arXiv:2603.02101v1 [math.CO] 2 Mar 2026

二部正则扩展图上的反铁磁伊辛模型采样

Anna Geisler、Mihyun Kang、Michail Sarantis、Ronen Wdowinski

Abstract. 反铁磁伊辛模型对图的顶点子集进行采样，其权重随诱导边的数量呈指数衰减。我们研究在具有良好顶点扩张的二部正则图类上对此模型进行采样的问题。我们证明，在很大范围的参数下，一种自然的采样器，即Glauber动力学，其混合速度呈指数级缓慢。另一方面，我们利用聚合物模型和簇展开方法，给出一种高效的伊辛模型采样算法，并为其配分函数提供全多项式时间近似方案。

1. Introduction

1.1. **动机与背景。** 伊辛模型 *伊辛模型* 是一种二自旋模型，于 1920年 作为铁磁性的数学模型提出，此后在统计物理和数学领域都受到广泛关注。参见 [9]和 [14, 第 3]章，了解相关介绍。给定一个底层图结构，为每个顶点分配一个来自 $\{-1, 1\}$ 的自旋。自旋构型的权重由两端点具有相同自旋的边数决定。本文研究一个相关模型，它等价于正则图上的伊辛模型，全文均称之为伊辛模型。我们在第 A 节证明这些模型的等价性。参见 [39, 第 2 节。1] 了解二自旋系统等价性的更一般结果。

给定一个图 $G = (V, E)$，*自旋构型* 是一个映射 $\sigma\colon V \to \{0, 1\}$。等价地，它也可以看作顶点的一个子集 $S := \{v \in V\colon \sigma(v) = 1\}$。给定两个参数——*逸度* $\lambda > 0$ 和*逆温度* $\beta \in \mathbb{R}$——我们将子集 $S \subseteq V$ 的权重定义为

$$\tilde{\omega}(S) := \lambda^{|S|} e^{-\beta |E(S)|},$$

其中 $E(S)$ 是 G 中由 S 诱导的边集。*伊辛模型* 以与其权重 $\tilde{\omega}(S)$ 成正比的概率抽取子集 $S \subseteq V$。也就是说，

$$\mathbb{P}(\mathbf{S} = S) = \frac{\tilde{\omega}(S)}{Z_G(\lambda, \beta)}, \tag{1}$$

其中 $Z_G(\lambda, \beta)$ 是伊辛模型的*配分函数*，定义为

$$Z_G(\lambda, \beta) := \sum_{S \subseteq V} \lambda^{|S|} e^{-\beta |E(S)|}.$$

我们用$\mu_{\lambda, \beta}$ 表示导出的概率测度，即所谓的*吉布斯测度*。若 $\beta < 0$，则称该模型为*铁磁* 模型；若 $\beta > 0$，则称其为*反铁磁* 模型。在铁磁情形下，集合 S的权重随其诱导的边数增加而增大；而在反铁磁情形下，权重则随之减小。本文关注反铁磁（简称 AF）情形，即参数范围 $\beta \in (0, \infty)$。

我们考虑经典伊辛模型这一变体的一个原因，是它在组合意义上可视为*硬核模型*的*正温度*类比。回顾一下，若子集 $I \subseteq V$所诱导的边集为空，则称其为*独立的*。逸度为 $\lambda > 0$ 的硬核模型以概率

$$\mathbb{P}(\mathbf{I} = I) = \frac{\lambda^{|I|}}{Z_G(\lambda)},$$

where $Z_G(\lambda)$ 是配分函数，也称为独立多项式，其定义为

$$Z_G(\lambda) \coloneqq \sum_{I \in \mathcal{I}(G)} \lambda^{|I|}.$$

因此，非正式地说，硬核模型就是零温极限下的伊辛模型 $\beta = \infty$。原则上，我们无法仅通过设定 $\beta = \infty$ 就立即将一个模型的结果推广到另一个模型，但实际上，只需稍微修改证明即可轻松做到。

事实上，反铁磁伊辛模型与硬核模型之间存在更深层的联系，并不仅仅是非正式意义上的正温度类比。在 [32], 中，Kronenberg 和 Spinka 指出，若对一个图进行随机稀疏化，则稀疏化图上的硬核模型配分函数的期望，恰好等于原图上的伊辛模型配分函数（经过适当参数化后）。更准确地说，给定 $p \in [0,1]$，令 G_p 为随机图（或渗流图），由 G 中的每条边独立地以概率 p保留而得到，并定义 $\beta > 0$ 使得 $p = 1 - e^{-\beta}$。文献 [32] 中指出

$$\mathbb{E}[Z_{G_p}(\lambda)] = Z_G(\lambda, \beta).$$

这种从渗流硬核模型迁移到反铁磁伊辛模型的能力，对于 [32] 关于渗流超立方体中独立集计数的结果Q^d至关重要。这项工作随后由本文作者在 [20]中进一步拓展。相关的独立集计数研究可参见 [1, 8, 11, 27] 。

本文旨在研究如何从反铁磁伊辛模型中进行高效采样，我们的结果分为两部分。首先，我们证明，在一大类具有良好扩张性质的正则图上，众所周知的采样器 *Glauber*动力学 不适合作为反铁磁伊辛模型的采样方案。其次，我们证明，对于同一类图，存在另一种算法，可为有界度图上的伊辛模型提供多项式时间采样方案，并为其配分函数提供全多项式时间近似方案。这推广了 [19]和 [28] 关于硬核模型的结果，同时给出了迄今为止这些结果适用参数范围的最佳界限。最后，我们提出一种针对具有特定对称性的图对Glauber动力学的改进，并将这种新马尔可夫链是否快速混合作为一个开放问题。

1.1.1. 近似算法。 如何高效计算伊辛模型的配分函数，或从相应分布中采样，一直备受关注。精确计算铁磁伊辛模型的配分函数是#P-难[29], ，而反铁磁情形甚至可能更难 [23]。反铁磁情形在计算上困难，原因在于它与最大割问题密切相关 [10, 13]。因此，研究近似算法是合理的。本文关注具有良好顶点扩张性质的正则二部图上的反铁磁伊辛模型近似算法。

从分布 π 中进行近似采样的主要方法之一是马尔可夫链蒙特卡罗方法（MCMC）。其基本思想是运行一个平稳分布为 π的马尔可夫链。在满足链的一些温和条件时，平稳分布是唯一的，并且时间 t 之后的输出分布会随着 $t \to \infty$趋近于 π 。这种方法是否实用，取决于混合时间，也就是在某种度量下（例如全变差距离），达到与 π足够接近所需的时间。

在这一方向上，采用局部更新的马尔可夫链已得到深入研究，并因其更新规则简单、实现时计算效率高而成为理想的候选方案。最著名且研究最广泛的局部链之一是 *Glauber*动力学 $M(G)$。对于反铁磁伊辛模型，我们从任意子集 $S_0 \subseteq V$开始。每一步中，我们均匀随机地选取一个顶点$v \in V$，并将集合更新为

$$S_{t+1} \coloneqq \begin{cases} S_t \cup \{v\} & \text{with probability } \dfrac{\lambda e^{-\beta|N(v)\cap S_t|}}{1+\lambda e^{-\beta|N(v)\cap S_t|}}, \\ S_t \setminus \{v\} & \text{with probability } \dfrac{1}{1+\lambda e^{-\beta|N(v)\cap S_t|}}. \end{cases}$$

请注意，更新概率由在 $v \in S_{t+1}$ 条件下、给定所有其他顶点状态时的概率确定。容易证明，该马尔可夫链是遍历的、非周期的且时间可逆的，并且其（唯一）平稳分布确实为 $\pi = \mu_{\lambda,\beta}$，即由 (1) 定义的吉布斯测度。在取得正面结果方面，Chen、Feng、Yin 和 Zhang [4] 运用谱独立性技术证明，当参数满足带有松弛量 $\delta \in (0, 1)$ 的唯一性条件（见 [4, 定义 3.1]）时，对于所有图（即使最大度无界），反铁磁二自旋系统上的 Glauber动力学均在时间 $C(\delta)n\log n$ 内混合。可以验证，对于我们的模型，这意味着当 $\lambda(1 - e^{-\beta}) \lesssim 1/d$时可快速混合；对于硬核模型，则当 $\lambda \lesssim 1/d$时可快速混合。值得注意的是，Chen and Jiang [6] 最近的工作通过一个依赖于 n的小参数，突破了硬核模型快速混合的这一界限。具体而言，对于具有 n 个顶点且最大度为 Δ （可能依赖于 n）的图，若$\gamma > 0$为常数且 $\lambda \leq \left(1 + \frac{\gamma}{\sqrt{n}}\right)\lambda_c(\Delta)$，其中 $\lambda_c(\Delta)$为唯一性阈值，则 Glauber动力学在时间 $O_\gamma\left(n^{2+2e+\frac{2e}{\Delta-2}}\log\Delta\right)$.内混合

与之密切相关的是近似计数问题，即近似计算配分函数。通过标准的自归约论证，前面提到的采样方案在相同的参数范围内可为配分函数提供一个完全多项式随机近似方案。首先要指出的是，对于反铁磁二自旋系统，在唯一性阈值以内，存在计算配分函数的确定性 算法，其运行时间为多项式时间，但对图的度呈指数依赖 [34]。另一方面，对于 d-正则图 [39]，在唯一性阈值以外，即使近似计算反铁磁二自旋系统的配分函数也是 NP 困难的。

不过，这并不排除在其他子类中存在高效算法的可能性。一个重要但至今仍未解决的相关复杂性类是 #BIS 困难问题：这类问题与近似计算二分图中独立集数量在多项式时间内等价。已有研究表明，在 [2] 中，超过唯一性阈值时，近似计算二部图上硬核模型的配分函数是一个 #BIS 困难问题。其他已被证明为 #BIS 困难的问题可见 [3, 15, 21]。

#BIS 问题一直无法获得完全多项式随机近似方案，这一事实促使 Goldberg and Jerrum [21] 猜想：#BIS 问题不存在完全多项式随机近似方案。迄今为止，积极结果仅在二部图的某些子类中得到证明。对于二分图扩展图，在唯一性阈值以上的某些范围内存在全多项式时间近似方案，但其对度的依赖呈指数级 [28]。在同一类图中，对于无界度图也存在完全多项式随机近似方案，但要求逸度 λ 随度 [5]呈多项式增长。此外，Jenssen, Keevash, and Perkins [25] 证明，一般而言，困难实例很少（如果它们存在的话）：如果 $\Delta \geq \Delta_0$ 对于某个常数 Δ_0成立，且 $\lambda \geq {}^{50}\log_{\Delta}{}^{2}\Delta$，那么存在一个全多项式时间近似方案，可以近似最大度为 Δ的几乎所有图的独立多项式，即使 Δ 无界。

即使对于著名的超立方体实例 Q^d，目前也尚不清楚是否存在多项式时间的近似均匀采样器，或用于计算独立集数量的完全多项式随机近似方案。应用现有关于 Q^d的结果，其中有 $n = 2^d$ 个顶点，当 $\lambda \geq d^{\Omega(d)} = n^{\Omega(\log\log n)}$ [5,时，存在一个近似采样器，且可以将配分函数近似到精度 e^{-n}；见定理 11],。而对于 $\lambda \geq {}^{C_0\log_{d^{1/2}}{}^{3/2}d}$，确定性算法的运行时间为 $n^{\mathrm{poly}(d)} = n^{\mathrm{polylog}(n)}$（[26, 28]以及本文）。因此，我们想知道，这究竟是当前方法的局限所致，还是该问题本身不存在完全多项式随机近似方案。在 [19], 中，Galvin 和 Tetali 通过识别一个自然的瓶颈，证明硬核模型的 Glauber动力学混合速度呈指数级缓慢。因此，近似采样器的一种潜在候选方案，是对其进行改造以克服这一瓶颈。我们将在第 5 节中对此作更详细的讨论。

1.2. **主要结果**。 尚未说明的定义请参见第2节。我们定义一类具有有界共度且满足弱全局顶点扩张性质的二部正则图。我们的慢混合结果将在这一类图上证明。

定义 1.1。 $\mathcal{H} = \mathcal{H}(n, d, \Delta_2, \kappa)$ 是由满足以下三个性质的 n 个顶点、 d 正则二部图G 构成的集合，其二分划分为 $(\mathcal{O}, \mathcal{E})$ ：

（1） G 的所有顶点对至多有 Δ_2 个公共邻居，（2） $|N（X）| \geq (1+\Omega$ $\left(\frac{1}{d^{\kappa}}\right))|X|$对所有 $X \subseteq \mathcal{O}$、$\mathcal{E}$成立，只要 $|X| \leq \frac{3}{8}n$，以及（3） $n = \Omega（d^6 \log d）$ 。

接下来，对于我们关于更高效采样算法的结果，我们将使用 $\mathcal{H}（n，\ d，\ \Delta_2，\ \kappa）$的如下子类，它对多项式规模集合的顶点扩张施加更强的控制。

定义 1.2. *[20, 定义 11.1]*类 $\mathcal{H}' = \mathcal{H}'（n，\ d，\ \Delta_2，\ \kappa）$是来自$\mathcal{H}（n，\ d，\ \Delta_2，\ \kappa）$中满足（1）、（2）、（3）（见定义*1.1*）以及如下附加条件的所有图的集合：

(4) $|N(X)| \geq \sqrt{d}|X|$ *for all* $X \subseteq \mathcal{O}, \mathcal{E}$ *whenever* $|X| \leq d^3 \log n$.

条件 **(4)** 是使用簇展开方法所必需的，使我们能够应用先前工作 [20] 中关于对来自类别 $\mathcal{H}'$ 的渗流图中的独立集进行计数的结果。

给定 $0 \leq \kappa < 2$，我们不妨设

$$C_* := \min\left\{\frac{1}{2}, 1 - \frac{\kappa}{2}\right\}.$$

我们的主要结果考虑满足以下条件的参数 λ， $\beta > 0$

$$\lambda \leq \lambda_0 \qquad \text{and} \qquad \lambda(1 - e^{-\beta}) \geq \frac{C_0 \log^{3/2} d}{d^{C_*}}, \tag{2}$$

其中 $\lambda_0 > 0$ 是一个固定常数，而 C_0 是一个仅依赖于 λ_0 的充分大常数。在我们的主要定理中，我们不期望将这些条件改进到超出 $\lambda(1 - e^{-\beta}) = \tilde{\Omega}(1/d)$ 的范围，因为人们认为，按照硬核模型抽取的独立集的典型结构会在此处发生相变；也就是说，当 $\beta = \infty$ 时会发生相变（见 [16, 26]）。为方便起见，本文中我们始终设

$$\alpha := \lambda(1 - e^{-\beta}).$$

我们的第一个主要结果表明，对于类别 $\mathcal{H}(n, d, \Delta_2, \kappa)$ 中的图，在满足上述关于 λ, β 的条件时，Glauber动力学的混合速度呈指数级缓慢。Glauber动力学 $M(G) = M_{\lambda,\beta}(G)$ 在 G 上的混合时间 $\tau_{\text{mix}}(M(G))$ 的下界将取决于满足条件 **(2)** 的 $\lambda, \beta > 0$ 的取值，以及图 G 的参数 n, d, κ。我们设

$$f(\lambda) := \frac{\lambda}{R \log^2(\max\{e, \lambda^{-1}\})}, \tag{3}$$

其中 R 是仅依赖于 λ_0 的一个足够大的常数。注意，当 λ 为常数时， $f(\lambda)$ 为常数，且 $f(\lambda) \geq \frac{2C_0}{Rd^{1/2}} \log^{1/2} d$，这是因为 $\lambda \geq \frac{C_0 \log^{3/2} d}{d^{1/2}}$。

定理 1.3. 固定 $\Delta_2 \geq 1$、 $0 \leq \kappa < 2$ 和 $\lambda_0 > 0$。则存在常数 C_0、$C > 0$，使得当 $\lambda \leq \lambda_0$ 且 $\alpha := \lambda(1 - e^{-\beta}) \geq \frac{C_0 \log^{3/2} d}{d^{C_*}}$ 时，*Glauber*动力学 $M(G)$在图 $G \in \mathcal{H}(n, d, \Delta_2, \kappa)$ 上的混合时间满足

$$\tau_{\text{mix}}(M(G)) \geq \exp\left(\frac{C\alpha^2 f(\lambda)}{d^{\kappa} \log d} \cdot n\right).$$

定理 1.3 的证明在第 3 节中给出。取零温极限 $\beta = \infty$，在定理 1.3 中，我们得到硬核模型的一个慢混合结果，该结果最初在 [19]，中针对正则二分扩展图在 $\lambda = \Omega\left(\frac{\log^{3/2} d}{d^{1/4}}\right)$ 时得到证明。对于硬核模型，与我们类似的一个界最近也由 Jenssen、Malekshahian 和 Park [26]，证明，因此我们的结果提供了对反铁磁伊辛模型的推广。

尽管定理 1.3 表明 Glauber动力学是一种效率低下的采样算法，但我们的第二个主要结果为在子类 $\mathcal{H}'(n, d, \Delta_2, \kappa)$ 上从伊辛模型进行采样提供了一种多项式时间近似方案。

定理 1.4。 固定 $\Delta_2 \geq 1$、 $0 \leq \kappa < 2$ 和 $\lambda_0 > 0$。那么存在常数 C_0、 $d_0 > 0$ ，使得只要 $d \geq d_0$、 $\lambda \leq \lambda_0$ 和 $\alpha := \lambda(1 - e^{-\beta}) \geq {}^{C_0 \log_{d^{C_*}}^{3/2} d}$ ，就存在一种多项式时间近似方案，可从伊辛模型$\mu_{\lambda,\beta}$中进行采样；并且存在一种全多项式时间近似方案，可用于计算其在 $\mathcal{H}'(n, d, \Delta_2, \kappa)$ 上的配分函数。

该算法的运行时间为 $\binom{n}{\epsilon}^{O(d^6 \log d)}$，其中 $\epsilon > 0$ 是采样器与吉布斯测度之间全变差距离的容差 $\mu_{\lambda,\beta}$。作为构造采样器的一部分，我们计算 $Z_G(\lambda, \beta)$ 的确定性近似，其运行时间相同。算法及定理 1.4 的证明见第 4 节。我们基于 Jenssen、Perkins 和 Potukuchi 的工作 [28], ，他们针对正则二分扩展图上的硬核模型，在 $\lambda = \Omega\left(\frac{\log d}{d^{1/4}}\right)$ 时，为常数 d 给出了全多项式时间近似方案；随后，Jenssen、Malekshahian 和 Park [26] 将其改进为 $\lambda = \Omega\left(\frac{\log^2 d}{d^{1/2}}\right)$。值得注意的是，他们在这一 ~~$\lambda$~~ 范围内的结果仅针对常数扩展情形进行表述，也就是 $\kappa = 0$。与他们的工作一样，我们的采样方案依赖于 Jenssen 和 Perkins [27] 对二分扩展图的簇展开方法所作的开发；该方法能够以严格且高效的方式描述从硬核模型或伊辛模型中抽取的集合的典型结构。利用聚合物模型和簇展开理论，我们将近似配分函数的任务归约为计算有界大小的簇及其权重，这些计算可以高效完成。

虽然我们的工作采用了与上述参考文献中关于硬核模型的类似研究相近的方法 [19, 26, 28], ，但我们证明中的某些部分需要额外的技术考量，而这些问题在硬核模型中并不存在，因为我们需要考虑的不仅仅是独立集。我们借助此前论文 [20], 中的结果和技巧来处理这些复杂问题，该论文采用了与 [32, 37]类似的技巧。

注 1.5. 定义*1.1*和定义*1.2*中的两类图涵盖了多种常见的图，例如：

(a) 超立方体 Q^d，其中 $\kappa = 1/2$ （见 *[17]*）；(b) 奇数 d时超立方体的中间层 Q^d，其中 $\kappa = 1$ （见 *[1]*）；(c) 偶数 $m = O$时（不断扩大的）偶数维环面 $\mathbb{Z}_m^t(t^c)$ 以及任意 $0 < c < 3/2$，其中 $\kappa = c + \frac{1}{2}$ （见*[11, 20]*）；(d) 有界规模正则二部图的笛卡尔积，其中 $\kappa = 1/2$ （见 *[11]*）。

(a) – (c) 中的图在 $\Delta_2 = 2$ 时具有最大共度 $d \geq 2$。对于 (d) 中的图，最大共度是 2 与任意基图的最大共度中的较大者。由于基图的规模有界，因此该值也有常数上界。值得注意的是，定理*1.3* 的慢混合结果对这些图同样成立。但如前所述，由于对度 d的依赖呈指数增长，定理*1.4*仅给出准多项式时间采样方案。在第*5*节中，我们提出了一种不同的马尔可夫链，它有望在这类对称图上实现快速混合。

1.3. **论文结构**。 介绍基本定义和记号后，第2 节将介绍基本计算概念，并简要介绍聚合物模型和簇展开。第3节专门证明我们的首个主要结果——定理1.3，并在此之前进行导论性讨论。证明依赖于引理3.1、引理3.2和引理3.3 中的结果；这些引理的证明将在后续小节中给出。特别是，第3.3节包含论证中的关键部分，即由容器引理（引理3.4）给出的部分。

我们的第二个主要结果，即定理1.4，将在第4节证明。在建立相应的聚合物模型后，两个主要环节分别是高效计算有界大小的簇及其权重（引理4.2），以及为聚合物构型设计高效的采样算法（引理4.3）。这两个引理的证明分别推迟到第4.2 节和第4.3节。最后，我们将在第5节简要讨论这些结果及未来研究的可能方向。

2. Preliminaries

2.1. 定义与基本事实。 在本文中，每当我们考虑满足性质 $\mathcal{C}$ 的 n 个顶点的 d-正则图时，实际上考虑的是一个序列 $(d_\ell, n_\ell)_{\ell\in\mathbb{N}}$，其元素为成对的 $(d_\ell, n_\ell) \in \mathbb{N}^2$，由此得到一个序列 $(G_\ell)_{\ell\in\mathbb{N}}$，其中包含 n_ℓ 个顶点的 d_ℓ-正则图；并且存在 $\ell_0 \in \mathbb{N}$，使得当 $\ell \geq \ell_0$ 时，所有图 G_ℓ 都满足性质 $\mathcal{C}$。所有渐近关系均相对于 $d \to \infty$ 而言，我们使用标准的朗道符号表示渐近关系（例如，$O(\cdot)$ $o(\cdot)$，$\Omega(\cdot)$ $\Theta(\cdot)$）。为便于表述，本文中凡有需要，均省略向下取整／向上取整符号，并假设 n 为偶数。除非另有说明，所有对数的底数均为自然底数。

设 $G = (V, E)$ 为一个图。给定集合 $A \subseteq V$，我们将 A 的（外部）邻域记作 $N_G(A) := \{v \in V \setminus A :$ 存在 $w \in A$ 使得 $vw \in E\}$，并将 $N_G(v)$ 记作 $N_G(\{v\})$。对于顶点 $v \in V$，我们将 $d_G(v)$ 记作 v 的度，即 $d_G(v) := |N_G(v)|$。给定两个不同的顶点 $u, v \in V$，我们定义它们的共度为 $\mathrm{codeg}(u, v) := |N_G(u) \cap N_G(v)|$。$G$ 的最大共度定义为 $\max\{\mathrm{codeg}(u, v) : u, v \in V, u \neq v\}$。对于两个不相交的子集 A, $B \subseteq V$，我们将一个端点在 A 中、另一个端点在 B 中的边集记作 $E_G(A, B)$，并将两个端点都在 A 中的边集记作 $E_G(A)$。只要图 G 的含义明确，我们便在此记法中省略下标 G。

我们主要研究二部图 G，通常用 $(\mathcal{O}, \mathcal{E})$ 表示其二分划分，其中 $\mathcal{O}$ 和 $\mathcal{E}$ 分别视为“奇侧”和“偶侧”，与超立方体 Q^d的标准二分划分类似。令 $\mathcal{D} \in \{\mathcal{O}, \mathcal{E}\}$。子集$A \subseteq \mathcal{D}$ 的（二部）闭包定义为

$$[A] := \{v \in \mathcal{D} : N(v) \subseteq N(A)\}.$$

顶点子集 $A \subseteq V$称为 2-连通的，如果 A在 G^2中诱导出一个连通子图，其中图 G^2 的顶点集与 G 相同，并且 uv 是 G^2 中的一条边，当且仅当u 与 v 在 G中的距离至多为 2。以下引理广为人知，例如可见于 [18]。

引理 2.1 （[18]）。设 $\ell \in \mathbb{N}$ 和 G 是一个 d-正则图。对于 G的任意顶点 v，包含该顶点且大小为 ℓ 的 2-连通子集数量至多为 $(ed^2)^{\ell-1}$。

下面关于二项式系数的估计也将会用到：

$$\binom{n}{k} \leq \binom{n}{\leq k} \leq \exp\left(k \log \frac{en}{k}\right), \tag{4}$$

其中 $\binom{n}{\leq k} := \sum_{j=0}^{k} \binom{n}{j}$。

2.2. 计算方面。 给定样本空间 Ω 上的两个概率测度 μ 和 $\hat{\mu}$，它们之间的全变差距离 定义为

$$\|\mu - \hat{\mu}\|_{TV} := \frac{1}{2} \sum_{x\in\Omega} |\mu(x) - \hat{\mu}(x)| = \max_{S\subseteq\Omega} |\mu(S) - \hat{\mu}(S)|. \tag{5}$$

设 $G = (V, E)$ 是一个图，并设 μ 是 2^V 上的一个概率分布，其中 2^V 是 V 的所有子集构成的集合。μ 的多项式时间采样算法 是一种随机化算法，使得对于每个 $\epsilon > 0$，都能在关于 $|V|$，$\frac{1}{\epsilon}$ 的多项式时间内计算出一个输出 $S \subseteq V$，且这类输出 S 的分布 $\hat{\mu}$ 满足

$$\|\mu - \hat{\mu}\|_{TV} \leq \epsilon.$$

函数 $Z = Z(G) : G \to \mathbb{R}$ 的全多项式时间近似方案 （全多项式时间近似方案）是一种算法，使得对每一个 $\epsilon > 0$，输出 $Z = Z(G)$ 都能在关于 $|V|$、$\log \frac{1}{\epsilon}$ 的多项式时间内计算，并且它是 Z 的一个 ϵ-近似,⁻即

$$(1 - \epsilon)\hat{Z} \leq Z \leq (1 + \epsilon)\hat{Z}.$$

2.3. **马尔可夫链与混合时间**。我们回顾马尔可夫链理论中的一些定义。参见 [33] 以了解该主题的更多背景。

设 M 是状态空间 Ω 上的一条马尔可夫链，其转移矩阵为 P，平稳分布为 π，即 $\pi P = \pi$。为简洁起见，我们也可以直接用转移矩阵 P 来指称马尔可夫链 M。如果任意一个状态都能在有限时间内到达其他任意状态，则称该链**不可约**，也就是说，对于每个 $x, y \in \Omega$，都存在一个整数 t，使得 $P^t(x, y) > 0$。如果一条马尔可夫链的所有状态 x 都满足 $\gcd(\{t : P^t(x, x) > 0\}) = 1$，则称该链为**非周期**。如果 M 不可约且非周期，则称其为**遍历**。众所周知，每条遍历链都有唯一的平稳分布。此外，如果一条马尔可夫链满足**细致平衡方程**，则称其**可逆**：

$$\pi(x)P(x, y) = \pi(y)P(y, x) \qquad \forall x, y \in \Omega,$$

也就是说，矩阵 P 关于 π 是自伴的。

给定任意 $\epsilon > 0$，M 的**混合时间**定义为

$$\tau_{\text{mix}}(M, \epsilon) := \min \left\{ t : \|P^t(x, \cdot) - \pi\|_{\text{TV}} \leq \epsilon \ \forall x \in \Omega \right\}.$$

通常只需考虑 $\epsilon = 1/4$，我们记

$$\tau_{\text{mix}}(M) := \tau_{\text{mix}}(M, 1/4).$$

当未指定 ϵ 而提及混合时间时，我们指的是 $\tau_{\text{mix}}(M)$。关于估计马尔可夫链混合时间的技术和工具已有大量文献，有兴趣的读者可参阅 [33] 及其中的参考文献。

对于任意状态 $x, y \in \Omega$ 以及任意子集 $A, B \subseteq \Omega$，记

$$Q(x, y) := \pi(x)P(x, y) \qquad \text{and} \qquad Q(A, B) := \sum_{x \in A, y \in B} Q(x, y).$$

集合 $S \subset \Omega$ 的**导通率**定义为

$$\Phi(S) = \Phi_M(S) := \frac{Q(S, S^c)}{\pi(S)}.$$

链 M 的导通率为

$$\Phi = \Phi_M := \min_{S \subseteq \Omega \,:\, 0 < \pi(S) \leq \frac{1}{2}} \Phi(S).$$

以下著名引理根据导通率 Φ 界定马尔可夫链 M 的混合时间（参见例如 [33, 定理7.4]）。

引理 2.2. 如果 M 是导通率为 Φ的遍历马尔可夫链，则其混合时间满足 *es*

$$\tau_{\text{mix}}(M) \geq \frac{1}{4\Phi}.$$

特别地，如果我们能找到一个导通率较小的集合 $S \subseteq \Omega$，则可得马尔可夫链 M 具有较大的混合时间。

2.4. **聚合物模型与簇展开**。以下是我们将使用的来自统计物理的两种工具的术语，即聚合物模型与簇展开。关于该主题的更多内容，参见 [27, 31]。

设 $\mathcal{P}$ 是一个有限的对象集合，我们称这些对象为**聚合物**，并赋予其**权重函数** $\omega : \mathcal{P} \to [0, \infty)$。我们还在 $\mathcal{P}$ 上定义一个对称的反自反关系 $\sim$，并称两个聚合物 $A, A' \in \mathcal{P}$ 在 $A \sim A'$ 时**相容**，否则**不相容**（记作 $A \nsim A'$）。由两两相容的聚合物组成的集合称为**聚合物构型**，我们用 $\Omega(\mathcal{P})$ 表示由来自 $\mathcal{P}$ 的聚合物构成的聚合物构型集合。（请勿与我们用来表示马尔可夫链 M 的状态空间的符号 Ω 混淆。）三元组 $(\mathcal{P}, \omega, \sim)$ 称为**聚合物模型**，其**配分函数**定义为

$$\Xi(\mathcal{P}) := \sum_{\Theta \in \Omega(\mathcal{P})} \prod_{A \in \Theta} \omega(A).$$

对于一个由聚合物组成的有序元组 Γ，不相容图 $H(\Gamma)$ 是一个顶点集为 Γ 的图，其中 Γ 中任意两个不相容的元素之间都有一条边。簇是指不相容图连通的聚合物有序元组。我们用 $\mathcal{C}(\mathcal{P})$ 表示由来自 $\mathcal{P}$ 的聚合物构成的所有簇的集合。我们通过如下方式将权重函数扩展到簇：

$$\omega(\Gamma) := \phi(H(\Gamma)) \prod_{A\in\Gamma} \omega(A),$$

其中，ϕ 是图 $G=(V,\ E)$ 的*Ursell* 函数，定义为

$$\phi(G) := \frac{1}{|V|!} \sum_{\substack{F\subseteq E \\ \text{spanning, connected}}} (-1)^{|F|}.$$

簇展开是 $\log \Xi(\mathcal{P})$ 的形式幂级数，给出为

$$\log \Xi(\mathcal{P}) = \sum_{\Gamma\in\mathcal{C}(\mathcal{P})} \omega(\Gamma). \tag{6}$$

注意，这确实是一个无穷形式级数：尽管聚合物集合是有限的，但簇集合是无穷的，因为存在任意长的不相容聚合物序列（例如，可以将同一个聚合物重复任意多次）。事实上，这是 $\log \Xi_{\mathcal{P}}$ 关于变量 $\omega(A)$ 的多元泰勒展开，而等式（6）由 Dobrushin 观察到 [12]。为了使簇展开成为配分函数的有用近似，我们需要知道它绝对收敛，而这通常通过众所周知的*Koteck ́y–Preiss* 条件 [31]（另见 [27]）来验证。

以下记号在处理簇展开时会很有用。簇 $\Gamma\in\mathcal{C}(\mathcal{P})$ 的大小定义为 $\|\Gamma\| := \sum_{A\in\Gamma} |A|$。对于每个 $k\in\mathbb{N}$，定义集合 $\mathcal{C}_k := \{\Gamma\in\mathcal{C}(\mathcal{P}):\ \|\Gamma\|=k\}$、$\mathcal{C}_{\le k} := \bigcup_{j\le k}\mathcal{C}_j$，以及 $\mathcal{C}_{>k} := \bigcup_{j>k}\mathcal{C}_j$。我们还定义

$$L_k := \sum_{\Gamma\in\mathcal{C}_k} \omega(\Gamma), \qquad L_{\le k} := \sum_{\Gamma\in\mathcal{C}_{\le k}} \omega(\Gamma) \qquad \text{and} \qquad L_{>k} := \sum_{\Gamma\in\mathcal{C}_{>k}} \omega(\Gamma).$$

于是，聚合物模型的簇展开形式为 $\log\Xi = L_{\le k} + L_{>k}$。

3. Slow mixing of the Glauber dynamics

本节证明定理 1.3，该定理表明，对于类 $\mathcal{H}(n,\ d,\ \Delta_2,\ \kappa)$ 中满足常数 $\Delta_2\ge 1$，$0\le\kappa<2$，且 $\lambda,\ \beta>0$ 满足 $\lambda\le\lambda_0$ 和$\alpha := \lambda(1-e^{-\beta}) \ge {C_0\log_d C_*}^{3/2}\, d$ 的一组图 G，其反铁磁伊辛模型的 Glauber动力学混合速度呈指数级缓慢。从现在起，假设这些条件均成立。

3.1. 作为瓶颈的平衡集合。 对于一组构型 $\mathcal{S}\subseteq 2^V$，我们将其权重定义为

$$\tilde{\omega}(\mathcal{S}) := \sum_{S\in\mathcal{S}} \tilde{\omega}(S) = \sum_{S\in\mathcal{S}} \lambda^{|S|} e^{-\beta|E(S)|}.$$

定义

$$\mathcal{S}_{bal} := \{S\subseteq V : |S\cap\mathcal{E}| = |S\cap\mathcal{O}|\}$$

表示平衡顶点集的集合。此外，令

$$\mathcal{S}_{\mathcal{E}} := \{S\subseteq V : |S\cap\mathcal{E}| > |S\cap\mathcal{O}|\} \qquad \text{and} \qquad \mathcal{S}_{\mathcal{O}} := \{S\subseteq V : |S\cap\mathcal{E}| < |S\cap\mathcal{O}|\}$$

分别表示偶数占多数集合和奇数占多数集合。不失一般性，我们可以假设 $\mu(\mathcal{S}_{\mathcal{E}}) \le 1/2$，其中 $\mu=\mu_{\lambda,\ \beta}$ 是伊辛模型的吉布斯测度。我们的目标是通过后文证明的一系列引理，证明集合 $\mathcal{S}_{\mathcal{E}}$ 的导通率很小，并由此推出定理 1.3。

首先，我们给出一个用平衡顶点集的权重表示的导通率界。对于我们的马尔可夫链 M，令 P 表示 Glauber动力学的转移矩阵，并回顾

，$Q(x,y) \coloneqq \pi(x)P(x,y)$。注意，若 $S \in \mathcal{S}_{\mathcal{E}}$ 且 $S' \notin \mathcal{S}_{\mathcal{E}}$ 满足 $P(S,S') \neq 0$，则 $S' \in \mathcal{S}_{bal}$。观察到

$$Q(\mathcal{S}_{\mathcal{E}}, \mathcal{S}_{\mathcal{E}}^c) = \sum_{\substack{S\in\mathcal{S}_{\mathcal{E}} \\ S'\notin\mathcal{S}_{\mathcal{E}}}} \mu(S)P(S,S') = \sum_{\substack{S\in\mathcal{S}_{\mathcal{E}} \\ S'\notin\mathcal{S}_{\mathcal{E}}}} \mu(S')P(S',S) = \sum_{\substack{S\in\mathcal{S}_{\mathcal{E}} \\ S'\in\mathcal{S}_{bal}}} \mu(S')P(S',S) \leq \mu(\mathcal{S}_{bal}),$$

其中第二个等式利用了该链的可逆性，而最后一个不等式利用了：对于任意固定的 $S' \in \mathcal{S}_{bal}$，我们有 $\sum_{S\in\mathcal{S}_{\mathcal{E}}} P(S',S) \leq 1$。因此，导通率满足

$$\Phi_M \leq \Phi_M(\mathcal{S}_{\mathcal{E}}) = \frac{Q(\mathcal{S}_{\mathcal{E}}, \mathcal{S}_{\mathcal{E}}^c)}{\mu(\mathcal{S}_{\mathcal{E}})} \leq \frac{\mu(\mathcal{S}_{bal})}{\mu(\mathcal{S}_{\mathcal{E}})} = \frac{\tilde{\omega}(\mathcal{S}_{bal})}{\tilde{\omega}(\mathcal{S}_{\mathcal{E}})}.$$

注意，$\tilde{\omega}(\mathcal{S}_{\mathcal{E}}) \geq \sum_{S\subseteq\mathcal{E}} \lambda^{|S|} \geq (1+\lambda)^{n/2}$，这是因为对任意 $S \subseteq \mathcal{E}$都有 $|E(S)| = 0$。这意味着

$$\Phi_M \leq \frac{\tilde{\omega}(\mathcal{S}_{bal})}{(1+\lambda)^{n/2}}. \tag{7}$$

剩余的目标是得到 $\tilde{\omega}(\mathcal{S}_{bal})$的上界。为此，我们用在两侧要么都小要么都大的集合族来覆盖 $\mathcal{S}_{bal}$这一平衡集合族。从小到大的过渡点将取决于 $f(\lambda)$，其定义见（3）。我们令

$$\mathcal{S}_{small} \coloneqq \{S \subseteq V : |S\cap\mathcal{O}|, |S\cap\mathcal{E}| \leq f(\lambda)\frac{n}{2}\},$$

$$\mathcal{S}_{big} \coloneqq \{S \subseteq V : |S\cap\mathcal{O}|, |S\cap\mathcal{E}| > f(\lambda)\frac{n}{2}\}.$$

注意，$\mathcal{S}_{bal} \subseteq \mathcal{S}_{small} \cup \mathcal{S}_{big}$。我们进一步将集合 $\mathcal{S}_{big}$ 划分如下：对于 $\mathcal{D} \in \{\mathcal{O}, \mathcal{E}\}$，

$$\mathcal{S}_{big,\mathcal{D}} \coloneqq \{S \in \mathcal{S}_{big} : |[S\cap\mathcal{D}]| \leq 3n/8\},$$

$$\mathcal{S}_{rest} \coloneqq \mathcal{S}_{big} \setminus (\mathcal{S}_{big,\mathcal{E}} \cup \mathcal{S}_{big,\mathcal{O}}).$$

我们指出，集合 $\mathcal{S}_{rest}$ 是伊辛模型中需要分析的新特征；在 Galvin 和 Tetali 的工作中，对图上的独立集硬核模型而言，并不存在这一特征 [19]。这是因为伊辛模型允许对任意子集 $S \subseteq V$ 进行抽样，而如果我们只考虑独立集 $S \subseteq V$，它们就必须满足 $|[S\cap\mathcal{E}]| \leq n/4$ 或 $|[S\cap\mathcal{O}]| \leq n/4$，因此在硬核模型中，$\mathcal{S}_{rest}$ 为空。

接下来需要分别给出集合 $\mathcal{S}_{small}$、$\mathcal{S}_{big}$、$\mathcal{D}$、$\mathcal{S}_{rest}$ 的权重上界，具体由以下三个引理给出。

引理 3.1. 我们有

$$\tilde{\omega}(\mathcal{S}_{small}) \leq (1+\lambda)^{n/4}.$$

引理 3.2. 存在一个常数 $C' > 0$，使得

$$\tilde{\omega}(\mathcal{S}_{big,\mathcal{D}}) \leq (1+\lambda)^{n/2} \exp\left(-\frac{C'\alpha^2 f(\lambda)}{d^\kappa \log d} \cdot n\right).$$

引理 3.3. 我们有

$$\tilde{\omega}(\mathcal{S}_{rest}) \leq (1+\lambda)^{n/2} \exp(-\Omega(\lambda n)).$$

引理 3.1 通过第 3.2 节中的直接计算得以证明。引理 3.2 需要在第 3.3 节中进行更复杂的计算。事实上，这需要对 Galvin 的容器构造 [16, 17], 作少许修改；该构造在这一领域十分常见，用于为不一定是 2-连通的集合界定权重。部分细节推迟至 B 节。尽管此类结果似乎早已是众所周知的，但据我们所知，以前并没有明确给出。引理 3.3 的证明仅对我们先前工作中的一个结果稍作修改 [20, 引理 7。1]，我们将在第 3.4 节概述证明中的基本改动。

假设上述三个引理成立，现在我们证明定理1.3。

定理 1.3的证明。 由于 $\mathcal{S}_{bal} \subseteq \mathcal{S}_{small} \cup \mathcal{S}_{big,\ \mathcal{E}} \cup \mathcal{S}_{big,\ \mathcal{O}} \cup \mathcal{S}_{rest}$，我们有

$$\tilde{\omega}(\mathcal{S}_{bal}) \leq \tilde{\omega}(\mathcal{S}_{small}) + \tilde{\omega}(\mathcal{S}_{big,\mathcal{E}}) + \tilde{\omega}(\mathcal{S}_{big,\mathcal{O}}) + \tilde{\omega}(\mathcal{S}_{rest}).$$

代入引理3.1、引理3.2和引理3.3 可得

$$\tilde{\omega}(\mathcal{S}_{bal}) \leq (1+\lambda)^{n/2}\left[(1+\lambda)^{-n/2} + 2\exp\left(-\frac{C'\alpha^2 f(\lambda)}{d^\kappa \log d}\cdot n\right) + \exp(-\Omega(\lambda n))\right] \tag{8}$$

我们注意到，第二项是主导项。这可由下式推出

$$\frac{C'\alpha^2 f(\lambda)}{d^\kappa \log d}\cdot n \leq \frac{C'\lambda_0^2}{R}\cdot\frac{1}{d^\kappa \log d}\cdot \lambda n = o(\lambda n) \quad \text{and} \quad \frac{C'\alpha^2 f(\lambda)}{d^\kappa \log d}\cdot n = o\left(\frac{n}{4}\log(1+\lambda)\right),$$

其中，第一个上界用到了 $\alpha \leq \lambda \leq \lambda_0$，第二个上界用到了 $\log(1+\lambda) \geq \lambda - \frac{\lambda^2}{2}$。因此，式（8）表明存在一个常数 $C > 0$ 使得

$$\tilde{\omega}(\mathcal{S}_{bal}) \leq (1+\lambda)^{n/2}\exp\left(-\frac{C\alpha^2 f(\lambda)}{2d^\kappa \log d}\cdot n\right). \tag{9}$$

将式（9）代入式（7），可得我们的马尔可夫链 M 的导通率满足 $\Phi_M \leq \exp(\lambda)\log d \cdot n)$。因此，根据引理2.2，混合时间满足

$$\tau_{\text{mix}}(M) \geq \exp\left(\frac{C\alpha^2 f(\lambda)}{d^\kappa \log d}\cdot n\right). \qquad \square$$

3.2. 小集合的贡献——引理3.1的证明。 在本小节中，我们证明 $\mathcal{S}_{small}$ 的总权重上界，其中 $\mathcal{S}_{small}$ 由满足 $|S\cap\mathcal{O}|, |S\cap\mathcal{E}| \leq f(\lambda)\frac{n}{2}$ 的子集 $S \subseteq V$ 组成。该上界可通过初等论证得到。回顾一下，如果 $0 < \lambda < \frac{1}{e}$，则 $f(\lambda) = \frac{\lambda}{2\log(1/\lambda)}$，而如果 $\frac{1}{e} \leq \lambda \leq \lambda_0$，则 $f(\lambda) = \frac{\lambda}{R}$。

引理的证明3.1。我们计算得到

$$\begin{aligned}\tilde{\omega}(\mathcal{S}_{small}) &= \sum_{S\in\mathcal{S}_{small}} \lambda^{|S|}e^{-\beta|E(S)|} \leq \binom{\frac{n}{2}}{\leq f(\lambda)\frac{n}{2}}^2 (1+\lambda)^{f(\lambda)n} \\ &\leq \exp\left(n\cdot f(\lambda)\log\left(\frac{e}{f(\lambda)}\right)\right)\cdot(1+\lambda)^{f(\lambda)n},\end{aligned}$$

其中第一个不等式使用 $e^{-\beta|E(S)|} \leq 1$，第二个不等式使用（4）。由于 $\lambda \leq \lambda_0$ 有界，我们可以选取足够大的 R，使得 $f(\lambda) \leq \frac{1}{8}$。现在只需证明$f(\lambda)\log\left(f^{e}(\lambda)\right) \leq \frac{1}{8}\log(1+\lambda)$。

若 $\lambda \geq 1/e$，则我们可以选取足够大的 R，使得 $f(\lambda)\log\left(f^{e}(\lambda)\right) \leq \frac{1}{8}\log\left(1+\frac{1}{e}\right) \leq \frac{1}{8}\log(1+\lambda)$。若 $\lambda < 1/e$，则我们有

$$f(\lambda)\log\left(\frac{e}{f(\lambda)}\right) = \frac{\lambda}{R\log^2(1/\lambda)}\log\left(\frac{eR\log^2(1/\lambda)}{\lambda}\right) \leq \frac{2\lambda}{R\log(1/\lambda)} \leq \frac{2\lambda}{R} \leq \frac{1}{8}\log(1+\lambda),$$

其中将 R 取得足够大，使得所有不等式均成立。至此证明完毕。 $\square$

3.3. 大集合的贡献——容器引理及引理3.2的证明。 固定$\mathcal{D} \in \{\mathcal{E}, \mathcal{O}\}$，并令 $\mathcal{D}$ 表示互补的二分部。在本小节中，我们对$\mathcal{S}_{big,\mathcal{D}}$的总权重给出上界，它由满足 $|S\cap\mathcal{O}|, |S\cap\mathcal{E}| > f(\lambda)\frac{n}{2}$以及 $|[S\cap\mathcal{D}]| \leq 3n/8$的子集 $S \subseteq V$组成。

这将使用一个类似于 [16, 19, 20, 27], 中的容器引理，对具有给定闭包和邻域的顶点集数量给出上界。为此，对$a, b \in \mathbb{N}$定义，

$$\begin{aligned}\mathcal{G}(a,b) = \mathcal{G}_{\mathcal{D}}(a,b) &:= \{A \subseteq \mathcal{D} : |[A]| = a, |N(A)| = b\}, \\ \mathcal{S}(a,b) = \mathcal{S}_{\mathcal{D}}(a,b) &:= \{S \in \mathcal{S}_{big,\mathcal{D}} : S\cap\mathcal{D} \in \mathcal{G}(a,b)\}.\end{aligned}$$

同时将 $\mathcal{G}(a,b)$的总权重定义为

$$\omega(\mathcal{G}(a,b)) := \sum_{A\in\mathcal{G}(a,b)} \sum_{B\subseteq N(A)} \frac{\lambda^{|A|+|B|}}{(1+\lambda)^{|N(A)|}} e^{-\beta|E(A,B)|}.$$

下面的容器引理给出了 $\omega(\mathcal{G}(a,b))$ 的上界。它与[20, 引理 42], 几乎相同，但区别在于， $\mathcal{G}(a,b)$ 中的集合不必是 2-连通的。我们在第B节证明这个新的容器引理。

引理 3.4。 固定 $\Delta_2 \geq 1$、 $0 \leq \kappa < 2$ 和 $\lambda_0 > 0$，并取足够大的 $C_0 > 0$ 。设 $G \in \mathcal{H}(n,d,\Delta_2,\kappa)$，且 $\lambda \leq \lambda_0$ 和 $\alpha := \lambda(1-e^{-\beta}) \geq \frac{C_0 \log_{dC_*}^{3/2} d}{d}$，并设 a、 $b \in \mathbb{N}$ 满足 $b \geq \left(1+\Omega\left(\frac{1}{d^\kappa}\right)\right) a$。那么对于任意 $a \geq f(\lambda)\frac{n}{2}$，有

$$\omega(\mathcal{G}(a,b)) \leq \frac{n}{2} \exp\left(-\frac{C(b-a)\alpha^2}{\log d}\right).$$

我们现在利用引理3.4 证明引理3.2。

引理 *3.2*的证明。回顾一下，对于每个 $S \in \mathcal{S}_{big,\mathcal{D}}$都有 $a \geq f(\lambda)\frac{n}{2}$，我们可以将权重 $\tilde{\omega}(\mathcal{S}_{big,\mathcal{D}})$ 拆分如下：

$$\tilde{\omega}(\mathcal{S}_{big,\mathcal{D}}) \leq \sum_{b\geq a\geq f(\lambda)\frac{n}{2}} \sum_{S\in\mathcal{S}(a,b)} \lambda^{|S|} e^{-\beta|E(S)|},$$

其中，第一个求和遍历所有 a， $b \in \mathbb{N}$。由于每个 $S \in \mathcal{S}(a,\ b)$ 都满足 $S \cap \mathcal{D} \in \mathcal{G}(a,\ b)$，我们可以改写 $A = S \cap \mathcal{D}$ 和 $B_0 = S \cap \mathcal{D}$，得到

$$\begin{aligned}\tilde{\omega}(\mathcal{S}_{big,\mathcal{D}}) &\leq \sum_{b\geq a\geq f(\lambda)\frac{n}{2}} \sum_{A\in\mathcal{G}(a,b)} \lambda^{|A|} \sum_{B_0\subseteq\overline{\mathcal{D}}} \lambda^{|B_0|} e^{-\beta|E(A,B_0)|} \\ &\leq \sum_{b\geq a\geq f(\lambda)\frac{n}{2}} \sum_{A\in\mathcal{G}(a,b)} \sum_{B\subseteq N(A)} \lambda^{|A|+|B|} e^{-\beta|E(A,B)|} \sum_{B'\subseteq\overline{\mathcal{D}}\setminus N(A)} \lambda^{|B'|}.\end{aligned}$$

第二个不等式将每个 $B_0 = S \cap \mathcal{D}$ 拆分为 $B = B_0 \cap N(A)$ 和 $B' = B_0 \cap (D \setminus N(A))$。利用 $\sum_{B'\subseteq\mathcal{D}\setminus N(A)} \lambda^{|B'|} \leq (1+\lambda)^{n/2}$，我们得到

$$\begin{aligned}\tilde{\omega}(\mathcal{S}_{big,\mathcal{D}}) &\leq (1+\lambda)^{n/2} \sum_{b\geq a\geq f(\lambda)\frac{n}{2}} \sum_{A\in\mathcal{G}(a,b)} \sum_{B\subseteq N(A)} \frac{\lambda^{|A|+|B|}}{(1+\lambda)^{|N(A)|}} e^{-\beta|E(A,B)|} \\ &\leq (1+\lambda)^{n/2} \left(\frac{n}{2}\right)^2 \max_{b\geq a\geq f(\lambda)\frac{n}{2}} \omega(\mathcal{G}(a,b)),\end{aligned}$$

其中，第二个不等式利用了以下事实： a 和 b 各自至多有 $n/2$ 种选择 .

现在我们可以应用引理 3.4 完成证明。事实上，我们对 G 的假设意味着 $b-a \geq a\cdot\Omega\left(\frac{1}{d^\kappa}\right)$（否则 $\mathcal{G}(a,b)$ 为空），因此引理 3.4 适用。此外，与引理 n 给出的指数上界相比，多项式因子可以忽略不计3.4。 □

3.4. **剩余集合的贡献——引理 3.3 的证明**。我们的目标是给 $\mathcal{S}_{rest} := \mathcal{S}_{big} \setminus (\mathcal{S}_{big,\mathcal{E}} \cup \mathcal{S}_{big,\mathcal{O}})$ 的贡献一个上界。证明沿用 [20, 引理 7 的证明1]，但对参数的选择作了修改。在当前证明中，令 $m := \lambda n \log d$，以明确体现对 λ 的依赖。另令 $s := \frac{d}{2}\cdot\frac{\lambda}{1+\lambda}$，并设

$$\mathcal{J}_{\mathcal{D}} := \{S \subseteq V\colon \exists \text{至少有 } m \text{ 个顶点 } v \in \mathcal{D} \text{ 使得 } 1 \leq |N(v) \cap S| \leq s\},$$

and

$$\mathcal{J}' := \mathcal{S}_{rest} \setminus (\mathcal{J}_{\mathcal{E}} \cup \mathcal{J}_{\mathcal{O}}).$$

于是 $\mathcal{S}_{rest} \subseteq \mathcal{J}_{\mathcal{O}} \cup \mathcal{J}_{\mathcal{E}} \cup \mathcal{J}'$。按照 [20], 中的计算过程，可以证明

$$\tilde{\omega}(\mathcal{J}_{\mathcal{D}}) \leq (1+\lambda)^{n/2} \qquad \text{and} \qquad \tilde{\omega}(\mathcal{J}') \leq \exp(-\Omega(n\log^2 d)).$$

引理 3.3 现在很容易得出（注意到 $\lambda \le \lambda_0 = o(\log^2 d)$）。

4. Efficient sampling via the cluster expansion

本节证明定理1.4，给出一种高效的采样算法，用于对图 G（属于类 $\mathcal{H}'(n, d, \Delta_2, \kappa)$）上的伊辛模型吉布斯测度 $\mu_{\lambda,\beta}$ 进行采样；此外，还给出一种全多项式时间近似方案，用于计算其配分函数 $Z_G(\lambda, \beta)$。我们采用簇展开方法，并假设在本节中， d 足够大，但与 n无关。

在关于超立方体中独立集计数的研究中 Q^d，Jenssen 和 Perkins [27]采用了恰当的聚合物模型，并利用簇展开的收敛性，对硬核模型的配分函数进行了近似。重要的是，该方法本身使用了一种辅助测度来近似所需的采样测度。原则上，如果能将近似证明中的步骤从计算转化为高效采样，就可以得到一种采样算法。这正是 [28] 应用于硬核模型的思路。对于我们的伊辛模型，已有证明[20] 表明，对于我们在全文中考虑的图类 $\mathcal{H}'(n,\ d,\ \Delta_2,\ \kappa)$以及 $\lambda,\ \beta$的取值范围，簇展开绝对收敛；该结论是通过验证 Koteck´y–Preiss 条件 [31] 得出的。因此，预期可以相应地复现该采样器。本节将以简洁的形式验证该采样器对伊辛模型的效率。

4.1. 聚合物模型。我们采用 [20, 32] 中描述的聚合物模型。对于 $\mathcal{D} \in \{\mathcal{O}, \mathcal{E}\}$，2-连通集 $A \subseteq \mathcal{D}$ 的权重定义为

$$\omega(A) := \sum_{B \subseteq N(A)} \frac{\lambda^{|A|+|B|}}{(1+\lambda)^{|N(A)|}} e^{-\beta |E(A,B)|} = \sum_{B \subseteq N(A)} \omega(A, B),$$

其中

$$\omega(A, B) := \frac{\lambda^{|A|+|B|}}{(1+\lambda)^{|N(A)|}} e^{-\beta |E(A,B)|}.$$

我们考虑聚合物模型

$$\mathcal{P}_{\mathcal{D}} = \left\{ A \subseteq \mathcal{D} : \quad A \text{ is 2-linked}, \quad |[A]| \le \frac{3}{4} \cdot |\mathcal{D}| \right\},$$

其中，两个聚合物 $A,\ A' \in \mathcal{P}_{\mathcal{D}}$ 若 $A \cup A'$ 是 2-连通的，则称它们相容，其权重函数由 $\omega(A)$ 给出。此外，我们定义装饰聚合物模型

$$\hat{\mathcal{P}}_{\mathcal{D}} := \left\{ (A, B) : \quad A \subseteq \mathcal{D} \text{ is 2-linked}, \quad |[A]| \le \frac{3}{4} \cdot |\mathcal{D}|, \quad \text{and} \quad B \subseteq N(A) \right\},$$

ˆ 其中，元素 $(A,\ B) \in \mathcal{P}_{\mathcal{D}}$是装饰聚合物。若 $A \cup A'$ 是 2-连通的，则两个装饰聚合物 $(A,\ B)$、$(A',\ B')$ 相容，其权重函数由 $\omega(A,\ B)$ 给出。使用装饰聚合物模型，是为了将聚合物 $A \in \mathcal{P}_{\mathcal{D}}$ 的权重 $\omega(A)$ 分解为各项 $\omega(A,\ B)$。

相对于 $\mathcal{D}$ 两两相容的装饰聚合物集合称为装饰ˆ聚合物构型，此类聚合物的集合记为 $\Omega_{\mathcal{D}}$。$\Omega_{\mathcal{D}}$ 中一个 ˆ ˆ 装饰聚合物构型 Θ 的权重定义为

$$\omega(\hat{\Theta}) := \prod_{(A,B) \in \hat{\Theta}} \omega(A, B).$$

同样，来自 $\mathcal{P}_{\mathcal{D}}$ 的聚合物构型集合记为 $\Omega_{\mathcal{D}}$。配分函数 这些聚合物模型的配分函数相同，且给出为

$$\Xi_{\mathcal{D}} := \Xi_{\hat{\Omega}_{\mathcal{D}}} = \Xi_{\Omega_{\mathcal{D}}} = \sum_{\hat{\Theta} \in \hat{\Omega}_{\mathcal{D}}} \omega(\hat{\Theta}).$$

我们用 $\mathcal{C}_{\mathcal{D}}$ 表示包含来自 $\mathcal{P}_{\mathcal{D}}$ 的聚合物的簇集合，并用 $L_{\mathcal{D},\ k}$,$L_{\mathcal{D},\ \le k}$, $L_{\mathcal{D},\ >k}$ 表示其簇展开中对应的项和截断。

我们通过以下步骤定义一对 $(S,\ \mathcal{D})$ 上的新测度 $\hat{\mu}^*$：

(1) 以与 $\Xi_{\mathcal{D}}$ 成正比的概率选择一个缺陷侧 $\mathcal{D} \in \{\mathcal{O}, \mathcal{E}\}$。 (2) 根据由 $\nu_{\mathcal{D}}$ 定义的测度，从 $\Omega_{\mathcal{D}}$ 中采样一个装饰聚合物构型 Θ

$$\mathbb{P}_{\nu_{\mathcal{D}}}(\hat{\boldsymbol{\Theta}} = \hat{\Theta}) = \frac{\omega(\hat{\Theta})}{\Xi_{\mathcal{D}}}.$$

(3) 若 $\Theta = \{(A_1, B_1) \ldots, (A_s, B_s)\}$，则令 $D := \bigcup_i (A_i \cup B_i)$，并设

- 每个顶点属于 D，并且
- 将每个顶点 $v \in \mathcal{D} \setminus N(D)$ 以概率 $\frac{\lambda}{1+\lambda}$ 独立地加入顶点集 S。

那么 $\hat{\mu}^*$ 是定义在点对 $(S, \mathcal{D})$ 集合上的一个测度，其中 $S \subseteq V$ 是一个顶点子集，而 $\mathcal{D} \in \{\mathcal{O}, \mathcal{E}\}$ 是一个缺陷侧。给定 $(S, \mathcal{D})$，我们可以通过取 $\mathcal{D}$ 的极大2-连接分量构成 A_i，并取 $S \cap N(A_i)$ 中的顶点构成 B_i，从而恢复装饰聚合物构型 $\Theta(S) \in \Omega_{\mathcal{D}}$。据此，我们还定义

$$\hat{\omega}^*(S, \mathcal{D}) := \mathbb{1}_{\hat{\Theta}(S) \in \Omega_{\mathcal{D}}} \lambda^{|S|} e^{-\beta |E(S)|},$$

and

$$\hat{\omega}(S) := \hat{\omega}^*(S, \mathcal{O}) + \hat{\omega}^*(S, \mathcal{E}).$$

现在我们通过按权重成比例地采样子集 $S \subseteq V$，我们定义测度 $\hat{\mu}$，其权重为 $\hat{\omega}(S)$：

$$\mathbb{P}_{\hat{\mu}}(\mathbf{S} = S) = \frac{\hat{\omega}(S)}{\hat{Z}},$$

其中 $Z := \sum_{S \subseteq V} \hat{\omega}(S)$。根据 [20], 配分函数 Z 满足 μ 的条件

$$\hat{Z} = (1+\lambda)^{n/2}(\Xi_{\mathcal{O}} + \Xi_{\mathcal{E}}).$$

以下引理说明，$\hat{\mu}$ 确实是伊辛模型的吉布斯测度$\mu = \mu_{\lambda,\ \beta}$ 的良好近似。

引理 4.1 (引理 3.3，见 [20])。 固定 $\Delta_2 \geq 1$、 $0 \leq \kappa < 2$ 和 $\lambda_0 > 0$。那么存在一个常数 $C_0 > 0$，使得只要 $\lambda \leq \lambda_0$ 且 $\lambda(1 - e^{-\beta}) \geq \frac{C_0 \text{对数} d^{3/2} d}{d^{C_*}}$，并且 $G \in \mathcal{H}(n, d, \Delta_2, \kappa)$，我们就有

$$\left| \log Z_G(\lambda, \beta) - \log\left((1+\lambda)^{n/2}(\Xi_{\mathcal{O}} + \Xi_{\mathcal{E}})\right) \right| = O\left(\exp\left(-\frac{n}{d^{\kappa+4}}\right)\right),$$

这就意味着

$$\|\hat{\mu} - \mu\|_{TV} = O\left(\exp\left(-\frac{n}{d^{\kappa+4}}\right)\right).$$

换言之，$\hat{\mu}$是 μ的一个良好近似。因此，尚需（近似或精确地）从$\hat{\mu}$中采样。考察导出$\hat{\mu}$之定义的步骤，我们需要以概率 $\Xi_{\mathcal{D}}/(\Xi_{\mathcal{E}} + \Xi_{\mathcal{O}})$采样一个缺陷侧，然后采样一个装饰聚合物模型，其所依据的测度为 $\nu_{\mathcal{D}}$。这两项任务都需要计算聚合物配分函数，而这无法精确完成。因此，我们的目标是为上述所有测度给出高效估计和近似采样器。簇展开的收敛性是引理4.1证明的核心，也是通过截断提供此类估计的关键。展开式各项的计算成为该算法的一个子问题，且必须在多项式时间内完成。

现在我们可以写出一个具体的算法了。

算法 1 伊辛模型的近似采样器

(1) 令 $\epsilon_0 := \exp\left(-d^{\kappa+4}\log^n d\right)$。若 $\epsilon \le \epsilon_0$，则通过暴力枚举采样一个集合。否则，执行以下步骤。(2) 按照引理4.4 选取 k_0 。根据引理 4.2 计算 $\mathcal{D} \in \{\mathcal{E}, \mathcal{O}\}$ 的 $L_{\mathcal{D},\le k_0}$ 。(3) 以概率 $L_{\mathcal{D},\mathcal{E}\le k_0} + L_{\mathcal{O},,\le k_0}$ 选择一个缺陷侧 $\mathcal{D}$。ˆ (4) 近似地从 $\nu_{\mathcal{D}}$ 中采样一个装饰聚合物构型 Θ 。具体方法见引理 4.3。令 D 为 Θ 中所有顶点构成的集合。(5) 令 S' 为一个随机集合，其中 $\mathcal{D}\setminus D$ 中的每个顶点以概率 $\frac{\lambda}{1+\lambda}$ 被包含。(6) 输出 $S := D \cup S'$。

现在陈述算法 1 中用到的三个引理。

引理 4.2。 给定 $\mathcal{D} \in \{\mathcal{O}, \mathcal{E}\}$，存在一种算法可在以下时间内计算 $L_{\mathcal{D},\le k}$

$$O(n^2k^8)\exp(O(kd)).$$

引理 4.3。 给定 $\mathcal{D} \in \{\mathcal{O}, \mathcal{E}\}$ 和 $\epsilon \ge \exp\left(-d^{\kappa+4}\log^n d\right)$，存在一个采样方案ˆ ˆ，可根据满足以下条件的分布ˆ$\nu_{\mathcal{D}}$ 从 $\Omega_{\mathcal{D}}$ 中采样 Θ

$$\|\hat{\nu}_{\mathcal{D}} - \nu_{\mathcal{D}}\|_{TV} \le \epsilon \quad in\ time \quad \left(\frac{n}{\epsilon}\right)^{O(d^4)}.$$

引理 4.4。 固定 $\epsilon > 0$、 $\Delta_2 \ge 1$ 和 $0 \le \kappa < 2$。若 $\lambda \le \lambda_0$ 和 $\lambda(1-e^{-\beta}) \ge \frac{C_0 \log^{3/2} d}{d^{C_*}}$ 且 $G \in \mathcal{H}'(n, d, \Delta_2, \kappa)$，则存在 $k_0 \in \{\lfloor d^3\log n\rfloor, \lfloor d^3\log n+1\rfloor, \lceil d^{\kappa+1}\log(16n/d^{\kappa+1}\epsilon)\rceil\}$，使得

$$|\Xi_{\mathcal{D}} - L_{\mathcal{D},<k_0}| \le \epsilon/16.$$

引理4.2 和4.3分别在第4.2 节和4.3节中证明。引理4.4在算法1的步骤（2）中使用，它表明大小至多为 k_0 的簇就足以足够精确地计算配分函数。该引理的结论可由 [20], 中描述的簇展开尾部估计稍作修改后推出。证明见第C节，该节还说明了 k_0 的正确取值。

假设上述三个引理成立，现在我们可以给出定理1.4的证明。

定理*1.4*的证明。首先令 $\epsilon_0 := \exp\left(-d^{\kappa+4}\log^n d\right)$。

若 $\epsilon \le \epsilon_0$，则我们以蛮力方式根据吉布斯测度 $\mu = \mu_{\lambda,\ \beta}$ 对集合 $S \subseteq V$进行采样。 V 的子集至多有 2^n 个，且计算其权重的复杂度关于n为多项式。因此，我们可以在时间 $2^{n+o(n)} \le \left(\frac{1}{\epsilon}\right)^{d^6\log d}$ 内按照概率 μ 对一个集合进行采样，因为$\kappa < 2$。

因此，我们可以假设 $\epsilon \ge \epsilon_0$。根据引理 4.1，我们有

$$\|\hat{\mu} - \mu\|_{TV} = O\left(\exp\left(-\frac{n}{d^{\kappa+4}}\right)\right) \le \frac{\epsilon}{2}.$$

这意味着，只需从 ˆμ 中采样，误差至多为 $\epsilon/2$。因此，我们需要根据正确的分布选取缺陷侧 $\mathcal{D}$ ，然后在给定该缺陷侧 $\mathcal{D}$ 的条件下，从 ˆμ^* 中采样。

$\mathcal{D} \in \{\mathcal{O}, \mathcal{E}\}$ 确实是缺陷侧的概率为

$$\mathbb{P}_{\hat{\mu}^*}(\boldsymbol{\mathcal{D}} = \mathcal{D}) = \frac{\Xi_{\mathcal{D}}}{\Xi_{\mathcal{O}} + \Xi_{\mathcal{E}}}, \tag{10}$$

因此，我们旨在近似 $\Xi_{\mathcal{O}}$ 和 $\Xi_{\mathcal{E}}$。根据引理4.4，

$$|\Xi_{\mathcal{D}} - L_{\mathcal{D},<k_0}| \le \frac{\epsilon}{16}, \tag{11}$$

对于 k_0的适当取值。根据引理4.2，我们可以在时间内计算 $L_{\mathcal{D},\ \le k_0}$

$$O(n^2 k_0^8)\exp(O(k_0 d)). \tag{12}$$

如果 $k_0 = \lfloor d^3 \log\ n\rfloor$ or $k_0 = \lfloor d^3 \log n + 1\rfloor$，那么（12）中的运行时间为 $O(n^2 d^{24}\log^8 n)n^{O(d^4)}$。如果$k_0 = \lceil d^{\kappa+1}\log(16n/d^{\kappa+1}\epsilon)\rceil$，那么（12）中的运行时间为 $O\left(n^2 d^{8(\kappa+1)}\log^8\left(\frac{n}{\epsilon}\right)\right)\left(\frac{n}{\epsilon}\right)^{O(d^{\kappa+2}}$)。

无论如何，由于 $\kappa < 2$ 计算 $L_{\mathcal{D},\le k_0}$ 的运行时间至多为

$$\left(\frac{n}{\epsilon}\right)^{O(d^4)}.$$

现在，以概率 $\mathcal{D}$ 选取缺陷侧 $\boldsymbol{\mathcal{D}}$

$$\frac{L_{\mathcal{D},\le k_0}}{L_{\mathcal{O},\le k_0} + L_{\mathcal{E},\le k_0}}.$$

利用（11）并注意到 $\Xi_{\mathcal{O}}, \Xi_{\mathcal{E}} \ge 1$，该概率对（10）的近似误差至多为 $\epsilon/8$。给定缺陷侧 $\mathcal{D}$，根据引理 4.3 ，我们还可以在关于 n 和 $\frac{1}{\epsilon}$ 的多项式时间内，以误差 $\frac{\epsilon}{8}$ 采样一个装饰聚合物构型 $\hat{}\Theta \in \hat{}\Omega_{\mathcal{D}}$。构造一个子集 $S \subseteq V\hat{}$，使其包含 $\bar{}\Theta$中的每个顶点。然后，独立地以概率 $\frac{\lambda}{1+\lambda}$ 将每个顶点 $v \in \mathcal{D}\backslash N(D)$ 添加到 S中，并回顾 $D := \bigcup_{(A,B)\in\hat{\Theta}}(A \cup B)$。输出 S。这就给出了我们的多项式时间采样方案。

最后，上述证明还给出了计算配分函数 $Z_G(\lambda, \beta)$的全多项式时间近似方案：在情形 $\epsilon \le \epsilon_0$中，我们直接计算配分函数，而对于 $\epsilon \ge \epsilon_0$ ，我们通过对聚合物模型的配分函数进行近似给出了一个近似。事实上，

$$\begin{aligned}\left|1 - \frac{Z}{(1+\lambda)^{n/2}(L_{\mathcal{E},\le k_0} + L_{\mathcal{O},\le k_0})}\right| &= \left|1 - \frac{Z}{(1+\lambda)^{n/2}(\Xi_{\mathcal{E}} + \Xi_{\mathcal{O}})} \cdot \frac{\Xi_{\mathcal{E}} + \Xi_{\mathcal{O}}}{L_{\mathcal{E},\le k_0} + L_{\mathcal{O},\le k_0}}\right| \\ &\le |1 - e^{\epsilon/2}(1 - \epsilon/8)| \le \epsilon,\end{aligned}$$

其中第一个不等式使用了引理4.1 和方程（11）。至此证明完成。 □

4.2. 有界大小簇的抽样——引理4.2的证明。 在本小节中，我们旨在高效计算簇展开的一个截断$L_{\mathcal{D},\le k}$。所进行的计算将是精确的：我们将列出所有适当大小的聚合物和簇，并精确计算它们的权重，从而得到$L_{\mathcal{D},\le k}$。我们遵循来自 [25, 定理 8]的方法。

回顾一下，簇 Γ 是一个由聚合物组成的有序元组，其不相容图是连通的，且其大小为 $\|\Gamma\| := \sum_{(A,B)\in\Gamma}|A|$。我们记$\mathcal{C}_{\mathcal{D},\le k} := \{\Gamma \in \mathcal{C}_{\mathcal{D}} : \ \|\Gamma\| \le k\}$以及

$$L_{\mathcal{D},\le k} := \sum_{\Gamma\in\mathcal{C}_{\mathcal{D},\le k}} \omega(\Gamma).$$

$\hat{}$ 另请回顾，装饰聚合物 $(A, B) \in \mathcal{P}_{\mathcal{D}}$ 由一个 2-连通集 $A \subseteq \mathcal{D}$ 和一个集合$B \subseteq N(A)$ 组成。由于相容关系仅依赖于 A，我们首先关注集合 A ，随后对所有子集 $B \subseteq N(A)$ 求和。

在我们的非装饰聚合物模型 $\mathcal{P}_{\mathcal{D}}$中，聚合物 $A \in \mathcal{P}_{\mathcal{D}}$ 是一个满足 $|[A]| \le \frac{3}{4}\cdot|\mathcal{D}|$ 的 2-连通集 $A \subseteq \mathcal{D}$，其大小由 $|A|$给出。首先，我们试图列出所有聚合物和簇。记 $\mathcal{P}_{\mathcal{D},\le k} := \{A \in \mathcal{P}_{\mathcal{D}} : |A| \le k\}$。由引理 2.1，在我们的 n 顶点、 d-正则图 G 中，大小为 k 的 2-连通集至多有$n(ed^2)^k = n\exp(O(k\log\ d))$ 个。因此，$\mathcal{P}_{\mathcal{D},\le k}$ 中的聚合物至多有 $n \cdot k\exp(O(k\log d))$ 个。此外，由 [36,引理 3.4] ，我们可以在时间内将它们全部列出

$$O(n^2 k^7 (ed^2)^{2k}) = O(n^2 k^7 \exp(4k\log d)). \tag{13}$$

使用 [22, 定理 6], 的证明$\mathcal{P}_{\mathcal{D},\ \le k}$ 中的算法，给定聚合物列表后，我们可以在时间复杂度为 $\|\Gamma\| \le k$ 的情况下列出所有满足 $\|\Gamma\| \le k$ 的簇 Γ $\mathcal{P}_{\mathcal{D}}$

$$n^2\exp\left(O(k\log d)\right). \tag{14}$$

现在，我们要计算这些聚合物和簇的权重。给定一个非装饰聚合物 A，回忆其权重为

$$\omega(A) \coloneqq \sum_{B \subseteq N(A)} \frac{\lambda^{|A|+|B|}}{(1+\lambda)^{|N(A)|}} e^{-\beta |E(A,B)|}.$$

如果 $|A| \le k$，那么 $N(A)$ 至多有 2^{kd} 个子集；给定这样的一个子集后，边的数量 $|E(A, B)|$ 即可确定。因此，我们可以在 $\exp(O(kd))$ 时间内计算大小至多为 k 的聚合物 A 的权重。

要计算一个簇的权重，我们需要其所包含的聚合物的权重，以及其不相容图的 Ursell 函数 ϕ。给定两个聚合物 A_1、$A_2 \in \mathcal{P}_{\mathcal{D}}$、$\le k$，检查它们是否不相容，等价于检查 $A_1 \cup A_2$ 是否在 G^2 中连通。由于 $|A_1 \cup A_2| \le 2k$，且 G^2 中的度至多为 d^2，使用广度优先搜索，可以在 $\mathcal{C}_{\mathcal{D}}$、$\le k$ 中以 $O(k^3 d^2)$ 时间构造一个簇的不相容图。根据 [22, 引理 5]（关于 Tutte 多项式的更一般结果，另见 [30]），可以在 $\exp(O(k))$ 时间内计算不相容图的 Ursell 函数。结合计算单个聚合物权重所需的 $\exp(O(kd))$ 时间，我们因此可以在至多以下时间内计算一个满足 $\|\Gamma\| \le k$ 的簇 Γ 的权重：

$$k \exp(O(kd)), \tag{15}$$

由于 Γ 至多包含 k 个来自$\mathcal{P}_{\mathcal{D},\le k}$的聚合物。

结合（13）、（14）和（15），我们得到一个运行时间为

$$\left(n^2 k^7 \exp(4k \log d) + n^2 \exp(O(k \log d))\right) \cdot k \exp(O(kd)) = n^2 k^8 \exp(O(kd)),$$

由此完成引理4.2的证明。

4.3. **对聚合物构型进行采样——引理 4.3的证明。** 在本小节中，给定一个 ^ 缺陷侧 $\mathcal{D}$，我们的目标是按照分布 Θ 从 $\Omega_{\mathcal{D}}$ 中采样一个聚合物构型$\nu_{\mathcal{D}}$。

令 $\epsilon \ge \epsilon_0 = \exp\left(-\frac{n}{d^{\kappa+4}} \log d\right)$。根据引理 4.4，我们得到某个 $k_0 \ge 1$ 使得

$$|\Xi_{\mathcal{D}} - L_{\mathcal{D},\le k_0}| \le \frac{\epsilon}{16}. \tag{16}$$

为了对聚合物构型进行采样，我们采用了 [22] 中的一个过程（ [25]中也使用了该过程）。给定 ^ 一个聚合物构型 $\Theta \in \Omega_{\mathcal{D}}$ 和一个顶点集合 S，我们记

$$\hat{\mathcal{P}}(\hat{\Theta}, S) \coloneqq \{(A,B) \in \hat{\mathcal{P}}_{\mathcal{D}} : A \cap S = \varnothing, (A,B) \text{ compatible with } \hat{\Theta}\}.$$

^ 这是聚合物集合 (A, B)，使得 A 不与 S 相交，且 $\Theta \cup \{(A, B)\}$ 仍是一个装饰聚合物构型。回顾：对任意聚合物集合 $\mathcal{P}$，其聚合物构型集合记为 $\Omega(\mathcal{P})$，其聚合物模型配分函数 $Z(\mathcal{P})$由下式给出

$$Z(\mathcal{P}) \coloneqq \sum_{\Theta \in \Omega(\mathcal{P})} \prod_{(A,B) \in \Theta} \omega(A,B).$$

^ 使用这种方法，我们可以通过以下步骤从 $\nu_{\mathcal{D}}$ 中采样一个聚合物构型 Θ。

算法 2 用于 $\nu_{\mathcal{D}}$ **的采样器**

ˆ (1) 固定 G顶点 $v_1, ..., v_n$ 的一个排序。令 $\Theta_0 := \varnothing$，且 $S_0 := \varnothing$。(2) 对于 $j = 0, 1, \dots, n-1$: ˆ ˆ (a) 从 $\mathcal{P}(\Theta_j, S_j)$ 中收集所有满足 $v_{j+1} \in A$ 的带装饰聚合物 (A, B)，并将它们放入列表 $\mathcal{L}(j)$ 中。(b) 按照概率 ˆ ˆ 从 $\mathcal{L}(j) \cup \{\varnothing\}$ 中采样一个聚合物。(c) 令 $\Theta_{j+1} := \Theta_j \cup \{(A, B)\}$，且 $S_{j+1} := S_j \cup \{v_{j+1}\}$。 ˆ ˆ (3) 输出 $\Theta = \Theta_n$。

$$\mathbb{P}((\mathbf{A}, \mathbf{B}) = (A, B)) := \frac{\omega(A, B) \cdot Z\big(\hat{\mathcal{P}}(\hat{\Theta}_j \cup (A, B), S_j \cup \{v_{j+1}\})\big)}{Z\big(\hat{\mathcal{P}}(\hat{\Theta}_j, S_j)\big)}. \tag{17}$$

ˆ根据 [22, 引理 11], ，输出 Θ 的分布恰好为 $\nu_{\mathcal{D}}$。然而，为了实现多项式时间，我们需要修改算法 2，并接受对 $\nu_{\mathcal{D}}$的足够好的近似。

ˆ 固定 $\epsilon > 0$。根据 (16)，从 $\Omega_{\mathcal{D}}$ 中按分布 $\nu_{\mathcal{D}}$ 采样得到的聚合物构型，以至少 $1 - \frac{\epsilon}{16}$ 的概率包含于 $\Omega_{\mathcal{D}, \leq k_0}$ 中。因此，只需考虑来自 ˆ$\mathcal{P}_{\mathcal{D}, \leq k_0}$的聚合物。于是，我们将步骤 (a) 修改如下：构造列表 $\mathcal{L}(j)$ 时，只考虑大小至多为 k_0 的聚合物。将这个修改后的列表记为 $\mathcal{L}_{\leq k_0}(j)$。

ˆ ˆ 为了计算聚合物列表 $\mathcal{L}_{\leq k_0}(j)$，其中聚合物 $(A, B) \in \mathcal{P}_{\mathcal{D}, \leq k_0}(\Theta_j, S_j)$ 满足 $v_{j+1} \in A$，我们使用第 4.2 节中描述的过程，计算出 $\mathcal{P}_{\mathcal{D}, \leq k_0}$ 中的所有聚合物，然后从该列表中删除与 Θ_j 不相容的聚合物，其中 $A \cap S_j \neq \varnothing$ 或 $v_{j+1} \notin A$。也就是说，根据 (13)，我们可以在 $O(n^2 k_0^7 \exp(4k_0 \log d))$ 时间内列出 ˆ$\mathcal{P}_{\mathcal{D}, \leq k_0}$ 中的所有聚合物。给定一个来自 $(A, B) \in \mathcal{P}_{\mathcal{D}, \leq k_0}$ 的聚合物 ˆ，接下来需要检查 $A \cap S_j = \varnothing$、$v_{j+1} \in A$，以及 (A, B) 是否与 Θ_j 相容。前两个条件可以通过遍历 A 中至多 k_0 个顶点轻松检查。对于第三个条件，我们遍历顶点 $v \in \bigcup_{(C,D) \in \hat{\Theta}_j} C$，并

ˆ 检查 $\mathrm{dist}(v, A) \leq 2$。总而言之，检查来自 $\mathcal{P}_{\mathcal{D}, \leq k_0}$ 的聚合物 (A, B) 是否属于 $\mathcal{L}_{\leq k_0}(j)$，需要耗时 $O(n^2)$。综上，步骤 (a) 需要耗时 $O(n^4 k_0^7 \exp(4k_0 \log d))$。

现在我们继续进行步骤 (b)。(17) 中的概率表示在已知 $\Theta_j \subseteq \Theta$ 的条件下，将 (A, B) ˆ ˆ ˆ 添加到 Θ 的概率。为了近似这个概率，我们使用 [38] 中的一个基本恒等式（另见 [22]），该恒等式指出，对于任意顶点 v,

$$Z\big(\hat{\mathcal{P}}(\hat{\Theta}, S)\big) = Z\big(\hat{\mathcal{P}}(\hat{\Theta}, S \cup \{v\})\big) + \sum_{\substack{(A,B) \in \hat{\mathcal{P}}(\hat{\Theta}, S) \\ v \in A}} \omega(A, B) \cdot Z\big(\hat{\mathcal{P}}(\hat{\Theta} \cup (A, B), S \cup \{v\})\big). \tag{18}$$

第一项对应于空多聚体。令

$$Y(A, B) := \omega(A, B) \cdot Z\big(\hat{\mathcal{P}}(\hat{\Theta}_j \cup (A, B), S_j \cup \{v_{j+1}\})\big)$$

利用 (18)，我们可以将 (17) 中的概率改写为

$$\mathbb{P}((\mathbf{A}, \mathbf{B}) = (A, B)) = \frac{Y(A, B)}{Y(\varnothing) + \sum_{\substack{(C,D) \in \hat{\mathcal{P}}(\hat{\Theta}_j, S_j) \\ v_{j+1} \in C}} Y(C, D)}.$$

为了近似这个概率，我们计算该等式中各项 $Y(A, B)$ 的精细近似值。令 $\epsilon' := \frac{\epsilon^2}{160 n^2}$。给定所有满足 $(A, B) \in$ ˆ$\mathcal{P}($ ˆ$\Theta_j, S_j)$ 的 ϵ'-近似值 $Y(A, B)$，根据引理 5.3]，我们可以得到 (17) 的一个 $\frac{\epsilon}{8}$ -近似值。为了得到 $Y(A, B)$ 的这种 ϵ'-近似值，我们需要计算权重 $\omega(A, B)$，以及形如 $Z\big($ ˆ$\mathcal{P}($ ˆ$\Theta_j, S_j)\big)$ 的配分函数的良好近似值，其中 ˆ $\Theta_j \in$ ˆ$\Omega_{\mathcal{D}}$ 且 $S_j \subseteq V$。

ˆ 所有正在考虑的聚合物均来自 $\mathcal{P}_{\mathcal{D}, \leq k_0}$，其权重可在 $O(k_0 d)$ 时间内计算。要计算配分函数 $Z\big($ ˆ$\mathcal{P}($ ˆ$\Theta_j, \ S_j)\big)$ 的近似值，

ˆˆ 注意，正在考虑的聚合物模型 $\mathcal{P}(\Theta_j, S_j)$ 是原始 ˆˆ 聚合物模型 $\mathcal{P}_{\mathcal{D}}$ 的子集。不过，第 4.2 节中的所有结果都适用于 $\mathcal{P}_{\mathcal{D}}$ 的子集。也就是说，我们可以像引理 4.2 中那样，通过截断簇展开，高效地近似每个配分函数 $Z\big(\hat{\mathcal{P}}(\hat{\Theta}_j, S_j)\big)$。关于这一论证的正式处理，请参见 [22, 引理 2.8]。请注意，我们要求的是 ϵ'-近似值；根据引理 4.4，可以找到 $k_0' \in \{\lfloor d^3 \log n \rfloor, \lfloor d^3 \log n + 1 \rfloor, \lceil d^{\kappa+1} \log \left(\frac{160 n^3}{\epsilon^2 d^{\kappa+1}}\right) \rceil\}$，使得 $Z\big(\hat{\mathcal{P}}(\hat{\Theta}_j, S_j)\big)$ 的近似误差至多为 ϵ'，且只需取其簇展开的前 k_0' 项。像引理 4.2 中那样，截取前 k_0' 项可在 $O(n^2 k_0'^8 \exp(O(k_0' d))$ 时间内完成。

ˆˆ 综合以上结果，我们可以在时间$O(n^2 k_0'^8 \exp(O(k_0' d))$内计算单个$(A, B) \in \mathcal{P}(\Theta_j, S_j)$对应的 $Y(A, B)$，而这样的聚合物至多有 $O(n^2 k_0^7 \exp(4 k_0 \log d))$个，因为 ˆˆˆ $(A, B) \in \mathcal{P}(\Theta_j, S_j) \subseteq \mathcal{P}_{\mathcal{D}, \le k_0}$。因此，步骤(b)可以在时间

$$O(n^4 k_0^7 k_0'^8 \exp(O(k_0' d)).$$

由于步骤(2)中的循环遍历所有 n个顶点，因此，对步骤(a)和(b)作出修改后的算法 2 的运行时间为

$$O\big(n^5 k_0^7 k_0'^8 \exp\left(O(k_0' d)\right)\big) = \left(\frac{n}{\epsilon}\right)^{O(d^{\kappa+2})},$$

其中，等式是将 k_0, k_0' 的可能取值代入得到的，正如定理 1.4 的证明中所做的那样。注意到 $\kappa < 2$，引理 4.3 的证明即告完成。

5. Discussion and Open Problems

本文排除了 Glauber动力学这一自然的采样算法，证明它无法作为高效采样器，用于一大类二部正则扩展图上的反铁磁伊辛模型。这将 Galvin 和 Tetali 关于硬核模型的结果 [19] 推广了。由此自然产生了一些问题。首先，我们猜想，所用的容器引理可以推广至 $\lambda(1-e^{-\beta}) \ge \tilde{\Omega}(1/d)$，正如文献 [16] 中对硬核模型所作的猜想。若能做到这一点，慢混合结果便可推广至这一参数范围。

问题 5.1. 对于 $G \in \mathcal{H}(n, d, \Delta_2, \kappa)$，只要 $\lambda(1-e^{-\beta}) = \tilde{\Omega}(1/d)$，反铁磁伊辛模型的*Glauber*动力学是否会出现指数级缓慢混合?

这在多对数因子范围内是最优的，因为对于任何反铁磁二自旋系统，在唯一性阈值以下，Glauber动力学都能快速混合 [7, 34]。该阈值为$\sim e/d$ 硬核模型中的阈值。请注意，在我们的伊辛模型版本中，若问题 5.1的答案为是，也会得到最优界：对于我们选取的参数，唯一性方程的解为 ˆ $x_d \le \lambda$，这意味着当$d\lambda(1-e^{-\beta}) < 1$ 时，我们处于唯一性区域（见 [34, 定义 2。3]），因此Glauber动力学会快速混合。

另一方面，方程 (7) 告诉我们，只需界定平衡集合的贡献 $\tilde{\omega}(\mathcal{S}_{bal})$，而证明本身则使用容器引理来界定一个大得多的族的权重。由于这一步可能并非最优，因此不妨探讨能否直接为平衡集合给出更好的界，以回答问题5.1，并相应地绕过或修改容器引理。

问题 5.2。 设 $G \in \mathcal{H}(n, d, \Delta_2, \kappa)$。对于 $\alpha := \lambda(1-e^{-\beta}) = \tilde{\Omega}(1/d)$，是否成立?

$$\sum_{\substack{S \subseteq V(G) \\ |S \cap \mathcal{E}| = |S \cap \mathcal{O}|}} \lambda^{|S|} e^{-\beta |S|} \le (1+\lambda)^{n/2} \exp\left(-n \frac{\alpha^2}{poly(d)}\right)?$$

˜专门考虑硬核模型时，对于 $\lambda = \Omega(1/d)$，是否有

$$\sum_{\substack{I \in \mathcal{I}(G) \\ |I \cap \mathcal{E}| = |I \cap \mathcal{O}|}} \lambda^{|I|} \le (1+\lambda)^{n/2} \exp\left(-n \frac{\lambda^2}{poly(d)}\right)?$$

我们注意到，这里写出指数项中的平方项只是为了类比先前的结果；只要它以关于n的指数速度衰减，实际结果也可以不同。关于计算超立方体 Q^d 中的平衡独立集数量这一问题，过去已有研究，Park [35] 证明平衡独立集的数量为

$$\mathrm{bis}(Q^d) = 2^{\left(1-\Theta\left(\frac{1}{\sqrt{d}}\right)\right)2^{d-1}},$$

与问题5.2 一致： $\lambda = 1$。

从现在起，为了便于表述，我们重点讨论硬核模型，但感兴趣的读者可以将所有内容重新表述为反铁磁伊辛模型。关键在于，Glauber动力学的局部性在奇数占多数集合与偶数占多数集合之间造成了一个瓶颈。另请参见 [24, 第 14]节，其中在更一般的框架下讨论了环面上的同一现象。由此引出一个问题：这是否是唯一的瓶颈，也就是说，是否是快速混合的唯一障碍？文献 [22, 25] 中有人提出，均匀随机选取一个基态，然后从该基态开始运行Glauber动力学，即可得到一个多项式时间近似采样器。沿着类似的思路， [5, 定理 13] 证明，当 λ相对于 Δ为多项式级别的大时，对于有界度图，将Glauber动力学限制在状态空间的适当部分内可以实现多项式时间混合。

这里，我们提出一种马尔可夫链，利用二分图的对称性，在 Glauber 动力学中加入全局移动，使多数为奇数的集合与偶数占多数集合相互翻转。因此，如果这确实是唯一的瓶颈，它的混合速度就应当很快（或更快）。我们只针对超立方体上的硬核模型陈述这一结论。

对于集合 $S \subseteq V(Q^d)$，令 $S + e_1$ 表示将 S 中每个 $v \in S$的第一个坐标翻转后得到的顶点集。带翻转的 *Glauber* 动力学定义如下。假设时刻 t我们处于状态 $X_t := I$，则状态 X_{t+1} 按以下方式确定。

(1) 均匀随机地选择一个顶点 v。(2) 以概率 $\frac{\lambda}{1+\lambda}$ 令 $S' := S \cup \{v\}$，以概率 $\frac{1}{1+\lambda}$ 令 $S' := S$。(3) 如果 S' 是独立集，则令 $S'' := S'$；否则，令 $S'' := S$。(4) 以相同的概率 $1/2$，令 $X_{t+1} := S''$ 或 $X_{t+1} := S'' + e_1$。

换言之，该链先执行一步 Glauber 动力学，然后以概率 $1/2$ 将独立集“翻转”到二分划分的另一侧。这相当于考虑转移矩阵为 $\frac{1}{2}(I + I_\sigma)P$ 的链，其中 P 是 Glauber 动力学的转移矩阵，I_σ 是置换矩阵，其列由状态空间中的元素索引，对应于操作 $S \to S + e_1$。注意，平稳分布 π 仍然是吉布斯测度 $\mu_{\lambda,\,\beta}$：自同构 $v \to v + e_1$ 保持 Q^d 上各集合的吉布斯测度（对于所有集合 S，都有 $\pi(S) = \pi(S + e_1)$），因此 $\pi I_\sigma = \pi$ 和 $\pi \cdot \frac{1}{2}(I + I_\sigma)P = \pi$。

将结果专门应用于超立方体 Q^d（其中 $n = 2^d$）时， [5] 的结果只能给出 $\lambda \geq n^{\Omega(\log\log n)}$ 的受限 Glauber 动力学混合时间的准多项式界，因此我们不能排除出现另一个瓶颈的可能性。由此，我们针对超立方体提出以下问题。

问题 5.3. 当 λ 有界时，超立方体上的带翻转 *Glauber* 动力学能否在多项式时间内混合？

我们施加的全局移动以关键方式利用了图的对称性：它利用图的一个自同构，将二分划分的两侧映射到彼此，从而打破瓶颈。也可以使用另一个这样的自同构（例如，将某个其他坐标加一），甚至可以根据某种分布来选择（例如，均匀随机地选择一个坐标进行翻转）。

另一方面，目前尚不清楚超立方体上是否存在多项式时间近似采样器或完全多项式随机近似方案（FPRAS）；甚至这个特定实例上的问题也可能很难。因此，我们提出以下问题。

问题 5.4。是否存在一种完全多项式随机近似方案，用于计算超立方体中独立集的数量？

Acknowledgments

作者谨向 Will Perkins 致谢，感谢他参与了富有成效的讨论。本研究部分得到了奥地利科学基金（FWF） [10.55776/F1002] 的资助。为实现开放获取，作者已对本次投稿所产生的任何经作者接受的稿件版本采用 CC BY 公共版权许可。

References

[1] J. Balogh、R. I. Garcia 和 L. Li。布尔格中间两层的独立集。 *Journal of Combinatorial Theory Series A* 178 105341, 2021 , , : 。[2] J.-Y. Cai、A. Galanis、L. A. Goldberg、H. Guo、M. Jerrum、D. ˇStefankoviˇc 和 E. Vigoda。树上非唯一性区域内二部有界度图上的 2 *Journal of Computer and System Sciences* 82 5 690 711, 2016 自旋系统的#BIS-困难性。, ( ): – 。[3] P. Chebolu、L. A. Goldberg 和 R. Martin。稳定匹配近似计数的复杂性。 *Theoretical Computer Science*, 437:35–68, 2012年。[4] X. Chen、W. Feng、X. Zhang 和 Y. Yin。通过谱独立性实现任意度下Glauber动力学的快速混合，载于 *Proceedings of the 62nd Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science – FOCS 2021* 137 148 2022 ，第 – 页。。[5] Z. Chen、A. Galanis、L. A. Goldberg、W. Perkins、J. Stewart 和 E. Vigoda。通过马尔可夫链实现低温下的快速算法。 *Random Structures & Algorithms*, 58(2):294–321, 2021。[6] Z. Chen 和 T. Jiang。改进临界硬核模型的混合。载于 *International Workshop and International Workshop on Approximation Randomization and Combinatorial Optimization. Algorithms and Techniques* 2025 , , , 。[7] Z. Chen、K. Liu 和 E. Vigoda。通过压缩将Glauber动力学的快速混合扩展至唯一性区域。 *SIAM Journal on Computing*, 52(1):196–237, 2023年。[8] M. B. R. Chowdhury、S. Ganguly 和 V. Winstein。渗流超立方体中独立集的高斯到对数正态的转变。 *arXiv:2410.07080*, 2024年。[9] B. A. Cipra。伊辛模型简介。 *The American Mathematical Monthly* 94 10 937 959, , ( ): – 。1987 [10] A. Coja-Oghlan、P. Loick、B. F. Mezei 和 G. B. Sorkin。随机正则图上的伊辛反铁磁体与最大割。英文。 *SIAM Journal on Discrete Mathematics*, 36(2):1306–1342, 2022年。[11] M. Collares、J. Erde、A. Geisler 和 M. Kang。扩展二部正则图中的独立集计数。arXiv:2503.22255, 2025年。[12] R. L. Dobrushin。低温下伊辛模型半不变量的估计。 *American Mathematical Society–Series 2* 177 59 82, 1996 *Translations of the* , : – 。[13] M. Dyer 、 M. Heinrich 、 M. Jerrum 和 H. M¨uller。线图上反铁磁伊辛模型的多项式时间近似算法。 *Combinatorics, Probability and Computing*, 30(6):905–921, 2021年。[14] S. Friedli 和 Y. Velenik。 *Statistical mechanics of lattice systems. A concrete mathematical introduction*。剑桥：剑桥大学出版社，2018年。[15] A. Galanis、L. A. Goldberg 和 M. Jerrum。近似计数 H *SIAM Journal on Computing* 45 3 680 711, 2016 着色是#BIS 困难问题。, ( ): – 。[16] D. Galvin。离散超立方体中随机独立集的阈值现象。 *Combinatorics, probability and computing* 20 1 27 51, 2011 , ( ): – 。[17] D. Galvin。离散超立方体中的独立集。 *arXiv:1901.01991*, 2019年。[18] D. Galvin 和 J. Kahn。关于 $\mathbb{Z}^d$上的硬核模型相变。 *Combinatorics Probability and Computing* 13 2 137 164, 2004 , , ( ): – 。[19] D. Galvin 和 P. Tetali。正则二部图上硬核模型的Glauber动力学慢混合。 *Random Structures & Algorithms*, 28(4):427–443, 2006 年。[20] A. Geisler 、 M. Kang 、 M. Sarantis 和 R. Wdowinski。通过伊辛模型计数渗流图中的独立集。arXiv:2504.08715, 2025年。[21] L. A. Goldberg 和 M. Jerrum。近似计算铁磁性Potts模型的配分函数。 *Journal of the ACM (JACM)*, 59(5):1–31, 2012年。[22] T. Helmuth、W. Perkins 和 G. Regts。算法Pirogov-Sinai理论。 *Probab. Theory Relat. Fields*, 176 3 4 851 895, 2020 (-): – 。[23] N. Huang、W. Perkins 和 A. Potechin。随机图上反铁磁伊辛模型的采样困难性。载于 *16th Innovations in Theoretical Computer Science Conference (ITCS 2025)*, *Leibniz International Proceedings in Informatics (LIPIcs)*第325卷，61:1–61:23, 2025年。[24] M. Jenssen 和 P. Keevash。来自环面的同态。 *Advances in Mathematics*, 430:109212, 2023年。[25] M. Jenssen、P. Keevash 和 W. Perkins。扩展图上#BIS 困难问题的算法。 *SIAM J. Comput.* 49 4 681 710, 2020 , ( ): – 。

[26] M. Jenssen、A. Malekshahian 和 J. Park。精细化的图容器引理及其在二部扩展图硬核模型中的应用。 *arXiv:2411.03393*, 2024年。[27] M. Jenssen 和 W. Perkins。重新探讨超立方体中的独立集。 *Journal of the London Mathematical Society* 102 2 645 669, 2020 , ( ): – 。[28] M. Jenssen、W. Perkins 和 A. Potukuchi。通过图容器近似计数二部图中的独立集。 *Random Structures & Algorithms*, 63(1):215–241, 2023年。[29] M. Jerrum 和 A. Sinclair。伊辛模型的多项式时间近似算法。 *SIAM Journal on Computing* 22 5 1087 1116, 1993 , ( ): – 。[30] M. Koivisto、A. Bj¨orklund、T. Husfeldt 和 P. Kaski。以顶点指数时间计算Tutte多项式。载于 *Proceedings of the 49th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science – FOCS 2008* 677 686, 2008 , 第 – 页。[31] R. Koteck´y 和 D. Preiss。抽象聚合物模型的簇展开。*Communications in Mathematical Physics* 103 491 498, 1986 , : – 。[32] G. Kronenberg 和 Y. Spinka。超立方体随机子图中的独立集。 *arXiv:2201.06127*, 2022 年。[33] D. A. Levin 和 Y. Peres。 *Markov chains and mixing times*，第 107 卷。美国数学会，2017 年。[34] L. Li 、P. Lu 和 Y. Yin。自旋系统中延伸至唯一性区域的关联衰减。载于 *Proceedings of the 24th Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms – SODA 2013* 67 84 2013 , 第 – 页。SIAM, 。[35] J. Park。关于汉明立方体中平衡独立集数量的注记。 *The Electronic Journal of Combinatorics* 2 34, 2022 :P – 。[36] 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。载于 *Extended abstracts of the ninth European conference on combinatorics graph theory and applications EuroComb 2017* 971 977 2017 ,,, 第 – 页。。[37] R. Peled 和 Y. Spinka。离散自旋系统中的长程有序。 *arXiv:2010.03177*, 2020年。[38] A. D. Scott 和 A. D. Sokal。排斥晶格气体、独立集多项式与Lov´asz局部引理。 *Journal of Statistical Physics*, 118(5-6):1151–1261, 2005年。[39] N. Sun 和 A. Sly。 *d*正则图上二自旋模型计数的计算困难性。载于 *Proceedings of the 53rd Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science – FOCS 2012*，第361–369页。加利福尼亚州洛斯阿拉米托斯：IEEE计算机学会，2012年。

Appendix A. Equivalence to the Ising model

在本附录中，我们给出一个初等证明，说明本文所研究的自旋模型等价于反铁磁伊辛模型的经典版本。关于二自旋系统等价性的更一般结果可见于 [39]。回顾一下，给定图 $G = (V, E)$，我们所研究的模型抽取子集 $S \subseteq V$（它可以以显然的方式视为一个 $\{0,1\}$-构型），其概率正比于 $\lambda^{|S|}e^{-\beta|E(S)|}$。在本节中，我们将该模型称为晶格气体模型。在经典伊辛模型中，构型是自旋构型$\sigma \in \{-1,+1\}^V$，其权重由下式给出

$$\exp\left(J\sum_{uv\in E}\sigma(u)\sigma(v) + h\sum_{w\in V}\sigma(w)\right),$$

其中 $J \in \mathbb{R}$是相互作用系数，$h \in \mathbb{R}$ 是外部磁场。指数中该表达式的相反数称为哈密顿量。该伊辛模型称为铁磁，若 $J > 0$；称为反铁磁，若 $J < 0$。

命题 A.1. 在一个 d-正则图 G上，逸度为 $\lambda > 0$ 、逆温度为 β的晶格气体模型等价于满足 $J = -\frac{\beta}{4}$和 $h = \log_2 \lambda - \frac{\beta d}{4}$的经典伊辛模型。

证明。设 $S \subseteq V$是晶格气体模型的一个构型。哈密顿量定义为

$$H(S) = \beta|E(S)| - (\log\lambda)|S| = \beta\sum_{uv\in E}\mathbb{1}_{u\in S}\mathbb{1}_{v\in S} - (\log\lambda)\sum_{w\in S}\mathbb{1}_{w\in S}.$$

现在令 $\sigma(v) := 2\mathbb{1}_{v\in S} - 1$。这定义了一个到经典伊辛模型构型的双射，其中 $\sigma(v) = 1$ 当且仅当 $v \in S$。代入 $\mathbb{1}_{v\in S} = \frac{1}{2}(\sigma(v) + 1)$，得到

$$H(S) = \frac{\beta}{4}\sum_{uv\in E}(\sigma(u)\sigma(v) + \sigma(u) + \sigma(v) + 1) - \frac{\log\lambda}{2}\sum_{w\in V}(\sigma(w) + 1).$$

由于 G 是 d-正则的，我们得到

$$H(S) = \frac{\beta}{4}\sum_{uv\in E}\sigma(u)\sigma(v) + \left(\frac{\beta d}{4} - \frac{\log\lambda}{2}\right)\sum_{w\in V}\sigma(w) + \left(\frac{\beta d}{8} - \frac{\log\lambda}{2}\right)n,$$

其中 $n = |V|$。最后一项与构型无关，因此不会影响最终得到的吉布斯测度。□

Appendix B. The Container Lemma

在本附录中，我们证明引理 3.2，该引理给出了利用图容器对 $\mathcal{S}_{big,\mathcal{D}}$ 的权重 $\tilde{\omega}(\mathcal{S}_{big,\mathcal{D}})$ 的上界。我们假设所研究的图为 $G \in \mathcal{H}(n, d, \Delta_2, \kappa)$，其最大共度 $\Delta_2 \geq 1$ 为常数，且 $0 \leq \kappa < 2$ 为常数。以下定义对于构造容器至关重要。

定义 B.1. 设 $1 \leq \varphi \leq d-1$，且设 $A \subset \mathcal{D}$。A 的一个 φ-近似是满足下列条件的集合 $F' \subseteq \mathcal{D}$

$$N(A)^{\varphi} \subseteq F' \subseteq N(A) \qquad and \qquad N(F') \supseteq [A],$$

其中 $N(A)^{\varphi} := \{v \in N(A) : d_{[A]}(v) > \varphi\}$。

定义 B.2. 设 $1 \leq \psi \leq d-1$。一个 ψ-近似 (F, H) 是顶点集$F \subseteq \mathcal{D}, H \subseteq \mathcal{D}$，满足对某个集合 $A \subseteq \overline{\mathcal{D}}$,

$$F \subseteq N(A) \quad and \quad H \supseteq [A],$$

$$d_F(u) \geq d(u) - \psi, \quad \forall u \in H,$$

$$d_{\mathcal{O}\setminus H}(v) \geq d(v) - \psi, \quad \forall v \in \mathcal{E} \setminus F.$$

在这种情况下，我们称(F, H) 近似 A，并将此关系记为 $A \approx (F, H)$。

以下是将 Galvin [17] 改编到所考虑的集合并非 2-连通 的情形。当然，这一推广并非对所有参数范围都成立，但对于我们所考虑的大集合是成立的。回想，对于 $\mathcal{D} \in \{\mathcal{O}, \mathcal{E}\}$ 与 $a,\ b \in \mathbb{N}$,

$$\mathcal{G}_{\mathcal{D}}(a,b) := \{A \subseteq \mathcal{D} : |[A]| = a, |N(A)| = b\}.$$

引理 B.3。 设 $t := b - a$。若 $b \geq n/d$，则存在一个由以下数对组成的族 $\mathcal{A}\,(F, H)$，满足

$$|\mathcal{A}| \leq \exp\left[O\left(\frac{b\log^2 d}{d^2} + \frac{t\log^2 d}{d}\right)\right],$$

使得每个 $A \in \mathcal{G}(a,b)$ 在 $\mathcal{A}$ 中都有一个 $d/2$-近似 (F, H)。

熟悉该方法的读者会注意到，$|\mathcal{A}|$的上界前缺少一个因子 $|\mathcal{D}|$ 。这并非改进，而是被指数项所主导。容器族 $\mathcal{A}$ 分两步构造。首先构造一个粗略的 φ-近似。然后将其细化为一个 ψ-近似。更准确地说，引理 B.3 可由以下两个引理结合推出。

引理 B.4。 存在一个族 $\mathcal{V} = \mathcal{V}(\varphi)$，使得每个集合 $A \in \mathcal{G}_{\mathcal{D}}(a,b)$ 都有一个 φ-近似，其中 $\varphi = d/2$ 属于 $\mathcal{V}$，并且

$$|\mathcal{V}| = \exp\left[O\left(\left(\frac{b\log d}{d^2} + \frac{t\log d}{d}\right)\log\left(\frac{nd^2}{b\log d}\right) + \frac{t\log^2 d}{d}\right)\right].$$

注意，$|\mathcal{V}|$ 的界会给出一个指数项 n，除非 b 非常大；而这正是我们的情况。

引理 B.5. 对于任意 $F' \in \mathcal{V}(\phi)$，存在一个族 $\mathcal{W} = \mathcal{W}(F')$，使得每个 $A \in \mathcal{G}(a,b)$的 φ-近似为 F'，在 $\mathcal{W}$ 中都有一个 ψ-近似，其中 $\varphi = \psi = d/2$，并且

$$|\mathcal{W}| = \exp\left(O\left(\frac{t\log d}{d}\right)\right).$$

引理 B.3可由引理 B.4和 B.5结合 $|\mathcal{A}| \leq |\mathcal{V}| \cdot |\mathcal{W}|$和 $b \geq n/d$立即得到。引理 B.5 的证明与 [17], 中的证明相同，只需相应地更改记号并令 $\varphi = \psi = d/2$。我们只给出引理 B.4的证明，并紧密遵循 [17,第 5 节。3]请注意，本节中的记号不会与论文正文中的记号冲突。

引理 *B.4*的证明。 固定某个 $A \in \mathcal{G}_{\mathcal{D}}(a,b)$，并令 $p := \frac{2C\,\text{对数}\,d}{d^2}$，其中 C是稍后确定的常数。选取 $N(A)$的一个 p-随机子集 S。于是 $|S| \sim \mathrm{Bin}(b,p)$，因此

$$\mathbb{E}[|S|] = bp = \frac{2C\log d}{d^2}b. \tag{19}$$

令 $\Omega(S) := E(S,\ \mathcal{D} \setminus [A])$。由于 $|E(N(A)\ \mathcal{D} \setminus [A])| = td$，我们得出

$$\mathbb{E}[|\Omega(S)|] = tdp = \frac{2Ct\log d}{d}. \tag{20}$$

令 $S' :=\ N(A)^{\varphi} \setminus N(N_{[A]}(S))$。按照 [17], 中 (28) 的计算，可以得出 at

$$\mathbb{E}[|S'|] \leq \frac{b}{d^2}, \tag{21}$$

当 C 选取恰当时，且仅取决于图的最大共度。利用马尔可夫不等式以及方程（19）、（20）和（21），至少存在一个 $T_0 \subseteq N\,(A)$ 满足

$$|T_0| \leq \frac{4Cb\log d}{d^2} \quad \text{and} \quad |\Omega(T_0)| \leq \frac{8Ct\log d}{d} \quad \text{and} \quad |T_0'| \leq \frac{4b}{d^2}.$$

令 $L := N(N_{[A]}(T_0)) \cup T_0'$，设 $T_1 \subseteq N(A) \setminus L$ 是由 $(N(A) \setminus L) \cup ([A] \setminus N(L))$ 在图 $[A] \setminus N(L)$ 中诱导出的最小规模覆盖。那么 $F' := L \cup T_1$ 是 A 的 φ-近似。

根据 [17], 中断言 5.7 的证明之后的论证，我们有

$$|T_1| \le \frac{3t\log d}{d-\varphi} = \frac{6t\log d}{d}.$$

令 $T \coloneqq T_0 \cup T_0' \cup T_1$，并记

$$T_{bound} \coloneqq \frac{4Cb\log d}{d^2} + \frac{4b}{d^2} + \frac{6t\log d}{d}.$$

由于 $|T| \le T_{bound}$， T 的选择数至多为

$$\binom{n}{|T|} \le \binom{n}{T_{bound}} \le \exp\left(O\left(\frac{b\log d}{d^2} + \frac{t\log d}{d}\right)\log\left(\frac{nd^2}{b\log d}\right)\right), \tag{22}$$

这里我们用到了（4）、 $k\log(en/k)$ 在 $k \le n$ 上递增这一事实，以及若 $k \ge k'$，则$k\log(en/k) \le k\log(en/k')$。请注意，这里正是与 [17], 中证明的主要区别：该证明利用了关于 T 的选择数的更精细上界，这源于 [17] 中相应集合是 8-链接的。尽管如此，式（22）中的粗略上界已足以满足我们的需要。

一旦选定 T，对于每个 T_0， $T_1 \subseteq T$，至多有 $2^{|T|}$ 种选择，而 T_0' 由 T_0 确定。鉴于 $|T_0| \le {}^{4Cb}\!\log_{d^2}{}^{d}$ 且 $b/t = O(d^\kappa) = O(d^2)$，至多有

$$\binom{\frac{4Cb\log d}{d}}{\le \frac{6Ct\log d}{d}} \overset{(4)}{\le} \exp\left(O\left(\frac{t\log^2 d}{d}\right)\right)$$

$\Omega(T_0)$ 的选择。总而言之，$(T_0, T_0', T_1, \Omega(T_0))$ 的选择数量（因此也包括 F' 的选择数量，因为它完全由这些集合确定）至多为

$$2^{T_{bound}} \exp\left[O\left(\left(\frac{b\log d}{d^2} + \frac{t\log d}{d}\right)\log\left(\frac{nd^2}{b\log d}\right) + \frac{t\log^2 d}{d}\right)\right].$$

由于 $2^{T_{bound}}$ 显然被指数项的第一项所支配，引理 B.4 的证明至此完成。 □

现在，引理 3.4 的证明与以下证明完全相同： [20, 引理 4。2], 即结合[20, 引理 4。5] 与引理 B.3，并注意到 $b \ge a \ge f(\lambda)\frac{n}{2} \ge n/d$。

Appendix C. Proof of Lemma 4.4

在本附录中，我们简述引理 4.4 的证明，说明在簇展开的计算中需要多少项，才能使结果与所需配分函数的差距不超过 $\epsilon/16$。定义

$$\tilde{\alpha} \coloneqq \frac{1+\lambda}{1+\lambda e^{-\beta}}$$

并注意到 $1 < \tilde{\alpha} \le 1+\lambda \le 1+\lambda_0$，且 $\log\tilde{\alpha} \ge \frac{\alpha}{1+\lambda^0}$ 在 [20, 引理 3.2 的证明，见第8], 节中，实际证明的是

$$|L_{\mathcal{D},\ge k}| \le nd^{-(\kappa+1)}\exp\left(-\tilde{g}(k)\right),$$

其中函数 $\tilde{g}$ 由下式给出

$$\tilde{g}(k) \coloneqq \begin{cases} (dk - \Delta_2 k^2)\log\tilde{\alpha} - (\kappa+7)k\log d & \text{if} \quad k \le \frac{d}{\log\log d}, \\ \frac{\sqrt{d}k}{2}\log\tilde{\alpha} & \text{if} \quad \frac{d}{\log\log d} < k \le d^3\log n, \\ \frac{k}{d^{\kappa+1}} & \text{if} \quad k > d^3\log n. \end{cases}$$

我们的目标是找到 k_0，使得$|L_{\mathcal{D},\ge k_0}| \le \epsilon/16$，即，

$$\tilde{g}(k_0) \ge \log\left(\frac{16n}{\epsilon d^{\kappa+1}}\right). \tag{23}$$

注意，在第一种情况下， $\tilde{g}$ 不依赖于 n 而（23）的右端随n增长，因此（23）永远不会成立。在第二种情况下，我们注意到 $\tilde{g}$ 随 k递增。因此，

如果在此范围内，对某个 k 而言（23）成立，那么对 $k_0 = \lfloor d^3 \log n \rfloor$也成立。在第三种情况下，（23）可整理为

$$k_0 \geq d^{\kappa+1} \log\left(\frac{16n}{\epsilon d^{\kappa+1}}\right).$$

因此，在此范围内，我们可以取 $k_0 =$最大值$\{\lfloor d^3$ 对数 $n+1 \rfloor$, $\lceil d^{\kappa+1}$ 对数$\left(\frac{16n}{\epsilon d^{\kappa+1}}\right)\rceil\}$。引理4.4的证明至此完成。

Institute of Discrete Mathematics, Graz University of Technology, Steyrergasse 30, 8010Graz, Austria*Email address*: {geisler,kang,sarantis,wdowinski}@math.tu格拉茨.at