

铁磁性双态自旋系统配分函数的可近似性



邱国良¹ 张驰豪²

1 电子科技大学计算机科学与工程学院 成都 610000

2 上海交通大学约翰·霍普克罗夫特计算机科学中心 上海 200240

(guoliang.qiu96@gmail.com)

摘要 双态自旋系统是统计物理学在处理相互作用粒子系统时所建立的简化模型,计算该系统的配分函数(partition function)在统计物理及计算机科学中均有重要意义。对于一般的系统,配分函数的精确计算已被证明是#P难的,但其是否能被高效地近似计算一直是理论计算机科学关注的问题。近年来,这一领域取得了较大的突破。研究者建立了配分函数的可近似性与该物理系统相变的联系,并且在很大的参数范围内理解了可近似性。文中对铁磁性双态自旋系统配分函数的可近似性研究进行了综述,介绍了目前针对该问题设计近似算法的三类技巧的主要思想,并把这些算法的结果与该问题在不可近似方面的结果进行了比较。

关键词: 铁磁双态自旋系统配分函数;近似计数;取样

中图法分类号 TP301

Approximability of Partition Functions of Ferromagnetic Two-state Spin Systems

QIU Guo-liang¹ and ZHANG Chi-hao²

1 School of Computer Science and Engineering, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610000, China

2 John Hopcroft Center for Computer Science, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China

Abstract The two-spin system is a simplified model for the interaction of the multiparticle system in statistical physics. Computing the partition function of the system is of great significance in both statistical physics and computer science. It is well-known that the exact computation of the partition function is #P-hard for general systems. Therefore, the approximability of the partition function has attracted a lot of attention of computer scientists. Notable progress has been made along this line of research in recent years. Close connections between the approximability of the partition function and the phase transition of the physical models have been revealed. Based on these connections, approximation algorithms have been discovered for the model in a wide range of parameters. This paper reviews the research on the approximability of the partition functions of ferromagnetic 2-spin systems, introduces the main ideas of three classes of algorithms for this problem, including MCMC based algorithms, decay of correlation based algorithm and recent polynomial interpolation based algorithms. Moreover, the results of these algorithms are compared with the current inapproximability results.

Keywords Partition function of ferromagnetic two-state spin systems, Approximate counting, Sampling

1 引言

双态自旋系统是统计物理学中的一种相互作用粒子系统模型。多粒子及其之间的相邻关系可以抽象为一个无向图 $G=(V, E)$, 每个顶点可处于 $\{+, -\}$ 两种自旋状态之一, 所有顶点的自旋状态构成系统自旋状态格局 $\sigma \in \{+, -\}^V$ 。为刻画系统的物理特征, 为每个具体的系统自旋状态格局赋予特定的能量数值, 这些数值来自于相邻顶点相互作用和顶点自身状态两个方面。相邻顶点之间的相互作用由矩阵 $A = \begin{bmatrix} A_{-,-} & A_{-,+} \\ A_{+,-} & A_{+,+} \end{bmatrix}$ 刻画, 其中 $A_{i,j} \geq 0$ 是当两个相邻的顶点状态

分别是 $i, j \in \{+, -\}$ 时对应的局部权值。在做了一定的归一化后, 可以假设 $A_{-,-} = A_{+,+} = 1$ 。顶点自身状态能量使用外磁场向量 $\pi \in \mathbb{R}_{\geq 0}^V$ 刻画。当顶点所处状态为 $-$ 时, 该顶点分配的能量值为 $\pi(v)$; 当顶点所处状态为 $+$ 时, 该顶点分配的能量值为 1 。

给定图 G 、相互作用矩阵 A 和向量 π , 其配分函数定义为:

$$Z(G) := \sum_{\sigma \in \{+, -\}^V} \prod_{(u,v) \in E} A_{\sigma(u), \sigma(v)} \prod_{v \in V: \sigma(v) = -} \pi(v)$$

对于特殊的 A 和 π , $Z(G)$ 对应一些自然的组合物。比如,

当 $A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$ 并且 $\pi = 1$ 时, $Z(G)$ 对应图 G 的独立集的数目。

收稿日期: 2020-02-26 返修日期: 2020-04-05 本文已加入开放科学计划(OSID), 请扫描上方二维码获取补充信息。

基金项目: 国家自然科学基金青年科学基金(NSFC 61902241)

This work was supported by the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (NSFC 61902241).

通信作者: 张驰豪(chihao@sjtu.edu.cn)

可以证明,对于一般的矩阵 \mathbf{A} 和非零的 $\boldsymbol{\pi}$, 只有 $A_{-,-} \cdot A_{+,+} = 1$ 或 $A_{-,-} = A_{+,+} = 0$ 时,存在多项式时间算法计算 $Z(G)$,其他场合下其计算是 $\#P$ 困难的^[1]。因此,对于什么样的 \mathbf{A} 和 $\boldsymbol{\pi}$, $Z(G)$ 存在高效的近似算法,是值得关注的问题。

本文把 $A_{-,-} \cdot A_{+,+} > 1$ 的情形称为“铁磁性”双态自旋系统, $A_{-,-} \cdot A_{+,+} < 1$ 的情形称为“反铁磁性”双态自旋系统。对于反铁磁性双态自旋系统,其配分函数的可近似性已经得到了较好的刻画;当且仅当该系统在无穷树上所定义的吉布斯分布是唯一的^[2-5], $Z(G)$ 可以被近似。而对于铁磁性双态自旋系统,研究者还未得到一个完整的可近似性刻画。

本文旨在对铁磁性双态自旋系统配分函数计算问题的可近似性的已有研究工作进行综述,以期为进入该领域的学者提供有价值的参考材料。

2 预备知识

2.1 双态自旋系统及其吉布斯分布

引言中已经提到,双态自旋系统可以由一个矩阵 $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A_{-,-} & A_{-,+} \\ A_{+,-} & A_{+,+} \end{bmatrix}$ 和向量 $\boldsymbol{\pi} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^V$ 刻画。为简化表达,可以把矩阵 \mathbf{A} 正则化为 $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \beta & 1 \\ 1 & \gamma \end{bmatrix}$, 其中 $\beta = A_{-,-} \geq 0, \gamma = A_{+,+} \geq 0$ 为参数。根据模型参数的对称性,我们不失一般性地假设 $\beta \leq \gamma$ 。由于我们进一步假设了每个顶点 v 满足 $0 \leq \boldsymbol{\pi}(v) \leq \lambda$, 非负实参数 β, γ, λ 刻画了一个具体的双态自旋系统。下面将严格定义一个系统自旋状态格局的能量及其导出的吉布斯分布。

定义 1 给定无向图 $G=(V, E)$ 、参数 β 和 γ , 外磁场 $\boldsymbol{\pi} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^V$ 满足 $\forall v \in V, \boldsymbol{\pi}(v) \leq \lambda$, 双态自旋系统的吉布斯分布是定义在所有系统自旋状态格局上的概率分布。给定系统自旋状态格局 $\sigma \in \{+, -\}^V$, 其概率为:

$$\mathbb{P}[\sigma] := \frac{w(\sigma)}{Z_{\beta, \gamma, \lambda}(G)} \quad (1)$$

$$w(\sigma) := \prod_{(u, v) \in E} \mathbf{A}_{\sigma(u), \sigma(v)} \prod_{v \in V: \sigma(v) = -} \boldsymbol{\pi}(v) = \beta^{m_-(\sigma)} \gamma^{m_+(\sigma)} \prod_{v \in V: \sigma(v) = -} \boldsymbol{\pi}(v) \quad (2)$$

$$Z_{\beta, \gamma, \lambda}(G) := \sum_{\sigma \in \{+, -\}^V} w(\sigma) \quad (3)$$

其中, $m_-(\sigma)$ 是在系统自旋状态格局 σ 中, 两端顶点均处于 - 状态的边的数量。类似地, $m_+(\sigma)$ 是两端顶点均处于 + 状态的边的数量。 $Z_{\beta, \gamma, \lambda}(G)$ 是归一化因子, 又称为配分函数。

在上述定义中, 如果 $\boldsymbol{\pi}$ 是常值函数, 则称上述模型为统一外场双态自旋系统, 其配分函数记为 $Z_{\beta, \gamma, \lambda}^*(G)$ 。 (β, γ, λ) 参数的取值完全决定了系统的性质。当 $\beta = \gamma$ 时, 该系统被称为伊辛模型(Ising Model)。双态自旋系统可以分为两类: 当 $\beta\gamma < 1$ 时, 为反铁磁性双态自旋系统; 而当 $\beta\gamma > 1$ 时, 为铁磁性双态自旋系统, 即本文主要的阐述对象。

下面定义两个具有密切关系的计算问题, 即配分函数的计算和吉布斯分布的采样。

问题 1 双态自旋系统配分函数的计算问题

(1) 固定参数 β, γ, λ , 输入无向图 $G=(V, E)$, 外磁场 $\boldsymbol{\pi} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^V$ 满足 $\forall v \in V, \boldsymbol{\pi}(v) \leq \lambda$ 。

(2) 输出

$$Z_{\beta, \gamma, \lambda}(G) := \beta^{m_-(\sigma)} \gamma^{m_+(\sigma)} \prod_{v \in V: \sigma(v) = -} \boldsymbol{\pi}(v) \quad (4)$$

问题 2 双态自旋系统吉布斯分布的采样问题

(1) 固定参数 β, γ, λ , 输入无向图 $G=(V, E)$, 外磁场 $\boldsymbol{\pi} \in \mathbb{R}_{\geq 0}^V$ 满足 $\forall v \in V, \boldsymbol{\pi}(v) \leq \lambda$ 。

(2) 输出随机系统自旋状态格局 σ , 满足 $\mathbb{P}[\sigma] := \frac{w(\sigma)}{Z_{\beta, \gamma, \lambda}(G)}$ 。

2.2 近似算法与近似取样器

定义 2 (随机化完全多项式近似算法) 给定一个可计算函数 $f: \Sigma^* \rightarrow \mathbb{R}$, 如果存在一个随机算法满足: 对于所有 $x \in \Sigma^*$ 和一个误差控制参数 $\epsilon > 0$, 输出 $\tilde{f}(x) \in \mathbb{R}$ 满足 $\mathbb{P}[e^{-\epsilon} \leq \frac{\tilde{f}(x)}{f(x)} \leq e^{\epsilon}] \geq \frac{3}{4}$, 且其最坏运行时间为关于 $|x|$ 和 $\frac{1}{\epsilon}$ 的多项式, 则称可计算函数 f 存在随机化完全多项式近似算法 (Fully Polynomial-time Randomized Approximation Scheme), 记为 FPRAS。类似地, 如果该算法是确定性算法, 我们可以定义确定性完全多项式近似算法 (Fully Polynomial-time Approximation Scheme), 记为 FPTAS。对于近似计数, 我们希望找到满足上述性质的算法。值得注意的是, FPRAS 以及 FPTAS 的定义对算法近似比的要求是非常苛刻的。这是因为文献[6]指出, 对于具有自归约性质的问题, 一旦有了多项式近似比的近似算法, 就可以将其转化为一个 FPRAS 或 FPTAS。我们关心的大部分配分函数的计算问题均具有自归约性质。同样地, 文献[6]指出, 对于具有自归约性质的问题, 设计一个高效的近似算法与设计一个高效的“近似准确”采样器等价。

定义 3 给定两个定义在可数集合 Ω 上的概率分布 μ 和 μ' , 定义它们的总差异距离 (Total Variation Distance) 如下:

$$\|\mu - \mu'\|_{TV} := \max_{A \subseteq \Omega} |\mu(A) - \mu'(A)|$$

定义 4 (几乎均匀的多项式近似采样器) 给定一个关系 $R \subseteq \Sigma^* \times \Sigma^*$, 满足: 对于任意 $x \in \Sigma^*$, 集合 $\{y: R(x, y)\}$ 有非空, 且 μ 为定义在该集合上的概率分布。如果存在一个随机算法, 给定输入 $x \in \Sigma^*$ 以及误差控制参数 $\delta > 0$, 算法随机输出 $y \in \Sigma^*$, 满足 $(x, y) \in R$ 且服从分布 μ' , 同时 $\|\mu - \mu'\|_{TV} \leq \delta$, 且随机算法的最坏运行时间为关于 $|x|$ 和 $\log \frac{1}{\delta}$ 的多项式, 则称关系 R 具有几乎均匀的多项式近似采样器 (Fully Polynomial-time Almost Uniform Sampler), 记为 FPAUS。

3 铁磁性双态自旋系统配分函数近似算法技术的发展现状

3.1 马尔可夫链蒙特卡洛方法

对于双态自旋系统, 自归约性质确保了其近似采样器与配分函数近似算法的等价性。因此, 为问题 2 设计高效的近似采样器能够从另一个角度得到问题 1 的高效近似算法。马尔可夫链蒙特卡洛方法记为 MCMC (Markov Chain Monte Carlo), 是经典的采样技术。利用 MCMC 设计采样器的关键在于对其收敛速度的分析。证明马尔可夫链快速收敛的常用技巧包括 Coupling 方法以及建立转移矩阵的 Spectral Gap 上界等^[7]。

对于问题 2, 我们可以设计一种简单的 MCMC 采样器, 其详细描述见 OSID 码。

Mossel 等^[8]使用 Coupling 方法证明了上述采样器在铁磁性伊辛模型(即 $\gamma = \beta > 1$)中具有快速收敛的性质。

定理 1 如果给定图 G 的最大度数 Δ 满足条件 $\Delta < \frac{2\beta}{\beta-1}$, 那么铁磁性伊辛模型配分函数存在 FPRAS。

上述结果中, 对于固定的 β , 只要图的最大度数满足上述条件, 则对参数 λ 没有限制。然而, 对于更一般的度数没有限制的铁磁性双态自旋系统, 上述采样器并不是最合适的选择。Liu 等^[9]将特定参数范围下的铁磁双态自旋系统归约到文献^[10-11]的问题中, 并且改进其中的分析得出定理 2。定理 2 的证明依赖于对与伊辛模型等价的马尔可夫链的典型路径(Canonical Paths)的分析, 从而得到 Spectral Gap 的上界, 进而蕴含采样器的快速收敛性质。

定理 2 给定参数 $\beta < \gamma, \beta\gamma > 1$, 如果 $\lambda < \gamma/\beta$, 则铁磁性双态自旋系统配分函数存在 FPRAS。

相比于定理 1, 在定理 2 的参数范围内, 我们对最大度 Δ 没有限制, 但是对 λ 有上界的要求。

3.2 相关性衰减方法

基于图递推式的相关性衰减方法是设计确定性近似计数算法的一种重要技术。Weitz^[2]首次利用此方法为图独立集计数问题设计了确定性近似算法。在此之后, 人们应用该技术成功地为一系列问题设计了 FPTAS^[3,12]。

双态自旋系统的吉布斯分布(式(1))定义了每个顶点自旋状态的边缘分布, 记 p_v 为顶点 v 的自旋状态为一的边缘分布。由于双态自旋系统的自归约性质, 计算式(4)等价于计算任意顶点 v 的自旋状态的边缘分布^[6]。Weitz 证明了双态自旋系统导出的 p_v 能够在特定的树上使用递推式进行计算, 该性质对于设计高效的算法起着关键作用。

假定输入实例是顶点为 v 的树, 并且给定顶点子集 $\Delta \subset V$, 固定顶点集合 Δ 的自旋状态 $\sigma_\Delta \in \{-, +\}^\Delta$, 记 $p_v^{\sigma_\Delta}$ 为顶点在 Δ 上、自旋状态为 σ_Δ 时顶点 v 确定为一的边缘概率分布。

令 $R_v^{\sigma_\Delta} = \frac{p_v^{\sigma_\Delta}}{1 - p_v^{\sigma_\Delta}}$, 则:

$$R_v^{\sigma_\Delta} = \pi(v) \prod_{i=1}^d \frac{\beta R_{T_i}^{\sigma_\Delta} + 1}{R_{T_i}^{\sigma_\Delta} + \gamma} \quad (5)$$

其中, T_i 是以 v 的第 i 个子节点 v_i 为根的子树。对于一般的图 $G = (V, E)$, 我们可以类似地定义 $R_{G,v}^{\sigma_\Delta} = \frac{p_v^{\sigma_\Delta}}{1 - p_v^{\sigma_\Delta}}$, 但是一般图并没有式(5)一样简洁的递归表达式。Weitz^[2]提出了一种适用于一般双态自旋系统的巧妙构造, 即对图 G 构造一个具有特殊赋值的 Self-Avoiding Walk(SAW)树, 记为 $T_{\text{SAW}}(G, v)$ 。之所以称其为 Self-Avoiding Walk 树, 是因为构造的方法是从顶点 v 出发, 列举 G 中所有点不相交的路径, 那些使路径闭合的点作为其叶节点。Weitz 证明了通过在 SAW 树上固定某些点的自旋状态, 可使得 $R_{G,v}^{\sigma_\Delta} = R_{T_{\text{SAW}},v}^{\sigma_\Delta}$, 因此我们只需关注双态自旋系统在树情形下边缘分布的递归表达式的性质。需要注意的是, 这并没有蕴含有效的算法, 因为 T_{SAW} 的规模相对于原输入样例的规模是指数级别的。

对于给定的树上的递推式, 我们只进行多项式规模的计算, 即对于常数度的图, 只在 T_{SAW} 上对递推式进行数层的展开。一旦对递归式的计算层数超过了预先设定的边界, 则随

意地返回数值。该算法的正确性来自于证明这样随意地返回边界数值不会产生太大的损失。为了确保算法的精度, 我们希望系统导出的边缘分布具有相关性衰减的性质。

定义 5(相关性衰减) 称自旋系统在一类图 \mathcal{G} 中呈现相关性衰减性质, 如果其对于所有的图 $G = (V, E) \in \mathcal{G}$, 任意 $v \in V, \Delta \subset V$ 以及两个局部自旋状态格局 $\sigma_\Delta, \tau_\Delta \in \{-, +\}^\Delta$ 均有:

$$|p_v^{\sigma_\Delta} - p_v^{\tau_\Delta}| \leq \exp(-\Omega(\text{dist}(v, S))) \quad (6)$$

其中, $S \subset \Delta$ 是局部系统自旋状态格局 $\sigma_\Delta, \tau_\Delta$ 中自旋状态不同的点构成的集合, $\text{dist}(v, S)$ 是顶点 v 到 S 中任意顶点的最短距离。

递推式(5)对于证明系统具有相关性衰减性质具有十分重要的作用。文献^[3]等提供了一种相对系统的技巧——势函数方法来分析递归表达式; 其后, Guo 等使用这种技术在铁磁性双态自旋系统得到了定理 3^[13]。

定理 3 给定参数 $\beta < \gamma, \beta\gamma > 1, \beta \leq 1$ 以及 $\lambda < \left(\frac{\gamma}{\beta}\right)^{\frac{\sqrt{\beta\gamma}}{\sqrt{\beta\gamma}-1}}$, 铁磁性双态自旋系统配分函数存在 FPTAS。

上述结果相比于 MCMC 方法进一步拓展了可近似的参数范围, 但要求限制 $\beta \leq 1$ 。目前, 该方法不能拓展到 $\beta\gamma > 1$ 范围, 其主要原因是参数的变动导致无法证明定义 5 所给出的相关性衰减性质, 其根源在于由图转化为 SAW 树时产生了损失。

3.3 基于复平面零点的多项式插值方法

基于复平面零点分布的多项式插值法由 Barvinok^[14]提出, 能够处理一大类多项式在特定点的求值问题。给定一个度数为 n 的多项式 $P(z) = \sum_{i=0}^n c_i z^i$, Barvinok 的方法是对多项式取对数后截断其泰勒展开式, 从而近似计算多项式的值。不难证明, 对常数 $\delta > 0$, 如果多项式 $P(z)$ 在复平面中包含 $[0, t]$ 的 δ 条带内是非零的, 要得到 $P(z)$ 的 $1 \pm \epsilon$ 近似, 只需要对 $k = O\left(\log \frac{n}{\epsilon}\right)$ 计算出系数 c_0, \dots, c_k 。其中, 包含 $[0, t]$ 的 δ 条带是指:

$$\{z \in \mathbb{C} \mid |\Im(z)| < \delta, -\delta \leq \Re(z) \leq t + \delta\}$$

对于统一外场双态自旋系统, 当参数 β, γ 固定并且将 λ 视为复平面上的变量时, $Z_{\beta, \gamma, \lambda}^{\sigma_\Delta}(G)$ 可被看作关于 λ 的单变量多项式, 从而将配分函数的计算与基于复平面零点的插值法关联起来。

该技术有两个关键问题: 1) 要保证多项式在一定范围内是非零的; 2) 在保证截断计算近似精度的同时, 要求泰勒展开式中的系数能被高效计算。在 Barvinok 原有的方法中, 计算这些系数需要伪多项式时间。其后, Patel 等为一大类图多项式设计了计算前 $O(\log n)$ 项系数的多项式时间算法^[15]。Barvinok 的算法框架以及 Patel 等巧妙的系数计算方法, 是整套技术成功的核心。

基于已有的工作, 应用多项式插值法计算配分函数的关键即被转化为证明多项式在指定区域内非零。一种重要的证明技术是使用归纳的方法, 不断地减小图中点的规模, 从而归纳证明对应图多项式在复平面的特定区域内非零^[16]。最近一些工作以复动力系统作为桥梁, 揭示了相关性衰减与图多项式非零之间的联系, 并在一些问题中取得了重要的进展。

物理学家 Sokal 提出过一个猜想^[18],该猜想陈述了由独立集问题定义的图多项式在复数域上零点的分布性质。文献[17]利用上述技术证明了 Sokal 的猜想是成立的。这个结论的意义是,使用多项式插值算法可以得到加权独立集配分函数的一个最优的近似算法,与 Weitz 使用相关性衰减方法得到的算法^[22]相匹配。另一方面,文献[19]为图染色问题设计了第一个与随机化算法效果匹配的确定性近似算法。

文献[20-21]在为著名的 Lee-Yang 定理给出新证明的过程中,使用了一种对图多项式进行收缩的方法,即通过合并变量的方式把很多小多项式逐渐收缩成大的多项式。如果我们知道小多项式零点的分布,就能推算出收缩后大多项式零点的分布。因此该类方法应用的关键在于,要证明我们所求的多项式能够由某类多项式通过不断收缩而得到,同时还能够分析收缩前后零点分布的变化情况。此方法在文献[22]中被用于为一类称为 Holant 的计数问题设计近似算法。最近, Liu 等应用此方法分析铁磁性双态自旋系统多项式的零点分布^[23],得到以下定理。

定理 4 给定参数 $\beta \leq \gamma$ 以及 $\beta\gamma > 1$, 如果 $\lambda < \left(\frac{\gamma}{\beta}\right)^{\frac{\pi}{2 \tan^{-1} \sqrt{\beta\gamma-1}}}$, 则铁磁性双态自旋系统存在 FPTAS。

定理 4 只适用于最大度数为常数的图,这是因为在多项式插值法的算法框架中,最坏运行时间的指数部分与图的最大度数有关。实际上,定理 4 的证明中得到的铁磁双态自旋系统零点分布^[23]性质并不受度数的限制。

4 铁磁性双态自旋系统可近似性相变点的讨论

在双态自旋系统可近似性的探讨中,人们发现在某些特定系统中存在关于参数变化而使得可近似性质变化的临界点,我们称其为可近似性相变点。有趣的是,对于某些系统,可近似性质的临界点与物理系统相变点契合。例如,在反铁磁双态自旋系统中,固定参数 β, γ , 当 λ 满足唯一性条件 (uniqueness condition) 时,系统存在 FPTAS^[2-3]; 反之,系统不存在高效近似算法,除非 $NP = RP$ ^[4-5]。这里,唯一性条件是指系统定义在无穷正则树上的吉布斯分布唯一时参数应该满足的条件。无穷图上的吉布斯分布的相关知识可以参考文献[24]。尽管在反铁磁双态自旋系统中,我们对其可近似性已经有了比较清晰的理解,但是在铁磁双态自旋系统中,可近似性与不可近似的边界仍然是一个重要的开放性问题。

对于本节介绍的各种近似算法设计技术,表 1 列出了各自成立时要求的 λ 的上界。需要注意的是,表中 λ_{decay} 即基于相关性衰减方法得出的结果,只适用于 $\beta \leq 1 < \gamma$ 的情况。

表 1 λ 的上界

Table 1 Upper bounds of parameter λ

	λ_{MCMC}	λ_{decay}	λ_{zero}
Upper bound for λ	$\frac{\gamma}{\beta}$	$\left(\frac{\gamma}{\beta}\right)^{\frac{\sqrt{\beta\gamma}}{\sqrt{\beta\gamma-1}}}$	$\left(\frac{\gamma}{\beta}\right)^{\frac{\pi}{2 \tan^{-1} \sqrt{\beta\gamma-1}}}$

下面为接下来的讨论固定一些记号:

$$\Delta_C := \frac{\sqrt{\beta\gamma+1}}{\sqrt{\beta\gamma-1}} \quad (7)$$

$$\lambda_C := \lambda_{\text{decay}} = \left(\frac{\gamma}{\beta}\right)^{\frac{\Delta_C+1}{2}} = \left(\frac{\gamma}{\beta}\right)^{\frac{\sqrt{\beta\gamma}}{\sqrt{\beta\gamma-1}}} \quad (8)$$

$$\lambda_C^{\text{int}} := \left(\frac{\gamma}{\beta}\right)^{\frac{[\Delta_C]+1}{2}} \quad (9)$$

$$\lambda_C^{\text{int}'} := \left(\frac{\gamma}{\beta}\right)^{\frac{[\Delta_C]+2}{2}} \quad (10)$$

这里定义的 $\lambda_C = \lambda_{\text{decay}}$, λ_C^{int} 和 $\lambda_C^{\text{int}'}$ 只在 $\frac{\gamma}{\beta}$ 的指数上稍有差别,并且满足 $\lambda_C \leq \lambda_C^{\text{int}} \leq \lambda_C^{\text{int}'}$ 。

类比反铁磁性双态系统中取得的成功,研究者起初认为铁磁性双态系统中的唯一性条件也可能是可近似性的相变点。上文提到,在 $\beta \leq 1$ 且 $\lambda < \lambda_C$ 时,计算配分函数存在 FPTAS。Guo 等^[13]指出:

定理 5 如果 $\beta \leq 1 < \gamma$ 且 $\beta\gamma > 1$, 则唯一性条件对于任何度至少为 2 的正则树成立,当且仅当 $\lambda < \lambda_C^{\text{int}}$ 。

Liu 等^[9]则证明了对于 $\lambda \geq \lambda_C^{\text{int}'}$, 近似计算配分函数可能是困难的。

定理 6 对于铁磁双态自旋系统,如果 $\lambda > \lambda_C^{\text{int}'}$, 那么计算其配分函数是 #BIS 难的。

上述 BIS 问题是二分图独立集个数的计数问题。目前的研究表明^[25], BIS 问题很可能不具有高效的近似算法。因此,从定理 3、定理 5 和定理 6 的表述中可以看出,当参数满足 $\beta \leq 1 < \gamma$ 时,系统的唯一性条件和可近似性有一定联系,但也并非是完全一致的。

对于 $\beta \geq 1$ 的铁磁性系统,唯一性条件甚至是不能成立的。Guo 等^[13]证明了:

定理 7 如果参数 $\beta, \gamma > 1$, 那么不存在参数 $\lambda > 0$, 使得铁磁双态自旋系统在所有度至少为 2 的正则树上的唯一性条件成立。

为了更加直观地比较上述不同参数范围上界之间的大小关系,图 1 绘制了以上所有结果中参数 λ 的界。可以看出,图中的 λ_C 曲线始终是最好的。实际上,我们也只在 $\beta \leq 1$ 的场合能达到 λ_C 的近似算法。Guo 等^[13]猜想这一范围实际上对所有的 β 均成立。

猜想 1 给定参数 β, γ, λ 满足 $\beta \leq \gamma$ 且 $\beta\gamma > 1$, 如果 $\lambda < \lambda_C$, 那么铁磁双态自旋系统配分函数存在 FPTAS。

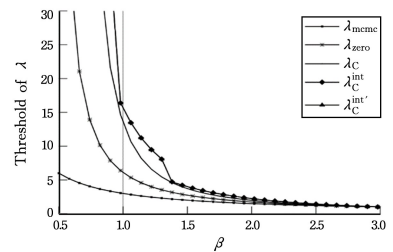


图 1 参数 λ 的阈值 ($\gamma=3$)

Fig. 1 Threshold of parameter λ ($\gamma=3$)

结束语 本文综述了铁磁性双态自旋系统配分函数可近似性的研究现状,并对已有算法结果的可行范围和已知的不可近似性结果做了详尽的对比。可以看出,目前人们对该问题的理解还不够完整,其核心在于如何解决文中所提出的猜想 1。

未来的另一个研究方向是能否继续改进已有的算法结

果。我们看到,使用 MCMC 方法、相关性衰减方法以及多项式插值法得到的 λ 的范围是不相同的,而这些技术均有各自的优点和局限性。MCMC 算法实现简单,运行速度快,并且其快速收敛性质与图的度数无关。相关性衰减法能得到 $\beta \leq 1$ 场合几乎最优的界,但不能处理 $\beta > 1$ 的情况;多项式插值法在 $\beta > 1$ 时能得到现在最好的界,但是要求图的最大度是常数。因此,这些算法都有改进的空间。我们以一个关于 MC-MC 的猜想结束这篇综述。

猜想 2 本文 3.1 节给出的 MCMC 采样器在 $\beta\gamma > 1, \beta \leq 1$ 且 $\lambda < \lambda_c$ 时快速收敛。

参 考 文 献

- [1] BULATOV A, GROHE M. The Complexity of Partition Functions[J]. Theoretical Computer Science, 2004, 348(2/3): 148-186.
- [2] WEITZ D. Counting independent sets up to the tree threshold [C]//Proceeding of the 38th Annual ACM Symposium on Theory of Computing. 2006:140-149.
- [3] LI L, LU P Y, YIN Y T. Correlation decay up to uniqueness in spin systems[C]// Proceedings of the Twenty-Fourth Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms. 2013:67-84.
- [4] SLY A, SUN N. The computational hardness of counting in two-spin models on d-regular graphs[C]//53rd Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science. 2012:361-369.
- [5] SINCLAIR A, SRIVASTAVA P, THURLEY M. Approximation Algorithms for Two-State Anti-Ferromagnetic Spin Systems on Bounded Degree Graphs[J]. Journal of Statistical Physics, 2014, 155(4): 666-686.
- [6] JERRUM M, VALIANT L G, VAZIRANI V V. Random generation of combinatorial structures from a uniform distribution[J]. Theoretical Computer Science, 1986, 43: 169-188.
- [7] LEVIN D, PERES Y. Markov Chains and Mixing Times[M]. American Mathematical Society, 2017.
- [8] MOSSEL E, SLY A. Exact threshold for Ising-Gibbs samplers on general graphs[J]. The Annals of Probability, 2013, 41(1): 294-328.
- [9] LIU J C, LU P Y, ZHANG C H. The complexity of ferromagnetic two-spin systems with external fields[C]// Proceedings of RANDOM. 2014: 843-856.
- [10] GOLDBERG A L, JERRUM M, PATERSON M. The computational complexity of two-state spin systems[J]. Random Structures & Algorithms, 2003, 23(2): 133-154.
- [11] JERRUM M, SINCLAIR A. Polynomial-time approximation algorithms for the Ising model[C]// International Colloquium on Automata, Languages & Programming. Springer-Verlag, 1990.
- [12] GAMARNIK D, KATZ D. Correlation decay and deterministic FPTAS for counting colorings of a graph[J]. Journal of Discrete Algorithms, 2012, 12: 29-47.
- [13] GUO H, LU P Y. Uniqueness, spatial mixing, and approximation for ferromagnetic 2-spin systems[J]. TOCT, 2018, 10(4): 17:1-17:25.
- [14] BARVINOK A. Combinatorics and Complexity of Partition Functions[M]. Springer International Publishing, 2016.
- [15] PATEL V, REGTS G. Deterministic polynomial-time approximation algorithms for partition functions and graph polynomials [J]. SIAM Journal on Computing, 2017, 46(6): 1893-1919.
- [16] SCOTT A D, SOKAL A D. The Repulsive Lattice Gas, the Independent-Set Polynomial, and the Lovász Local Lemma[J]. Journal of Statistical Physics, 2005, 118(5/6): 1151-1261.
- [17] PETERS H, REGTS G. On a conjecture of sokal concerning roots of the independence polynomial[J]. The Michigan Mathematical Journal, 2019, 68(1): 33-55.
- [18] SOKAL A. A personal list of unsolved problems concerning lattice gases and antiferromagnetic Potts models [J]. Markov Process, 2001(1): 21-38.
- [19] LIU J C, SINCLAIR A, SRIVASTAVA P. A deterministic algorithm for counting colorings with 2-delta colors[C]//60th IEEE Annual Symposium on Foundations of Computer Science. 2019: 1380-1404.
- [20] ASANO T. Theorems on the partition functions of the Heisenberg ferromagnets[J]. The Physical Society of Japan, 1970, 29: 350-359.
- [21] RUELLE DAVID. Extension of the lee-yang circle theorem[J]. Physical Review Letters, 1971, 26: 303-304.
- [22] GUO H, LIAO C, LU P Y, et al. Zeros of Holant problems: locations and algorithms[C]//Proceedings of the Thirtieth Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms. 2019: 2262-2278.
- [23] GUO H, LIU J C, LU P Y. Zeros of ferromagnetic 2-spin systems[C]// Proceedings of the 2020 ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms. 2020: 181-192.
- [24] GEORGH H O. Gibbs Measures and Phase Transitions(2nd Edition)[M]. Berlin: Springer, 2011.
- [25] DYER M, GOLDBERG L A, GREENHILL C, et al. The Relative Complexity of Approximate Counting Problems[J]. Algorithmica, 2004, 38(3): 471-500.



QIU Guo-liang, born in 1996, postgraduate. His main research interest is theoretical computer science.



ZHANG Chi-hao, born in 1988, Ph.D, Ph.D supervisor, is a member of China Computer Federation. His main research interest is theoretical computer science.