arXiv:2302.07821v1 [cs.DS] 15 Feb 2023

通过弱空间混合对 q上的 $\mathbb{Z}^2$-自旋系统进行完美采样

Konrad Anand*和 Mark Jerrum†

伦敦玛丽女王大学数学科学学院，Mile End Road，伦敦 E1 4NS，英国

摘要

我们提出了一种边缘采样器，可对 $\mathbb{Z}^2$上自旋系统的唯一吉布斯测度进行完美采样。该算法是作者此前提出的“惰性深度优先”方法的一种改编，但将强空间混合的要求放宽为弱空间混合。它利用了统计物理学中的一项经典结果，该结果将 $\mathbb{Z}^2$ 上的弱空间混合与正方形上的强空间混合联系起来。当自旋系统呈现弱空间混合时，我们的采样器的运行时间与样本大小呈线性关系。值得注意的应用包括超临界温度下的铁磁性 Potts 模型，以及任意非零温度下具有一致非零外场的铁磁伊辛模型。

1 引言

本文介绍了“惰性深度优先采样”的一个新版本，详见 [AJ22]，它将该算法的适用范围扩展到了强空间混合区域之外。

自旋系统最初是在统计力学研究中发展起来的，如今也是概率论、机器学习和理论计算机科学中的一个活跃研究领域。不同的学术群体使用不同术语研究同一个基本概念，例如起源于人工智能的约束满足问题（CSP）。简言之，自旋系统由一个图 G、一个有限的（在本文中）自旋集合以及一个局部“规范”定义。系统的一个构型是将自旋分配给图的各个顶点。局部规范定义了系统构型上的概率分布。尽管规范是局部的，这个吉布斯分布仍可能呈现长程效应。该领域的一个主要算法目标是从吉布斯分布中采样构型。

近年来及过去几十年来，关于自旋系统采样的问题已催生出一系列研究成果。许多方法都基于马尔可夫链，尤其是

*由数学科学学院提供学生奖学金资助。

†由英国工程与自然科学研究委员会（EPSRC）资助，项目编号 EP/S016694/1，项目名称为“遗传类中的采样”。

采用 Glauber动力学 [Gla63]。另一个方向是通过计算或部分计算样本的比例来减少随机性的算法。这些成果来自关联衰减 [Wei06], 配分函数的泰勒展开 [PR17; BS17a], 以及高效计算马尔可夫链的历史 [FGW+22]。

本文所属的研究方向是完美采样。一个显而易见的动机是，完美采样器不会产生误差；另一个不那么显而易见的动机是，它具有明确的终止条件，而马尔可夫链模拟则必须运行“足够多”步。这需要预先给出马尔可夫链混合时间的上界，该上界必须通过解析推导得出，而且可能远大于实际所需的步数。相比之下，完美采样器能够根据具体问题实例的特点作出响应，并在有利的实例上更快地产生结果。

完美采样的首个示范来自 Propp 和 Wilson 的从过去的耦合（CFTP）方法 [PW98]。近年来还出现了其他高效完美采样方法，它们不再依赖马尔可夫链，例如 Guo、Jerrum 和 Liu 的部分拒绝采样 [GJL19] ，以及 Feng、Guo 和 Yin 的贝叶斯滤波器 [FGY22]。最初的惰性深度优先采样 [AJ22]以及本文提出的改进版本也属于类似的研究方向。

惰性深度优先采样的另一项优势是适用于无限自旋系统。自旋系统是在局部意义下定义的，但在某些条件下（本文假设这些条件成立），自旋系统的局部定义会扩展为唯一的吉布斯测度。当然，我们无法在无限图上采样一个构型，但惰性深度优先采样器本质上是一个边缘采样器，因此我们可以对其中的有限窗口进行采样。

Van den Berg 和 Steif [BS99] 开创了从无限吉布斯测度中进行完美采样的方法。他们利用 CFTP 证明，在唯一性区域内（即存在唯一吉布斯测度时），可以对 $\mathbb{Z}^2$ 上的铁磁伊辛模型进行完美采样。Spinka [Spi20], 通过一项广泛的研究进一步推进了这一方法。相比之下，惰性深度优先采样不再采用 CFTP，而是借鉴了部分拒绝采样及相关工作的思路。

1.1 惰性深度优先采样

惰性深度优先采样的优势显而易见：它是一个完美采样器，也是一个能够对无限自旋系统中的窗口进行采样的边缘采样器；此外，对于具有强空间混合且底层图满足次指数增长这一附加条件的任何自旋系统，它都能高效运行（线性时间） G。也可以根据整个图的大小，将其视为次线性边缘采样器。这是该算法一项尤为可取的优势，因为大多数方法的运行时间取决于图的大小，而不是窗口的大小。

惰性深度优先采样是一种简单的递归算法，它以单个顶点 $v \in G$ 为对象运行。简而言之，我们尝试猜测顶点 v 的自旋，而不查看 v 周围边界上的自旋；为此，我们尽可能多地计算 v 的分布。当无法猜出时，算法会递归地确定适当半径的球面上的自旋，然后返回为 v 指定自旋。算法运行时，会构建一个由递归调用组成的分枝过程；当强空间混合

成立。

惰性深度优先采样（以及许多其他算法）高效运行的相关条件是弱空间混合和强空间混合。非正式地说，弱空间混合要求：当附近的自旋不受约束时，如果改变远处的自旋，某个顶点集合的边缘分布变化很小。强空间混合则要求：即使固定了一些局部自旋，改变远处的自旋也只会使边缘分布发生很小的变化。（我们有时把固定自旋的排列称为“部分构型”。）

在首次介绍面向自旋系统的惰性深度优先采样时，我们的采样过程没有考虑底层图的精确结构，而是依靠强空间混合提供一个粗略界，以确保效率。在许多方法中[FGY22; Spi20; SSY13; SSvY17; DSVW04], ，要保证效率就需要这一条件；但有些方法的要求较低：只需弱空间混合 [CLV21; CLV20]。我们的改进超越了强空间混合的要求，只需弱空间混合。

这一改编的灵感来自 Martinelli、Olivieri 和 Schonnman 的经典物理学结果：对于 $\mathbb{Z}^2$上的自旋系统，弱空间混合蕴含在正方形 [MOS94] 上的强空间混合。在标准的强空间混合中，部分构型可以自由排列；而在正方形上的强空间混合中，部分构型被限制在围绕顶点的一个正方形内，我们正是要界定这些顶点的边缘分布变化。我们使用类似的论证来证明这一改编的效率。

这一改编运行于 $\mathbb{Z}^2$ ，并确保自身处于一个网格（ $\mathbb{Z}^2$ 的子晶格）上，从而使我们的所有部分构型都“主要”位于当前正在采样的顶点周围的一个正方形内。这样一来，我们避开了病态的部分构型，并仅凭弱空间混合就保证了算法的效率。该算法同样适用于 q自旋系统，而不仅仅是双自旋系统；值得一提的是，可以证明该算法在多种二维格子上都具有效率——为简便起见，我们只考虑 $\mathbb{Z}^2$ 。

值得指出的是，Lazy 采样框架并不局限于自旋系统。事实上，He、Wang 和 Yin，以及 He、Wu 和 Yang 最近发表的两篇论文，已将这些原理应用于约束满足问题的均匀解采样[HWY22a; HWY22b]。他们的结果展现了 Lazy 采样在自旋系统之外的应用潜力。

非正式地说（在附加一些温和条件的情况下），我们的结果如下：

定理1.1。设 $\mathcal{S}$ 是定义在 $\mathbb{Z}^2$ 上、具有弱空间混合性质的 q-自旋系统，并设 S 如上所述。那么， LAZY （算法 *1*）是 $\mathcal{S}$ 的完美采样器，其运行时间与采样的顶点数呈线性关系。

1.2 应用

我们重点介绍 $\mathbb{Z}^2$ 上自旋系统完美采样的两项新应用：超临界温度下的铁磁 Potts 模型，以及在所有温度下具有恒定外场的铁磁伊辛模型。这两项结果均基于这些模型的既有研究。

从铁磁性 Potts 模型中采样是一个活跃的研究领域。过去已有适用于超临界温度下的一般图的近似采样器，例如 Bordewich、Greenhill 和 Patel 关于最大度 Δ图上 Glauber动力学混合的研究 [BGP16], 专门针对 $\mathbb{Z}^2$ [GL20；GL18；BS17b；Ull13],的近似采样器

适用于超临界温度的近似采样器 [BR19；HPR20；HPR23], 以及近期提出的一种采样器，可在所有温度下对足够大的 q [BCH+20]铁磁性 Potts 模型进行采样。

我们提出了首个适用于 $\mathbb{Z}^2$ 上铁磁性 Potts 模型的完美采样器，在超临界温度下，该采样器对每个顶点的运行时间为常数。为确保算法 1 的成功与效率，我们依托 Beffara 和 Duminal-Copin 的著名成果[BDC12] ，并结合 Alexander 的工作 [Ale98]。

早期在带外场的铁磁伊辛模型采样方面的一项重要进展，是 Mossel 和 Sly 关于 Glauber动力学快速混合的研究：当温度由图最大度的某个函数所界定时，该结论成立 [MS13]。近期的研究则证明了随机分区图上的 Swendsen–Wang 动力学具有快速混合性质 [PJG+17] ，并提出了 CFTP 算法 [FGW22]以及近线性时间场动力学算法 [CZ23] ，用于在有界度图上进行采样，其中外场与 1 保持正距离。

我们提出了一种适用于 $\mathbb{Z}^2$ 上具有一致外场的铁磁伊辛模型的完美边缘采样器；当外场与 1 保持正距离时，该采样器对每个顶点的运行时间为常数。尽管该算法不适用于一般的有界度图，但它在无限图上是完美的，且运行时间与窗口大小严格呈线性关系。该算法的效率源于 Schonmann 和 Schlosman 所建立的弱空间混合条件 [SS95]。

2 自旋系统

我们定义有限图上的自旋系统；稍后我们将讨论其向无限图的扩展。

给定一个有限图 $G = (V, E)$，且 $q \in \mathbb{N}$ 我们考虑构型集合 $\Omega_V = [q]^V$，其中 $[q] = \{1, 2, \ldots, q\}$。在不会引起混淆时，我们将以 Ω 代替 Ω_V。自然地，当 $W \subset V$时，我们用 $\Omega_W = [q]^W$ 表示限制在 W上的部分构型。

对于 $\sigma \in \Omega$ 和 $W \subset V$，我们将 σ 限制到 W 上的结果记为 σ_W。为简便起见，当$W = \{v\}$ 时，我们将写作 σ_v ，而非 $\sigma_{\{v\}}$。在同样的情形下，我们将 v处的自旋记为 i，并写作 $\sigma_v = i$ ，而不是 $\sigma_v = \{(v, i)\}$。对于两个构型：定义在 Λ_1 上的 τ 和定义在Λ_2 上的 σ ，若它们在 $\Lambda_1 \cap \Lambda_2$ 上一致，我们用 $\tau \oplus \sigma$ 表示定义在 $\Lambda_1 \cup \Lambda_2$ 上的构型，该构型同时与 τ 和 σ一致。

自旋系统由一个“场” $b\colon [q] \to \mathbb{R}$ 以及一个相互作用权重的对称矩阵 $A\colon [q] \times [q] \to \mathbb{R}$定义。给定一个图 G （此处为有限图）， G的吉布斯分布为每个构型 σ 赋予权重

$$\prod_{v \in V} b(\sigma_v) \prod_{(u,v) \in E} A(\sigma_u, \sigma_v).$$

将配分函数 $Z(G)$定义为所有可能权重的总和

$$Z(G) := \sum_{\sigma \in \Omega} \prod_{v \in V} b(\sigma_v) \prod_{(u,v) \in E} A(\sigma_u, \sigma_v).$$

接着，我们将吉布斯测度定义为测度 $\mu : \Omega \to [0,1]$，其中

$$\mu(\sigma) = \frac{\prod_{v\in V} b(\sigma_v) \prod_{(u,v)\in E} A(\sigma_u, \sigma_v)}{Z(G)}. \tag{2.1}$$

在本文中，我们经常需要考察这样一种边缘分布：固定其余顶点上的构型后，在一组顶点上诱导出的边缘分布。对于任意 W，定义 μ 在 W 上的边缘分布为

$$\mu_W(\sigma) = \sum_{\sigma' \in \Omega : \sigma'_W = \sigma} \mu(\sigma'),$$

对所有 $\sigma \in \Omega_W$均成立。此外，对于任意 $\Lambda \subset V$ 以及 $\tau \in \Omega_\Lambda$，定义边界条件为 (Λ, τ) 时的边缘分布为

$$\mu_W^{(\Lambda,\tau)}(\sigma) := \frac{1}{\mu_\Lambda(\tau)} \sum_{\substack{\sigma' \in \Omega : \\ \sigma'_\Lambda = \tau, \sigma'_W = \sigma}} \mu(\sigma'), \tag{2.2}$$

假设 $\mu_\Lambda(\tau) \neq 0$。当集合 Λ 的含义由上下文明确时，我们将 $\mu_W^{(\Lambda,\tau)}$ 简写为 μ_W^τ。

根据吉布斯测度的这一规定，我们得到一个由少数几个参数确定的固定概率空间。我们称之为自旋系统 $\mathcal{S} = (G, q, b, A)$。本文只研究底层图 G 为二维网格 $\mathbb{Z}^2$的自旋系统，即顶点集和边集分别为

$$\begin{aligned} V_{\mathbb{Z}^2} &= \mathbb{Z}^2, \\ E_{\mathbb{Z}^2} &= \{(u,v) \in V_{\mathbb{Z}^2} : d(u,v) = 1\}, \end{aligned}$$

其中 $d(\cdot, \cdot)$ 表示欧几里得距离。并非一定要限定在特定的二维网格上：只需对采样模式和分析稍作修改，该算法便可用于许多平面晶格；但为使讨论清晰，我们将范围限定在最常见的平面晶格上。不过，我们将看到，限定在二维至关重要。

幸运的是，在描述和分析所提出的算法时，我们只会遇到 $\mathbb{Z}^2$ 的有限子图。对于这些子图，构型上的吉布斯分布由 (2.1) 定义。和往常一样，μ 的吉布斯性质 对我们很重要，这也是我们能够将注意力集中在有限子图上的原因。设 $W \subset V$，且构型 $\tau \in \Omega^{V\setminus W}$ 是可行的，即 $\mu_{V\setminus W}(\tau) > 0$。定义 W 的边界 为

$$\partial W = \{v \in V \setminus W : \{u, v\} \in E \text{ for some } u \in W\},$$

并令 $\tau' \in \Omega_{\partial W}$ 为 τ 在 ∂W 上的限制。于是

$$\mu_W^{(V\setminus W,\tau)} = \mu_W^{(\partial W,\tau')}; \tag{2.3}$$

换句话说，以 W 的补集为条件，等价于以其边界为条件。

由于我们声称我们的算法从无限图（即二维网格）上的吉布斯测度中进行采样，因此需要简要说明这意味着什么。Friedli 和 Velenik 在 [FV18] 中对“无限体积”测度进行了完整论述：请参阅第 3 节，尤其是第 3.3 小节。其基本内容如下。

如果我们去掉 V 为有限的假设，只要 W 为有限，恒等式 (2.3) 仍然可以让我们计算边缘分布 $\mu_W^{(V\setminus W,\tau)}$。这些量

$$\left\{\mu_W^{(V\setminus W,\tau)} : W \subset V,\, W \text{ finite, and } \tau \in \Omega_{V\setminus W}\right\}$$

给出了无限体积测度 [FV18, Def. 6.11] 的一个规范。（各种边缘分布必须满足一致性条件，但在这里这是自动满足的。）我们所关注的无限体积测度，是与规范 [FV18, Defn 6.12] 一致的测度。这样的测度可能不存在，也可能有一个或多个。在我们的算法中，我们只使用有限子图上的边缘概率，而这些概率由 (2.3) 给出。因此，我们的算法以概率 1 终止的证明，可以解释为无限体积测度唯一性的证明；而算法的输出，则可以解释为对无限体积测度（在有限子集 $U \subset V$ 上的边缘分布）的构造。

最后，如果存在 $\alpha > 0$ 和 $i \in [q]$，使得对于所有 $j \in [q], A_{ij} > \alpha$，我们称 A 为软相互作用矩阵。在本文中，我们将范围限制在具有软相互作用矩阵的自旋系统上。这样做的限制性不必要，但处理起来直接，并且足以满足我们的应用需求。

2.1 弱空间混合

注意，在下文中，d_G 表示图距离。

为了提高算法的效率，我们要求满足弱空间混合。直观地说，这意味着给定集合 $U \subset \mathbb{Z}^2$ 和 $W \subset \mathbb{Z}^2$ 后，只要 W 远离 U，对 σ_W 进行条件化就几乎不会影响 σ_U 的分布。为了与先前的工作顺畅衔接，我们基本采用 Martinelli、Olivieri 和 Schonmann [MOS94, (1.11)] 的相同定义。

定义 2.1。设 $\mathcal{S}$ 为一个自旋系统，$f\colon \mathbb{N} \to \mathbb{R}^+$ 为一个函数。给定 $W \subset V$、$U \subset V \setminus W$ 和 τ^1、$\tau^2 \in \Omega_W$，如果对于所有满足 $V \setminus W$ 且 W 为有限集的情形、所有 $U \subset V \setminus W$，以及所有满足 $\tau^1 \neq \tau^2$ 的可行 τ^1、$\tau^2 \in \Omega_W$，

$$d_{\mathrm{TV}}\left(\mu_U^{\tau^1}, \mu_U^{\tau^2}\right) \leq \sum_{u\in U, w\in W} f(d_G(u,w)),$$

那么我们称 $\mathcal{S}$ 以速率 f 呈现集合弱空间混合。

从现在起，由于我们始终在 $\mathbb{Z}^2$ 上讨论，因此省略图距离 d_G 中的下标 G。

弱空间混合有许多变体，关键在于我们采用足够强的定义。为了获得随机簇模型在 $\mathbb{Z}^d$ 上混合时间为 $O(n\log n)$ 的结果，Gheissari 和 Sinclair 要求 U，W 为盒子 [GS22]。相比之下，我们需要我们的

集合可以具有任意形式。在 Spinka 的完美采样论文中 [Spi20], , 而非我们的求和，该界为

$$d_{\mathrm{TV}}\left(\mu_U^{\tau^1}, \mu_U^{\tau^2}\right) \leq |U| f(d(U, W)),$$

然而，在我们的情形中，这个条件还不足以确保效率。

从这　一点开始，弱空间混合具有指数速率，即 $f(x) = Ce^{-\gamma x}$。

3 Martinelli、Olivieri 和 Schonmann

在他们 1994 年的论文中， [MOS94], 得到了一个关于 $\mathbb{Z}^2$ 的特定结果，该结果表明，对于二维自旋系统，弱空间混合蕴含正方形上的强空间混合。具体结果如下。设 $S \subset \mathbb{Z}^2$ 是边长为 L的正方形，也就是说，对于某个顶点 v_c,

$$S = \left\{v \in \mathbb{Z}^2 : v = v_c + (a, b), 0 \leq a, b \leq L\right\}.$$

定理 3.1 ([MOS94，定理 1。1])。 设 $\mathcal{S}$ 是定义在 $\mathbb{Z}^2$ 上的自旋系统，且具有弱空间混合性质。那么存在常数 C、$\gamma > 0$ ，使得对于所有 τ_1、$\tau_2 \in \Omega_{\partial S}$ 以及所有$\Delta \subset S$

$$d_{\mathrm{TV}}\left(\mu_\Delta^{\tau_1}, \mu_\Delta^{\tau_2}\right) \leq Ce^{-\gamma \ell},$$

其中 $\ell =$最小值 $\{d(v, \Delta) : v \in \partial S, \tau_1(v) \neq \tau_2(v)\}$.

这里， $d(v, \Delta) =$最小值$\{d(v, u) : u \in \Delta\}$。Martinelli 等人还指出，这一结果并非仅适用于 $\mathbb{Z}^2$ ——它可以推广到其他正则二维图——然而，也存在反例表明，对二维的限制至关重要 [MO94]。

对于我们的算法，无需使用定理 3.1；我们只需调整同一篇论文中的中间结果命题 2.1 [MOS94]。我们无法直接应用该命题，因为我们的算法将构造一些不局限于顶点周围正方形的部分构型。

考虑一个边长为 $2L$ 的正方形 $S \subset \mathbb{Z}^2$ （因此由 4 个边长为 L 的正方形组成）。准确地说，对于某个 $v_c \in \mathbb{Z}^2$,

$$\begin{aligned}
S &= \left\{v \in \mathbb{Z}^2 : v = v_c + (a, b), 0 < a, b < 2L\right\}, \\
S_0 &= \left\{v \in \mathbb{Z}^2 : v = v_c + (a, b), 0 < a, b < L\right\}, \\
S_1 &= \left\{v \in \mathbb{Z}^2 : v = v_c + (L + a, b), 0 < a, b < L\right\}, \\
S_2 &= \left\{v \in \mathbb{Z}^2 : v = v_c + (a, L + b), 0 < a, b < L\right\}, \\
S_3 &= \left\{v \in \mathbb{Z}^2 : v = v_c + (L + a, L + b), 0 < a, b < L\right\}.
\end{aligned}$$

记号 ∂S 表示 S的通常边界，我们还将考虑 S的“二分”边界，

$$\boxplus S = \partial S_0 \cup \partial S_1 \cup \partial S_2 \cup \partial S_3.$$

在分析我们的算法时，我们会遇到一些边界条件，它们固定了整个 ∂S 以及 $\boxplus S \setminus \partial S$的一个子集上的自旋。这样的边界条件由一个部分构型 (T, τ) 指定，其中 $\partial S \subseteq T \subseteq \boxplus S$ 且 $\tau \in \Omega_T$。

命题 3.2。设 $\mathcal{S}$ 是 $\mathbb{Z}^2$ 上的一个 q-自旋系统，且满足弱空间混合，其常数为 C、$\gamma > 0$。那么存在 $L_0 \in \mathbb{N}$ 和 $\gamma_0 > 0$，使得以下结论成立：对于所有边长为 $2L > 2L_0$ 的正方形 $S \subset \mathbb{Z}^2$、所有 $y \in \partial S$、所有满足 $\partial S \subseteq T \subseteq \boxplus S$ 的 T，以及所有可行部分构型 τ、$\tau' \in \Omega_T$（它们除顶点 y 外均相同），

$$d_{\mathrm{TV}}\left(\mu_Q^{\tau}, \mu_Q^{\tau'}\right) \leq e^{-\gamma_0 L^{1/4}},$$

其中

$$Q := \left\{x \in S : \|x - y\| \geq L^{\frac{1}{2}}\right\}.$$

在证明结果之前，我们先简要介绍一个简单的一维类比证明。回忆一下，对于定义在同一状态空间上的两个测度 λ 和 μ，以及随机变量 $X \sim \lambda$ 和$Y \sim \mu$，如果我们能找到这些随机变量的一个耦合 $(X,\ Y)$，使得 $\mathbb{P}[X \neq Y] \leq \varepsilon$，那么

$$d_{\mathrm{TV}}(\mu, \lambda) \leq \varepsilon.$$

由此可知，要界定两个测度之间的全变差距离，我们只需找到一个在适当程度上相一致的耦合。为方便熟悉 [MOS94], 的读者，我们采用其中的一些记号。请注意，量 L、$L^{\frac{1}{2}}$和 $L^{\frac{1}{4}}$本身并无特别意义；重要的是第一个增长得比第二个快，而第二个又增长得比第三个快。

考虑定义在 $S = \{-L, ..., L\} \subset \mathbb{Z}$上的一个 2-自旋系统 $\mathcal{S}$，其中 $L^{\frac{1}{4}}$为整数，并且以常数 C，γ满足弱空间混合。假设我们想确定原点处一个固定自旋对集合

$$Q := \left\{x \in S : |x| \geq L^{\frac{1}{2}}\right\}.$$

我们可以通过在 S 上构建两个构型，并尝试在每一步将它们耦合起来来实现这一点；也就是说，我们试图确保这两个构型在距离 0 足够远的地方相等。我们将这两个构型分别记为 σ^+ 和 σ^-，其边界条件分别为 $\sigma^+_{-L} = \sigma^-_{-L} = +$、$\sigma^+_L = \sigma^-_L = +$ 以及 $\sigma^+_0 = +$ 和 $\sigma^-_0 = -$。我们从原点开始，逐个自旋地对 σ^+ 和 σ^- 进行采样，努力使它们保持一致，同时确保 σ^+和 σ^- 都具有正确的吉布斯分布。如果我们曾经成功地将这两个构型耦合起来，那么马尔可夫性质就能确保我们始终维持这种耦合。因此，我们只需分析尚未完成耦合的情形。

我们将尝试耦合所有 $L^{\frac{1}{4}}$ 自旋。设 $\bar{D}_i = \{-iL^{\frac{1}{4}}, iL^{\frac{1}{4}}\}$。假设$\sigma^+_{D_{i-1}} \neq \sigma^-_{D_{i-1}}$，即我们在前一步中尚未完成耦合。由于 $\mathcal{S}$ 具有弱空间混合性质，我们可以将 $\sigma^+_{D_i}$ 与 $\sigma^-_{D_i}$ 耦合，使得

$$\mathbb{P}\left[\sigma^+_{D_i} \neq \sigma^-_{D_i}\right] < Ce^{-\gamma L^{1/4}},$$

通过反复执行这一过程，可以得出在第 $n = L^{\frac{1}{4}}$ 步时，尚未耦合的概率有如下界：

$$\mathbb{P}\left[\sigma^+_{D_n} \neq \sigma^-_{D_n}\right] < C^n e^{-\gamma n L^{1/4}} = C^{L^{1/4}} e^{-\gamma L^{1/2}}.$$

通过选择足够大的 L，我们可以确保以至少 $1\ 2$ 的概率已经发生耦合；此时，我们可以使 σ^+ 和 τ^- 在 Q 上一致。下面针对二维情形的证明较为复杂，但思路相似。

命题 *3.2* 的证明。 再次假设 $L^{\frac{1}{4}}$ 是整数。借鉴预热阶段的一维论证，我们将围绕 y 构造一个框架序列 $D_i \subset S$，其中每个框架都比前一个框架距离 y 更远。接着，我们将分别从 τ 和 τ' 开始构造构型 σ, σ'，并尝试在每个框架上耦合这两个构型。耦合成功的概率将给出 $d_{\mathrm{TV}}\left(\mu_Q^{\tau}, \mu_Q^{\tau'}\right)$ 的上界。

令 h 为一个充分大的数，稍后再确定。对 $i = 0, ..., L^{\frac{1}{4}}$，定义 $^-$：

$$
\begin{aligned}
Q_i &= \left\{x \in S : \|x - y\|_\infty > iL^{\frac{1}{4}}\right\}, \\
D_i &= \left\{x \in S : \|x - y\|_\infty = iL^{\frac{1}{4}}\right\}, \\
A_i &= \left\{x \in D_i : \min_{z \in \boxplus S} \|x - z\|_\infty \le h\right\}, \\
B_i &= D_i \setminus A_i.
\end{aligned}
$$

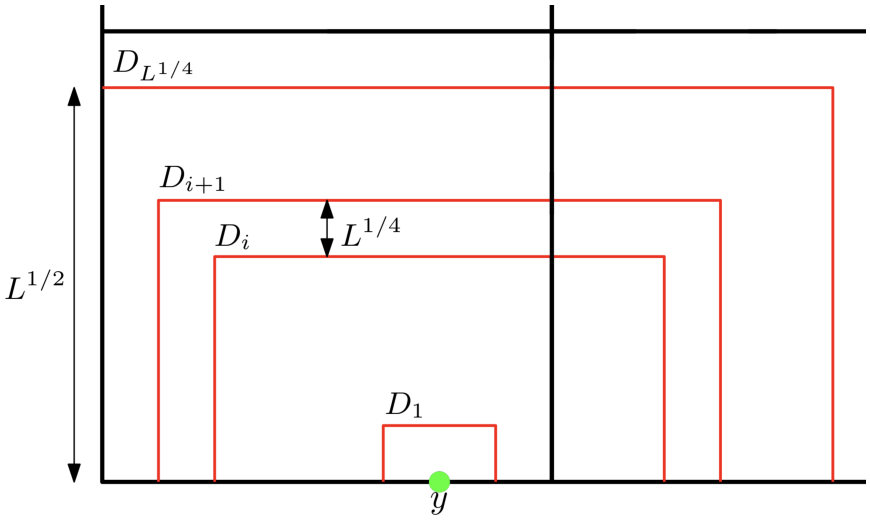


图 1：黑色部分为 $\boxplus S$、τ 和 τ' 的区域。绿色部分为顶点 y，在该顶点处 τ 和 τ' 不同。红色部分为各个 D_i，即我们将迭代尝试耦合 σ 和 σ' 的 $L^{\frac{1}{4}}$ 个框架。免责声明：此图仅供示意，并非按比例绘制。

D_i将作为我们的框架。它们被分为 A_i，即靠近边界的部分，以及 B_i，即远离边界的部分。 B_i是距离 $\boxplus S$ 足够远、因而适用弱空间混合的良好顶点。（参数 h 将被选取为使这一点成立。） A_i是不理想的顶点，对于它们我们没有什么巧妙的办法，但它们的数量足够少，因此可以相当粗略地处理。我们将尝试分别耦合这两组顶点。请注意，同样地，一旦我们匹配了第 i层框架上的构型，就总能将耦合扩展到整个 Q_i，这是由于

马尔可夫性质，以及两种构型中 Q_i 具有相同的边界。因此，我们只讨论在之前每一步都失败的情况。

考虑集合 A_i 和 B_i。对于特定的 h，我们可以将 L_0 取得足够大，使得$_1L_0^4 > 2h$。这样，除了至多一个 i_0 之外， A_i 都将由（至多）四个大小为 h 的“足部”组成，而这些足部是 D_i 中唯一靠近 $\boxplus S$ 的部分。我们将跳过对 i_0 的合并尝试，但仍能以任意接近 1 的概率成功。

现在，我们尝试先处理 B_i，再处理 A_i，以此进行耦合。对于 B_i，我们需要以下技术引理。该引理说明，固定的部分构型对 B_i 的影响有界，且此界与 h 和 L 无关，只要 h 和 L 取得足够大。

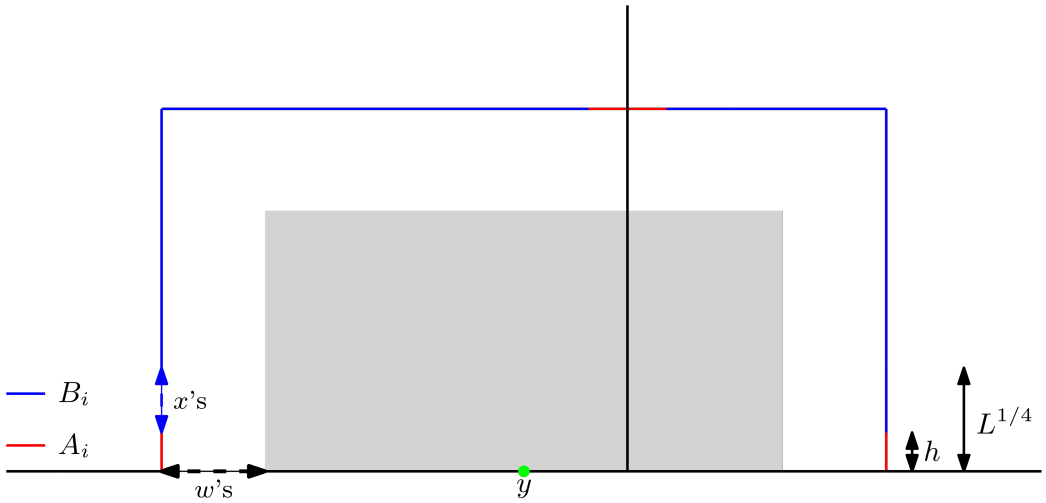


图2：黑色部分表示 $\boxplus S$ 中的顶点。灰色部分表示 Q_{i-1}^c，即到达第 i 帧时已经固定的顶点。红色部分表示 A_i，即 D_i 中因离边界太近而无法利用弱空间混合的顶点。蓝色部分表示 B_i，即 D_i 中远离 $\boxplus S$ 的顶点。箭头标出了构成 E 的 $x's$ 和 w。x 是 B_i 中与 $\boxplus S$ 的距离在 $L^{\frac{1}{4}}$ 以内的顶点； w 是 $\boxplus S$ 中与 D_i 的距离在 $L^{\frac{1}{4}}$ 以内的顶点。

引理3.3. 在命题 *3.2*的条件下，存在 h、L_0，使得对于所有$L > L_0$以及所有 $i = 1$、...、$L^{\frac{1}{4}}$，满足 $i \neq i_0$:

$$C \sum_{\substack{x\in B_i,\\ w\in(\boxplus S\cup D_{i-1})}} e^{-\gamma d(x,w)} \leq \frac{1}{2}.$$

这样我们就能得到 $\mu_{B_i}^{\tau\oplus\sigma_{D_{i-1}}}$ 和 $\mu_{B_i}^{\tau'\oplus\sigma'_{D_{i-1}}}$ 的一个耦合，它们一致的概率大于 $1\ 2$。

证明。 我们将求和拆成两部分。令

$$P = \left\{(x,w) \in B_i \times (\boxplus S \cup D_{i-1}) : d(x,w) \le L^{\frac{1}{4}}\right\}$$

and

$$P^c = B_i \times (\boxplus S \cup D_{i-1}) \setminus P.$$

Then

$$\sum_{\substack{x\in B_i,\\ w\in(\boxplus S\cup D_{i-1})}} e^{-\gamma d(x,w)} = \sum_{(x,w)\in P} e^{-\gamma d(x,w)} + \sum_{(x,w)\in P^c} e^{-\gamma d(x,w)}.$$

注意到 D_i 与 ∂S 相交两次，与 $\boxplus S \setminus \partial S$ 至多相交一次。因此， P 可划分为至多三个子集，每个子集都局限于某个交点。设 z 是 D_i 与 $\boxplus S$的交点之一。我们还可以根据x 和 w 位于 z的左侧/右侧或上方/下方，对 P 中的配对 $(x,\ w)$ 进一步划分。如此一来， P 可划分为至多八个（不完整的）L形片 $\{P_1,\dots,P_8\}$，每个都局限于某个交点。设 P_m 是局限于 z的一个这样的L形区域。（参见图2。）于是我们有

$$\sum_{(x,w)\in P_m} e^{-\gamma d(x,w)} = \sum_{(x,w)\in P_m} e^{-\gamma(d(x,z)+d(w,z))} \le \sum_{j=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{\infty} e^{-\gamma(j+k+h)} = \frac{e^{-\gamma h}}{(1-e^{-\gamma})^2}.$$

这里，求和遍历 $j = d（x,\ z）- h$ 以及 $k = d（w,\ z）$。因此

$$C\sum_{(x,w)\in P} e^{-\gamma d(x,w)} = C\sum_{m=1}^{8}\sum_{(x,w)\in P_m} e^{-\gamma d(x,w)} \le \frac{8Ce^{-\gamma h}}{(1-e^{-\gamma})^2}.$$

我们可以令 h 足够大，使上述量不超过 1 4。

对于 P^c，注意到求和中的每一项都具有 $d（x,\ w）\ge L^{\frac{1}{4}}$，且项数以 $13L^2$为界，因此

$$C\sum_{(x,w)\in P^c} e^{-\gamma d(x,w)} < 13CL^2 e^{-\gamma L^{1/4}}.$$

那么，取足够大的 L_0 ，我们可以将该项界定为1 4。

现在，根据我们对 h 的选择以及任意的 $L > L_0$ ，有

$$C\sum_{\substack{x\in B_i,\\ w\in(\boxplus S\cup D_{i-1})}} e^{-\gamma d(x,w)} < \frac{1}{4} + \frac{1}{4} = \frac{1}{2}.$$

至此，引理3.3的证明完成。 □

现在我们来描述迭代耦合尝试。假设在步骤 i ，截至目前我们仍未能在 D_{i-1}之外将 σ 与 σ' 耦合。

对于 B_i 而言，我们对弱空间混合的定义至关重要，因为它告诉我们，对于每个 $i = 1, \ldots, L^{\frac{1}{4}}$，

$$d_{\mathrm{TV}}\left(\mu_{B_i}^{\tau\oplus\sigma_{D_{i-1}}}, \mu_{B_i}^{\tau'\oplus\sigma'_{D_{i-1}}}\right) < C \sum_{\substack{x\in B_i,\\ w\in(\partial S\cup B_{i-1})}} e^{-\gamma d(x,y)}.$$

然后取自引理3.3的 h 和 L_0，即可立即得出

$$d_{\mathrm{TV}}\left(\mu_{B_i}^{\tau}, \mu_{B_i}^{\tau'}\right) < \frac{1}{2}.$$

由此可知，我们可以在 B_i 上选择一种耦合，使得

$$\mathbb{P}\left[\sigma_{B_i} = \sigma'_{B_i}\right] \geq \frac{1}{2}.$$

对于 A_i，由于距离太近，无法使用弱空间混合，因此我们将采用一种较粗略的方法，独立采样 σ_{A_i} 和 σ'_{A_i}。由于我们将讨论限制在软相互作用矩阵上，每次尝试耦合时，对于某个常数 $\alpha > 0$，都有

$$\mathbb{P}\left[\sigma_{A_i} = \sigma'_{A_i}\right] \geq \alpha^{|A_i|} = \alpha^{4h}.$$

现在，将这两部分结合起来可得，在每次尚未成功的迭代中，我们以概率进行耦合

$$\mathbb{P}\left[\sigma_{D_i} = \sigma'_{D_i}\right] \geq \frac{1}{2}\alpha^{4h}.$$

由此可得

$$d_{\mathrm{TV}}\left(\mu_Q^{\tau}, \mu_Q^{\tau'}\right) \leq \mathbb{P}\left[\sigma_{D_{L^{1/4}}} = \sigma'_{D_{L^{1/4}}}\right] < \left(1 - \frac{1}{2}\alpha^{4h}\right)^{L^{1/4}} < e^{-\frac{1}{2}\alpha^{4h}L^{1/4}}.$$

这就完成了引理3.3的证明。 □

我们再次强调，要求软相互作用矩阵是不必要的限制。对于所选的应用而言，这样做简单且合适；但只要自旋系统以某个常数概率耦合 σ_{A_i} 和 σ'_{A_i}，论证仍然成立。

对于该算法，我们不会遇到仅在一个顶点上不同的两个构型，不过幸运的是，这个问题很容易解决。首先定义

$$\Delta := \left\{x \in S : \forall y \in \partial S \text{ such that } \tau_y \neq \tau'_y, \|x - y\| \geq L^{\frac{1}{2}}\right\}.$$

推论 3.4。设 $\mathcal{S}$ 是整数格 $\mathbb{Z}^2$ 上的一个表现出弱空间混合的 q-自旋系统。那么存在 $L_0 \in \mathbb{N}$ 和一个正常数 γ_0，使得对于所有边长为 $2L > 2L_0$的正方形$S \subset \mathbb{Z}^2$ 、所有满足 $\partial S \subseteq T \subseteq \boxplus S$的集合 T，以及所有在 $\boxplus S \setminus \partial S$上相同的构型$\tau$、 $\tau' \in \Omega_T$，

$$d_{\mathrm{TV}}\left(\mu_\Delta^{\tau}, \mu_\Delta^{\tau'}\right) \leq 8Le^{-\gamma_0 L^{1/4}}.$$

证明。我们只需通过每次翻转一个边界顶点上的自旋，将 τ 变为 τ'。共有 $8L$ 个边界顶点，因此应用三角不等式和命题 3.2 即得结果。

□

4 算法

这个版本的惰性深度优先采样与我们在 [AJ22],中介绍的版本非常相似，不过这里我们在选择要采样的顶点时更加谨慎。

在介绍算法之前，我们先定义一个网格 $\Gamma \subset \mathbb{Z}^2$，其中 Γ中的每个网格方格的边长为 L。准确地说， $\Gamma = (V_\Gamma,\ E_\Gamma)$ 定义为

$$V_\Gamma = \left\{v = (i,j) \in \mathbb{Z}^2 : i = 0 \pmod L\right\} \cup \left\{v = (i,j) \in \mathbb{Z}^2 : j = 0 \pmod L\right\},$$
$$E_\Gamma = \left\{(u,v) : u, v \in V_\Gamma, d(u,v) = 1\right\}.$$

为确保命题 3.2 中的全变差距离界适用， LAZY 只会对 Γ中的顶点进行采样。此外，对于每个 $v = (i,\ j) \in V_\Gamma^2$，定义 $\Gamma_v \subset \Gamma$ 为包含 v 且边长为 $2L$ 的正方形，并且满足 $d(\Gamma_v,\ v) \geq L/2.$。具体而言，令 $v_c = (k,\ \ell) \in \Gamma$ 为满足 $k,\ \ell = 0$ (模 L) 的顶点，并且

$$k + \frac{L}{2} \leq i < k + \frac{3L}{2},$$
$$\ell + \frac{L}{2} \leq j < \ell + \frac{3L}{2}.$$

并定义

$$\Gamma_v = \partial\left\{u \in \mathbb{Z}^2 : u = v_c + (a,b), 0 < a, b < 2L\right\}.$$

当我们在以顶点 v为参数调用的算法中进行递归时，总是会对 Γ_v中的顶点进行递归。

该算法以 $\mathbb{Z}^2$ 上的一个 q-自旋系统为输入，并给定定义在某些顶点子集 $\Lambda \subset \Gamma$上的部分构型 σ 。通俗地说，部分构型 $(\Lambda,\ \sigma)$ 表示已确定的自旋。随后，算法会在某个尚未赋值的顶点 $v \in \Gamma$ 上调用。我们计算以下概率:

$$p_v^i := \min_{\tau \in \Omega_{\Gamma_v \setminus \Lambda}} \mu_v^{(\Lambda,\sigma)\oplus(\Gamma_v\setminus\Lambda,\tau)}(i) \quad \forall i \in \{1,...,q\},$$
$$p_v^0 := 1 - \sum_{i \in [q]} p_v^i.$$

利用这些值，我们将单位区间划分为 $q+1$ 个长度为 $\left(p_v^i\right.$ 的子区间： $0 \leq i \leq q\left.\right)$，并抽取一个样本 $y \sim U[0,1]$。如果 y 位于对应于 p_v^i 的子区间内，且满足 $i \neq 0$，那么我们就将自旋设为 i ；否则，我们依次对 $\Gamma_v \setminus \Lambda$ 中的顶点递归调用该算法，每次都以该集合中先前顶点的赋值为条件。若需要递归，我们使用子程序 BD-CALC 来计算 v 处的自旋。（见算法 1。）

请注意，这与 [AJ22] 中的常规 LAZY （在那里称为 SSMS）不同，区别在于我们选择的递归方式：此处，为了利用全变差界，我们必须将样本限制在网格 Γ 上；而对于具有强空间混合性质的自旋系统，我们只需考察以 v 为中心、半径为 L 的球即可。

还要注意，自旋系统由一个图、自旋数量、一个权重向量和一个相互作用矩阵决定。我们的算法专门针对图 $\mathbb{Z}^2$ 上有 q 个自旋的情形，因此我们在算法陈述中列出这些内容，以示强调。

算法 1 LAZY$(\mathcal{S}=(\mathbb{Z}^2,\ q,\ b,\ A),\ (\Lambda,\ \sigma)\ v,\ \Gamma)$

输入： 该算法接受一个自旋系统 $\mathcal{S}$、一个网格 $\Gamma \subset \mathbb{Z}^2$、一个已知顶点集合 $\Lambda \subset \Gamma$ 及其构型 $\sigma \in \Omega_\Lambda$，以及一个待采样的顶点 $v \in \Gamma \setminus \Lambda$。

输出： 该算法返回传入的部分构型，并在 v 处附加一个自旋，使其满足：$(\Lambda,\ \sigma) \oplus (v,\ i)$，其中 $i \in \{1,...,q\}$。

定义 $\Gamma\ \ v$ 如上所述。

对于 $i \in \{1,...,q\}$，**执行**

  $p_v^i \leftarrow \min_{\tau \in \Omega_{\Gamma_v \setminus \Lambda}} \mu_v^{\sigma \oplus \tau}(i)$

  $I_i \leftarrow \left[\sum_{j=1}^{i-1} p_v^j, \sum_{j=1}^{i} p_v^j\right)$

结束循环

$p_v^0 \leftarrow 1 - \sum_{i \in [q]} p_v^i$

$I_0 \leftarrow \left[1 - p_v^0, 1\right]$

样本 $y \sim U[0,1]$，一个均匀 $[0,1]$ 随机变量的实现值。

对于 $i = \{1,...,q\}$，**执行**

  如果 $y \in I_i$，**则**

    返回 $((\Lambda,\sigma)\ \oplus (v,i))$

  结束如果

结束循环

返回 BD-CALC $\left(\mathcal{S},\ (\Lambda,\sigma)\ v,\ (p_v^1,\ldots,p_v^q)\ y\right)$

算法 2 BD-CALC $(\mathcal{S},\ (\Lambda,\sigma)\ v,\ (p_v^1,\ldots,p_v^q)\ y)$

给出 $\Gamma_v \setminus \Lambda$ 一个排序 $\Gamma_v \setminus \Lambda = \{w_1,...,w_m\}$。

$(\Lambda',\ \sigma') \leftarrow (\Lambda,\ \sigma)$

对 $j \in [1,...,m]$ **执行**

  $(\Lambda', \sigma') \leftarrow$LAZY$(\mathcal{S}, (\Lambda', \sigma')\, w_j, \Gamma)$

结束循环

对 $i \in \{1,...,q\}$ **执行**

  $\varrho_v^i \leftarrow \mu_v^{\sigma'}(i) - p_v^i$

  $I_i \leftarrow \left[\sum_{j=1}^{q} p_v^j + \sum_{k=1}^{i-1} \varrho_v^k, \sum_{j=1}^{q} p_v^j + \sum_{k=1}^{i} \varrho_v^k\right)$

  如果 $y \in I_i$ **则**

    返回 $((\Lambda,\sigma)\ \oplus (v,i))$

  结束条件判断

结束循环

值得注意的是，该算法还提供了一种对网格 Γ 外部的顶点进行采样的方法。对于 $v = (i,\ j) \in \mathbb{Z}^2 \setminus \Gamma$，令 $v_c = (k,\ \ell) \in \Gamma$ 为满足 $k,\ \ell = 0 \pmod{L}$ 的顶点，并且

$$k < i < k + L,$$
$$\ell < j < \ell + L,$$

并定义

$$B = \partial \left\{ u \in \mathbb{Z}^2 : u = v_c + (a, b), 0 < a, b < L \right\}.$$

该算法允许我们对 B 中每个顶点的自旋进行采样，之后便可以使用任意一种带边界的自旋系统采样算法，对 v 处的自旋进行采样。

LAZY 正确性的验证与 [AJ22] 中的论述相似，其运行时间分析也是如此。运行时间分析的差异更大，因此我们先讨论这一点。

5 运行时间

我们的运行时间分析以调用 LAZY 的次数为依据。对于恰当选取的 L，进而也恰当选取的 Γ，在 Γ 上处理顶点的每次调用所需时间为 $O(1)$。

我们的观点是，该算法的行为类似于一个分枝过程，其中算法的每次递归调用都是发起该调用的顶点的子节点。这使我们能够对广泛一类自旋系统中 LAZY 在 $\mathbb{Z}^2$ 上的运行时间给出上界。

现在注意，尽管随着算法的执行，正方形 Γ_v 的内部 S 可能并非空集，但其中只能占据 Γ_v 的竖直和水平平分线。换句话说，只有 Γ 中顶点的自旋被固定了。根据我们对 Martinelli、Olivieri 和 Schonmann 结果（推论 3.4）的改编，我们知道，v 处自旋的分布仅受到 Γ_v上的边界条件的微弱影响

定理 5.1。设 $\mathcal{S} = \left(\mathbb{Z}^2, q, b, A\right)$ 为一个具有软相互作用矩阵 A且呈现弱空间混合的自旋系统。取推论 *3.4* 中的 γ_0 和 L_0，并令 $L > L_0$满足

$$64L^2 e^{-\gamma_0 L^{1/4}} < 1.$$

设 Γ 为一个 L-网格。那么对于所有满足以下条件的 $v \in \Gamma$、$\Lambda \subset \Gamma$ 和 $\sigma \in \Omega_\Lambda$

$$\mu_\Lambda(\sigma) > 0,$$

预期 LAZY（$\mathcal{S}$、（Λ、σ） v、Γ）调用 LAZY （总计）的次数为 O（1）。

注意，我们总可以选择足够大的 L，使其满足 $L > L_0$ 和 $64L^2 e^{-\gamma_0 L^{1/4}} < 1$。

证明。 我们根据递归调用构造一棵随机树 T_A。根节点为初始调用。递归地，若在树的某个节点 w 处我们落入未决区域 I_0，则对于由 BD-SPLIT发起的每次递归调用，我们都为该节点添加一个子节点。若未落入未决区域，则 w 没有子节点。

设 T_B 为后代分布为 ξ 的分枝过程，其中

$$\mathbb{P}[\xi = 0] = 1 - 8Le^{-\gamma_0 L^{1/4}}, \quad \mathbb{P}[\xi = 8L] = 8Le^{-\gamma_0 L^{1/4}}.$$

那么，我们可以对 T_B 和 T_A 进行耦合，使得 T_B 在随机序意义下支配 T_A。事实上，推论 3.4 告诉我们，在每个节点 $w \in T_A$，落入未决区域的概率至多为 $8Le^{-\gamma_0 L^{1/4}}$。此外，当 w 确实有子节点时，其子节点数至多为 $|\Gamma_v| = 8L$。

现在，我们可以利用分枝过程理论来完成这个界的推导。我们知道

$$\mathbb{E}[\xi] \leq 64L^2 e^{-\gamma_0 L^{1/4}} < 1,$$

因此，根据分枝过程基本定理可得

$$\mathbb{E}[|T_A|] \leq \mathbb{E}[|T_B|] \leq \frac{1}{1 - 64L^2 e^{-\gamma_0 L^{1/4}}} = O(1).$$

□

本节主要结果的定性特征概括如下推论所示。

推论 5.2. 设 $\mathcal{S} = (\mathbb{Z}^2, q, b, A)$ 是一个自旋系统，其软相互作用矩阵为 A，并且具有弱空间混合性质。设 $\Gamma \subset \mathbb{Z}^2$ 是一个 L-网格，其中 L 选得足够大，以满足定理 *5.1*；任取 $v \in V$、$\Lambda \subset \Gamma$ 和 $\sigma \in \Omega_\Lambda$。则 $\textsc{lazy}(\mathcal{S}, (\Lambda, \sigma)\ v, \Gamma)$ 的运行时间 R 满足 $\mathbb{E}[R] = O(1)$。

6 正确性

正确性的证明与 [AJ22], 中的证明几乎完全相同，因此我们仅提供直观解释。

定理 6.1。 设 $\mathcal{S} = (\mathbb{Z}^2, q, b, A)$ 是一个具有软相互作用矩阵 A且满足弱空间混合的自旋系统，并设 Γ 为选定的网格。假设对于所有 $v \in \Gamma$、所有有限的 $\Lambda \subset \Gamma$，以及所有满足下列条件的 $\sigma \in \Omega_\Lambda$

$$\mu_\Lambda(\sigma) > 0,$$

$\textsc{lazy}(\mathcal{S}, (\Lambda, \sigma)\ v, \Gamma)$ 以概率 *1* 终止。于是

$$\mathbb{P}\left[\textsc{lazy}(\mathcal{S}, (\Lambda, \sigma), v, \Gamma) = i\right] = \mu_v^\sigma(i).$$

我们可以用归纳法证明该算法正确，只是这种证明缺少传统的基本情形。问题在于，递归调用树中存在长度无界的路径。在较早的论文 [AJ22], 中，作者通过分析该算法的人工版本来绕过这个问题：在该版本中，递归深度被限制在上界 h。假设算法以概率 1 终止，那么令 $h \to \infty$ 取极限即可推出实际算法的正确性。算法正确性的关键在于，每次递归调用

都从 Γ_v 中某个顶点的正确条件分布中抽取一个自旋，其中已考虑此前确定的自旋。因此，根据条件概率链式法则，我们便得到整个 Γ_v上的自旋的正确分布。

假设我们知道递归调用给出了正确的概率，也就是说，

$$\mathbb{P}\left[\textsc{lazy}\left(\mathcal{S},(\Lambda,\sigma)\oplus\bigoplus_{k=1}^{j-1}(w_k,\tau_{w_k}),w_j,\Gamma\right)=\tau_{w_j}\right]=\mu_{w_j}^{(\Lambda,\sigma)\oplus\bigoplus_{k=1}^{j-1}(w_k,\tau_{w_k})}(\tau_{w_j}).$$

那么，给定算法处理顶点的顺序 $\Gamma_v\setminus\Lambda=\{w_1,...,w_m\}$，我们有

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}\left[\textsc{lazy}(\mathcal{S},(\Lambda,\sigma),v,\Gamma)=i\right]\\
&=p_v^i+\sum_{\tau\in\Omega_{\Gamma_v\setminus\Lambda}}\left(\mu_v^{\sigma\oplus\tau}(i)-p_v^i\right)\prod_{j=1}^{m}\mathbb{P}\left[\textsc{lazy}\left(\mathcal{S},(\Lambda,\sigma)\oplus\bigoplus_{k=1}^{j-1}(w_k,\tau_{w_k}),w_j,\Gamma\right)=\tau_{w_j}\right]\\
&=p_v^i+\sum_{\tau\in\Omega_{\Gamma_v\setminus\Lambda}}\left(\mu_v^{\sigma\oplus\tau}(i)-p_v^i\right)\prod_{j=1}^{m}\mu_{w_j}^{(\Lambda,\sigma)\oplus\bigoplus_{k=1}^{j-1}(w_k,\tau_{w_k})}(\tau_{w_j}).
\end{aligned}$$

现在注意到

$$p_v^i=\sum_{\tau\in\Omega_{\Gamma_v\setminus\Lambda}}p_v^i\cdot\prod_{j=1}^{m}\mu_{w_j}^{(\Lambda,\sigma)\oplus\bigoplus_{k=1}^{j-1}(w_k,\tau_{w_k})}(\tau_{w_j}),$$

由此可得

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}\left[\textsc{lazy}(\mathcal{S},(\Lambda,\sigma),v,\Gamma)=i\right]\\
&=p_v^i+\sum_{\tau\in\Omega_{\Gamma_v\setminus\Lambda}}\left(\mu_v^{\sigma\oplus\tau}(i)-p_v^i\right)\prod_{j=1}^{m}\mu_{w_j}^{(\Lambda,\sigma)\oplus\bigoplus_{k=1}^{j-1}(w_k,\tau_{w_k})}(\tau_{w_j})\\
&=\sum_{\tau\in\Omega_{\Gamma_v\setminus\Lambda}}\mu_v^{\sigma\oplus\tau}(i)\prod_{j=1}^{m}\mu_{w_j}^{(\Lambda,\sigma)\oplus\bigoplus_{k=1}^{j-1}(w_k,\tau_{w_k})}(\tau_{w_j})\\
&=\mu_v^{\sigma}(i).
\end{aligned}$$

这就证明了正确性。

7 应用

7.1 铁磁性 Potts 模型

该算法的一个有趣应用是，我们可以对 $\mathbb{Z}^2$ 上的铁磁性 Potts 模型进行采样，直至其弱空间混合阈值。Potts 模型可由以下相互作用来刻画：

$$b=\begin{pmatrix}1\\ \vdots\\ 1\end{pmatrix},\quad A=\begin{pmatrix}e^\beta & 1 & \cdots & 1\\ 1 & e^\beta & \cdots & 1\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 1 & 1 & \cdots & e^\beta\end{pmatrix},$$

其中自旋数为 $q \geq 2$。要满足铁磁性， A 必须是正定的，即$e^{\beta} \geq 1$。

在他们具有开创性的论文 [BDC12]，中，Beffara 和 Duminil-Copin 证明，对于所有满足 $q \geq 2$ 的情形，铁磁性 Potts 模型的临界逆温度为

$$\beta_c = \log\left(1 + \sqrt{q}\right),$$

并且当 $\beta < \beta_c$ 时，关联呈指数衰减。

对我们的目的而言，我们需要的不仅是关联衰减，还需要弱空间混合（特别是集合形式的弱空间混合）。幸运的是，Alexander 证明，对于所有 $\beta < \beta_c$，按照本文的定义，当且仅当关联以 [的方式衰减时，Potts 模型在 $q \geq 2$ 下才具有弱空间混合 Ale98, Thm 3.6]。因此，这两项结果确保推论 5.2 的条件成立，且算法 1 的运行时间为线性。

我们很容易想到通过 Edwards-Sokal 耦合[ES88] 、对偶图和流来研究低温区域，正如 Huijben 、 Patel 和 Regts [HPR23] 所做的那样。遗憾的是，这种对应关系在我们的算法运行方式下会失效。要确定对偶图中的自旋，我们必须经过随机簇模型，而为此必须识别连通簇。如果我们只考虑特定大小的方框，那么在我们的视野之外可能存在连接，因此看起来不连通的部分实际上可能是连通的。

7.2 带外场的铁磁伊辛模型

第二个新的应用是任意温度下带恒定外场的铁磁伊辛模型。正自旋上的恒定外场 h 伊辛模型可表征为

$$b = \begin{pmatrix} 1 \\ h \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} e^{\beta} & 1 \\ 1 & e^{\beta} \end{pmatrix}.$$

Schonmann 和 Schlosman 证明，在所有温度下，带恒定外场的铁磁伊辛模型都满足弱空间混合 [SS95，定理 2]。由此可知，推论 5.2 的条件成立，且算法 1 在该模型上的运行时间为线性。

参考文献

[AJ22] K. Anand 和 M. Jerrum，《通过强空间混合对无限自旋系统进行完美采样》，*SIAM J. Comput.*，第 51 卷，第 4 期，第 1280–1295 页，2022 年， ISSN：0097-5397。 DOI：10.1137/21M1437433。 [在线]。获取地址：https: // doi-org.ezproxy.library.qmul.ac.uk/10.1137/21M1437433。

[阿莱98] K. S. Alexander，《格点模型中的弱混合》《概率论及相关领域》，第 110 卷，第 4 期，441–471 页，1998 年， ISSN：0178-8051。 DOI：10. 1007 / s004400050155。 [在线]。可访问：https : / / doi . org / 10 . 1007 / s004400050155。

[BCH+20] C. Borgs、J. Chayes、T. Helmuth、W. Perkins 和 P. Tetali，《所有温度下 Potts 模型的高效采样与计数算法》，载于 STOC '20——第 52 届 ACM SIGACT计算理论年度研讨会论文集，ACM，纽约，[2020] ©2020，第 738–751 页。DOI：10.1145/3357713.3384271。[在线]。可访问：https://doi- org.ezproxy.library.qmul.ac.uk/10.1145/3357713.3384271.[BDC12] V. Beffara 和 H. Duminil-Copin，《二维随机簇模型的自对偶点是 $q \geq 1$的临界点》，《概率论及相关领域》，第 153 卷，第 3–4 期，511–542 页，2012 年，ISSN：0178-8051。DOI：10.1007/s00440- 011-0353-8。[在线]。可访问：https://doi.org/10.1007/s00440-011-0353-8.[BGP16] M. Bordewich、C. Greenhill 和 V. Patel，《铁磁性 Potts 模型的 Glauber 动力学混合》，《随机结构与算法》，第 48 卷，第 1 期，21–52 页，2016 年，ISSN：1042-9832。DOI：10.1002/rsa.20569。[在线]。可访问：https://doi-org.ezproxy.library.qmul.ac.uk/10.1002/rsa. 20569.[BR19] A. Barvinok 和 G. Regts，《稀疏方程组解的加权计数》，Combin. Probab. Comput.，第 28 卷，第 5 期，696–719 页，2019 年，ISSN：0963-5483。DOI：10. 1017 /s0963548319000105。[在线]。可访问：https : / / doi - org . ezproxy . library . qmul . ac . uk / 10 . 1017 / s0963548319000105.[BS17a] A. Barvinok 和 P. Sober´on，《图同态配分函数的计算》，《组合学》，第 37 卷，第 4 期，633–650 页，2017 年，ISSN：0209- 9683。DOI：10.1007/s00493-016-3357-2。[BS17b] A. Blanca 和 A. Sinclair，《 $\mathbb{Z}^2$中的随机簇动力学》，《概率论及相关领域》，第 168 卷，第 3–4 期，821–847 页，2017 年，ISSN：0178-8051。DOI：10 . 1007 / s00440 - 016 - 0725 - 1。[在线]。可访问：https : / / doi - org . ezproxy.library.qmul.ac.uk/10.1007/s00440-016-0725-1.[BS99] J. van den Berg 和 J. E. Steif，《一类随机场的有限编码存在与不存在问题》，Ann. Probab.，第 27 卷，第 3 期，1501–1522 页，1999 年，ISSN：0091-1798。DOI：10.1214/aop/1022677456。[CLV20] Z. Chen、K. Liu 和 E. Vigoda，《通过压缩实现唯一性范围内的 Glauber 动力学快速混合》，载于 2020 年 IEEE 第 61 届计算机科学基础年度研讨会论文集，IEEE Computer Soc.，洛斯阿拉米托斯，加利福尼亚州，[2020]©2020，第 1307–1318 页。DOI：10 . 1109 / FOCS46700 . 2020 . 00124。[在线]。可访问：https://doi.org/10.1109/FOCS46700.2020.00124.[CLV21] ——，《Glauber 动力学的最优混合：通过高维扩张实现熵分解》，载于 STOC '21——第 53 届 ACM SIGACT计算理论年度研讨会论文集，ACM，纽约，[2021]©2021，第 1537–1550 页。

[CZ23] X. Chen 和 X. Zhang，“带外场伊辛模型的近线性时间采样器”，载于《2023年ACM-SIAM 离散算法年会论文集》（SODA），SIAM，费城，宾夕法尼亚州，2023年，第 4478–4503 页。DOI: 10.1137/1.9781611977554.ch170。 [在线]。可访问：https://doi- org.ezproxy.library.qmul.ac.uk/10.1137/1.9781611977554.ch170。[DSVW04] M. Dyer、A. Sinclair、E. Vigoda 和 D. Weitz，“晶格自旋系统中的时空混合：组合视角”，《随机结构与算法》，第 24 卷，第 4 期，第 461–479 页，2004年， ISSN: 1042-9832。 DOI: 10.1002/rsa.20004。[在线]。可访问：https://doi-org.ezproxy.library.qmul.ac.uk/10. 1002/rsa.20004。[ES88] R. G. Edwards 和 A. D. Sokal，“Fortuin-Kasteleyn-Swendsen-Wang 表示和蒙特卡洛算法的推广”，《Phys. Rev. D》（3），第 38 卷，第 6 期，第 2009–2012 页，1988年， ISSN: 0556-2821。 DOI: 10 . 1103 / PhysRevD.38.2009。 [在线]。可访问：https://doi-org.ezproxy.library. qmul.ac.uk/10.1103/PhysRevD.38.2009。[FGW+22] W. Feng、H. Guo、C. Wang、J. Wang 和 Y. Yin，“趋向去随机化马尔可夫链蒙特卡洛”，arXiv，第 abs/2211.03487 卷，2022年。[FGW22] W. Feng、H. Guo 和 J. Wang，“带外场铁磁伊辛模型的采样”，arXiv，第 abs/2205.01985 卷，2022年。[FGY22] W. Feng、H. Guo 和 Y. Yin，“从空间混合中进行完美采样”，《随机结构与算法》，第 61 卷，第 4 期，第 678–709 页，2022年， ISSN: 1042-9832。 DOI: 10.1002/rsa.21079。 [在线]。可访问：https://doi.org/10.1002/rsa. 21079。[FV18] S. Friedli 和 Y. Velenik，《晶格系统的统计力学》。剑桥大学出版社，剑桥，2018年，第 xix+622 页，《一部具体的数学导论》，ISBN: 978-1-107-18482-4。[GJL19] H. Guo、M. Jerrum 和 J. Liu，“通过 Lov´asz 局部引理进行均匀采样”，《J. ACM》，第 66 卷，第 3 期，文章 18，共 31 页，2019年， ISSN: 0004-5411。 DOI: 10. 1145/3310131。[GL18] R. Gheissari 和 E. Lubetzky，“临界二维 Potts 模型的混合时间”，《Comm. Pure Appl. Math.》，第 71 卷，第 5 期，第 994–1046 页，2018年， ISSN: 0010-3640。 DOI: 10 .1002 /cpa . 21718。 [在线]。可访问：https :/ /doi - org.ezproxy.library.qmul.ac.uk/10.1002/cpa.21718。[GL20] ——，“临界二维随机簇模型的准多项式混合”，《随机结构与算法》，第 56 卷，第 2 期，第 517–556 页，2020年，ISSN: 1042-9832。 DOI: 10.1002/rsa.20868。 [在线]。可访问：https://doi- org.ezproxy.library.qmul.ac.uk/10.1002/rsa.20868。[Gla63] R. J. Glauber，“伊辛模型的时变统计”，《J. Mathematical Phys.》，第 4 卷，第 294–307 页，1963年，ISSN: 0022-2488。 DOI: 10.1063/1.1703954。[GS22] R. Gheissari 和 A. Sinclair，《晶格上的空间混合与随机簇动力学》，2022年。 DOI: 10 . 48550 / ARXIV . 2207 . 11195。 [在线]。可访问：https://arxiv.org/abs/2207.11195。

[HPR20] T. Helmuth、W. Perkins 和 G. Regts，“算法式皮罗戈夫–西奈理论”，《概率论及相关领域》，第 176 卷，第 3-4 期，第 851–895 页，2020年， ISSN: 0178- 8051。 DOI: 10.1007/s00440-019-00928-y。 [在线]。可访问：https://doi-org.ezproxy.library.qmul.ac.uk/10.1007/s00440-019-00928-y。[HPR23] J. Huijben、V. Patel 和 G. Regts，“通过流上的马尔可夫链从低温 Potts 模型中采样”，《随机结构与算法》，第 62 卷，第 1 期，第 219–239 页，2023年， ISSN: 1042-9832。 DOI: 10.1002/rsa.21089。[在线]。可访问：https://doi.org/10.1002/rsa.21089。[HWY22a] K. He、C. Wang 和 Y. Yin，《近线性时间内对一般约束满足解进行 Lov ´asz 局部引理采样》，2022年。arXiv: 2204.01520[cs.DS]。[HWY22b] K. He、K. Wu 和 K. Yang，《随机 CNF 公式解采样的改进界》，2022年。arXiv: 2207。11892 [cs.DS]。[MO94] F. Martinelli 和 E. Olivieri，“单相区域中 Glauber 动力学趋于平衡的方法。I. 吸引情形”，《Comm. Math. Phys.》，第 161 卷，第 3 期，第 447–486 页，1994年， ISSN: 0010-3616。 [在线]。可访问：http: / / projecteuclid . org . ezproxy . library . qmul . ac . uk / euclid . cmp / 1104270006。[MOS94] F. Martinelli、E. Olivieri 和 R. H. Schonmann，“对于二维晶格自旋系统，弱混合蕴含强混合”，《Comm. Math. Phys.》，第 165 卷，第 1 期，第 33–47 页，1994年， ISSN: 0010-3616。[MS13] E. Mossel 和 A. Sly，“一般图上伊辛–吉布斯采样器的精确阈值”，《Ann. Probab.》，第 41 卷，第 1 期，第 294–328 页，2013年， ISSN: 0091-1798。DOI: 10.1214/11-AOP737。 [在线]。可访问：https://doi-org.ezproxy. library.qmul.ac.uk/10.1214/11-AOP737。[PJG+17] S. Park、Y. Jang、A. Galanis、J. Shin、D. Stefankovic 和 E. Vigoda，“随机分割吸引模型的快速混合 Swendsen-Wang 采样器”，载于《国际人工智能与统计学会议》，2017年。[PR17] V. Patel 和 G. Regts，“配分函数和图多项式的确定性多项式时间近似算法”，《SIAM J. Comput.》，第 46 卷，第 6 期，第 1893–1919 页，2017年， ISSN: 0097-5397。 DOI: 10.1137/16M1101003。[PW98] J. G. Propp 和 D. B. Wilson，“如何从一般马尔可夫链中获得完全随机样本并生成有向图的随机生成树”，载于第 2 卷，第 27 卷，2023年 ACM-SIAM 离散算法年会（亚特兰大，佐治亚州，1996年），1998年，第 170–217 页。 DOI: 10.1006/jagm.1997. 0917。[Spi20] Y. Spinka，“空间混合马尔可夫随机场的有限编码”，《Ann. Probab.》，第 48 卷，第 3 期，第 1557–1591 页，2020年， ISSN: 0091-1798。 DOI: 10.1214/19- AOP1405。[SS95] R. H. Schonmann 和 S. B. Shlosman，“二维伊辛模型完备的完全解析性”，《Comm. Math. Phys.》，第 170 卷，第 2 期，第 453–482 页，1995年， ISSN: 0010-3616。

[SSvY17] A. Sinclair、P. Srivastava、D. ˇStefankoviˇc 和 Y. Yin，“空间混合与连通常数：最优界”，《概率论及相关领域》，第 168 卷，第 1–2 期，第 153–197 页，2017年，ISSN: 0178-8051。 DOI: 10.1007/s00440- 016-0708-2。[SSY13] A. Sinclair、P. Srivastava 和 Y. Yin，“连通常数有界的图的空间混合与近似算法（扩展摘要）”，载于*2013*年*IEEE*第*54*届计算机科学基础年会—*FOCS 2013*，IEEE计算机学会，洛斯阿拉米托斯，加利福尼亚州，2013年，第 300–309 页。 DOI: 10.1109/FOCS.2013.40。[Ull13] M. Ullrich，“Swendsen-Wang 动力学与热浴动力学的比较”，《随机结构与算法》，第 42 卷，第 4 期，第 520–535 页，2013年， ISSN: 1042-9832。DOI: 10.1002/rsa.20431。 [在线]。网址：https://doi-org.ezproxy. library.qmul.ac.uk/10.1002/rsa.20431。[Wei06] D. Weitz，“计数至树阈值的独立集”，载于*STOC’06*：*ACM*第*38*届计算理论年会论文集，ACM，纽约，2006年，第 140–149 页。 DOI: 10.1145/1132516.1132538。