

Algorithms and Software for Lattice Gauge Theory

第六届中国格点量子色动力学研讨会
香港中文大学（深圳）

蒋翔宇 · Indiana University · 2026 年 10 月 11 日

LQCD 计算

组态生成

细格距拓扑冻结，长程模更新缓慢

夸克传播子

小质量费米子矩阵病态

.....

测量

激发态污染，信噪比，算符混合

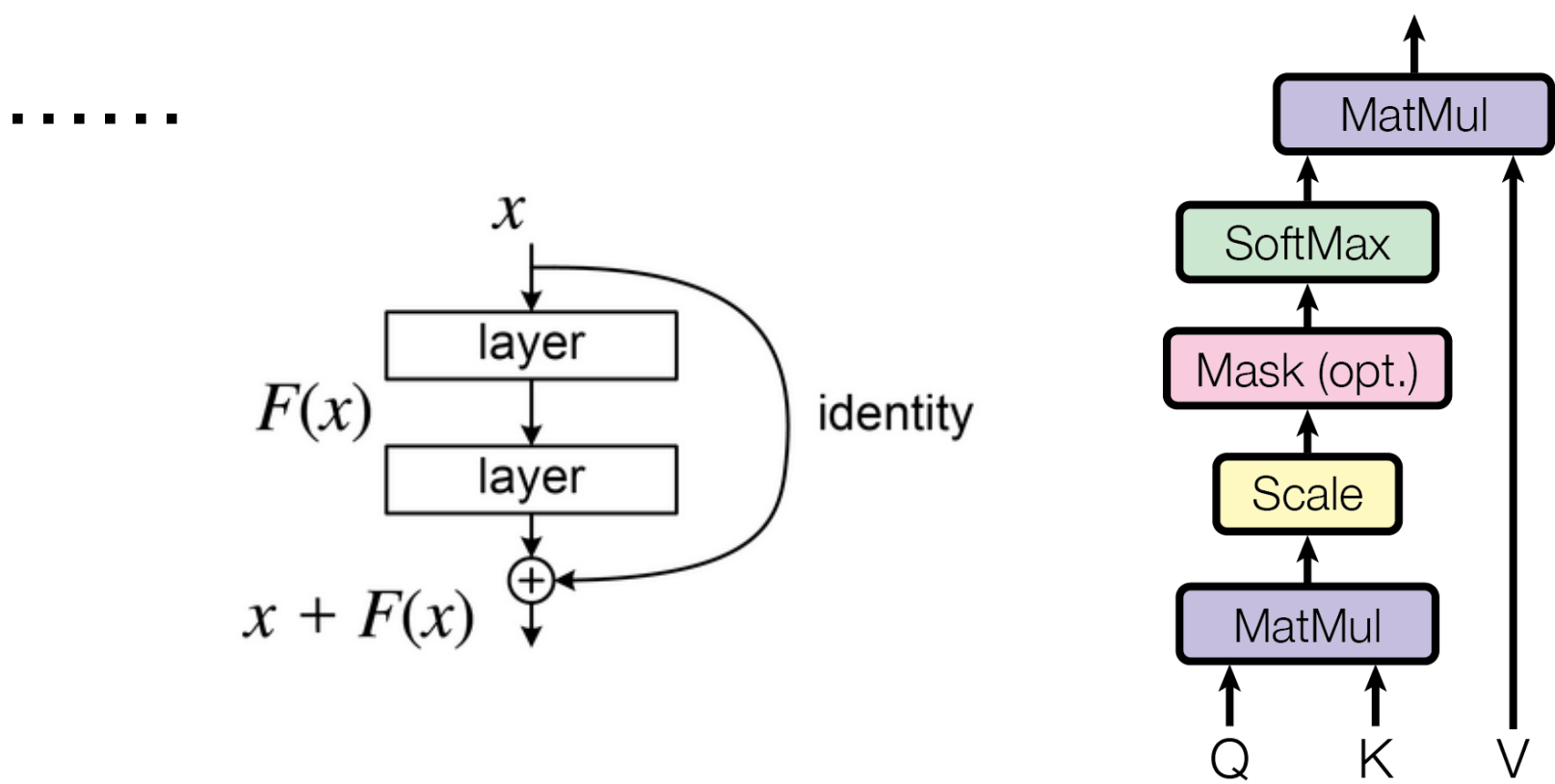
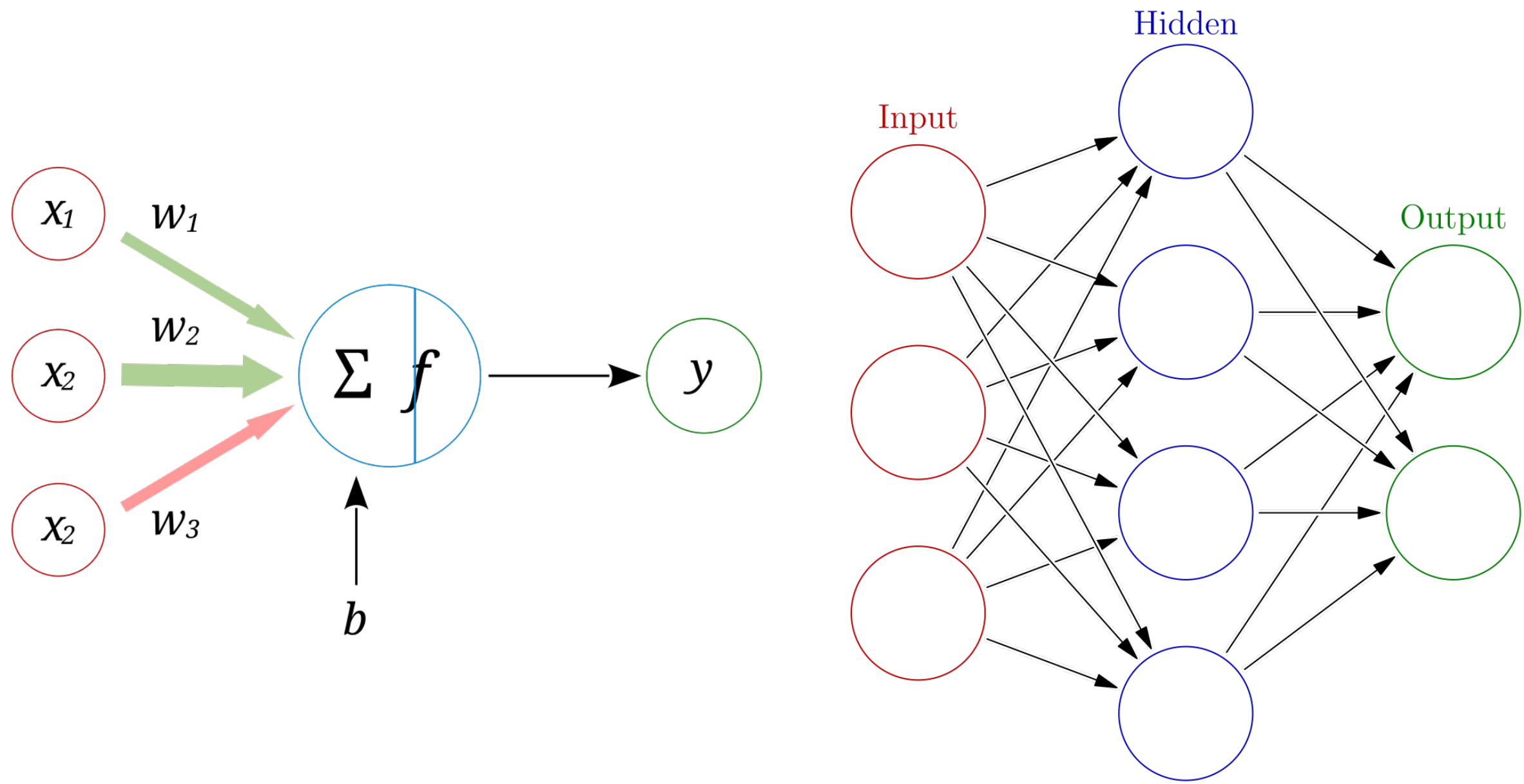
分析

软件约定，匹配约定，重复 workflow

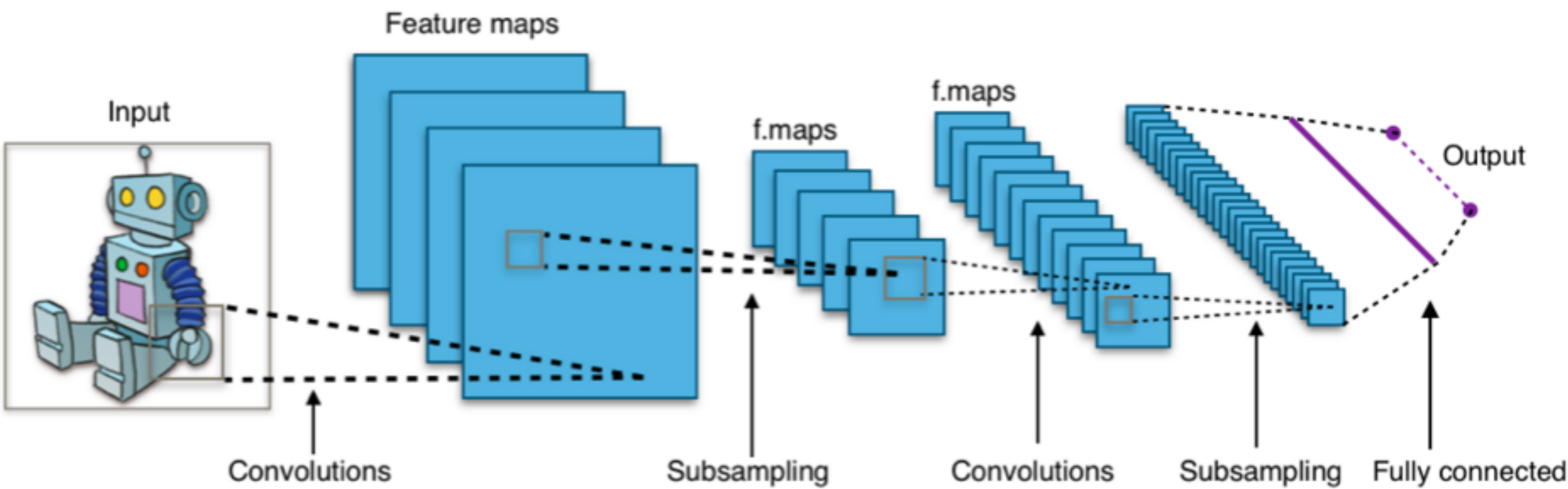
.....

机器学习

- MLP: 混合特征并施加非线性
- CNN: 局域连接与权重共享
- ResNet: 学习对已有映射的修正
- Attention: 输入依赖的特征权重



LGT 网络设计: 显式保持规范对称性



机器学习 - 组态产生

L2HMC — S. Foreman et al. · [2312.08936](#)

规范固定 — H. Hsiao et al. · [2602.23731](#)

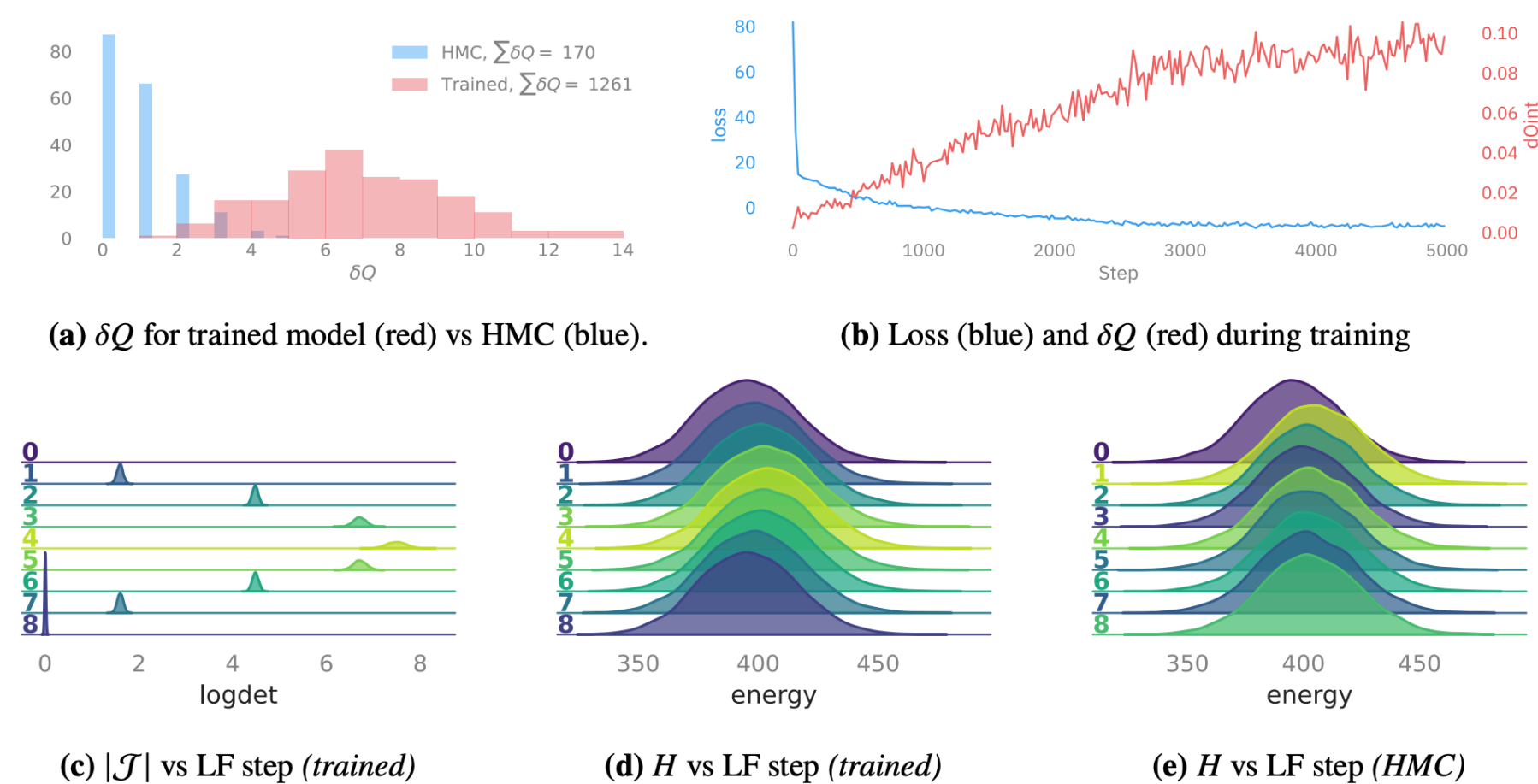
L2HMC：学习轨迹中的更新

可学习缩放 / 平移 + Jacobian 校正

2D U(1)、 $\beta=4$ ：增强跨拓扑扇区采样

损失：接受率加权的拓扑变化平方

$$\mathcal{L} = -\mathbb{E}[A(\xi'|\xi)(Q'_R - Q_R)^2]$$



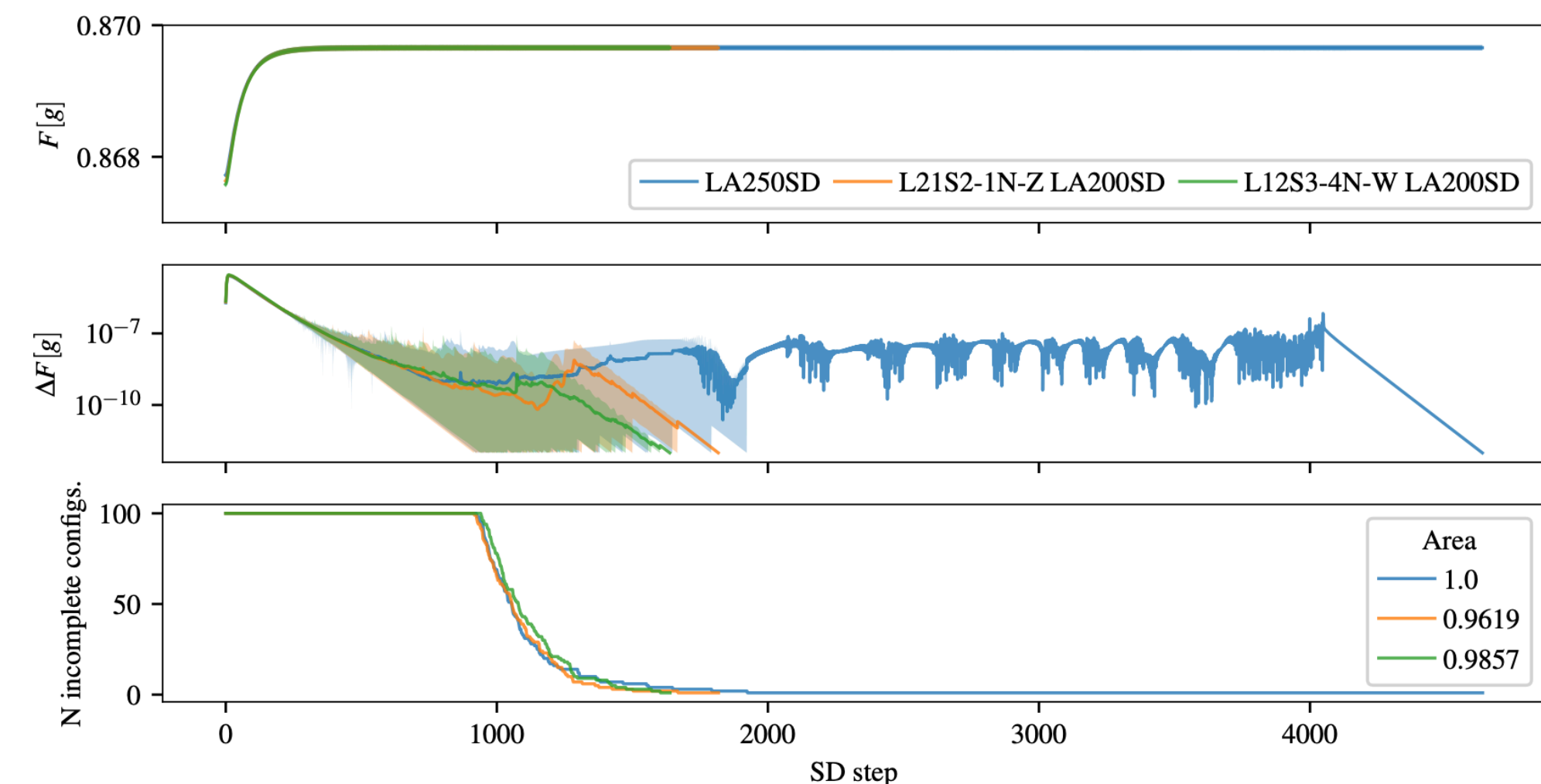
规范固定：学习更好的初始变换

网络初始变换，再接传统迭代

同收敛阈值下，迭代成本指标降低 1.4%–3.8%

损失：负的规范固定泛函

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{3N_c V} \sum_x \sum_{i=1}^3 \text{Re Tr } U_i^{(\theta)}(x)$$



规范等变卷积神经网络

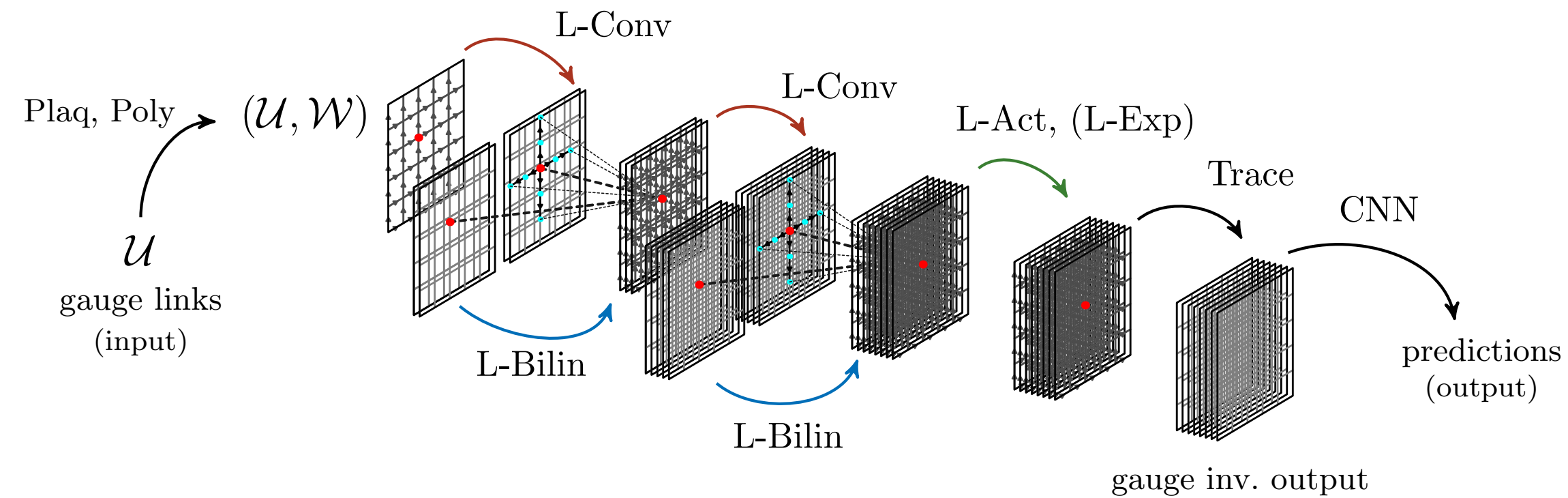
M. Favoni, A. Ipp, D. I. Müller & D. Schuh · [2012.12901](#)

卷积：平行输运 + 通道混合

双线性：局域矩阵乘积 + 通道混合

激活：不变标量 × 协变矩阵

Trace 后接普通网络



$$W'_a(x) = \sum_{p,b} c_{p,ab} U_p W_b(y_p) U_p^\dagger$$

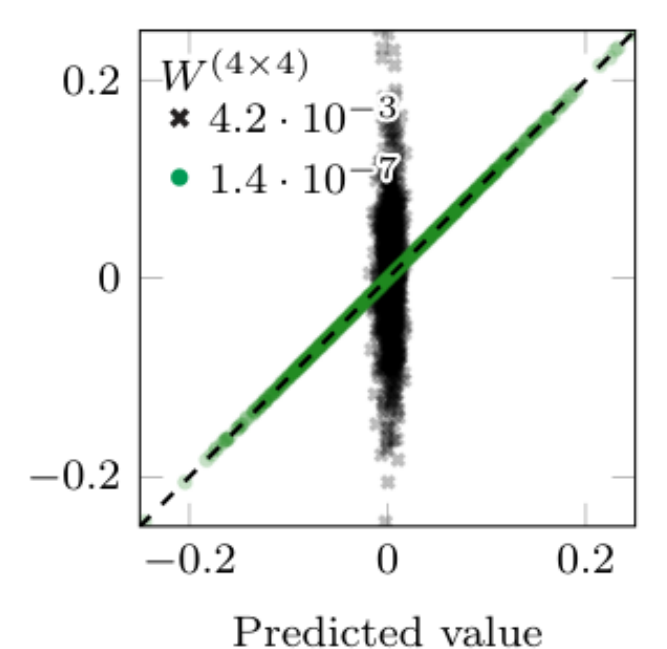
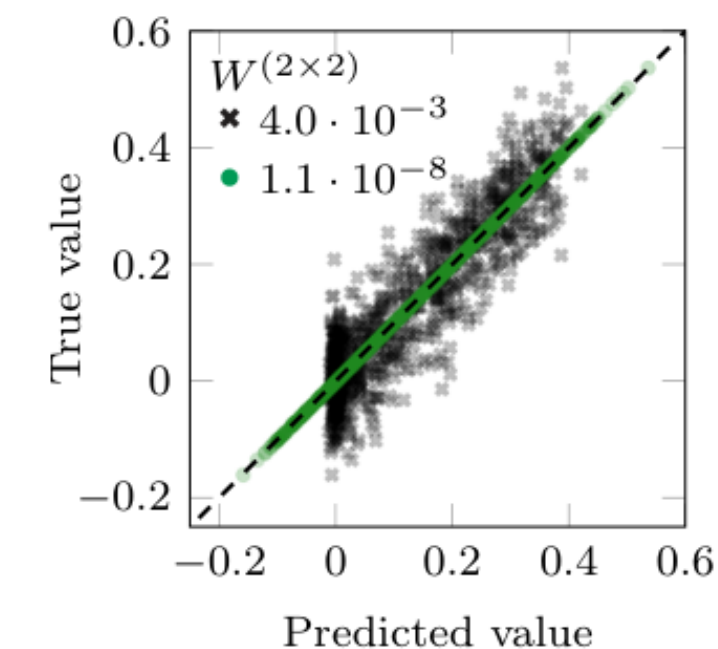
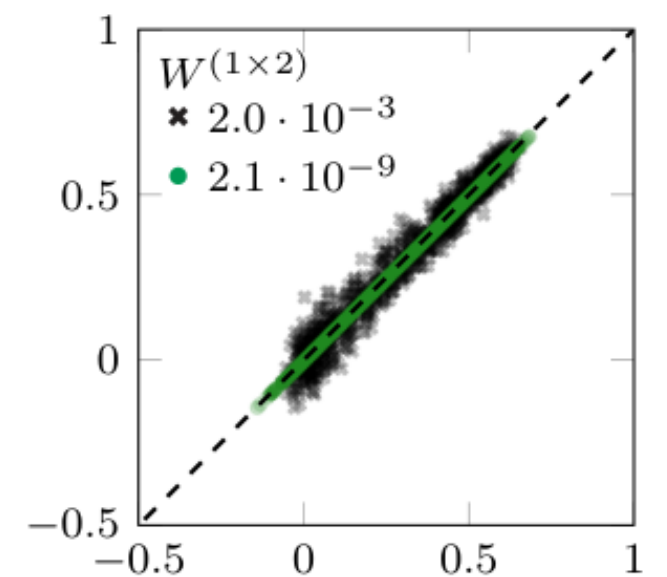
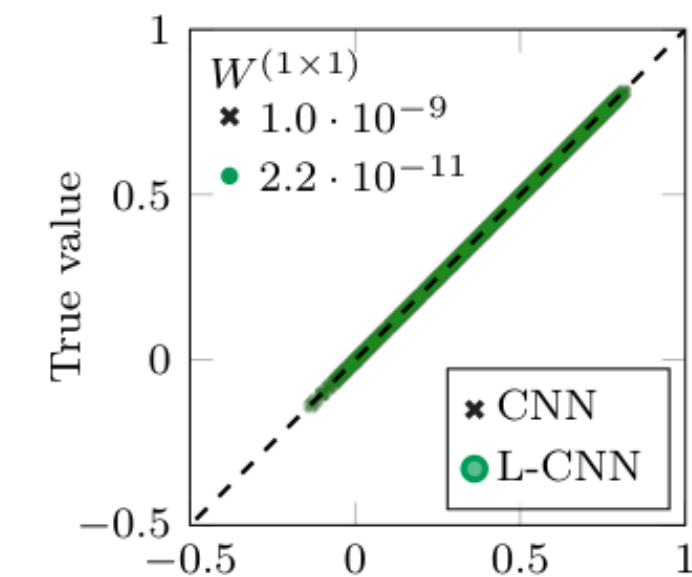
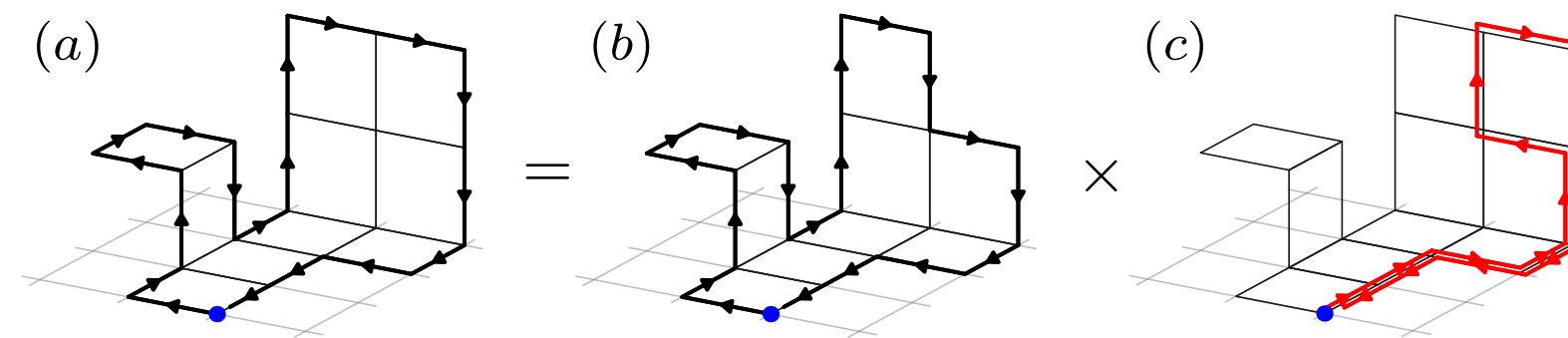
$$W'_a(x) = \sum_{b,c} b_{abc} W_b(x) W_c(x)$$

损失：监督回归的 MSE

$$\mathcal{L} = \mathbb{E}[(\hat{O}_\theta(U) - O(U))^2]$$

纯 SU(2) loop 回归：显著优于普通 CNN

保持精确等变性，并可迁移格点尺寸



GENN - 求解器

S. Pfahler, D. Knüttel, C. Lehner & T. Wettig · [2602.23840](#)

目标：学习 $M_\theta \approx D^{-1}$ 作为预条件子

用平行运输卷积 PTC 处理夸克场

组合长程 PT 路径与低模过滤损失

$$(M_\theta \psi)_a(x) = \sum_{p,b} A_{abp} U_p \psi_b(y_p)$$

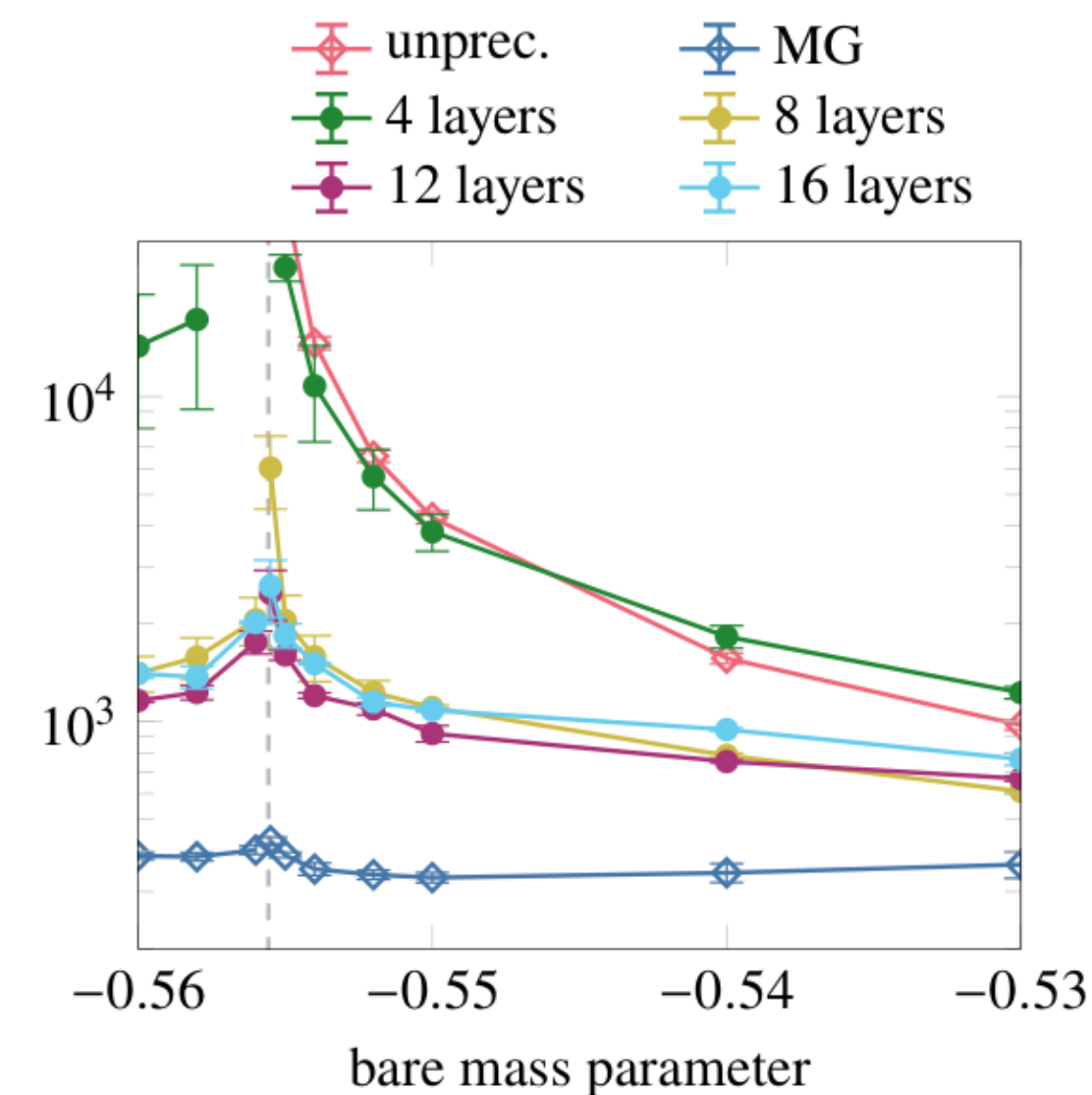
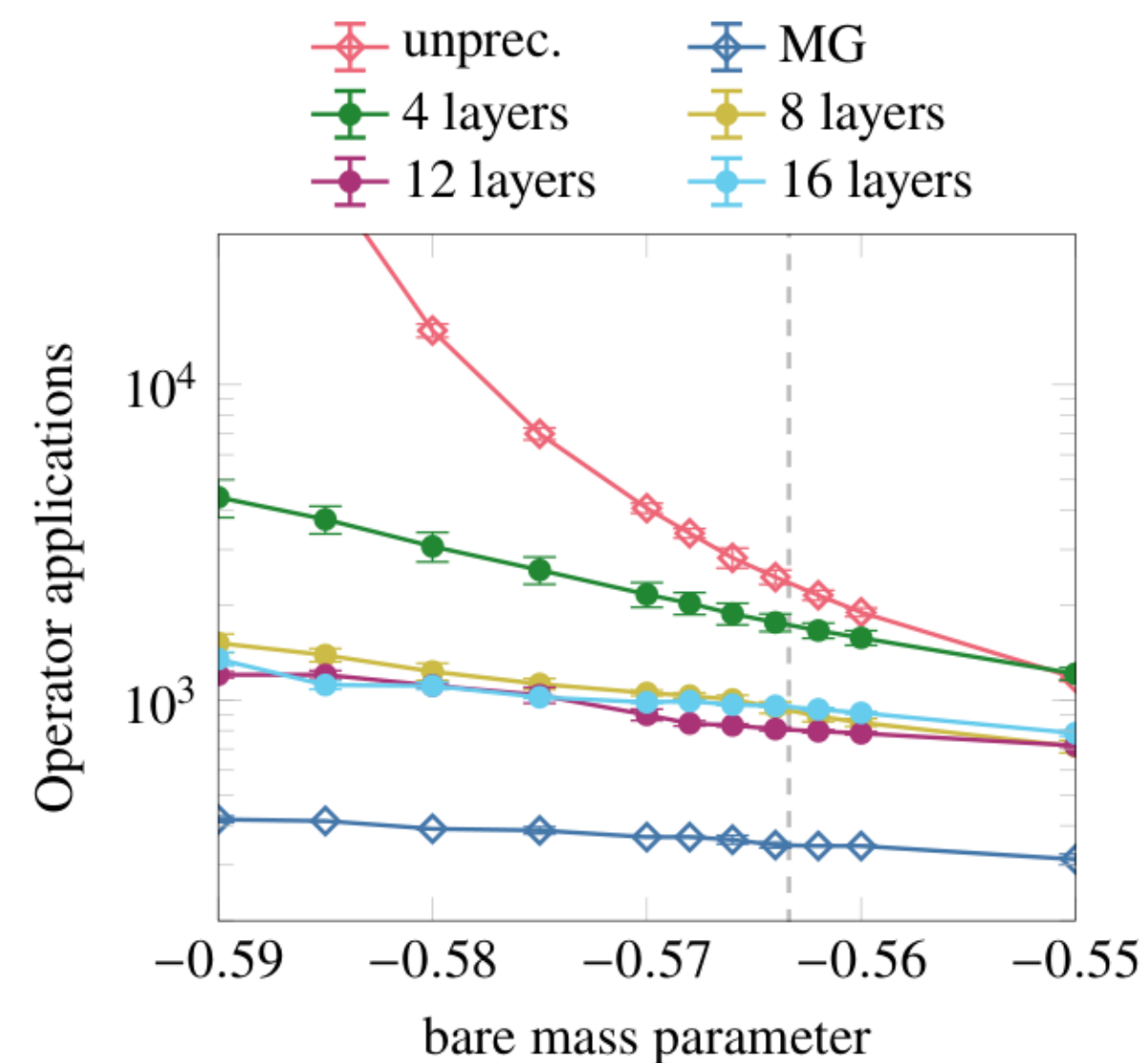
损失：GMRES 过滤向量上的近似逆误差

$$\mathcal{L}_N = \mathbb{E}_{u_N} [\|M_\theta D u_N - u_N\|_2^2]$$

收益按“算子应用次数”比较

$8^3 \times 16$ 、 $Q=1$ ：算子调用可减少 >10 倍

大体积 / 高拓扑荷：优势减弱



GENN - 测量

V. Bellscheidt, N. Brambilla, A. S. Kronfeld & J. Mayer-Steudte · [2602.02436](#)

规范等变网络构造路径组合

优化“算符”而非拟合观测量

以短时相关函数比值改善基态重叠

多算符 + GEVP 正交化：优化激发态

$$\tilde{S}_\theta(x, y) \rightarrow \Omega(x) \tilde{S}_\theta(x, y) \Omega^\dagger(y)$$

$$\max_\theta \frac{\langle \text{tr } \tilde{W}_\theta(r, t) \rangle}{\langle \text{tr } \tilde{W}_\theta(r, 0) \rangle}$$

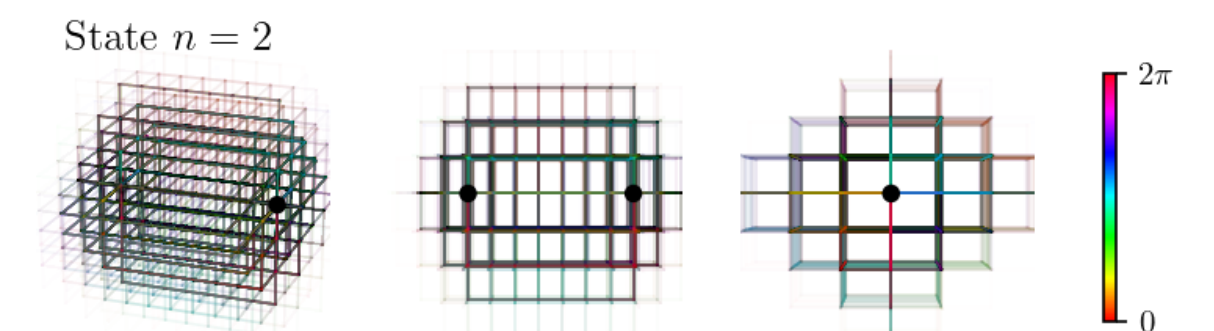
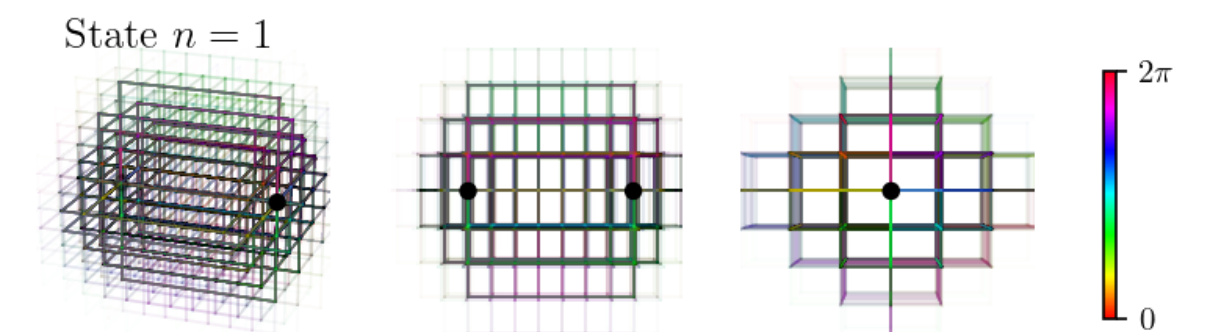
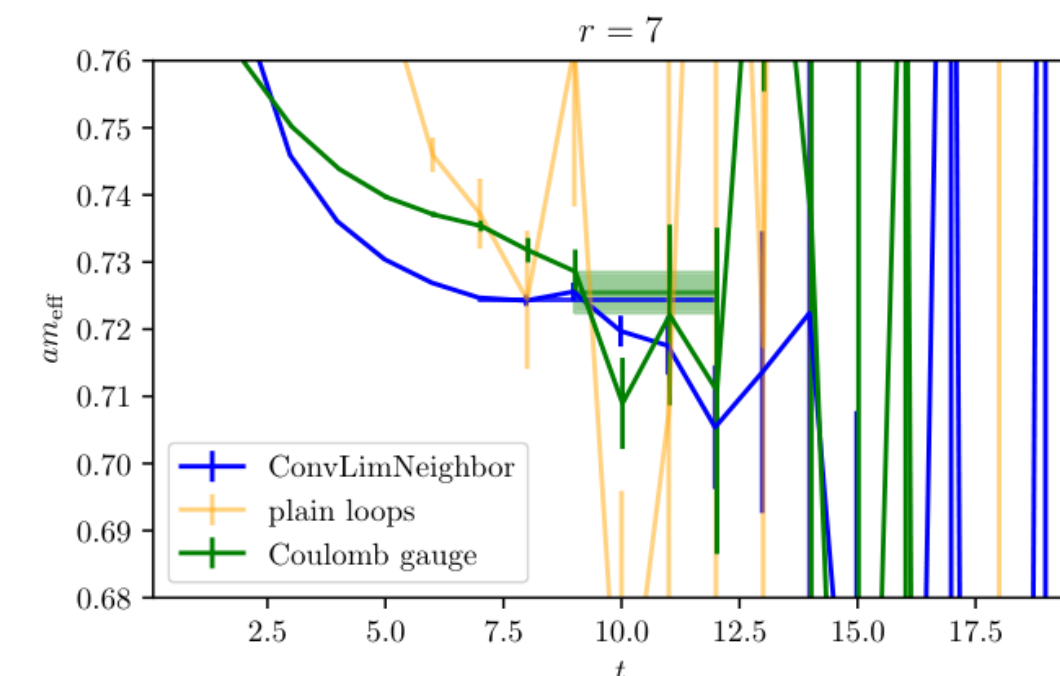
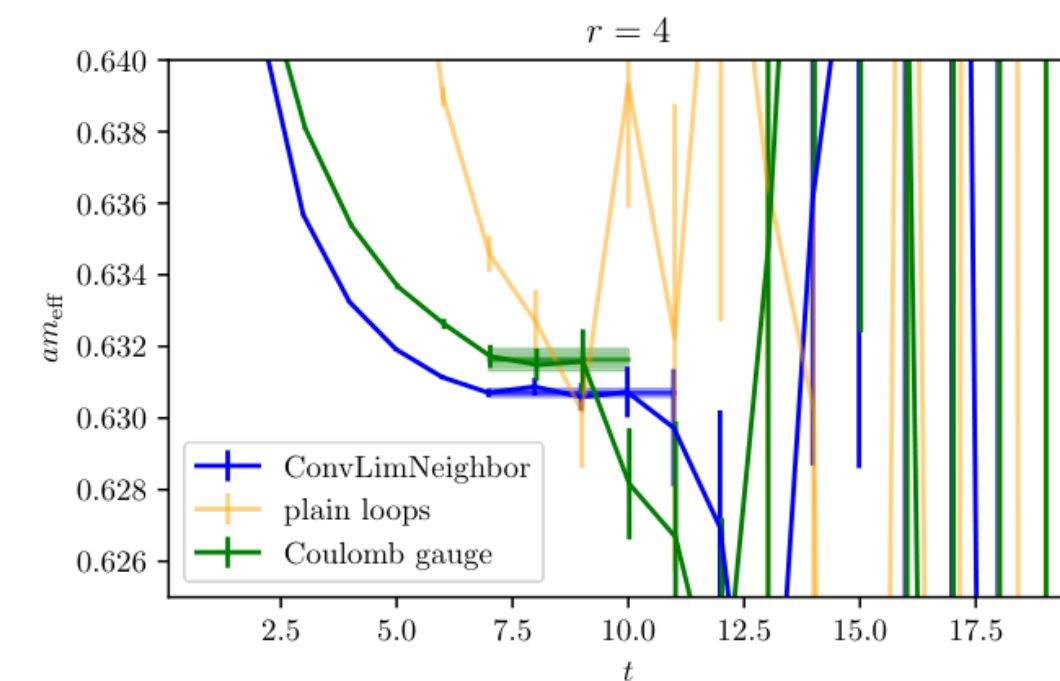
损失：相关函数比值 + 零时归一化惩罚

$$\mathcal{L} = - \sum_{t=1}^{t_{\max}} W_t \frac{C_\theta(t)}{C_\theta(0)} + W[C_\theta(0) - N]^2$$

神经算符达到与 Coulomb gauge 相近的

基态效果，同时保持规范不变；

还可接 multilevel 或测静态力。



Normalizing Flow - 组态产生

R. Abbott et al. · [2502.00263](#)

可逆映射：简单分布 $\rightarrow$ 近似目标分布
密度可计算，再以重加权 / MH 校正
staple network 组合冻结链路的路径
与 active link 合成可学习的 active loop
对 active loop 的谱特征做可逆变换

$$U = f_{\theta}(z), \quad q_{\theta}(U) = r(z) |\det J_{f_{\theta}}(z)|^{-1}$$

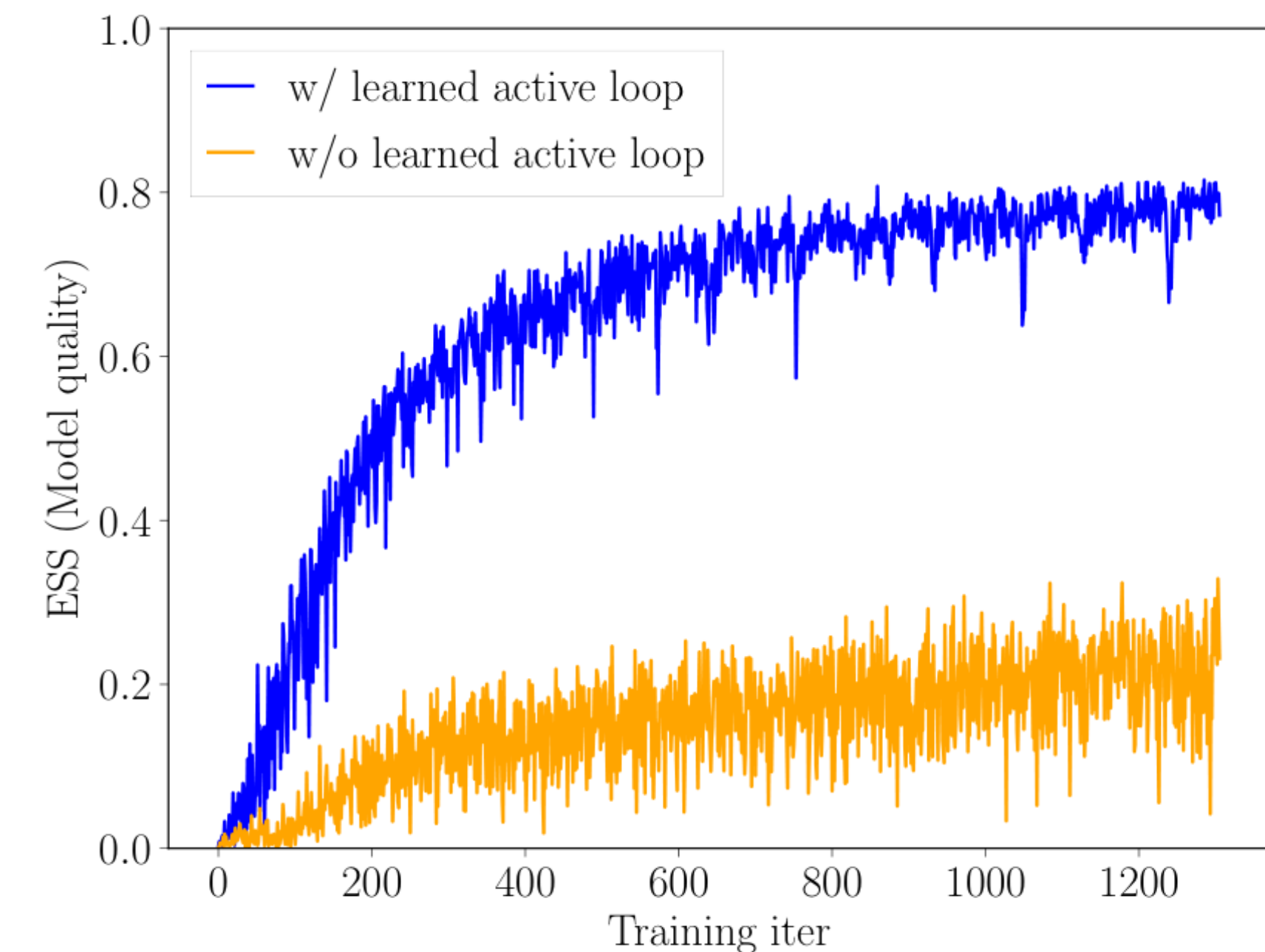
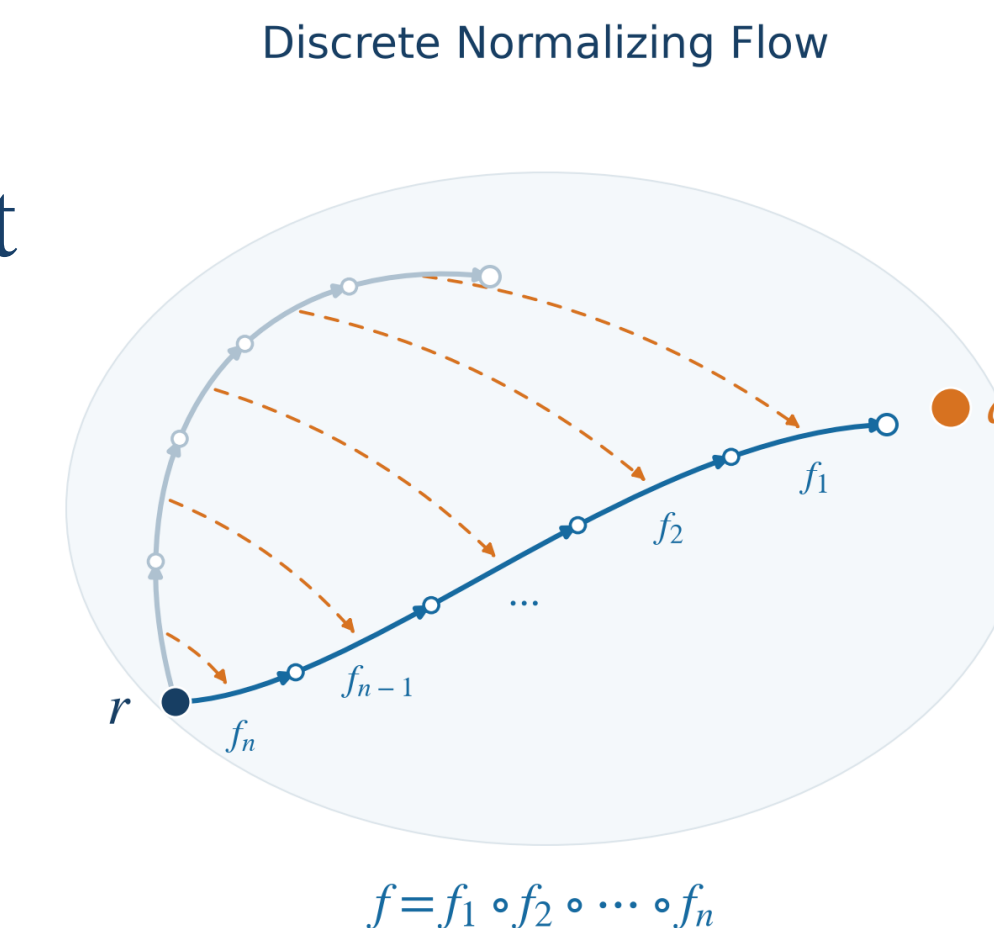
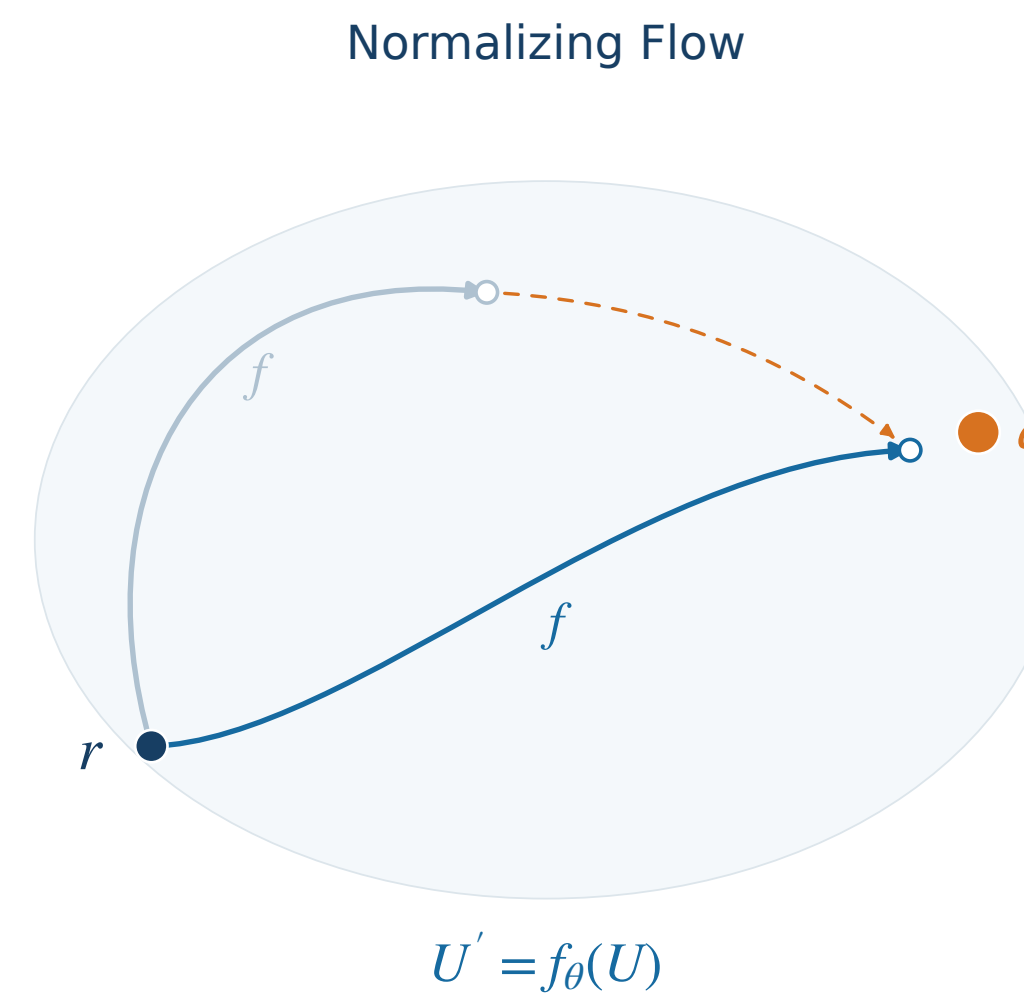
$$P_{\text{act}} = \text{Proj}_{SU(N)}[U_{\text{act}} S_{\theta}^{\dagger}(U_{\text{frozen}})]$$

损失：reverse KL divergence

$$\mathcal{L} = D_{\text{KL}}(q_{\theta} \| p) = \mathbb{E}_{q_{\theta}}[\log q_{\theta} + S] + \text{const}$$

右图：其他设置相同，learned active loops
将 ESS 从约 20% 提高到约 80%

4⁴ 纯规范



Continuous Normalizing Flow - 组态产生

M. Gerdes, P. de Haan, R. Bondesan & M. C. N. Cheng · [2410.13161](#)

网络给出组态此刻的运动方向和速度
用 ODE 积分器沿速度场连续推进组态
无需求解完整的 Jacobian 矩阵
同步跟踪概率密度，再用 MH 校正

TABLE II. Effective sample sizes for normalizing flows for $SU(2)$ and $SU(3)$ on 16×16 lattice compared to previous work. Best values in bold.

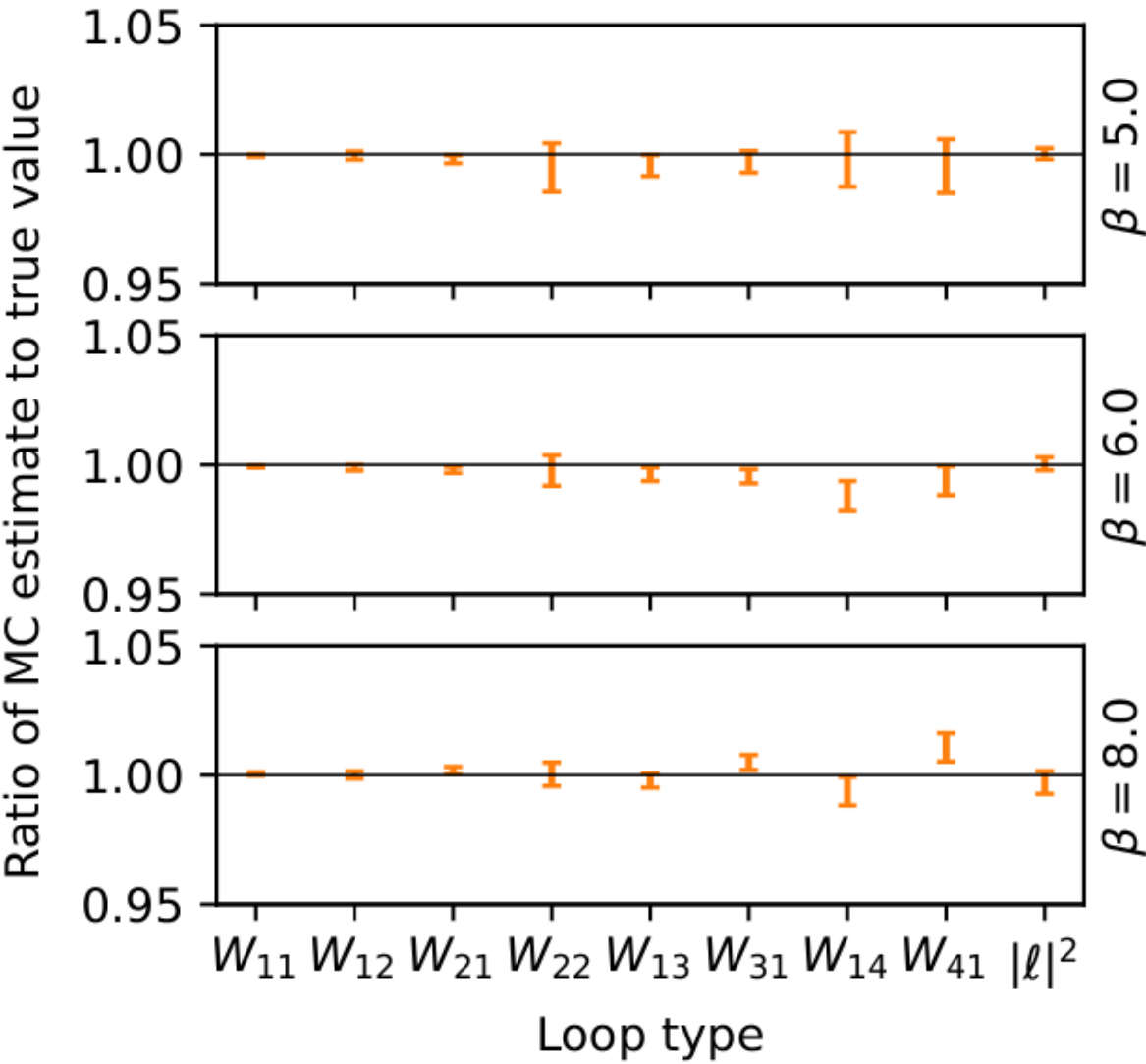
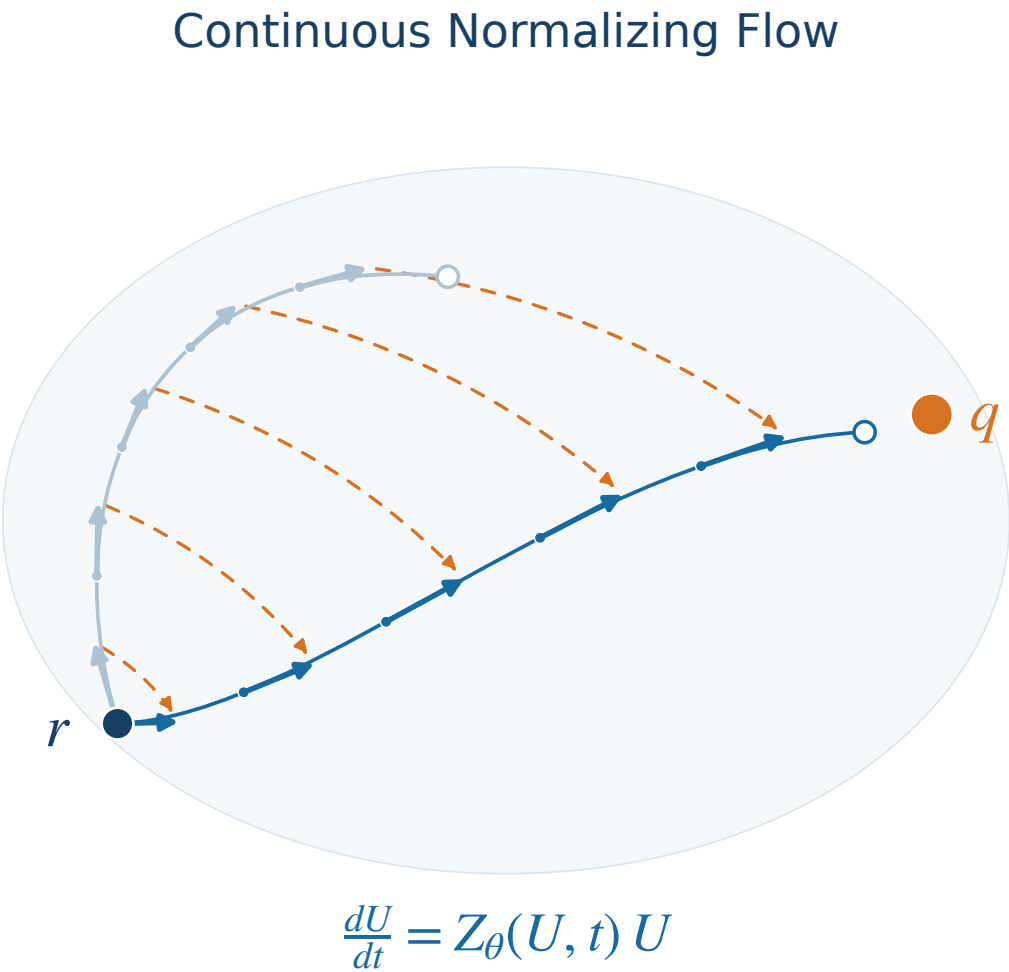
ESS [%]	SU(2)		SU(3)		
	$\beta = 2.2$	$\beta = 2.7$	$\beta = 5$	$\beta = 6$	$\beta = 8$
Continuous flow	87	68	86	76	23
Bacchio et al [16]	—	—	88	70	—
Boyda et al [8]	80	56	75	48	—

$$\dot{U}_e = \sum_a Z_e^a T^a U_e$$
$$Z_e^a = \sum_{k, \bar{x}} \Lambda_{\bar{x}}^k(t, W) \partial_a^e W_k(\bar{x})$$
$$\frac{d}{dt} \log q_t(U(t)) = - \sum_{e,a} \partial_a^e Z_e^a$$

损失：reverse KL divergence

$$\mathcal{L} = D_{\text{KL}}(q_T \| p) = \mathbb{E}_{q_T}[\log q_T + S] + \text{const.}$$

2D $SU(2)$ / $SU(3)$: 报告 ESS 与接受率
经 MH 校正的观测量符合解析值
所测较大 β 处，模型质量仍下降



Stochastic Normalizing Flow - 组态产生

A. Bulgarelli, E. Cellini & A. Nada · [2412.00200](#)

可学习的 flow 与 Monte Carlo 更新交替
逐步改变 β ，将初始系综推进到目标系综
最终通过重加权得到目标分布的观测量

$$U_0 \xrightarrow{g_{\theta,1}} V_1 \xrightarrow{K_{\beta_1}} U_1 \dots$$

$$w = e^{-W}, \quad \langle O \rangle_p = \frac{\mathbb{E}_F[w O(U_N)]}{\mathbb{E}_F[w]}$$

最小化耗散功；实际采用逐层损失

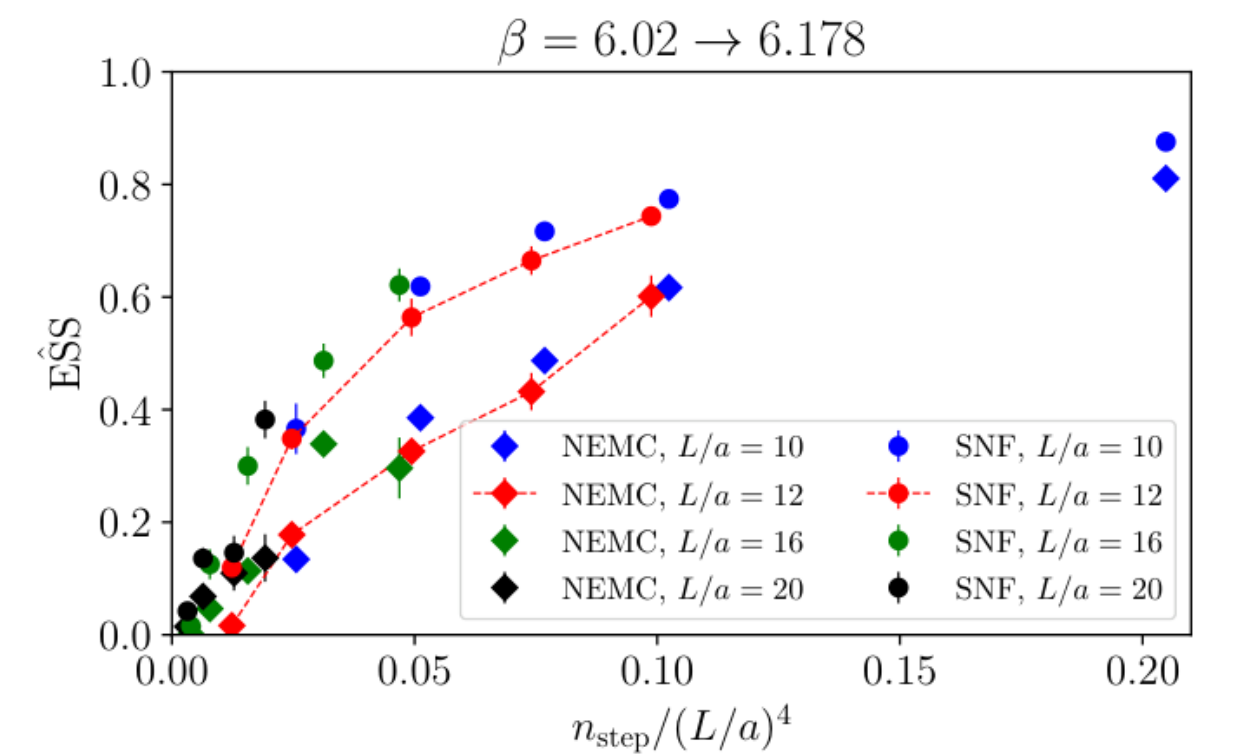
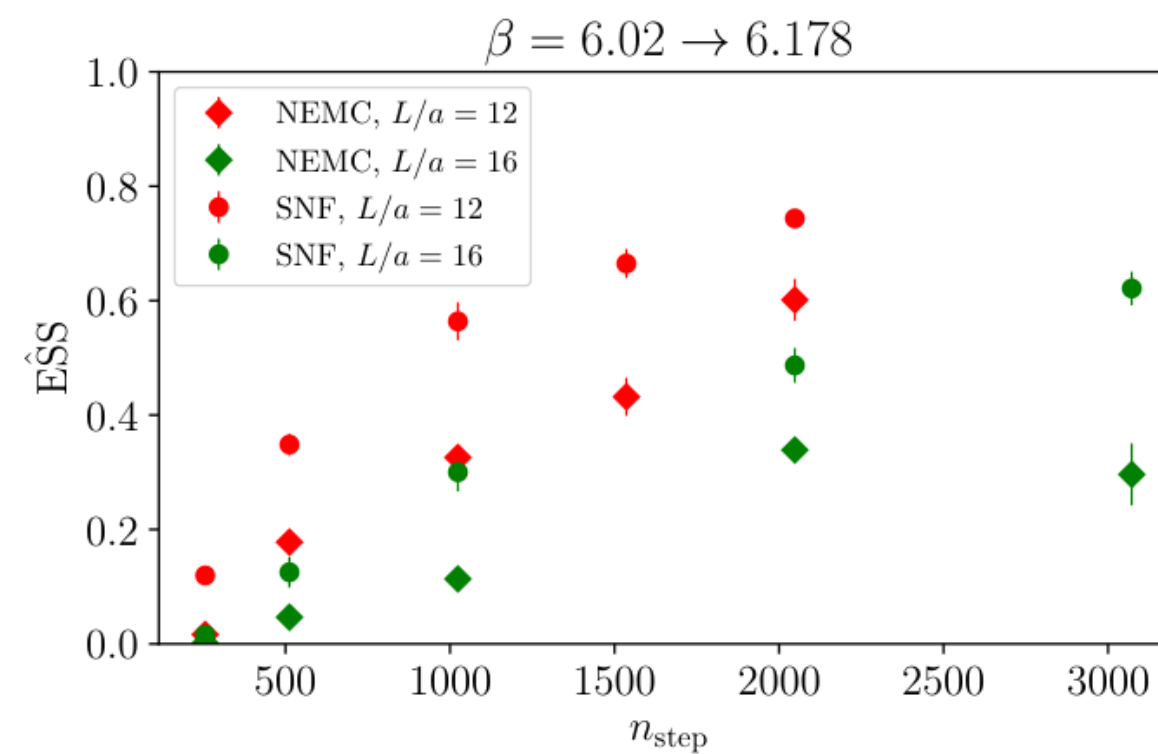
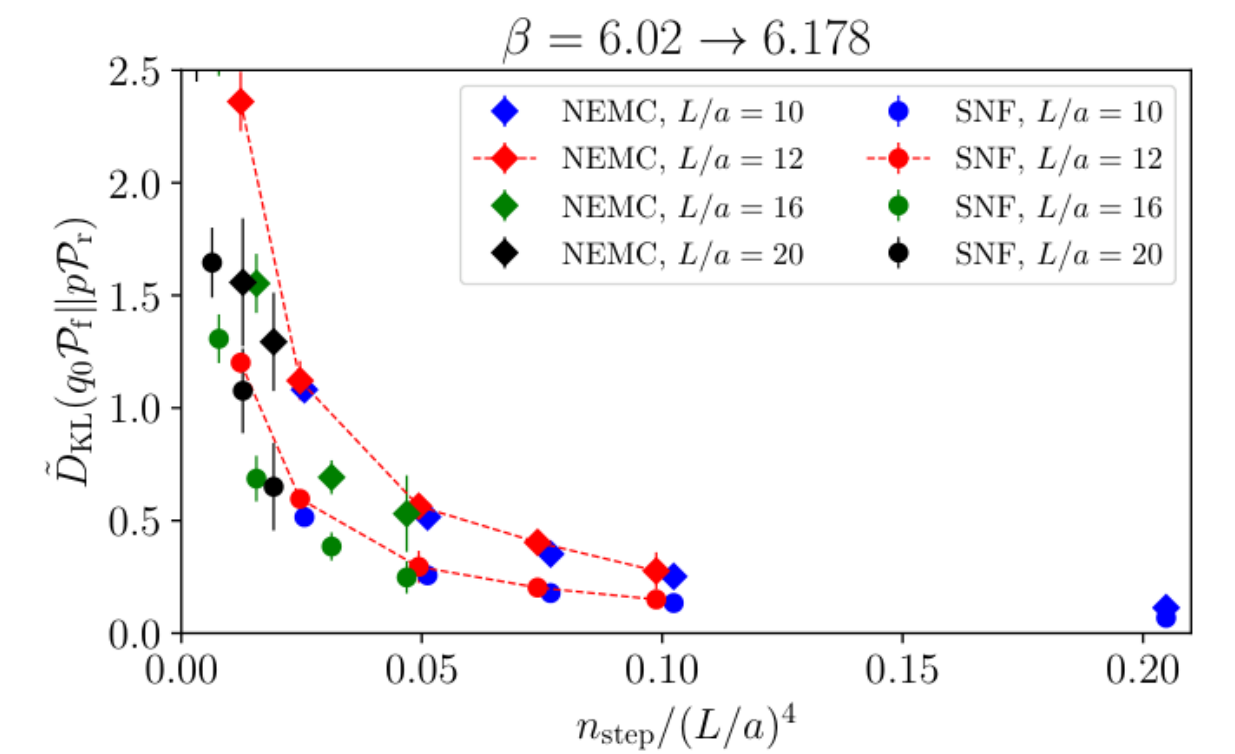
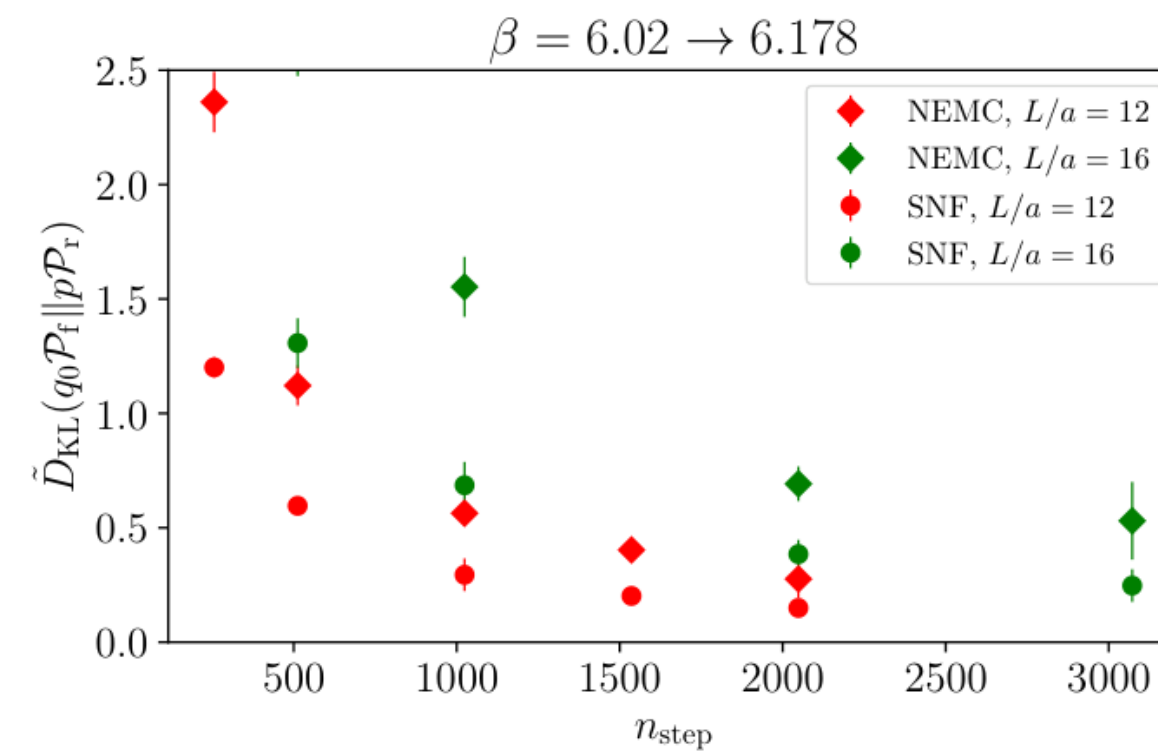
$$\langle W_d \rangle_F = D_{\text{KL}}(q_0 P_F \| p P_R)$$

$$\mathcal{L}_n = \mathbb{E}[S_{n+1}(V) - S_n(U) - \log |\det J_g(U)|]$$

相同路径 KL：所需步骤约减半

stout 层成本约为一次 MCMC 更新的 25%

固定质量时，步骤数近似随体积增长



Residual Flow - 测量

R. Abbott et al. · [2606.15986](#)

用未归一化权重估计生成泛函

$$Z_\lambda = \int DU e^{-S(U) + \lambda \cdot O(U)}, \quad \frac{Z_\lambda}{Z_0} = \langle \hat{w}_\lambda \rangle_0$$

$$C_n \equiv \langle O_1 \cdots O_n \rangle_0 = \left. \partial_{\lambda_1} \cdots \partial_{\lambda_n} \frac{Z_\lambda}{Z_0} \right|_{\lambda=0}$$

$$\langle O_i O_j \rangle_c = \left. \partial_{\lambda_i} \partial_{\lambda_j} \log Z_\lambda \right|_{\lambda=0}$$

训练各单源 flow, 降低权重涨落

$$\mathcal{L}_i(\theta) = D_{\text{KL}}(q_{\theta,i} \| p_{\lambda_i}) = \log \frac{Z_{\lambda_i}}{Z_0} - \langle \log \hat{w}_{\lambda_i} \rangle_0$$

完整多源 flow 的理想极限 (零点邻域)

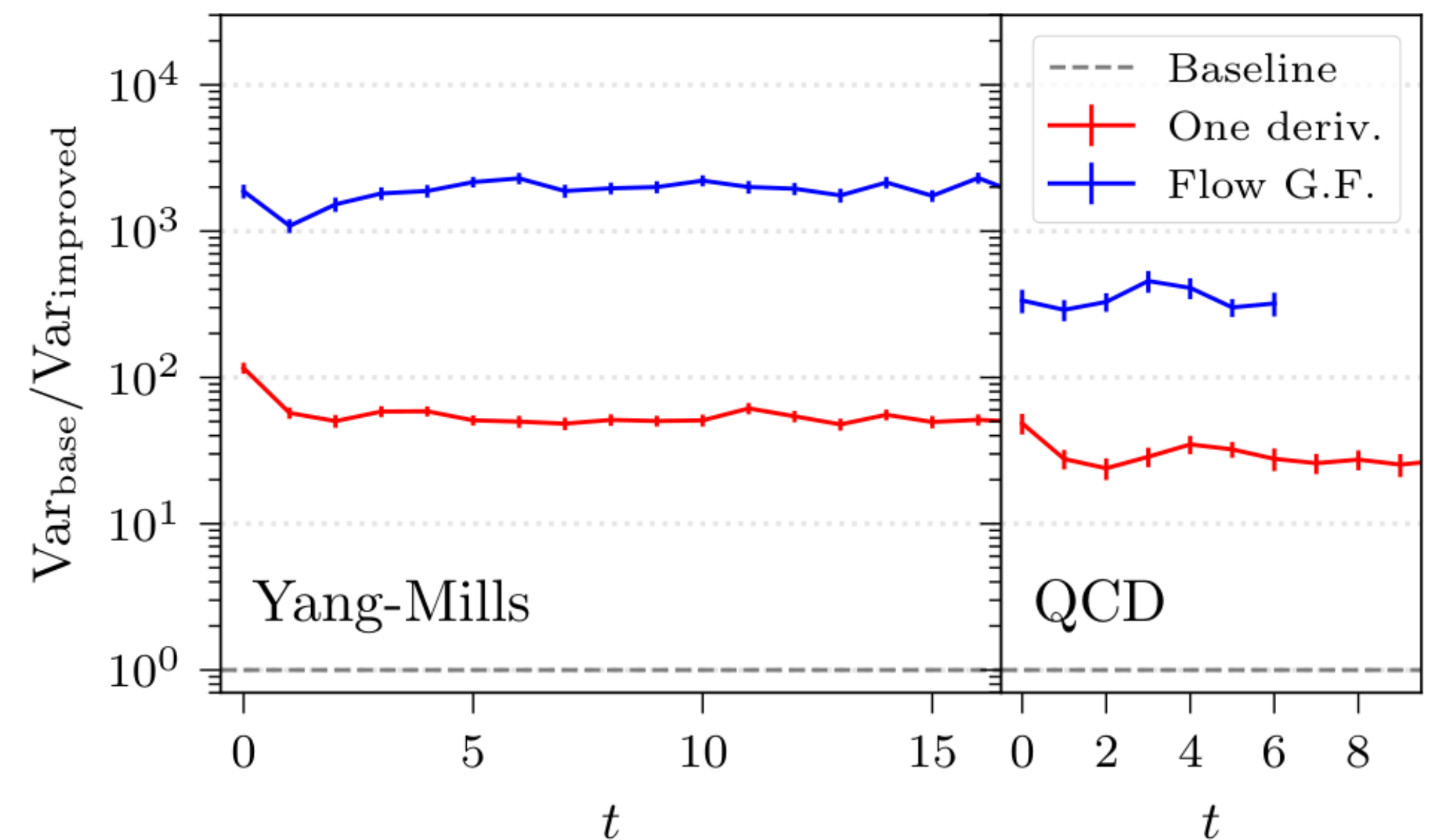
$$q_{\theta,\lambda} = p_\lambda \implies \hat{w}_\lambda(U) = \frac{Z_\lambda}{Z_0}$$

$$c_n(U) \equiv \left. \partial_{\lambda_1} \cdots \partial_{\lambda_n} \hat{w}_\lambda(U) \right|_{\lambda=0}$$

$$\text{Var}[c_n] = \lim_{\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{\lambda^2} \left(\frac{1}{\text{ESS} - 1} \right)$$

掩码残差层 + 规范等变卷积

分解 flow 与平移复用 (实用近似)



胶球关联函数: YM 方差约降 2000 倍

Nf=2 QCD: 超过 100 倍; m_pi ≈ 600 MeV

16^3 × 32; 方差降低倍数不等于耗时加速比

Riemannian Manifold HMC - 组态产生

C. Jung & N. H. Christ · [2401.13226](#)

将动量质量矩阵改为场依赖的 $M(U)$

$M(U)$ 由规范协变 Laplacian 构造

按 Laplacian 模调节动量的质量尺度

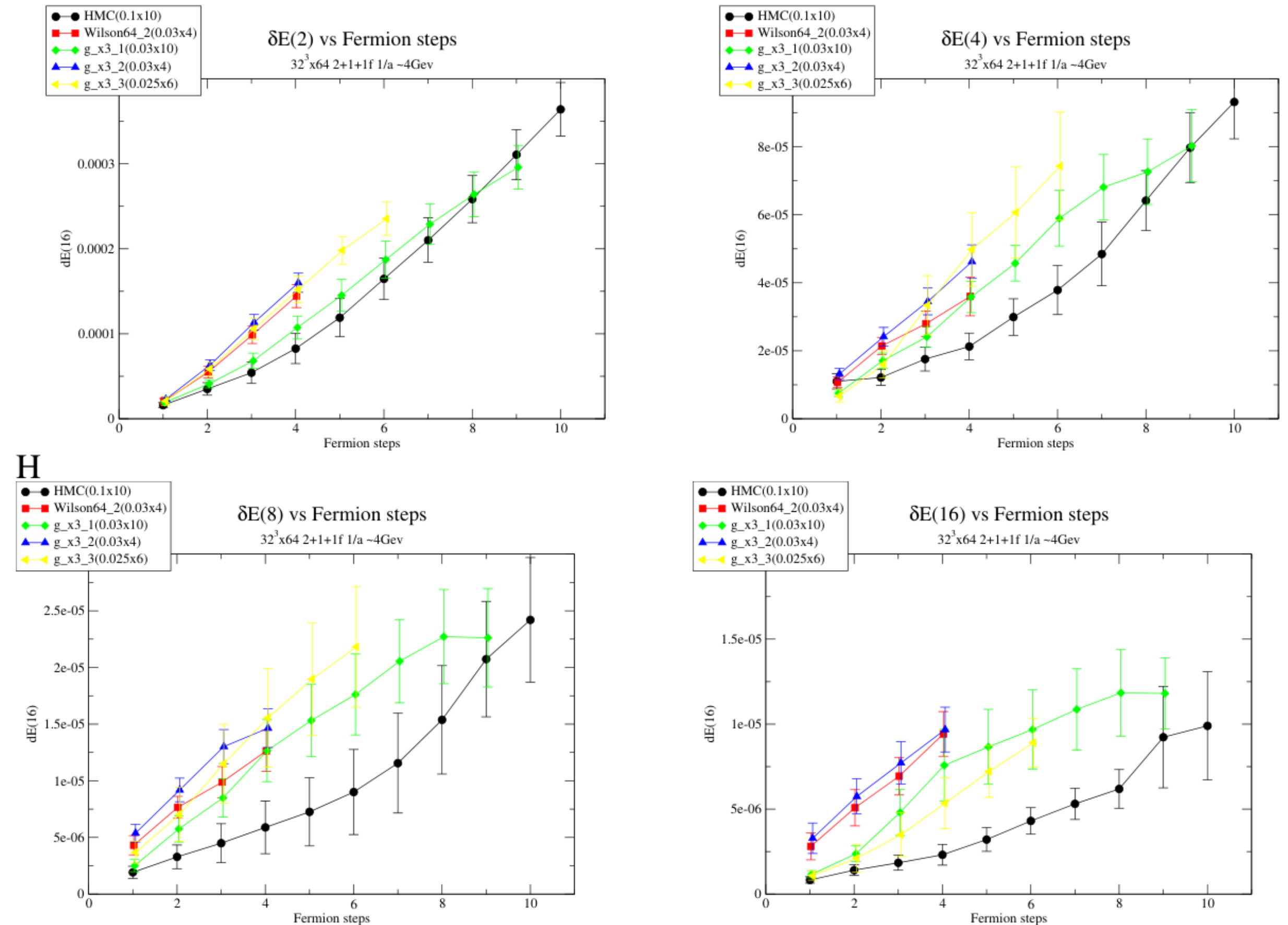
辅助场补偿行列式；使用隐式积分

$$H = S_G(U) + S_F(U) + \frac{1}{2} \sum_{\mu} p_{\mu}^{\dagger} M(U)^{-1} p_{\mu} + \frac{1}{2} \sum_{\mu} [\pi_{\mu}^{\dagger} M(U) \pi_{\mu} + \phi_{\mu}^2]$$
$$M(U)^{-1} = (G[\nabla^2])^2$$

$N_f=2+1+1$ DWF, $a \approx 0.05$ fm

每个费米子积分步，长流时 $E(t)$ 变化增大

该图衡量 MD 推进，不是总耗时加速



Neural Network Transform HMC - 组态产生

J. He, X.-Y. Jin, J. C. Osborn & Y. Zhao · [2511.02018](#)

学习可逆场坐标变换

在变换后的作用量上运行 HMC

不同 p 范数兼顾平均力与 force 尖峰

$$V = f_{\theta}(U)$$

$$S_{\text{eff}}(U) = S(V) - \log |\det J_{f_{\theta}}(U)|$$

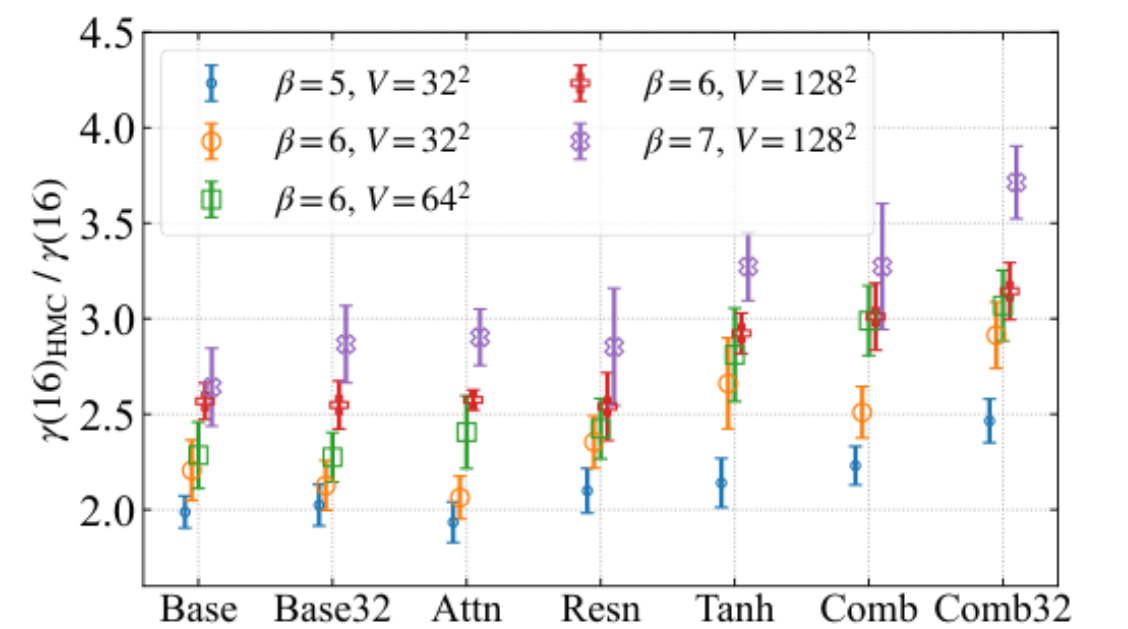
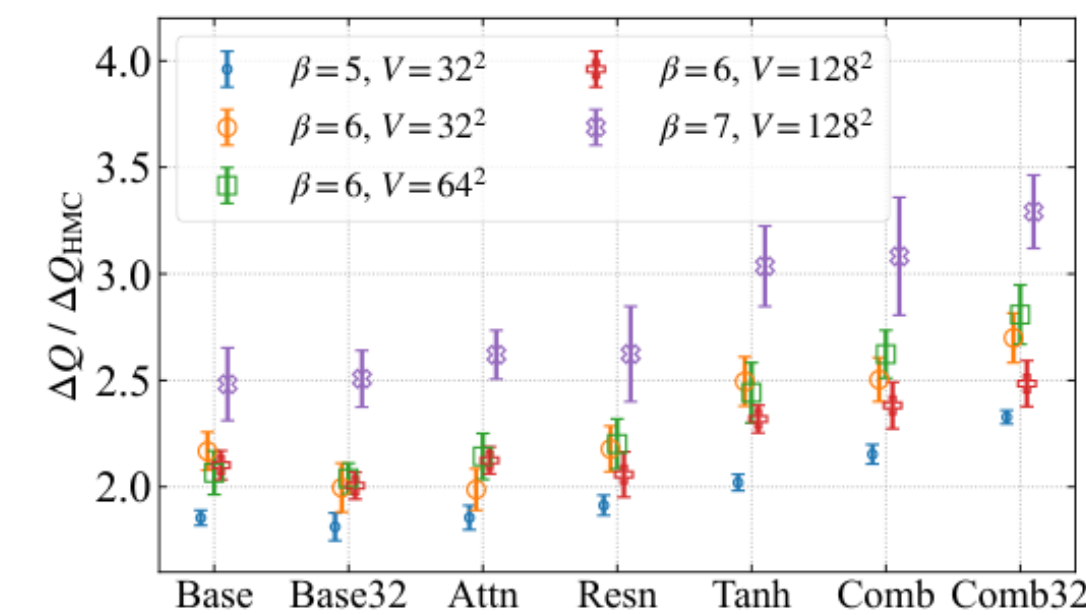
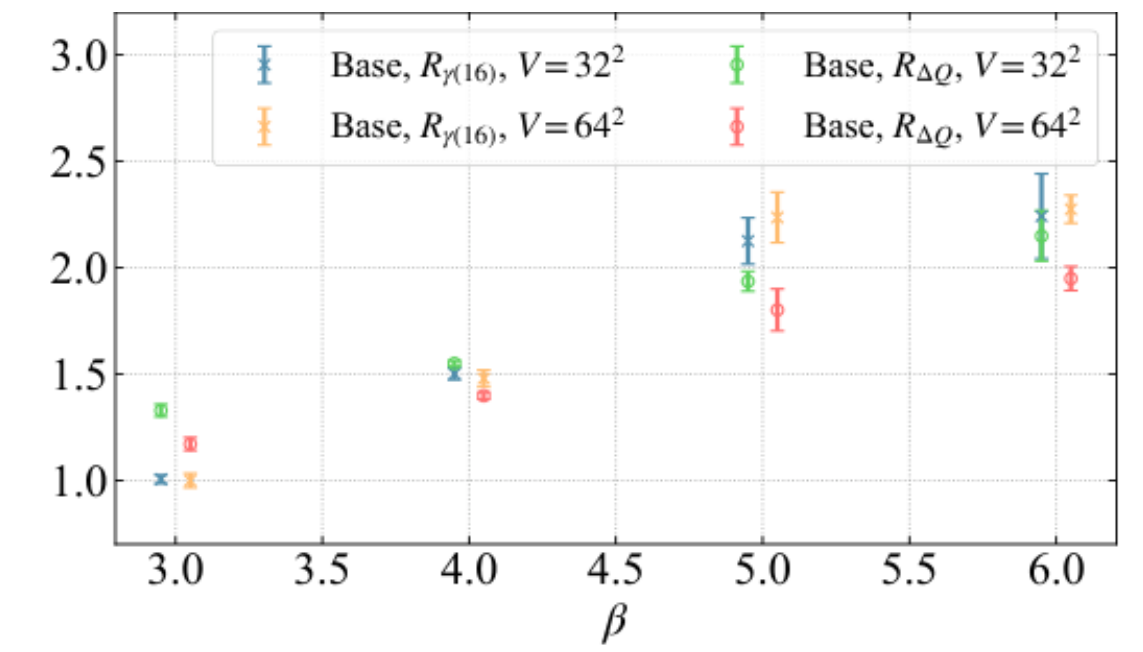
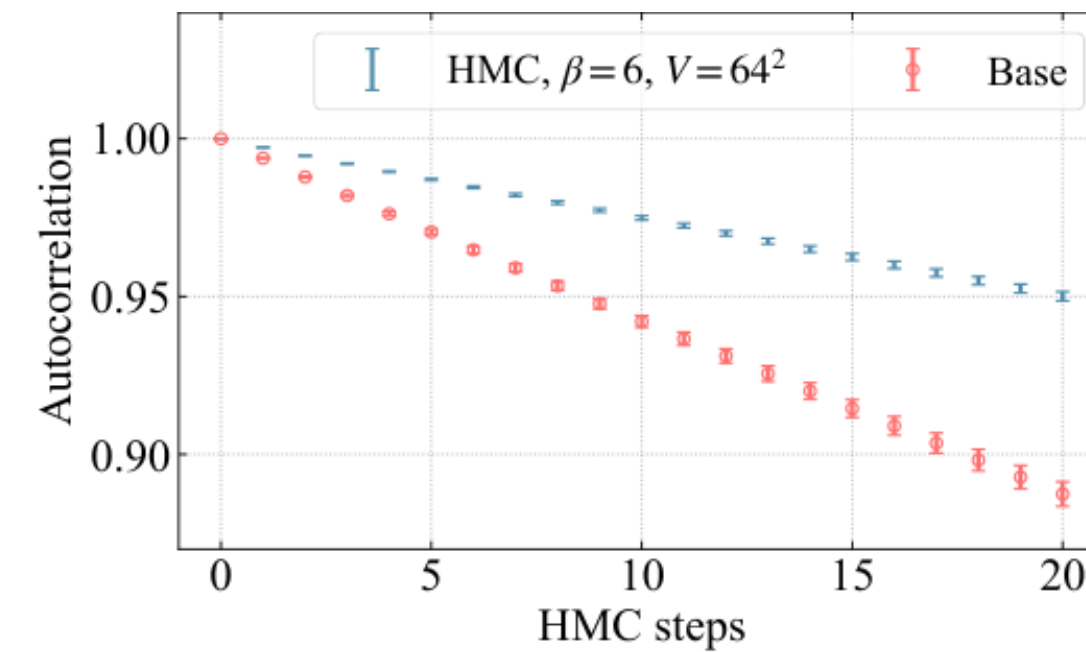
损失函数

$$\mathcal{L} = \mathbb{E} \left[\sum_{p \in \{2,4,6,8\}} c_p V_{\text{lat}}^{-1/p} \|\partial_U S_{\text{eff}}(U)\|_p \right]$$

2D U(1): 免重训迁移至更大 β / 体积

图中指标: $\gamma(16)$ 与每步拓扑变化 ΔQ

这篇工作的数值验证限于 2D U(1)



Parallel Tempering

多个副本各自按自己的作用量演化
在相邻副本间交换整个组态

容易隧穿的副本帮助越过势垒

物理副本保持目标参数并承担测量

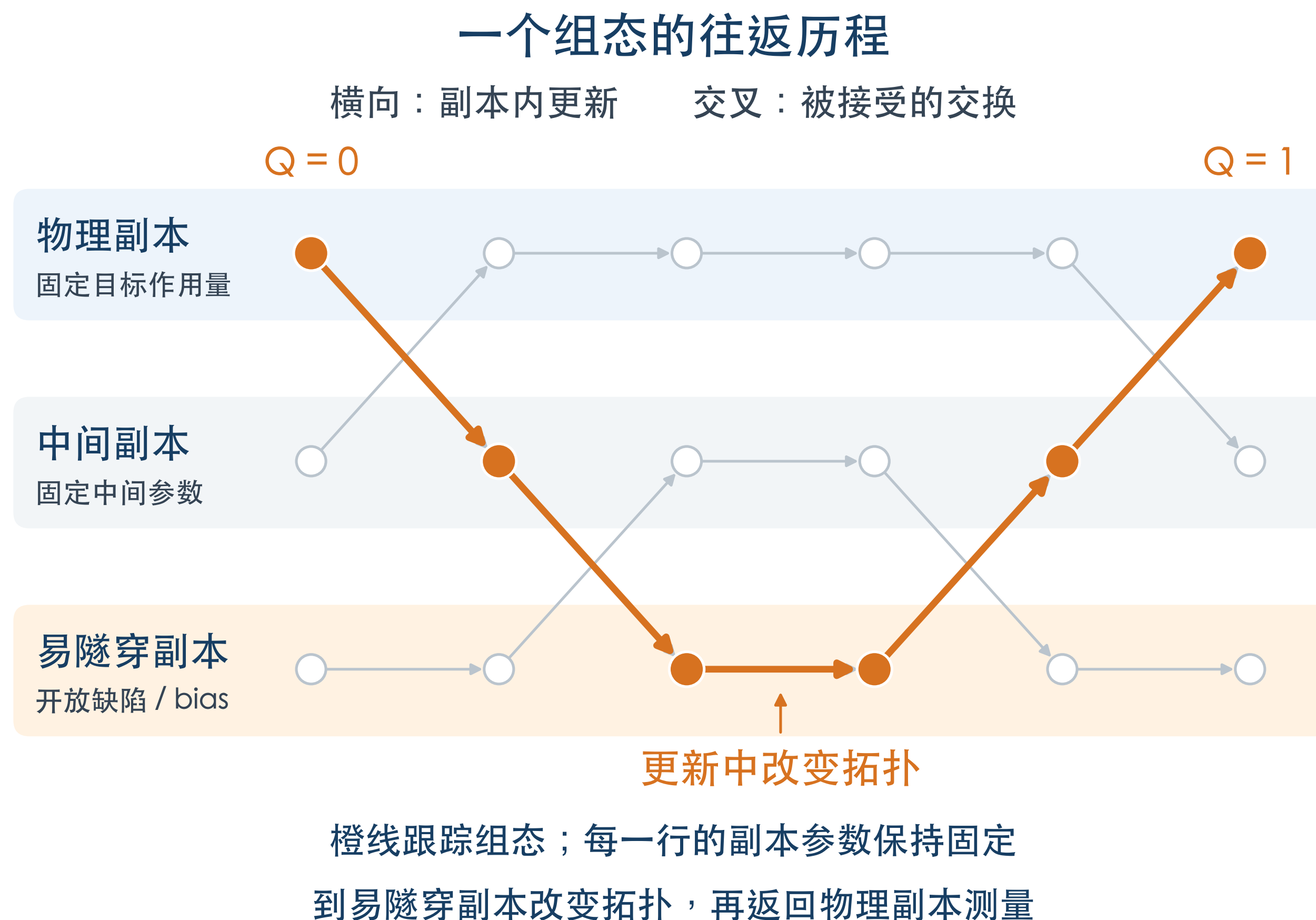
无偏物理副本上的测量无需重加权

通过边界条件或 bias 构造易隧穿副本

$$\pi(\{U_i\}) \propto \prod_i e^{-S_i(U_i)}$$

$$A_{\text{swap}} = \min(1, e^{-\Delta}),$$

$$\Delta = S_i(U_j) + S_j(U_i) - S_i(U_i) - S_j(U_j)$$



PT on Boundary Conditions - 组态产生

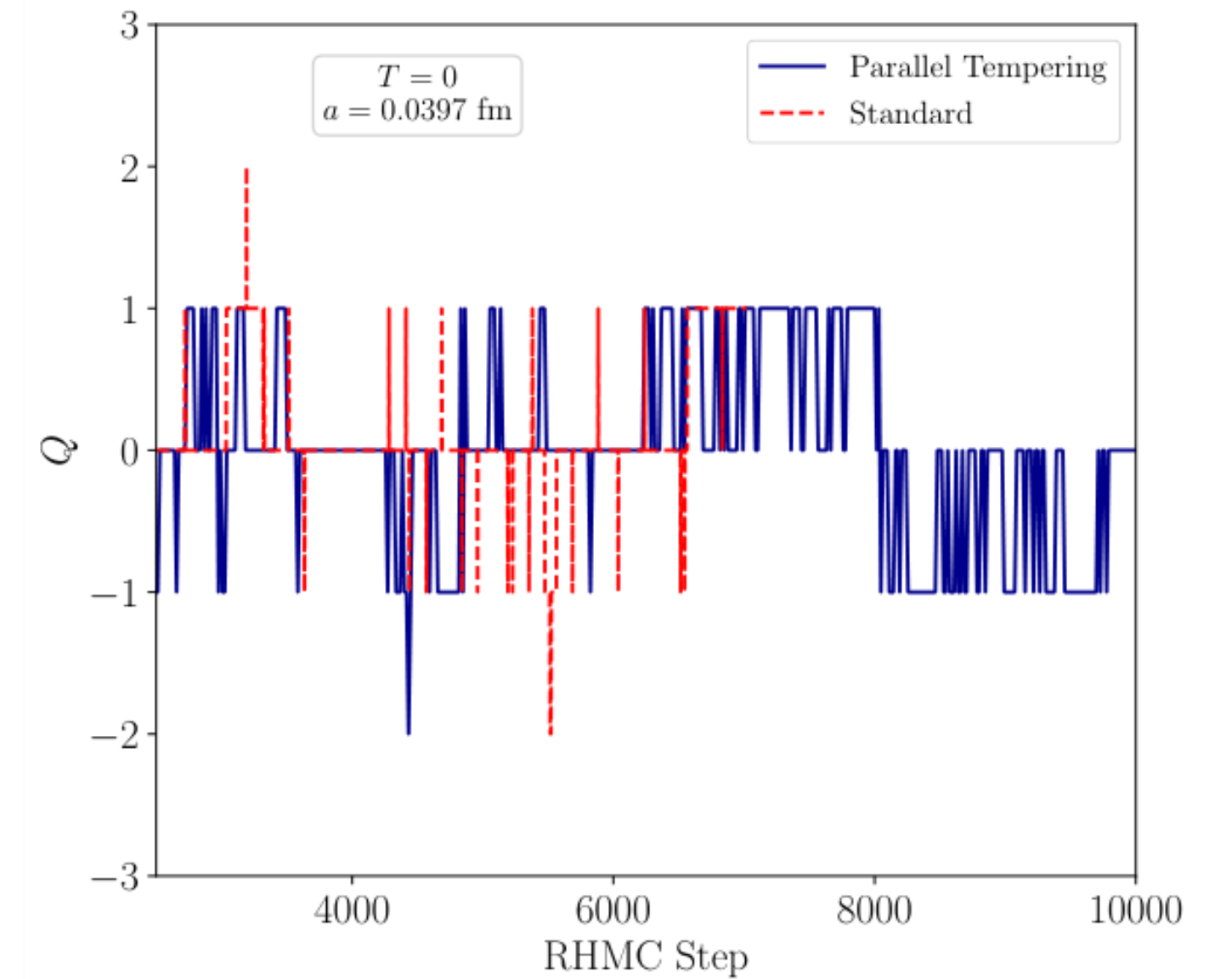
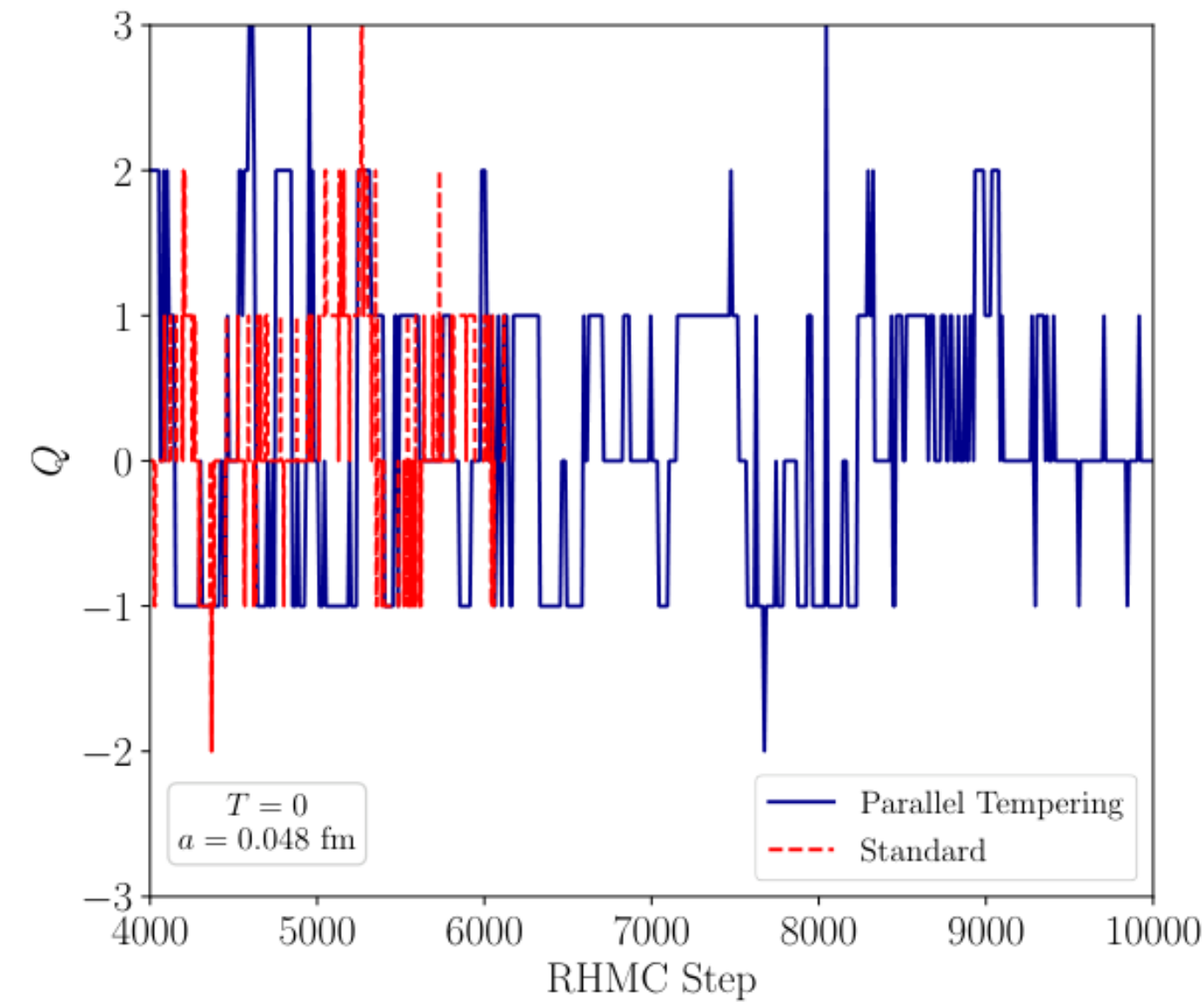
C. Bonanno et al. · [2404.14151](#)

规范作用量：调节边界缺陷链路

费米子边界保持不变

周期规范场副本承担物理测量

$$S_c(U) = S_g[U; K_c] + S_f(U)$$
$$c = 1 \longleftrightarrow \dots \longleftrightarrow c = 0$$



物理点 $N_f=2+1$ ；右图为零温结果

$a \approx 0.0215$ fm：有限温度 + multicanonical

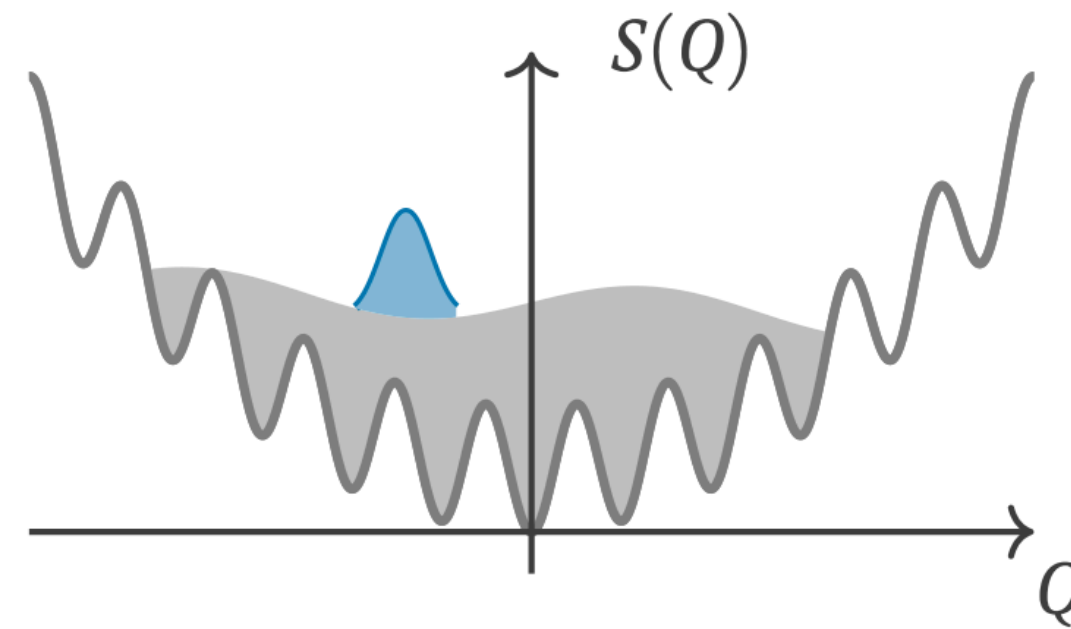
自相关收益须折算多副本成本

PT Metadynamics - 组态产生

T. Eichhorn, G. Fuwa, C. Hoelbling & L. Varnhorst · [2607.21575](#)

普通 MetaD 原理示意

$$V_t(Q) = \sum_{t' \leq t} g(Q - Q(t'))$$
$$g(Q) = w \exp(-Q^2 / (2\delta Q^2))$$



生产阶段冻结拓扑 bias 势
biased 副本跨越拓扑势垒
与 unbiased 目标副本交换

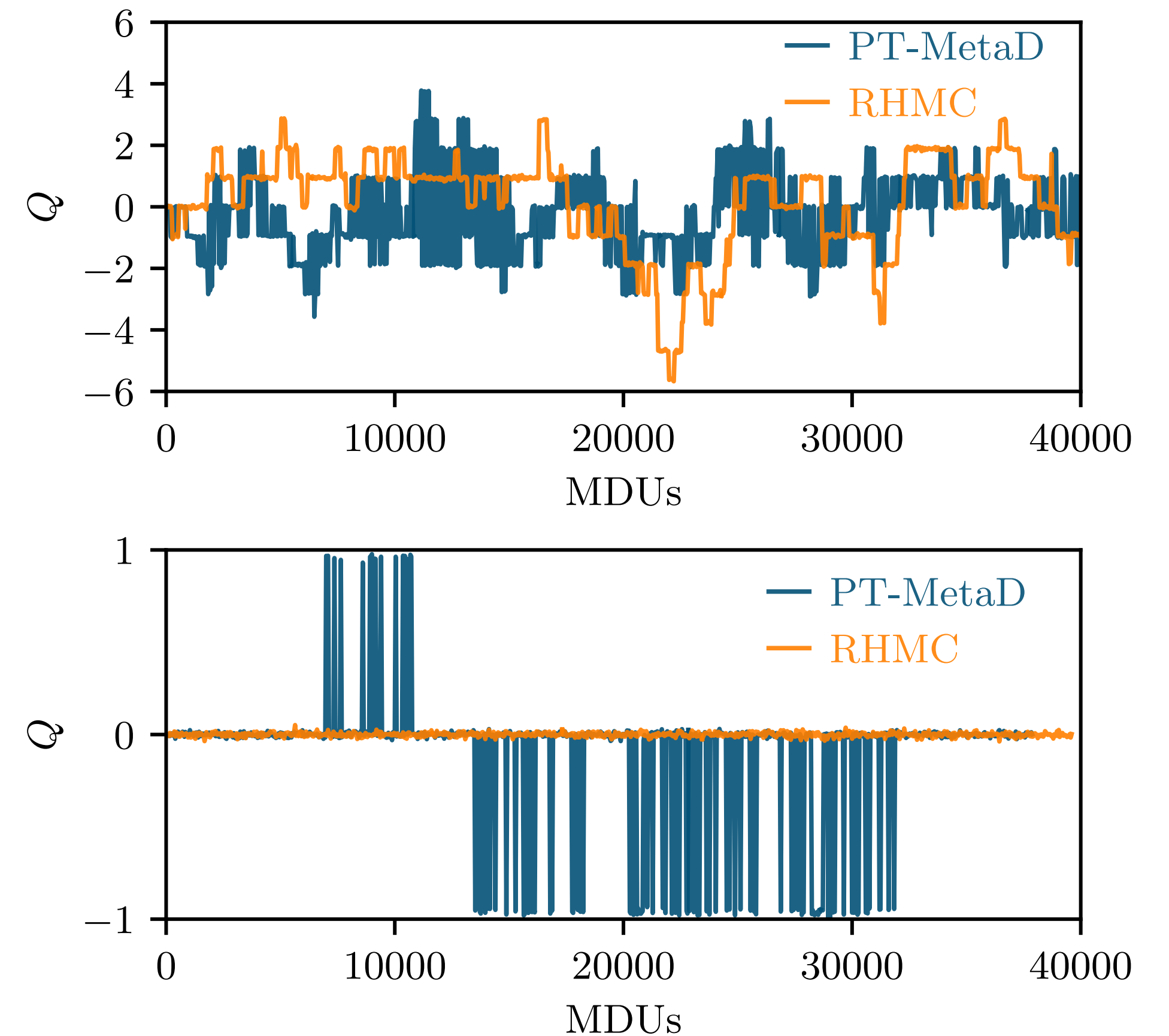
$$S_0(U) = S(U), \quad S_b(U) = S(U) + V(Q_{CV}(U))$$

$$A_{\text{swap}} = \min\{1, e^{V(Q_b) - V(Q_0)}\}$$

Nf=2 staggered: 细参数点 RHMC 冻结约 40,000 MDU

PT-MetaD 恢复拓扑变化 (非物理质量)

粗参数点 χ_t 的 CPU 效率: $\times 3.0$; 含 setup 为 $\times 1.82$



Lanczos Algorithm - 分析

W. Detmold et al. · [2601.22272](#)

输入欧氏两点 / 三点关联函数

构造转移矩阵 Krylov 子空间

Lanczos 小矩阵给出能级与矩阵元

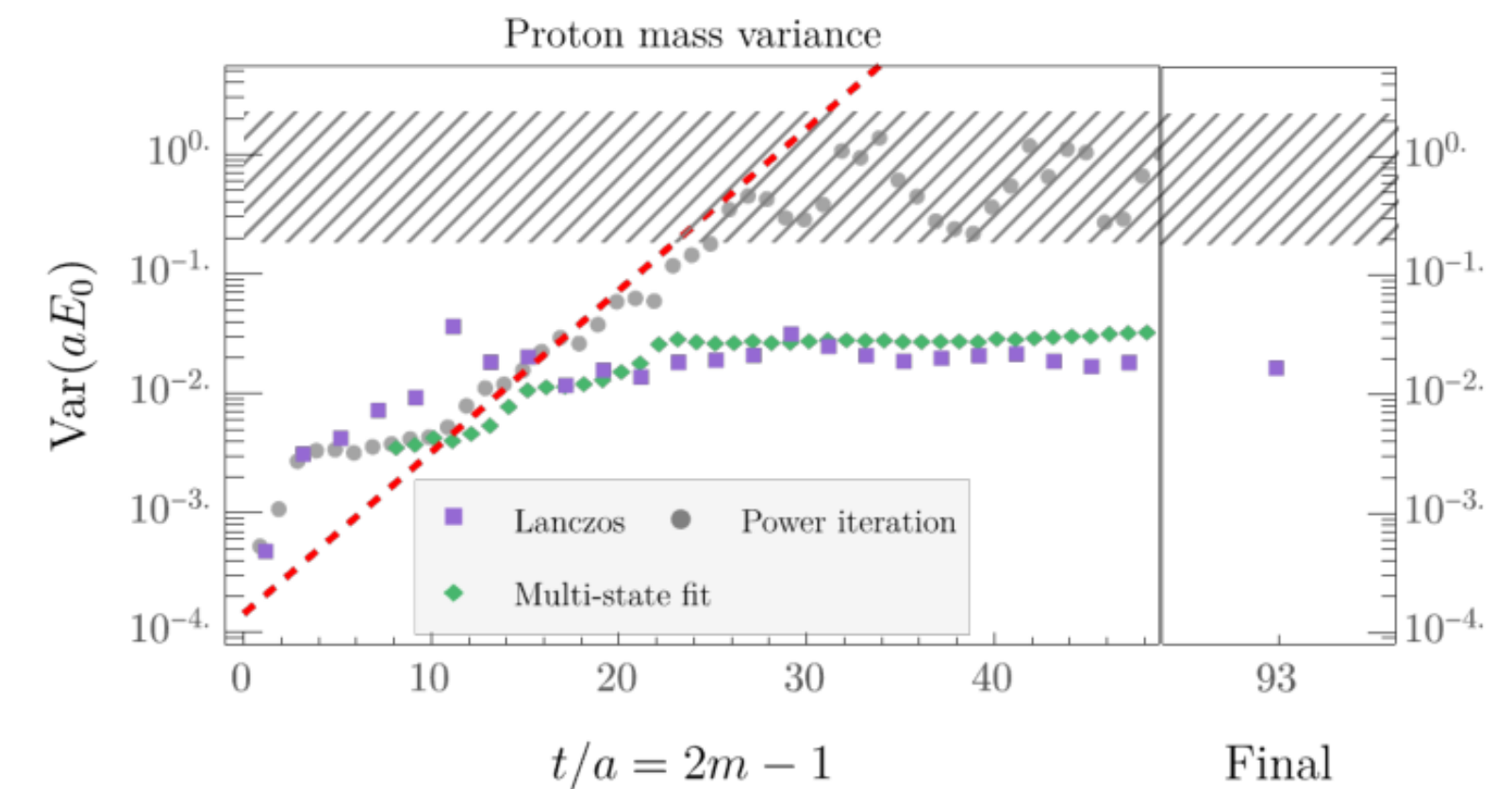
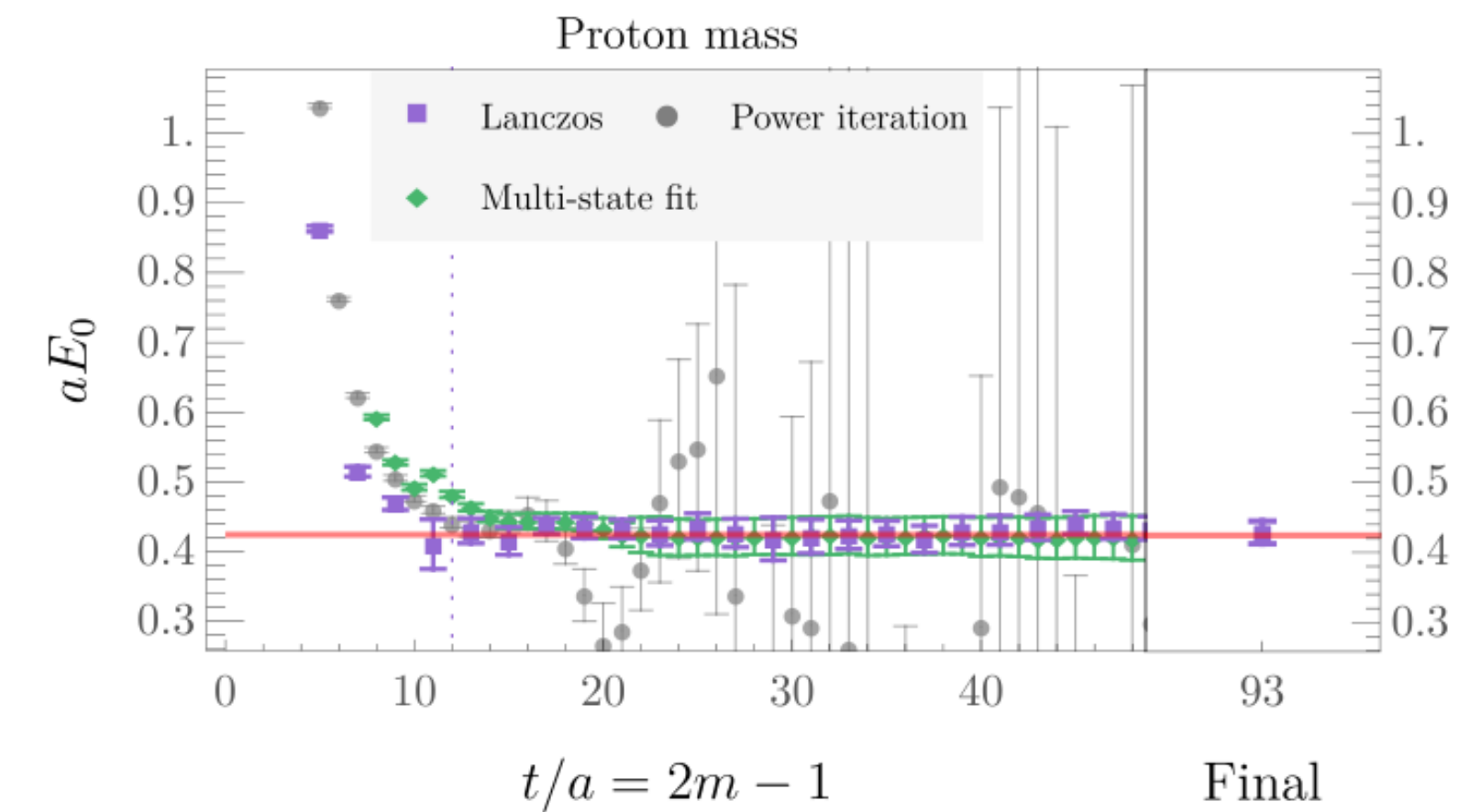
图示基准：比有效质量更早抑制激发态

残差界仅需厄米性；不预设拟合谱模型

$$C(t) = \langle \psi | T^{t/a} | \psi \rangle$$
$$T \longrightarrow T_m, \quad E_n^{(m)} = -a^{-1} \log \lambda_n(T_m)$$

进展：能谱 $\rightarrow$ 矩阵元 $\rightarrow$ 多算符分析

更紧的 gap bounds 需要显式能隙假设



Software

Y. Nagai, H. Ohno & A. Tomiya · [2602.20516](#)

计算内核与生成

QUDA · Grid · MILC · Chroma

openQCD · SIMULATeQCD · tmLQCD

qex · LatticeQCD.jl

组合与测量接口

PyQU DA · GPT · Hadrons

LLVM 级自动微分

作用量程序 → Enzyme → HMC force
保留 in-place 实现，覆盖 CPU / GPU
与手写 force 数值一致、性能可比

TABLE I. Representative wall-clock time (seconds) for a single force evaluation of the Wilson fermion action on a 24^4 lattice. CPU results correspond to single-thread execution. GPU results are obtained on an NVIDIA H100 using JACC.jl.

Implementation	CPU	GPU
Hand-written	195.53	4.61
LLVM-AD	162.50	3.39

减少 force 维护负担；不对 Krylov 迭代求导
部分 GPU 底层算子仍需自定义 adjoint

Software – Agent

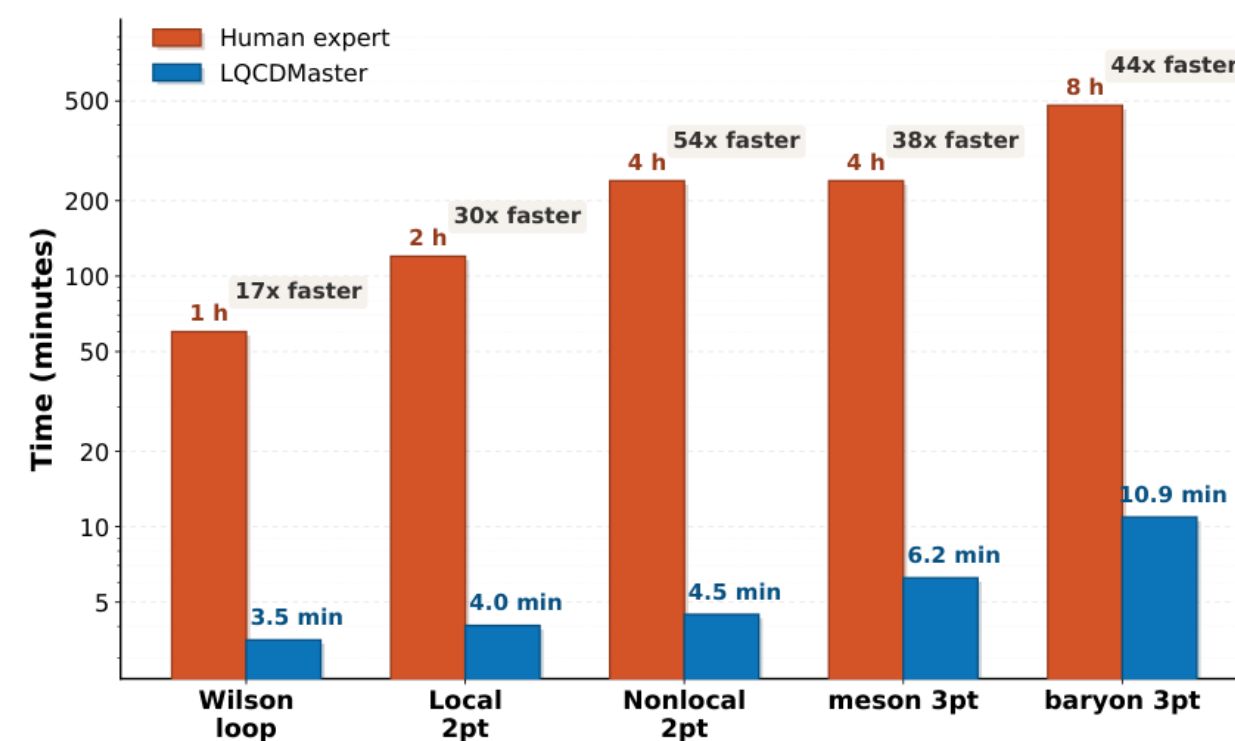
LQCDMaster — H. Gao et al. · [2607.15001](#)

https://github.com/sjtu-sai-agents/LQCD_Master

测量 workflow: LQCDMaster

自然语言物理目标 → SKILL/工具
→ PyQUDA 计算脚本 → 可观测量

70 项任务中 63 项机器精度复现 (输出格式)
主要降低 PyQUDA API 使用难度, 减少实现时间



主会场 10:30-11:00 王伟

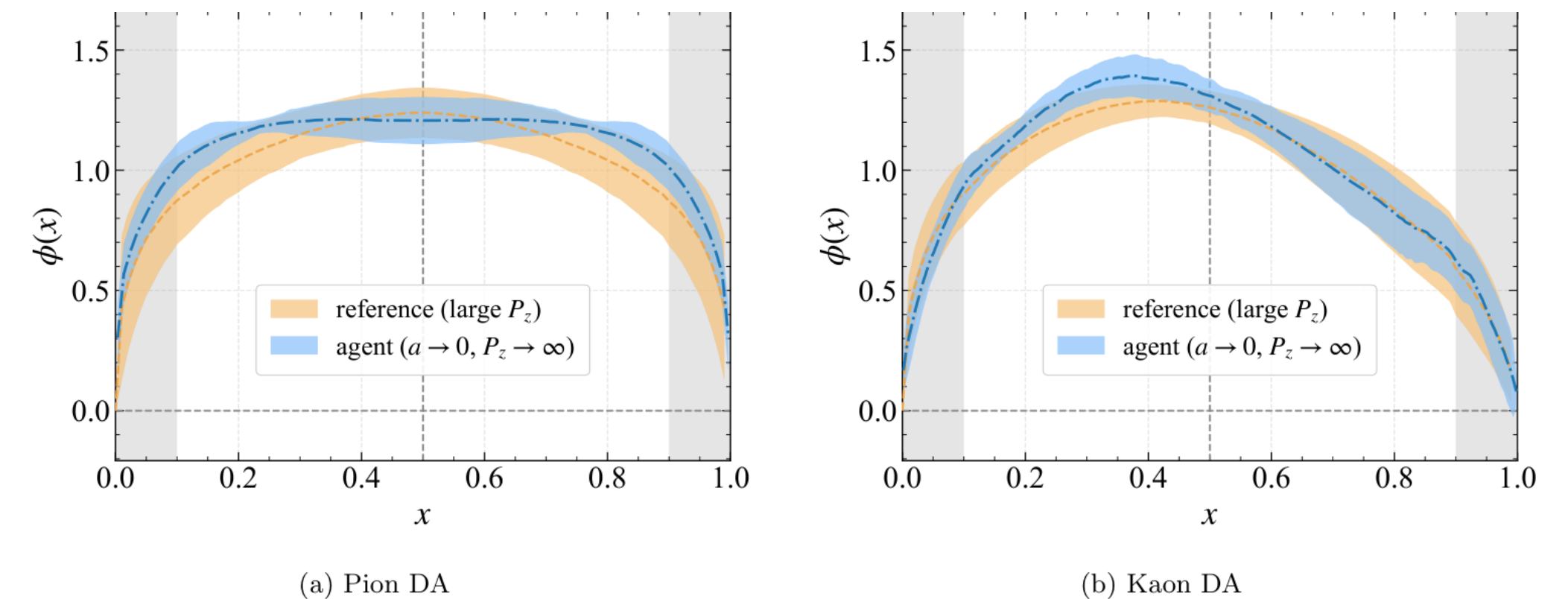
LaMET-Agent — J. He et al. · [2609.32225](#)

<https://github.com/AI4LGT/lamet-agent>

LaMET 分析: lamet-agent

自然语言物理目标 → 确定性数值流程
→ 阶段报告 → 完整流程审查

四个案例复现: manifest → job → review
主要降低 LaMET 分析门槛, 统一约定加速研究



分会场 II 14:30 - 14:50 赵殿君

总结与展望

近年社区在算法上的努力集中于缓解拓扑冻结

Normalizing flow 和 parallel tempering 方法开始展现潜力

LLM 开始进入应用阶段

LQCD 专用 Agent 开始开发

LLM 大幅度缩短开发时间

但是由于语料问题 LLM 写测量/分析脚本总是搞错.....

LQCD 专用 Skill 集合开始构思

https://github.com/AI4LGT/LQCD_Skills

Thank you for listening!