arXiv:2301.00683v1 [cond-mat.dis-nn] 2 Jan 2023

第1章

模拟退火、优化与基态搜索

Sergio Caracciolo[†]、Alexander K. Hartmann[‡]、Scott Kirkpatrick[§]和 Martin Weigel[¶]

[†]米兰大学物理系和意大利国家核物理研究院米兰分部，意大利米兰

[‡] 奥尔登堡大学物理研究所，德国奥尔登堡[§]希伯来大学工程与计算机科学学院，以色列耶路撒冷

¶</style}开姆尼茨工业大学物理研究所，德国开姆尼茨

本章首先回顾了优化自旋玻璃哈密顿量的早期尝试，并将其与近期在随机图中搜索最大团的研究结果进行比较。第 1.2 节探讨用于寻找一般自旋玻璃模型基态的精确算法；第 1.3 节则专门讨论存在多项式算法的二维情形，这些算法使得研究规模大得多的系统成为可能。最后，第 1.4 节概述指派问题的相关结果，其中可以非常详细地研究基态的有限尺寸修正。

[†]sergio.caracciolo@mi.infn.it
[‡]a.hartmann@uni-oldenburg.de[§]
kirk@cs.huji.ac.il
[¶]martin.weigel@physik.tu-chemnitz.de

1.1. 引言

贯穿本章的主题，是通过模拟研究有限随机系统，以检验随着自旋玻璃中新型有序状态的定义与实现而产生的预测和见解。本章介绍的工具已应用于许多领域。在物理学中，人们通常考察物理系统的相空间；在应用数学中，人们则求解理想化问题或基于现实世界数据的问题，以优化目标函数或满足约束。多年来，数学界和物理学界逐渐认识到，这两个领域彼此非常相似。

Brout 引入副本时， [1], 它们是完全有序晶格上的大型区域。Edwards 和 Anderson（EA） [2] 试图从多个相同的随机自旋及其相互作用副本之间行为的相似性中寻找有序。在 Brout 和 EA 的研究中，自由能是通过将配分函数按 n（即副本数）的幂展开，并取其中的线性项而得到的。EA 将有序定义为不同副本中自旋取向的自相关，因为这可以代表长时间尺度上的相关性。Sherrington 和 Kirkpatrick（SK） [3], 将问题简化为一个具有独立同分布随机高斯相互作用、作用强度为$1/\sqrt{N}$ 的无限程伊辛系统，希望使其可解，随后明确使用了这一恒等式，

$$\ln Z = \lim_{n\to 0} \frac{Z^n - 1}{n} \,, \tag{1.1}$$

尽管显然 Z^n 在 n 取整数值以外时的含义并不清楚。对所得自由能方程 F进行仔细的外推处理后发现，零温时的熵为负值，这在离散模型中是不可能的；而磁化率尖点等其他特征似乎是合理的。预测的基态能量 $E_0 = （2/\pi）^{1/2} = -0.798...$可以通过模拟进行检验。

幸运的是，1975年，计算机的性能几乎已经达到能够探究诸如 E_0 这类量的渐近值问题的水平。IBM 370-168 和后来的 3033 等功能强大、普遍可用的计算机，随机存取存储器最多可容纳 10 MB 数据，处理速度可达每秒数百万条指令。（1975年的第一台超级计算机 Cray-1，其随机存取存储器也不超过约 10 MB，但指令运行速度快了 4 到 6 倍。）这样的随机存取存储器容量足以模拟少量含有 500 至 1000 个自旋的样本。因此，Kirkpatrick 和 Sherrington（KS）在 IBM 大型机上加装浮点协处理器，以获得更接近 Cray 的处理速度，并于 1978年报告称， E_0 实际上介于 -0.75 和 -0.77 之间，副本对称结果除外。此后 $30+$ 年间，人们持续改进这一估计。使用 Parisi 的完整副本对称性破缺公式，并以 Pad´e 逼近法外推 E_0 的上界和下界，得出的渐近结果最新估计值为 $-0.76321...$ [5]，目前已获普遍认可。数十年来，理论上的改进才使这一结果得到认可，相关讨论见其他文献。为了通过实验检验这一结果，也需要等待数年，直到计算速度提升，模拟才能得出更可靠的统计数据。研究人员已对最多含有 2000 个格点的 N 图进行了研究 [6],

然而，理解 E_0 对系统规模的依赖性仍是一个研究课题。模拟结果与理论相符，而且随着理论结果的界限逐渐收紧，模拟也变得更加准确。研究人员最初就需要找到求解模拟模型基态能量的新方法；随着模型规模扩大、所需精度范围缩小，这类方法也变得愈发必要。模拟退火等方法如今已发展出自身的应用领域，被广泛用于统计力学简单模型之外的复杂系统。

如果你是统计物理学家，模拟退火 [7] 显然是个好主意。KS 最初研究自旋玻璃模型时便有此想法，V. ˇCern`y [8] 和 K. Wilson [9]也不例外。ˇKirkpatrick 和 Cern`y 以旅行商问题为例，因为它容易描述。Wilson 则利用退火优化其为量子色动力学模拟编写的编译器所生成的并行处理器代码的打包方式。我们都意识到，让一条马尔可夫链上的状态在一系列逐渐降低的有限温度下演化（退火），与简单的梯度下降相比，更有可能在具有许多局部极小值的复杂函数空间中找到更大、更深的极小值。

当时，人们偏好的方法是采用梯度下降，并辅以多次随机重启以及跳转到新起点的技巧；只有在搜索陷入停滞时才使用这些技巧。可能的局部极小值数量庞大，而且大多能量较高，因此这种方法效果不佳。此外，对磁化率和比热等性质的研究（这些性质可由玻尔兹曼系统的涨落得到）能够为制定有效的退火方案提供指导。在出现大幅涨落的温度范围内，涨落可能预示着相界，这便提示我们应放慢退火过程，以便发生较大的变化。

当时，Kirkpatrick 和 IBM 的同事 [7] 也在研究设计自动化工具所涉及的问题。这些工具用于在 IBM下一代计算机中对晶体管和小型超大规模集成电路进行布局与布线。他们在论文中列入了这两类实际问题的简化示例。这些工具得到成功应用，并被纳入 IBM 内部的产品开发工具集，也被其他行业采用。

IBM 团队从接触工程环境的过程中汲取了重要经验。首先，在哈密顿量框架中将复杂约束表示为能量代价，提供了宝贵的灵活性；而退火框架能够同时满足各项约束，或按重要性顺序逐一满足，而非一次只处理一项。其次，他们很快意识到，对于电路设计这类问题，找到精确最优解并非工程团队真正的目标；他们只需及时找到足够好的解决方案，以便将产品推向市场。对于这类目标，方法的稳健性以及纳入多种特殊约束的能力，至少与效率同样重要。如果可能，获得最优解固然是额外收获，但并非唯一目标。

模拟退火已被认可为另一种工具，能够对复杂但实用且重要的问题进行近似求解。它更大的影响或许在于推动统计物理框架成为应用数学的一个活跃组成部分。一位备受尊敬的约束满足领域研究者最近发表的综述 [10] 认为，20世纪90年代是相变的时代，而21世纪初则引入了更精细的技术，例如调查传播 [11] 和腔体结-

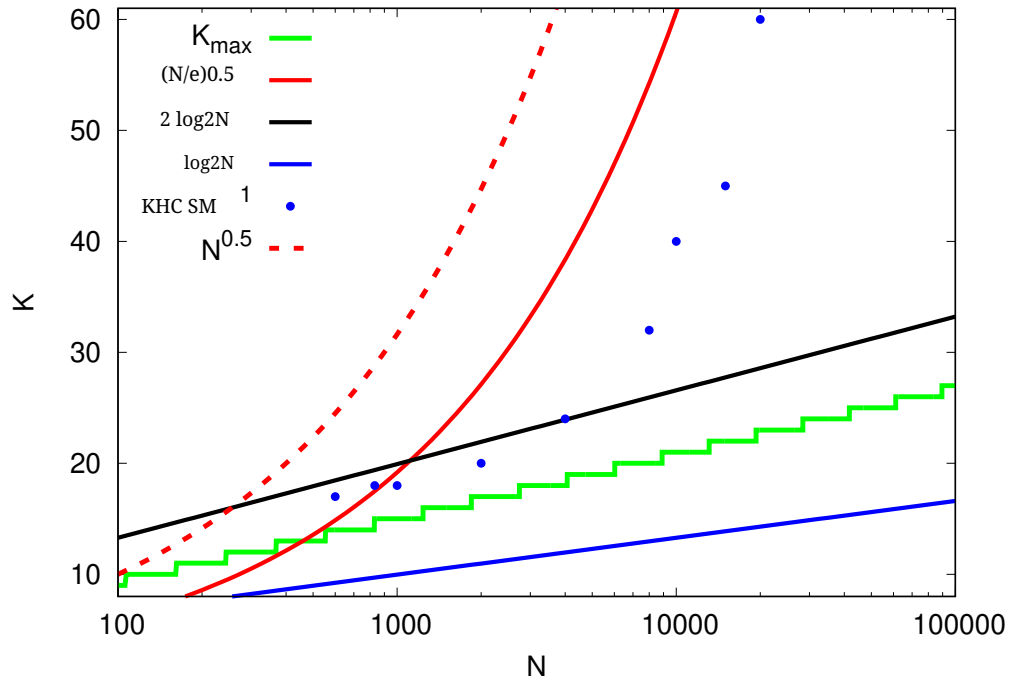


图 1.1. 感兴趣的隐藏团大小 K_{HC} 在 $G(N,\ p = 0.5)$ 中介于阶梯线与已证明或实验观测到的下限之间；这些下限可通过谱方法（红色虚线）或消息传递技术（红色实线）得出。图中蓝点表示从所有初始格点出发、采用简单贪心搜索并在发现隐藏团证据后立即停止时识别出的最小隐藏团大小；这些大小远低于上述两种下限。

构 [12]。描绘可行解集形状变化以及问题解的相空间中不同遍历程度的相图 [13, 14] 如今已成为讨论组合问题与计算问题不同复杂性类之间根本差异的基础 [15]。

组合优化中最简单的问题，是明确证明随机图的某种性质，或证明该性质在该图中不成立。例如，可以检验大小为 K 的团（即完全连通的格点簇）是否存在于大小为 N、含有一半随机选取的相互作用键且其余相互作用键均不存在的 Erd˝os-R´enyi 图 $G(N,\ p = 0.5)$ 中。这是数据科学家在追踪当今网络中的交互时，可能会针对社交网络提出的一个常见问题的简化模型：这类图可能描述数十亿人的群体，而相互作用键可能代表共同兴趣或通信。只需计算期望值，我们就能知道哪些情况是可能的。在这个模型中自然形成的最大团，其大小 $K_{\max}$ 不会超过 $2\log_2 N$；考虑有限尺寸修正后，这类最大团 的实际极限大小会小得多。因此，成本与相互作用键数量成正比的简单线性算法 N^2，无法找到团大小 K 比 $\log_2 N$ 大出几个格点以上的解。随着找到的最大团逐渐增大，一系列阶梯状的阶段由此界定出一个困难 相：在这个相中，大量大小

大于 $\log_2 N$ 的团必然存在，但若不采用回溯等成本更高的非线性搜索方法，就无法找到它们。

对此问题的一种常见扩展，是在随机图中加入一个隐藏团，其规模大于随机出现的团。由于这个团是唯一的，因此应该更容易找到；但目前已证明有效、成本为准线性的最佳方法（尽管其前置系数较大），只能找到规模大于 $\sqrt{N/e}$ 的隐藏团。因此，当隐藏团大于这条直线所示的规模时，这个相关问题存在一个容易区域。所得相图如图 1.1 [16] 所示。

近期的一些研究重新回到了 EA 最初的直觉：在随机且无对称性的系统中，相同副本之间的活动相关性，表明系统存在有序化，这种相关性或许可以替代传统的序参量。设想在不断降低的温度下，或在多个不同温度下，模拟随机系统多个副本的演化，并在不同副本之间传递改进后的解；这种方法在物理学中称为并行退火 [17]。事实证明，该方法能够在超大图中找到隐藏团，即便隐藏团的规模仅略大于自然出现的团 [18],；此外，它也能非常高效地找到最大独立集 [19]。以这种方式对多个副本进行退火，其缺点是无法证明随着问题规模增大，其成本仍仅为多项式级；不过，对问题的经验和实证认知或许有助于调整该方法，使其在大型实际问题上的成本保持在可承受范围内。它还可能提供一条途径，帮助克服组合问题中妨碍最优构型搜索的混淆现象：许多次优构型彼此重叠，使任何局部搜索都受到干扰，例如图着色或最大团问题 [16]。

并行回火似乎提供了额外的搜索能力，这表明或许还有其他方式可以利用 Edwards 和 Anderson 的最初洞见：随机系统中的有序化可能表现为，在复杂系统的多个副本或区域中观察到的行为之间存在相关性。副本对称性破缺意味着有序化可能呈现一系列取值，而研究低温下多个副本之间表现出的相关性，或许能够增进我们对这种有序化的物理理解。进一步而言，可以用一组副本来建模这样一类系统：它们总体上基本相似，但受到局部环境微小修正的影响，每个副本都略有不同。其目标是从各个副本的解之间的差异中，识别出有序化响应于不同局部影响时的函数变化。这类局部变化是当今高度仪器化世界中大量社会数据的典型特征，而这些数据正可供研究。这只是自旋玻璃对应用数学和统计学可能产生的又一种影响，只不过迄今尚未实现。

具有高斯分布相互作用的原始 SK 伊辛模型，只是促使人们进一步探索如何求得最低能量基态的诸多情形之一。事实证明，将不同的优化工具以不同方式结合起来，对于这一问题颇有价值；由此也得到了一些不同的经验，详见本章后续部分。

1.2. 聚焦于基态

考虑零场中的自旋玻璃（SG）模型，其哈密顿量为 [2]

$$\mathcal{H} = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j. \tag{1.2}$$

我们关注置于图的顶点上的伊辛自旋 $s_i = \pm 1$，但也有人研究过序参量的其他对称性。伊辛对称性的优势在于，与之相关的统计物理问题是组合性的。求和 $\langle i,j \rangle$ 遍历图的所有边。对于 Edwards-Anderson（EA）模型，图是 d 维超立方晶格，但人们也研究过其他图结构，例如完全连接的 Sherrington-Kirkpatrick模型，它对应于式（1.2）的 $d \to \infty$ 极限。如第 1 章所述，这个平均场问题在许多方面都得到了充分理解，这在一定程度上要归功于自 20 世纪 80 年代以来的研究。低维情况下的情形则不太清楚，因此近几十年来，大量工作集中于使用数值方法研究 2、3 和 4 维中的这一问题。

除了用于研究自旋玻璃转变附近区域以及有序相中的行为的蒙特卡洛模拟（见第 5 章）之外，人们还投入了大量精力研究基态及其上方的低激发态，以评估低温行为。关于自旋玻璃相本质的不同理论，对这类激发的能量和几何性质作出了相互矛盾的预测。基于对佩尔斯论证的推广——该论证用于说明铁磁相的稳定性——研究者认为，能量随尺度发散的激发将导致能够抵抗热涨落的自旋玻璃相。因此，研究自旋玻璃系统基态的首要目标之一，就是理解其中普遍存在的低能激发的性质，以及它们的大小与能量之间的关系。

离散对称自旋玻璃的基态搜索，本质上是一个组合优化问题，因为候选解的数量是可数的 [20]。因此，这类问题可以通过穷举所有构型来求解，但所需计算量会随自旋数量呈指数增长。正如第 1.3 节所述，巧妙地组织枚举过程可以大幅提高效率，但无法改变这一过程总体上的指数级增长。这对应于这样一个事实： $d \geq 3$ 中的问题已知是 *NP*难问题 [21]。不过，在某些特殊情况下，基态问题可以映射为辅助优化问题，从而能够在多项式 时间内求解。第 1.4 节将对此作出说明。除了自旋玻璃的基态之外，许多优化问题也引起了物理学家的关注 [22, 23]。一个近期研究的模型实例是指派问题，第 1.5 节将对此进行讨论。

1.3. 困难问题的精确算法

这里探讨了用于求解伊辛自旋玻璃基态的精确通用算法，不过所介绍的方法具有很强的通用性。作为式（1.2）的扩展，这里还纳入了与局部场 h_i 的相互作用。对于大多数已研究的系统，

并不存在局部场，但在下文介绍的某些算法中，待求解的子问题可能会出现这类项。在这种情况下，自旋玻璃的能量由哈密顿量给出

$$\mathcal{H}(s) = -\sum_{i<j} J_{ij} s_i s_j \; - \sum_i h_i s_i \, , \tag{1.3}$$

其中，$s = (s_1, \ldots\ldots, s_N)$ 是一个构型，而相互作用键 J_{ij} 对应于图的边，是淬火无规变量。在最一般的情况下，这里的求和遍历所有自旋对。因此，如果所有相互作用键均非零，该系统就是平均场类型。对于有限维晶格，大多数相互作用键都为零，且其选取方式恰当。非零相互作用键通常取自高斯分布或双峰 $J_{ij} = \pm 1$ 分布。

这里介绍三种常用于计算三维自旋玻璃精确基态的算法。首先，解释分支定界方法，该方法以精巧的方式枚举大量状态。接着，概述线性规划方法，该方法通过将哈密顿量改写为线性函数、放宽条件 $s_i = \pm 1$，并添加称为切平面或割的额外约束来求解。最后，介绍结合这两种方法的分支割算法；这是目前求取自旋玻璃基态最快的精确方法。

1.3.1. 分支定界

分支定界方法的基本思想 [24] 是：为了求得方程 (1.3) 的极小值，将所有自旋构型表示为一棵二叉树。在每个节点处，根据该节点选定的自旋 i_0，将构型空间划分为分别满足$s_{i_0} = +1$ 和 $s_{i_0} = -1$的构型。自旋构型由这棵树的 2^N 叶节点给出。求解基态问题最简单的方法是通过枚举得到所有构型，再选出能量最小的构型，其运行时间为 $O(2^N)$。

虽然最坏情况下运行时间仍呈指数级，但可以通过考察子树中可达到能量的界限，省略这棵树的部分内容，从而缩短运行时间 [25]。这里我们介绍参考文献 [26] 中所述的改进算法。分支始终针对子问题中的最后一个自旋进行，即从自旋 N 开始。对于 $s_N = +1$ 和 $s_N = -1$ 的子问题，其能量可利用式 (1.3) 对 $s = (s_1, \ldots, s_{N-1})$ 写为：

$$\mathcal{H}^+(\overline{s}) = -{\sum_{i<j}}' J_{ij} s_i s_j - {\sum_i}' h_i s_i - {\sum_i}' J_{iN} s_i - h_N \, , \tag{1.4}$$

$$\mathcal{H}^-(\overline{s}) = -{\sum_{i<j}}' J_{ij} s_i s_j - {\sum_i}' h_i s_i + {\sum_i}' J_{iN} s_i + h_N \, , \tag{1.5}$$

其中，求和 $\sum'$ 从 1 到 $N-1$。若定义

$$\mathcal{H}^*_{N-1} = \min_{s_1,\ldots,s_{N-1}} -{\sum_{i<j}}' J_{ij} s_i s_j \, , \tag{1.6}$$

利用关系式 $\min_s(f_1(s)+f_2(s)) \geq \min_s f_1(s)+\min_s f_2(s)$，可得界

$$\mathcal{H}^+(\overline{s}) \geq \mathcal{H}^* + \min_{s_1,\ldots,s_{N-1}} {\sum_i}' (-h_i - J_{in}) s_i - h_n \ , \tag{1.7}$$

$$\mathcal{H}^-(\overline{s}) \geq \mathcal{H}^* + \min_{s_1,\ldots,s_{N-1}} -{\sum_i}' (-h_i + J_{in}) s_i + h_n \ . \tag{1.8}$$

这些界限之所以可用，是因为在构建分支树的过程中，可以递归地获得极小值 $\mathcal{H}^*_{N-1}$, $\mathcal{H}^*_{N-2}, \ldots$。此外，线性函数$\sum_s \sum_i a_i s_i$的极小值（此处分别为 $a_i = -h_i - J_{in}$ 或 $a_i = -h_i + J_{in}$）可直接表示为$-\sum_i |a_i|$。因此，限制分支树规模的第一种方法是：如果某个或两个分支的界限高于已知阈值，就可以省略相应的分支。这些阈值可能来自其他分支中已经找到的低能构型，也可能由启发式算法得到；或者，在寻求枚举指定范围内的低能构型时，阈值也可以直接作为问题的一部分给出。

第二种界限 [26] 的作用方式如下。利用 $d(s) = -2{\sum_i}' J_{iN} s_i - 2h_N$，可以将方程（1.4）和（1.5）改写为 $\mathcal{H}^+(s) = \mathcal{H}^-(s) + 2d(s)$。因此，我们得到以下推论

$$\max_{s_1,\ldots,s_{N-1}} d(\overline{s}) = 2\sum_i |J_{iN}| - 2h_N \leq 0 \implies \mathcal{H}^+(\overline{s}) \geq \mathcal{H}^-(\overline{s}) \ ,$$

$$\min_{s_1,\ldots,s_{N-1}} d(\overline{s}) = -2\sum_i |J_{iN}| - 2h_N \geq 0 \implies \mathcal{H}^+(\overline{s}) \leq \mathcal{H}^-(\overline{s}) \ .$$

这些界限易于计算，有时可以在评估任何一个分支之前省去两个分支中的一个。

例如，这类分支定界算法已用于分析自旋玻璃的低温景观 [27–30] 。更广泛地说，在优化问题的统计力学领域 [22, 23], ，分支定界方法已应用于其他问题，例如可满足性问题 [31] 或顶点覆盖问题 [32]。对于后者，研究者采用了一种分支定界方法：分支变量并非按既定顺序选取，而是由局部启发式方法确定，以进一步缩减分支树。对于这些算法的简单变体，还可以解析地计算随机问题集合的典型运行时间；这类问题呈现出通常为多项式时间和通常为指数时间的行为转变 [33, 34]。

1.3.2. 线性规划与切平面

另一种方法是将二次哈密顿量转化为线性规划。为方便起见，这里我们考虑公式 (1.2) 的形式。注意，通过引入一个与给定方程匹配的“幽灵自旋”$s_0 = 1$ ，公式 (1.3) 中的场项可以写成二次项。

我们用一个图 $G = (V, E)$ 来描述该系统，其中 V 表示自旋所在的格点集合， E 表示连接 $\{i, j\}$ 相互作用格点的边集合。对于 G 中的任意集合 $V' \subset V$，割 $\delta(V')$ $\subset E$ 表示这样一组边：其一个端点位于 V' 中，另一个端点不在其中，即连接集合 V' 和 $V \setminus V'$的边。对于

每个构型，自旋都可以划分为两个集合： $V^+ = \{i|s_i = +1\}$ 个“向上”自旋和 $V^+ = \{i|s_i = -1\} = V \setminus V^+$ 个“向下”自旋。如果两个自旋 s_i 和 s_j 方向相同，它们贡献能量 $-J_{ij} = +0 - J_{ij}$；如果方向不同，则贡献能量 $J_{ij} = 2J_{ij} - J_{ij}$。因此，利用割，我们可以写出

$$\mathcal{H}(s) = 2 \sum_{\{i,j\}\in\delta(V^+)} J_{ij} - \sum_{ij} J_{ij} \,. \tag{1.9}$$

引入变量 $c_{ij} = -J_{ij}$、 $S = \sum_{ij} J_{ij}$，以及变量 $x_{ij} = 1$，如果 $\{i, j\} \in \delta(V^+)$，否则为 $x_{ij} = 0$，则可写为

$$\mathcal{H}(x) = -2 \sum_{i,j} c_{ij} x_{ij} - S \,, \tag{1.10}$$

其中 $\sum_{i,\ j} c_{ij} x_{ij}$ 称为由 x表示的割的权重。因此，由于 S只是一个常数，求式 (1.2) 的最小能量就对应于在边权重为 c_{ij} 的图中求最大割。注意，式 (1.10) 是一个带整数变量的线性函数，这意味着我们已将二次优化问题转化为线性问题，但增加了额外的约束，因为 x 必须描述一个割。这个问题称为整数线性规划。

为纳入描述该割的约束，我们注意到，对于图 G 中的任意环，该割必须穿过偶数条边。对于变量 x，这可以方便地用如下线性不等式 [35] 表示：对于任意环 $C \subset E$（即起点和终点为同一顶点的路径），以及任意奇数基数子集 $Q \subset C$,

$$\sum_{\{i,j\}\in Q} x_{ij} - \sum_{\{i,j\}\in C\setminus Q} x_{ij} \leq |Q| - 1 \tag{1.11}$$

都必须成立，这就完整地定义了一个割。

割平面方法的基本思路是放松变量 $x_{ij} = 0$,1 到 $0 \leq x_{ij} \leq 1$，并在满足线性不等式（式 (1.11)）的条件下，求式 (1.10) 的最大值。割平面这一名称源于这样一个事实：所有不等式都描述了超平面，它们会从可能解空间中切去一部分。由此得到的问题称为线性规划（LP）。好消息是，LP（即变量放松后的问题）可以使用椭球法，在最坏情况下于问题规模的多项式时间内求解 [36]。尽管如此，在实际应用中，单纯形法 [37] 或对偶单纯形法等方法虽然没有多项式时间界，但速度要快得多。坏消息是，不等式的数量原则上呈指数级增长，因此运行时间也会直接呈指数级增长。因此，与其立即将所有约束都加入 LP，不如先从零个或少数几个约束开始，计算出一个初始解。由于放松后的问题包含的约束少于所需数量，所得割权重通常会更高，也就是说，它是整数线性规划问题中真实最大割的上界。因此，所得解通常不对应一个割，也不是纯整数值。于是，指数多的不等式中可能有一些未得到满足。割平面方法的第二个基本思路是，专门寻找未满足的不等式，而不必搜索所有可能的不等式，并将找到的未满足不等式加入不断扩大的不等式集合中

，作为 LP 的约束。寻找未满足不等式的一种精确多项式算法，基于求解一系列最短路径问题 [35], ，其求解时间为 $O(N^3)$。这种方法虽然是多项式时间的，但速度相当慢。幸运的是，特别是对于物理晶格结构，存在多种启发式方法，其运行时间为线性 $O(N)$ [38] ，而且大多数时候足以生成满足未满足条件所需的额外不等式。如果某个时刻再也找不到未满足的不等式，且解完全为整数值，就找到了真正的最优解，算法随即终止。但如果仍有变量不是整数，则可以采用下一小节所述的分支方法。

然而，对于某些组合问题，人们观察到，仅采用割平面方法就可能得到整数问题的有效最优解。例如，对于 Erd˝os-R´enyi 随机图上的顶点覆盖问题，人们研究了另一种环不等式 [39]。改变图中邻居节点的平均数量 c 时，人们观察到一种相变。在热力学极限 $N \to \infty$下，对于较小的值 $c < c^* = e \approx 2.71$，通常所有实例都能在多项式运行时间内完全求解；而对于较大的值 c ，则无法做到。有趣的是，这种易难转变 与顶点覆盖问题发生副本对称性破缺的临界连通度相吻合 [32]。此时，人们观察到解空间具有复杂结构 [40], ，所谓的叶剥离核心 [41] 开始渗流。

最后请注意，有一组切平面称为 *Gomory* 割 [42], ，可普遍地为所有松弛线性问题构造。这些切平面通过直接从给定的非整数解中识别被违反的不等式来生成，具体来说，是从单纯形算法求解线性规划时使用的所谓单纯形表 [36] 中识别。已经证明，这组可能呈指数级增长的不等式是完备的，也就是说，原则上任何整数规划问题都可以仅通过生成这些切平面来求解。然而在实践中，任何有限的数值精度都会导致收敛问题，因此，这种割平面法以及许多其他割平面法最终都被证明需要与分支结合使用，才能真正高效，下一节将对此进行说明。

1.3.3. 分支割平面法

如果描述最大割的松弛线性系统得到的解仍然不是整数解，就选择某个变量 $x_{ij} \neq 0, 1$，考虑 $x_{ij} = 0$ 和 $x_{ij} = 1$ 这两种可能性，并递归地求解相应的子问题。这意味着进行分支。因此，这些方法的结合称为分支割平面法 [38, 43]。请注意，除了上述界限外，这里还可以使用其他几个界限。这些界限可以是根据任何有效割的割权重得到的下界 x^* ，也可以是根据线性规划等合适的松弛得到的上界。

目前，分支切割法可被视为求解困难自旋玻璃实例基态的最强精确算法。一个可公开访问的分支割算法实现是自旋玻璃服务器 [44] ，由波恩大学托管。该服务器最初由科隆大学的 F. Liers 和 M. J¨unger 研究团队的几位成员及合作者开发。在该服务器上，你可以提交自旋玻璃实例文件；如果系统规模不太大，服务器就会返回相应的基态。

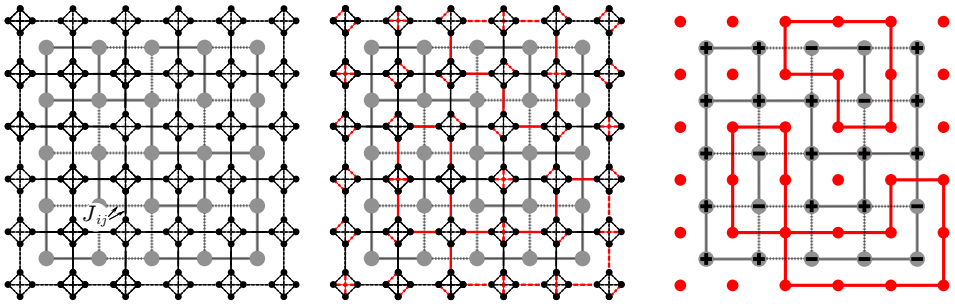


图1.2. 将伊辛基态问题映射为辅助图上的匹配问题，其中包含 Kasteleyn 城市。左：展开伊辛晶格，将每个顶点替换为一个完全图 K_4。K_4 子图中的边权重设为0，其余边权重为 J_{ij}。中：辅助图上的最小权完美匹配。右：从装饰图反向变换回原始晶格。由此得到的匹配形成一组闭合回路，将向上自旋与向下自旋分隔开。

分支切割方法曾多次应用于有限维自旋玻璃。据我们所知，目前最大的三维实例是在一项低能激发研究中 $N = 12^3$ 考虑的 [45]。

这种方法也已应用于平均场随机键伊辛模型。该模型是标准自旋玻璃的一种推广，其负键的比例可变，由键值的非零均值控制。在这里，观测到典型分支切割运行时间（以求解的线性规划问题数量衡量）在易相与难相之间发生相变，这一相变出现在铁磁行为与自旋玻璃行为的转变附近 [46]。

1.4. 二维中的基态

现在我们转而讨论可在多项式时间内求解的基态问题。对于式（1.2）中的 EA 模型，当维度为 $d < 3$ 时，情况正是如此。由于一维问题相当简单，这类问题中更有趣的是二维 EA 模型。

EA基态到辅助图上最小权完美匹配（MWPM）问题的一种相关映射，最早由文献 [47]提出。该映射基于如下观察：受挫晶格面 [48]，（即包含奇数条反铁磁耦合的基本晶格面）必须具有奇数条断键 $J_{ij}s_is_j < 0$，而非受挫晶格面则具有偶数条断键。因此，自旋构型可以表示为由断键构成的缺陷线构型，这些缺陷线始于并终于受挫晶格面。于是，基态构型就是通过缺陷线将受挫晶格面完美配对（匹配），且总权重最小。基于花算法 [49]及其变体 [50]，可以在多项式时间内求解MWPM。然而，这种方法仍不够理想，因为它在 F个受挫晶格构成的完全图上运行，该图有 F（$F-1$）条边，而且在求解匹配问题之前，必须采用合适的方法预先计算边权重

例如Dijkstra算法 [51] ，然后再求解匹配问题。该方法可用于研究典型最大线性尺寸为 $L \approx 500$ [52]的系统。

正如后来所展示的 [53, 54], ，一种替代映射的效率显著更高，因为它作用于一个与原始晶格连通性相近的稀疏图。该方法依赖于一个辅助图：它将晶格的每个顶点替换为由四个节点组成的完全图 K_4 ，也称为 Kasteleyn城。原始边的边权重设为 J_{ij} ，内部相互作用键的边权重则设为零 K_4 。在此图上求解匹配问题，便对应于在原始晶格上找到一组闭合回路，这些回路将自旋取向相反的畴分隔开来，参见图 1.2 中的示意图。权重最小的构型对应于自旋玻璃样本的一个基态。由于辅助图具有稀疏性，与 [47], 中提出的方法相比，该方法能够研究大得多的系统；文献 [55]中报告了对规模最高达 $L = 10\,000$ 的方格晶格所进行的计算。

研究基态激发的一种广泛应用的方法，是系统地改变边界条件（BCs）；这些激发在自旋玻璃相理论中起着核心作用。人们认为，沿一个方向将周期边界条件改为反周期边界条件所对应的缺陷能，

$$E_{\mathrm{def}} = |E_{\mathrm{P}} - E_{\mathrm{AP}}|, \tag{1.12}$$

可作为系统典型低能激发的替代量 [56]。此处， E_{P} 和E_{AP} 分别指周期性和反周期边界条件下的基态能量。人们预期 E_{def} 按 [57, 58],的形式标度

$$E_{\mathrm{def}} \sim L^{\theta} \tag{1.13}$$

其中 自旋刚度指数 θ， $\theta > 0$ 应表明自旋玻璃相在非零温度下的稳定性，而对于 $\theta < 0$ ，转变温度$T_{\mathrm{SG}} = 0$ 以及 $\theta = -1/\nu$ 决定自旋玻璃关联长度按$T \to T_{\mathrm{SG}}$ [59] 发散。对于高斯交换耦合 J_{ij} ，可得到刚度指数$\theta \approx -0.3$ [52]，其中最精确的估计值为 [55],

$$\theta = -0.2793(3). \tag{1.14}$$

图 1.3(a) 展示了在很大范围的系统尺寸内缺陷能的标度行为，对此进行了说明。边界条件的改变会诱导出一个贯穿整个系统的畴壁缺陷；图 1.4 左图展示了周期性和反周期边界条件下基态之间重叠的一个典型构型。翻转畴的边界是一条分形曲线，因此预期畴壁长度呈现如下形式的分形标度

$$\langle \ell \rangle_J = A_\ell L^{d_{\mathrm{f}}}. \tag{1.15}$$

如图 1.3(b) 所示，数据以很高的精度确实验证了这一点，分形维数估计为 $d_{\mathrm{f}} = 1.27319(9)$。

由于技术原因，匹配方法只能处理定义在平面图上的样本，即至多在一个方向上具有周期性边界条件的晶格 [47]。更准确地说，对于具有全周期性边界的系统，运行结果与

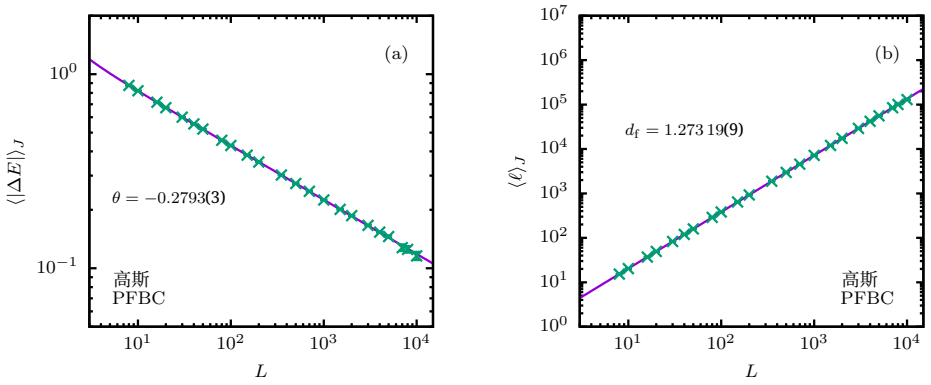


图 1.3。（a）正方晶格上的高斯 EA 模型中，沿 x 方向采用周期性边界、沿 y 方向采用自由边界时，缺陷能 E_{def} 的标度关系。直线表示对数据按函数形式 $E_{\mathrm{def}} = A_\theta L^\theta + C_\theta / L^2$ [55]进行拟合的结果。（b）周期边界条件与反周期边界条件之间畴壁长度的标度关系。直线表示按函数形式（1.15）对数据进行拟合的结果。

两个方向上分别采用周期边界条件和反周期边界条件的结果相同，因此返回的构型是四种可能边界条件之一对应的基态。正如参考文献 [53], 所指出的，该方法实际上同时对边界条件和自旋变量进行优化。为避免这一问题，并能够处理具有全周期边界条件且标度修正更小的系统，可以采用图 1.4 右图所示的窗口技术：由于最小权完美匹配（MWPM）可用于求解平面图的精确基态，为了处理周期性 $L \times L$ 系统，可在边长为 $L-2$ 的方形子集（“窗口”）上应用该方法，同时固定外部自旋的相对取向。在（周期性）晶格上随机移动窗口位置，反复进行窗口优化，便可使结果快速收敛。这一方案构成了一种随机算法，通过采用 m 次相互独立的运行，可以任意提高其成功概率，

$$P_s(\{J_{ij}\}) = 1 - [1 - P_n(\{J_{ij}\})]^m. \tag{1.16}$$

数值结果表明，对于给定的成功概率，所需的重复次数与系统大小无关，因此该算法的计算复杂性与平面图上的最小权完美匹配方法相同；后者的复杂性按 L^κ 扩展，其中 $\kappa \approx 2.2$ [55] 对应 Blossom V 算法 [50]。

具有双峰耦合的系统也可以用匹配技术来研究。在这里，人们发现 E_{def} 并未渐近衰减，而是收敛到一个正的极限值，如 $L \to \infty$ [52]。起初，这被视为下临界维数为 $d_l = 2$ 的证据；后来人们意识到，这实际上是另一个零温重整化群不动点的特征，它与非零温度下的物理性质无关 [60] ，而且相反，有证据表明 $d_l = 2.5$ [61, 62]。该系统的一个特征是基态具有广延简并，从而产生有限的基态熵。这给匹配方法带来了困难，因为它不会以相同的概率选取各个基态。最简单的形式是确定性的，因此总会返回同一个基态。一些

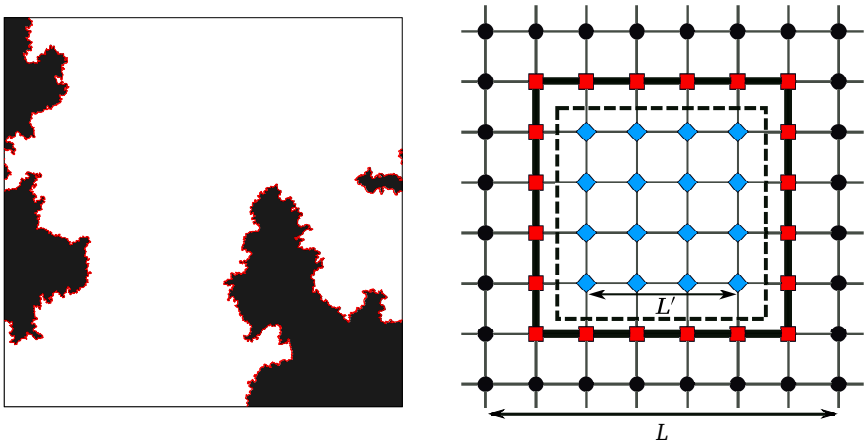


图1.4。左：在周期性边界和反周期性边界条件下，特定无序样本中分隔相同与相反基态构型区域的畴壁。右：采用窗口技术计算具有完全周期性边界条件的样本基态时所用的设置。

通过改变相互作用键的考察顺序或向耦合中加入一些噪声进行简单随机化，可以改善这一情况，但仍会导致有偏采样方法 [55]。通过在基态流形中适当构造蒙特卡罗采样技术，可以实现无偏采样，从而估算畴壁分形维数及相关量 [55]。

匹配技术也可用于采样其他类型的激发，而不仅仅是由边界条件变化引起的畴壁扰动。通过用“硬”相互作用键固定自旋的相对取向，可以研究不同类型的液滴形激发 [63, 64]。此外，尽管匹配是解决这一问题最广泛使用的技术，但另一种基于利用 Pfaffian 计算配分函数的方法，也可以精确地在多项式时间内研究有限温性质 [65–67]。最近，这类方法得到进一步扩展，还可用于研究关联函数及其他相关性质 [68–70]。

1.5. 指派问题

本节将讨论指派问题的一些新结果。为了以最简单的形式定义这个问题，我们需要考虑一个大小为n, $W := \{w_{ij}\}_{i,\ j=1}^{n}$、元素为实数的方阵。对于对称群$\mathcal{S}_n$ 中的每个排列 π，考虑矩阵 $\Pi := \{\pi_{ij}\}_{i,\ j=1}^{n}$，其元素为零或一，使得

$$\pi_{ij} = \delta_{j,\pi(i)} = \begin{cases} 1 & \text{if } \pi(i) = j \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases} \tag{1.17}$$

并要求对 W 的列进行排列，以使迹达到最小值，也就是使哈密顿量达到最小值

$$\mathcal{H}(\Pi, W) := \operatorname{tr}\left(W^T \cdot \Pi\right) = \sum_{i,j=1}^{n} w_{ij}\pi_{ij} = \sum_{i,j=1}^{n} w_{ij}\delta_{j,\pi(i)} = \sum_{i=1}^{n} w_{i,\pi(i)}\,. \tag{1.18}$$

不失一般性，我们可以假定 W 的各项均为非负数： $w_{ij} \geq 0$。事实上，在组合优化中，它们通常称为代价。换言之，这是完全二分图 $\mathcal{K}_{n,n}$上的经典匹配问题。该问题的解是一个排列 π^*，其对应矩阵为 $\Pi^*(W)$，该排列使代价最小，并由此确定

$$\mathcal{H}^*(W) := \min_{\pi\in\mathcal{S}_n} \mathcal{H}(\Pi, W) = \mathcal{H}\left(\Pi^*(W), W\right) \tag{1.19}$$

总成本的最优值。最优解可视为由成本矩阵 W 定义的无序系统的哈密顿量的基态。这种类比可以派上用场，例如可用于模拟退火 [7]。

在可能成本的空间上引入概率，使我们能够研究典型解的性质；统计物理中的方法也充分展现了其威力 [22, 23, 71]。在具有开创性的研究中，M´ezard 和 Parisi[72–74] （另见 [75]）运用副本技巧，求解了匹配、指派问题和旅行商问题，其中矩阵元素 w_{ij} 是同分布的独立随机变量，其概率密度具有如下形式

$$\rho(w) = w^r \sum_{k=0}^{\infty} \eta_k w^k \tag{1.20}$$

其中 $\eta_0 \neq 0$。更准确地说，在规模 n 无限大的渐近极限下，副本对称性不发生破缺，最优解可通过应用鞍点法确定，即作为一个积分方程的解，而该方程中只含参数 r 。特别是

$$E_n := \mathbb{E}\left[\mathcal{H}^*(W)\right] \sim n^{1-\frac{1}{r+1}}\,, \tag{1.21}$$

其中，期望值是对可能的权重取的； $\sim$ 我们用此符号表示关系两边随较大的 n 以相同方式缩放，因此当点数趋于无穷时，它们的比值会收敛。关于一篇近期研究，其中在 [76, 77] 之后重新考察了首批有限尺寸修正，并将参数 r 扩展到非整数取值，请参见 [78]。

当图$\mathcal{K}_{n,n}$ 的顶点与 Ω 中的点相对应，且 $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ 被视为欧几里得空间的子集时，便出现了一类新的问题。因此，我们有两个基数均为 n 的点集：分别记为红点 $\mathcal{R}$和蓝点$\mathcal{B}$，其位置分别为 $x_i \in \mathbb{R}^d$ 和 $y_i \in \mathbb{R}^d$，其中 $i \in \{1, \ldots, n\} = [n]$。假设将第 i 个红点指派给第 j 个蓝点的成本，是这两个点之间欧几里得距离 $|x_i - y_j|$ 的函数。我们将限于以下这些情形

$$w_{ij} = f(|x_i - y_j|) = |x_i - y_j|^p \tag{1.22}$$

由实数 $p \in \mathcal{R}$ 参数化。我们引入与这两个点集相关联的经验 概率测度

$$\rho_{\mathcal{R}}(x) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\delta(x - x_i)\,; \qquad \rho_{\mathcal{B}}(y) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\delta(y - y_j) \tag{1.23}$$

并且对于 $p \geq 1$，考察两个概率测度之间的 p 阶 Wasserstein 距离（在其他地方也称作 Kan- torovich 和 Rubinstein 距离），也就是考察这个变分问题

$$W_p(\rho_1, \rho_2) := \left(\inf_{\gamma\in\Gamma(\rho_1,\rho_2)}\int dx\, dy\, \gamma(x,y)\,|x-y|^p\right)^{\frac{1}{p}}, \tag{1.24}$$

其中 $\Gamma(\rho_1,\ \rho_2)$ 是 $\Omega\times\Omega$ 上边缘分布为 ρ_1 和 ρ_2的测度集合。这无非是将按照 ρ_1 分布的单位质量传输到分布 ρ_2 [79, 80]的最优传输 （或 Monge-Kantorovich）问题。函数 $\gamma(x,\ y)$ 定义了一个运输方案，实际上，边缘条件

$$\int dx\,\gamma(x,y) = \rho_2(y)\,; \qquad \int dy\,\gamma(x,y) = \rho_1(x) \tag{1.25}$$

约束移入点 y 和移出点 x 的质量，正是所需的条件。对于这两个经验概率测度，可能的运输方案可归结为排列集合，因此它们的 Wasserstein 距离与最优代价 [81] 之间有简单的关系

$$\mathcal{H}^*(W) = n\, W_p^p(\rho_{\mathcal{R}}, \rho_{\mathcal{B}}). \tag{1.26}$$

元素取决于空间中随机分布点之间欧几里得距离的随机矩阵，称为欧几里得随机矩阵。欧几里得随机矩阵的谱已在 [82] 中得到研究。

为明确起见，我们考虑 $\Omega = [0,1]^d$ 的情形，并采用周期性边界条件，因此实际上是在单位体积的环面上，红点和蓝点的位置按均匀概率随机选取。因此，自然的长度尺度为 $n^{-\frac{1}{d}}$，并且可以简单地假设，对于每个红点，在半径约为 $n^{-\frac{1}{d}}$ 的球内至少有一个蓝点与之匹配，由此可以推测

$$E_n \sim n^{1-\frac{p}{d}}\,. \tag{1.27}$$

但众所周知， [83] 这只有在 $d \geq 2$ 中才成立。已经证明，在 $d = 2$

$$E_n \sim n\left(\frac{\log n}{n}\right)^{\frac{p}{2}} \tag{1.28}$$

会出现对数级偏离。在 $d = 1$ [84] 中，可以进行更为详细的分析，探讨其与布朗过程之间引人入胜的关系 [85]。研究表明，对于一般的概率分布 ρ，其累积分布函数为 Φ，平均总成本为

$$E_n = n^{1-\frac{p}{2}}\frac{2^p}{\sqrt{\pi}}\Gamma\left(\frac{p+1}{2}\right)\int_0^1 dx\frac{[\Phi(x)(1-\Phi(x))]^{\frac{p}{2}}}{\rho^{p-1}(x)} + o(n^{-\frac{p}{2}}) \tag{1.29}$$

至少在积分收敛时如此。否则，就会出现反常标度 [86]。对于开放边界条件和均匀分布的情形，即使系统大小有限，也可以借助塞尔伯格积分求得平均成本 [87]

$$E_n = n\,\frac{\Gamma\left(1+\frac{p}{2}\right)}{p+1}\,\frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma\left(n+1+\frac{p}{2}\right)}\,. \tag{1.30}$$

此外，也有研究考察了 $p \leqslant 0$，其中则是针对平坦分布 [88],

$$\lim_{n\to\infty}\frac{E_n}{n} = \frac{1}{2^p}\,. \tag{1.31}$$

当 $0 < p < 1$ 代价函数变为凹函数时。在 [89] 中，作者认为

$$E_n \sim \begin{cases} n^{1-p} & \text{for } 0 < p < \frac{1}{2}\,, \\ \sqrt{n}\log n & \text{for } p = \frac{1}{2}\,, \\ \sqrt{n} & \text{for } \frac{1}{2} < p < 1\,, \end{cases} \tag{1.32}$$

因此，相图会在 $p = \frac{1}{2}$ 处发生变化。

对于 $d = 2$ 中的平坦分布，在特定值 $p = 2$下得到了一个有趣的精确结果；在 [90, 91], 中，该结果为

$$\lim_{n\to\infty}\frac{E_n}{\log n} = \frac{1}{2\pi}. \tag{1.33}$$

这一点已在 [92] 中得到严格证明（另见 [93] 中的改进）。我们沿用 [94] 中引入的场论方法，并引入向量输运场 $\mu(x)$，它将 x 中的红点与 $y = x + \mu(x)$中的蓝点连接起来，并考虑拉格朗日量

$$\mathcal{L}[\mu,\phi] := \frac{1}{2}\int \mu^2(x)\rho_{\mathcal{R}}(dx) + \int [\phi(x+\mu(x))\rho_{\mathcal{R}}(dx) - \phi(x)\rho_{\mathcal{B}}(dx)] \tag{1.34}$$

以便将其最小化，其中标量场 $\phi(x)$是一个拉格朗日乘子，用于实现蓝点与红点之间的匹配。在点数 n很大的极限下，若红点和蓝点按照相同的分布 ρ 提取，使得 $\delta\rho := \rho_{\mathcal{R}} - \rho_{\mathcal{B}}$，且最优的 μ 趋于零，那么我们预计仅使用拉格朗日量中的二次项就能得到良好的近似，即

$$\mathcal{L}[\mu,\phi] := \int \left[\frac{1}{2}\mu^2(x) + \mu(x)\cdot\nabla\phi(x)\rho(dx)\right] + \int \phi(x)\delta\rho(dx)\,, \tag{1.35}$$

其欧拉-拉格朗日方程为

$$\mu = -\nabla\phi\,, \qquad \nabla\cdot[\rho\,\mu] = \delta\rho\,, \tag{1.36}$$

揭示出与一个静电问题的严格类比：其中，μ 扮演电场的角色，ϕ 是标量势，实际上也是用于实现高斯定律的拉格朗日乘子；红点和蓝点带有相反的单位电荷，因此总电荷为零，而 ρ 则是线性介电介质的介电函数。因此

$$-\nabla\cdot[\rho\,\nabla\phi] = \rho \tag{1.37}$$

可借助算子 $-\nabla\cdot[\rho\,\nabla\bullet]$的经典格林函数 $G_\rho(x,\ y)$求解，因此，在无序固定时，一个显式的近似解为

$$\mu(x)=\int\nabla_x G_\rho(x,y)\,\delta\rho(dy)\,. \tag{1.38}$$

对无序进行平均后，在平坦测度的简单情形下（非恒定情形见 [95] ），我们得到

$$\lim_{n\to\infty}E_n(\Omega)=-2\,\mathrm{tr}\,\Delta_\Omega^{-1}\,, \tag{1.39}$$

其中，拉普拉斯算子 Δ_Ω 定义在定义域 Ω 上。这个公式在 $d=1$ 中是正确的，但对于 $d>1$，它只会导致两边都发散。这种紫外发散是由对无限多模态进行线性化引入的，但这种近似在极短距离下并不成立。在精确的非线性理论中，高阶模态会被截断，因此我们预期

$$E_n(\Omega)=2\int_{0^+}^{\infty}\frac{F\left(\frac{\lambda}{n}\right)}{\lambda}\,d\mathcal{N}_\Omega(\lambda)\,, \tag{1.40}$$

其中，$\mathcal{N}_\Omega(\lambda)$ 是拉普拉斯算子的特征值小于 λ 的数量，而未知函数 F 在 $\lambda\lesssim n$ 时取 1，在 $\lambda\gtrsim n$ 时取 0。

根据魏尔定律 [96]，关于拉普拉斯–贝尔特拉米算子的特征值计数函数的渐近行为，对于一个体积为 1 的二维 d 流形（采用适用于我们问题的诺伊曼边界条件）

$$\mathcal{N}_\Omega(\lambda)=\frac{1}{4\pi}\left(\lambda+\sqrt{\lambda}\,|\partial\Omega|\right)+o\left(\sqrt{\lambda}\right)\,. \tag{1.41}$$

现在，在 $d=2$ 中很容易计算点数的首项对数奇异性；与 [97] 一致，我们预期

$$E_n(\Omega)=\frac{1}{2\pi}\log n+2c_*(n)+2c_\Omega+o(1)\,, \tag{1.42}$$

其中 $c_*(n)=O(\log n)$ 是一个不依赖于 Ω 的普适函数。进一步的推论是，

$$\lim_{n\to\infty}\left[E_n(\Omega)-E_n(\Omega')\right]=2\lim_{n\to\infty}\int_{0^+}^{\infty}\frac{F\left(\frac{\lambda}{n}\right)}{\lambda}\,\left[d\mathcal{N}_\Omega(\lambda)-d\mathcal{N}_{\Omega'}(\lambda)\right]\,, \tag{1.43}$$

但即使没有正则化，右端也收敛，因此

$$\lim_{n\to\infty}\left[E_n(\Omega)-E_n(\Omega')\right]=2\int_{0^+}^{\infty}\frac{d\mathcal{N}_\Omega(\lambda)-d\mathcal{N}_{\Omega'}(\lambda)}{\lambda}\,, \tag{1.44}$$

这个表达式已在 [98] 上通过格林函数方法以及戴德金极限公式等其他经典工具，对各种 $2d$ 流形进行了检验，从而证实了场论方法的预测。

关于将类似方法应用于更一般情形，参见 [99–101]。

再一次，这个相对简单的组合优化问题揭示了与众多不同研究领域之间引人入胜且富有成果的联系。

参考资料

[1] R. Brout，随机铁磁系统的统计力学理论，*Phys. Rev.* **115** 4 824, 1959 ( ),

( )。[2] S. F. Edwards 和 P. W. Anderson，自旋玻璃理论， *J. Phys. F*。5，965，（1975年）。[3] D. Sherrington 和 S. Kirkpatrick，自旋玻璃的可解模型， *Phys. Rev. Lett.* **35** (26), 1792，（1975年）。[4] S. Kirkpatrick 和 D. Sherrington，无限程自旋玻璃模型，*Phys. Rev. B*。17(11)，4384，（1978年）。[5] A. Crisanti 和 T. Rizzo，Sherrington-Kirkpatrick模型副本对称性破缺解的分析， *Phys. Rev. E*。65(4)，046137，（2002）。[6] S.-Y. Kim、S. J. Lee 和 J. Lee，Sherrington-Kirkpatrick自旋玻璃的基态能量与能量景观， *Phys. Rev. B*。76(18)，184412，（2007）。[7] S. Kirkpatrick、C. D. Gelatt 和 M. P. Vecchi，通过模拟退火进行优化，*Science*。220(4598)，671–680，（1983）。网址 http://science.sciencemag.org/content/ 220/4598/671.long。[8] V. ˇCern`y，旅行商问题的热力学方法：一种高效的模拟算法， *Journal of optimization theory and applications*。45(1), 41–51，（1985）。[9] K. G. Wilson。与 Scott Kirkpatrick 的个人通信，（1990）。[10] B. Selman。新一代自动推理方法，（2021）。康奈尔大学 CS6700 课程讲座幻灯片。[11] M. M´ezard、G. Parisi 和 R. Zecchina，随机可满足性问题的解析解与算法解， *Science*。297(5582)，812–815，（2002）。[12] M. M´ezard 和 G. Parisi，零温下的腔方法，*J. Stat. Phys.* **111** (1)，1–34，（2003）。[13] F. Krzaka-la、A. Montanari、F. Ricci-Tersenghi、G. Semerjian 和 L. Zdeborov´a，吉布斯态与随机约束满足问题解的集合，*Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **104** 25 10318 10323, 2007 ( ), –

( )。[14] L. Zdeborova，困难优化问题的统计物理， *Acta Physica Slovaca*。59，（2009）。[15] D. Gamarnik，重叠间隙性质：优化随机结构时的拓扑障碍，*Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **118**(41)，e2108492118，（2021）。[16] R. Marino 和 S. Kirkpatrick，困难优化问题具有软边缘，*arXiv:2209.04824*。（2022）。[17] K. Hukushi ma 和 K. Nemoto，交换蒙特卡洛方法及其在自旋玻璃模拟中的应用， *J. Phys. Soc. Jpn.* **65** (6)，1604–1608，（1996）。[18] M. C. Angelini，用于隐藏团问题的并行回火，*J. Stat. Mech.: Theory Exp.* **2018** 7 073404, 2018 ( ),

( )。[19] M. C. Angelini 和 F. Ricci-Tersenghi，蒙特卡洛算法在稀疏随机图中寻找最大独立集时非常有效， *Phys. Rev. E*。100(1)，013302，（2019）。[20] A. K. Hartmann 和 H. Rieger， *Optimization Algorithms in Physics*。（Wiley，柏林，2002）。[21] F. Barahona，论伊辛自旋玻璃模型的计算复杂性， *J. Phys. A*。15，3241，（1982）。网址 http://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/15/10/028。[22] A. K. Hartmann 和 M. Weigt，*Phase Transitions in Combinatorial Optimization Problems: Basics Algorithms and Statistical Mechanics* 2006 , 。

（Wiley，）。[23] M. M´ezard 和 A. Montanari， *Information*、 *physics*、 *and computation*。（牛津大学出版社，2009）。[24] A. H. Land 和 A. G. Doig，求解离散规划问题的一种自动方法， *Exonometrica*。28，497，（1960）。

[25] S. Kobe 和 A. Hartwig，有限非晶伊辛系统的精确基态，

Comp. ( )， – *Phys. Commun.* **16** 1 1 4， 1978 0010 4655 10 1016 ( )。ISSN -。doi：https://doi.org/。/ 0010-4655(78)90102-9。[26] A. Hartwig 、 F. Daske 和 S. Kobe，求伊辛自旋玻璃模型精确基态的递归分支定界算法， *Comp. Phys. Commun.* **32**(2)，133–138，（1984）。ISSN 0010-4655。doi：https://doi.org/10.1016/0010-4655(84)90066-3。[27] T. Klotz 和 S. Kobe，有限三维 ±j自旋玻璃构型空间中的基态簇几何， *J. Magn. Magn. Mat.* **177**-181，1359–1360，（1998）。ISSN 0304- 8853。doi：https://doi.org/10.1016/S0304-8853(96)00775-5。国际磁学会议（第二部分）。[28] T. Klotz、S. Schubert 和 K. H. Hoffmann，短程伊辛自旋玻璃的状态空间：态密度， *Europ. Phys. J. B*。2(3)，313–317（1998年4月）。ISSN 1434- 6036。doi：10.1007/s100510050254。[29] J. Krawczyk 和 S. Kobe，自旋玻璃的低温动力学：在能量景观中行走， *Physica A*。315(1)，302–307，（2002）。ISSN 0378-4371。doi：https://doi.org/10.1016/S0378-4371(02)01227-X。自然界中的慢动力学过程。[30] S. Schubert 和 K. H. Hoffmann，枚举的自旋玻璃状态空间的结构，*Comp. Phys. Commun.* **174**(3)，191–197，（2006）。ISSN 0010-4655。doi：https://doi.org/ 10.1016/j.cpc.2004.02.019。[31] R. Monasson、R. Zecchina、S. Kirkpatrick、B. Selman 和 L. Troyansky，从特征相变确定计算复杂性， *Nature*。400，133，（1999）。[32] M. Weigt 和 A. K. Hartmann，博物馆所需的守卫数量——随机图顶点覆盖中的一个相变， *Phys. Rev. Lett.* **84**，6118，（2000）。[33] S. Cocco 和 R. Monasson，相图中的轨迹、生长过程与计算复杂性：搜索算法如何解决

3 *Phys.* -可满 *Rev. Lett.* **86** 1654 2001 足性问题， ， （ ）。[34] M. Weigt 和 A. K. Hartmann，有限连通度随机图上顶点覆盖算法的典型情形复杂性， *Phys. Rev. Lett.* **86**，1658，（2001）。[35] F. Barahona 和 A. R. Mahjoub，论割多面体， *Math. Program.* **36**(2)，157–173（1986年6月）。ISSN 1436-4646。doi：10.1007/BF02592023。[36] M. Padberg， *Linear Programming and extensions*。（施普林格，柏林，1995）。[37] G. B. Dantzig，线性结构中的规划， *Bull. Amer. Math. Soc.* **54**，1074–1074，（1948）。[38] F. Liers、M. J¨unger、G. Reinelt 和 G. Rinaldi，通过分支割平面法计算困难伊辛自旋玻璃问题的精确基态。载于 A. K. Hartmann 和 H. Rieger 编，*New Optimization Algorithms in Physics*，第47页。Whiley-VCH，魏因海姆，（2004）。[39] T. Dewenter 和 A. K. Hartmann，顶点覆盖问题的割平面法相变， *Phys. Rev. E*。86，041128，（2012）。doi：10.1103/PhysRevE.86.041128。[40] W. Barthel 和 A. K. Hartmann，顶点覆盖问题基态结构的聚类分析， *Phys. Rev. E*。70，066120，（2004）。[41] M. Bauer 和 O. Golinelli，随机图中的核渗流：临界现象分析， *Eur. Phys. J. B*。24，339，（2001）。[42] R. E. Gomory，线性规划整数解算法概要，

Bull. ( )， – *Am. Math. Soc.* **64** 5 275 278， 1958 ( )。[43] F. Barahona 、 M. Gr¨otschel 、 M. J¨unger 和 G. Reinelt，将组合优化应用于统计物理和电路布局设计， *Operations Research*。36(3)，493，（1988）。ISSN 0030364X。[44] S. Mallach。自旋玻璃服务器。http://spinglass.uni-bonn.de/，（2022）。访问日期：2022-05-04。[45] M. Palassini、F. Liers、M. J¨unger 和 A. P. Young，从精确基态获得的自旋玻璃低能激发， *Phys. Rev. B*。68，064413（2003年8月）。doi：10.1103/

PhysRevB.68.064413。[46] F. Liers、M. Palassini、A. K. Hartmann 和 M. J¨unger，贝特晶格自旋玻璃的基态与精确优化算法的运行时间， *Phys. Rev. B*。68，094406（2003年9月）。doi：10.1103/PhysRevB.68.094406。[47] I. Bieche、R. Maynard、R. Rammal 和 J. P. Uhry，论通过图论匹配方法求自旋玻璃受挫模型的基态， *J. Phys. A*。13，2553，（1980）。URL http://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/13/8/005。[48] G. Toulouse，自旋玻璃受挫效应理论 1， *Commun. Phys.* **2**，115，（1977）。URL http://dx.doi.org/10.1142/9789812799371_0009。[49] J. Edmonds， *J. Res. Natl. Bur. Stand. B*。69，125，（1965）。[50] V. Kolmogorov，Blossom V：最小代价完美匹配算法的新实现， *Math. Prof. Comp.* **1**，43，（2009）。URL http://dx.doi.org/10.1007/ s12532-009-0002-8。[51] A. Gibbons， *Algorithmic Graph Theory*。（剑桥大学出版社，剑桥，1985）。[52] A. K. Hartmann 和 A. P. Young，伊辛自旋玻璃的下临界维数，*Phys. Rev. B*。64(18)，180404，（2001）。URL http://dx.doi.org/10.1103/physrevb。64.180404。[53] C. K. Thomas 和 A. A. Middleton，用于自旋玻璃基态的匹配 Kasteleyn 城市， *Phys. Rev. B*。76，220406，（2007）。URL http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB。76.220406。[54] G. Pardella 和 F. Liers，大型二维平面伊辛自旋玻璃的精确基态， *Phys. Rev. E*。78，056705，（2008）。URL http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE。78.056705。[55] H. Khoshbakht 和 M. Weigel，二维伊辛自旋玻璃中的畴壁激发， *Phys. Rev. B*。97，064410，（2018）。URL http://arxiv.org/abs/1710.01670。[56] J. R. Banavar 和 M. Cieplak，自旋玻璃中的有序化本质， *Phys. Rev. Lett.* **48**，832 1982，（）。[57] A. J. Bray 和 M. A. Moore，伊辛自旋玻璃的下临界维数：一项数值研究， *J. Phys. C*。17，（1984）。[58] W. L. McMillan，伊辛自旋玻璃的标度理论， *J. Phys. C*。17，3179，（1984）。[59] A. J. Bray 和 M. A. Moore。自旋玻璃有序相的标度理论。载于 J. L. van Hemmen 和 I. Morgenstern 编， *Heidelberg Colloquium on Glassy Dynamics*，第121页，海德堡，（1987）。施普林格。[60] T. J¨org 和 F. Krzakala，离散二维自旋玻璃中不同零温相的性质：重整化群流中的熵、普适性、混沌与级联， *J. Stat. Mech.: Theory Exp.* **2012**(01)，L01001，（2012）。URL http://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/2012/01/l01001。[61] S. Boettcher， Edwards-Anderson 模型在所有维度中的刚度，

Phys. Rev. , , *Lett.* **95** 197205 2006

（）。[62] A. Maiorano 和 G. Parisi，支持零磁场下自旋玻璃下临界维数为 5/2 这一数值， *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **115**(20)，5129–5134，（2018）。[63] A. K. Hartmann 和 M. A. Moore，二维自旋玻璃中液滴的标度修正很大， *Phys. Rev. Lett.* **90**，127201，（2003）。[64] A. K. Hartmann，二维

$\pm J$ **77**, 伊辛

144418，2008 10 1103 77 144418

自旋玻璃中的液滴， *Phys. Rev. B*。（）。URL http://dx.doi.org/。/physrevb。。。[65] J. A. Blackman 和 J. Poulter， $\pm J$ 自旋玻璃模型的规范不变方法，*Phys. Rev. B*。44，4374–4386，（1991）。URL http://dx.doi.org/10.1103/physrevb.44。4374。[66] L. Saul 和 M. Kardar，二维 $\pm J$ 伊辛自旋玻璃的精确整数算法， *Phys. Rev. E*。48(5)，R3221，（1993）。URL http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE。48.R3221。

[67] A. Galluccio、M. Loebl 和 J. Vondr´ak, 《伊辛问题的新算法：有限格图的配分函数》, *Phys. Rev. Lett.* **84**(26), 5924, （2000）。网址 http: //dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.5924。[68] C. K. Thomas 和 A. A. Middleton, 《二维伊辛自旋玻璃的精确采样算法》, *Phys. Rev. E*。80, 046708, （2009）。网址 http://dx.doi.org/10.1103/ PhysRevE.80.046708。[69] C. K. Thomas、D. A. Huse 和 A. A. Middleton, 《二维 $\pm J$ 伊辛自旋玻璃的零温和低温行为》, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 047203, （2011）。网址 http://dx.doi.org/10.1103/physrevlett.107.047203。[70] C. K. Thomas 和 A. A. Middleton, 《二维伊辛自旋玻璃中的数值精确关联与采样》, *Phys. Rev. E*。87, 043303（2013年4月）。网址 https: //link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.87.043303。[71] M. M´ezard、G. Parisi 和 M. Virasoro, 《*Spin glass theory and beyond: An Introduction to the Replica Method and Its Applications*》。第 9 卷。（世界科学出版公司，1987年）。[72] M. M´ezard 和 G. Parisi, 《副本与优化》, *J. Phys. (Paris) - Lettres*。46（17）, 771–778, （1985）。ISSN 0302-072X。doi：10.1051/jphyslet:019850046017077100。网址 http://www.edpsciences.org/10.1051/jphyslet:019850046017077100。[73] M. M´ezard 和 G. Parisi, 《旅行商问题的副本分析》, *J. Phys. (Paris)*。47(1986), 1285–1296, （1986）。网址 http://jphys.journaldephysique.org/index.php? option=com{_}article{&}access=doi{&}doi=10.1051/jphys:019860047080128500。[74] M. M´ezard 和 G. Parisi, 《匹配问题与旅行商问题的平均场方程》, *Europhysics Letters*。2(12), 913–918, （1986）。[75] H. Orland, 《优化问题的平均场理论》, *Le J. Phys. (Paris)*。（）, –（）。- *Lettres* **46** 17 773 770, 1985 10 1051 019850046017076300 doi：。/jphyslet:。网址 https://jphyslet.journaldephysique.org/articles/jphyslet/abs/1985/17/jphyslet_1985__46_17_763_0/jphyslet_1985__46_17_763_0.html。[76] M. M´ezard 和 G. Parisi, 《随机链路匹配问题的解》, *J. Phys. (Paris)*。48(9), 1451–1459, （1987）。ISSN 0302-0738。doi: 10.1051/ jphys:019870048090145100。网址 http://jphys.journaldephysique.org/index.php? option=com{_}article{&}access=doi{&}doi=10.1051/jphys:019870048090145100http://www.edpsciences.org/10.1051/jphys: 019870048090145100。[77] G. Parisi 和 M. Rati´eville, 《某些随机匹配问题的有限尺寸修正》, *Eur. Phys. J. B*。29(3), 457–468（2002年10月）。ISSN 1434-6028。doi：10.1140/ epjb/e2002-00326-3。[78] S. Caracciolo、M. P. D' Achille、E. M. Malatesta 和 G. Sicuro, 《随机指派问题中的有限尺寸修正》, *Phys. Rev. E*。95, 052129, （2017）。doi：10.1103/PhysRevE.95.052129。网址 https://journals-aps-org.pros.lib.unimi.it: 2050/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.95.052129。[79] C. Villani, 《》, *Optimal transport: old and new*。第338卷, （施普林格科学与商业媒体，2008年）。[80] L. Ambrosio, 《*Mathematical Aspects of Evolving Interfaces* 1812 *Lecture Notes in Mathematics (Fondazione C.I.M.E., Firenze)*》, 第 vol. 卷, , , 章节《最优输运问题讲义》, 第 1–52 页。施普林格，柏林，海德堡, （2003）。[81] H. Brezis, 《离散情形下关于蒙日–康托罗维奇问题的评论》, *Comptes Rendus Mathematique* **356** 2 207 213, 2018 1631 073 。（）, –（）。ISSN - X。doi：https://doi.org/ 10.1016/j.crma.2017.12.008。网址 http://www.sciencedirect.com/science/article/ pii/S1631073X1730328X。[82] M. M´ezard、G. Parisi 和 A. Zee, 《欧几里得随机矩阵的谱》, *Nuclear Physics B* **559** 3 689 701, 1999 0550 3213 10 1016 。（）, –（）。ISSN - 。doi：https://doi.org/ 。/

S0550-3213(99)00428-9。网址 http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0550321399004289。[83] M. Ajtai、J. Komlˊos 和 G. Tusnˊady，《最优匹配》，*Combinatorica*。**4(4)**，259–264，（1984）。[84] E. Boniolo、S. Caracciolo 和 A. Sportiello，《直线和圆上的网格泊松欧几里得匹配的相关函数》，*J. Stat. Mech.* **11**，P11023，（2014）。doi：10.1088/1742-5468/2014/11/P11023。[85] S. Caracciolo 和 G. Sicuro，《一维欧几里得匹配问题：精确解、关联函数与普适性》，*Phys. Rev. E*。**90**，042112，（2014）。doi：10.1103/PhysRevE.90.042112。网址 https://journals-aps-org.pros.lib.unimi.it/ pre/abstract/10.1103/PhysRevE.90.042112。[86] S. Caracciolo、M. P. D'Achille 和 G. Sicuro，《一维随机指派问题中最优代价的反常标度》，*J. Stat. Phys.* **174(4)**，846–864，（2019）。doi：10.1007/s10955-018-2212-9。网址 https://link.springer.com/article/10.1007% 2Fs10955-018-2212-9。[87] S. Caracciolo、A. Di Gioacchino、E. M. Malatesta 和 L. G. Molinari，《一维随机欧几里得优化问题中的塞尔伯格积分》，*J. Stat. Mech.* p. 063401，（2019）。doi：10.1088/1742-5468/ab11d7。网址 https://iopscience-iop-org.pros.lib.unimi.it: 2050/article/10.1088/1742-5468/ab11d7/pdf。[88] S. Caracciolo、M. P. D'Achille 和 G. Sicuro，《一维随机欧几里得匹配问题》，*Phys. Rev. E*。**96**，042102，（2017）。doi：10.1103/PhysRevE. 96.042102。网址 https://journals-aps-org.pros.lib.unimi.it/pre/pdf/10.1103/ PhysRevE.96.042102。[89] S. Caracciolo、M. P. D'Achille、V. Erba 和 A. Sportiello，《凹的一维随机指派模型中的Dyck界》，*J. Phys. A: Math. Theor.* **53(6)**，064001（25页），（2020）。doi：10.1088/1751-8121/ab4a34。网址 https://doi.org/10. 1088%2F1751-8121%2Fab4a34。[90] S. Caracciolo、C. Lucibello、G. Parisi 和 G. Sicuro，《欧几里得二分匹配问题的标度假设》，*Phys. Rev. E*。**90**，012118，（2014）。doi：10.1103/PhysRevE. 90.012118。网址 https://journals-aps-org.pros.lib.unimi.it/pre/abstract/10. 1103/PhysRevE.90.012118。[91] S. Caracciolo 和 G. Sicuro，《欧几里得二分匹配问题的标度假设。II. 关联函数》，*Phys. Rev. E*。**91**，062125，（2015）。doi：http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.91.062125。网址 https://journals-aps-org.pros.lib.unimi.it/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.91.062125。[92] L. Ambrosio、F. Stra 和 D. Trevisan，《二维匹配问题的偏微分方程方法》，*Probab. Theory Relat. Fields*。**173**，433–477，（2019）。doi：10.1007/ s00440-018-0837-x。网址 https://doi.org/10.1007/s00440-018-0837-x。[93] L. Ambrosio、F. Glaudo 和 D. Trevisan，《关于二维随机匹配问题中的最优映射》，*Discrete Cont. Dyn. A*。**39**，1078–0947，（2019）。doi：10.3934/dcds.2019304。网址 http://aimsciences.org//article/id/17beca52-6bdd-4a1a-a9c9-4b2145874254。[94] S. Caracciolo 和 G. Sicuro，《二次随机欧几里得二分匹配问题》，*Phys. Rev. Lett.* **115(23)**，230601，（2015）。doi：http://dx.doi.org/ 10.1103/PhysRevLett.115.230601。网址 http://journals.aps.org/prl/abstract/10. 1103/PhysRevLett.115.230601。[95] D. Benedetto 和 E. Caglioti，《非恒定密度下二维欧几里得随机匹配》，*J. Stat. Phys.* **181**，854–869，（2020）。[96] V. Ivrii，《韦尔定律100年》，*Bull. Math. Sci.* **6(3)**，379–452，（2016）。doi：10.1007/ s13373-016-0089-y。[97] L. Ambrosio 和 F. Glaudo，《关于

2 *J.* 维匹

Éc. Polytech. Math. **6** 737 765，2019

配问题的更精细的估计》，，–（）。

[98] D. Benedetto、E. Caglioti、S. Caracciolo、M. P. D'Achille、G. Sicuro 和 A. Sportiello，《流形上的随机指派问题》， $2d$ ，34，（2021）。doi：10. 1007/s10955-021-02768-4。网址：https://arxiv.org/abs/2008.01462。[99] P. Koehl、M. Delarue 和 H. Orland，《求解最优传输问题的统计物理方法》， *Phys. Rev. Lett.* **123**，040603，（2019）。doi：10.1103/PhysRevLett.123. 040603。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.123.040603。[100] P. Koehl 和 H. Orland，《通用及退化指派问题精确解的快速计算》， *Phys. Rev. E*。**103**，042101，（2021）。doi：10.1103/PhysRevE.103. 042101。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.103.042101。[101] P. Koehl、M. Delarue 和 H. Orland，《求解可变质量最优传输问题的物理学方法》， *Phys. Rev. E*。**103**，012113，（2021）。doi：10.1103/PhysRevE.103. 012113。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.103.012113。