(\sigma)}{\partial \theta_k} \quad (13)$$

對於 RBM 量子態，對數導數可以解析計算：

$$\frac{\partial \ln \psi_{\text{RBM}}}{\partial a_i} = \sigma_i \quad (14)$$

$$\frac{\partial \ln \psi_{\text{RBM}}}{\partial b_j} = \tanh \left(\sum_i W_{ij} \sigma_i + b_j \right) \quad (15)$$

$$\frac{\partial \ln \psi_{\text{RBM}}}{\partial W_{ij}} = \sigma_i \tanh \left(\sum_k W_{kj} \sigma_k + b_j \right) \quad (16)$$

3.5 理論有效性

定理 3.1 (變分原理). 對於任意試探波函數 ψ , 能量期望值 $E[\psi]$ 總是滿足:

$$E[\psi] \geq E_0 \quad (17)$$

其中 E_0 是基態能量。當且僅當 ψ 是基態波函數時，等號成立。

證明: 根據變分原理，對於任意歸一化的波函數 ψ :

$$E[\psi] = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_n |c_n|^2 = E_0 \quad (18)$$

其中 $c_n = \langle n | \psi \rangle$, $|n\rangle$ 是哈密頓量的本徵態, E_n 是對應的本徵值。

4 輔助場量子蒙地卡羅 (Auxiliary-Field QMC, AFQMC)

4.1 Hubbard-Stratonovich 變換

對於包含兩體相互作用的費米子系統, Hubbard-Stratonovich 變換將相互作用項分解為單粒子項:

$$e^{-\Delta\tau U \hat{n}_i \hat{n}_j} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} e^{-\Delta\tau \lambda s(\hat{n}_i - \hat{n}_j) - \frac{\Delta\tau U}{2}} \quad (19)$$

其中 λ 由下式確定:

$$\cosh(\lambda \Delta\tau) = e^{U \Delta\tau / 2} \quad (20)$$

對於排斥相互作用 $U > 0$:

$$\lambda = \frac{1}{\Delta\tau} \operatorname{arccosh}(e^{U \Delta\tau / 2}) \quad (21)$$

4.2 路徑積分表示

在虛時間演化中, 傳播子可以寫為:

$$e^{-\beta \hat{H}} = \int \mathcal{D}[\phi] e^{-S[\phi]} \hat{U}[\phi] \quad (22)$$

其中 ϕ 是輔助場, $S[\phi]$ 是作用量, $\hat{U}[\phi]$ 是單粒子演化算符。

4.3 符號問題

對於費米子系統，符號問題（sign problem）是 AFQMC 的主要挑戰。權重可能變為負值：

$$w[\phi] = \det \hat{U}[\phi] \quad (23)$$

當 $\det \hat{U}[\phi] < 0$ 時，會導致統計誤差指數增長。

4.4 固定節點近似

固定節點近似通過限制輔助場的符號來緩解符號問題：

$$w[\phi] \rightarrow w[\phi] \Theta(\det \hat{U}[\phi]) \quad (24)$$

其中 Θ 是階躍函數，確保權重為正。

5 路徑積分蒙地卡羅

(Path Integral Monte Carlo, PIMC)

5.1 虛時間路徑積分

有限溫度下的配分函數可以寫為路徑積分形式：

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \hat{H}} = \int \mathcal{D}[\sigma(\tau)] e^{-S[\sigma(\tau)]} \quad (25)$$

其中 $\beta = 1/k_B T$ 是逆溫度， $S[\sigma(\tau)]$ 是作用量：

$$S[\sigma(\tau)] = \int_0^\beta d\tau \left[\frac{1}{2} \left(\frac{d\sigma}{d\tau} \right)^2 + V(\sigma(\tau)) \right] \quad (26)$$

5.2 離散時間切片

將虛時間離散化為 M 個時間切片， $\Delta\tau = \beta/M$ ：

$$Z \approx \int \prod_{k=0}^{M-1} d\sigma_k \exp \left\{ -\Delta\tau \sum_{k=0}^{M-1} \left[\frac{(\sigma_{k+1} - \sigma_k)^2}{2\Delta\tau^2} + V(\sigma_k) \right] \right\} \quad (27)$$

其中 $\sigma_0 = \sigma_M$ (週期邊界條件)。

5.3 Worm 演算法

Worm 演算法是 PIMC 中高效的更新方法，通過在路徑中插入和移除「蟲」(worm)來採樣配置：

1. 在隨機時間切片 τ 和位點 i 插入蟲
2. 蟲在虛時間中隨機遊走
3. 當蟲回到起點時，接受或拒絕更新

接受概率為：

$$P_{\text{accept}} = \min \left(1, \frac{e^{-S_{\text{new}}}}{e^{-S_{\text{old}}}} \right) \quad (28)$$

5.4 超流密度計算

超流密度可以通過繞數 (winding number) 計算：

$$\rho_s = \frac{mk_B T}{\hbar^2} \frac{\langle W^2 \rangle}{L} \quad (29)$$

其中繞數 W 定義為：

$$W = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^N \sum_{k=0}^{M-1} (\sigma_{i,k+1} - \sigma_{i,k}) \quad (30)$$

6 Hubbard 模型

6.1 哈密頓量

單帶 Hubbard 模型的哈密頓量為：

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i\sigma} \quad (31)$$

其中：

- t 是最近鄰躍遷振幅
- U 是位點相互作用強度
- μ 是化學勢
- $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ 和 $\hat{c}_{i\sigma}$ 是費米子產生和湮滅算符
- $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$ 是粒子數算符

6.2 局部能量計算

對於配置 σ , 局部能量為:

$$E_{\text{loc}}(\sigma) = \sum_{\sigma'} \frac{\langle \sigma | \hat{H} | \sigma' \rangle \psi(\sigma')}{\psi(\sigma)} \quad (32)$$

Hubbard 模型的非對角項來自躍遷項:

$$\langle \sigma | -t \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} | \sigma' \rangle = -t \delta_{\sigma, \sigma'_{ij}} \quad (33)$$

其中 σ'_{ij} 是將 σ 中位點 j 的粒子移到位點 i 後的配置。

7 Bose-Hubbard 模型

7.1 哈密頓量

Bose-Hubbard 模型的哈密頓量為:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \text{h.c.}) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i \quad (34)$$

其中 \hat{b}_i^\dagger 和 \hat{b}_i 是玻色子產生和湮滅算符。

7.2 超流-絕緣體相變

當 $U/t \ll 1$ 時, 系統處於超流相; 當 $U/t \gg 1$ 時, 系統處於 Mott 絶緣體相。臨界點可以通過計算超流密度和壓縮率來確定。

7.3 序參數

超流序參數定義為:

$$\psi_{\text{SF}} = \langle \hat{b}_i \rangle \quad (35)$$

Mott 絶緣體的特徵是整數填充和零壓縮率:

$$\kappa = \frac{\partial \langle \hat{n} \rangle}{\partial \mu} = 0 \quad (36)$$

8 數值實現細節

8.1 採樣效率

為了提高採樣效率，我們使用：

- 平衡步驟 (equilibration steps) 以達到穩態分布
- 跳過步驟 (skip steps) 以減少自相關
- 多行走者 (multiple walkers) 以並行採樣

8.2 誤差估計

使用 Bootstrap 方法估計統計誤差：

$$\sigma_E = \sqrt{\frac{1}{B-1} \sum_{b=1}^B (E_b - \bar{E})^2} \quad (37)$$

其中 B 是 Bootstrap 樣本數， E_b 是第 b 個樣本的平均能量。

8.3 自相關時間

自相關時間 τ 定義為：

$$C(t) = \frac{\langle E(0)E(t) \rangle - \langle E \rangle^2}{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2} = e^{-t/\tau} \quad (38)$$

有效樣本數為：

$$N_{\text{eff}} = \frac{N}{2\tau} \quad (39)$$

9 理論有效性總結

9.1 收斂性

定理 9.1 (VMC 收斂性). 在適當的條件下，VMC 方法收斂到變分能量：

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M E_{\text{loc}}(\sigma_i) = E[\psi] \quad (40)$$

其中 M 是採樣數。

證明：根據大數定律，當樣本數趨於無窮時，樣本平均收斂到期望值。

9.2 誤差界限

對於 M 個獨立樣本，中心極限定理給出誤差界限：

$$P\left(\left|\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M E_{\text{loc}}(\sigma_i) - E[\psi]\right| > \epsilon\right) \leq \frac{\text{Var}(E_{\text{loc}})}{M\epsilon^2} \quad (41)$$

9.3 計算複雜度

- RBM 量子態: $O(NM)$ 用於計算波函數振幅
- VMC: $O(N^2M)$ 用於局部能量計算（對於最近鄰相互作用）
- PIMC: $O(NM)$ 用於每個更新步驟，其中 M 是時間切片數

10 結論

本文件詳細說明了量子蒙地卡羅方法的數學理論基礎和實現細節。這些方法在強關聯量子多體系統的研究中發揮著重要作用，特別是在處理大系統和複雜相變時。結合神經網路量子態的最新進展，這些方法為研究量子多體物理提供了強大的數值工具。

11 參考文獻

1. Carleo, G., & Troyer, M. (2017). Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks. *Science*, 355(6325), 602-606.
2. Foulkes, W. M. C., et al. (2001). Quantum Monte Carlo simulations of solids. *Reviews of Modern Physics*, 73(1), 33.
3. Ceperley, D. M. (1995). Path integrals in the theory of condensed helium. *Reviews of Modern Physics*, 67(2), 279.
4. White, S. R. (1992). Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Physical Review Letters*, 69(19), 2863.
5. Prokof'ev, N., & Svistunov, B. (1998). Worm algorithm in quantum Monte Carlo simulations. *Physical Review Letters*, 81(12), 2514.