

# Sign-Problem-Free Nuclear Quantum Monte Carlo

报告人: 牛忠旺

导师: 吕炳楠

Graduate School of China Academy of Engineering Physics  
中国工程物理研究院研究生院

第十届手征有效场论研讨会 10.17-10.21

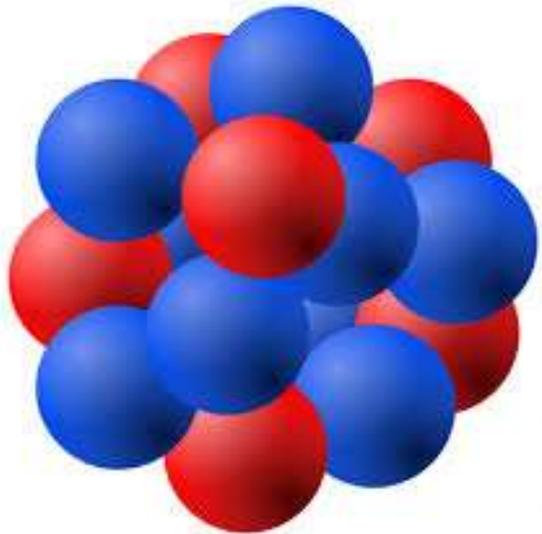
全文: [arXiv:2506.12874](https://arxiv.org/abs/2506.12874)

# 概述

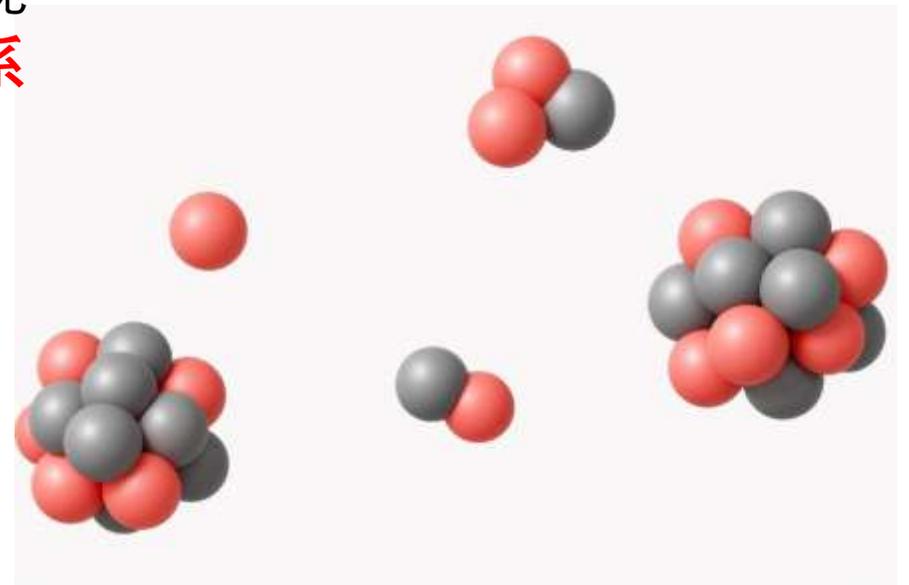
从**基本核子-核子相互作用**中理解核结构出现是现代核物理学核心挑战

*ab initio*方法：从**微观相互作用**出发，精确求解量子多体体系

- 完全包含多体关联，物理现象从相互作用直接涌现
- **计算复杂度高**，资源消耗巨大，**中等数量核子体系**



纷繁复杂的核力 **X**



1. 用**最简核力**预测核素表性质
2. 克服**符号问题**，将*ab initio*方法拓展到**重核体系**

# 格点上的辅助场蒙特卡洛方法(AFQMC)

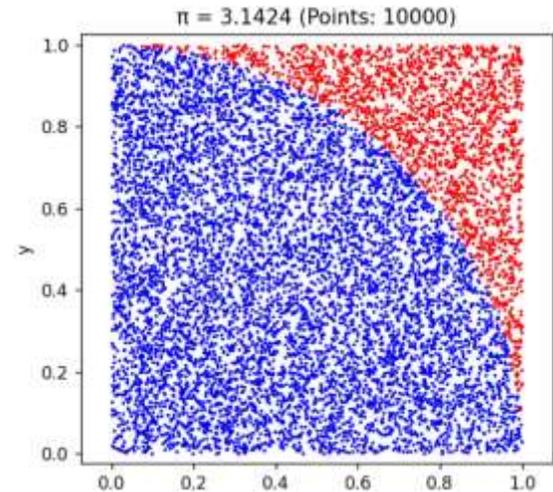
量子蒙特卡洛方法：通过在希尔伯特空间**随机采样**，将随核子指数增长计算复杂度降低到**多项式复杂度**

- 虚时间投影：
$$|\Phi\rangle \propto \lim_{\tau \rightarrow \infty} \exp(-\tau H)|\Phi_T\rangle$$
$$\langle O \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\langle \Phi_T | e^{-\tau H/2} O e^{-\tau H/2} | \Phi_T \rangle}{\langle \Phi_T | e^{-\tau H} | \Phi_T \rangle}$$

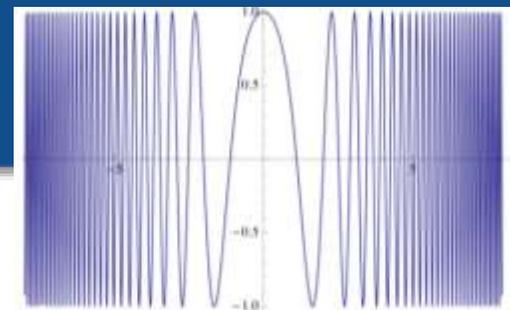
- 格点技术：时空离散化成立方格子

- 辅助场变换：
$$: \exp \left[ -\frac{a_t C}{2} (\Psi^\dagger \Psi)^2 \right] := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int ds : \exp \left[ -\frac{s^2}{2} + \sqrt{-a_t C} s (\Psi^\dagger \Psi) \right] :$$

将多体相互作用转化为**单体算符和辅助场相互作用**



# 蒙特卡洛符号问题



## MC方法核心困难：符号问题—— NP hard

- 当积分高度震荡时，正负振幅间的抵消会导致随粒子数呈**指数级增长**的统计噪声
- 源于费米子反对称性及复杂相互作用

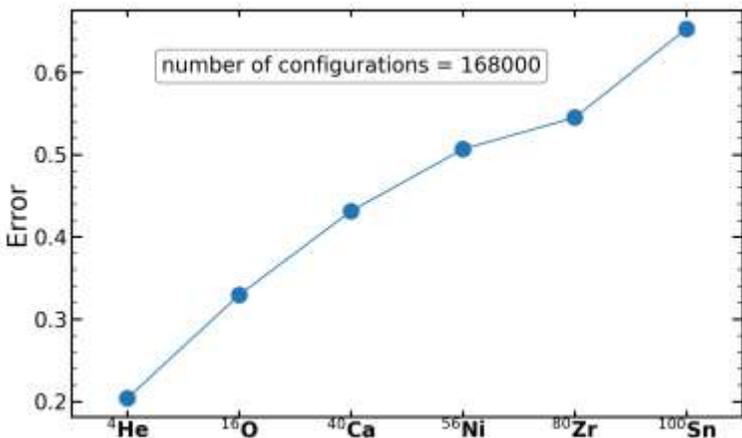
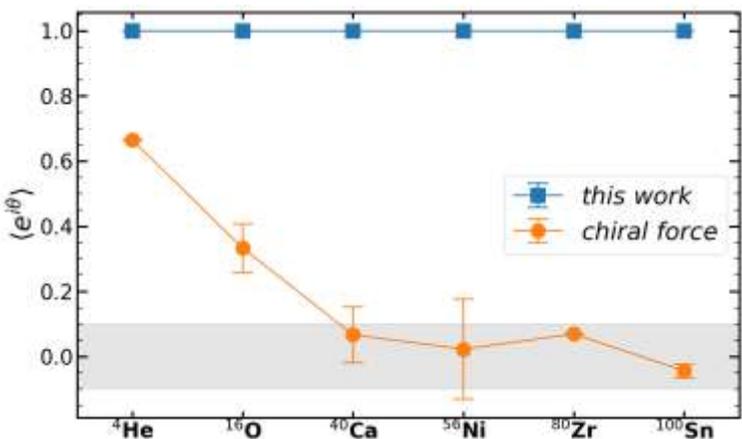
**任何非零符号问题**都会阻止**重原子核**的直接MC模拟

## 无符号问题MC计算实例：

相同夸克种类的格点QCD计算，吸引Hubbard model，双分格点晶格上半填充的排斥Hubbard model，the Kane-Mele-Hubbard model， the half-filled Kondo lattice model

M. Troyer and U.-J. Wiese, PRL 94, 170201 (2005)

Z.-X. Li and H. Yao, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. 10, 337 (2019).



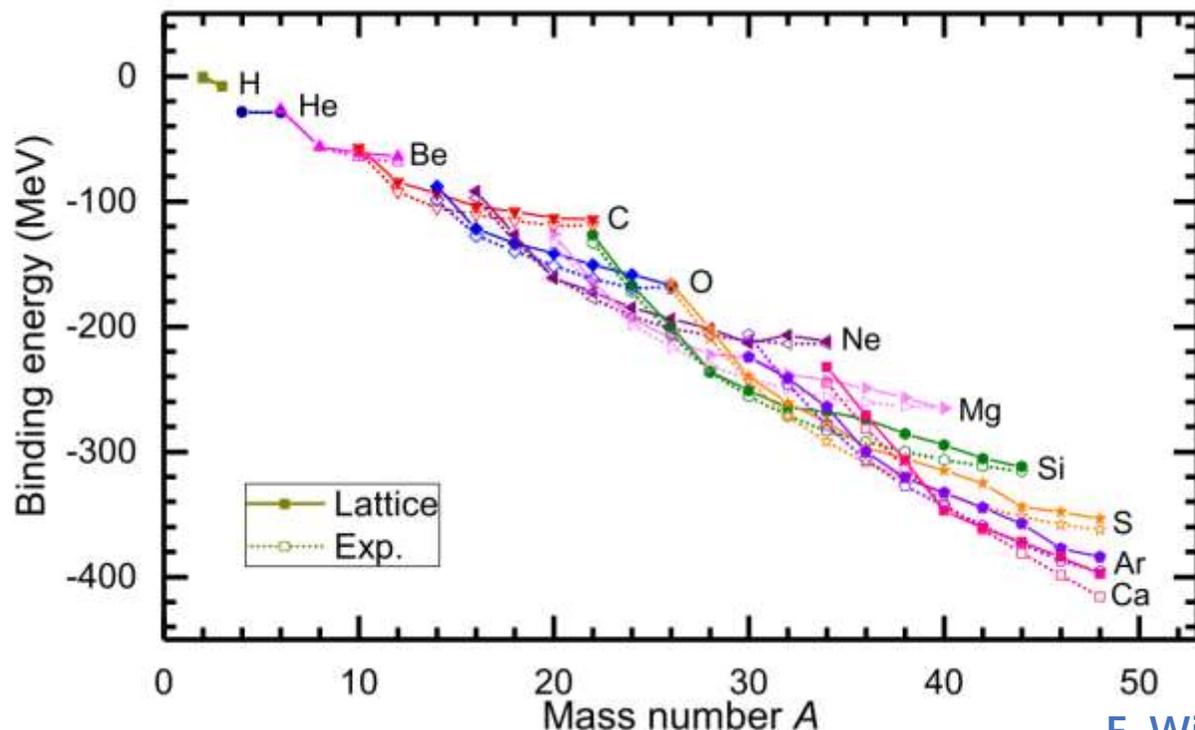
# Lattice SU(4) 模型

不依赖自旋同位旋的相互作用具有Wigner-**SU(4)** 对称性.

$$H_{\text{SU}(4)} = H_{\text{free}} + \frac{1}{2!} C_2 \sum_{\mathbf{n}} \tilde{\rho}(\mathbf{n})^2 + \frac{1}{3!} C_3 \sum_{\mathbf{n}} \tilde{\rho}(\mathbf{n})^3$$

$$\tilde{\rho}(\mathbf{n}) = \sum_i \tilde{a}_i^\dagger(\mathbf{n}) \tilde{a}_i(\mathbf{n}) + s_L \sum_{|\mathbf{n}'-\mathbf{n}|=1} \sum_i \tilde{a}_i^\dagger(\mathbf{n}') \tilde{a}_i(\mathbf{n}')$$

$$\tilde{a}_i(\mathbf{n}) = a_i(\mathbf{n}) + s_{NL} \sum_{|\mathbf{n}'-\mathbf{n}|=1} a_i(\mathbf{n}')$$



SU(4) 相互作用**对于结合能，电荷密度分布**等性质给出了很好的预测，且严格没有符号问题。

$$Z = \int \mathcal{D}s e^{-s^2/2} \det[Z(s)]$$

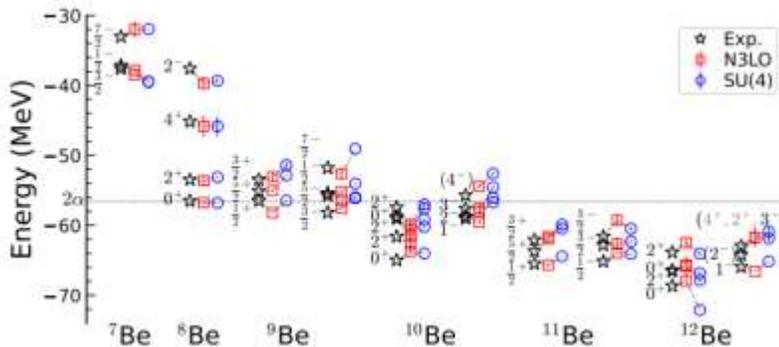
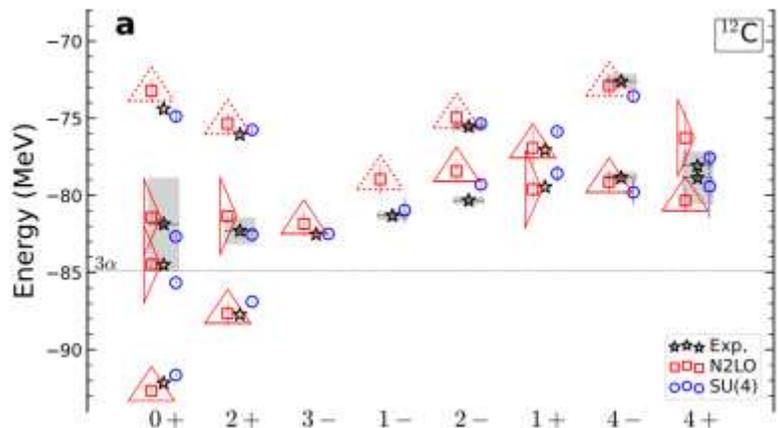
$$\det[Z(s)] = \det[Z_\uparrow(s)] \det[Z_\downarrow(s)] = \det[Z_\uparrow(s)]^2 \geq 0$$

E. Wigner, Phys. Rev. 51, 106 (1937).

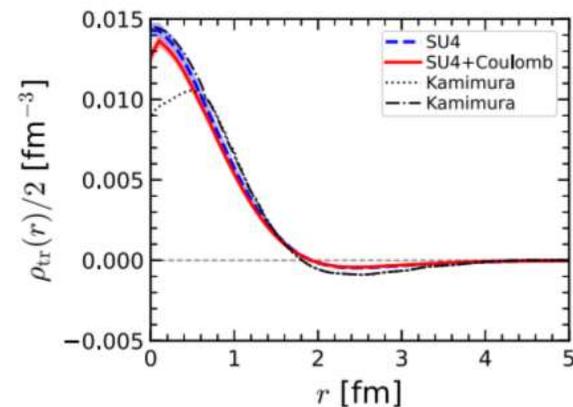
B.-N. Lu, N. Li, et al. PLB 797, 134863 (2019).

# Lattice SU(4) 模型的应用

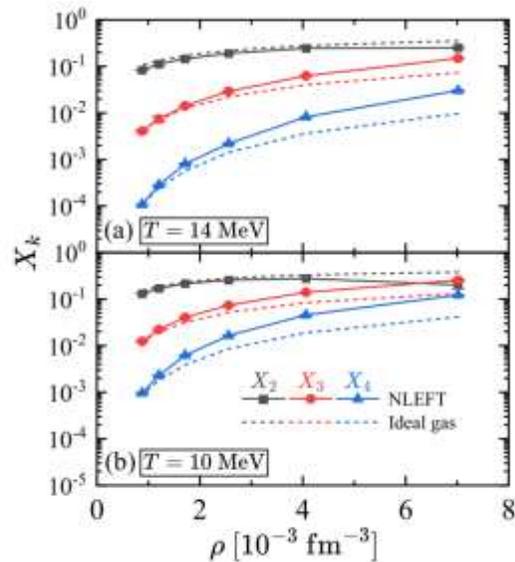
## $^{12}\text{C}$ 和 Be 同位素激发谱



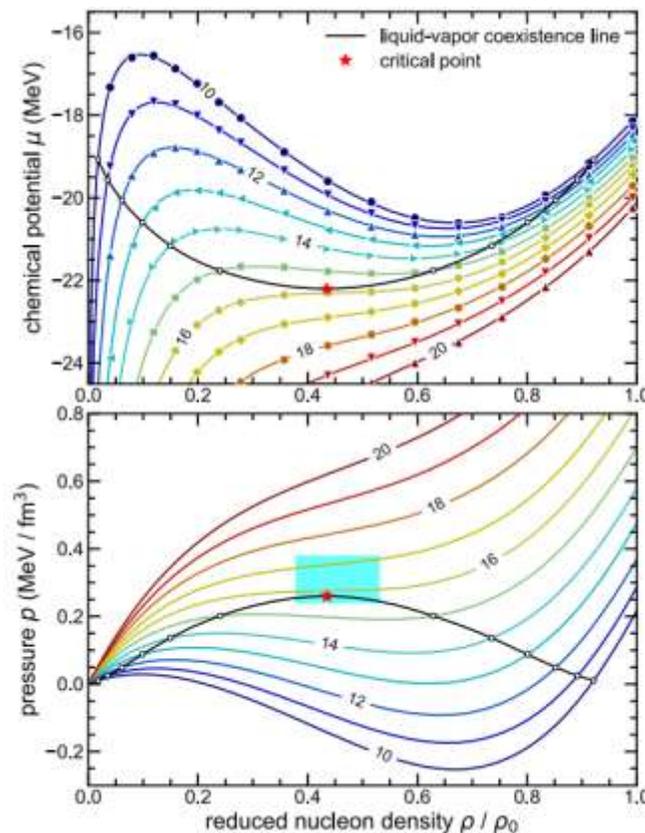
## $\alpha$ 粒子的单极子跃迁



## 有限温体系中的cluster



## 核热力学的 *ab initio* 计算



S.-H Shen, et al. Nat. comm 14, 2777 (2023)

S.-H Shen, et al. PRL 134, 162503 (2025)

U.-G. Meißner, S.-H. Shen, et al. PRL 132, 062501(2024)

B.-N. Lu, N. Li, et al. PRL 125, 192502(2020)

Z. Ren, et al. PLB 850, 138463(2024)

# 格点核力模型



Mayer & Jensen. Nuclear shell model. (1963 Nobel Prize)

"Protons & neutrons in a nucleus move in regular orbits"

为了描述壳演化：引入了**非微扰的**，**无符号问题**的自旋轨道耦合相互作用。

$$H = \sum_{\mathbf{n}} \left[ -\frac{\Psi^\dagger \nabla^2 \Psi}{2M} + : \frac{C_2}{2} \bar{\rho}^2 + \frac{C_3}{6} \bar{\rho}^3 + \boxed{C_s \bar{\rho} \bar{\rho}_s} : \right] \quad \begin{aligned} \rho &= \bar{\Psi}^\dagger \bar{\Psi}, \\ \rho_s &= \frac{i}{4} \sum_{iik} \epsilon_{ijk} \nabla_i \left[ \bar{\Psi}^\dagger (\vec{\nabla}_j - \overleftarrow{\nabla}_j) \sigma_k \bar{\Psi} \right] \end{aligned}$$

辅助场变换  $M(c) = \exp \left[ \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} a_t \frac{\Psi^\dagger(\mathbf{n}) \nabla_{\mathbf{nn}'}^2 \Psi(\mathbf{n}')}{2M} + \sum_{\mathbf{n}} \sqrt{-a_t C_2} c(\mathbf{n}) \left( \bar{\rho}(\mathbf{n}) + \frac{C_s}{2C_2} \bar{\rho}_s(\mathbf{n}) \right) \right]$

对于辅助场变换后的相互作用，如果严格**保持时间反演不变性**，那么就可以进行**无符号问题**的蒙卡计算

$$Z = \int \mathcal{D}s e^{-s^2/2} \det[Z(s)]$$

$$\det[Z(s)] = \prod_i |\lambda_i|^2 \geq 0$$

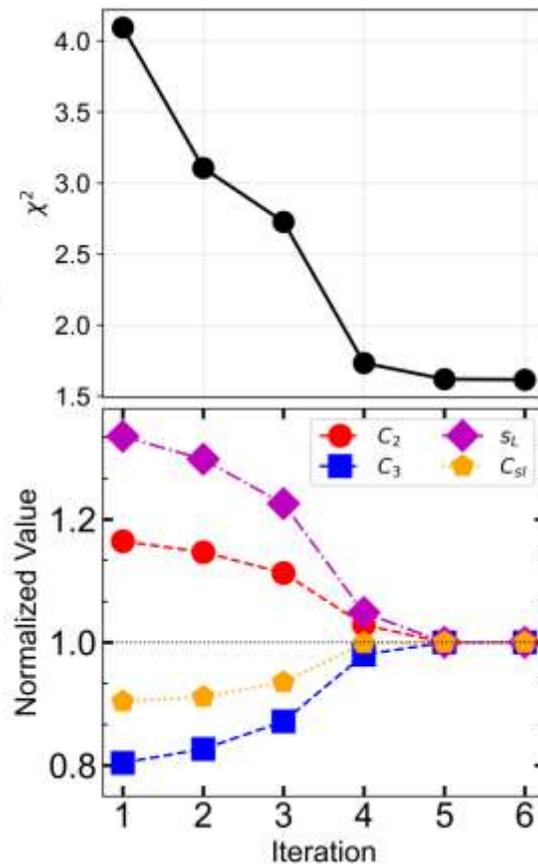
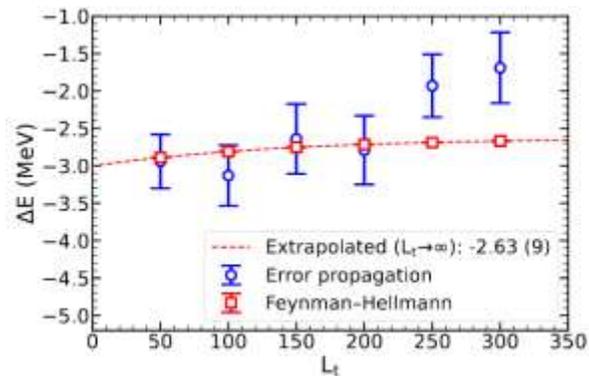
# 蒙特卡洛拟合算法实现

蒙特卡洛方法拟合问题的困难:

- 单次计算**资源消耗大**，难以使用复杂算法多次迭代
- 得到的物理量**存在统计误差**

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial \theta_i} = \sum_A \left[ 2 \left( \frac{E(A) - E(A)_{\text{exp}}}{\epsilon^2} \right) \frac{\partial E(A)}{\partial \theta_i} \right]$$

$\theta_i$ : 待拟合参数。



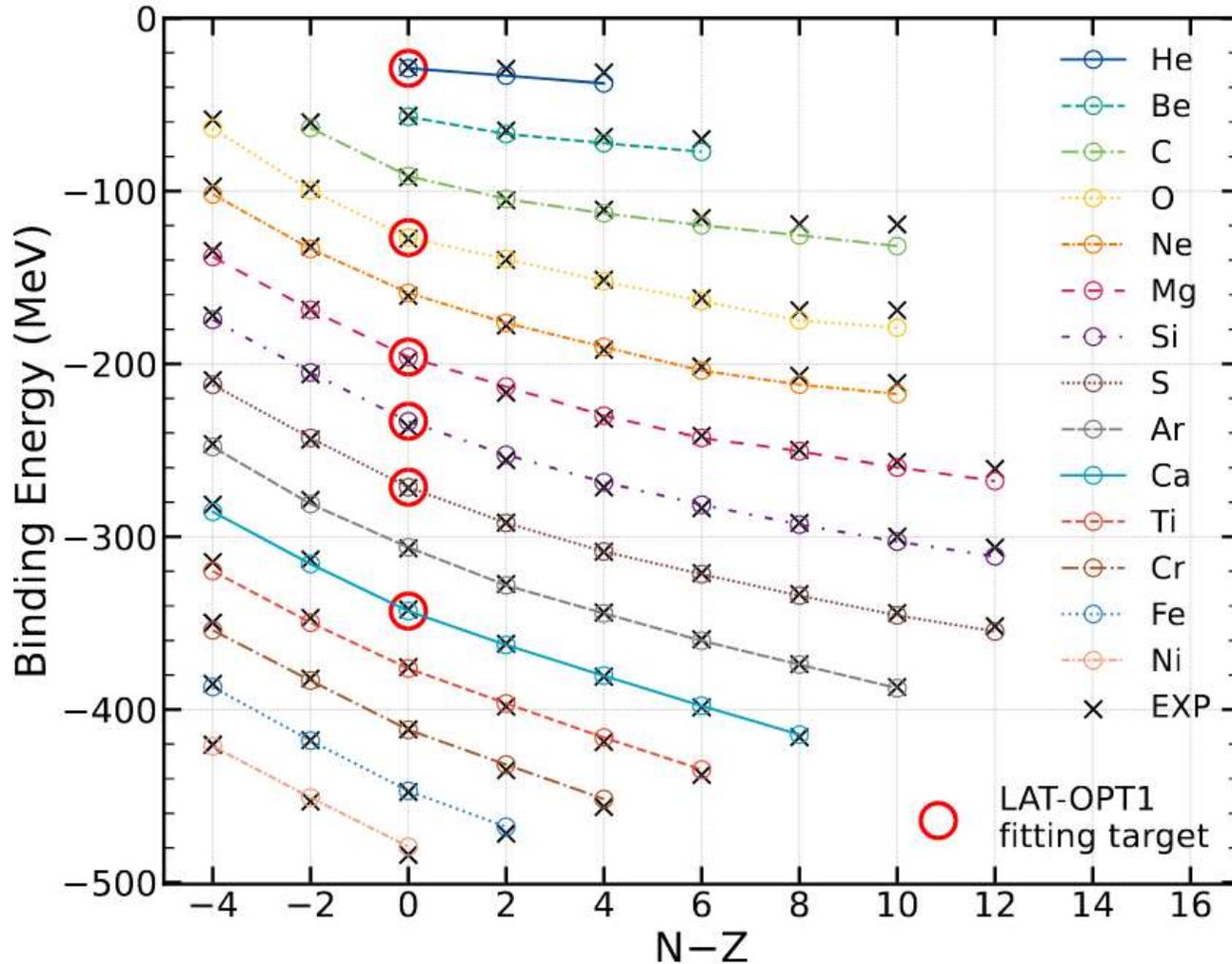
实现:

- 构建损失函数  $\chi^2 = \chi^2(s_L, s_{NL}, C_2, C_3, C_s) = \sum_A \left( \frac{E(A) - E(A)_{\text{exp}}}{\epsilon} \right)^2$
- 引入**标度缩放**、**自适应学习率**实现了梯度下降算法
- 选取三个**开壳核**三个**闭壳核**作为拟合目标

$^4\text{He}$ ,  $^{16}\text{O}$ ,  $^{24}\text{Mg}$ ,  $^{28}\text{Si}$ ,  $^{32}\text{S}$ ,  $^{40}\text{Ca}$

我们称拟合得到的参数集为**LAT-OPT1**

# N, Z ≤ 28 偶偶核结合能



与实验值相比N, Z ≤ 28的76个偶偶核的平均标准偏差。

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}$$

Model	Parameterization	Parameters	$\sigma$ (MeV)
Macroscopic-microscopic	FRDM [22]	> 30	1.15
Relativistic mean field	PC-PK1 [23]	11	2.25
Skyrme DFT	UNEDF1 [24]	12	3.43
Lattice EFT	Wigner-SU(4) [1]	4	10.21
Lattice EFT	LAT-OPT1	5	2.93

[1] B.-N. Lu, N. Li, et al. PLB 797, 134863 (2019).

[22] P. Möller, et al. At. Data Nucl. Data Tables 109, 1–204 (2016)

[23] K. Zhang, et al. At. Data Nucl. Data Tables 144, 101488 (2022)

[24] M. Kortelainen, et al. Phys. Rev. C 85, 024304 (2012).

# 壳结构的涌现



Mayer & Jensen. Nuclear shell model. (1963 Nobel Prize)

"Protons & neutrons in a nucleus move in regular orbits"

$$V = -\lambda \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} L \cdot S$$

唯像自旋轨道耦合项的引入解释了幻数：2, 8, 20, 28, 50, 82, 和 126 的存在。

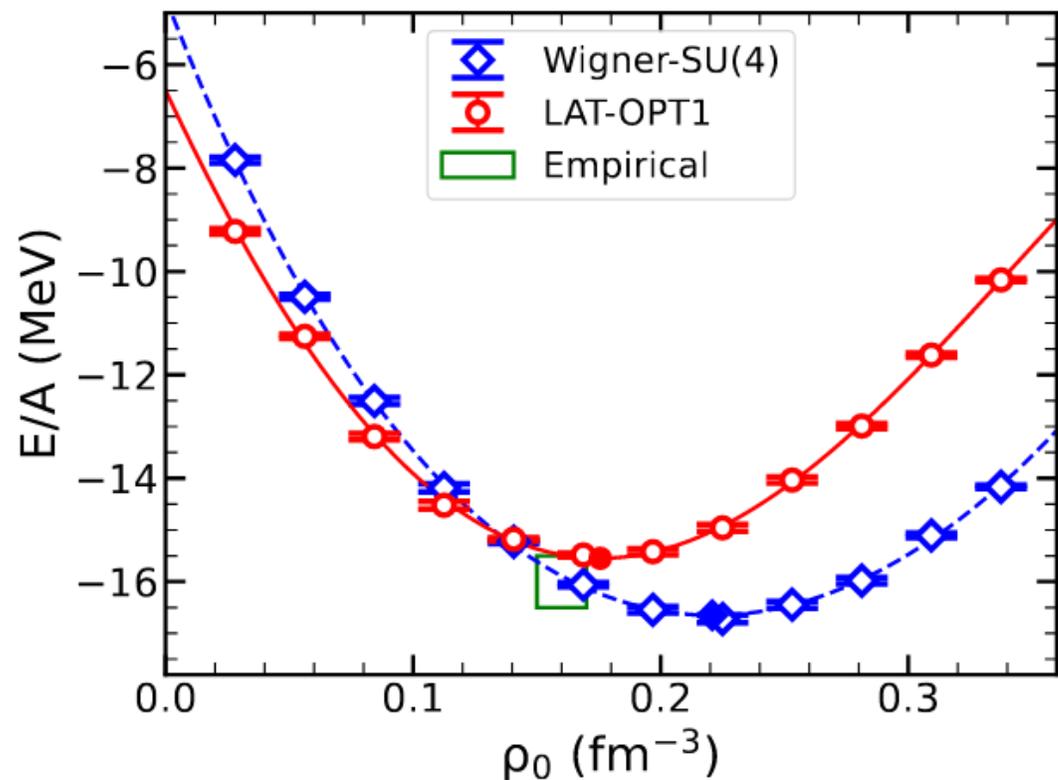
Nucleus	$E_{\text{bind}}$ (MeV)	$E_{\text{sl}}$ (MeV)	$E_{\text{sl}}/E_{\text{bind}}$	EXP (MeV)
$^4\text{He}$	-28.8	-0.3	0.010	-28.3
$^{12}\text{C}$	-91.3(1)	-13.3	0.146	-92.2
$^{14}\text{C}$	-104.6(1)	-12.7	0.121	-105.3
$^{16}\text{O}$	-126.9(2)	-5.6	0.044	-127.6
$^{40}\text{Ca}$	-343.0(2)	-13.6	0.040	-342.1
$^{48}\text{Ca}$	-414.5(3)	-42.3	0.102	-416.0
$^{56}\text{Ni}$	-479.3(6)	-74.6	0.156	-484.0
$^{80}\text{Zr}$	-672.1(8)	-23.3	0.035	-669.2
$^{90}\text{Zr}$	-782.1(5)	-64.8	0.083	-783.9
$^{100}\text{Sn}$	-824.7(8)	-103.0	0.125	-825.2
$^{132}\text{Sn}$	-1134.2(27)	-110.9	0.098	-1102.8

传统谐振子幻数 2、8、20、40（例如  $^4\text{He}$ 、 $^{16}\text{O}$ 、 $^{40}\text{Ca}$  和  $^{80}\text{Zr}$ ）原子核，自旋轨道耦合项占比始终低于 5%。

新幻数 28、50、82（例如  $^{56}\text{Ni}$ 、 $^{100}\text{Sn}$  和  $^{132}\text{Sn}$ ）原子核占比显著增强。与经典核壳模型给出的物理图像一致。

$^4\text{He}$  和  $^{132}\text{Sn}$  的相对误差低于 3%，其他原子核的相对误差低于 1%。

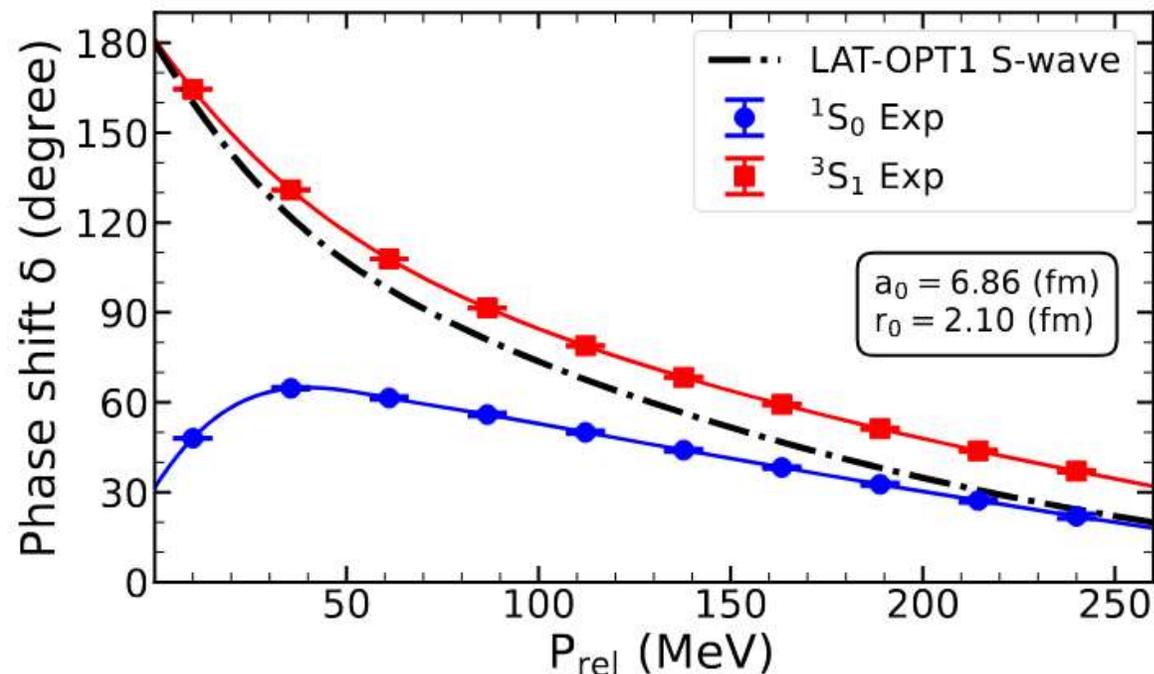
# 核物质状态方程与S波相移



饱和点:  $(\rho_0, E/A) = (0.175 \text{ fm}^{-3}, -15.4 \text{ MeV})$

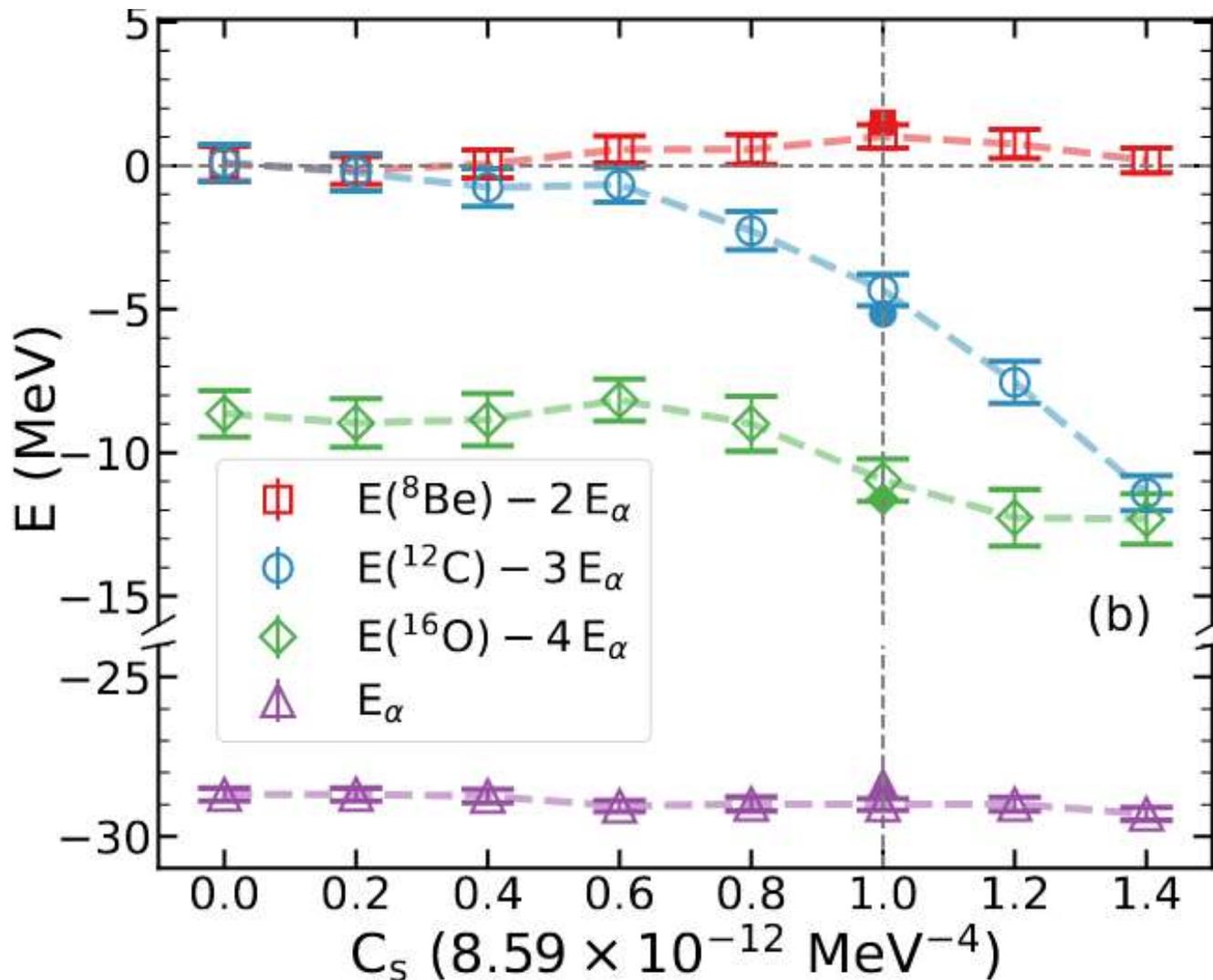
饱和点经验值:

$(\rho_0, E/A) = (0.16 \pm 0.01 \text{ fm}^{-3}, -16.0 \pm 1.0 \text{ MeV})$



在仅拟合6个结合能数据的前提下，给出了非常好的**核物质状态方程饱和点、核子-核子散射相移**的预测。

# $\alpha$ -集团化结构的出现

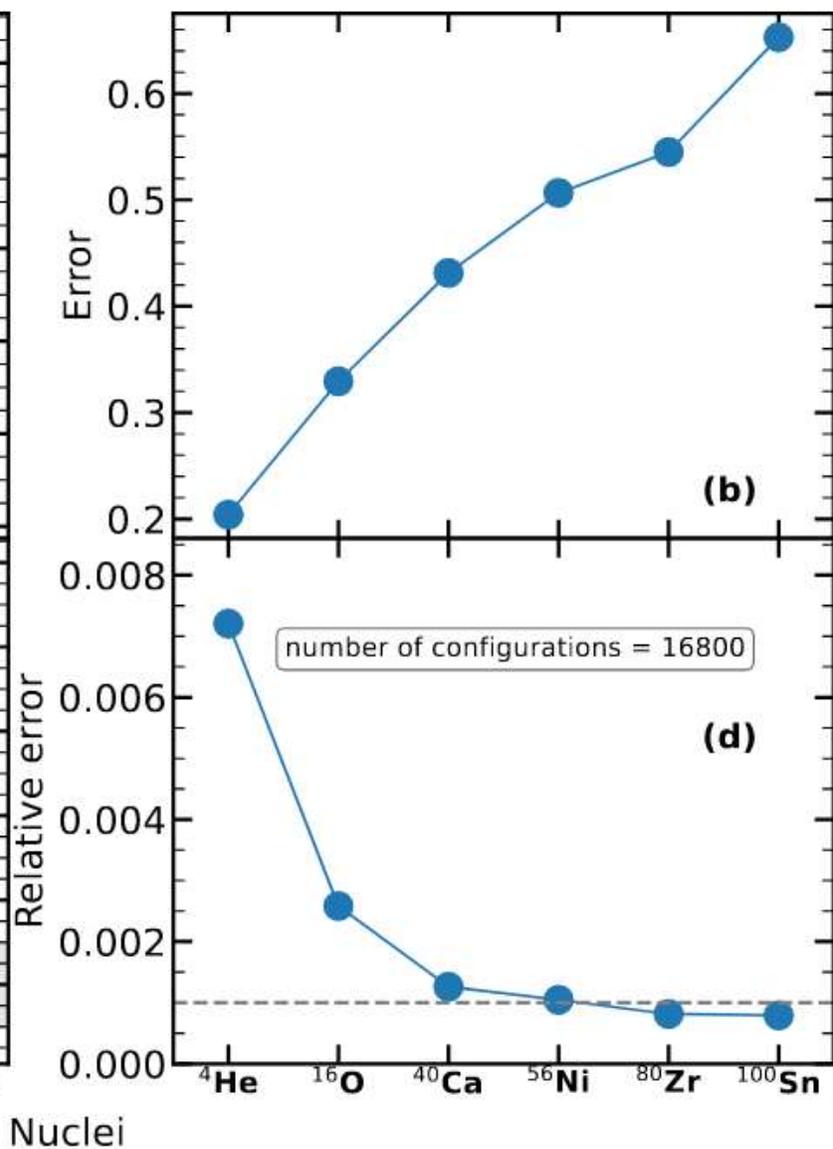
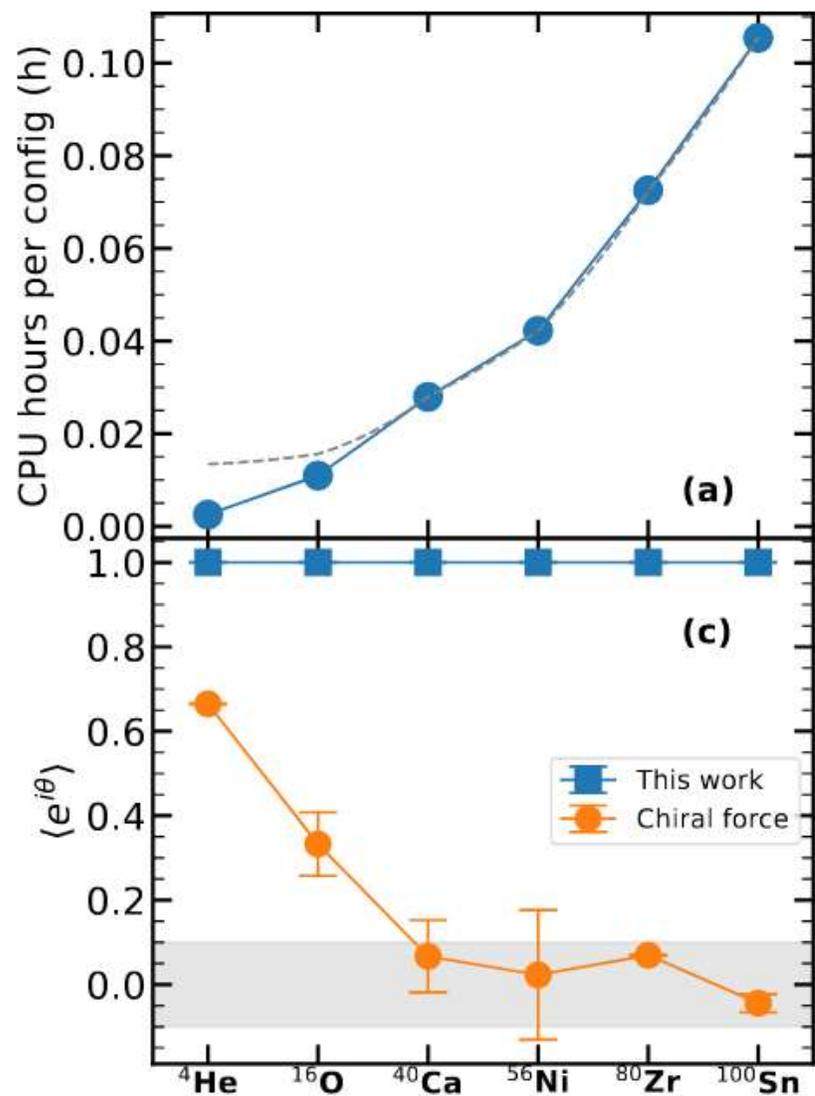


$$H = \sum_n \left[ -\frac{\Psi^\dagger \nabla^2 \Psi}{2M} + \frac{C_2}{2} \bar{\rho}^2 + \frac{C_3}{6} \bar{\rho}^3 + C_s \bar{\rho} \bar{\rho}_s \right]$$

引入系数调控自旋轨道耦合耦合项的大小。随着强度变化：

- $\alpha$ 粒子的结合能基本不改变
- $^8\text{Be}$ 由自由态展现出共振态的迹象
- $^{12}\text{C}$ 基态从三个自由的alpha粒子变成alpha束缚的结构，涌现出了**集团化**的现象。

# 计算消耗及误差比较



$^4\text{He}$ 、 $^{16}\text{O}$ 、 $^{40}\text{Ca}$ 、 $^{56}\text{Ni}$ 、 $^{80}\text{Zr}$ 、 $^{100}\text{Sn}$   
计算消耗及误差比较。

- 计算消耗随核子**多项式增长**。
- **严格无符号问题**的体系使我们能够精确计算较重的体系。
- 误差随核子数缓慢增加, 对于绝大部分计算达到**千分之一**计算精度。

# 总结

01

通过引入**无符号问题**的自旋轨道耦合项，提出了一个**可精确求解**的原子核量子多体模型，可以定量再现**轻核到重原子核**的结合能实验数据。

02

通过蒙特卡洛采样实现了**同时**对可观测量和**梯度信息**的精确估计，给出了使用蒙特卡洛方法进行**高效拟合**的范式。

03

计算了从 **$^4\text{He}$  到  $^{132}\text{Sn}$** 的结合能、对称核物质饱和度、S波相移、电荷密度分布等性质，并揭示了轻核中**自旋轨道耦合驱动cluster**的机制。



# 感谢聆听，欢迎批评指正

报告人：牛忠旺

**Graduate School of China Academy of Engineering Physics**  
中国工程物理研究院研究生院