

第一章 自旋玻璃概述

1975年, Edwards和Anderson [30] 构造了一个格点自旋相互作用模型, 希望用它来理解无序磁性材料一些奇异的性质[19, 18, 15, 34]。在Edwards-Anderson模型中, 三维晶体的每一个晶格点上有微观自旋状态, 它可以取向上和向下两个方向。相邻格点的自旋有相互作用, 这些相互作用有的是铁磁的(希望两个自旋有同样的取向), 有的则是反铁磁的(希望两个自旋取向相反), 铁磁和反铁磁相互作用杂乱无章地分布于三维晶体的所有近邻自旋之间。Edwards和Anderson预言当环境温度足够低时, 该模型系统的自旋微观构型将处于一种玻璃态。在这一低温玻璃态中, 系统在宏观上不表现出自发的磁性, 但晶格中大部分格点都有取向偏好, 有的喜欢自旋向上, 有的喜欢自旋向下, 导致格点具有或强或弱的微观自发磁性。

Edwards和Anderson的理论工作激发了人们对自旋玻璃 (spin glass) 系统的研究兴趣。在四十年时间内, 人们构建了许多自旋玻璃模型, 提出了一些统计物理平均场理论(例如: 复本对称破缺 (replica-symmetry-breaking) 理论和液滴 (droplet) 理论), 并发展了高效数值计算方法(例如: 模拟退火 (simulated annealing)、模拟回火 (simulated tempering)、复本交换蒙特卡罗 (replica exchange Monte Carlo) 等等) [15, 64, 34, 35, 52, 59, 51, 11]。理论和计算机模拟工作揭示了低温自旋玻璃相的自由能图景 (landscape) 一些本质特性, 例如热力学宏观态的激增。

自旋玻璃研究领域的前沿课题和应用范围并不仅仅局限于无序磁性材料系统。就统计物理性质而言, 人们发现结构玻璃和颗粒态物质在一些方面非常类似于多体相互作用自旋玻璃系统[42, 53], 由此引发了大量的理论和模拟工作。近年来自旋玻璃平均场理论已被推广到可以应用于过冷液体、结构玻璃、颗粒态物质的阻塞 (jamming) 相变等问题[53, 14, 21, 82]。可以期待这方面将会有更多的理论进展, 促使我们对玻璃系统和颗粒态物质系统的统计物理性质获得全面的理解。

自旋玻璃理论的应用极为广泛。计算机科学中的随机组合优化问题和约束满足问题，信息科学中的随机纠错码编码和解码问题、图像恢复问题和压缩传感问题，人工智能科学中的联想记忆和感知学习问题，复杂网络科学中的网络结构预测和重构、网络社区结构划分问题，生命科学中的蛋白质结构预测问题，社会和生物系统的博弈问题，...，都可以转化成自旋玻璃系统进行研究[80, 49, 60, 87]。这些应用研究有的已经取得了丰硕的成果，并且促进了统计物理、计算机科学、信息理论、复杂系统研究等学科的交叉与融合，对自旋玻璃理论本身的发展也起到了极为重要的推动作用。

对各种复杂系统进行实证和理论研究，已成为统计物理学领域很有吸引力的一个新方向。人们期待能从各种复杂和多样性的数据中，发现复杂系统的一些内部规律和特征关系，从而对复杂系统获得更深和更定量的理解[95, 10]。自旋玻璃体系有极为复杂的能量图景，表现出丰富的动力学行为，它们是复杂系统研究的重要范例。

本章介绍一些常见的自旋玻璃模型，概括自旋玻璃系统的一些主要性质，并列举自旋玻璃理论在信息科学领域部分问题上的应用。本章还将求解两个简单模型，即随机能量模型和随机子集模型，以便读者能直观地体验自旋玻璃平均场理论所对应的物理图像。

1.1 自旋玻璃模型举例

以拓扑类型而言，自旋玻璃模型可以分为有限维系统，随机有限连通系统，和完全连通系统（见图1.1）；从相互作用的类型而言，可以分为两体相互作用系统和多体相互作用系统。

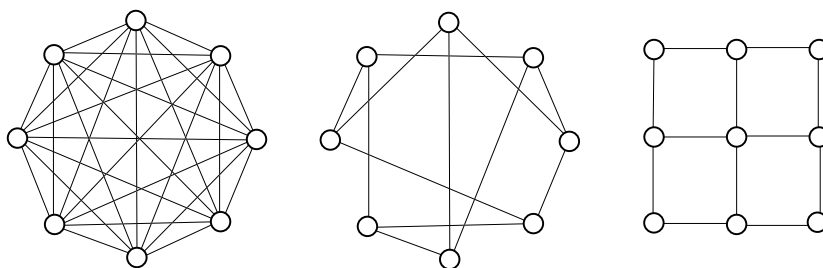


图 1.1: 两体相互作用自旋玻璃模型的三种类型：完全连通网络（左），随机有限连通网络（中），规则晶格（右）。

1.1.1 晶格体系

Edwards-Anderson (EA) 模型[30]是定义于有限维晶格上的两体相互作用自旋玻璃模型。该晶格体系的粒子（例如原子或分子）周期性地排布于 D 维空间中（ $D = 2, 3$ ，但在理论研究中也考虑 $D > 3$ 的情形）；每一个粒子（ $i = 1, 2, \dots, N$ ， N 为格点总数目）都有一个自旋状态 σ_i ， $\sigma_i = +1$ 表示自旋向上， $\sigma_i = -1$ 表示自旋向下。晶格中任意两个相邻的粒子 i 和 j 之间存在自旋相互作用，其能量为 $E_{(i,j)}(\sigma_i, \sigma_j) = -J_{ij}\sigma_i\sigma_j$ ， J_{ij} 是耦合常数。系统的微观构型总数为 2^N ，每一个微观自旋构型 $(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ 的总能量为

$$E(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) = - \sum_{(i,j) \in DL} J_{ij}\sigma_i\sigma_j, \quad (1.1)$$

其中求和局限于 D 维晶格（ D -dimensional lattice, DL）中的所有最近邻粒子对 (i, j) 。这种最近邻关系可以用晶格中的边来表示，见图1.1(右)。

如果所有的耦合常数 J_{ij} 都是铁磁的（ $J_{ij} > 0$ ，相邻自旋取向一致能量最小），那（1.1）就是著名的铁磁伊辛模型。如果所有的耦合常数 J_{ij} 都是反铁磁的（ $J_{ij} < 0$ ，相邻自旋取向相反能量最小），那（1.1）就是反铁磁伊辛模型。在 D 维晶格体系中，反铁磁模型实际上等价于铁磁伊辛模型¹。铁磁伊辛模型的统计物理性质已被研究得很透彻。可以用平均磁矩 m 作为序参量来描述系统的宏观性质，

$$m \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N m_i, \quad (1.2)$$

其中 m_i 是格点 i 的自旋状态 σ_i 的统计平均值。在高温下，系统的平均磁矩 $m = 0$ ，但当温度低于某个临界值（即居里温度 T_c ）时会出现自发的宏观磁矩[1, 2]，见示意图1.2（左），这说明在低温时系统自发形成了有序的状态。系统的平均格点磁化率 χ 是所有格点磁化率 χ_i 的平均值[34]，即

$$\chi \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \chi_i = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1 - m_i^2}{k_B T}, \quad (1.3)$$

它在居里温度 T_c 处达到极大值，说明系统对外界磁场的响应在 T_c 处是最强的。

在Edwards-Anderson自旋玻璃模型中，（1.1）中的一部分近邻对 (i, j) 之间的耦合常数 J_{ij} 是铁磁的，而另一部分近邻对之间的耦合常数是反铁磁的，

¹这是因为整个晶格可以看成是两个子晶格相互嵌套而成的，每一个粒子的所有最近邻粒子都处于另外一个子晶格中。我们可以将一个子晶格里所有粒子的自旋正向都定义为与另一个晶格的自旋正向相反，从而将反铁磁伊辛模型转化成铁磁伊辛模型。

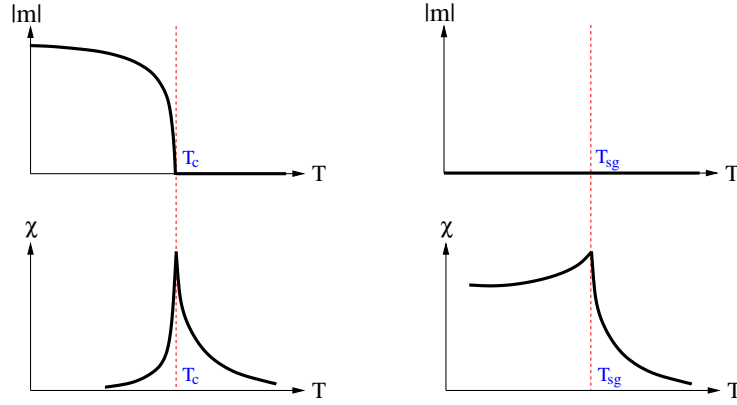


图 1.2: 铁磁伊辛模型（左）和Edwards-Anderson自旋玻璃模型（右）的平均磁矩 $|m|$ 及平均格点磁化率 χ 随温度 T 的变化趋势示意图。

且铁磁和反铁磁的耦合常数杂乱无章地分布于晶格中，没有任何规律。在一个 D 维晶格中产生一个EA模型的样本（sample, instance）很简单，我们先给定耦合常数 J_{ij} 的分布函数，通常是二项分布，

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{2}\delta_{J_{ij}}^J + \frac{1}{2}\delta_{J_{ij}}^{-J},$$

或高斯分布，

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}J} \exp\left[-\frac{J_{ij}^2}{2J^2}\right],$$

然后对晶格中的每一条边 (i, j) 按照这个分布函数独立地赋予一个自旋耦合参数 J_{ij} ，这样就生成了模型（1.1）的一个样本。系统中所有的自旋耦合参数在赋值后就不再改变取值，可变的只是系统的自旋微观状态。

竞争性（例如铁磁和反铁磁）相互作用杂乱无章地分布于系统中，这是许多自旋玻璃模型的一个共同特征。这种无序性会产生许多**阻挫**（frustration），使系统的所有相互作用能量不可能同时处于基态[102]。考虑图1.3所示的回路， $i - j - k - l - i$ ，其能量为

$$-J_{ij}\sigma_i\sigma_j - J_{jk}\sigma_j\sigma_k - J_{kl}\sigma_k\sigma_l - J_{li}\sigma_l\sigma_i.$$

该回路中有三个铁磁相互作用和一个反铁磁相互作用，回路的分支 $i - l - k - j$ 希望自旋 σ_i 和自旋 σ_j 取向一样，而回路的另一分支 $i - j$ 却希望 σ_i 和 σ_j 反向。由于这样的冲突，该回路中至少有一个相互作用必然不是处于能量最低态。

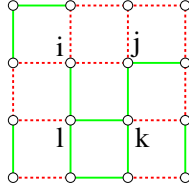


图 1.3: 在回路上的竞争性相互作用导致阻挫。图中实线表示铁磁自旋耦合 ($J_{jk} > 0$), 虚线表示反铁磁自旋耦合 ($J_{ij} < 0$)。如果一个包含4条边的回路上有奇数(1或3)条边的耦合参数为负, 那该回路的4个相互作用能量不可能同时处于各自的最小值。

在一个非平庸自旋玻璃模型系统中存在着许多相互作用回路。如果一个回路上的相互作用能量之和的最小值大于该回路上每一个相互作用能量的最小值之和, 那么我们就称该回路处于阻挫状态中[102]。由于存在着许多阻挫, 能量函数 (1.1) 作为 N 维状态空间 $\{-1, +1\}^N$ 中的一个曲面是很崎岖不平的。这导致系统的平衡统计物理性质和非平衡动力学性质难以在理论上进行精确描述。系统的基态能量构型可能具有很大的简并度, 但由于能量曲面上存在许多局部极小, 导致很难通过局部优化的方法获得模型 (1.1) 的一个最小能量 (基态) 构型²。

与铁磁伊辛模型不同, Edwards-Anderson 自旋玻璃模型在任何非零温度都没有自发的宏观平均磁矩, $m \approx 0$, 说明系统在宏观上总是处于无序的状态。然而如果测量格点的平均磁化率 χ , 人们却发现 χ 在某一临界温度 T_{sg} 处出现一个峰值, 见示意图 1.2 (右)。当 $T > T_{sg}$ 时, 平均格点磁化率 χ 作为温度的函数为 $\chi = 1/(k_B T)$; 与 (1.3) 相比较, 可以看出此时所有格点 i 的微观磁矩 $m_i = 0$ 。当温度降低到 T_{sg} 时, 平均格点磁化率 χ 达到一个最大值, 然后它随着温度的进一步降低而减少。Edwards 和 Anderson [30] 认为在 $T < T_{sg}$ 时系统每个格点 i 都具有非零磁矩, $m_i \neq 0$, 该磁矩随温度降低而增大, 这就能解释为什么平均格点磁化率 χ 不是 T 的单调函数; 但不同格点的微观磁矩有正有负, 在宏观上彼此抵消, 这就解释了系统不表现出宏观磁矩的原因。温度 T_{sg} 称为自旋玻璃相变温度, 在该温度处系统从宏观无序且微观也无序的状态改变为宏观无序但微观有序的状态。

²求解能量函数 (1.1) 的基态能量通常是非常困难的任务, 但对于一维 ($D = 1$) 该问题是非常简单的; 对于二维 ($D = 2$) 情况, 如果晶格的边界是开放边界, 可以将基态问题转化为一个网络配对问题求解, 也可采用键传播 (bond-propagation) 算法 (可参见[58, 108, 101]及其中的引文)。

有限维自旋玻璃模型对于定量描述无序磁性材料的低温性质很重要。但由于晶格中有很多短程回路，导致理论计算很不容易。对这类系统取得的进展主要来自计算机模拟工作，且当前文献对系统的低温本质特性和自旋玻璃相变有很多争议[76, 77, 12, 4, 112, 13]。争议的焦点是系统处于低温自旋玻璃相时热力学宏观态的数目。一种观点认为只有两个热力学宏观态，它们之间存在自旋反演对称性（类似于铁磁伊辛模型的两个低温宏观态，只是自旋玻璃的低温宏观态在宏观上无序而已）；另一种观点是认为在热力学极限下，宏观态的数目趋向于无穷。

1.1.2 完全连通体系

Sherrington-Kirkpatrick (SK) 模型[92]是完全连通自旋玻璃模型的最著名例子。该模型的能量函数为

$$E(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) = - \sum_{1 \leq i < j \leq N} J_{ij} \sigma_i \sigma_j. \quad (1.4)$$

任意两个粒子之间都有相互作用，故模型对应一个完全连通网络，见图1.1(左)。不同粒子对 (i, j) 之间的耦合常数 J_{ij} 是相互独立的随机参数，其分布为

$$P(J_{ij}) = \sqrt{\frac{N}{2\pi J^2}} \exp\left(-\frac{N J_{ij}^2}{2J^2}\right). \quad (1.5)$$

按照分布(1.5)以相互独立的方式产生 $N(N-1)/2$ 个耦合常数 J_{ij} ，就产生了SK模型的一个样本。系统的 N 个自旋状态 $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N$ 是可以随时间改变的，但自旋之间的耦合常数在赋初值后就一直固定不变。由(1.5)可知，耦合常数 J_{ij} 的量级为 $\frac{J}{\sqrt{N}}$ ，即任意一对粒子之间的相互作用都很弱³，但每个自旋都和所有其它自旋有这种弱耦合作用。在SK模型中没有空间结构的概念，任意两个自旋都彼此为最近邻。

p -自旋相互作用模型[45, 42]是SK模型的一个自然推广，该模型包含多体相互作用，其能量函数为

$$E(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) = - \sum_{1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_p \leq N} J_{i_1 i_2 \dots i_p} \sigma_{i_1} \sigma_{i_2} \dots \sigma_{i_p}. \quad (1.6)$$

模型中有 $\frac{N!}{p!(N-p)!}$ 个耦合常数 $J_{i_1 i_2 \dots i_p}$ ，它们是彼此独立的随机参数，服从同样

³之所以要求耦合常数 J_{ij} 为 $N^{-1/2}$ 的量级，是为了保证模型(1.4)所对应的自由能是广延量，参见第1.3节。在分布(1.7)中要求 $J_{i_1 i_2 \dots i_p}$ 为 $N^{-(p-1)/2}$ 的量级也是基于同样的考虑。

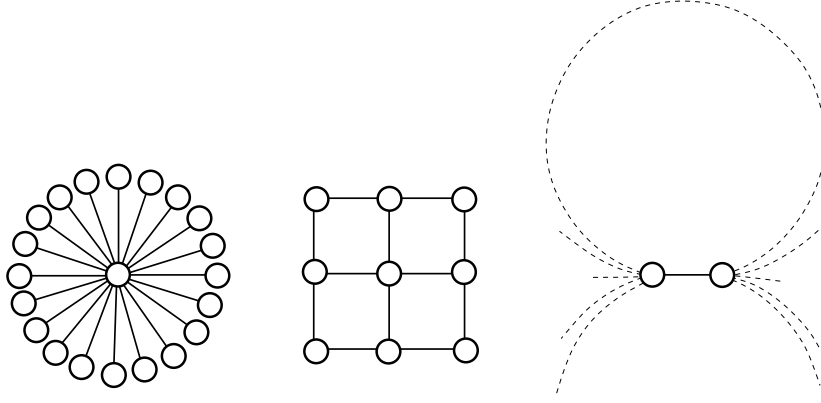


图 1.4: 完全连通自旋玻璃中, 每个节点都与所有其它节点相互作用, 故图中所示中心节点对周围任意一个节点状态的改变不敏感, 只感受到所有这些节点的平均场效果, 该平均场基本不随时间改变; 有限维自旋玻璃模型中, 中心节点与周围节点状态关联很强, 且短程回路的效果明显; 有限连通随机自旋玻璃模型中, 相邻节点主要受到短程关联的影响, 系统中回路的长度正比于 $\ln N$ (N 是节点总数目), 故在理论处理上常常忽略长程关联的影响。

的分布

$$P(J_{i_1 i_2 \dots i_p}) = \sqrt{\frac{N^{p-1}}{\pi p! J^2}} \exp\left(-\frac{N^{p-1}}{p! J^2} J_{i_1 i_2 \dots i_p}^2\right). \quad (1.7)$$

耦合常数 $J_{i_1 i_2 \dots i_p}$ 的量级为 $\frac{J}{N^{(p-1)/2}}$ 。由于多体相互作用的引入, 使 p -自旋相互作用模型与 SK 模型相比, 其统计物理性质有一些定性的不同[45, 42, 119]。这一模型对于理解结构玻璃的统计物理性质有重要的意义[53, 21]。

SK 模型和 p -自旋相互作用模型在自旋玻璃平均场理论研究中发挥了重要的作用[92, 15, 64, 34, 20]。这一类完全连通模型由于不存在空间结构, 且自旋之间的相互作用耦合强度随粒子数 N 的增加而呈现幂次减少的趋势, 在理论处理上相对于晶格模型而言要简单得多。

在 SK 模型中, 每一个粒子 i 受到所有其它粒子的影响, 这些粒子的总效果对应于一个磁场 h_i , 即

$$h_i = \sum_{j \neq i} J_{ij} \sigma_j.$$

不同粒子感受到的磁场 h_i 当然各不相同, 而且各局域场 h_i 也将随时间改变。但由于 h_i 是 $N-1$ 个随机状态的求和, 当粒子 i 周围的粒子改变自旋状态时, 有的

自旋改变将使 h_i 升高，但有的改变将使 h_i 减少。根据中心极限定理可以期望当 $N \rightarrow \infty$ 时，使 h_i 升高的总因素将与使其减少的总因素抵消，从而使 h_i 只在一个典型值附近微小地涨落，任何一个最近邻粒子 j 的自旋状态改变对于粒子 i 的场 h_i 都只有微乎其微的影响。在理论上，就可以用场 h_i 的长时间平均值代替它的瞬时值，导致理论计算的极大简化。这种情况是与有限维自旋玻璃系统非常不一样的，参见示意图1.4。在有限维EA模型中，每个粒子 i 的场 h_i 都是由 i 的最近邻粒子贡献的（是少数几个状态的求和），任意一个最近邻粒子自旋状态的改变对于 h_i 的影响都是很大的，导致 h_i 随时间涨落很大，难以用它的时间平均值代替它的瞬时值。

完全连通自旋玻璃模型作为一类复杂的随机系统，也是数学物理学以及应用数学的新兴研究课题。这方面已有非常重要的研究进展，可以参考[46, 48, 47, 99, 81]。另外，利用场论的方法研究SK模型及其它完全连通自旋玻璃系统也有许多重要的进展，可参见专著[25]（这方面国内学者从1980年代初期就开始[109, 97, 96, 56, 22]）。

1.1.3 随机网络体系

在引入随机有限连通自旋玻璃模型前，我们先介绍随机网络的一些性质。在自旋玻璃研究中所考虑的随机网络通常是Erdős-Rényi (ER) 随机网络[93, 84, 33]或规则随机网络 (regular random graph)。

ER随机网络其实最早由Solomonoff和Rapoport于1951年提出[93, 84]，几年之后Erdős和Rényi从演化这一角度对其性质独立地进行了探讨[33]。在一个包含 N 个节点的网络中，候选边的数目为 $N(N-1)/2$ 。如果将所有这些候选边都包括于网络中，就会形成一个完全连通网络。可以对每条候选边都独立产生一个均匀分布于区间 $[0, 1]$ 的随机实数 r ，若 $r \leq c/(N-1)$ 就将该候选边包含于网络中，反之就舍弃该边。按这一方式将候选边遍历后就生成了一个ER随机网络，该网络中有 N 个节点和大约 $(c/2)N$ 条边。该随机网络唯一的参数 c 是一个与节点数目 N 无关的常数。在随机网络中，任意两个随便选取的节点都可能是最近邻节点，故随机网络没有空间维度的概念。

ER随机网络的性质在数学上已经有透彻的研究[16, 3]。例如一个显而易见的性质是网络的平均连通度为 c 。在一个由节点和边构成的网络中，节点 i 的**连通度** k_i 是指节点 i 所连的边的数目。网络的平均连通度就等于节点连通度的平均值。任选网络中一个节点 i ，能与它相连的候选边的数目为 $(N-1)$ ，但由于每条候选边只有 $c/(N-1)$ 的概率被包含于网络中，故 k_i 的平均值是 c 。另一

个重要的简单性质是ER 随机网络中节点连通度的分布在节点数 N 足够大时趋向于泊松分布。任选网络中的一个节点 i ，发现该节点的连通度 $k_i = k$ 的概率为

$$\text{Prob}[k_i = k] = \frac{(N-1)!}{k!(N-1-k)!} \left(\frac{c}{N-1}\right)^k \left(1 - \frac{c}{N-1}\right)^{N-1-k}. \quad (1.8)$$

这是一个二项分布。当 N 足够大时，上述二项分布趋向于平均值为 c 的泊松分布：

$$\text{Prob}[k_i = k] \simeq \frac{c^k e^{-c}}{k!}. \quad (1.9)$$

由于这一性质，ER随机网络又称为**泊松随机网络**。在ER随机网络中，绝大多数节点的连通度都在平均值 c 附近；在网络中存在一个节点其连通度 k 远远大于平均连通度 c 的概率随 k 的增加而指数式急剧衰减。

习题 1.1 利用 *Sterling* 公式 $n! \simeq \sqrt{2\pi n} n^n e^{-n}$ 验证 (1.9) 的正确性。

上面介绍的ER随机网络的参数是固定的平均连通度 c ，其中包含的边的平均数为 $(c/2)N$ 。另一种在概率论的意义上与之等价的ER随机网络的参数是固定的边数 $M = \frac{c}{2}N$ 。它对应于从所有 $N(N-1)/2$ 条候选边中选择 M 条边而形成的随机网络（文献[68]探讨了生成这种随机网络的具体算法）。当节点数 N 足够大时，这两类随机网络的统计性质完全一样[16]。

另外一种应用很多的随机网络是规则随机网络，又称为**Bethe晶格** (Bethe lattice)。在一个规则随机网络中，每一个节点的连通度都一样 ($k_i \equiv K$)，但边的连接则是完全随机的，没有任何结构，参见图1.1(中)。

给定一个由节点和边构成的网络，它的一条**路径** (path) 是指网络中的一个连通子网络，在该子网络中有两个节点的连通度为1，其它所有节点的连通度为2。而一条**回路** (loop) 是指网络中一个连通子网络，该子网络中所有节点的连通度都等于2。随机网络具有一个很重要的性质，即网络中只有极少的**短回路**，这是随机网络与有限维晶格系统的一个重要的区别。为了理解这一性质，让我们来计算随机网络中包含 n 条边的回路的平均数目。选取网络中的 n 个节点，一共有 $N!/[n!(N-n)!]$ 种方式；将这 n 个不同节点用长度为 n 的回路连起来，最多有 $(n-1)!/2$ 种可能的方式，每种方式对应于网络中真实存在的一条回路的概率是 $[c/(N-1)]^n$ ；故网络中长度为 n 的回路的平均数目为

$$\frac{(n-1)!}{2} \frac{N!}{n!(N-n)!} \left(\frac{c}{N-1}\right)^n.$$

当 $n \ll N$ 时, 这一数目近似为 $c^n/(2n)$ 。这一个计算结果表明, 对于平均连通度 c 为常数但节点数 N 足够大的随机网络, 网络中短回路 (即 $n \sim O(1)$) 的数目与节点数 N 不成比例。就算 N 趋向于无穷大, 随机网络中也只有有限条短回路。

随机网络中很少有短回路。那么对网络中绝大多数节点 i 而言, 如果考虑以 i 为中心且只包含与 i 的最短路径长度小于或等于常数 $n (\ll \ln N)$ 的所有节点构成的子网络, 该子网络将不包含任何回路, 呈树状结构。可用如下的方法粗略估计经过节点 i 的最短回路的长度。假设以节点 i 为中心且半径为 L 的子网络不包含回路。平均而言 i 有 c 条边, 即有 c 个最近邻节点; 它的每一个最近邻节点平均而言有 $c+1$ 个最近邻节点, 故 i 的次近邻节点平均数目为 c^2 ; 依此类推, 可得节点 i 的第 L 阶近邻节点的平均数目为 c^L 。那么在半径为 L 的子网络中, 节点的总数目约为 c^{L+1} 。当这一数目与网络中节点总数目 N 相当时, 子网络中不同的树状分支如果还能继续生长, 必定会重叠起来, 由此我们得出 $L \sim \ln N$, 即经过节点 i 的最短回路的长度为 $\ln N$ 的量级。

随机网络的有限连通度 (c 为常数, 不随网络节点数 N 的增加而增加) 以及局部为树状结构的性质, 使其在自旋玻璃平均场理论中有广泛的应用。作为定义于有限连通随机网络上的自旋玻璃系统的例子, 我们首先考虑 Viana-Bray 模型[103], 其能量函数为

$$E(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) = - \sum_{(i,j) \in RG} J_{ij} \sigma_i \sigma_j. \quad (1.10)$$

这一表达式与 (1.1) 有同样的形式, 关键的不同是其中的求和局限于一个随机网络 (random graph, RG) 上所有的边。与 Edwards-Anderson 模型一样, 在 Viana-Bray 模型中, 每一条边 (i, j) 上的耦合常数 J_{ij} 都是相互独立的随机变量, 服从二项分布或高斯分布。

随机网络的概念稍作推广就是**随机超网络** (random hyper-graph, RHG)。在一个随机超网络中, 一条边连接三个甚至更多节点, 称为**超边** (hyper-edge), 见示意图 1.5, 网络中超边的数目 M 与节点数目 N 为同一量级, $M = \alpha N$ (α 为常数)。一个包含 M 条超边且每条超边连接三个节点的随机超网络可以通过如下方法生成: 系统中候选超边的数目总共有 C_N^3 条, 从中以完全随机的方式选出 M 条作为超网络的边而舍弃其余所有超边, 就形成了一个超网络[68]。随机超网络与随机网络一样, 也具有有限平均连通度, 并且网络的

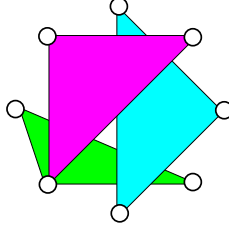


图 1.5: 一个包含8个节点和3条超边的随机超网络。该网络中每条超边连接三个节点。

结构在局部为树状结构。定义于这一超网络上的自旋玻璃模型的例子是：

$$E(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) = - \sum_{(i,j,k) \in RHG} J_{ijk} \sigma_i \sigma_j \sigma_k, \quad (1.11)$$

其中超边 (i, j, k) 上的耦合常数 J_{ijk} 是一个服从某种分布的随机参数。

随机网络自旋玻璃模型介乎完全连通自旋玻璃模型与有限维晶格自旋玻璃模型之间，它们具有有限维模型的一些特征（每个粒子只参与到少数几个相互作用），但没有典型空间尺度（任意两个变量之间都可能存在相互作用）。相对于完全连通模型，人们期望在随机网络自旋玻璃模型上得到的结论可能更能推广到有限维晶格系统。

随机网络局部为树状结构的这一性质也带来理论处理的简化，参见示意图1.4。考虑模型(1.10)中任意一条边 (i, j) 所连的两个节点 i 和 j 。由于自旋相互作用 $-J_{ij}\sigma_i\sigma_j$ ，节点 i 和 j 的状态当然很强地关联在一起。但如果将边 (i, j) 从网络中切除，那么节点 i 和 j 之间的最短路径的长度就变为 $\ln N$ 量级。由于节点之间的关联通常随路径长度的增长而指数衰减，可以期望当系统不是处于某些临界状态时，这些长路径对节点 i 和 j 之间的状态关联只有微小的贡献，在 $N \rightarrow \infty$ 的热力学极限下很可能可以完全忽略。在这一物理图像的指引下，可以构造基于局部关联而忽略回路导致的长程关联的平均场理论，我们将在以后的章节详细介绍这类平均场理论的理论要点。

1.2 信息系统中的自旋玻璃问题举例

由于系统中存在着竞争性的相互作用和阻挫，自旋玻璃系统的能量函数通常不是光滑函数，而是非常崎岖不平。拥有复杂的能量图景（以及自由能

图景)是自旋玻璃系统最本质的特征。在计算机科学、信息理论、神经网络等研究领域,有许多问题同样具有复杂的能量图景,它们也可以作为自旋玻璃系统进行研究。我们在此给出少数几个例子。

1.2.1 约束满足和组合优化

约束满足问题是希望找到 N 个变量的一个或多个微观构型,使 M 个约束能够同时被满足。这一类问题最著名例子是 K -满足问题(K -satisfiability, K -SAT),见示意图1.6(左)。一个 K -满足问题的能量函数可以定义为:

$$E(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) = \sum_{a=1}^M \prod_{i \in \partial a} \frac{(1 - J_a^i \sigma_i)}{2}. \quad (1.12)$$

上式中一共有 M 项能量,每项能量来自于一个约束 a ,其能量或者为0(对应于约束 a 被满足)或者为1(对应于约束 a 没被满足)。 ∂a 表示约束 a 所直接涉及到的变量的集合,对于 K -SAT问题而言,该集合的大小为 K ,即 $|\partial a| = K$ 。在约束 a 的能量项中有 K 个参数, $\{J_a^i : i \in \partial a\}$, 每个参数 J_a^i 都等于1 或者-1。如果 $J_a^i = 1$,就意味着约束 a 希望变量 i 的值为真(用自旋 $\sigma_i = +1$ 表示);如果 $J_a^i = -1$,则意味着该约束希望变量 i 取值为假(用自旋 $\sigma_i = -1$ 表示)。在图1.6中,我们在变量 i 和约束 a 之间连一条实边(虚边),用以表示变量 i 被 a 所限制,且 a 希望其自旋值 $\sigma_i = +1$ ($= -1$)。只要参与到约束 a 的 K 个变量至少有一个的自旋取值与该约束希望的取值相同,那该约束的能量就为0;如果所有这 K 个变量的自旋取值都与约束 a 希望的值相反,那么该约束就没有被满足,其能量等于1。给定一个自旋构型 $\underline{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$, 能量(1.12)等于该构型未满足的约束数目。如果所有的约束都被该构型所满足,那么该构型的能量等于0,这样的构型称为该 K -SAT问题的解。

给定一个 K -SAT问题及其能量函数(1.12),原则上总是可以通过枚举所有 2^N 个自旋构型来判断该问题是否有解。然而当 N 很大时,穷举方式将非常耗时,实际上变得不可行⁴。是否存在效率很高的算法,使判断有解无解所需的计算时间随 N 只是幂次增长而非指数式增长?对于2-SAT问题,的确存在非常高效的算法。但一般的 K -SAT问题($K \geq 3$)是NP完备型约束满足问题⁵,极有可能不存在这样的高效算法能处理所有由(1.12)所表示的问题实

⁴给定一个自旋构型 $\underline{\sigma}$,要通过计算机判断它是否使能量函数(1.12)的值为零是很容易的,假设只需10纳秒,即 10^{-8} 秒。那么一一判断 2^N 个构型的总耗时就是 $2^N \times 10^{-8}$ 秒。当 $N = 50$ 时,这个时间为130天;当 $N = 60$ 时,为13万天!

⁵NP是‘non-deterministic polynomial’的缩写,它包含一大类计算问题。NP完备问题是NP问题集

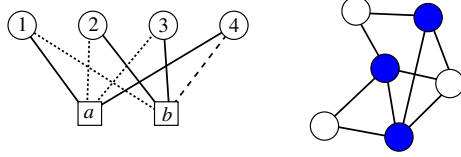


图 1.6: 约束满足问题和组合优化问题举例。(左)代表一个包含4个变量和2个约束的4-SAT公式; 每个变量有 ± 1 两种状态, 但构型 $(-1, 1, 1, -1)$ 是不被约束 a 所允许的, 而构型 $(1, -1, -1, 1)$ 则不被约束 b 所允许。(右)显示了包含6个节点的一个网络的最小覆盖构型。网络中每一条边带来一个约束, 它要求所连的两个节点中至少一个节点要被覆盖。

例[24]。

能量函数 (1.12) 实际上就是一个多体相互作用自旋玻璃模型。对该问题的统计物理学研究近年来取得了非常重要的进展[70, 71, 65, 67]。我们将在第五章研究随机 K -SAT问题的统计物理性质, 并介绍以统计物理平均场理论为基础的高效消息传递算法。当一个 K -SAT问题不存在能量为零的构型时, 一个重要的问题是确定能量函数 (1.12) 的全局极小值, 即最大 K -满足 (MAX- K -SAT) 问题。这个问题是一个组合优化问题, 并且是 NP 困难问题, 极有可能没有通用的高效算法。

网络的着色问题 (graph coloring) 是另一个很有代表性的约束满足问题。该问题的输入是一个包含 N 个节点和 M 条边的网络, 记为 G 。网络 G 中每一条边连接两个不同节点, 且网络中任意两个节点之间最多有一条边相连, 不存在多重边。每个节点 i 的状态用一个颜色 c_i 来表征, 它可以来自 Q 种不同颜色中取值, 即 $c_i \in \{1, 2, \dots, Q\}$ 。需要找到网络 G 的一种涂色方案 $(c_1, c_2, \dots, c_N)$, 使网络中每一条边所连的两个节点颜色不一样。这个问题对应于如下的能量函数:

$$E(c_1, c_2, \dots, c_N) = \sum_{(i,j) \in G} \delta(c_i, c_j). \quad (1.13)$$

上式中 $\delta(c_i, c_j)$ 是Kronecker δ -符号: 当 $c_i = c_j$ 时, $\delta(c_i, c_j) = 1$; 而当 $c_i \neq c_j$ 时, $\delta(c_i, c_j) = 0$ 。对一个给定颜色构型 $(c_1, c_2, \dots, c_N)$, 能量 $E(c_1, \dots, c_N)$ 等

合的一个子集。 NP 完备问题是否存在多项式算法是数学界最著名的未解难题之一。一个问题属于 NP 完备问题, 粗略地说, 就是指构造该问题的一个解可能非常困难, 但要验证一个候选解是否是真正的解却很容易。而如果一个问题属于 NP 困难问题的话, 那么除了构造一个真正的解非常困难外, 连验证一个候选解是否为真正的解也是非常困难的。关于 NP 完备和 NP 困难问题更精确的定义, 可以参阅[24, 43, 49]。

于网络 G 中不满足约束的边（其所连的两个节点颜色相同）的总数目。如果能量表达式（1.13）的基态能量值为零，就意味着网络 G 可以用 Q 种不同颜色着色。

对于平面网络而言，数学家们借助计算机已经证明，当 $Q \geq 4$ 时任意一个平面网络都可以着色，这就是著名的四色定理[5, 7, 6]。但一般而言，判断一个任意给定的网络是否能用 Q 种颜色着色是一个NP-完备问题。统计物理学理论近年来已经被成功应用于随机有限连通网络的着色问题，见文献[74, 55, 113]。

组合优化问题与约束满足问题很类似，它的目标是选取 N 个变量的一组赋值方案，使 M 个约束有尽可能多的约束被满足。前面提到的最大 K -满足问题就是一个组合优化问题。另一个非常基本的组合优化问题是**顶点覆盖问题**（vertex cover），它的目标是将一个由节点和边构成的网络 G 以最少数目的标记来覆盖，使每一条边的两个端点至少有一个端点已被覆盖，见示意图1.6（右）。每个节点 i 的状态为 $c_i \in \{0, 1\}$ ： $c_i = 0$ 意味着节点 i 为空， $c_i = 1$ 表示 i 已被覆盖。每一条边 (i, j) 意味着约束 $c_i + c_j \geq 1$ 。一个满足所有约束的覆盖构型 $(c_1, c_2, \dots, c_N)$ 的能量就是节点覆盖状态之和，即处于被覆盖状态的节点的总数目。最小顶点覆盖问题就是要寻找能量最低的覆盖构型，这是一个极为困难的优化问题。顶点覆盖的统计物理研究有许多文献，例如[105, 106, 116, 49, 117, 115, 124, 118]。第四章将详细介绍自旋玻璃理论在随机顶点覆盖问题上的应用。

顶点匹配（vertex matching）问题的定义与顶点覆盖问题有些类似，它的目标是将网络 G 的节点尽可能多地两两配对，但任一节点不允许参与两个或多个配对。顶点匹配问题与顶点覆盖问题虽然看上去很类似，但在计算复杂性上却有本质的区别：构造最大顶点匹配构型是一简单优化问题，存在很多高效算法。可以利用自旋玻璃理论计算随机顶点匹配问题的基态能量密度[120]及最大顶点匹配问题的熵密度[114]。网络的**可控制性问题**（network controllability）的目标是寻找一组数目最小的目标节点，通过调控这些目标节点的动力学状态来达到对整个网络动力学状态的控制[57]。这一问题可以转化为有向网络上的顶点匹配问题进行研究，故自旋玻璃的理论方法近来也被用于讨论随机网络的可控制问题[57]。顶点匹配问题可以看成是一个资源最佳匹配的问题，它在经济学领域也有重要的应用。

网络的划分（graph partitioning）是将一个网络 G 的 N 个节点分成两个子集，每个子集含有 $N/2$ 个节点（假设 N 为偶数），使两部分之间的连边的数目为最小。另一个有重要应用意义的问题是复杂网络社区结构（community

structure) 问题, 它的目标是将给定网络 G 的节点分配到不同的模块去, 使同一个模块内部边的密度远大于不同模块之间的边密度[44, 78]。网络的划分问题和网络社区结构问题都可以看成自旋玻璃问题进行研究[38, 98, 27, 26]。另一个著名的组合优化问题是旅行推销员问题 (Traveling salesman problem), 它的目标是找到网络 G 的一条最短路径, 使该路径经过网络中的每个节点一次, 也仅仅一次。当前用统计物理学的方法处理旅行推销员问题还不是很成功。

1.2.2 低密度奇偶校验码

在信息科学中数据通常表示为二进制形式, 基本的字符可记为0和1, 任何数据都可以转化为由0和1组成的字符序列。信息的储存和传输都不可避免会受到各种噪声的影响, 导致数据的失真, 最简单的情形是字符序列有些位置的字符由0变为1, 而另外一些位置的字符则由1变为0。为了能够消除噪声对数据的影响, 必须对字符序列添加一些冗余, 以便当字符序列出现错误时, 还能够利用冗余还原其中蕴含的全部信息。

添加冗余最为简单的方式是将字符序列的每一个字符都重复多次。例如在数据传输过程中, 为了将一个字符 (0或1) 从发送端传递到接收端, 可以将该字符重复发送 k 次 (k 为奇数); 然后在接收端对收到的这 k 个字符进行处理, 如果其中有超过一半为1, 则认为发送端的信号为1, 反之则认为发送端的信号为0。这种编码方式称为**复制码** (repetition code)。假设传输线路每发送一个信号都有 p 的概率出错, 那么这种编码方式的**出错率** (error rate) 为

$$P_E = \sum_{r=0}^{\lfloor k/2 \rfloor} \binom{k}{r} (1-p)^r p^{k-r}.$$

给定传输线路的噪声参数 $p > 0$, 出错率 P_E 在 k 有限时总是大于零的。为了无错传输, 需要将信号复制 $k \rightarrow \infty$ 次, 但这时传输效率将变得非常低。

有没有可能在不牺牲信号传输效率的情况下, 通过设计其它更为精妙的添加冗余的方法, 达到完全无错的数据传输? Claude Shannon在1948年发表的经典工作[90, 91]对这个问题在理论上给出了肯定的回答。十五年之后, Robert Gallager在其博士学位论文中提出了具体的编码方案, 即**低密度奇偶校验码** (low-density parity-check code, 简称LDPC) [40, 39]。近年来这一纠错编码方式在信息系统中已被广泛应用。

长度为 n 的二进制字符序列, $(s_1, s_2, \dots, s_n)$, 共有 2^n 个。对每个这样的

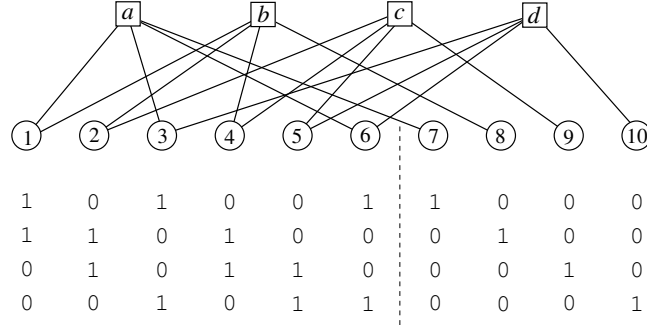


图 1.7: LDPC码示例。长度 $N = 10$ 的字符序列用标号为0到10的圆圈表示，其中前6个圆圈代表的子序列是信息位，而后4个圆圈所代表的子序列为奇偶校验位。四个奇偶校验约束用4个方框表示，每一个约束对应于奇偶校验矩阵的一行。

字符序列我们都添加 M 位冗余字符，这样就形成了一个长度为 $N = n + M$ 的新字符序列，即

$$(s_1, \dots, s_n) \rightarrow (s_1, \dots, s_n, s_{n+1}, \dots, s_N).$$

冗余字符序列 $(s_{n+1}, s_{n+2}, \dots, s_N)$ 并不是任意的，它通过一个编码算法来确定。该算法的核心是要求添加了冗余的字符序列 $(s_1, \dots, s_N)$ 满足如下形式的 M 个线性约束：

$$\sum_{i=1}^N J_a^i s_i = 0 \pmod{2}, \quad \forall a = 1, 2, \dots, M. \quad (1.14)$$

上式中，系数 J_a^i 是约束 a 的参数，它是常数且值域属于集合 $\{0, 1\}$ 。所有这些参数构成一个 $M \times N$ 维的矩阵 $\mathcal{J}$ ，该矩阵就定义了一种LDPC码，见示例图1.7。由于矩阵 $\mathcal{J}$ 中所有的矩阵元只能取值为0或1，每一个约束(1.14)实际上是要求序列 $(s_1, \dots, s_N)$ 的一部分字符之和为偶数。

LDPC矩阵 $\mathcal{J}$ 的前 n 列所构成的子矩阵构成一个 $M \times n$ 维的矩阵 $\mathcal{S}$ ，而后 M 列则构成另一个 $M \times M$ 维的方阵 $\mathcal{P}$ 。例如图1.7的方阵 $\mathcal{P}$ 是一个对角矩阵。一般情况下，由于编码的需要，必须保证矩阵 $\mathcal{P}$ 是满秩的，即所有的本征值都非零。这时，任意给定信息字符序列 $(s_1, s_2, \dots, s_n)$ ，冗余奇偶校验子序

列 $(s_{n+1}, s_{n+2}, \dots, s_{n+M})$ 可以由如下线性方程组唯一地定出来[86]：

$$\mathcal{P} \begin{pmatrix} s_{n+1} \\ \vdots \\ s_{n+M} \end{pmatrix} = \mathcal{S} \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \\ \vdots \\ s_{n-1} \\ s_n \end{pmatrix} \pmod{2} \quad (1.15)$$

LDPC码的核心实际上是一个包含 N 个变量和 M 个约束的随机异或满足 (random exclusive-OR satisfiability) 问题的能量函数，即

$$E(s_1, s_2, \dots, s_N) = \sum_{i=1}^M \frac{1 - \prod_{j \in \partial a} (1 - 2s_j)}{2}. \quad (1.16)$$

上式中， ∂a 表示约束 a 所涉及到的所有字符的位置，即 $\partial a \equiv \{j : J_a^j = 1\}$ 。随机异或问题的能量函数对应于一个多体相互作用自旋玻璃模型，该模型的自旋 $\sigma = +1$ 对应于 $s = 0$ ，而自旋 $\sigma = -1$ 则对应于 $s = 1$ 。随机异或问题的统计物理性质已被非常透彻的研究[85, 36, 37, 66, 23, 63]。

如果字符序列 $(s_1, \dots, s_N)$ 从发送端传输到接收端的过程中没有出现任何错误，那么其能量 $E(s_1, \dots, s_N)$ 必定等于零，我们读取该字符序列的前 n 位，就获得了该序列所蕴含的信息。如果 $E(s_1, \dots, s_N) > 0$ ，那么字符序列在传输过程中必定出现了错误。在这种情况下面临的任务是根据接收到的序列来构造一个与之最相似的新序列 $(s'_1, s'_2, \dots, s'_N)$ ，使其能量 $E(s'_1, s'_2, \dots, s'_N) = 0$ 。这一解码问题可以通过本书将要介绍的消息传递算法高效地解决。

另外一个与随机异或满足问题密切相关的编码方式是Sourlas纠错码[94, 50]。在手机等无线通讯中，还经常用到另外一种纠错编码方式，即**CDMA码** (code-division multiple-access) [104]。CDMA解码问题与自旋玻璃统计物理也有非常密切的关系[100]。

1.2.3 逆伊辛问题

神经元细胞 (neuron) 是神经系统进行信息处理的基本单元[75]。初略的说，单个神经元通过树突 (dendrite) 收集从其它神经元细胞传递来的电信号并对这些电信号进行整合，当整合后的电信号达到某个阈值时，该神经元将产生一个或多个电脉冲，即动作电位 (action potential) 并通过轴突 (axon) 将该脉冲信号传递给其它神经元。多个神经元细胞的树突和轴突相互接触，

就形成一个神经网络, 这是一个有向网络, 且神经元 A 对另一个神经元 B 的影响有两类, 或者是刺激性的, 或者是抑制性的, 这取决于轴突与树突之间传递电化学信号的神经递质的种类。

如果将神经元 i 的状态粗粒化描述, 在一个给定的时间窗口 τ 内(例如20毫秒), 可以将其分为静息态(没有激发动作电位, 用自旋 $\sigma_i = -1$ 代表)和激活状态(激发了一个或多个动作电位, 用 $\sigma_i = +1$ 代表)。通过记录一段时间内神经元 i 的电活动情况并将其粗粒化处理, 就会得到该神经网络的一个状态序列: $(\sigma_i(0), \sigma_i(1), \sigma_i(2), \dots)$, 其中 $\sigma_i(m)$ 表示神经元 i 在时间区间 $[n\tau, (n+1)\tau)$ 的粗粒化状态, 见示意图1.8。

在实验上可以做到同时测量上百个神经元的电活动情况[88, 41]。人们希望根据这些测量数据推测神经网络的内部连接方式, 但这在目前还是非常困难的任务。作为第一步, 人们希望构建简单的唯象模型来描述神经元状态之间的关联。假定 N 个神经元的电活动可以用一个两体相互作用模型来描述, 即

$$\text{Prob}[\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N] \propto \exp \left[\sum_{1 \leq i < j \leq N} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \sum_{i=1}^N h_i \sigma_i \right], \quad (1.17)$$

如何从类似图1.8的观测数据出发来确定模型的耦合参数 J_{ij} 及场 h_i ? 这个问题称为**逆伊辛**(inverse Ising)问题, 即从系统的微观状态出发得出系统的相互作用参数。求解逆伊辛问题的算法在近几年的文献中有很多讨论, 这些方案大多与自旋玻璃平均场理论有关, 见文献[88, 89, 61, 8, 79]。

在一个相互作用系统中, 不同变量之间存在关联。这种关联有可能是直接的关联, 例如节点 i 和节点 j 有自旋耦合相互作用, 故它们的自旋 σ_i 和 σ_j 是关联在一起的; 关联也可能由于非直接的相互作用导致的, 例如两个自旋 σ_i 和 σ_k 如果都和自旋 σ_j 发生相互作用, 那么在自旋 σ_j 的媒介下, 就算 σ_i 和 σ_k 之间没有直接相互作用它们的状态也会出现关联。在不知道系统的微观相互作用机理的情况下, 通过观察系统表现的状态, 将变量之间的直接关联和非直接关联区分开来, 这是一个很有挑战性的任务, 同时也有非常重要的应用价值。让我们以蛋白质序列和蛋白质结构预测为例。

蛋白质是由20种氨基酸构成的一条线性长链, 其中包含的氨基酸单元的数目从几十个到几千个。在细胞体内, 蛋白质链内的氨基酸单元会发生相互作用, 使链条折叠成特定的三维构型, 从而实现其生物学功能。蛋白质的氨基酸序列是会发生变异的, 在进化的进程中, 不同物种内的同一种蛋白质, 虽然实现同一种生物学功能, 但其氨基酸序列却并非完全一样。如果将不

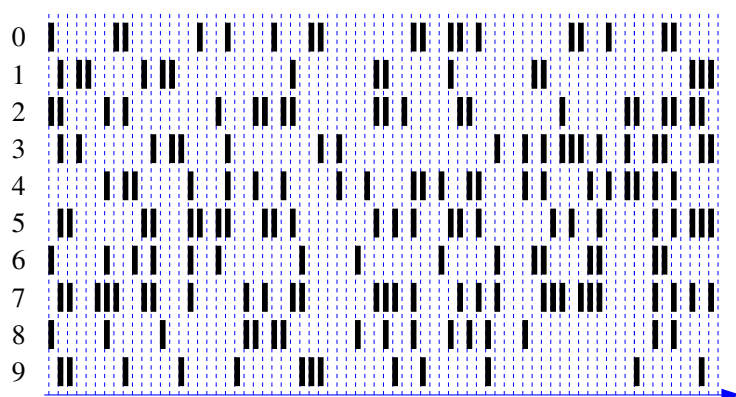


图 1.8: 神经元状态随时间演化示意图。图中每一行是一个神经元状态的时间序列（一共有10个不同神经元）。每一条竖直虚线代表一个宽度为 τ 的时间窗口，若在一个时间窗口内神经元处于激活状态，就用一根小竖棒标记。箭头表示时间增长的方向。

同物种的同一个蛋白质序列做一下序列匹配，那么在氨基酸序列的每一个位置 i 上就会得到20种氨基酸在该位点的一个分布，不同位点的氨基酸分布当然并不相同。蛋白质序列的演化具有协同性，如果在该蛋白质的三维结构中位点 i 和位置 j 的两个氨基酸是有接触的（短程相互作用），那么如果位点 i 处的氨基酸发生了变异，有较大的可能会导致节点 j 处的氨基酸同样发生变异，这样才能使蛋白质的三维结构仍旧保持不变，从而同样能实现其生物学功能。如果已经蛋白质的三维结构，人们当然能够预测出不同位点处的关联情况。但另一种情况是，如果只知道序列，能否从序列中预测哪些位点是在三维结构中距离很近的？这时区分直接的关联与非直接的关联就变得非常重要。因为两个位点 i 和 j 的氨基酸关联较强并不一定意味着它们就是距离很近的，因为它们之间的关联也可能是由于非直接相互作用导致的。近年来人们利用与自旋玻璃有密切联系的方法用于蛋白质结构预测，取得了一定的进展，参见[107, 73, 31]。

1.2.4 矩阵计算与压缩传感

压缩传感（compressive sensing）是稀疏信号处理研究领域一个新兴方法[32]。考虑到信号的稀疏性，它的基本思想是将信号的获取与处理同时进行。我们在此不详细介绍压缩传感的理论，仅通过一个简单的例子来引入这

一问题的关键计算问题。

互联网包含很多节点，每个节点都有一个IP地址。任意两个节点之间如果可以直接进行数据交换，它们之间一定有数据线（边）直接相连，即它们是最近邻节点。因为一个节点通常只和少数一些其它节点有边相连，导致数据包从互联网的一个节点 a 传递到一个目标节点 b 常常要经过一些中间节点 $c, d, \dots$ 。数据包从节点 a 传递到相邻节点 b 会有延时。记互联网的一条边为 e ($e = 1, 2, \dots, M$, M 是一个很大的数)，在该条边上数据包的延时为 x_e ，那么所有边的延时就对应于一个矢量 $\vec{x} = (x_1, x_2, \dots, x_M)$ 。

我们希望能够测量出所有边的延时 x_e 。一种方法是对每一条边分别进行测量，这就需要 M 次独立的局部的测量，但这种方法在网络很大时不容易实现，因为它需要网络的每个节点都做同样的操作。另一种方式是预先设计 m 条路径，每条路径选定一个起始节点 a 和一个终止节点 z ，以及一条从 a 到 z 的路径，测量数据包从 a 传递到 z 所用的时间 y_m 。 y_m 是该路径上所有延时之和。那么就有如下的关系：

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1M} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mM} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_M \end{pmatrix} \quad (1.18)$$

上式中， a_{ij} 表示第 i 条探测路径是否经过网络的第 j 条边，如果经过，那么 $a_{ij} = 1$ ，反之则有 $a_{ij} = 0$ 。一般而言，为了从测量矢量 $\vec{y} = (y_1, y_2, \dots, y_m)$ 获得延时矢量 $\vec{x}$ ，需要矢量 $\vec{y}$ 的维数至少是 M ，即至少需要做 M 次测量。但是，如果矢量 $\vec{x}$ 的许多元素 x_e 都非常小，可以忽略不计，只有一少部分边上的延迟很严重。这时 $\vec{x}$ 就是一个稀疏矢量。在这种情况下，能否只进行 $m \ll M$ 次测量就能重构出稀疏矢量 $\vec{x}$ ？这就是一个典型的压缩传感问题。

一般而言，压缩传感问题的核心是，给定线性方程

$$\vec{y} = \mathbf{A} \vec{x} \quad (1.19)$$

其中 $\vec{x}$ 是一个 M 维列矢量， $\vec{y}$ 是一个 m 维列矢量，而 $\mathbf{A}$ 是一个 $m \times M$ 维测量矩阵。列矢量 $\vec{x}$ 是稀疏的，它只有 ρM 个元素不为零，而其它元素都等于零。我们需要由测量结果 $\vec{y}$ 确定矢量 $\vec{x}$ 的所有非零元素及其取值。

如果矩阵 $\mathbf{A}$ 的所有 m 行是线性不相关的，因而 $\mathbf{A}$ 是一个满秩矩阵，并且行数 $m > \rho M$ ，那么由方程（1.19）一定可以唯一的确定 $\vec{x}$ 。这一问题相当于

寻找一个满足条件 (1.19) 的 M 维矢量 $\mathbf{x}$, 同时要求 $\mathbf{x}$ 中的非零元素为最少。这个优化问题属于 NP-困难类型。常用的另一种途径是寻找满足条件 (1.19) 的矢量 $\mathbf{x}$, 使

$$\sum_{i=1}^M |x_i|$$

达到最小。文献[29]对这一优化问题用消息传递的方法进行了研究。

设计测量矩阵也是压缩传感研究中非常重要的问题。对同一个稀疏信号矢量, 不同的测量矩阵所需的测量数是不相同的。文献[54]对此问题进行了一些探索。

1.3 复本对称破缺平均场理论, 自旋玻璃相变

在自旋玻璃模型中有许多结构参数和相互作用参数, 例如三维EA模型中的自旋耦合常数, 着色问题中网络的连接方式, 等等。当某一自旋玻璃模型的所有参数值都一一指定后, 该模型的一个样本就确定了。同一模型系统的不同样本, 由于模型参数取值的不同, 所表现出来的宏观和微观统计物理性质会有一定程度的差异。自旋玻璃理论研究的任务, 就是要发展理论框架和计算方案, 尽可能精确地描述某一自旋玻璃模型系统的共性, 以及与样本有关的特性。这方面最主要的进展是复本对称破缺平均场理论 (replica-symmetry breaking, 简称RSB) [64]。这一节定性介绍RSB理论的物理图像。

1.3.1 样本系统的平均性质

自旋玻璃系统的宏观性质通常只需少数一些强度量就可以表征, 例如系统的平均能量密度, 自由能密度, 粒子的平均磁矩等等。这些强度量原则上与样本中所有参数的细节有关, 但对于包含粒子数很多的系统而言, 当样本参数改变后, 这些强度量的值只有微不足道的涨落, 可以认为与特定样本无关而只与模型参数的统计性质有关。研究某一自旋玻璃模型的共性, 涉及到根据模型参数的统计性质来定性和定量地预言这些宏观物理学量的特征以及它们对温度或其它环境参数的响应关系。

以EA模型 (1.1) 的自由能为例。系统的平衡自由能与微观构型之间的关系为[1, 2]

$$F_J = -k_B T \ln \left[\sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} \exp(-\beta E_J(\sigma_1, \dots, \sigma_N)) \right], \quad (1.20)$$

其中 k_B 是玻耳兹曼常数, T 是环境温度。在上式中, 我们用下标 J 来暗示微观构型的总能量 E_J 以及系统的总自由能 F_J 都含有样本的所有耦合常数 $\{J_{ij}\}$ 作为参数。考虑由模型(1.1)的所有样本构成的一个系综, 其中样本的耦合常数 $\{J_{ij}\}$ 是根据某一特定概率分布函数 $P[\{J_{ij}\}]$ 来生成的, 那么样本自由能 F_J 就是该概率分布下的一个随机变量。这一随机变量的系综平均值为

$$\bar{F} = \sum_{\{J_{ij}\}} P[\{J_{ij}\}] F_J \quad (1.21a)$$

$$= Nf + o(N). \quad (1.21b)$$

平均自由能与系统粒子数 N 的标度关系是线性的, 该线性系数 f 即为系综中样本的平均自由能密度。另一方面, F_J 的涨落大小可从方差看出, 即

$$\text{Var}(F_J) = \sum_{\{J_{ij}\}} P[\{J_{ij}\}] (F_J - \bar{F})^2 \quad (1.22a)$$

$$= cN^\alpha + o(N^\alpha), \quad (1.22b)$$

其中 c 为常数, α 为一个标度指数。系统中包含的粒子数 N 越多, 自由能 F_J 的涨落也越大; 当 N 足够大时, 二者之间存在标度关系 $\text{Var}(F_J) \sim N^\alpha$, 即自由能 F_J 在不同样本之间的变化幅度为 $O(N^{\frac{\alpha}{2}})$ 的量级。对大多数系统而言, 标度指数 $\alpha < 2$ 。这样自由能的涨落相比于平均自由能而言量级为 $O(N^{-1+\frac{\alpha}{2}})$, 也即系统越大, 自由能的涨落相对于平均值而言就越不重要。从样本系综中完全随机地选择一个样本, 该样本在概率学的意义下都会是一个典型样本, 其自由能密度和其它宏观物理学量的强度值与系综平均值只有微不足道的差别, 反映出系综中样本的共性。由于这样的原因, 人们常常只关心自由能等广延物理学量的密度的系综平均值。

然而要计算自由能的系综平均值需要对一个随机函数的对数进行平均, 直接计算常常很不容易。统计物理学中的**复本方法**(replica method)提供了一种解决方案。该方法的出发点是对随机函数的对数求平均转变为求随机函数平均值的对数。假设 x 是一个随机变量, 服从某个概率分布 $p(x)$, 而 $Z(x)$ 是随机变量 x 的一个正值函数。很容易证明如下表达式是成立的:

$$\sum_x p(x) \ln Z(x) = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \left[\sum_x p(x) Z^n(x) \right], \quad (1.23)$$

其中 n 称为复本数, 它是非负实数。

根据 (1.23) 可将系综平均 $\bar{F}$ 的表达式 (1.21a) 改写为

$$f = - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{k_B T}{nN} \ln \left\{ \sum_{\underline{\sigma}^1, \dots, \underline{\sigma}^n} \sum_{\{J_{ij}\}} P[\{J_{ij}\}] \exp \left(-\beta \sum_{s=1}^n E_J(\underline{\sigma}^s) \right) \right\} \quad (1.24a)$$

$$= - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{k_B T}{nN} \ln \left\{ \sum_{\underline{\sigma}^1, \dots, \underline{\sigma}^n} \exp \left(-\beta E^{(n)}(\underline{\sigma}^1, \dots, \underline{\sigma}^n; \beta) \right) \right\}. \quad (1.24b)$$

上式中我们假设复本数 n 为整数, 并用 $\underline{\sigma}^s \equiv (\sigma_1^s, \sigma_2^s, \dots, \sigma_N^s)$ 表示序号为 s 的复本的微观构型, 其中 $\sigma_i^s \in \pm 1$ 。这 n 个复本的微观构型是彼此完全独立的, 但由于它们都受到同一组随机耦合常数 $\{J_{ij}\}$ 的影响, 当耦合常数的系综平均完成后, 这些微观构型将变得彼此关联起来。这些关联通过有效能量函数 $E^{(n)}(\underline{\sigma}^1, \underline{\sigma}^2, \dots, \underline{\sigma}^n; \beta)$ 来体现。有效能量 $E^{(n)}$ 一般而言与温度有关, 而且它作为复本微观构型 $\underline{\sigma}^1, \dots, \underline{\sigma}^n$ 的函数可能具有很复杂的形式, 但它有一个基本特点: 它是这 n 个复本构型的对称函数。

方程 (1.24b) 右侧大括号内部的表达式实际上是一个统计系统的配分函数, 该系统包含 N 个粒子, 每个粒子 i 有一个矢量状态 $\underline{\sigma}_i \equiv (\sigma_i^1, \sigma_i^2, \dots, \sigma_i^n)$ 。由于有效能量 $E^{(n)}$ 是复本构型的对称函数, 我们自然期望粒子 i 的矢量状态 $\underline{\sigma}_i$ 的平衡概率分布也应该是自旋 $\sigma_i^1, \sigma_i^2, \dots, \sigma_i^n$ 的对称函数。然而实际情况却常常并非这样。这种情况称为复本对称性破缺, 它所对应的物理图像将在下一小节中介绍。

对一个给定自旋玻璃模型, 复本方法首先要计算平均自由能 (1.24b) 在不同整复本数 n 处的值, 从而获得平均自由能作为整数 n 的函数; 在此基础上将该函数解析延拓到非整数 n 值, 包括 $0 < n < 1$ 的区域; 最后求延拓后的函数在 $n \rightarrow 0$ 的极限, 从而获得系统的平均自由能密度 f 。在这一计算过程中需要引进一些序参量以描述复本之间的对称性, 其中最重要的序参量是两个复本之间的相似度。

复本方法的计算过程是较为繁杂的, 只在少数一些无限维自旋玻璃模型上能够解析地进行, 最著名的是Giorgio Parisi所获得的SK模型 (1.4) 的无穷复本对称破缺解[64]。该方法的数学基础当前还不是特别牢固, 例如复本数目 n 从整数解析延拓到 $0 < n < 1$ 区间的方式很可能不是唯一的, 在数学上还值得更深入地研究。本书将不讨论复本方法的细节, 有兴趣的读者请参阅综述文献[64, 34, 20, 99]。

1.3.2 单个样本的统计性质

自旋玻璃系统的系综平均性质不能反映系综中单个样本的特异性，但这种特异性在很多情形下是非常重要的。以 K -SAT问题为例，人们希望能够判断出一个给定的 K -SAT能量函数(1.12)是否存在能量为零的微观构型，也希望能够获得每一个自旋变量的边缘概率分布并利用这些信息来构造出满足所有约束的微观构型。基于恒等式(1.23)的复本方法由于要对样本进行系综平均，不太适合于研究单个样本的局部统计物理性质（例如少量指定粒子的微观状态的边缘概率分布，或者是粒子状态之间的局部关联等等）。

统计物理学研究领域和信息科学研究领域都独立地发展出定量研究单个系统统计性质的近似方法。在信息科学领域中，代表性的进展是信念传播(belief-propagation)算法及其推广[40, 83, 111]，在统计物理学中则是自旋玻璃复本对称破缺空腔方法(cavity method)以及与之相对应的一阶复本对称破缺(1RSB)消息传递算法[64, 62, 65]。我们将在本书的第二章及第三章从配分函数圈图展开的角度来建立复本对称破缺空腔理论，推导出信念传播方程及1RSB消息传播方程，并将在第六章探讨这一理论在有限维自旋玻璃系统的进一步推广。

1.3.3 自旋玻璃相变

复本对称破缺平均场理论的一个序参量是系统任意两个平衡微观构型之间的相似程度。考虑自旋玻璃系统的一个样本。在温度 T 下，随机选取该样本的两个平衡微观构型 $\underline{\sigma}^a$ 和 $\underline{\sigma}^b$ ，这两个构型的交叠(overlap)定义为

$$q_{ab} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^a \sigma_i^b, \quad (1.25)$$

它定量表征两个构型的相似程度。例如，如果构型 $\underline{\sigma}^a$ 和 $\underline{\sigma}^b$ 完全相同，那么 $q_{ab} = 1$ ；如若完全相反，则 $q_{ab} = -1$ ；如果这两个构型有接近一半粒子的自旋相同而其余粒子的自旋相反，则 $q_{ab} \approx 0$ 。

系统的平均能量密度 u 是环境温度 T 的递减函数，温度 T 降低，平均能量密度 $u(T)$ 也将递减。在给定温度 T 处，决定系统平衡统计物理性质的微观构型的能量相对于能量面 $E = Nu(T)$ 只有微弱的涨落，在热力学极限 $N \rightarrow \infty$ 下可以忽略不计。该能量面上任意两个微观构型之间的交叠 q_{ab} 都可以根据(1.25)来计算。让我们记 $\mathcal{N}(q; u(T))$ 为该平衡能量面上交叠 q_{ab} 等于特定值 q 的微观

构型对的总数目, 即

$$\mathcal{N}(q; u(T)) \equiv \frac{1}{2} \sum_{\underline{\sigma}^a} \sum_{\underline{\sigma}^b} \delta\left(q - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^a \sigma_i^b\right). \quad (1.26)$$

式中的 $\delta(x)$ 是Dirac- δ 函数, 而求和符号上的'意味着求和局限于能量密度等于 $u(T)$ 的那些微观构型。由构型对数目可以相应定义构型对的熵密度为

$$s(q; u(T)) \equiv \frac{1}{N} \ln \left[\mathcal{N}(q; u(T)) \right], \quad (1.27)$$

它定量表征交叠等于 q 的构型对的丰富程度。

能量密度为 $u(T)$ 的所有微观构型之间的交叠 q_{ab} 的分布记为 $P(q; u(t))$, 它与熵密度的关系为

$$P(q; u(t)) = \frac{e^{Ns(q; u(t))}}{\sum_{q'} e^{Ns(q'; u(t))}}. \quad (1.28)$$

非均匀相变与簇集相变

为讨论方便起见, 将温度 T 固定时 $s(q; u(T))$ 作为 q 的函数记为 $s_T(q)$ 。与之相应, 将分布函数 $P(q; u(T))$ 记为 $P_T(q)$ 。随着温度 T 的改变, 系统平衡构型空间的性质将发生改变, 导致熵函数 $s_T(q)$ 的形状可能会发生定性的变化, 最主要的是凹凸性的改变, 以及函数极值点数目的改变。

在温度 T 足够高时, 决定系统平衡性质的所有微观构型所处的能量面的能量密度 $u(T)$ 也很高, 该能量面上的微观构型非常的多, 几乎是完全均匀地分布于整个能量面上。这时熵密度 $s_T(q)$ 是交叠 q 的凹 (concave) 函数, 只有一个极大值 (对应于 $q = q_0$, 见示意图1.9)。在这种高温情况下, 系统只有一个热力学宏观态, 它包含能量密度为 $u(T)$ 的几乎全部微观构型。当粒子数 N 足够多时, 由表达式 (1.28) 可以看出, 交叠分布函数 $P_T(q)$ 趋向于 δ -函数, 即

$$P_T(q) = \delta(q - q_0). \quad (1.29)$$

任选该热力学宏观态的两个微观构型, 它们之间的交叠有接近100%的概率等于 q_0 。这种情况在平均场理论中称为**复本对称** (replica symmetric)。对于EA模型 (1.1) 和SK模型 (1.4) 等, 复本对称情形就是系统处于顺磁态, 每一个粒子的自旋平均值都等于零, 而平衡构型之间的平均交叠 $q_0 = 0$ 。

随着温度 T 的降低, 决定系统平衡性质的微观构型所处的能量面的能量密度 $u(T)$ 也降低, 且这些微观构型的总数目也随之减少。当 T 降低到某个临

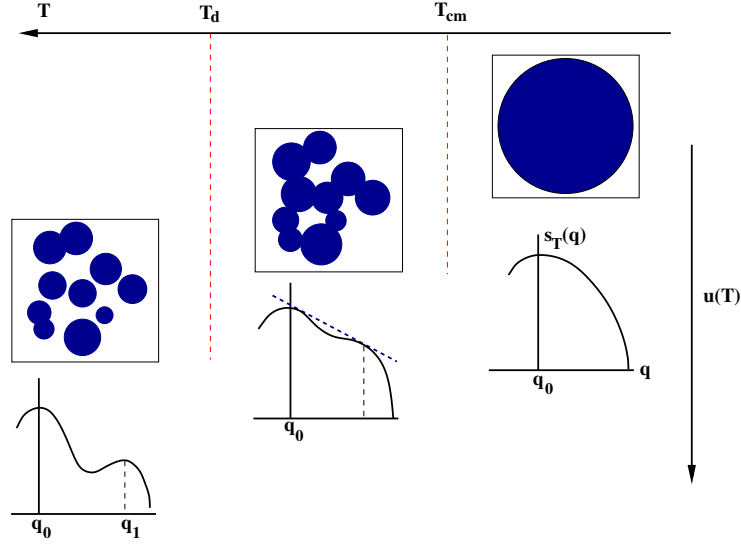


图 1.9: 平衡微观构型所处能量面的结构非均匀相变与簇集相变。平衡能量面的能量密度 $u(T)$ 随着温度 T 的降低 (从右至左) 而递减 (从上到下)。在临界温度 T_{cm} 处, 平衡微观构型不再均匀分布于整个能量面, 而是形成许多局部密集的区域, 这导致构型对熵密度 $s_T(q)$ 的凹凸性发生改变。在更低的临界温度 T_d 处, 平衡能量面最终分裂为许多团簇 (每一团簇对应于一个热力学宏观态), q_1 是团簇内部微观构型之间的平均交叠, 而 q_0 是不同团簇微观构型之间的平均交叠。

界值 $T = T_{cm}$ 时, 熵密度 $s_T(q)$ 虽然仍只有一个极值点, 但它的凹凸性却发生改变, 不再在整个 $-1 \leq q \leq 1$ 区间都是凹函数 (见图1.9)。造成熵函数凹凸性改变的原因是平衡微观构型不再是均匀分布于能量密度为 $u(T)$ 的能量面, 而是在较为密集的分布于很多局部区域。直观上可以将平衡能量面划分为很多社区 (community), 每一个社区对应于能量面上微观构型比较密集的一个区域, 它包含很多微观构型, 这些构型彼此之间比较相似, 有较大的交叠; 而不同社区的微观构型之间的交叠则较小。不同的社区在边缘会有较多重叠, 因而系统仍然只有一个热力学宏观态。

在温度 T_{cm} 处系统的平衡能量面微观构型的局部密度发生了由均匀到不均匀的转变, 温度 T_{cm} 可称为系统的非均匀相变温度[121]。能量面统计性质的这一定性改变是系统出现多个热力学宏观态的前奏。由于熵密度 $s_T(q)$ 仍然只有一个极大值, 故交叠分布函数 $P_T(q)$ 仍然是方程 (1.29) 的形式。

随着温度 T 以及平衡能量面能量密度 $u(T)$ 的进一步降低, 能量面微观构型局部密度的非均匀性进一步明显, 以致于当温度降到另一个临界值 $T = T_d$ 时, 熵密度 $s_T(q)$ 的极大点不再是唯一的, 除了 $q = q_0$ 是一个极大点以外, 至少还存在另外一个特定交叠值 $q = q_1 > q_0$, 在该处 $s_T(q)$ 也达到极大 (见图1.9)。熵函数出现多个极大值的原因是平衡能量面上的不同微观构型社区之间的重叠区域的微观态密度越来越小, 以致这些微观状态的统计权重可以忽略不计, 因而平衡能量面可以认为是分裂成许多相互之间没有交集的**团簇** (cluster), 每个团簇都包含许多微观构型, 对应于系统的一个热力学宏观态。在 $T = T_d$ 处系统平衡能量面结构的转变称为**簇集相变** (clustering transition), 这一相变在结构玻璃研究中又称为**动力学相变** (dynamical transition)。在这一温度处可以认为系统态空间的连通性发生了破缺。

当系统出现许多热力学宏观态以后, 一个最简单的情形就是每一个团簇内部的微观态之间的平均交叠为 $q \approx q_1$, 而不同团簇之间的平均交叠则为 $q \approx q_0$ 。这一简单情形在平均场理论中称为**一阶复本对称破缺** (first-level replica-symmetry-breaking, 1RSB)⁶。这时交叠分布函数 $P_T(q)$ 将是两个或多个 δ -函数的叠加, 其中在 $q = q_0$ 处的尖峰对应于团簇之间的平均交叠, 而在 $q = q_1$ 处的尖峰则对应于团簇内部的平均交叠。然而, 由于不同团簇之间的微观构型对的数目远远超过团簇内部的微观构型对的数目, 导致在 $q = q_0$ 处的 δ -峰的统计权重极接近于1, 而 $q = q_1$ 处的 δ -峰的统计权重则极接近于0。

凝聚相变

当温度 T 低于簇集相变温度 T_d 后, 由于系统出现了许多不同的热力学宏观态, 这时一个热力学宏观态 α 对系统平衡性质的统计权重就依赖于该宏观态的自由能密度 $f_\alpha \equiv u_\alpha(T) - T\phi_\alpha(T)$, 其中 u_α 是该宏观态在温度 T 处的能量密度, 而 $\phi_\alpha(T)$ 则是它的熵密度。一般而言, 只有为数不多的热力学宏观态具有最低的自由能密度 $f_0(T)$, 而自由能密度高于 $f_0(T)$ 的热力学宏观态在数目上则可能远远超出。由于热力学宏观态层次的熵和自由能之间的竞争, 导致在温度 T 高于临界值 T_c 时, 数目上占优势的热力学宏观态决定系统的平衡自由能密度 $f(T)$, 它的值要比最小自由能密度 $f_0(T)$ 大; 但当 $T < T_c$ 时, 自由能密度为最小值 $f_0(T)$ 的那些少数热力学宏观态胜出, 从而系统的平衡自由

⁶更为复杂的情形是不同团簇之间的平均交叠有不同的值。这种情况在平均场理论中称为高阶复本对称破缺。为了不使本节的定性讨论变得过分复杂, 我们假设1RSB是一个很好的近似。值得注意的一点是, 如果自旋玻璃系统的能量函数具有整体的反演对称性, 即微观构型 $(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ 与 $(-\sigma_1, -\sigma_2, \dots, -\sigma_N)$ 有完全相同的能量, 那么就算在1RSB近似中也会有三个平均交叠值, 分别是 $\pm q_1$ 和 q_0 , 而且一定有 $q_0 = 0$ 。

能密度 $f = f_0(T)$ 。

在 T_c 处系统的状态空间发生了一个**凝聚相变** (condensation transition), 即系统的平衡统计物理性质开始由少数一些自由能密度最低的热力学宏观态所决定。这种情况在物理上类似于玻色气体的玻色-爱因斯坦凝聚相变[1, 2]。在 $T < T_c$ 后系统的平衡热力学态通常称为**理想玻璃态** (ideal glass)。实际上系统非常难以在 $T < T_c$ 时达到热力学平衡。

有一些自旋玻璃系统 (例如EA模型和SK模型) 的凝聚相变温度 T_c 等于簇集相变温度 T_d 。

我们将通过两个严格可解模型来进一步演示自旋玻璃状态空间的演化。这两个模型是随机能量模型及随机子集模型。

1.4 随机能量模型

随机能量模型 (random-energy model, 简称REM) 是Benard Derri-da在1980年引入的[28], 该模型非常简单, 能够通过解析方法严格求解, 但它体现出自旋玻璃系统的很多特征, 并且对于定性理解玻璃动力学行为也发挥了作用[17]。

考虑包含 N 个伊辛自旋的一个系统, 它的微观构型数目总数为 2^N 。系统的每一个微观构型 $\underline{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ 有一个能量 E , 但该能量与微观构型 $\underline{\sigma}$ 实际上没有任何关系, 而是一个随机实数, 服从高斯分布

$$P(E) = \frac{1}{\sqrt{\pi N}} \exp\left(-\frac{E^2}{N}\right). \quad (1.30)$$

随机能量模型的一个样本就对应于 2^N 个彼此独立且服从相同分布的随机能量 $\{E_1, E_2, \dots, E_{2^N}\}$, 每一个能量值一经给定就不允许再改变。

给定样本在温度 T 处的平均能量为

$$\langle E \rangle_T = \frac{\sum_{\alpha=1}^{2^N} E_{\alpha} e^{-\beta E_{\alpha}}}{\sum_{\alpha=1}^{2^N} e^{-\beta E_{\alpha}}}. \quad (1.31)$$

而样本的自由能则为

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln \left[\sum_{\alpha=1}^{2^N} e^{-\beta E_{\alpha}} \right]. \quad (1.32)$$

注意到平均能量和自由能都是 2^N 个随机能量的函数, 故它们本身也是随机数。

由于样本的构型能量是服从分布 (1.30) 的独立随机数, 那么样本的 2^N 个微观构型中, 能量密度等于 ϵ 的微观构型的数目的统计期望值就正比于

$$2^N P(N\epsilon) \propto e^{N[\ln 2 - \epsilon^2]}. \quad (1.33)$$

如果 $|\epsilon| < \sqrt{\ln 2}$, 那么样本中能量密度为 ϵ 的微观构型的数目就是 $e^{Ns(\epsilon)}$ 的量级 (这是一个远远大于 1 的数), 其中 $s(\epsilon)$ 是能量密度为 ϵ 的微观构型的熵密度:

$$s(\epsilon) = \ln 2 - \epsilon^2. \quad (1.34)$$

由概率论中的大数定律可知 $s(\epsilon)$ 也是单个样本中能量密度 ϵ 处的熵密度。但当 $|\epsilon| > \sqrt{\ln 2}$ 时, 由 (1.33) 可知系统中能量密度 $|\epsilon| > \sqrt{\ln 2}$ 的微观构型的数目的统计期望值等于零。那么在一个典型样本中, 就不存在任何微观构型具有能量密度 $\epsilon > \sqrt{\ln 2}$ 或 $\epsilon < -\sqrt{\ln 2}$ 。样本的微观构型能量密度处于 $-\sqrt{\ln 2} < \epsilon < \sqrt{\ln 2}$ 的区间。

在温度 T 处, 能量密度为 ϵ 的所有微观构型的总权重为

$$e^{Ns(\epsilon)} e^{-\beta N\epsilon} = e^{N[\ln 2 - \epsilon^2 - \beta\epsilon]}, \quad |\epsilon| < \sqrt{\ln 2}. \quad (1.35)$$

如果温度 $T > T_c = \frac{1}{2\sqrt{\ln 2}}$, 那么上述权重的最大值对应于能量密度 $\epsilon = -\beta/2$, 这也是单个样本的平均能量密度。随着温度的降低, 统计权重 (1.35) 的最大值对应的平均能量密度逐渐降低。当 T 降到 T_c 时, 统计权重的最大值对应于 $\epsilon = -\sqrt{\ln 2}$, 在该能量密度处样本的熵密度降低到零。当温度进一步降低到 $T < T_c$ 时, 由于样本中不存在能量密度更低的微观态, 故样本的平均能量密度保持在 $\epsilon = -\sqrt{\ln 2}$ 处, 且系统平衡性质所对应的微观构型也不再改变。

由上述分析, 可将随机能量模型的自由能密度、平均能量密度及熵密度作为温度的函数分别写为

$$f(T) = \begin{cases} -\frac{1}{4T} - T \ln 2, & -\frac{1}{2T}, & \ln 2 - \frac{1}{4T^2}, & T \geq T_c, \\ -\sqrt{\ln 2}, & -\sqrt{\ln 2}, & 0, & T < T_c. \end{cases} \quad s(T) = \quad (1.36)$$

这些函数在临界温度 T_c 处的一阶导数都不连续。

随机能量模型的单个样本在临界温度 T_c 处发生一个凝聚相变, 即决定系统平衡统计性质的微观状态的数目由正比于粒子数 N 的指数变为只有有限个。在温度 $T < T_c$ 后, 系统的性质就由最低能量密度面上的那些少数构型决定了, 这些少数构型每一个都是一个随机构型。

1.5 随机子集模型

随机子集模型 (random-subcube model) 是Dimitrio Achlioptas为理解随机约束满足问题的解空间结构演化而构造的一个玩具模型[72, 60, 9]。这一严格可解模型对于理解自旋玻璃构型空间的相变也很有启发意义。我们在此简要回顾该模型的要点。

考虑包含 N 个节点的系统，其中每个节点 i 有伊辛自旋状态 $\sigma_i \in \pm 1$ 。系统一共有 2^N 个微观构型，但假设系统受到某些约束，以致于只有处于一些子集内的微观构型才是被容许的。这些微观构型子集的数目为

$$\mathcal{M} = 2^{N(1-\alpha)},$$

其中 $0 < \alpha < 1$ 是控制参数。每一个子集 $r \in \{1, 2, \dots, \mathcal{M}\}$ 都包含很多微观构型，这些微观构型 $\underline{\sigma} \equiv (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ 的特性是：(1) 不同节点 i 和 j 的自旋是完全独立不相关的；(2) 任意节点 i 的自旋 σ_i 有 $(1-p)$ 的概率在子集 r 中是凝固的（它在 r 的所有微观构型中都取同一个值），且 σ_i 凝固为 $+1$ 态的概率等于它凝固为 -1 态的概率；(3) 任意节点 i 的自旋 σ_i 有 p 的概率在子集 r 中是完全自由的，即如果 $\underline{\sigma}$ 属于子集 r ，那么将该构型中节点 i 的自旋改变符号后的微观构型也属于 r 。概率 p 是随机子集模型的另外一个控制参量。自旋态可自由取值的节点称为子集 r 的自由节点。

假设有 $N\rho_0$ 个节点的自旋态在子集 r 中自由的，那么该子集包含的微观构型总数就是 $2^{N\rho_0}$ ，因而子集 r 的熵密度为 $\rho_0 \ln 2$ ，即自由节点密度 ρ_0 完全决定子集的大小。在本节以后的讨论中，我们将自由节点密度为 ρ_0 的随机子集称为 ρ_0 -子集。从 $\mathcal{M}$ 个子集中完全随机挑选一个，该子集的自由节点密度为 ρ_0 的概率根据二项分布为

$$\binom{N}{N\rho_0} p^{N\rho_0} (1-p)^{N(1-\rho_0)} \approx \left(\frac{p}{\rho_0}\right)^{N\rho_0} \left(\frac{1-p}{1-\rho_0}\right)^{N(1-\rho_0)}.$$

系统中 ρ_0 -子集的平均数目 $\mathcal{M}_{\rho_0}$ 为

$$\mathcal{M}_{\rho_0} \approx 2^{N(1-\alpha)} \left(\frac{p}{\rho_0}\right)^{N\rho_0} \left(\frac{1-p}{1-\rho_0}\right)^{N(1-\rho_0)} = e^{N\Sigma(\rho_0)}, \quad (1.37)$$

其中 $\Sigma(\rho_0)$ 是子集层次的熵密度，它定量表征系统中 ρ_0 -子集的丰富程度，表达式为

$$\Sigma(\rho_0) = (1-\alpha) \ln 2 + \rho_0 \ln(p/\rho_0) + (1-\rho_0) \ln[(1-p)/(1-\rho_0)]. \quad (1.38)$$

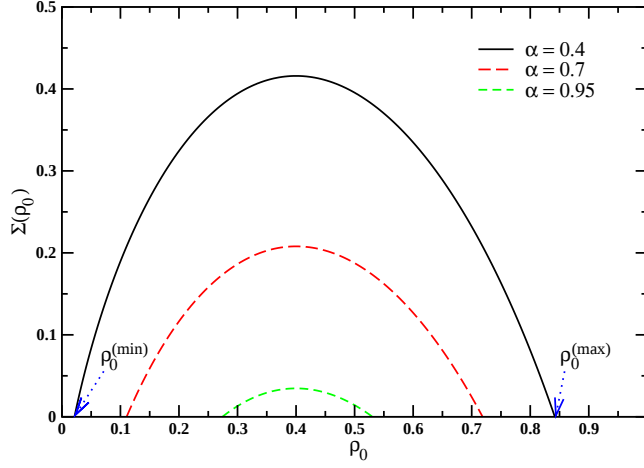


图 1.10: 复杂度 $\Sigma(\rho_0)$ 作为自由节点密度 ρ_0 的函数 (参数 $p = 0.4$, 对应 $\alpha_d = 0.485427$ 及 $\alpha_c = 0.913998$)。 $\Sigma(\rho_0)$ 的极大值在 $\rho_0 = p$ 处, 而当 $\rho_0 < \rho_0^{(min)}$ 或 $\rho_0 > \rho_0^{(max)}$ 时其值为负, 意味着绝大部分随机子集的自由节点密度 $\rho_0 = p$, 且系统中不存在 $\rho_0 < \rho_0^{(min)}$ 或 $\rho_0 > \rho_0^{(max)}$ 的随机子集。当参数 α 增加时, 函数 $\Sigma(\rho_0)$ 整体向下移动但形状保持不变, 导致 $\rho_0^{(max)} - \rho_0^{(min)}$ 变小。

函数 $\Sigma(\phi)$ 在自旋玻璃文献中通常称为系统的**复杂度** (complexity) [69, 62], 在结构玻璃研究领域又称为**结构熵** (structural entropy)。

图1.10显示了 $\Sigma(\rho_0)$ 函数的形状。复杂度 $\Sigma(\rho_0)$ 在 $\rho_0 = p$ 处有唯一的极大值。方程 $\Sigma(\rho_0) = 0$ 有两个根, 分别为 $\rho_0 = \rho_0^{(min)}$ 和 $\rho_0 = \rho_0^{(max)}$ 。复杂度 $\Sigma(\rho_0)$ 在 $\rho_0^{(min)} < \rho_0 < \rho_0^{(max)}$ 区间为正, 但当 $\rho_0 > \rho_0^{(max)}$ 或当 $\rho_0 < \rho_0^{(min)}$ 时为负, 说明在 $N \rightarrow \infty$ 的极限情况下, 所有的随机子集的自由节点密度 $\rho_0 \in [\rho_0^{(min)}, \rho_0^{(max)}]$ 。

随机子集的总数目 $\mathcal{M}$ 随参数 α 的增加而减少, 复杂度函数 $\Sigma(\rho_0)$ 也相应地向下平移, 从而区间 $[\rho_0^{(min)}, \rho_0^{(max)}]$ 变小, 以致于当 $\alpha = 1$ 时该区间收缩为一个点, 即 $\rho_0^{(min)} = \rho_0^{(max)} = p$ 。

1.5.1 各态历经破缺, 典型随机子集

是否任意一个微观构型都属于至少一个子集? 考虑完全随机产生的一个

构型 $\underline{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$, 它属于某一子集 r 的概率为

$$\left(p + \frac{1-p}{2}\right)^N = \left(\frac{1+p}{2}\right)^N. \quad (1.39)$$

因而含有构型 $\underline{\sigma}$ 的子集的平均数目为

$$2^{N(1-\alpha)} \left(\frac{1+p}{2}\right)^N = e^{N[(1-\alpha) \ln 2 + \ln \frac{1+p}{2}]}. \quad (1.40)$$

当 $\alpha < \alpha_d = \frac{\ln(1+p)}{\ln 2}$ 时, 这是一个巨大的数目, 即任意一个微观构型都同时属于指数多的子集, 所有子集组成的并集包含系统的所有微观构型。然而, 当 $\alpha > \alpha_d$ 以后, 随机产生的一个微观构型 $\underline{\sigma}$ 有趋向于 1 的概率不属于任何子集, 这样由所有子集构成的并集中包含的微观构型数目的总数目就远远小于 2^N 。

当参数 $\alpha > \alpha_d$ 时, 让我们进一步考虑一个属于某个子集 r 的微观构型 $\underline{\sigma}$ 。这个构型也属于另外一个子集 r' 的概率也等于表达式 (1.39), 因而包含该构型的其它子集的平均数目同样由 (1.40) 给出。这一平均数目远远小于 1, 意味着子集 r 中绝大多数微观构型只属于 r , 只有比例约为 $2^{-N(\alpha-\alpha_d)}$ 的微观构型还同时属于一个 (甚至多个) 其它子集。由于比例 $2^{-N(\alpha-\alpha_d)}$ 非常接近于零, 故两个随机子集 r 和 r' 就算有交集, 交集中包含的微观构型数目也远远小于子集中微观构型的总数目, 完全可以忽略不计。因而当 $\alpha > \alpha_d$ 时, 每一个子集的几乎所有微观构型都处于子集内部 (不再属于其它子集), 只有比例极小的微观构型处于子集的边界 (边界的构型同时属于另外一个或多个子集)。由于子集的边界包含的微观构型数目远远少于子集内部微观构型的数目, 从熵的角度可以认为每一个子集 r 都代表一个热力学宏观态, 具有特定的熵密度 $\phi_r = \rho_0 \ln 2$ 。由所有子集的并集构成的微观构型空间从熵的角度而言可以认为不再是各态历经的。故 $\alpha = \alpha_d$ 处对应于系统构型空间发生各态历经破缺 (ergodicity breaking)。

给定 $\alpha > \alpha_d$, 系统构型空间一共包含多少微观构型? 在忽略子集之间的交集后, 微观构型的总数目 $\mathcal{N}$ 的表达式为

$$\mathcal{N} = \int_{\rho_0^{(min)}}^{\rho_0^{(max)}} d\rho_0 \mathcal{M}_{\rho_0} 2^{N\rho_0} = \int_{\rho_0^{(min)}}^{\rho_0^{(max)}} d\rho_0 e^{N[\Sigma(\rho_0) + \rho_0 \ln 2]}. \quad (1.41)$$

在 $N \rightarrow \infty$ 的热力学极限, 微观构型总数目 $\mathcal{N}$ 几乎全部由自由节点密度 $\rho_0 \approx$

ρ_0^* 的那些随机子集所贡献, 其中 ρ_0^* 对应于上式中指数系数的最大值, 即

$$\rho_0^* = \operatorname{argmax}_{\rho_0^{(min)} \leq \rho_0 \leq \rho_0^{(max)}} [\Sigma(\rho_0) + \rho_0 \ln 2] \quad (1.42a)$$

$$= \min\left(\frac{2p}{1+p}, \rho_0^{(max)}\right). \quad (1.42b)$$

系统构型空间的熵密度 s 为

$$s \equiv \frac{1}{N} \ln \mathcal{N} \quad (1.43a)$$

$$= \max_{\rho_0^{(min)} \leq \rho_0 \leq \rho_0^{(max)}} [\Sigma(\rho_0) + \rho_0 \ln 2] \quad (1.43b)$$

$$= \begin{cases} \Sigma(\rho_0^*) + \rho_0^* \ln 2 & \rho_0^* < \rho_0^{(max)}, \\ \rho_0^{(max)} \ln 2 & \rho_0^* = \rho_0^{(max)}. \end{cases} \quad (1.43c)$$

自由节点密度为 ρ_0^* 的随机子集称为系统的典型随机子集, 因为系统的熵密度完全由这些随机子集构成的并集决定。

当 $\alpha < \alpha_c = \frac{1-p}{1+p} + \frac{\ln(1+p)}{\ln 2}$ 时, $\rho_0^* < \rho_0^{(max)}$ 。这时系统的绝大多数微观构型都包含于自由节点密度为 ρ_0^* 的随机子集内, 这些随机子集的数目是 N 的指数函数 ($\approx e^{N\Sigma(\rho_0^*)}$)。随着 α 的增加 $\rho_0^{(max)}$ 变得越来越小, 以致于在 $\alpha = \alpha_c$ 处 ρ_0^* 和 $\rho_0^{(max)}$ 相互重合。在 $\alpha \geq \alpha_c$ 的区间, 对系统熵密度有贡献的随机子集是那些自由节点密度最大的子集, 而这些随机子集的数目并不多 ($\Sigma(\rho_0^{(max)}) = 0$)。在临界参数 α_c 处系统的微观构型空间发生了一个凝聚相变, 构型空间的统计权重开始集中于少数一些最大随机子集。

1.5.2 构型空间的连通性

考虑一个自由节点密度为 ρ_0 的子集 r 。随机选取另一个自由节点密度为 ρ'_0 的子集 r' , 它与 r 的交集不是空集的概率为

$$P_{\cap}(\rho_0, \rho'_0) = \frac{\sum_{m=m_1}^{m_2} C_{N\rho_0}^m C_{N(1-\rho_0)}^{N\rho'_0-m} \left(\frac{1}{2}\right)^{N(1-\rho_0-\rho'_0)+m}}{\sum_{m=m_1}^{m_2} C_{N\rho_0}^m C_{N(1-\rho_0)}^{N\rho'_0-m}}. \quad (1.44)$$

上式中, m 是同时属于子集 r 和子集 r' 的自由节点的数目, $m_1 = \max[0, N(\rho_0 + \rho'_0 - 1)]$ 和 $m_2 = \min(N\rho_0, N\rho'_0)$ 分别是该数目的下限及上限。当 N 足够大时, 上式可以近似写为

$$P_{\cap}(\rho_0, \rho'_0) \approx \exp[N(\phi_1 - \phi_2)], \quad (1.45)$$

系数 ϕ_1 和 ϕ_2 是如下长式的简记:

$$\begin{aligned}
 \phi_1 &= \rho_0 \ln \rho_0 + (1 - \rho_0) \ln(1 - \rho_0) - (1 - \rho_0 - \rho'_0) \ln 2 \\
 &\quad - \min_{x_1 \leq x \leq x_2} \left[x \ln 2 + x \ln x + (1 - \rho_0 - \rho'_0 + x) \ln(1 - \rho_0 - \rho'_0 + x) \right. \\
 &\quad \left. + (\rho_0 - x) \ln(\rho_0 - x) + (\rho'_0 - x) \ln(\rho'_0 - x) \right] \\
 &= \rho_0 \ln \rho_0 + (1 - \rho_0) \ln(1 - \rho_0) - \frac{2 - \rho_0 - \rho'_0}{2} \ln 2 \\
 &\quad - \ln \left[\frac{2\rho_0\rho'_0}{Q - 2 + \rho_0 + \rho'_0} - 1 \right] - \frac{\rho_0 + \rho'_0}{2} \ln \left[\frac{Q + \rho_0 + \rho'_0 - 2}{Q - \rho_0 - \rho'_0} \right] \\
 &\quad - \frac{\rho_0 - \rho'_0}{2} \ln \left[\frac{2 - Q + \rho_0 - \rho'_0}{2 - Q - \rho_0 + \rho'_0} \right], \tag{1.46}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \phi_2 &= \rho_0 \ln \rho_0 + (1 - \rho_0) \ln(1 - \rho_0) \\
 &\quad - \min_{x_1 \leq x \leq x_2} \left[x \ln x + (1 - \rho_0 - \rho'_0 + x) \ln(1 - \rho_0 - \rho'_0 + x) \right. \\
 &\quad \left. + (\rho_0 - x) \ln(\rho_0 - x) + (\rho'_0 - x) \ln(\rho'_0 - x) \right] \\
 &= -\rho'_0 \ln \rho'_0 - (1 - \rho'_0) \ln(1 - \rho'_0), \tag{1.47}
 \end{aligned}$$

其中 $x_1 = m_1/N = \max(0, \rho_0 + \rho'_0 - 1)$, $x_2 = m_2/N = \min(\rho_0, \rho'_0)$, 而 $Q = \sqrt{(2 - \rho_0 - \rho'_0)^2 + 4\rho_0\rho'_0}$.

自由节点密度为 ρ'_0 的随机子集数目 $\mathcal{M}_{\rho'_0} \approx e^{N\Sigma(\rho'_0)}$, 故自由节点密度为 ρ'_0 且与子集 r 的交集为非空集合的子集的平均数目为

$$\mathcal{M}_{\rho'_0} P_{\cap}(\rho_0, \rho'_0) \approx e^{N\Sigma_{\rho_0}(\rho'_0)}, \tag{1.48}$$

其中

$$\Sigma_{\rho_0}(\rho'_0) = \phi_1 - \phi_2 + \Sigma(\rho'_0). \tag{1.49}$$

熵密度 $\Sigma_{\rho_0}(\rho'_0)$ 定量表征自由节点密度为 ρ'_0 且与一个 ρ_0 -子集的交集非空的随机子集的丰富程度。如果 $\Sigma_{\rho_0}(\rho'_0) > 0$, 说明几乎每一个 ρ_0 -子集都和非常多的 ρ'_0 -子集相交; 但若 $\Sigma_{\rho_0}(\rho'_0) < 0$, 则意味着几乎所有 ρ_0 -子集都不和自由节点密度为 ρ'_0 的随机子集相交, 只有非常非常小比例的 ρ_0 -子集与 ρ'_0 -子集有非空交集。

作为示例, 图1.11显示了在参数 $p = 0.4$, $\alpha = 0.7$ 时的熵密度函数 $\Sigma_{\rho_0}(\rho'_0)$ 。对于 $\rho_0 = \rho_0^{(max)} = 0.719$ 的一个最大子集而言, 和它的交集非空的其它随机子集的自由节点密度 ρ'_0 属于区间 $[0.228, 0.676]$; 对于 $\rho_0 = \rho_0^* = 0.571$ 的一个

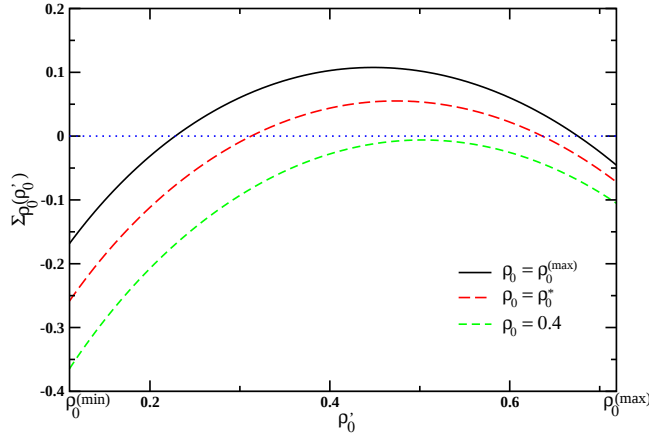


图 1.11: 控制参数 $p = 0.4$, $\alpha = 0.7$ 的随机子集模型的熵密度 $\Sigma_{\rho_0}(\rho'_0)$ [见 (1.49) 式]。此系统的 $\rho_0^{(min)} = 0.110575$, $\rho_0^{(max)} = 0.718616$, 而 $\rho_0^* = 0.5714286$ 。当 ρ_0 减小时, 函数 $\Sigma_{\rho_0}(\rho'_0)$ 向下移动并且形状发生一些改变。

典型子集而言, 和它的交集非空的其它随机子集的自由节点密度则缩小为区间 $[0.312, 0.636]$ 。自由节点密度 $\rho_0 = p = 0.4$ 的随机子集的数目最多, 但它们之中的绝大多数都是孤立子集, 和其它任何任何随机子集都没有交集。由图 1.11 注意这样一种情况可能出现, 即 $\Sigma_{\rho_0}(\rho'_0) < 0$ 而 $\Sigma_{\rho'_0}(\rho_0) > 0$ (或者刚好相反)⁷。

我们可以构造一个随机子集的网络, 该网络的每一个点代表一个随机子集, 而如果两个随机子集之间的交集非空就用一条边将它们对应的点连起来。由上面的这些分析和计算可以看出, 当 $\alpha > \alpha_d$ 以后, 虽然系统的构型空间从熵的角度来看是处于各态历经破缺的状态, 分裂成不同的热力学宏观态, 每一个这样的宏观态对应于一个随机子集, 但一些随机子集之间还是相互连通的。什么情况下这种连通性会被破坏? 我们最为关心的是决定系统统计性质的典型随机子集所构成的子网络的连通性。图 1.12 显示了熵密度 $\Sigma_{\rho_0}(\rho_0)$ 随参数 α 的变化情况 (另一控制参数 p 固定为 $p = 0.4$)。由该图可知, 当 $\alpha < 0.751$ 时每一个典型随机子集都和非常多的其它典型随机子集相连; 但当 $\alpha > 0.751$ 时几乎所有典型随机子集都不和另外任何一个典型随机子集相连。决定系统统

⁷ 这种看似非常奇怪的情况其实容易理解。当 $\Sigma(\rho_0) > \Sigma(\rho'_0)$ 时, 有可能几乎所有 ρ'_0 -子集都与许多 ρ_0 -子集相交, 这些 ρ_0 -子集的总数目的量级不会超过 $e^{N[\Sigma(\rho'_0) + \Sigma(\rho_0)]}$, 但这一数目与 ρ_0 -子集的总数目 $e^{N\Sigma(\rho_0)}$ 相比可能仍然是可以忽略不计的, 即绝大部分 ρ_0 -子集都不与任何 ρ'_0 -子集相交。

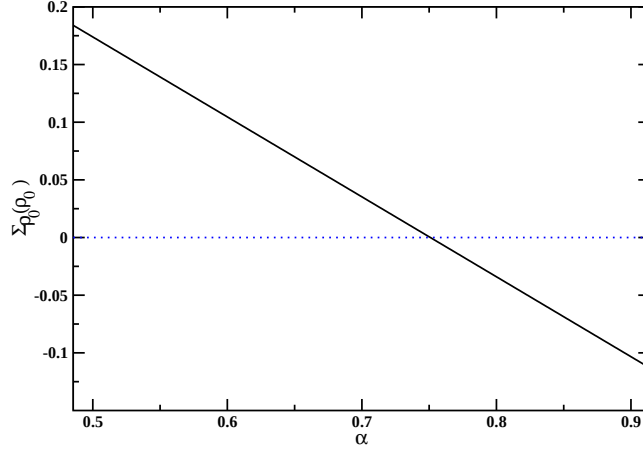


图 1.12: 控制参数 $p = 0.4$ 时, 随机子集模型的熵密度 $\Sigma_{\rho_0}(\rho_0)$ 随另一控制参数 α 的变化情况。

计性质的典型随机子集构成的子空间在 $\alpha = 0.751$ 处发生了连通性的相变, 从是一个连通的子空间变为一个互不连通的子空间。

关于本书

随机能量模型和随机子集模型可以通过概率论的分析严格求解。但大多数自旋玻璃模型都比这两个玩具模型要复杂得多, 严格解析求解非常困难, 需要发展计算方法和平均场理论。

借助于配分函数圈图展开这一数学框架[110, 123, 122], 这本小书将详细介绍自旋玻璃复本对称破缺空腔理论, 并将这一理论推广到有限维系统。希望这一小册子能帮助没有经验但有兴趣的读者迅速理解自旋玻璃平均场理论, 掌握分布式消息传递算法的要点, 减少阅读前沿文献的困难。更资深的读者也许会觉得配分函数圈图展开这一框架让自旋玻璃平均场理论的数学基础更加牢固和严格。有限维自旋玻璃系统的最主要特征是系统中包含许许多多短程回路, 它们导致变量之间复杂的短程关联。书中讨论了配分函数在区域图上的展开方法并推导出一系列消息传递方程。这些区域图消息传递方程为处理真实系统的短程关联提供了一种计算方案, 但对其计算效率作出评估和改进需要积累更多的应用实例。我们期望区域图消息传递计算方案在进一步优化后, 能更精确地描述有限维自旋玻璃系统的统计物理性质和复杂能量

图景。

本书不打算对自旋玻璃统计物理学及其应用进行全方位的描述。内容更全面的教材可参见[60, 80, 34]。关于自旋玻璃理论的更早期书籍和综述可参考[64, 34, 15]。对自旋玻璃平均场理论的一些概念的入门性介绍可以参见[20]。

自旋玻璃动力学性质也是自旋玻璃统计物理理论研究极为重要的分支, 但本书完全没有讨论这方面的进展。有兴趣的读者可以参阅[20, 25, 21]。

参考文献

- [1] 李政道: 李政道讲义-统计力学. 上海科学技术出版社, 上海(2006)
- [2] 林宗涵: 热力学与统计物理学. 北京大学出版社, 北京(2007)
- [3] Albert, R., Barabási, A.L.: Statistical mechanics of complex networks. *Rev. Mod. Phys.* **74**, 47–97 (2002)
- [4] Alvarez Baños, R., Cruz, A., Fernandez, L.A., Gil-Narvion, J.M., Gordillo-Guerrero, A., Guidetti, M., Maiorano, A., Mantovani, F., Marinari, E., Martin-Mayor, V., Monforte-Garcia, J., Muñoz Sudupe, A., Navarro, D., Parisi, G., Perez-Gavero, S., Ruiz-Lorenzo, J.J., Schifano, S.F., Seoane, B., Tarancon, A., Tripiccion, R., Yllanes, D.: Nature of the spin-glass phase at experimental length scales. *J. Stat. Mech.: Theor. Exp.* p. P06026 (2010)
- [5] Appel, K., Haken, W.: Every planar map is four colorable. part i: Discharging. *Illinois J. Math.* **21**, 429–490 (1977)
- [6] Appel, K., Haken, W.: Solution of the four color map problem. *Scientific American* **237** (4), 108–121 (1977)
- [7] Appel, K., Haken, W., Koch, J.: Every planar map is four colorable. part ii: Reducibility. *Illinois J. Math.* **21**, 491–567 (1977)
- [8] Aurell, E., Ekeberg, M.: Inverse ising inference using all the data. *Phys. Rev. Lett.* **108**, 090,201 (2012)
- [9] Bapst, V., Foini, L., Krzakala, F., Semerjian, G., Zamponi, F.: The quantum adiabatic algorithm applied to random optimization prob-

- lems: The quantum spin glass perspective. *Phys. Rep.* **523**, 127–205 (2013)
- [10] Barabási, A.L.: The network takeover. *Nature Physics* **8**, 14–16 (2012)
- [11] Belletti, F., Cotallo, M., Cruz, A., Fernandez, L.A., Gordillo-Guerrero, A., Guidetti, M., Maiorano, A., Mantovani, F., Marinari, E., Martin-Mayor, V., Muñoz Sudupe, A., Navarro, D., Parisi, G., Perez-Gaviro, S., Ruiz-Lorenzo, J.J., Schifano, S.F., Sciretti, D., Tarancon, A., Tripiccion, R., Velasco, J.L., Yllanes, D.: Nonequilibrium spin-glass dynamics from picoseconds to a tenth of a second. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 157,201 (2008)
- [12] Belletti, F., Cruz, A., Fernandez, L.A., Gordillo-Guerrero, A., Guidetti, M., Maiorano, A., Mantovani, F., Marinari, E., Martin-Mayor, V., Monforte, J., Muñoz Sudupe, A., Navarro, D., Parisi, G., Perez-Gaviro, S., Ruiz-Lorenzo, J.J., Schifano, S.F., Sciretti, D., Tarancon, A., Tripiccion, R., Yllanes, D.: An in-depth view of the microscopic dynamics of ising spin glasses at fixed temperature. *J. Stat. Phys.* **135**, 1121–1158 (2009)
- [13] Billoire, A., Fernandez, L.A., Maiorano, A., Marinari, E., Martin-Mayor, V., Parisi, G., Ricci-Tersenghi, F., Ruiz-Lorenzo, J.J., Yllanes, D.: Comment on “evidence of non-mean-field-like low-temperature behavior in the edwards-anderson spin-glass model”. *arXiv:1211.0843* (2012)
- [14] Binder, K., Kob, W.: *Glassy Materials and Disordered Solids: An Introduction to Their Statistical Mechanics*. World Scientific, Singapore (2005)
- [15] Binder, K., Young, A.P.: Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts, and open questions. *Rev. Mod. Phys.* **58**, 801–976 (1986)
- [16] Bollobás, B.: *Random Graphs*. Academic Press, Landon (1985)
- [17] Bouchaud, J.P., Dean, D.S.: Aging on parisi’s tree. *J. Phys. I France* **5**, 265–286 (1995)

-
- [18] Cannella, V., Mydosh, J.A.: Magnetic ordering in gold-ion alloys. *Phys. Rev. B* **6**, 4220–4237 (1972)
- [19] Cannella, V., Mydosh, J.A., Budnick, J.I.: Magnetic susceptibility of au-fe alloys. *J. Appl. Phys.* **42**, 1689–1690 (1971)
- [20] Castellani, T., Cavagna, A.: Spin-glass theory for pedestrians. *J. Stat. Mech.: Theo. Exp.* **2005**, P05,012 (2005)
- [21] Cavagna, A.: Supercooled liquids for pedestrians. *Phys. Report* **476**, 51–124 (2009)
- [22] Chou, K.C., Su, Z.B., Hao, B.L., Yu, L.: Equilibrium and nonequilibrium formalisms made unified. *Phys. Rep.* **118**, 1–131 (1985)
- [23] Cocco, S., Dubois, O., Mandler, J., Monasson, R.: Rigorous decimation-based construction of ground pure states for spin-glass models on random lattices. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 047,205 (2003)
- [24] Cook, S.A.: The complexity of theorem-proving procedures. In: P.M. Lewis, M.J. Fischer, J.E. Hopcroft, A.L. Rosenberg, J.W. Thatcher, P.R. Young (eds.) *Proceedings of the 3rd Annual ACM Symposium on Theory of Computing*, pp. 151–158. ACM, New York (1971)
- [25] De Dominicis, C., Giardinà, I.: *Random Fields and Spin Glasses: A Field Theory Approach*. Cambridge Univ. Press, New York (2006)
- [26] Decelle, A., Krzakala, F., Moore, C., Zdeborová, L.: Asymptotic analysis of the stochastic block model for modular networks and its algorithmic applications. *Phys. Rev. E* **84**, 066,106 (2011)
- [27] Decelle, A., Krzakala, F., Moore, C., Zdeborová, L.: Inference and phase transitions in the detection of modules in sparse networks. *Phys. Rev. Lett.* **107**, 065,701 (2011)
- [28] Derrida, B.: Random-energy model: An exactly solvable model of disordered systems. *Phys. Rev. B* **24**, 2613–2626 (1981)

-
- [29] Donoho, D.L., Maleki, A., Montanari, A.: Message-passing algorithms for compressed sensing. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **106**, 18,914–18,919 (2009)
 - [30] Edwards, S.F., Anderson, P.W.: Theory of spin glasses. *J. Phys. F: Met. Phys.* **5**, 965–974 (1975)
 - [31] Ekeberg, M., Lövkvist, C., Lan, Y., Weigt, M., Aurell, E.: Improved contact prediction in proteins: Using pseudolikelihoods to infer potts models. Preprint (2012)
 - [32] Eldar, Y.C., Kutyniok, G. (eds.): *Compressed Sensing: Theory and Applications*. Cambridge University Press, Cambridge, UK (2012)
 - [33] Erdős, P., Rényi, A.: On random graphs. *Publ. Math. Debrecen* **6**, 290–297 (1959)
 - [34] Fischer, K.H., Hertz, J.A.: *Spin Glasses*. Cambridge Univ. Press, Cambridge (1991)
 - [35] Fisher, D.S., Huse, D.A.: Ordered phase of short-range ising spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.* **56**, 1601–1604 (1986)
 - [36] Franz, S., Leone, M., Ricci-Tersenghi, F., Zecchina, R.: Exact solutions for diluted spin glasses and optimization problems. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 127,209 (2001)
 - [37] Franz, S., Mézard, M., Ricci-Tersenghi, F., Weigt, M., Zecchina, R.: A ferromagnet with a glass transition. *Europhys. Lett.* **55**, 465–471 (2001)
 - [38] Fu, Y., Anderson, P.W.: Application of statistical mechanics to np-complete problems in combinatorial optimisation. *J. Phys. A: Math. Gen.* **19**, 1605–1620 (1986)
 - [39] Gallager, R.G.: Low-density parity-check codes. *IEEE Trans. Infor. Theory* **8**, 21–28 (1962)
 - [40] Gallager, R.G.: *Low-Density Parity-Check Codes*. MIT Press, Cambridge, MA (1963)

-
- [41] Ganmor, E., Segev, R., Schneidman, E.: Sparse low-order interaction network underlies a highly correlated and learnable neural population code. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **108**, 9679–9684 (2011)
 - [42] Gardner, E.: Spin glasses with p -spin interactions. *Nucl. Phys. B* **257** [FS14], 747–765 (1985)
 - [43] Garey, M., Johnson, D.S.: *Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness*. Freeman, San Francisco (1979)
 - [44] Girvan, M., Newman, M.E.J.: Community structure in social and biological networks. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **99**, 7821–7826 (2002)
 - [45] Gross, D.J., Mézard, M.: The simplest spin glass. *Nucl. Phys. B* **240** [FS12], 431–452 (1984)
 - [46] Guerra, F.: Sum rules for the free energy in the mean field spin glass model. *Fields Institute Communications* **30**, 161–170 (2001)
 - [47] Guerra, F.: Broken replica symmetry bounds in the mean field spin glass model. *Commun. Math. Phys.* **233**, 1–12 (2003)
 - [48] Guerra, F., Toninelli, F.L.: The thermodynamic limit in mean field spin glass models. *Commun. Math. Phys.* **230**, 71–79 (2002)
 - [49] Hartmann, A.K., Weigt, W.: *Phase Transitions in Combinatorial Optimization Problems*. Wiley-VCH, Weinheim, Germany (2005)
 - [50] Huang, H., Zhou, H.J.: Cavity approach to the Sourlas code system. *Phys. Rev. E* **80**, 056,113 (2009)
 - [51] Hukushima, K., Nemoto, K.: Exchange monte carlo method and application to spin glass simulations. *J. Phys. Soc. Jpn* **65**, 1604–1608 (1996)
 - [52] Kirkpatrick, S., Gelatt Jr., C.D., Vecchi, M.P.: Optimization by simulated annealing. *Science* **220**, 671–680 (1983)
 - [53] Kirkpatrick, T.R., Thirumalai, D.: p -spin-interaction spin-glass models: Connections with the structural glass problem. *Phys. Rev. B* **36**, 5388–5397 (1987)

-
- [54] Krzakala, F., Mézard, M., Sausset, F., Sun, Y.F., Zdeborová, L.: Statistical physics-based reconstruction in compressed sensing. arXiv:1109.4424 (2011)
- [55] Krzakala, F., Pagnani, A., Weigt, M.: Threshold values, stability analysis, and high- q asymptotics for the coloring problem on random graphs. *Phys. Rev. E* **70**, 046,705 (2004)
- [56] Lin, J.C., Shen, Y., Zhou, G.Z.: Symmetry and ward identities for disordered electron systems. *Commun. Theor. Phys.* **3**, 139–148 (1984)
- [57] Liu, Y.Y., Slotine, J.J., Barabási, A.L.: Controllability of complex networks. *Nature* **473**, 167–173 (2011)
- [58] Loh, Y.L., Carlson, E.W.: Efficient algorithm for random-bond ising models in 2d. *Phys. Rev. Lett.* **97**, 227,205 (2006)
- [59] Marinari, E., Parisi, G.: Simulated tempering: a new monte carlo scheme. *Europhys. Lett.* **19**, 451–458 (1992)
- [60] Mézard, M., Montanari, A.: *Information, Physics, and Computation*. Oxford Univ. Press, New York (2009)
- [61] Mézard, M., Mora, T.: Constraint satisfaction problems and neural networks: A statistical physics perspective. *J. Physiol. Paris* **103**, 107–113 (2009)
- [62] Mézard, M., Parisi, G.: The bethe lattice spin glass revisited. *Eur. Phys. J. B* **20**, 217–233 (2001)
- [63] Mézard, M., Parisi, G.: The cavity method at zero temperature. *J. Stat. Phys.* **111**, 1–34 (2003)
- [64] Mézard, M., Parisi, G., Virasoro, M.A.: *Spin Glass Theory and Beyond*. World Scientific, Singapore (1987)
- [65] Mézard, M., Parisi, G., Zecchina, R.: Analytic and algorithmic solution of random satisfiability problems. *Science* **297**, 812–815 (2002)

-
- [66] Mézard, M., Ricci-Tersenghi, F., Zecchina, R.: Two solutions to diluted p -spin models and xorsat problems. *J. Stat. Phys.* **111**, 505–533 (2003)
- [67] Mézard, M., Zecchina, R.: The random k -satisfiability problem: from an analytic solution to an efficient algorithm. *Phys. Rev. E* **66**, 056,126 (2002)
- [68] Milo, R., Kashtan, N., Itzkovitz, S., Newman, M.E.J., Alon, U.: On the uniform generation of random graphs with prescribed degree sequences. e-print: cond-mat/0312028 (2003)
- [69] Monasson, R.: Structural glass transition and the entropy of the metastable states. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2847–2850 (1995)
- [70] Monasson, R., Zecchina, R.: Entropy of the k -satisfiability problem. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3881–3885 (1996)
- [71] Monasson, R., Zecchina, R.: Statistical mechanics of the random k -sat problem. *Phys. Rev. E* **56**, 1357–1361 (1997)
- [72] Mora, T., Zdeborová, L.: Random subcubes as a toy model for constraint satisfaction problems (2008)
- [73] Morcos, F., Pagnani, A., Lunt, B., Bertolino, A., Marks, D.S., Sander, C., Zecchina, R., Onuchic, J.N., Hwa, T., Weigt, M.: Direct-coupling analysis of residue coevolution captures native contacts across many protein families. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **108**, E1293 (2011)
- [74] Mulet, R., Pagnani, A., Weigt, M., Zecchina, R.: Coloring random graphs. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 268,701 (2002)
- [75] Nelson, P.: 生物物理学：能量、信息、生命. 上海科学技术出版社, 上海(2006)
- [76] Newman, C.M., Stein, D.L.: Non-mean-field behavior of realistic spin glasses. *Phys. Rev. Lett.* **76**, 515–518 (1996)

-
- [77] Newman, C.M., Stein, D.L.: Simplicity of state and overlap structure in finite-volume realistic spin glasses. *Phys. Rev. E* **57**, 1356–1366 (1998)
 - [78] Newman, M.E.J.: Assortative mixing in networks. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 208,701 (2002)
 - [79] Nguyen, H.C., Berg, J.: Mean-field theory for the inverse ising problem at low temperatures. *Phys. Rev. Lett.* **109**, 050,602 (2012)
 - [80] Nishimori, H.: *Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing: An Introduction*. Clarendon Press, Oxford (2001)
 - [81] Panchenko, D.: The sherrington-kirkpatrick model: an overview. *J. Stat. Phys.* **149**, 362–383 (2012)
 - [82] Parisi, G., Zamponi, F.: Mean-field theory of hard sphere glasses and jamming. *Rev. Mod. Phys.* **82**, 789–845 (2010)
 - [83] Pearl, J.: *Probabilistic Reasoning in Intelligent Systems: Networks of Plausible Inference*. Morgan Kaufmann, San Francisco, CA, USA (1988)
 - [84] Rapoport, A.: Contribution to the theory of random and biased nets. *Bull. Math. Biophys.* **19**, 257–277 (1957)
 - [85] Ricci-Tersenghi, F., Weigt, M., Zecchina, R.: Simplest random k -satisfiability problem. *Phys. Rev. E* **63**, 026,702 (2001)
 - [86] Richardson, T., Urbanke, R.: *Modern Coding Theory*. Cambridge University Press, New York (2008)
 - [87] Saitta, L., Giordana, A., Cornuéjols, A.: *Phase Transitions in Machine Learning*. Cambridge Univ. Press, UK (2011)
 - [88] Schneidman, E., Berry II, M.J., Segev, R., Bialek, W.: Weak pairwise correlations imply strongly correlated network states in a neural population. *Nature* **440**, 1007–1012 (2006)

-
- [89] Sessak, V., Monasson, R.: Small-correlation expansions for the inverse Ising problem. *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 055,001 (2009)
- [90] Shannon, C.E.: A mathematical theory of communication. i. *Bell Syst. Tech. J* **27**, 379–423 (1948)
- [91] Shannon, C.E.: A mathematical theory of communication. ii. *Bell Syst. Tech. J* **27**, 623–655 (1948)
- [92] Sherrington, D., Kirkpatrick, S.: Solvable model of a spin-glass. *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1792–1796 (1975)
- [93] Solomonoff, R., Rapoport, A.: Connectivity of random nets. *Bull. Math. Biophys.* **13**, 107–117 (1951)
- [94] Surlas, N.: Spin-glass models as error-correcting codes. *Nature* **339**, 693–695 (1989)
- [95] Stein, D.L., Newman, C.M.: Spin glasses: old and new complexity. *Complex Systems* **20**, 115–126 (2011)
- [96] Su, Z.B., Yu, L., Zhou, G.Z.: A dynamical theory of the infinite range Ising model. *Commun. Theor. Phys.* **2**, 1191–1201 (1983)
- [97] Su, Z.B., Yu, L., Zhou, G.Z.: On a dynamic theory of quenched random system. *Commun. Theor. Phys.* **2**, 1181–1189 (1983)
- [98] Sulc, P., Zdeborova, L.: Belief propagation for graph partitioning. *J. Phys. A: Math. Theor.* **43**, 285,003 (2010)
- [99] Talagrand, M.: *Spin Glasses: A Challenge for Mathematicians*. Springer-Verlag, Berlin (2003)
- [100] Tanaka, T.: Statistical mechanics of cdma multiuser demodulation. *Europhys. Lett.* **54**, 540–546 (2001)
- [101] Thomas, C.K., Huse, D.A., Middleton, A.A.: Zero- and low-temperature behavior of the two-dimensional $\pm J$ Ising spin glass. *Phys. Rev. Lett.* **107**, 047,203 (2011)

-
- [102] Toulouse, G.: Theory of the frustration effect in spin glasses: I. Commun. Phys. **2**, 115–119 (1977)
- [103] Viana, L., Bray, A.J.: Phase diagrams for dilute spin glasses. J. Phys. C: Solid State Phys. **18**, 3037–3051 (1985)
- [104] Viterbi, A.J.: CDMA: Principles of Spread Spectrum Communication. Addison-Wesley, MA (1995)
- [105] Weigt, M., Hartmann, A.K.: Number of guards needed by a museum: A phase transition in vertex covering of random graphs. Phys. Rev. Lett. **84**, 6118–6121 (2000)
- [106] Weigt, M., Hartmann, A.K.: Minimal vertex covers on finite-connectivity random graphs: A hard-sphere lattice-gas picture. Phys. Rev. E **63**, 056,127 (2001)
- [107] Weigt, M., White, R.A., Szurmant, H., Hoch, J.A., Hwa, T.: Identification of direct residue contacts in protein-protein interaction by message-passing. Proc. Natl. Acad. Sci. USA **106**, 67–72 (2009)
- [108] Wu, X.T., Zhao, J.Y.: Efficient algorithm for computing correlation functions of the two-dimensional random-bond ising model. Phys. Rev. B **80**, 104,402 (2009)
- [109] Wu, Y.L. (ed.): Selected Papers of K. C. Chou, *World Scientific Series in 20th Century Physics*, vol. 42. World Scientific, Singapore (2009)
- [110] Xiao, J.Q., Zhou, H.J.: Partition function loop series for a general graphical model: free-energy corrections and message-passing equations. J. Phys. A: Math. Theor. **44**, 425,001 (2011)
- [111] Yedidia, J.S., Freeman, W.T., Weiss, Y.: Constructing free-energy approximations and generalized belief-propagation algorithms. IEEE Trans. Inf. Theory **51**, 2282–2312 (2005)
- [112] Yucesoy, B., Katzgraber, H.G., Machta, J.: Evidence of non-mean-field-like low temperature behavior in the edwards-anderson spin-glass model. Phys. Rev. Lett. **109**, 177,204 (2012)

-
- [113] Zdeborova, L., Krzakala, F.: Phase transitions in the coloring of random graphs. *Phys. Rev. E* **76**, 031,131 (2007)
 - [114] Zdeborová, L., Mézard, M.: The number of matchings in random graphs. *J. Stat. Mech.: Theo. Exp.* p. P05003 (2006)
 - [115] Zhang, P., Zeng, Y., Zhou, H.J.: Stability analysis on the finite-temperature replica-symmetric and first-step replica-symmetry-broken cavity solutions of the random vertex cover problem. *Phys. Rev. E* **80**, 021,122 (2009)
 - [116] Zhou, H.J.: Vertex cover problem studied by cavity method: Analytics and population dynamics. *Eur. Phys. J. B* **32**, 265–270 (2003)
 - [117] Zhou, H.J.: Long-range frustration in a spin-glass model of the vertex-cover problem. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 217,203 (2005)
 - [118] Zhou, H.J.: Erratum: Long-range frustration in a spin-glass model of the vertex-cover problem [phys. rev. lett. 94, 217203 (2005)]. *Phys. Rev. Lett.* **109**, 199,901 (2012)
 - [119] Zhou, H.J., Li, K.: Distribution of equilibrium free energies in a thermodynamic system with broken ergodicity. *Commun. Theor. Phys.* **49**, 659–664 (2008)
 - [120] Zhou, H.J., Ou-Yang, Z.C.: Maximum matching on random graphs. e-print: cond-mat/0309348 (2003)
 - [121] Zhou, H.J., Wang, C.: Ground-state configuration space heterogeneity of random finite-connectivity spin glasses and random constraint satisfaction problems. *J. Stat. Mech.: Theor. Exp.* p. P10010 (2010)
 - [122] Zhou, H.J., Wang, C.: Region graph partition function expansion and approximate free energy landscapes: Theory and some numerical results. *J. Stat. Phys.* **148**, 513–547 (2012)
 - [123] Zhou, H.J., Wang, C., Xiao, J.Q., Bi, Z.: Partition function expansion on region-graphs and message-passing equations. *J. Stat. Mech.: Theo. Exp.* p. L12001 (2011)

- [124] Zhou, J., Zhou, H.J.: Ground-state entropy of the random vertex-cover problem. *Phys. Rev. E* **79**, 020,103(R) (2009)