

各位下午好. 我们组汇报的主题是 **Bose-Hubbard 模型的数值计算与算法优化**. 我是汇报人余林涛, 小组成员还有夏明宇和肖月两位同学. 我们的研究聚焦强关联量子多体系统的数值模拟, 通过设计并对比三种量子蒙特卡洛 (MCMC) 采样算法, 实现采样效率的优化. 接下来将按

1. 模型介绍

2. SSE 级数展开

3. 数值计算分析

4. 模拟结果

5. 核心结论

6. 仿真方法

六个部分讲解.

翻页 (5%)

## 1 模型介绍

翻页 (7%)

Bose-Hubbard 模型是描述无自旋玻色子在周期性晶格上相互作用的基础理论模型, 广泛应用于超流-莫特绝缘相变、高温超导等领域的研究. 其哈密顿量的完整形式如下

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i. \quad (1)$$

翻页 (9%)

其中

1. 跳跃项推动系统进入超流相 (粒子无耗散流动)  
: 玻色子以跃迁振幅  $t$  在相邻格点间自由移动, 趋向于让粒子在晶格上均匀分布.

2. 在位排斥项推动系统进入莫特绝缘相（粒子被束缚在单个格点，无宏观流动）：描述同一格点上两个玻色子的排斥作用（ $n_i = 0$  或 1 时该项为 0， $n_i \geq 2$  时随粒子数增长）；排斥强度由  $U$  控制，阻碍粒子在同一格点聚集；当  $U > 9$  时，排斥作用完全压制跳跃作用，系统进入莫特绝缘相； $U$  较小时（ $U < 3$ ），跳跃作用主导，系统处于超流相；

3. 化学势项  $-\mu \sum_i \hat{n}_i$ ：描述外部场对玻色子的能量贡献，用于控制系统的平均粒子数密度。

## 2 SSE 级数展开

由于哈密顿量的非对易性，直接计算量子多体系统的配分函数极其困难。随机级数展开（SSE）是解决这一问题的核心方法，其本质是通过泰勒展开将指数算子转化为“经典闭合图”的求和，实现量子问题的经典化转化。在我们的模型中配分函数的 SSE 展开式：

$$Z = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\beta^m}{m!} \sum_{\{i_1, \dots, i_m\}} \sum_{\{b_1, \dots, b_m\}} \prod_{k=1}^m \langle i_k | -H_{b_k} | i_{k+1} \rangle. \quad (2)$$

为直观展示展开过程，我们以 1D-4 格点，展开阶数为  $m = 3$  为例：这里的四个状态序列需满足“守恒 + 闭合”条件

1.  $|i_1\rangle = |2, 1, 1, 0\rangle$  为初始状态，总粒子数为 4；

2. 第二个状态序列  $|i_2\rangle = |1, 2, 1, 0\rangle$ : 代表格点 1 的 1 个粒子跃迁至格点 2, 总粒子数仍为 4, 这就是守恒条件;
3. 第三个状态序列  $|i_3\rangle = |1, 2, 1, 0\rangle$ : 在位排斥算子  $(U, 3)$  作用于格点 3 (粒子数为 1,  $\hat{n}_3(\hat{n}_3-1) = 0$ ), 化学势算子  $(\mu, 4)$  作用于格点 4 (粒子数为 0), 均不改变粒子数状态;
4. 第四个状态序列  $|i_4\rangle = |2, 1, 1, 0\rangle = |i_1\rangle$ , 可以看到它回归初始状态, 这即是闭合条件.

通过该实例可见, SSE 的核心价值是将抽象的量子配分函数, 转化为“算子序列 + 状态序列 + 顶点权重”的经典构型集合, 后续 MCMC 算法的本质就是对这些经典构型进行高效采样, 从而计算物理量的统计平均值.

---

翻页 (26%)

---

## 3 算法设计

我们的核心目标是通过优化 MCMC 的跃迁矩阵, 减少采样过程中的“样本相关性”— 用密度积分自相关时间  $\tau_{\text{int}}(n)$  量化, 也就是说  $\tau_{\text{int}}(n)$  越短, 样本独立性越强, 采样效率越高. 接下来详细介绍三种算法的原理

---

翻页 (28%)

---

### 3.1 方案 A: 热浴更新

这种方法的核心原理是基于权重比例来进行采样, 直接将跃迁概率设定为归一化后的顶点权重, 即  $\pi_j = w_j / \sum_{k=1}^4 w_k$  (4 种散射过程: 反弹、直线、跳跃、转

向)；这种方法没有拒绝步骤，始终按权重接受跃迁，实现起来比较简单，仅需对权重归一化即可。

————— 翻页 (30%) —————  
跃迁矩阵结构

$$T_A = \begin{bmatrix} \pi_1 & \pi_2 & \pi_3 & \pi_4 \\ \pi_2 & \pi_1 & \pi_4 & \pi_3 \\ \pi_3 & \pi_4 & \pi_1 & \pi_2 \\ \pi_4 & \pi_3 & \pi_2 & \pi_1 \end{bmatrix}$$

其中对角元  $T_{A_{ii}} = \pi_i$ ，代表“滞留概率”——粒子可停留在当前散射过程，无需转移；

————— 翻页 (33%) —————  
这种方法的缺点在于：对角元非零导致严重的“状态滞留”，样本间相关性极强，采样效率低下。

————— 翻页 (35%) —————

### 3.2 方案 B：最小反弹算法

这种方法是基于线性规划的约束优化，核心目标是  
最小化反弹过程的总概率，即最小化跃迁矩阵的迹  
 $\text{Tr}(T_B) = \sum_{i=1}^4 T_{B_{ii}}$ ；通过两大核心约束来实

1. 概率归一化约束：对任意行索引  $i$ ,  $\sum_{j=1}^4 T_{B_{ij}} = 1$ （确保每一步跃迁的概率和为 1）；
2. 细致平衡约束：对任意  $i, j$ ,  $w_i T_{B_{ij}} = w_j T_{B_{ji}}$ （保证采样的无偏性）；

————— 翻页 (37%) —————  
通过一个实例验证（权重  $[0.2, 0.4, 0.3, 0.1]$ ）. 求解线性规划后得到跃迁矩阵

$$T_B = \begin{bmatrix} 0.1 & 0.5 & 0.3 & 0.1 \\ 0.5 & 0.1 & 0.1 & 0.3 \\ 0.3 & 0.1 & 0.1 & 0.5 \\ 0.1 & 0.3 & 0.5 & 0.1 \end{bmatrix}.$$

可见反弹过程的对角元  $T_{B_{11}} = 0.1$ ，较热浴更新的  $\pi_1 = 0.2$  显著降低.

————— 翻页 (40%) —————  
有效减少无效转移.

————— 翻页 (42%) —————

### 3.3 方案 C：局部最优算法 (Locally Optimal Algorithm) —— 定理驱动算法

这种方法基于 Peskun 定理 (Peskun's Ordering Theorem)，该定理指出：在满足细致平衡的前提下，跃迁矩阵的“非对角元占比越高”，采样效率越高；基于此，核心设计规则为仅保留权重最大的散射过程的滞留概率，其余过程禁止滞留 ( $T_{C_{ii}} = 0, i \neq \max$ )；

————— 翻页 (44%) —————  
跃迁矩阵结构 (设  $\pi_1 \leq \pi_2 \leq \pi_3 \leq \pi_4$ ， $\pi_4$  为最大权重)：

$$T_C = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\pi_2}{1-\pi_1} & \frac{\pi_3}{1-\pi_1} & \frac{\pi_4}{1-\pi_1} \\ \frac{\pi_1}{1-\pi_2} & 0 & \frac{\pi_3}{1-\pi_2} & \frac{\pi_4}{1-\pi_2} \\ \frac{\pi_1}{1-\pi_3} & \frac{\pi_2}{1-\pi_3} & 0 & \frac{\pi_4}{1-\pi_3} \\ \frac{\pi_1}{1-\pi'_4} & \frac{\pi_2}{1-\pi'_4} & \frac{\pi_3}{1-\pi'_4} & \pi'_4 \end{bmatrix}.$$

其中  $\pi'_4 = 1 - \sum_{j \neq 4} T_{C_{4j}}$  (仅最大权重过程允许少量滞留)，非对角元需重新归一化以满足概率和为 1；

————— 翻页 (47%) —————  
它的优势是：禁止低权重状态滞留，最大化样本独立性，适配低  $U$  场景 (权重分布均衡) .

————— 翻页 (49%) —————

## 4 计算结果分析

我们的核心观测指标为  $\tau_{int}(n)$ （自相关时间越小，效率越高），量化结果如下

————— 翻页 (51%) —————

### 4.1 整体趋势

————— 翻页 (53%) —————

方案 A 热浴更新的  $\tau_{int}(n)$  始终是 B、C 的 2 – 3 倍，在所有  $U$  区间均显著低效；

————— 翻页 (56%) —————

然后，我们逐渐增大扫描次数的取值. 我们会发现

————— 翻页 (58%) —————

随  $U$  增大，SSE 构型空间的对角权重逐渐主导，方案 C 局部最优算法的  $\tau_{int}(n)$  略有上升，方案 B 最小反弹算法保持比较稳定；

扫描次数  $\geq 4000$  时，三种算法的结果均趋于稳定，无明显波动.

————— 翻页 (60%) —————

### 4.2 不同相区的性能对比

————— 翻页 (63%) —————

在这个表格中，

————— 翻页 (65%) —————

我们可以看到

1. 在低  $U$ （权重均衡，超流相）区间：方案 C 局部最优算法最优， $\tau_{int}(n)$  仅 7 – 9；
2. 在高  $U$  区间（对角权重主导，近莫特相）：方案 B 最小反弹算法最优， $\tau_{int}(n)$  仅 15 – 20；

3. 传统的方案 A 热浴更新因状态滞留问题，在所有场景下均无优势.

翻页 (67%)

## 5 核心结论与展望

基于以上详细的模型分析、算法设计与仿真验证，得出三点核心结论

翻页 (70%)

1. 热浴更新算法 (A) 的低效具有必然性：其跃迁矩阵的非零对角元导致严重的状态滞留，样本相关性强，自相关时间是优化算法的 2 – 3 倍，不适用于强关联量子多体系统的高效采样；

翻页 (72%)

2. 算法选择必须依赖模型参数：在低  $U$  区间（超流相，权重分布均衡）优先选择局部最优算法，在高  $U$  区间（近莫特相，对角权重主导）优先选择最小反弹算法，通过“场景适配”可以有效提升采样效率；

翻页 (74%)

3. 高效算法的统一设计原则为：使“非最大权重状态的对角元归零”，剩余自由度需根据权重分布特性进行适配.

翻页 (77%)

## 6 仿真方法

翻页 (79%)

我们使用了此表列出的关键参数.

—— 翻页 (81%) ——

并使用 SSE 将量子问题映射到  $(d + 1)$  维的经典图像.

—— 翻页 (84%) ——

计算的流程如表所示.

—— 翻页 (86%) ——

接下来是我们使用的计算程序. 我们使用 Python 进行仿真.

—— 翻页 (88%) ——

首先初始化类用于存储参数.

—— 翻页 (91%) ——

然后定义计算顶点权重的函数.

—— 翻页 (93%) ——

再定义计算转移矩阵的函数.

—— 翻页 (95%) ——

这里用到了此矩阵的表达式.

—— 翻页 (98%) ——

最后在运行仿真时, 执行马尔可夫链扫描.

—— 翻页 (100%) ——

以上就是我们小组的全部分享, 感谢大家的耐心聆听! 如有任何疑问或交流需求, 欢迎提出.