

长程阻错的统计物理理论

周海军[†]

(Max-Planck-Institute of Colloids and Interfaces, 14424 Potsdam, Germany)

(中国科学院理论物理研究所 北京 100080)

摘要 一个无序自旋玻璃系统可能有许许多多能量最小态或基态构型. 有些格点的自旋可能在所有这些基态中都只取同一个值(这种情况称为自旋凝固). 也有另外一种情况出现,即某些格点在一部分基态中自旋取向上而在其余的基态中自旋向下,这样的格点称为未凝固的格点. 本文的工作表明 2 个或多个未凝固的格点,虽然每个格点的自旋都随着基态的不同而改变,但是有可能某一些特定的自旋取向组合不会出现于任何一基态构型中. 这种现象称为长程阻错. 本文提出一个新的长程阻错序参量 R 来定量刻划这种现象,并将这一统计物理理论用于图的最小覆盖和 K -SAT 等组合优化问题.

关键词 自旋玻璃,长程阻错,组合优化,图的覆盖, K -SAT

A statistical physical theory of long-range frustration

ZHOU Hai-Jun[†]

(Max-Planck Institute of Colloids and Interfaces, 14424 Potsdam, Germany)

(Institute of Theoretical Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract A spin glass system may have many configurations of the same ground-state energy. When the spins on some of the vertices have the same value among all the ground-state configurations, these vertices are referred to as frozen. If the spins on some other vertices have different values in different configurations, these vertices are therefore unfrozen. We show in this work that two or more unfrozen vertices may be prohibited from taking a certain combination of spin values, even though the spin of each vertex can fluctuate amongst different ground-state configurations. This phenomenon is called long-range frustration. We present a new long-range frustration order parameter R to quantify this phenomenon, and apply our mean field theory to the minimum vertex-cover problem and the random K -satisfiability problem.

Keywords spin glasses, long-range frustration, combinatorial optimization, vertex-cover, K -SAT

1 引言

自旋玻璃理论是无序系统统计物理学的一个分支,到目前已有 30 年的研究历史^[1-4]. 一个自旋玻璃系统的能量图景非常复杂,存在着许多能量低谷,这些低谷为能量高原和高峰所围绕. 当体系的温度“充分高”时,体系处于高能状态,因而觉察不到能量图景的崎岖不平. 当温度降低到某一程度时,体系开始处于较低能状态,这时能量图景的不规整就开

始发挥作用了,它将体系的状态局限于能量图景的一部份区域. 这种现象称为各态历经破缺. 随着温度的进一步降低,体系的状态会被局限于“面积”越来越小的一个低能量区域. 当一个自旋玻璃体系的温度以一定的速率由高降低到某一低温时,体系最终所达到的状态很强烈地依赖于体系的初始状态以及温度变化的速率,而且如果体系处于某个能量的

2005-07-31 收到

[†] Email: zhouhj@itp.ac.cn

低谷,则需要等待“很长”的时间,体系才有可能从这一低谷逃逸出去,到达一个能量更低的低谷.这种现象称为弛豫时间的发散.

由于一个自旋玻璃系统的能量图景非常复杂,所以它具有非常丰富的低温统计物理性质和动态老化行为.历经近三十年的发展,目前这个领域已经积累了多种理论技巧和方法,而且所发展的思想和方法已经对其他一些学科,尤其是计算算法学,产生了非常重要的影响.在此仅举两个例子,在物理学和计算科学中广泛应用的模拟退火算法以及近年来新提出的全景传递算法(survey propagation)都来源于对自旋玻璃系统所获得的物理洞察.

一些自旋玻璃体系的基态或能量极小态可以对应于某些重要组合优化问题的全局或局域最优解.所以从2005年以来,就有一些作者特别关注于自旋玻璃系统在温度为零时的统计物理性质.本文的工作属于这一类.我们希望探讨的问题是,无规网络中自旋玻璃体系的基态中的长程阻错现象.在第2节我们将介绍一种定量描述这种强关联的平均场理论,在第3节中,我们将讨论这一理论在一些组合优化问题及自旋玻璃体系中的应用.

2 长程阻错的统计物理理论

无规网络中自旋玻璃体系的统计物理性质是目前的一个研究重点.一个无规网络可以通过如下方式来产生:在网络的 N 个顶点之间一共最多可能有 $N(N-1)/2$ 条边;然而这些边并不都出现在一个无规网络中,每条边出现在一个给定网络中的概率很小,只有 $c/(N-1)$,其中 c 是一个不随 N 改变的常量;而这条边不出现在网络中的概率为 $1-c/(N-1)$.在产生出来的网络中,平均每个顶点和 c 条边相连(即平均配位数为 c).我们可以给网络的每个顶点 $i \in \{1, \dots, N\}$ 赋予一个自旋状态 $\sigma_i = 1$ 或 $\sigma_i = -1$.

一个自旋玻璃体系能量图景极端复杂,非常有可能体系存在着不止一个而是许许多多多个能量最低态(基态).对一个顶点 i 而言,它的自旋状态可以分为如下三种情况:(1)自旋 σ_i 在所有的基态中都取 $+1$ 值;(2)自旋 σ_i 在所有的基态中都取 -1 值;(3)自旋 σ_i 在一部分基态中取 $+1$ 值而在其余的基态中取 -1 值.如果顶点 i 属于情况(1)或(2),我们则称顶点 i 为一个被凝固的顶点;反之如果他属于情况(3),则它为一个未被凝固的顶点.

一个自旋玻璃体系可能存在许多未被凝固的顶点.这些顶点的自旋状态可能依基态的不同而相应地改变(自旋涨落).一个极端重要的问题是这些顶点自旋涨落之间的关联情况.不同顶点的自旋涨落是彼此独立的吗?如果不是,那它们是如何关联起来的?我们在此尝试来回答这些问题.

我们采取的方法是,直接计算一个未被凝固的顶点当它的自旋状态被扰动后影响的区域的大小.在作计算的过程中,我们应用已知的无规网络结构的统计特征来帮助我们进行简化计算.我们在此仅描述计算的基本思路,有兴趣的读者可以参阅文献[5]及其附录(可在网上全文下载).

首先任意选取一个未被凝固的顶点 i ,并将它的自旋人为地设置成某一个固定的值 $\sigma_i^* \in \{-1, 1\}$.这一微扰将有可能影响到与 i 直接相连的另外一些未被凝固顶点,并将它们的自旋状态也固定下来.这些最近邻顶点的自旋被固定后,又有可能导致顶点 i 的一些次近邻未被凝固顶点的自旋状态受到影响;……扰动的层层传播的最后结果是导致一个连通区域 Λ_i 的出现.在这个区域的所有顶点都是未被凝固的,且它们的自旋状态都会因为顶点 i 的自旋取 $\sigma_i = \sigma_i^*$ 而受到影响(被固定).

这个扰动区域 Λ_i 有什么特点?当所研究的自旋玻璃体系非常大时, Λ_i 的形状或者是树形(其中不包含任何回路)或者是一个大的连通区域(其中包含非常多的回路).其他形状,例如包含一个回路的形状,出现的概率都为0.树形区域的大小分布可以很方便地用生成函数法求得, Λ_i 是树形的概率相应地可以计算出.由此我们可以知道 Λ_i 不是树形的概率.我们将这一个概率记为 R ,并称他为长程阻错序参量.如果 $R=0$,则所有的扰动区域都是树形,反之,则有一部分未被凝固顶点所对应的扰动区域包含许许多多回路.

两个随机选取的未被凝固的顶点 i 和 j ,如果它们的扰动区域 Λ_i 和 Λ_j 都不是树形,顶点 i 和 j 可能不能同时取自旋值 $\{\sigma_i = \sigma_i^*, \sigma_j = \sigma_j^*\}$,换句话说,如果 $\{\sigma_i = \sigma_i^*\}$,则 $\sigma_j = -\sigma_j^*$;如果 $\sigma_j = \sigma_j^*$,则 $\sigma_i = -\sigma_i^*$;但是,只要 Λ_i 和 Λ_j 至少有一个是树形,则顶点 i 取自旋值 $\sigma_i = \sigma_i^*$ 时,顶点 j 可同时取自旋值 $\sigma_j = \sigma_j^*$.

3 应用

3.1 无规图(网络)的覆盖问题

一个无规网络是由 N 个顶点和 $M = cN/2$ 条边组成的,平均每个顶点和 c 条边相连.我们在网络的一些顶点上置放一些标记或“帽子”.如果一条边至少有一个顶点上面有标记,则此条边就被认为是被覆盖住了;如果它的两个顶点上都没有标记,则它就被认为是没被覆盖.而且仅当一个网络的所有边都被覆盖住了,此网络才被认为是被覆盖住了.给定一个网络,怎样才能用最少的标记来将它覆盖?这是一个非常著名的 NP - Hard 类型的组合优化问题.人们普遍相信不存在一种高效的算法对所有的网络都有效.

我们探讨无规网络最小覆盖模式的统计特征^[5].计算表明,当平均配位数 $c < e = 2.7183\dots$ 时(e 是自然指数),体系不存在上节所描述的长程阻错现象(即 $R=0$,见图1).在这一参数区域有一种快速的算法可以找出一个网络最小覆盖模式.当平均配位数 $c > e$ 时,网络体系存在长程阻错现象($R > 0$),因此 2 个或多个相距很远的未凝固顶点的覆盖状态可能会很强烈地关联起来.在这种情况下,改变其中一个顶点的覆盖状态,将可能会导致非常多(正比于 N)的其他未凝固顶点的覆盖状态改变.在这一参数区域,要断定一个所找到的覆盖模式是最小覆盖是非常困难的计算任务.

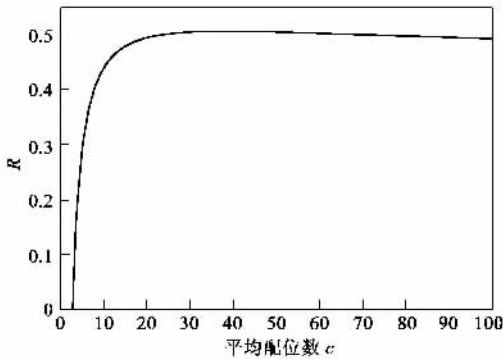


图1 无规网络的最小覆盖问题中的长程阻错序参量 R (当平均配位数 $c > 2.7183$ 时,序参量 $R > 0$)

我们也估算了覆盖一个无规网络最少需要的标记数目^[5].我们的基于长程阻错物理图像的统计物理结果和文献[6]的数值模拟结果以及文献[7]的严格数学渐远表达式都有很好的符合(见图2).这种一致性说明我们的长程阻错物理图像具有一定的合理性.目前正在希望用计算机模拟的方式来研究一个给定的无规网络的不同最小覆盖模式之间的相似性,以便能进一步验证所提出的物理图像.

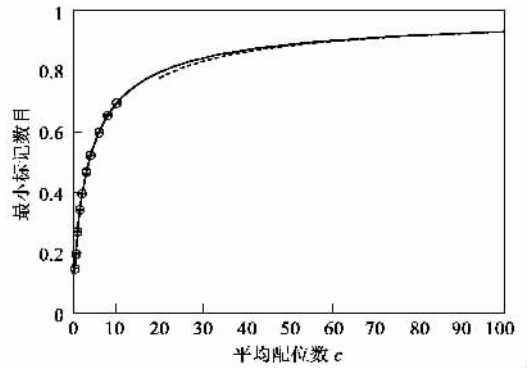


图2 覆盖一个无规网络所需要的最小标记的数目(实线是理论解析估计值^[5],圆点是文献[6]给出的数值计算结果,虚线是文献[7]给出的严格渐远结果)

3.2 满足性问题:无规 2-SAT 和无规 3-SAT

满足性问题是判断一个布尔表达式是否可以被满足(即其值为真).例如,如下的表达式

$$F_2 = (x_1 \vee \neg x_2) \wedge (x_1 \vee x_2) \wedge (\neg x_1 \vee x_3) \wedge (x_2 \vee \neg x_3)$$

就可以被 $x_1 = x_2 = x_3 = \text{真}$ 所满足.在上面的表达式中有 $N=3$ 个布尔变量和 $M=4$ 个约束,每个约束里含有两个布尔变量.这样的布尔表达式称为 2-SAT 表达式.当然也有 3-SAT, 4-SAT, 及一般的 K -SAT 表达式.例如,如下的 3-SAT 表达式是不可满足的:

$$F_3 = (x_1 \vee x_2 \vee x_3) \wedge (x_1 \vee x_2 \vee \neg x_3) \wedge (\neg x_1 \vee x_2 \vee x_3) \wedge (x_1 \vee \neg x_2 \vee x_3) \wedge (\neg x_1 \vee \neg x_2 \vee x_3) \wedge (\neg x_1 \vee x_2 \vee \neg x_3) \wedge (x_1 \vee \neg x_2 \vee \neg x_3) \wedge (\neg x_1 \vee \neg x_2 \vee \neg x_3)$$

2-SAT 问题和一般的 K -SAT 问题($K > 3$) 具有不同的计算复杂性:判定一个 2-SAT 表达式是否可被满足很容易(所需的计算时间随体系大小 N 呈几级数增长),而一般的 K -SAT 问题却属于 NP-完备类型(所需计算时间在最坏情况下随体系大小 N 呈指数增长).为了进一步理解造成这种定性差异的原因,我们在此用统计物理的观点来探讨 2-SAT 和 3-SAT.

对无规 2-SAT 问题,严格的数学定理表明,当 $\alpha = M/N$ (约束数目与变量数目之比)小于 1 时,一个无规 2-SAT 表达式能被满足的概率为 100%;而当 $\alpha > 1$ 时,它可以被满足的概率为 0%.我们的统计物理计算与此相符^[8].我们进一步发现,当 $1 \leq \alpha \leq 4.4588$ 时,虽然一个无规 2-SAT 表达式是不可满足的(基态能量大于 0),但体系并不存在长程阻错.

只有当 $\alpha > 4.4588$ 时,长程阻错才会出现(见图3)。这个物理图像暗示着如下的可能性:当 $1 \leq \alpha < 4.4588$ 时,存在一种多项式算法,来找到一个能满足最多约束的布尔变量赋值方式。我们目前正在尝试去找到这样一种算法。

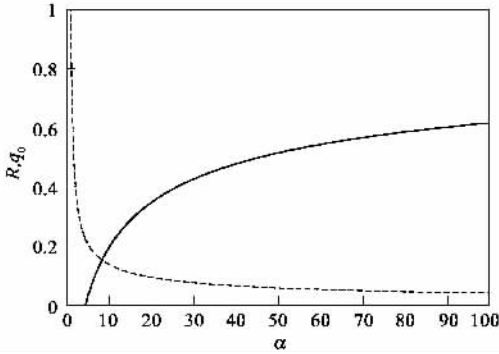


图3 无规 2-SAT 的相图. 实线是长程阻错序参量 R , 虚线是体系中未凝固的布尔变量的密度 q_0 . 当 α (约束的数目比上变量的数目) 超过 1 时 $q_0 < 1$ (即一部分布尔变量的值被凝固起来了); 当 $\alpha > 4.4588$ 时序参量 R 开始变得大于 0

对于无规 3-SAT 问题,我们的计算表明,当 $\alpha < 4.189724$ 时,体系只存在一个无长程阻错的平均场解,而且这一解在 $\alpha \geq 4.189724$ 时也是局部稳定的;当 $\alpha > 4.189724$ 时,我们还找到了一个存在长程阻错的平均场解,其长程阻错序参量 R 由 0 跃变到一个有限值(见图4)。我们的平均场理论认为无规 3-SAT 表达式将在 $\alpha = 4.189724$ 处由可以被满足转变为不能被满足;然而目前文献中通常提到的转变点为 $\alpha \approx 4.2667$ 。我们的结果和这一结果有 0.08 的距离。显然还需要作出许多努力,才能消除这一困难。

3.3 Viana-Bray 模型

Viana-Bray 自旋玻璃模型的哈密顿量为

$$H = - \sum J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (1)$$

在(1)式中, σ_i 是顶点 i 的自旋取值; $J_{ij} \in \{-1, 0, 1\}$ 是顶点与顶点之间的耦合常数(如果 i 和 j 之间不存在一条边,则 $J_{ij} = 0$)。 (1) 式中的求和是对一个无规网络的所有边(i, j)进行的。对此模型进行研究表明,它在温度为零时的相图与无规最大 2-SAT 的相图完全一样^[8]。当无规网络的平均配位数 $c < 1$ 时,体系处于顺磁态,没有被凝固的顶点;当平均配位数 $1 \leq c < 4.4588$ 时,体系处于没有长程阻错的自旋玻璃态,体系包含被凝固的顶点和未被凝固的顶

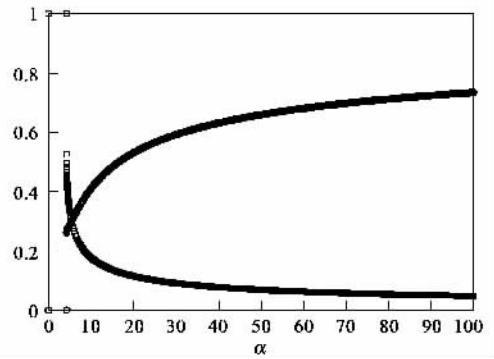


图4 无规 3-SAT 的相图. 圆点是长程阻错序参量 R , 方点是体系中未凝固的布尔变量的密度 q_0 . 当 α (约束的数目比上变量的数目) 在临界值 $\alpha = 4.189724$ 时, q_0 突然由 1 降到 0.5270, 而 R 则由 0 跳到 $R = 0.2605$

点,未被凝固的顶点的自旋状态彼此不关联;当平均配位数 $c > 4.4588$ 时,体系处于有长程阻错的自旋玻璃态。

4 结论和展望

本文简要介绍了一种探讨自旋玻璃基态中长期阻错性质的平均场理论。此理论可以应用于无规网络中的一些自旋玻璃体系及一些组合优化问题,例如无规网络的覆盖问题,随机产生的布尔表达式的满足性问题等等。

本文所描述的平均场理论尚未考虑自旋玻璃体系中的各态历经破缺带来的影响。如何成功地结合各态历经破缺和长程阻错是一个非常具有挑战性的问题,我们正在从不同的角度进行尝试。

参考文献

- [1] Edwards S F, Anderson P W. J. Phys. F, 1975, 5 :965
- [2] Mezard M, Parisi G, Virasoro M A. Spin Glass Theory and Beyond. World Scientific, Singapore, 1987
- [3] Fischer K H, Hertz J A. Spin Glasses, Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1991
- [4] Castellani T, Cavagna A. J. Stat. Mech. : Theo. Exp. , 2005, 5 :P05012 (可全文下载)
- [5] Zhou H J. Phys. Rev. Lett. 2005, 94 :217203
- [6] Weigt M, Hartmann A K. Phys. Rev. Lett. ,2000, 84 :6118
- [7] Frieze A M. Discrete Mathematics, 1990, 81 :171
- [8] Zhou H J. New J. Phys. ,2005, 7 :123 (可全文下载)