arXiv:2611.32635v1 [math.PR] 24 Nov 2026

正则树上反铁磁波茨模型的精确唯一性阈值

Wei Wu* Yicheng Xu† Kuan Yang‡

2026年11月25日

摘要

我们研究了无限有根 d-元树和无限（$d+1$）-正则树上 q态反铁磁波茨模型的吉布斯唯一性，其中 $d \geqslant 1$ 和 $q \geqslant 2$。若一条边的两个端点颜色相同，则其权重为 $p \in [0,1]$，否则权重为 1。我们证明，当且仅当 $p \geqslant p_c := \max\{0, 1-q/(d+1)\}$时存在唯一吉布斯态；但当（$q$，$p$）$=$（$d+1$，0）时除外，从而完成了所有 $d \geqslant 1$ 和 $q \geqslant 2$的唯一性阈值。我们的证明采用树递推的凸势函数，并证明该函数偏离均匀分布时严格递减。结合 Gu、Wu 和 Yang 的结果，我们的定理在 $p_c > 0$时给出了精确的临界幂律。

关键词： 反铁磁波茨模型；Gibbs 测度；正则树；唯一性阈值；幂律衰减。

目录

1 引言 **2**
1.1 主要结果 .4 1.2 证明概要 .5

2 树递推关系与紧性原理 **8**
2.1 根边缘分布与单步迭代 .8 2.2 中心化对数坐标 .9 2.3 紧性原理 .11

3 对数比较与标量化约简 **14**
3.1 精确恒等式 .14 3.2 对数项的比较 .15 3.3 化归为标量不等式 .17

*(W. Wu) 纽约大学上海校区数学系及纽约大学—华东师范大学数学科学研究所（位于纽约大学上海校区），中国。wei.wu@nyu.edu
†(Y. Xu) 纽约大学上海校区数学系，中国。yx4167@nyu.edu
‡(K. Yang) 约翰·霍普克罗夫特计算机科学中心，上海交通大学，中国。kuan.yang@sjtu.edu.cn

4 标量不等式与临界下降 18
4.1 标量函数的形状 .204.2 端点正性 .244.3 当.....时的补偿 $q = d + 1$ .264.4 受约束和与临界下降.33

5 从临界下降到一致边界收敛 34
5.1 边参数的单调性 .345.2 子树根边缘分布的一致收敛 .35**6 Gibbs 唯一性与互补参数范围 38**6.1 有限子树上的唯一性与收敛 .386.2 所述范围之外的非唯一性 .39

1 引言

本文研究正则树上反铁磁（AF） q-状态 Potts 模型的 Gibbs 测度唯一性。我们关注距离根为 n 的边界条件对根处自旋分布的影响。我们的主要结果确定了边参数的精确范围：当 n 趋于无穷时，该影响会消失。特别地，我们建立了反铁磁 Potts 模型的精确唯一性阈值。

设 $\mathbb{T}^d$ 为无限根 d叉树，其中 $d \geqslant 1$。我们用 $*$ 表示其根，用 $\mathbb{T}_n^d$表示高度为 n 的子树。其边界 $\partial\mathbb{T}_n^d$ 由距根 n 的顶点组成，并用 int($\mathbb{T}_n^d$) 表示其内部。沿用 [11],中树的字典记号，我们将距根 k的顶点 u与 $\{1,\ldots,d\}$上的一个长度为 $|u| = k$的字对应。根是空字，而 u的子节点为 $u1$、.....、ud。于是可以写作 $\mathbb{T}_n^d := \cup_{k=0}^n \{1,\cdots,d\}^k$和$\mathbb{T}^d := \cup_{k=0}^\infty \{1,\cdots,d\}^k$。当两个顶点相邻时，我们使用记号 $u \sim v$。

设 $q \geqslant 2$为颜色数，并记作 $[q] = \{1,\ldots,q\}$。对于自旋构型$\sigma : \mathbb{T}_n^d \to [q]$，令 $M(\sigma)$ 表示单色边的数量，也就是端点颜色相同的边。给定边界条件 $\xi : \partial\mathbb{T}_n^d \to [q]$ 和边参数$p \in [0,1]$，σ 的权重定义为

$$W_{n,p,q}^{\xi}(\sigma) = p^{M(\sigma)} \mathbf{1}_{\{\sigma|_{\partial\mathbb{T}_n^d} = \xi\}}. \tag{1.1}$$

归一化这些权重后，得到 $\mathbb{T}_n^d$ 边界条件为 ξ的 Potts 测度，

$$\mu_{n,p,q}^{\xi}[\sigma] = \frac{W_{n,p,q}^{\xi}(\sigma)}{Z_{n,p,q}^{\xi}}, \qquad Z_{n,p,q}^{\xi} = \sum_{\sigma \in [q]^{\mathbb{T}_n^d}} W_{n,p,q}^{\xi}(\sigma). \tag{1.2}$$

对于 $0 < p < 1$，由于每条单色边都会使权重乘以因子 p，因此相互作用倾向于使相邻顶点具有不同的颜色。在零温度（$p = 0$）下，这变为所有延拓 ξ 的合法着色的均匀分布，其中约定 $0^0 = 1$。如果 ξ 满足 $Z_{n,\,p,\,q}^{\xi} > 0$，我们称边界条件为可容许的。注意，当 $p > 0$ 时，所有边界条件都是可容许的。在全文中，极值均取遍可容许边界条件，并且将 d，q，p 固定，令 n 趋于无穷。

在无限树上，我们采用 Dobrushin–Lanford–Ruelle定义来定义 Gibbs 测度。对于每个有限顶点集，在给定该集合外部的自旋条件下，集合内部的自旋服从以这些外部值为条件的 Potts分布。在 $p=0$ 下，该测度支撑所有合法着色。

统计物理中的一个基本问题是：给定温度下的相互作用是否决定唯一的平衡态，这也称为 Gibbs 测度的唯一性/非唯一性。在唯一性的情况下，无论边界处固定了哪些颜色，任意给定有限区域内自旋的边缘分布都会随着该区域到边界的距离增加而趋于同一个极限。Gibbs 测度的共存意味着，远处自旋的选择仍然可以在局部被检测到。随着温度变化，唯一性向非唯一性的转变标志着相变。

对于正则树上的 Potts 模型，唯一性可以通过根处边缘分布的收敛性来刻画 [8, 引理 1。3]。当 n 趋于无穷时，该边缘分布必须一致地收敛到均匀分布，其中一致性是相对于 $\partial\mathbb{T}_n^d$上所固定的自旋而言的。由对称性，只需考虑颜色 1，此时判据变为

$$\lim_{n\to\infty}\max_{\xi}\left|\mu_{n,p,q}^{\xi}[\sigma_*=1]-\frac{1}{q}\right|=0. \tag{1.3}$$

一个民间猜想认为，存在一个临界参数

$$p_c=p_c(d,q):=\max\left\{0,\,1-\frac{q}{d+1}\right\} \tag{1.4}$$

使得在无限 d 元树（或无限的（$d+1$）-正则树）上，Potts 模型的 Gibbs 测度是唯一的，当且仅当 $p\in[p_c,1]$ 且（q，p）$\neq$（$d+1$，0）。为了解释临界参数如何出现，考虑每个 d 子树的根边缘分布与（r，1，……，1）成比例的情形。在每个子节点处，颜色 1 与颜色 2 的概率比为 r。应用一次树递推，可得父节点处的相应比值为 f（r），其中

$$f(r)=\left(\frac{pr+q-1}{r+p+q-2}\right)^d,\qquad f(1)=1,\qquad f'(1)=-\frac{d(1-p)}{p+q-1}.$$

不动点 $r=1$ 表示均匀分布。当 $|f'(1)|<1$ 时，它是局部吸引的，也就是说，当 $p>1-q/(d+1)$ 时是如此。这提示临界参数为 p_c。对于任意边界条件，d子树的边缘分布不必彼此相同，因此它们对根的影响通常无法用单一比值 r来描述，这会产生复杂得多的递推关系。在 $p=p_c>0$处还存在进一步的困难。即使子节点的边缘分布具有上述形式，$f'(1)=-1$成立，线性近似也不会衰减。猜想是，（1.6）对所有 $p\in[p_c,1]$都成立，但 $p=0$ 除外，当 $q=d+1$ 时（见 [11]）。

该猜想已在若干情形下得到证明。在 $p=0$（即适当的 q-着色模型）中，Jonasson [12] 证明了 $q\geqslant d+2$的唯一性。当 $q\leqslant d+1$时，冻结着色给出不同的 Gibbs 测度 [4]。对于正温度，已知只要 $p<p_c$ [17]，就会出现非唯一性。剩下的问题是，对于任意的 q 和 d，唯一性是否一直成立到 p_c，包括在临界点 p_c 本身为正时该点是否也成立。Galanis、Goldberg 和 Yang [9] 证实了 $q=3$和 $q=d=4$的猜想，de Boer、Buys 和 Regts [8] 则证明了 $q=4$ 和 $d\geqslant 4$的猜想。对于更大的 q，Bencs、de Boer、Buys 和 Regts [2]表明，对于每个固定的 $q\geqslant 5$ 以及所有充分大的 d，$p\geqslant p_c$ 均具有唯一性。Chen、Liu、Mani 和 Moitra [6], 证明了 $p\geq 1-\frac{q-1}{d+6}$ 的唯一性，随后 Bencs、Berrekkal 和 Regts [1], 又进一步取得了进展，他们

证明了对于 $q \geq 3$ 和 $d \geq q+2$，唯一性一直成立到 $p_c + O(q/d^2)$。然而，他们都没有完全解决这一猜想。在本文中，我们弥合了剩余的差距，确立了猜想中的唯一性阈值。

唯一性阈值以及边界的影响，在有限图上的计数和采样复杂度中也发挥着重要作用。对于无外场的反铁磁伊辛模型（$q=2$），固定一个整数 $\Delta \geqslant 3$。树上的唯一性阈值将有界度图上配分函数近似的问题划分为两个区域。对于 $p > p_c = 1 - 2/\Delta$，Sinclair、Srivastava 和 Thurley [14] 给出了一个适用于最大度数为 Δ的图的确定性算法。该算法以关于顶点数和 $1/\varepsilon$ 的多项式时间，将配分函数近似到相对误差 ε 以内。对于 $0 < p < p_c$，Sly 和 Sun [15] 证明了：在 Δ-正则图上不存在随机近似方案，除非 NP =RP。在 $p = p_c$处，Chen、Chen、Yin 和 Zhang [5] 证明，最大度数为 Δ的图上的单点 Glauber 动力学可在多项式时间内达到混合，从而在临界值处给出了一个采样算法。对于 $q \geqslant 3$，此外还有一个民间猜想认为：当参数处于唯一性区域时，在最大度数为 Δ的图上，Potts 模型存在多项式时间近似方案（以及多项式时间采样器）。这一猜想在随机实例上已得到部分解决。Blanca 等人 [3, 的定理 2.7] 给出了随机正则图上的一个采样算法，该算法取决于树上 Gibbs 测度的唯一性。更准确地说，固定 q、$\Delta \geqslant 3$ 和 $0 < p < 1$，满足$p \neq 1 - q/\Delta$。如果在 $(\Delta-1)$-叉树上唯一性成立，那么对于随机 n-顶点 Δ-正则图的选取，以趋近于 1 的概率，该算法能在多项式时间内生成一个样本，其分布在全变差意义下与 Potts分布相差不超过 $O(n^{-\delta})$，其中 $\delta = \delta(q, \Delta, p) > 0$。下面的定理 1.1 对每个 $p_c < p < 1$验证了他们的唯一性假设。在所有最大度数为 Δ 的图上，是否能在整个 $p_c < p < 1$ 内实现高效采样，对于一般的 q仍是一个开放问题。在树阈值以下，Galanis、Štefankovič 和 Vigoda [10]证明，对于偶数 $q \geqslant 4$ 和 $0 \leqslant p < 1 - q/\Delta$，配分函数不存在全多项式随机近似方案，即使是在无三角形的 Δ-正则图上也是如此，除非 NP = RP。

1.1 主要结果

我们的主要定理在无限 d元树和（$d+1$）-正则树上均确立了猜想中的唯一性阈值。

定理 1.1（精确唯一性阈值）。设 q，其中 $q \geqslant 2$，并设 $p \in [0,1]$。q态反铁磁 *Potts* 模型在 $\mathbb{T}^d$ 上存在唯一的 *Gibbs* 测度，当且仅当

$$\begin{cases} p \in [p_c, 1], & q \neq d+1, \\ p \in (p_c, 1], & q = d+1. \end{cases} \tag{1.5}$$

同样的判据也适用于无限（$d+1$）-正则树。

在此参数范围内，根边缘分布满足

$$\lim_{n\to\infty} \max_{\xi} \left| \mu^{\xi}_{n,p,q}[\sigma_* = 1] - \frac{1}{q} \right| = 0. \tag{1.6}$$

更一般地，令 ν 为 $\mathbb{T}^d$上的唯一 *Gibbs* 测度。对于每个固定的 $m \geqslant 0$ 以及仅取决于 $\mathbb{T}^d_m$中的自旋的事件A，

$$\lim_{n\to\infty} \sup_{\xi} \left| \mu^{\xi}_{n,p,q}[A] - \nu[A] \right| = 0. \tag{1.7}$$

在 (1.5)之外，每棵树至少存在两个 *Gibbs* 测度，并且 (1.6) 中的收敛失败。

定理 1.1 中的唯一测度是自由吉布斯测度。在任一棵树上，它通过为根节点赋予一个均匀自旋，然后递归地抽样各个自旋而得到：在给定父节点自旋的条件下，各子节点之间相互独立，其转移概率为

$$K_p(j \mid i) := \frac{1 + (p-1)\delta_{i,j}}{p+q-1}, \qquad i, j \in [q], \tag{1.8}$$

其中$\delta_{i,\ j}$是克罗内克δ函数。

在 $q = d+1$ 处的例外情况发生在零温度下。合法着色可能被其边界冻结，因此无论边界距离多远，根节点的颜色都能被确定。对于相同的 q 和 d，定理 1.1 对所有 $p > 0$都给出唯一性。

对于 $2 \leqslant q \leqslant d$，临界参数为正；此外，还可以考察边界的影响在 p_c处以多快的速度消失。Gu、Wu 和 Yang [11, 定理 1。2] 在唯一性假设下确定了精确衰减率。他们的估计在根边缘分布充分接近均匀分布时适用。定理1.1 保证对于所有充分大的 n，每个边界条件都会给出该邻域内的边缘分布。结合这两个结果可得如下幂律。

推论 1.2 （幂律衰减）。 对于 $2 \leqslant q \leqslant d$ 和 $p_c = 1 - q/(d+1)$,

$$\lim_{n\to\infty} \sqrt{n} \max_{\xi:\partial \mathbb{T}_n^d \to [q]} \left| \mu_{n,p_c,q}^{\xi}[\sigma_* = 1] - \frac{1}{q} \right| = \sqrt{\frac{6d^2}{d^2-1}}\, \frac{q-1}{q^2}. \tag{1.9}$$

1.2 证明概要

主要困难在于控制任意边界条件的影响。不同子树的根边缘分布不一定相同，因此递推关系必须允许这些子树上的分布各不相同。为此，我们为每个 $d \geqslant 2$ 和 $2 \leqslant q \leqslant d+1$构造一个显式的凸势函数；在每个非零的中心化对数消息处，该函数在一步递推下全局递减。

我们首先用对数坐标表示树递推关系，以计算边缘分布。令 $x_i^{(u)}$ 表示在该子树中 u 处颜色为 i 的概率，其中通向父节点的边已移除。如果父节点的颜色为 i，加入该边后权重为 p；否则权重为 1。因此，对 u 处的自旋进行平均可得因子 $px_i^{(u)} + 1 - x_i^{(u)} = 1 - (1-p)x_i^{(u)}$。将 d 个子树的贡献相乘，对于正的子边缘分布，我们得到父节点处比值的以下恒等式

$$\frac{x_i'}{x_j'} = \prod_{u=1}^{d} \frac{1-(1-p)x_i^{(u)}}{1-(1-p)x_j^{(u)}}.$$

注意，右侧的 d 向量取决于 ξ 在相应子树上的限制。为了比较它们，我们使用中心化对数坐标。对于严格为正的边缘分布 x，令

$$y_i := \log x_i - \frac{1}{q}\sum_{j=1}^{q} \log x_j,$$

然后，对每一对颜色取 $y_i - y_j = \log(x_i/x_j)$。注意，$\sum_i x_i = 1$。因此，我们可以通过 y 唯一恢复 x:

$$x_i = \frac{e^{y_i}}{\sum_j e^{y_j}}.$$

特别地， $y = 0$ 对应于均匀分布。此外，对颜色进行置换只会相应地置换 y 的坐标。

在我们的树递推中，每个节点的子树所产生的贡献会相乘。取对数可将这一乘积转换为和，再减去均值即可消除共同的归一化因子。第 2节表明，该递推关系具有如下形式

$$y' = \frac{1}{d}\sum_{u=1}^{d} T_{d,p}\big(y^{(u)}\big), \tag{1.10}$$

其中， $y^{(u)}$ 是子树在子节点 u处的根边缘分布所对应的中心化对数向量， y' 是父节点处对应的向量，而映射 $T_{d,\ p}$ 描述了所有子节点边缘分布均相同的情形。在参考颜色对数比坐标中，这一平均恒等式已出现在 Bencs、de Boer、Buys 和 Regts[2,引理 2.2]的工作中。

y 的坐标之和为零。因此，我们在空间

$$E_q := \left\{ y \in \mathbb{R}^q : \sum_{i=1}^{q} y_i = 0 \right\}, \tag{1.11}$$

并考虑一个势函数

$$\Phi_c(y) := \sum_{i=1}^{q} e^{cy_i} - q, \qquad \text{for some } c > 0. \tag{1.12}$$

函数 Φ_c 在 E_q上是凸的且非负，并且仅在 0 处取零。我们将选择 c 使得该势函数在用于计算边缘分布的树递推下递减。(1.10)中的子节点边缘分布可能各不相同。由 Φ_c的凸性，根据詹森不等式可得

$$\Phi_c(y') \leqslant \frac{1}{d}\sum_{u=1}^{d} \Phi_c\big(T_{d,p}(y^{(u)})\big).$$

因此，如果对于每个非零的 $y \in E_q$，都有 $\Phi_c(T_{d,p}(y)) < \Phi_c(y)$，那么除非所有子向量均为零，否则父节点处的势函数小于最大的子向量势函数。这就是如何将关于 $T_{d,p}$的不等式应用于任意子向量边缘分布。

Φ_c 的指数形式还给出

$$e^{cy_i} = \frac{x_i^c}{\left(\prod_{j=1}^{q} x_j\right)^{c/q}}.$$

我们利用这一恒等式，以及 $T_{d,p}(y)$ 的相应恒等式，来比较第 3节中的两个势函数。此外，关于 Φ_c 的界从上方约束了 y 的每个坐标。由于这些坐标之和为零，它也从下方约束了这些坐标。这就得到了引理2.4中所述的紧性。

现在考虑 $d \geqslant 2$ 和 $2 \leqslant q \leqslant d+1$。在 $p = p_c$ 处，$T_{d,\ p_c}$ 在 0 处的导数为 $-\mathrm{Id}$，因此线性近似无法得到严格收缩。为了了解如何选择指数 c，令 $\gamma > 1$并定义

$$F_{q,d,\gamma}(x) := (qx)^{\gamma} - \left(\frac{d+1-qx}{d}\right)^{\gamma d} - \gamma\log(qx) + \gamma d \log\left(\frac{d+1-qx}{d}\right), \qquad 0 < x < \frac{d+1}{q}.$$

在第 3节中，我们将看到，只需证明

$$\sum_{i=1}^{q} F_{q,d,\gamma}(x_i) > 0, \tag{1.13}$$

对于每个正的非均匀概率向量 x。

我们首先考察均匀边缘分布附近的这一条件。对于任意 $\gamma > 1$，$F_{q,d,\gamma}$ 及其在 $1/q$ 处的前两个导数均为零。于是，其泰勒展开的后续项给出

$$F_{q,d,\gamma}\left(\frac{1}{q}+h\right) = \frac{q^3\gamma^2}{3}\left(\gamma - \frac{3(d+1)}{2d}\right)h^3 + O(h^4).$$

非零的三次项会在 $1/q$ 的两侧、当 $|h|$ 足够小时取相反的符号。为满足这一局部要求，我们必须消去该项。因此取

$$\gamma = c_d := \frac{3(d+1)}{2d}.$$

在此取值下，

$$F^{(4)}_{q,d,\gamma}(1/q) = 2q^4\gamma^2\left(1-\frac{1}{d^2}\right) > 0, \qquad F_{q,d,\gamma}(1/q+h) = \frac{q^4\gamma^2}{12}\left(1-\frac{1}{d^2}\right)h^4 + O(h^5).$$

因此，所选的标量函数在 $1/q$ 两侧的充分小邻域内均为正。令 $F_{q,d}(x) := F_{q,d,c_d}(x)$ 表示固定 γ 后得到的函数。

为了证明其在整个区间 $(0, d/q]$ 上为正，我们研究 $F_{q,d}$ 的形状，并在第4节证明$F_{q,d}(d/q) > 0$。然后，这些估计意味着

$$F_{q,d}(x) > 0 \qquad \text{for } 0 < x \leqslant d/q, \quad x \neq 1/q.$$

由于 $F_{q,d}(1/q) = 0$，只要所有坐标都满足 $x_i \leqslant d/q$ 且向量非均匀，总和就严格为正。这涵盖了所有满足 $q \leqslant d$的情形。

剩下的情形是 $q = d+1$ 存在一个坐标（例如 x_1）大于 d/q。其余 d个坐标的和为 $1 - x_1 < \frac{1}{q}$，因此每个坐标都落在 $(0, 1/q)$ 内。我们证明 $F_{q,d}$ 在此区间上是凸的。由詹森不等式可得

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{d+1} F_{q,d}(x_i) &\geqslant F_{q,d}(x_1) + dF_{q,d}\left(\frac{1-x_1}{d}\right)\\ &= F_{q,d}(x_1) + dF_{q,d}\left(\frac{d+1-qx_1}{dq}\right) =: S_{q,d}(x_1).\end{aligned}$$

另一个估计可得

$$S_{q,d}(x) > 0 \qquad \text{for } d/q < x < (d+1)/q.$$

因此，即使较大的坐标贡献了负项，其余坐标的贡献仍足以使总和为正。这就完成了对我们所选择的 $\gamma = c_d$的（1.13）的证明，从而也证明了对于每个非零 $y \in E_q$，都有严格势函数下降 $\Phi_{c_d}(T_{d,p}(y)) < \Phi_{c_d}(y)$。

回到树递推，凸性和（1.10）给出

$$\Phi_{c_d}(y') \leqslant \frac{1}{d}\sum_{u=1}^{d}\Phi_{c_d}\big(T_{d,p_c}(y^{(u)})\big) < \max_{1\leqslant u\leqslant d}\Phi_{c_d}\big(y^{(u)}\big),$$

至少有一个子向量非零。

为了使收敛关于边界条件一致，我们需要将迭代次数界定为一个与边界无关的数。假设所有初始势至多为某个有限的a_0。对于 $0<\varepsilon<a_0$，集合

$$\{y\in E_q:\varepsilon\leqslant\Phi_{c_d}(y)\leqslant a_0\}$$

是紧的。连续函数

$$\Phi_{c_d}(y)-\Phi_{c_d}\big(T_{d,p_c}(y)\big)$$

因此在该集合上具有严格为正的最小值。引理 2.5 利用这一事实和凸性，得到经过若干层后每个势函数都至多为 ε，其中层数仅取决于 a_0 和 ε（对于固定的 d），q。因此，公共的有限初始界可保证关于边界条件一致地收敛到均匀分布。

第 5 节在 $p>0$时经过一层、在$p=0$和 $q\geqslant d+2$时经过两层后得到初始界。该节还利用单调性将下降过程扩展到更大的 p，并处理 $q\geqslant d+2$和 $d=1$。在例外点（q，p）$=$（$d+1$, 0）处，冻结边界条件可能迫使某些坐标为零，因此对数坐标未必有定义。最后，第 6 节推出吉布斯唯一性以及在固定有限子树上的收敛，并应用已知的非唯一性结果于（1.5）之外。

致谢。 在我们的研究中，我们受益于 AI 工具的帮助。我们询问 ChatGPT-6 Astra 能否为树递推找到一个李雅普诺夫函数，并在我们的指导下用它撰写了第 3 节和第 4 节的证明。随后，作者对初稿进行了修订和重写。感谢 Chenlin Gu 让我们 [18] 注意到这项工作。W.W. 的研究工作部分由 MOST 基金和 NYUSH-Boost 基金资助。K.Y. 的研究工作由国家自然科学基金 62572298 资助。

2 树递推与紧致性原理

2.1 根边缘分布与单步迭代

固定整数 $d\geqslant 1$、$q\geqslant 2$ 和 $n\geqslant 1$，参数 $p\in[0,1]$，以及 $\partial\mathbb{T}_n^d$上的可容许边界条件ξ 。

对于 $v\in\mathbb{T}_n^d$，由 v 及其后代组成的子树高度为 $h=n-|v|$。我们通过将每个后代写作 vw，将其与 $\mathbb{T}_h^d$ 视为同一对象，其中 vw 表示连接。由 ξ 继承的边界条件为

$$\xi^v(w):=\xi(vw),\qquad w\in\partial\mathbb{T}_h^d.$$

定义

$$Z_v:=Z_{h,p,q}^{\xi^v},\qquad x_i^{(v)}:=\mu_{h,p,q}^{\xi^v}[\sigma_*=i],\qquad i\in[q]. \tag{2.1}$$

因此，当 $v \neq *$ 时， $x^{(v)} = (x_i^{(v)})_{i\in[q]}$ 是该子树的根边缘分布，其中通往 v 的父节点的边被移除。 ξ 的可容许性确保 $Z_v > 0$，因此这些概率是定义良好的。

当 $p > 0$ 时，每个延拓该边界条件的构型都具有正权重，因此 $Z_v > 0$。当 $p = 0$ 时， ξ 的可容许性为 $\mathbb{T}_n^d$ 提供了延拓 ξ的合法着色；其在 v 下方子树上的限制是 ξ^v的合法延拓，从而再次得到 $Z_v > 0$。在叶节点 v 处，

$$Z_v = 1, \qquad x_i^{(v)} = \delta_{i,\xi(v)}.$$

引理 2.1（单步迭代）。 设 $v \in \mathbb{T}_n^d$ 满足 $|v| < n$，因此其子节点为 $v1$、……、vd。于是

$$x_i^{(v)} = \frac{\displaystyle\prod_{u=1}^{d}\big[1 + (p-1)x_i^{(vu)}\big]}{\displaystyle\sum_{j=1}^{q}\prod_{u=1}^{d}\big[1 + (p-1)x_j^{(vu)}\big]}, \qquad i \in [q]. \tag{2.2}$$

证明。 令 $h = n - |v| \geqslant 1$。固定根的自旋并对各子树的构型求和，得到

$$\begin{aligned} Z_v x_i^{(v)} &= \sum_{\substack{\sigma\in[q]^{\mathbb{T}_h^d}\\ \sigma_*=i}} W_{h,p,q}^{\xi^v}(\sigma) \\ &= \prod_{u=1}^{d}\left(Z_{vu}\sum_{j=1}^{q} p^{\delta_{i,j}} x_j^{(vu)}\right) \\ &= \left(\prod_{u=1}^{d} Z_{vu}\right)\prod_{u=1}^{d}\big[1 + (p-1)x_i^{(vu)}\big]. \end{aligned} \tag{2.3}$$

T边界限制包含在权重 $W_h^{\xi^v}$ 、p、q 中。最后一个等式利用了

$$\sum_{j=1}^{q} p^{\delta_{i,j}} x_j^{(vu)} = p x_i^{(vu)} + \sum_{j\neq i} x_j^{(vu)} = 1 + (p-1)x_i^{(vu)}.$$

对 2.3 求和 i可得

$$\sum_{i=1}^{q}\prod_{u=1}^{d}\big[1 + (p-1)x_i^{(vu)}\big] = \frac{Z_v}{\prod_{u=1}^{d} Z_{vu}} > 0.$$

将其除以该和式即可证明（2.2），包括 $p = 0$。 □

2.2 居中对数坐标

Let

$$\mathcal{S}_q^\circ := \left\{ x \in (0,1)^q : \sum_{i=1}^{q} x_i = 1 \right\},$$

并回忆 E_q 以及 Φ_c 由（1.11）和（1.12）可知。

这些映射

$$y_i(x) := \log x_i - \frac{1}{q}\sum_{j=1}^{q} \log x_j, \qquad x_i(y) := \frac{e^{y_i}}{\sum_{j=1}^{q} e^{y_j}} \tag{2.4}$$

是 $\mathcal{S}_q^\circ$ 与 E_q 之间的连续逆映射。均匀向量 $\pi = (1/q, \ldots\ldots, 1/q)$ 对应于 $y = 0$。

对于 $p \in [0,1]$，定义 $T_{d,\,p}$： $E_q \to E_q$ 如下

$$T_{d,p,i}(y) := d\left(\log\bigl(1+(p-1)x_i(y)\bigr) - \frac{1}{q}\sum_{j=1}^{q}\log\bigl(1+(p-1)x_j(y)\bigr)\right), \qquad i \in [q]. \tag{2.5}$$

由于 $0 < x_i(y) < 1$，因此对于每个 $p \in [0,1]$（包括 $p = 0$），对数都有定义。映射 $T_{d,\,p}$ 是连续的，并满足 $T_{d,\,p}(0) = 0$。

引理 2.2（中心化坐标中的递推）。设 v 为一个非叶顶点。假设子节点根边缘分布 $x^{(v1)}$、……、$x^{(vd)}$ 均严格为正，并记作 $y^{(vu)} = y(x^{(vu)})$。则 $x^{(v)}$ 严格为正，且

$$y^{(v)} = \frac{1}{d}\sum_{u=1}^{d} T_{d,p}\bigl(y^{(vu)}\bigr). \tag{2.6}$$

证明。每个因子 $1 + (p-1)\,x_i^{(vu)}$ 都是正的，因为 $x_i^{(vu)} < 1$ 且 $p \in [0,1]$。因此（2.2）给出 $x_i^{(v)} > 0$ 对每个 i。

令 D_v 表示式（2.2）中的分母。取对数得

$$\log x_i^{(v)} = \sum_{u=1}^{d}\log\bigl(1+(p-1)x_i^{(vu)}\bigr) - \log D_v.$$

项 $\log D_v$ 与 i无关，因此对颜色取平均后将其减去，得

$$y_i^{(v)} = \sum_{u=1}^{d}\left(\log\bigl(1+(p-1)x_i^{(vu)}\bigr) - \frac{1}{q}\sum_{j=1}^{q}\log\bigl(1+(p-1)x_j^{(vu)}\bigr)\right).$$

根据$T_{d\text{的定义},\,p}$这就是（2.6）。 □

式（2.6）中的子节点根边缘分布可能各不相同。平均公式使我们能够对具有任意边界条件的子树应用凸性。为了启动这一递推关系，我们需要严格为正的边缘分布，以及其势函数的一个共同上界。在正温度下，这两点都可由下面的引理推出。

引理 2.3（正温度下的统一界）。令 $p \in (0,1]$ 且设 v 为非叶顶点。那么，即使子节点边缘分布的某些坐标为零，$x^{(v)}$ 仍严格为正。此外，

$$p^d \leqslant \frac{x_i^{(v)}}{x_j^{(v)}} \leqslant p^{-d}, \qquad i,j \in [q], \qquad \|y^{(v)}\|_\infty \leqslant d\log\frac{1}{p}. \tag{2.7}$$

因此，对于每个 $c > 0$，

$$\Phi_c\bigl(y^{(v)}\bigr) \leqslant q\bigl(p^{-cd} - 1\bigr). \tag{2.8}$$

证明。 对于每个 $s \in [0,1]$,

$$p \leqslant 1 + (p-1)s \leqslant 1.$$

因此（2.2）中的所有因子均为正。对颜色 i 和 j 取比值后，公共的归一化因子相互抵消，得到

$$\frac{x_i^{(v)}}{x_j^{(v)}} = \prod_{u=1}^{d} \frac{1 + (p-1)x_i^{(vu)}}{1 + (p-1)x_j^{(vu)}} \in [p^d, p^{-d}].$$

由于

$$y_i^{(v)} = \frac{1}{q} \sum_{j=1}^{q} \log \frac{x_i^{(v)}}{x_j^{(v)}},$$

我们得到 $|y_i^{(v)}| \leqslant d\log(1/p)$。因此

$$\Phi_c\big(y^{(v)}\big) = \sum_{i=1}^{q} e^{cy_i^{(v)}} - q \leqslant qp^{-cd} - q.$$

□

因此，当 $p > 0$ 时，我们可以从叶节点上方一层开始进行对数递推，并且势函数界与边界条件无关。

2.3 紧性原理

我们首先证明，对势函数的一个界可以约束 y 的每个坐标。

引理 2.4 （势函数的基本性质）。 设 $c > 0$。函数 Φ_c 在 E_q 上连续且严格凸。它是非负的，且仅在 0 处取等号，并满足

$$\|y\|_\infty \leqslant \frac{q-1}{c} \sqrt{2\Phi_c(y)}, \qquad y \in E_q. \tag{2.9}$$

特别地，对于每个 $a \geqslant 0$，集合

$$K_a := \{y \in E_q : \Phi_c(y) \leqslant a\}$$

是紧的。

证明。 连续性和严格凸性源于指数函数的连续性和严格凸性。由于$\sum_i y_i = 0$,

$$\Phi_c(y) = \sum_{i=1}^{q} \big(e^{cy_i} - 1 - cy_i\big). \tag{2.10}$$

每一项都非负，且仅当 $y_i = 0$ 时为零。因此 $\Phi_c(y) \geqslant 0$，且仅在 $y = 0$ 处取等号。

为了证明（2.9），令 $M = \max_i y_i \geqslant 0$。对于每个 i,

$$-y_i = \sum_{j \neq i} y_j \leqslant (q-1)M,$$

因此 $\|y\|_\infty \leqslant (q-1)M$。保留（$M$ 中的对应于 2.10的一个求和项，并对 $e^s-1-s \geqslant s^2/2$取 $s \geqslant 0$, 得到

$$\Phi_c(y) \geqslant e^{cM} - 1 - cM \geqslant \frac{c^2M^2}{2} \geqslant \frac{c^2\|y\|_\infty^2}{2(q-1)^2}.$$

这就证明了（2.9）。每个 K_a 由连续性知是闭集，并且由该不等式有界，因此是紧集。

□

下一个引理利用这种紧致性，从一个共同的有限初始界得到一致收敛，同时允许每个顶点的子节点使用不同的向量。

引理 2.5（全局严格下降下的一致收敛）。设 $c > 0$，并设 $T\colon E_q \to E_q$连续，且 $T(0) = 0$ 并且

$$\Phi_c\big(T(y)\big) < \Phi_c(y), \qquad y \in E_q \setminus \{0\}. \tag{2.11}$$

固定 $a_0 > 0$ 和 $0 < \varepsilon \leqslant a_0$，并定义

$$\delta_\varepsilon := \min_{\substack{y \in E_q \\ \varepsilon \leqslant \Phi_c(y) \leqslant a_0}} \big\{\Phi_c(y) - \Phi_c\big(T(y)\big)\big\} > 0, \qquad N_\varepsilon := \left\lceil \frac{a_0 - \varepsilon}{\delta_\varepsilon} \right\rceil. \tag{2.12}$$

对于一个整数 $m \geqslant 0$，为 $\mathbb{T}_m^d$的每个叶节点 v 赋予一个向量 $y^{(v)} \in E_q$，其中 $\Phi_c\,(y^{(v)}) \leqslant a_0$。其余顶点上的向量递归定义为

$$y^{(v)} = \frac{1}{d}\sum_{u=1}^{d} T\big(y^{(vu)}\big).$$

那么根满足

$$\Phi_c\big(y^{(*)}\big) \leqslant \max\{\varepsilon, a_0 - m\delta_\varepsilon\}.$$

特别地，当 $m \geqslant N_\varepsilon$ 时，其势函数至多为 ε。因此，当 $m \to \infty$ 时，根向量收敛到 0，且这一收敛对所有满足初始界的叶赋值都是一致的。相应的概率向量也一致收敛到 $(1/q, \ldots, 1/q)$。

证明。步骤 *1*：远离 0 时的一致递减。集合

$$A_\varepsilon := \{y \in E_q : \varepsilon \leqslant \Phi_c(y) \leqslant a_0\}$$

根据引理 2.4，它是紧的。它非空，因为

$$\Phi_c(x, -x, 0, \ldots, 0) = e^{cx} + e^{-cx} - 2$$

当 x 遍历 $[0, \infty$ 时，取遍 $[0, \infty$ 中的所有值）。定义

$$g : A_\varepsilon \to \mathbb{R}, \qquad g(y) := \Phi_c(y) - \Phi_c\big(T(y)\big).$$

由于 Φ_c 和 T 是连续的，g 是连续的。由于 A_ε 非空且紧，g 在 A_ε上取得其最小值。此外，$0 \notin A_\varepsilon$，因此（2.11）给出 $g\,(y) > 0$ 对每个 $y \in A_\varepsilon$均成立。

$$\delta_\varepsilon = \min_{y \in A_\varepsilon} g(y) > 0.$$

δ_ε 和 N_ε 都与树高和叶赋值无关。

步骤 *2*：使用不同的子向量进行一次迭代。假设

$$\Phi_c\big(y^{(u)}\big) \leqslant a, \qquad u \in [d], \qquad \varepsilon \leqslant a \leqslant a_0.$$

由（2.11）和 $T(0) = 0$，$\Phi_c(T(y)) \leqslant \Phi_c(y)$ 对每个 $y \in E_q$。

如果 $\Phi_c(y^{(u)}) < \varepsilon$，那么

$$\Phi_c\big(T(y^{(u)})\big) \leqslant \Phi_c(y^{(u)}) < \varepsilon.$$

否则，$y^{(u)} \in A_\varepsilon$，因此

$$\Phi_c\big(T(y^{(u)})\big) \leqslant \Phi_c(y^{(u)}) - \delta_\varepsilon \leqslant a - \delta_\varepsilon.$$

由凸性，

$$\Phi_c\left(\frac{1}{d}\sum_{u=1}^{d} T(y^{(u)})\right) \leqslant \frac{1}{d}\sum_{u=1}^{d} \Phi_c\big(T(y^{(u)})\big) \leqslant \max\{\varepsilon, a - \delta_\varepsilon\}. \tag{2.13}$$

步骤 *3*：迭代与一致收敛。从初始界 a_0出发，定义

$$a_{j+1} := \max\{\varepsilon, a_j - \delta_\varepsilon\}, \qquad j \geqslant 0.$$

从叶节点向根依次应用（2.13），可知每个 j 层高于叶节点的顶点，其势函数至多为a_j，其中 $0 \leqslant j \leqslant m$。递推关系给出

$$a_j = \max\{\varepsilon, a_0 - j\delta_\varepsilon\}.$$

取 $j = m$ 即可证明所述的根界。该结论对每个高度 m 均成立，并且对于所有满足初始界的叶节点赋值，该界都是一致的。

特别地，

$$m \geqslant N_\varepsilon \quad \Longrightarrow \quad a_0 - m\delta_\varepsilon \leqslant \varepsilon \quad \Longrightarrow \quad \Phi_c\big(y^{(*)}\big) \leqslant \varepsilon.$$

最后，只要 $\Phi_c(y) \leqslant \varepsilon$，由（2.9）可得

$$\|y\|_\infty \leqslant \eta_\varepsilon, \qquad \eta_\varepsilon := \frac{q-1}{c}\sqrt{2\varepsilon}.$$

由（2.4），

$$\frac{e^{-2\eta_\varepsilon}}{q} \leqslant x_i(y) \leqslant \frac{e^{2\eta_\varepsilon}}{q}, \qquad i \in [q].$$

因此，

$$\max_{i\in[q]} \left| x_i(y) - \frac{1}{q} \right| \leqslant \frac{e^{2\eta_\varepsilon} - 1}{q} = \frac{\exp\left(\frac{2(q-1)}{c}\sqrt{2\varepsilon}\right) - 1}{q}. \tag{2.14}$$

η_ε 与右侧都随 $\varepsilon \downarrow 0$趋于零。对每一个 $m \geqslant N_\varepsilon$ 以及每一个满足初始界的叶节点赋值，这些界都适用于根。由于 N_ε 与赋值无关，根向量及其对应的概率向量均一致收敛。

□

3 对数比较与标量约化

在本节中，我们将临界性处势函数的严格下降归结为一个涉及单变量函数的不等式。始终固定整数 $d \geqslant 2$ 与 $2 \leqslant q \leqslant d+1$。我们保留所选的势函数指数 $c > 1$，从而 $cd > 1$。本节的论证并不需要 c在第4节中所用的特定值。

3.1 精确恒等式

对于 $y \in E_q$，设 $x = x(y) \in \mathcal{S}_q^\circ$。由于 $0 < qx_i < q \leqslant d+1$,

$$qx_i > 0, \qquad \frac{d+1-qx_i}{d} > 0, \qquad i \in [q]. \tag{3.1}$$

此外,

$$\frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q} qx_i = \frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q} \frac{d+1-qx_i}{d} = 1. \tag{3.2}$$

定义

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q}(qx_i)^c, \qquad & C &= \frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q}\left(\frac{d+1-qx_i}{d}\right)^{cd}, \\ B &= -\frac{c}{q}\sum_{i=1}^{q}\log(qx_i), & J &= -\frac{cd}{q}\sum_{i=1}^{q}\log\left(\frac{d+1-qx_i}{d}\right). \end{aligned} \tag{3.3}$$

这些量表示应用 $T_{d,\ 1-q/(d+1)}$ 前后的势函数。

引理 3.1。对于 $y \in E_q$,

$$\Phi_c(y) + q = qAe^B, \qquad \Phi_c\big(T_{d,\,1-q/(d+1)}(y)\big) + q = qCe^J. \tag{3.4}$$

此外，A、$C \geqslant 1$ 以及 B、$J \geqslant 0$。

证明。因子 q 在我们将对数进行中心化时会约去，因此（2.4）给出

$$y_i = \log(qx_i) - \frac{1}{q}\sum_{j=1}^{q}\log(qx_j).$$

根据 B的定义,

$$e^{cy_i} = (qx_i)^c e^B.$$

对 i 求和即可证明第一个恒等式。

在 $p = 1 - q/(d+1)$ 处，（2.5）中的因子满足

$$1 + (p-1)x_i = 1 - \frac{qx_i}{d+1} = \frac{d}{d+1}\left(\frac{d+1-qx_i}{d}\right).$$

当对数在（ $d/(d+1)$ 中居中时，公因子2.5会消去。因此,

$$\begin{aligned} T_{d,1-\frac{q}{d+1},i}(y) &= d\left(\log\left(\frac{d+1-qx_i}{d}\right) - \frac{1}{q}\sum_{j=1}^{q}\log\left(\frac{d+1-qx_j}{d}\right)\right), \\ e^{cT_{d,1-\frac{q}{d+1},i}(y)} &= \left(\frac{d+1-qx_i}{d}\right)^{cd} e^J. \end{aligned}$$

对 i 求和即可得到第二个恒等式。

由于 c、$cd > 1$，函数 $s \mapsto s^c$ 和 $s \mapsto s^{cd}$ 在 $(0, \infty)$ 上是凸的，$s \mapsto -\log s$ 也同样如此。因此，根据（3.2），由詹森不等式可得

$$A = \frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q}(qx_i)^c \geq \left(\frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q} qx_i\right)^c = 1,$$
$$C = \frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q}\left(\frac{d+1-qx_i}{d}\right)^{cd} \geq \left(\frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q}\frac{d+1-qx_i}{d}\right)^{cd} = 1,$$

and

$$B = -\frac{c}{q}\sum_{i=1}^{q}\log(qx_i) \geq -c\log\left(\frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q} qx_i\right) = 0,$$
$$J = -\frac{cd}{q}\sum_{i=1}^{q}\log\left(\frac{d+1-qx_i}{d}\right)$$
$$\geq -cd\log\left(\frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q}\frac{d+1-qx_i}{d}\right) = 0.$$

□

3.2 对数项比较

现在我们直接证明 $J \leqslant B$。由（3.3），

$$J - B = \frac{c}{q}\sum_{i=1}^{q}\left[\log(qx_i) - d\log\left(\frac{d+1-qx_i}{d}\right)\right].$$

我们将证明，该表达式在均匀向量处取得最大值，此时其值为零。

引理 3.2（对数比较）。对于任意 $x \in \mathcal{S}_q^\circ$，

$$J \leqslant B. \tag{3.5}$$

证明。我们证明，$J - B$ 在均匀向量处取得最大值，此时其值为零。在这一论证中，令 d 取实数，同时保持 q 和 c 不变，并首先假设 $d > 1$ 和 $q < d + 1$。

回顾一下，

$$J - B = \frac{c}{q}\sum_{i=1}^{q}\left[\log(qx_i) - d\log\left(\frac{d+1-qx_i}{d}\right)\right].$$

由于 $0 < x_i < 1$，

$$0 < \frac{d+1-q}{d} \leqslant \frac{d+1-qx_i}{d} \leqslant \frac{d+1}{d}.$$

因此，涉及 $(d+1-qx_i)/d$ 的对数是一致有界的。另一方面，$\log(qx_i) \leqslant \log q$，而这些项中最小的一项在 $\min_i x_i \to 0$ 时趋于 $-\infty$。因此

$$J - B \longrightarrow -\infty \qquad \text{as } \min_i x_i \longrightarrow 0.$$

在均匀向量处， $J-B=0$。因此，我们可以选取 $0<\varepsilon<1/q$，使得当 $\min_i x_i<\varepsilon$ 时，$J-B<0$。连续函数 $J-B$ 在闭有界集合上达到最大值

$$\left\{x\in\mathbb{R}^q:\sum_{i=1}^q x_i=1,\quad x_i\geqslant\varepsilon \text{ for every } i\right\}.$$

这个最大值至少为零，而此集合之外的所有点取值均为负。因此，它是一个全局最大值，并在所有坐标均为正的点处取得。

现在证明，这样的最大值点必定是均匀的。各坐标的导数为

$$\frac{\partial(J-B)}{\partial x_i}=c\left(\frac{1}{qx_i}+\frac{d}{d+1-qx_i}\right),$$
$$\frac{\partial^2(J-B)}{\partial x_i^2}=cq\left(-\frac{1}{(qx_i)^2}+\frac{d}{(d+1-qx_i)^2}\right).$$

在最大值点处，将 x_i 增加并将 x_j 减少相同的微小量，不会改变约束 $\sum_i x_i=1$。沿此变化方向的导数必须为零，因此

$$\frac{1}{qx_i}+\frac{d}{d+1-qx_i}=\frac{1}{qx_j}+\frac{d}{d+1-qx_j}\qquad(i,j\in[q]).$$

在区间 $0<x_i<(d+1)/q$ 上，二阶偏导数当且仅当

$$\sqrt{d}\,qx_i<d+1-qx_i,\qquad\text{that is,}\qquad x_i<\frac{d+1}{q(1+\sqrt{d})},$$

时为负；不等式反向时为正。因此，将一阶偏导数视为其对应坐标的函数，它在此点以下严格递减，在此点以上严格递增。

因此，一阶导数的每个取值在分界点的任一侧至多取得一次。在约束 $\sum_{i=1}^q x_i=1$ 下的内部最大值点处，所有一阶偏导数都相等。因此，各坐标至多取两个不同的值。如果有两个值，其中一个严格小于分界点，另一个严格大于分界点。

假设出现了两个不同的坐标值。我们声称，较大的值只出现一次。否则，选取取该值的两个坐标 x_i 和 x_j，并考虑如下变分

$$x_i\mapsto x_i+h,\qquad x_j\mapsto x_j-h.$$

当 $|h|$ 足够小时，各坐标仍为正，且其和仍为 1。由于 $J-B$ 是各个坐标对应函数之和，其混合二阶导数为零。因此，在 $h=0$ 处沿此变分方向的二阶导数为

$$\frac{\partial^2(J-B)}{\partial x_i^2}+\frac{\partial^2(J-B)}{\partial x_j^2}>0,$$

因为这两个坐标都位于分界点之上。这与极大值处的二阶导数条件相矛盾。

因此，重新标记后，任何非均匀极大化点都必须满足

$$x_1=\cdots=x_{q-1}<\frac{1}{q}<x_q,\qquad x_q=1-(q-1)x_1.$$

与 x_1 和 x_q 对应的一阶偏导数相等，得到

$$0 = q(x_q - x_1)\left[\frac{1}{q^2 x_1 x_q} - \frac{d}{(d+1-qx_1)(d+1-qx_q)}\right].$$

由于 $x_q > x_1$ 且所有分母均为正，因此可得

$$(d+1-qx_1)(d+1-qx_q) - dq^2 x_1 x_q = 0.$$

另一方面，将 $x_q = 1 - (q-1)x_1$ 代入可得

$$\begin{aligned}&(d+1-qx_1)(d+1-qx_q) - dq^2 x_1 x_q \\ &\quad = (d+1-q)(d+1-2qx_1) + (q-1)(d-1)q^2 x_1^2 > 0.\end{aligned}$$

事实上， $d+1-q \geqslant 0$ 和 $qx_1 < 1$ 意味着第一项非负，因为

$$d+1-2qx_1 > d-1 > 0.$$

第二项严格为正。

这与假设矛盾，因此排除了所有非均匀的极大化点。因此，最大值在均匀向量处取得，此时 $J - B = 0$。因此，当 $q < d+1$时， $J \leqslant B$。

最后，假设 $q = d+1$。固定 q、 c和一个正概率向量 x，并令实参数 d 从上方递减至 $q-1$。刚刚证明的不等式在取极限之前成立。在极限值处，

$$\frac{d+1-qx_i}{d} = \frac{q(1-x_i)}{q-1} > 0.$$

因此，所有对数在极限处仍保持连续，并将 $J - B \leqslant 0$ 取极限可得（3.5），当 $q = d+1$时同样成立。 □

3.3 化为标量不等式

估计式 $J \leqslant B$ 控制了（3.4）中的指数因子。我们还必须比较 A 和 C。对于 $0 < x < (d+1)/q$, 定义

$$F_{q,d}(x) := (qx)^c - \left(\frac{d+1-qx}{d}\right)^{cd} - c\log(qx) + cd\log\left(\frac{d+1-qx}{d}\right). \tag{3.6}$$

A、 C、 B、 J的定义给出

$$\frac{1}{q}\sum_{i=1}^{q} F_{q,d}(x_i) = A - C + B - J. \tag{3.7}$$

下一个引理表明，这个和为正意味着势函数严格递减。

引理 3.3 (标量充分条件)。 设 $y \in E_q$ 并记 $x = x(y)$。若

$$\sum_{i=1}^{q} F_{q,d}(x_i) > 0,$$

then

$$\Phi_c\big(T_{d,\,1-q/(d+1)}(y)\big) < \Phi_c(y).$$

证明。由（3.4），且由于 $A,\ C>0$,

$$\begin{aligned}\Phi_c\big(T_{d,\,1-q/(d+1)}(y)\big)<\Phi_c(y) \quad &\Longleftrightarrow \quad Ce^{J}<Ae^{B}\\ &\Longleftrightarrow \quad \log\frac{C}{A}<B-J.\end{aligned}$$

因此，只需证明最后一个不等式。由假设和（3.7）可得

$$C-A<B-J,$$

而前面的引理给出 $B-J\geqslant 0$。如果 $C>A$，则 $A\geqslant 1$ 以及 $\log(1+u)\leqslant u$ 意味着

$$\log\frac{C}{A}\leqslant\frac{C-A}{A}\leqslant C-A<B-J.$$

如果 $C\leqslant A$，则

$$\log\frac{C}{A}\leqslant 0\leqslant B-J.$$

两端相等则要求同时满足 $C=A$ 和 $B=J$，这与 $A{-}C{+}B{-}J>0$ 矛盾。因此，在这两种情况下，所需的严格不等式均成立。 □

由于 $y=0$ 当且仅当 $x_1=\cdots=x_q=1/q$，因此还需证明

$$\sum_{i=1}^{q}F_{q,d}(x_i)>0$$

对于任意满足 $\sum_i x_i=1$ 且不等于（x_1，……，x_q）的正向量（$1/q$，……，$1/q$），本节的主要任务是证明这一点。第 4 节将完成这一任务。

4 标量不等式与临界下降

在本节中，令 $d\geqslant 2$ 和 $2\leqslant q\leqslant d+1$ 为整数。

暂时令 $c>1$ 为任意值，并记 $F=F_{q,\ d}$ 为式（3.6）中定义的函数：

$$F(x)=(qx)^c-\left(\frac{d+1-qx}{d}\right)^{cd}-c\log(qx)+cd\log\left(\frac{d+1-qx}{d}\right),\qquad 0<x<\frac{d+1}{q}.\quad(4.1)$$

我们的目标是证明

$$\sum_{i=1}^{q}F_{q,d}(x_i)>0$$

对于除 $(1/q,\ldots,1/q)$ 之外的每个正概率向量。我们将首先证明

$$F(x)>0\qquad\left(0<x\leqslant\frac{d}{q},\quad x\neq\frac{1}{q}\right).$$

由于 $d\geqslant 2$，这要求在 $x=1/q$ 的两侧都为正。为选择指数 c，我们考察该点处的泰勒展开。

利用

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{d+1-qx}{d}\right)=-\frac{q}{d},$$

我们得到

$$F'(x) = cq\left[(qx)^{c-1} + \left(\frac{d+1-qx}{d}\right)^{cd-1} - \frac{1}{qx} - \frac{d}{d+1-qx}\right].$$

在 $x = 1/q$ 处， qx 和 $(d+1-qx)/d$ 均等于 1，因此

$$F(1/q) = 0, \qquad F'(1/q) = cq(1+1-1-1) = 0.$$

进一步求导可得

$$F''(1/q) = cq^2\left[(c-1) - \frac{cd-1}{d} + 1 - \frac{1}{d}\right] = 0$$

and

$$\begin{aligned} F'''(1/q) &= cq^3\left[(c-1)(c-2) + \frac{(cd-1)(cd-2)}{d^2} - 2 - \frac{2}{d^2}\right] \\ &= 2c^2q^3\left(c - \frac{3(d+1)}{2d}\right). \end{aligned}$$

因此，当 $h \to 0$ 时，

$$\begin{aligned} F(1/q+h) &= F(1/q) + F'(1/q)h + \frac{F''(1/q)}{2}h^2 + \frac{F'''(1/q)}{6}h^3 + O(h^4) \\ &= \frac{c^2q^3}{3}\left(c - \frac{3(d+1)}{2d}\right)h^3 + O(h^4). \end{aligned}$$

若三次系数非零，它便决定了当非零 h 足够小时 $F(1/q+h)$ 的符号。若选取符号与该系数相反的 h，则会得到 $F(1/q+h) < 0$。由于在 $1/q$ 附近 h 的两种符号都允许，我们所要求的逐点正性意味着 $F'''(1/q) = 0$。由于$c > 1$，这便确定了

$$c = \frac{3(d+1)}{2d}, \qquad cd = \frac{3(d+1)}{2}. \tag{4.2}$$

本节余下部分我们固定 c 的这个取值。特别地，

$$\frac{3}{2} < c \leqslant \frac{9}{4}, \qquad cd \geqslant \frac{9}{2}.$$

这种抵消解释了为何选择 c，但仍需证明所要求的正性。此外，

$$F(x) \longrightarrow -\infty \qquad \text{as } x \uparrow \frac{d+1}{q},$$

因为

$$cd\log\left(\frac{d+1-qx}{d}\right) \longrightarrow -\infty,$$

而定义中 F 的其他项保持有界。因此，我们必须使用约束$\sum_i x_i = 1$。

我们首先证明，对于 $0 < x \leqslant d/q$，除 $x = 1/q$ 外，$F_{q,\,d}(x) > 0$ 。这就解决了情形 $q \leqslant d$，因为此时每个坐标都满足 $x_i < 1 \leqslant d/q$。当 $q = d+1$ 时，至多有一个坐标可以超过 d/q。在这种情况下，我们利用其余坐标来抵消该坐标可能产生的负贡献。

4.1 标量函数的形状

我们首先确定 F' 变号的位置，并证明 F 在 $(0,\ 1/q)$ 上是凸的。这种凸性稍后将使我们能够对较小的坐标应用詹森不等式。在证明中，我们通过从 F' 中消去分母来引入辅助函数 P，且不改变其符号。P''' 的表达式由两个分别与仿射函数相乘的幂组成，我们可以比较它们的符号和大小。

引理 4.1 （$F_{q,\ d}$）。对于所有整数 $d \geqslant 2$ 和 $2 \leqslant q \leqslant d+1$，以下陈述成立。

(*i*) 对于 $0 < x < 1/q$,

$$F'_{q,d}(x) < 0, \qquad F''_{q,d}(x) > 0, \qquad F_{q,d}(x) > 0.$$

(*ii*) 存在唯一的 $\rho \in (1/q\ (d+1)\ /q)$ 使得

$$F'_{q,d}(x) > 0 \qquad (1/q < x < \rho),$$

and

$$F'_{q,d}(x) < 0 \qquad (\rho < x < (d+1)/q).$$

(*iii*) 如果 $F_{q,\ d}\ (d/q)\ > 0$，则

$$F_{q,d}(x) > 0 \qquad \left(0 < x \leqslant \frac{d}{q}, \quad x \neq \frac{1}{q}\right).$$

证明。对$F_{q,\ d}$ 的定义进行微分可得

$$F'_{q,d}(x) = \frac{3q(d+1)}{2d}\left[(qx)^{\frac{d+3}{2d}} + \left(\frac{d+1-qx}{d}\right)^{\frac{3d+1}{2}} - \frac{1}{qx} - \frac{d}{d+1-qx}\right]. \tag{4.3}$$

在 $x = 1/q$ 处，进一步求导可得

$$F_{q,d}(1/q) = F'_{q,d}(1/q) = F''_{q,d}(1/q) = F'''_{q,d}(1/q) = 0, \tag{4.4}$$

and

$$F^{(4)}_{q,d}(1/q) = \frac{9q^4(d+1)^2(d^2-1)}{2d^4} > 0.$$

为确定 $F'_{q,d}$ 的符号，定义

$$\begin{aligned} P(x) &= \frac{2x(d+1-qx)}{3(d+1)} F'_{q,d}(x) \\ &= \frac{d+1-qx}{d}\,(qx)^{\frac{3(d+1)}{2d}} + qx\left(\frac{d+1-qx}{d}\right)^{\frac{3(d+1)}{2}} - qx - \frac{d+1-qx}{d}. \end{aligned} \tag{4.5}$$

乘以 $F'_{q,\ d}$在 $(0,\ (d+1)/q$上为正，因此 P和 F'_{q}的符号相同。根据乘积法则和（4.4）可得

$$P(1/q) = P'(1/q) = P''(1/q) = 0. \tag{4.6}$$

将（4.5）求三阶导数可得

$$\begin{aligned} P'''(x) = & -\frac{3q^3(d+1)(d+3)}{8d^4}\,(qx)^{-\frac{3(d-1)}{2d}}\big[(d-3)(d+1)+(5d+3)qx\big] \\ & +\frac{3q^3(d+1)(3d+1)}{8d^3}\left(\frac{d+1-qx}{d}\right)^{\frac{3(d-1)}{2}}\big[6(d+1)-(3d+5)qx\big]. \end{aligned} \tag{4.7}$$

我们还将使用端点极限

$$\begin{aligned} P(((d+1)/q)^-) &= -(d+1) < 0, \\ P'(((d+1)/q)^-) &= q\left[-\frac{(d+1)^{\frac{3(d+1)}{2d}}}{d} - 1 + \frac{1}{d}\right] < 0, \\ P''(((d+1)/q)^-) &= -\frac{3q^2}{d^2}(d+1)^{\frac{3(d+1)}{2d}} < 0, \\ P'(0^+) &= q\left[\left(1+\frac{1}{d}\right)^{\frac{3(d+1)}{2}} - 1 + \frac{1}{d}\right] > 0. \end{aligned} \tag{4.8}$$

对于最后一个不等式，底数大于 1 且指数为正，因此幂大于 1。

我们首先证明， P''' 在包含 $1/q$ 的某个区间上为正，并在其闭包之外为负。

情形 $d \geqslant 3$。在（4.7）中，

$$(d-3)(d+1)+(5d+3)qx > 0 \qquad (x>0),$$

因此第一项严格为负。当 $x \geqslant 6(d+1)/(q(3d+5))$时，第二项中的括号内表达式非正。因此

$$P'''(x) < 0 \qquad \left(\frac{6(d+1)}{q(3d+5)} \leqslant x < (d+1)/q\right).$$

对于 $0 < x < 6(d+1)/(q(3d+5))$，第二项为正。它与第一项绝对值的比值为

$$R(x) = \frac{d(3d+1)}{d+3}\,(qx)^{\frac{3(d-1)}{2d}}\left(\frac{d+1-qx}{d}\right)^{\frac{3(d-1)}{2}}\frac{6(d+1)-(3d+5)qx}{(d-3)(d+1)+(5d+3)qx}. \tag{4.9}$$

在所考虑的区间内，该表达式中的所有因子均为正。根据定义，R是 P'''中正项与负项的绝对值之比。因此， P'''与 $R-1$具有相同的符号。

对 $\log R$ 求两次导数得到

$$\begin{aligned} (\log R)''(x) = & -\frac{3(d-1)}{2dx^2} - \frac{3q^2(d-1)}{2(d+1-qx)^2} \\ & -\frac{q^2(3d+5)^2}{[6(d+1)-(3d+5)qx]^2} + \frac{q^2(5d+3)^2}{[(d-3)(d+1)+(5d+3)qx]^2}. \end{aligned}$$

为了界定正项，注意到 $d \geqslant 3$ 可得

$$(d-3)(d+1)+(5d+3)qx \geqslant (5d+3)qx > 0.$$

由此可得

$$\frac{q^2(5d+3)^2}{[(d-3)(d+1)+(5d+3)qx]^2} \leqslant \frac{1}{x^2}.$$

因此，

$$(\log R)''(x) \leqslant -\frac{d-3}{2dx^2} - \frac{3q^2(d-1)}{2(d+1-qx)^2} - \frac{q^2(3d+5)^2}{[6(d+1)-(3d+5)qx]^2} < 0. \tag{4.10}$$

第一项非正，另外两项严格为负。因此，$\log R$ 严格凹。我们还有

$$R(1/q) = \left(\frac{3d+1}{d+3}\right)^2 > 1, \qquad \lim_{x\uparrow 6(d+1)/(q(3d+5))} R(x) = 0.$$

由凹性可知，$\log R > 0$ 为正值的集合是一个区间：在该集合中的任意两点之间，图像都位于连接它们的正弦上方。该区间包含 $1/q$。其右端点严格小于 $6(d+1)/(q(3d+5))$，因为 $\log R$ 在该点趋于 $-\infty$。

在正值区间的闭包之外，$\log R$ 严格为负。否则，它将在某个这样的点处为零。在该点与 $1/q$ 之间的严格凹性将随后在闭包之外给出正值，产生矛盾。由于 P''' 与 $R-1$ 具有相同的符号，并且已知其在 $6(d+1)/(q(3d+5))$的右侧为负，这就证明了所断言的符号模式。

情形 $d=2$。 P''' 的表达式中的两个括号分别变为 $13qx-3$ 和 $18-11qx$。考虑到第一项前的负号，得到

$$P''' > 0 \quad \text{on} \quad \left(0, \frac{3}{13q}\right], \qquad P''' < 0 \quad \text{on} \quad \left[\frac{18}{11q}, \frac{3}{q}\right).$$

在（$3/(13q)$ $18/(11q)$）上，第一项为负，第二项为正。正项与负项的绝对值之比为

$$R(x) = \frac{14}{5}(qx)^{3/4}\left(\frac{3-qx}{2}\right)^{3/2}\frac{18-11qx}{13qx-3}.$$

其对数导数为

$$(\log R)'(x) = \frac{3}{4x} - \frac{3q}{2(3-qx)} - \frac{11q}{18-11qx} - \frac{13q}{13qx-3}.$$

在此区间上，所有分母均为正。此外，

$$13qx-3 < 13qx \quad \Longrightarrow \quad \frac{13q}{13qx-3} > \frac{1}{x} > \frac{3}{4x}.$$

因此，第一项与最后一项之和为负。其他两项也为负，所以（$\log R$）$' < 0$。

由于

$$\lim_{x\downarrow 3/(13q)} R(x) = +\infty, \qquad R(1/q) = \frac{49}{25} > 1, \qquad \lim_{x\uparrow 18/(11q)} R(x) = 0,$$

函数 R 恰好在大于 $1/q$ 的某一点处与 1 相交一次。因此，当 $d=2$ 时， P''' 也具有所断言的符号模式。

现在我们利用这一符号模式来确定 P 和 $F'_{q,\,d}$ 的符号。

区间 $(0,\ 1/q)$。对于 $x<1/q$ 所在的区间，其中 $P'''>0$， （4.6）给出

$$P''(x)=-\int_x^{1/q}P'''(s)\,ds<0,\qquad P'(x)=-\int_x^{1/q}P''(s)\,ds>0.$$

如果这个正区间的左端点大于 0，则同样的积分表明， P' 在该端点处严格为正。

在 0 与该端点之间的剩余区间上， $P'''<0$。由于 $(P')''=P'''$，函数 P' 在此处是凹函数。它的两个端点值均为正：左端点值为 $P'(0^+)>0$，根据（4.8）可得；右端点值则由积分得到。函数 P' 的图像位于连接这两个端点值的弦之上，因此在这个剩余区间上同样有 $P'>0$。

因此，对于每个 $0<x<1/q$， $P'(x)>0$。由于 $P(1/q)=0$，

$$P(x)=-\int_x^{1/q}P'(s)\,ds<0.$$

P与F'_q之间的符号关系，d从而得到 $F'_{q,\,d}(x)<0$。利用 $F_{q,\,d}(1/q)=0$，我们得到

$$F_{q,d}(x)=-\int_x^{1/q}F'_{q,d}(s)\,ds>0.$$

为证明凸性，我们写出

$$F'_{q,d}(x)=\frac{3(d+1)}{2}\frac{P(x)}{x(d+1-qx)}.$$

求导得

$$F''_{q,d}(x)=\frac{3(d+1)}{2}\frac{x(d+1-qx)P'(x)-(d+1-2qx)P(x)}{x^2(d+1-qx)^2}.\tag{4.11}$$

对于 $0<x<1/q$，分母为正，并且

$$x(d+1-qx)>0,\qquad d+1-2qx>d-1>0.$$

由于 $P'(x)>0$ 且 $P(x)<0$，分子中的两项均为正。因此 $F''_{q,\,d}(x)>0$，从而证明了（i）。

区间 $(1/q,\ (d+1)/q)$。在此区间内， P''' 恰好改变一次符号，从正变为负。因此， P'' 先从 $P''(1/q)=0$ 严格递增，随后严格递减。其最大值为正，而根据（4.8），其在右端点处的极限为负。因此，它恰好一次穿过零点，从正变为负。

由此可知， P' 先从 $P'(1/q)=0$ 开始严格递增，随后严格递减。同样，它的最大值为正，而在右端点处的极限为负，因此它恰好穿过零点一次，从正值变为负值。

反过来， P 先从 $P(1/q)=0$ 严格递增，随后严格递减，并在右端点趋于其负极限。因此，存在唯一的 $\rho\in(1/q,\ (d+1)/q)$，使得

$$P>0\quad\text{on }(1/q,\rho),\qquad P<0\quad\text{on }(\rho,(d+1)/q).$$

由于 $F'_{q,\ d}$ 与 P 同号，这就证明了 (ii)。

最后，假设 $F_{q,d}(d/q) > 0$。第 (i) 部分给出了在 $(0, 1/q)$ 上的正性。在 $(1/q, \rho]$ 上，第 (ii) 部分给出

$$F_{q,d}(x) > F_{q,d}(1/q) = 0.$$

若 $d/q \leqslant \rho$，则这证明了在整个 $(1/q, d/q]$ 上的正性。若 $d/q > \rho$，则 $F_{q,d}$ 在 $[\rho, d/q]$ 上递减，因此

$$F_{q,d}(x) \geqslant F_{q,d}(d/q) > 0 \qquad (\rho \leqslant x \leqslant d/q).$$

这就证明了 (iii)。 □

4.2 端点正性

由形状引理可知，在 $(0, d/q] \setminus \{1/q\}$ 上的正性可归结为证明 $F_{q,d}(d/q) > 0$。我们直接处理 $d = 2$。对于 $d \geqslant 3$，我们通过比较正幂项与对数项，给出一个一致性论证。

引理 4.2 (端点正性)。 对于每个整数 $d \geqslant 2$,

$$F_{q,d}(d/q) > 0. \tag{4.12}$$

因此,

$$F_{q,d}(x) > 0 \qquad (0 < x \leqslant d/q,\ x \neq 1/q). \tag{4.13}$$

证明。 根据定义,

$$F_{q,d}(d/q) = d^{3(d+1)/(2d)} - d^{-3(d+1)/2} - \frac{3(d+1)^2}{2d} \log d. \tag{4.14}$$

对于 $d = 2$，初等界

$$2^{1/4} > \frac{19}{16}, \qquad \sqrt{2} > \frac{7}{5}, \qquad \log 2 < \frac{25}{36}$$

give

$$\begin{aligned} F_{q,2}(2/q) &= 4 \cdot 2^{1/4} - \frac{1}{16\sqrt{2}} - \frac{27}{4} \log 2 \\ &> \frac{19}{4} - \frac{5}{112} - \frac{75}{16} > 0. \end{aligned}$$

对于其余情形，将（4.14）的右侧视为实数 $d \geqslant 3$ 的函数。我们首先证明

$$\frac{d^{3(d+1)/(2d)}}{\frac{3(d+1)^2}{2d} \log d}$$

是严格递增的。这将给出（4.14）中第一项与第三项之差的一个下界。

我们使用对数界

$$\frac{3(d-1)}{d+3} < \log d < \frac{d+1}{3} \qquad (d \geqslant 3).$$

确实,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}d} \left(\log d - \frac{3(d-1)}{d+3} \right) = \frac{(d-3)^2}{d(d+3)^2} \geqslant 0,$$

and

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}d}\left(\frac{d+1}{3}-\log d\right)=\frac{1}{3}-\frac{1}{d}\geqslant 0.$$

在 $d=3$ 处，两个差值均严格为正，因为

$$1<\log 3<\frac{11}{10}<\frac{4}{3}.$$

因此，所述界限在整个 $[3,\infty)$ 上都成立。

对比值取对数后求导，得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}d}\log\left(\frac{d^{3(d+1)/(2d)}}{\frac{3(d+1)^2}{2d}\log d}\right)=\frac{-3(d+1)(\log d)^2+(d^2+8d+3)\log d-2d(d+1)}{2d^2(d+1)\log d}.$$

分母为正。固定 d 后，分子是关于占据 $\log d$ 所在位置的量的严格凹二次函数。在区间的两个端点

$$\left[\frac{3(d-1)}{d+3},\ \frac{d+1}{3}\right],$$

处，其函数值为

$$\begin{aligned}&-3(d+1)\left(\frac{3(d-1)}{d+3}\right)^2+(d^2+8d+3)\frac{3(d-1)}{d+3}-2d(d+1)\\&=\frac{(d-3)\big((d-3)^3+(d-3)^2+36\big)}{(d+3)^2}\geqslant 0\end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}&-3(d+1)\left(\frac{d+1}{3}\right)^2+(d^2+8d+3)\frac{d+1}{3}-2d(d+1)\\&=\frac{2(d+1)}{3}>0.\end{aligned}$$

凹函数位于连接其端点值的弦上方。由于 $\log d$ 严格位于这两个端点之间，且第二个端点值严格为正，因此分子严格为正。于是，比值严格递增，并且

$$\frac{d^{3(d+1)/(2d)}}{\frac{3(d+1)^2}{2d}\log d}\geqslant\frac{9}{8\log 3}>1\qquad(d\geqslant 3).$$

此外，

$$\frac{(d+1)^2}{d}=d+2+\frac{1}{d}$$

对于 $d\geqslant 3$，它为正且递增，因为其导数为 $1-d^{-2}>0$。由于 $\log d$ 同样为正且递增，

$$\frac{3(d+1)^2}{2d}\log d\geqslant 8\log 3.$$

因此，以下乘积中的两个因子都有正的下界：

$$\begin{aligned} & d^{3(d+1)/(2d)} - \frac{3(d+1)^2}{2d}\log d \\ &= \frac{3(d+1)^2}{2d}\log d\left(\frac{d^{3(d+1)/(2d)}}{\frac{3(d+1)^2}{2d}\log d} - 1\right) \\ &\geqslant 8\log 3\left(\frac{9}{8\log 3} - 1\right) = 9 - 8\log 3. \end{aligned}$$

最后，$d \geqslant 3$ 和 $3(d+1)/2 \geqslant 6$ 可推出

$$d^{-3(d+1)/2} \leqslant 3^{-6} = \frac{1}{729}.$$

将这些估计与（4.14）结合，并利用 $\log 3 < 11/10$，得到

$$F_{q,d}(d/q) \geqslant 9 - 8\log 3 - \frac{1}{729} > \frac{1}{5} - \frac{1}{729} > 0.$$

这就证明了（4.12）。现在，利用引理 4.1（iii），即可得到方程（4.13）。 □

没有大坐标的情形。 设 $x = (x_1, \dots, x_q)$ 是一个正的非均匀概率向量。如果 $\max_i x_i \leqslant d/q$，则（4.13）和 $F_{q,d}(1/q) = 0$ 可得，对于每个 i，都有 $F_{q,d}(x_i) \geqslant 0$。至少有一个坐标不同于 $1/q$，因此

$$\sum_{i=1}^{q} F_{q,d}(x_i) > 0.$$

对于 $2 \leqslant q \leqslant d$，每个这样的向量都满足 $x_i < 1 \leqslant d/q$ 对所有 i。因此，引理 3.3 表明，在这一范围内，正临界参数处的势函数严格下降。

剩下的情况是考虑 $q = d+1$，其中 $\max_i x_i > d/q$。

4.3 当 $q = d+1$ 时的补偿

设 $q = d+1$ 且有一个坐标大于 d/q。重新标号后，令 $x_1 > d/q$。其余 d 坐标之和为 $1 - x_1 < 1/q$，因此每个坐标都属于 $(0, 1/q)$。由于 $F_{q,d}$ 由引理 4.1(i) 可知在此区间上是凸的，詹森不等式给出

$$\sum_{i=1}^{d+1} F_{q,d}(x_i) \geqslant F_{q,d}(x_1) + dF_{q,d}\left(\frac{1-x_1}{d}\right) = S_{q,d}(x_1),$$

其中我们用到了

$$\frac{1-x_1}{d} = \frac{d+1-qx_1}{dq}$$

并定义了

$$S_{q,d}(x) := F_{q,d}(x) + dF_{q,d}\left(\frac{d+1-qx}{dq}\right), \qquad \frac{d}{q} \leqslant x < \frac{d+1}{q}. \tag{4.15}$$

当较小的坐标相等时，詹森界取等号。因此，我们需要证明 $S_{q,d}$ 本身严格为正。我们通过证明 $S_{q,d}(d/q) > 0$，以及 $S_{q,d}$ 严格递增来做到这一点。

为表示其导数，定义

$$G_{q,d}(x) := (qx)^{\frac{d+3}{2d}} - \left(\frac{d+1-qx}{d}\right)^{\frac{d+3}{2d}} + \left(\frac{d+1-qx}{d}\right)^{\frac{3d+1}{2}} - \left(1+\frac{qx-1}{d^2}\right)^{\frac{3d+1}{2}} + \frac{d^2}{d^2+qx-1} - \frac{1}{qx}, \qquad \frac{d}{q} \leqslant x \leqslant \frac{d+1}{q}. \tag{4.16}$$

所有指数均为正，且分母在 $[d/q,(d+1)/q]$ 上始终为正。因此，$G_{q,d}$在这个闭区间上连续。我们只将右端点纳入 $G_{q,d}$ 的定义域；$S_{q,d}$ 的定义域仍为 $[d/q,(d+1)/q)$。

引理 4.3（补偿不等式）。对于每个整数 $d \geqslant 2$,

$$S'_{q,d}(x) = \frac{3q(d+1)}{2d}\, G_{q,d}(x) \qquad \left(\frac{d}{q} \leqslant x < \frac{d+1}{q}\right),$$

and

$$G_{q,d}(x) > \frac{1}{100} \qquad \left(\frac{d}{q} \leqslant x \leqslant \frac{d+1}{q}\right). \tag{4.17}$$

因此，$S_{q,\ d}$ 在 $[d/q,\ (d+1)\ /q)$ 上严格递增，并且

$$S_{q,d}(x) > 0 \qquad (\frac{d}{q} \leqslant x < \frac{d+1}{q}). \tag{4.18}$$

证明。步骤 *1*。导数恒等式。

根据链式法则,

$$\begin{aligned} S'_{q,d}(x) &= F'_{q,d}(x) + dF'_{q,d}\left(\frac{d+1-qx}{dq}\right)\left(-\frac{1}{d}\right) \\ &= F'_{q,d}(x) - F'_{q,d}\left(\frac{d+1-qx}{dq}\right). \end{aligned}$$

对于 $\frac{d}{q} \leqslant x < \frac{d+1}{q}$，第二个自变量属于 $(0,\ 1/\ (dq)\ ]$，因此（4.3）在两个自变量处均适用。此外,

$$\frac{d+1-q\frac{d+1-qx}{dq}}{d} = \frac{d^2+qx-1}{d^2} = 1+\frac{qx-1}{d^2}.$$

代入（4.3）得到

$$\begin{aligned} \frac{2d}{3q(d+1)} S'_{q,d}(x) = &\left[(qx)^{\frac{d+3}{2d}} + \left(\frac{d+1-qx}{d}\right)^{\frac{3d+1}{2}} - \frac{1}{qx} - \frac{d}{d+1-qx}\right] \\ &- \left[\left(\frac{d+1-qx}{d}\right)^{\frac{d+3}{2d}} + \left(1+\frac{qx-1}{d^2}\right)^{\frac{3d+1}{2}} - \frac{d}{d+1-qx} - \frac{d^2}{d^2+qx-1}\right] \\ = &\, G_{q,d}(x). \end{aligned}$$

涉及 $d/\ (d+1-qx)$ 的两项恰好完全抵消。剩下需要证明（4.17）。

步骤 *2*。端点界的幂估计。

我们使用以下三个估计来界定步骤 3 中的端点值。

$$d^{\frac{d+3}{2d}} \geqslant 3, \qquad (d+1)^{\frac{d+3}{2d}} \geqslant 4 \qquad (d \geqslant 3), \tag{4.19}$$

$$\left(1+\frac{1}{d}\right)^{\frac{3d+1}{2}} < e^{3/2} < \frac{449}{100} \qquad (d \geqslant 2), \tag{4.20}$$

and

$$\left(1+\frac{d-1}{d^2}\right)^{\frac{3d+1}{2}} < d^{\frac{d+3}{2d}} \qquad (d \geqslant 3). \tag{4.21}$$

我们使用初等数值界

$$\log 4 < \frac{3}{2}, \qquad \log 5 > \frac{8}{5}, \qquad e^{3/2} < \frac{449}{100}.$$

在此步骤的导数计算中， d被视为实变量。

对于（4.19），应用对数 $u \leqslant u-1$，其中 $u=(d+1)/4$:

$$\begin{aligned}\log(d+1) &= \log 4 + \log\left(\frac{d+1}{4}\right)\\ &\leqslant \log 4 + \frac{d+1}{4} - 1\\ &= \log 4 + \frac{d-3}{4}\\ &< \frac{3}{2} + \frac{d-3}{4} = \frac{d+3}{4}.\end{aligned}$$

因此，

$$\begin{aligned}d(d+3) - 3(d+1)\log(d+1) &> d(d+3) - \frac{3(d+1)(d+3)}{4}\\ &= \frac{(d+3)(d-3)}{4} \geqslant 0.\end{aligned}$$

由此可得

$$\left[\frac{d+3}{2d}\log(d+1)\right]' = \frac{d(d+3) - 3(d+1)\log(d+1)}{2d^2(d+1)} > 0.$$

因此 $(d+1)^{(d+3)/(2d)}$ 在 $d \geqslant 3$上递增。它在 $d=3$ 处的值为 4，从而证明了（4.19）中的第二个不等式。

对于第一个不等式，注意到

$$0 < \frac{d}{d+1} < 1, \qquad 0 < \frac{d+3}{2d} \leqslant 1.$$

对于取值在 (0,1) 内的底数，降低指数会使数值增大。因此

$$\left(\frac{d}{d+1}\right)^{\frac{d+3}{2d}} \geqslant \frac{d}{d+1},$$

因此

$$\begin{aligned} d^{\frac{d+3}{2d}} &= (d+1)^{\frac{d+3}{2d}} \left(\frac{d}{d+1}\right)^{\frac{d+3}{2d}} \\ &\geqslant \frac{4d}{d+1} = 3 + \frac{d-3}{d+1} \geqslant 3. \end{aligned}$$

对于（4.20），恒等式

$$\frac{1}{1+x} = 1 - \frac{x}{1+x}$$

得出

$$\begin{aligned} \log\left(1+\frac{1}{d}\right) &= \int_0^{1/d} \frac{1}{1+x}\,dx \\ &= \frac{1}{d} - \int_0^{1/d} \frac{x}{1+x}\,dx. \end{aligned}$$

在积分区间上，

$$0 \leqslant x \leqslant \frac{1}{d} \quad \Longrightarrow \quad 1+x \leqslant \frac{d+1}{d}.$$

取倒数并乘以 $x \geqslant 0$，得

$$\frac{x}{1+x} \geqslant \frac{d}{d+1}\,x.$$

对这个下界积分，得到

$$\begin{aligned} \int_0^{1/d} \frac{x}{1+x}\,dx &\geqslant \frac{d}{d+1} \int_0^{1/d} x\,dx \\ &= \frac{d}{d+1} \cdot \frac{1}{2d^2} = \frac{1}{2d(d+1)}. \end{aligned}$$

由于该积分是被减去的，我们得到

$$\log\left(1+\frac{1}{d}\right) \leqslant \frac{1}{d} - \frac{1}{2d(d+1)}.$$

两边乘以正数 $(3d+1)/2$，得到

$$\begin{aligned} \frac{3d+1}{2}\log\left(1+\frac{1}{d}\right) &\leqslant \frac{3d+1}{2}\left(\frac{1}{d} - \frac{1}{2d(d+1)}\right) \\ &= \frac{(3d+1)(2d+1)}{4d(d+1)} \\ &= \frac{3}{2} - \frac{d-1}{4d(d+1)} < \frac{3}{2}. \end{aligned}$$

最后一个不等式用到了 $d \geqslant 2$。两边取指数即可证明（4.20）。

对于（4.21），直接计算可得以下情形： $d = 3,\ 4$:

$$\left(\frac{11}{9}\right)^5 < 3, \qquad \left(\frac{19}{16}\right)^{13/2} < 4^{7/8}.$$

对于实数 $d \geqslant 5$,

$$\left[\log d - \frac{3d^2-2d-1}{d(d+3)}\right]' = \frac{(d-1)^2(d-3)}{d^2(d+3)^2} \geqslant 0.$$

因此，方括号中的表达式是非递减的，并且

$$\log d - \frac{3d^2-2d-1}{d(d+3)} \geqslant \log 5 - \frac{8}{5} > 0.$$

对 $1+u \leqslant u$ 应用 log，并令 $u=(d-1)/d^2$，再乘以正数 $d(3d+1)/(d+3)$，得到

$$\begin{aligned}\frac{d(3d+1)}{d+3}\log\left(1+\frac{d-1}{d^2}\right) &\leqslant \frac{d(3d+1)}{d+3}\frac{d-1}{d^2}\\ &= \frac{3d^2-2d-1}{d(d+3)} < \log d.\end{aligned}$$

因此乘以 $(d+3)/(2d) > 0$ 可得

$$\frac{3d+1}{2}\log\left(1+\frac{d-1}{d^2}\right) < \frac{d+3}{2d}\log d.$$

由于指数函数是严格递增的，这证明了（4.21）。

步骤 *3*。当 $d \geqslant 3$ 时的凹下界。

由于 $0 < (d+3)/(2d) \leqslant 1$，函数

$$x \longmapsto \left(\frac{d+1-qx}{d}\right)^{\frac{d+3}{2d}}$$

is 在 $[d/q,(d+1)/q]$ 上为凹函数。事实上，它在开区间上的二阶导数 is

$$\frac{q^2(d+3)(3-d)}{4d^4}\left(\frac{d+1-qx}{d}\right)^{-\frac{3(d-1)}{2d}} \leqslant 0,$$

且该函数在两个端点处均连续。

它在 $x=d/q$ 处的函数值和一阶导数分别为

$$d^{-\frac{d+3}{2d}}, \qquad -\frac{q(d+3)}{2d}\,d^{-\frac{d+3}{2d}}.$$

凹函数位于其切线下方。因此

$$\begin{aligned}\left(\frac{d+1-qx}{d}\right)^{\frac{d+3}{2d}} &\leqslant d^{-\frac{d+3}{2d}} - \frac{q(d+3)}{2d}\,d^{-\frac{d+3}{2d}}(x-d/q)\\ &= d^{-\frac{d+3}{2d}}\left(1-\frac{d+3}{2d}(qx-d)\right).\end{aligned}$$

该项在 $G_{q,d}$ 中带有负号，因此其上界为 $G_{q,d}$ 的下界。我们还可以舍去非负项 $((d+1-qx)/d)^{(3d+1)/2}$。因此

$$\begin{aligned}G_{q,d}(x) \geqslant (qx)^{\frac{d+3}{2d}} &- \left(1+\frac{qx-1}{d^2}\right)^{\frac{3d+1}{2}} + \frac{d^2}{d^2+qx-1} - \frac{1}{qx}\\ &- d^{-\frac{d+3}{2d}}\left(1-\frac{d+3}{2d}(qx-d)\right).\end{aligned} \tag{4.22}$$

接下来我们证明右侧是凹函数。其前两项的二阶导数为

$$\left[(qx)^{\frac{d+3}{2d}}-\left(1+\frac{qx-1}{d^2}\right)^{\frac{3d+1}{2}}\right]''$$
$$=\frac{q^2(d+3)(3-d)}{4d^2}(qx)^{-\frac{3(d-1)}{2d}}-\frac{q^2(3d+1)(3d-1)}{4d^4}\left(1+\frac{qx-1}{d^2}\right)^{\frac{3(d-1)}{2}}<0.$$

这里第一项非正，因为 $d\geqslant 3$，而第二项严格为负。

对于倒数项之差，我们使用

$$d^2+qx-1-dqx=(d-1)(d+1-qx)\geqslant 0.$$

因此 $d^2+qx-1\geqslant dqx>0$，从而得到

$$\frac{2q^2d^2}{(d^2+qx-1)^3}\leqslant\frac{2q^2d^2}{d^3(qx)^3}=\frac{2q^2}{d(qx)^3}.$$

所以，

$$\left(\frac{d^2}{d^2+qx-1}-\frac{1}{qx}\right)''=\frac{2q^2d^2}{(d^2+qx-1)^3}-\frac{2q^2}{(qx)^3}$$
$$\leqslant\frac{2q^2}{d(qx)^3}-\frac{2q^2}{(qx)^3}=-\frac{2q^2(d-1)}{d(qx)^3}<0.$$

这一倒数计算对每个 $d\geqslant 2$ 都成立，下面也将使用这一点。最后，(4.22) 中的最后一项关于 x 是仿射的，因此其二阶导数为零。所以整个右侧是凹的。

现在我们对它的两个端点值进行界定。在左端点处，首先注意到

$$\frac{11}{9}-\left(1+\frac{d-1}{d^2}\right)=\frac{(2d-3)(d-3)}{9d^2}\geqslant 0.$$

比较的两个量均为正数，因此取倒数可得

$$\frac{d^2}{d^2+d-1}\geqslant\frac{9}{11}.$$

此外，（4.19）和 $d\geqslant 3$ 给出

$$d^{-\frac{d+3}{2d}}\leqslant\frac{1}{3},\qquad\frac{1}{d}\leqslant\frac{1}{3}.$$

由（4.21），前两个幂之差严格为正。因此，下界在 $x=d/q$ 处的值满足

$$d^{\frac{d+3}{2d}}-\left(1+\frac{d-1}{d^2}\right)^{\frac{3d+1}{2}}-d^{-\frac{d+3}{2d}}+\frac{d^2}{d^2+d-1}-\frac{1}{d}$$
$$>-\frac{1}{3}+\frac{9}{11}-\frac{1}{3}=\frac{5}{33}>\frac{1}{100}.$$

在右端点处，

$$1-\frac{d+3}{2d}=\frac{d-3}{2d}\geqslant 0.$$

将此与 $d^{-(d+3)/(2d)} \leqslant 1/3$ 结合可得

$$-\frac{d-3}{2d}\, d^{-\frac{d+3}{2d}} \geqslant -\frac{d-3}{6d}.$$

利用（4.19）和（4.20），在 $x=\ (d+1)\ /q$ 处的下界值因此为

$$\begin{aligned}(d+1)^{\frac{d+3}{2d}} - \left(1+\frac{1}{d}\right)^{\frac{3d+1}{2}} - \frac{d-3}{2d}\, d^{-\frac{d+3}{2d}} + \frac{d-1}{d+1} \\ > 4 - \frac{449}{100} - \frac{d-3}{6d} + \frac{d-1}{d+1} \\ = \frac{1}{100} + \frac{(2d-1)(d-3)}{6d(d+1)} \geqslant \frac{1}{100}.\end{aligned}$$

第一个不等式是严格的，因为（4.20）中的幂严格小于 $449/100$。对于 $d \geqslant 3$，最后的分式是非负的。

对于 $x \in [d/q,(d+1)/q]$，连接这两个端点值的弦的权重为 $d+1-qx$和 $qx-d$。这些权重均为非负数，且总和为 1。两个端点值都大于 $1/100$，因此弦上的每个值都大于

$$(d+1-qx)\frac{1}{100} + (qx-d)\frac{1}{100} = \frac{1}{100}.$$

（4.22）的凹的右端位于该弦之上。由于 $G_{q,\ d}$ 位于该右侧之上，因此对于4.17），（ $d \geqslant 3$成立。

第*4*步。情形 $d=2$。

I在此情形下，从（$3-qx$）$/2$）$^{7/2}$ 中舍去非负项（4.16）即可得到

$$G_{q,2}(x) \geqslant (qx)^{5/4} - \left(\frac{qx+3}{4}\right)^{7/2} - \left(\frac{3-qx}{2}\right)^{5/4} + \frac{4}{qx+3} - \frac{1}{qx}.$$

我们再次证明，这个显式下界是凹的，且在端点处为正。

对于$-\frac{2}{q} \leqslant x \leqslant \frac{3}{q}$，

$$(qx)^{-3/4} \leqslant 1, \qquad \left(\frac{qx+3}{4}\right)^{3/2} \geqslant 1.$$

第一个不等式使用了 $qx \geqslant 1$ 和一个负指数；第二个使用了 $(qx+3)/4 \geqslant 1$ 和一个正指数。

由此可得

$$\begin{aligned}\left[(qx)^{5/4} - \left(\frac{qx+3}{4}\right)^{7/2}\right]'' &= \frac{5q^2}{16}(qx)^{-3/4} - \frac{35q^2}{64}\left(\frac{qx+3}{4}\right)^{3/2} \\ &\leqslant \frac{5q^2}{16} - \frac{35q^2}{64} = -\frac{15q^2}{64} < 0.\end{aligned}$$

对于 $2/q < x < 3/q$，我们还有

$$\left[-\left(\frac{3-qx}{2}\right)^{5/4}\right]'' = -\frac{5q^2}{64}\left(\frac{3-qx}{2}\right)^{-3/4} < 0.$$

将步骤 3 应用于 $d=2$ 可知，倒数差同样是凹函数。因此，下界在（$2/q$, $3/q$）上是凹的。由于其中所有项在$[2/q, 3/q]$上都是连续的，所以它在闭区间上是凹的。

在两个端点处，直接计算可得

$$2^{5/4} - \left(\frac{5}{4}\right)^{7/2} - 2^{-5/4} + \frac{3}{10} > \frac{1}{24},$$

and

$$3^{5/4} - \left(\frac{3}{2}\right)^{7/2} + \frac{1}{3} > \frac{1}{24}.$$

对于 $x \in [2/q, 3/q]$，连接这些端点值的弦的权重为 $3-qx$ 和 $qx-2$。这些权重均为非负数，且总和为 1，因此该弦在整个区间内都严格位于 $1/24$ 之上。根据凹性，

$$G_{q,2}(x) > \frac{1}{24} > \frac{1}{100} \qquad \left(\frac{2}{q} \leqslant x \leqslant \frac{3}{q}\right).$$

这就完成了对（4.17）的证明。

步骤 *5*。总贡献的正性。
根据步骤 1 和（4.17），

$$S'_{q,d}(x) = \frac{3q(d+1)}{2d} G_{q,d}(x) > 0 \qquad \left(\frac{d}{q} \leqslant x < \frac{d+1}{q}\right).$$

因此 $S_{q,\ d}$ 在 $[d/q,(d+1)/q$ 上严格递增。

引理 4.2 给出 $F_{q,\ d}(d/q) > 0$。由于 $d \geqslant 2$，我们有 $0 < 1/(dq) < 1/q$，因此引理 4.1(i) 也给出 $F_{q,\ d}(1/(dq)) > 0$。于是

$$S_{q,d}(d/q) = F_{q,d}(d/q) + dF_{q,d}(1/(dq)) > 0.$$

根据单调性，

$$S_{q,d}(x) \geqslant S_{q,d}(d/q) > 0 \qquad (\frac{d}{q} \leqslant x < \frac{d+1}{q}),$$

这就证明了（4.18）。 □

4.4 受约束和与临界下降

定理 4.4（受约束标量不等式）。 设 $d \geqslant 2$ 和 $2 \leqslant q \leqslant d+1$ 为整数。若x_1, ..., $x_q > 0$,

$$\sum_{i=1}^{q} x_i = 1, \qquad (x_1, \ldots, x_q) \neq (1/q, \ldots, 1/q),$$

then

$$\sum_{i=1}^{q} F_{q,d}(x_i) > 0. \tag{4.23}$$

证明。 若 $\max_i x_i \leqslant d/q$，则结论由（4.13）、$F_{q,\,d}\,(1/q)\ =0$以及 x的非均匀性可得。否则 $q=d+1$，我们可以重新标记坐标，使得 $x_1 > d/q$。第 4.3 节中的詹森界和引理 4.3 给出

$$\sum_{i=1}^{d+1} F_{q,d}(x_i) \geqslant S_{q,d}(x_1) > 0.$$

□

定理 4.5（临界参数处的严格下降）。 设 $d \geqslant 2$和 $2 \leqslant q \leqslant d+1$ 为整数。则

$$\Phi_{\frac{3(d+1)}{2d}}\big(T_{d,1-\frac{q}{d+1}}(y)\big) < \Phi_{\frac{3(d+1)}{2d}}(y) \qquad \textit{for every } y \in E_q \setminus \{0\}. \tag{4.24}$$

证明。 对于 $y \in E_q \setminus \{0\}$，令 $x = x\,(y)$。坐标 x_i 均为正数，且总和为 **1**。它们不全等于 $1/q$，因为 $x\,(y)\ =\pi$ 当且仅当 $y=0$成立。定理 4.4 因此给出

$$\sum_{i=1}^{q} F_{q,d}(x_i) > 0,$$

以及引理 3.3给出（4.24）。 □

注 4.6。 当 $q=d+1$时，临界参数为 $1-q/\,(d+1)\ =0$。定理 4.5 表明，对于除均匀向量外的每个严格为正的根边缘分布，势函数都严格下降；在均匀向量处，两个势函数均为零。然而，在零温度下，可容许边界条件可能给出带有零坐标的根边缘分布。此时，中心化对数坐标不是有限的，因此该定理无法确立在 $(q,p)\ =\ (d+1,\ \mathbf{0})$处的吉布斯唯一性。

5 F从临界下降到一致边界收敛 e

回顾一下，

$$p_c = p_c(d,q) = \max\left\{0,\, 1-\frac{q}{d+1}\right\}.$$

现在我们利用临界下降不等式，证明 $\mathbb{T}_n^d$ 上的一致边界收敛。下文中的所有上确界均取遍 $\partial\mathbb{T}_n^d$ 上的可容许边界条件。

5.1 边参数的单调性

引理 5.1（关于 p 的单调性）。设 $d \geqslant 1$ 和 $q \geqslant 2$ 为整数。对于每个 $c>0$ 和 $y \in E_q$，函数

$$p \longmapsto \Phi_c\big(T_{d,p}(y)\big)$$

在 $[0,1]$ 上是非递增的。

证明。 固定 $c>0$ 和 $y \in E_q$，记 $x = x(y)$，并设 $a = 1-p$。由于 $0 < x_i < 1$，当 $a \in [0,1]$时，所有因子$1-ax_i$ 均为正。定义

$$g_i(a) := \frac{x_i}{1-ax_i}, \qquad h_i(a) := \exp\big(cT_{d,1-a,i}(y)\big) = \frac{(1-ax_i)^{cd}}{\Big(\prod_{j=1}^{q}(1-ax_j)\Big)^{cd/q}}.$$

Then

$$\Phi_c\big(T_{d,1-a}(y)\big) = \sum_{i=1}^{q} h_i(a) - q.$$

记 $\bar{g} = q^{-1}\sum_{j=1}^{q} g_j$ 并求导，得到

$$\frac{d}{da}T_{d,1-a,i}(y) = -d(g_i - \bar{g}), \qquad h_i' = -cd\, h_i(g_i - \bar{g}).$$

因此，

$$\frac{d}{da}\sum_{i=1}^{q} h_i = -\frac{cd}{2q}\sum_{i,j=1}^{q}(h_i - h_j)(g_i - g_j). \tag{5.1}$$

对于固定的 a，函数 $s \mapsto s/(1-as)$ 在 $(0,\ 1)$ 上递增。因此， g_i 的排序与 x_i相同。 h_i的定义中的分母与 i无关，且 $s \mapsto (1-as)^{cd}$是非递增的。因此， h_i 的排序与 x_i相反。因此，

$$(h_i - h_j)(g_i - g_j) \leqslant 0 \qquad (i, j \in [q]).$$

（5.1）中的导数因此非负。由于 $a = 1 - p$，所需的单调性得证。

□

5.2 子树根边缘分布的一致收敛

命题 5.2 （一致边界收敛）。设 $d \geqslant 1$ 和 $q \geqslant 2$ 为整数，并假设

$$p \in [p_c, 1], \qquad (q,p) \neq (d+1, 0).$$

对于每个固定的整数 $m \geqslant 0$，

$$\lim_{n\to\infty} \sup_{\xi} \max_{v \in \partial \mathbb{T}_m^d} \left\| x^{(v)} - \pi \right\|_\infty = 0, \tag{5.2}$$

其中 $x^{(v)}$ 是 v处后代子树的根边缘分布，如 (2.1)中所定义，并且

$$\pi = \left(\frac{1}{q}, \ldots, \frac{1}{q}\right).$$

特别地，(1.6) 中的根收敛成立。

证明。 若 $p = 1$，则递推关系（2.2）给出

$$x_i^{(v)} = \frac{1}{q}$$

在每个非叶顶点处均成立，且与 ξ无关。因此，当 $n > m$时， （5.2）中的量为零。下文设 $p < 1$。

我们首先处理 $d = 1$。在这种情况下，每个非叶顶点都有一个单个子节点，递推关系变为

$$x_i' = \frac{1 - (1-p)x_i}{q - 1 + p}.$$

因此

$$x_i' - \frac{1}{q} = -\lambda\left(x_i - \frac{1}{q}\right), \qquad \lambda = \frac{1-p}{q-1+p}.$$

从叶节点开始迭代可得

$$\left\|x^{(v)} - \pi\right\|_\infty \leqslant \lambda^{n-m} \qquad (|v| = m). \tag{5.3}$$

当且仅当 $\lambda < 1$。在命题的假设下，这仅排除了 $(q,\ p) = (2,\ 0)$，因此（5.2）成立。

还需考虑 $d \geqslant 2$。我们首先证明命题中所有参数都严格下降。令

$$r = \max\{d, q-1\}, \qquad c = c_r = \frac{3(r+1)}{2r}.$$

于是 $q \leqslant r+1$ 且

$$p_c(r,q) = p_c(d,q).$$

事实上，如果 $q \leqslant d+1$，则 $r = d$。如果 $q \geqslant d+2$，则 $r = q-1$，且两个临界参数均为零。

根据（2.5），分支数仅作为前因子出现，因此

$$T_{d,p} = \frac{d}{r}\, T_{r,p}.$$

由于 $0 < d/r \leqslant 1$ 和 $\Phi_c(0) = 0$，凸性、引理 5.1以及定理 4.5 给出

$$\begin{aligned} \Phi_c\big(T_{d,p}(y)\big) &\leqslant \frac{d}{r}\,\Phi_c\big(T_{r,p}(y)\big) \\ &\leqslant \frac{d}{r}\,\Phi_c\big(T_{r,p_c}(y)\big) \\ &< \frac{d}{r}\,\Phi_c(y) \leqslant \Phi_c(y), \qquad y \in E_q \setminus \{0\}. \end{aligned} \tag{5.4}$$

映射 $T_{d,\ p}$ 是连续的且保持 0 不变，因此满足引理 2.5的假设。还要注意，当 $q \geqslant d+2$时，有 $r = q-1 > d$ 并且

$$\Phi_{c_r}\big(T_{d,p}(y)\big) \leqslant \frac{d}{r}\,\Phi_{c_r}(y) \qquad (y \in E_q). \tag{5.5}$$

接下来我们对初始势函数给出一个一致上界。得到该上界所需的层数取决于 p 是否为正。

如果 $0 < p < 1$，引理 2.3 表明，处于层级 $n-1$ 的每个顶点都有严格为正的根边缘分布，并且

$$\Phi_c\big(y^{(v)}\big) \leqslant q\big(p^{-cd} - 1\big).$$

在这种情况下，令

$$\ell = 1, \qquad a_0 = q\big(p^{-cd} - 1\big) > 0.$$

如果 $p = 0$，则该命题的假设意味着 $q \geqslant d+2$。此时，每个叶边界条件都是可容许的：从叶节点向上进行着色时，每个顶点只需避开其子节点所分配的至多 d 种颜色。

考虑定义在以非叶顶点 v为根的后代子树上的测度。

在给定该子树中所有其他自旋的条件下， v 处的自旋在其子节点未使用的颜色中均匀分布。由于这些 d 子节点是其在该子树中的唯一邻居，因此至少有 $q-d$种颜色可供使用。对条件自旋取平均可得

$$x_i^{(v)} \leqslant \frac{1}{q-d} \qquad (i \in [q],\ |v| \leqslant n-1). \tag{5.6}$$

现在假设 $|v| \leqslant n-2$，因此 v 的每个子节点都是非叶顶点。令

$$b := 1 - \frac{1}{q-d} \in [1/2, 1).$$

根据（5.6），递推关系中的每个因子 $1 - x_i^{(vu)}$ 都属于 $[b, 1]$。因此 $x^{(v)}$ 严格为正，并且

$$b^d \leqslant \frac{x_i^{(v)}}{x_j^{(v)}} \leqslant b^{-d} \qquad (i, j \in [q]).$$

引理 2.3中的论证于是给出

$$\left\|y^{(v)}\right\|_\infty \leqslant d \log \frac{1}{b}, \qquad \Phi_c\big(y^{(v)}\big) \leqslant q\big(b^{-cd} - 1\big).$$

在这种情况下，令

$$\ell = 2, \qquad a_0 = q\big(b^{-cd} - 1\big) > 0.$$

在这两种情况下，层级 $n-\ell$ 上的每个顶点都有严格为正的根边缘分布，其势函数至多为 a_0。常数 ℓ和 a_0仅取决于 d、q、p。递推关系保持正性，因此引理2.2 给出

$$y^{(v)} = \frac{1}{d} \sum_{u=1}^{d} T_{d,p}\big(y^{(vu)}\big)$$

在每个更接近根的层级上。

固定 $\varepsilon \in (0,\ a_0]$。由引理 2.5，存在一个整数 N_ε，它与 n 和 ξ无关，使得 t

$$\Phi_c\big(y^{(v)}\big) \leqslant \varepsilon$$

只要 $|v| = m$ 且 $n - m - \ell \geqslant N_\varepsilon$，方程（2.14）便给出

$$\left\|x^{(v)} - \pi\right\|_\infty \leqslant \frac{1}{q}\left[\exp\left(\frac{2(q-1)\sqrt{2\varepsilon}}{c}\right) - 1\right].$$

This 该界对 ξ 以及第 m层上的所有顶点均一致。令 $\varepsilon \downarrow 0$ 即可证明（5.2） . □

注 5.3。初始势界只需有限。特别地，即使界 $q(p^{-cd}-1)$ 很大，引理2.5仍然适用，因为 $p > 0$ 很小。

对于 $2 \leqslant q \leqslant d$ 在 $p = p_c$处的情形，上述紧性论证无需计算速率即可得到一致收敛。精确的临界速率由推论 1.2给出。当 $d \geqslant 2$，$q \geqslant d+2$，并且 $p < 1$时，方程（5.5）和凸性给出几何界

$$\sup_{\xi} \max_{v \in \partial \mathbb{T}_m^d} \Phi_{c_r}\big(y^{(v)}\big) \leqslant a_0 \left(\frac{d}{r}\right)^{n-m-\ell}, \qquad r = q-1, \quad n \geqslant m + \ell,$$

取 a_0 和 ℓ （在证明中选定）。对于 $d = 1$，显式压缩见（5.3）。

6 吉布斯唯一性与互补参数范围

现在我们完成定理 1.1 的证明。我们采用吉布斯唯一性的标准刻画：无限 q态 Potts 模型定义在 $d+1$-正则树上，当且仅当有限根 d叉树上的根边缘分布对所有可容许边界条件都一致收敛到均匀分布时，它具有唯一的 Gibbs 测度；参见 [11]和 [8, 引理 1。3]。

在我们的记号下，颜色对称性允许我们将这一判据写成

$$\lim_{n\to\infty} \max_{\xi} \left| \mu^{\xi}_{n,p,q}[\sigma_* = 1] - \frac{1}{q} \right| = 0. \tag{6.1}$$

同一判据刻画了无限根树 $\mathbb{T}^d$上的唯一性。事实上，在（6.1）成立时，命题 6.1 中的因子分解给出了在每个固定有限子树上的一致收敛。因此，DLR方程强制每个 Gibbs 测度都具有这些极限有限维边缘分布。

反之，如果（6.1）不成立，则存在一列可容许边界条件，使得颜色 1 在根处的概率始终与 $1/q$保持固定的正距离。由紧致性，对应测度的某个子序列局部收敛。其极限满足 DLR方程，并且在根处不同于自由吉布斯测度。

6.1 有限子树上的唯一性与收敛

设 $p \in [p_c, 1]$ 且 $(q,\ p) \neq (d+1,\ 0)$。命题 5.2 给出（6.1），因此在两棵树上 Gibbs 测度都是唯一的。它就是自由吉布斯测度 ν，其构造方式是为根赋予一个均匀颜色，并沿着边使用 K_p 中（1.8）的转移概率。它在 $\mathbb{T}^d_m$ 上的边缘分布是

$$\nu_m[\eta] = \frac{\displaystyle\prod_{\{v,w\}\in E(\mathbb{T}^d_m)} p^{\delta_{\eta_v,\eta_w}}}{q(q-1+p)^{|E(\mathbb{T}^d_m)|}}, \qquad \eta \in [q]^{\mathbb{T}^d_m}. \tag{6.2}$$

接下来，我们证明有限体积测度在边界条件下均匀收敛到这些边缘分布。

命题 6.1. 设 $d \geqslant 1$、 $q \geqslant 2$ 和 $p \in [p_c, 1]$ 满足 $(q, p) \neq (d+1, 0)$。对于每个固定的$m \geqslant 0$,

$$\lim_{n\to\infty} \max_{\xi} \max_{\eta\in[q]^{\mathbb{T}^d_m}} \left| \mu^{\xi}_{n,p,q}\left[\sigma|_{\mathbb{T}^d_m} = \eta\right] - \nu_m[\eta] \right| = 0. \tag{6.3}$$

因此，(1.7) 对每个仅取决于以下部分中颜色的事件都成立： $\mathbb{T}^d_m$。

证明。 固定 $n > m$ 和一个可容许边界条件 ξ。对于位于第 m 层的顶点 v，记其第 $u \in [d]$ 个子节点为 vu，其中 $u \in [d]$。对第 m 层以下的后代子树求和，得到

$$\omega^{\xi}_{n,m}(\eta) := \prod_{\{v,w\}\in E(\mathbb{T}^d_m)} p^{\delta_{\eta_v,\eta_w}} \prod_{v\in\partial\mathbb{T}^d_m} \prod_{u=1}^{d} \left(1 + (p-1)x^{(vu)}_{\eta_v}\right), \tag{6.4}$$

and

$$\mu^{\xi}_{n,p,q}\left[\sigma|_{\mathbb{T}^d_m} = \eta\right] = \frac{\omega^{\xi}_{n,m}(\eta)}{\displaystyle\sum_{\zeta\in[q]^{\mathbb{T}^d_m}} \omega^{\xi}_{n,m}(\zeta)}. \tag{6.5}$$

这里， $x^{(vu)}$ 是以 vu 为根的后代子树中的根边缘分布，其边界条件由 ξ 诱导。这些子树的配分函数均为正，并在比值中相消。

Set

$$s_p := \frac{q-1+p}{q} > 0.$$

根据命题 5.2,

$$1 + (p-1)x_i^{(vu)} \longrightarrow s_p$$

一致地对 ξ， v， u 和 i 成立。由于有 d^{m+1} 条边离开 $\mathbb{T}_m^d$,

$$\omega_{n,m}^{\xi}(\eta) \longrightarrow s_p^{d^{m+1}} \prod_{\{v,w\}\in E(\mathbb{T}_m^d)} p^{\delta_{\eta_v,\eta_w}}$$

一致地对 ξ 和 η 成立。逐层对叶节点求和可得

$$\sum_{\eta\in[q]^{\mathbb{T}_m^d}} \prod_{\{v,w\}\in E(\mathbb{T}_m^d)} p^{\delta_{\eta_v,\eta_w}} = q(q-1+p)^{|E(\mathbb{T}_m^d)|}. \tag{6.6}$$

因此，式（6.5）中的分母一致收敛到一个严格正数，取比值即可证明式（6.3）。由于 $\mathbb{T}_m^d$ 只有有限种构型，对属于事件 A的构型求和即可证明式（1.7）。

□

6.2 所述范围之外的非唯一性

现在我们回顾互补参数范围内已知的非唯一性结果。

在 $p=0$ 时，当 $2 \leqslant q \leqslant d+1$ 时存在冻结的合法着色；参见 [4, 第 2.1] 节。它们给出不同的 Gibbs 测度。当 $d=1$ 且 $q=2$ 时，这些测度就是支撑在两种交替着色上的狄拉克测度。

在正温度下，首先假设 $3 \leqslant q \leqslant d$ 且

$$0 < p < 1 - \frac{q}{d+1}.$$

应用 [10, 推论 7.5]，取 $\Delta = d+1$ 和 $B = p$，可在无限的（$d+1$）-正则树上得到一个并非平移不变的半平移不变吉布斯测度。它不同于平移不变的自由吉布斯测度，因此唯一性不成立。

对于 $q=2$ 和 $d \geqslant 2$，当

$$0 < p < \frac{d-1}{d+1} = 1 - \frac{2}{d+1}.$$

这是具有零外场的反铁磁伊辛模型的经典阈值；参见[14,第 2.2] 节。

这些结果涵盖了 (1.5) 之外的所有参数。根据刻画 (6.1)，两棵树上都存在非唯一性，且 (1.6) 中的收敛性不成立。

定理 *1.1* 的证明。 在范围 (1.5) 内，命题 5.2 和刻画 (6.1) 表明，两棵树上 Gibbs 测度均唯一。

唯一的测度是自由 Gibbs 测度，命题 6.1 给出（1.7）。在此范围之外，上文回顾的结果表明存在非唯一性，且（1.6）不成立。 □

参考文献

[1] F. Bencs、K. Berrekkal 和 G. Regts, 《树上反铁磁 Potts 模型的弱空间混合与强空间混合的近最优界》。《概率电子期刊》**30**（2025年），第65号论文，1–25。[2] F. Bencs、D. de Boer、P. Buys 和 G. Regts, 《大 Δ-正则树上反铁磁 Potts 模型的 Gibbs 测度唯一性》。《统计物理学杂志》**190** （2023），第140号文章。[3] A. Blanca、A. Galanis、L. A. Goldberg、D. ˇStefankoviˇc、E. Vigoda 和 K. Yang, 《随机正则图上 Potts 模型和随机簇模型在唯一性区域内的抽样》。《*SIAM* 离散数学杂志》**34** （2020），第1期，742–793。[4] G. R. Brightwell 和 P. Winkler, 《Cayley 树的随机着色》。载于《当代组合学》，《Bolyai 学会数学研究》，第10卷，J´anos Bolyai 数学学会，布达佩斯，2002年，247–276。[5] X. Chen、Z. Chen、Y. Yin 和 X. Zhang, 《唯一性阈值处的快速混合》。载于《第*57*届 *ACM* 计算理论年会论文集（*STOC*）》，ACM，2025年，879–890。[6] Z. Chen、K. Liu、N. Mani 和 A. Moitra, 《树上着色的强空间混合及其算法应用》。载于《*2023 IEEE* 第*64*届计算机科学基础年会（*FOCS*）》，IEEE，2023年，810–845。[7] J. E. Cohen、Y. Iwasa、G. Rautu、M. B. Ruskai、E. Seneta 和 G. Zb˘aganu, 《随机矩阵映射下的相对熵》。《线性代数及其应用》**179** （1993），211–235。[8] D. de Boer、P. Buys 和 G. Regts, 《正则树上四态反铁磁 Potts 模型的 Gibbs 测度唯一性》。《组合学、概率与计算》**32**（2023），158–182。[9] A. Galanis、L. A. Goldberg 和 K. Yang, 《树上三态反铁磁 Potts 模型的唯一性》。《概率电子期刊》**23** （2018），第82号论文，1–43。[10] A. Galanis、D. ˇStefankoviˇc 和 E. Vigoda, 《树上的非唯一性区域中反铁磁自旋系统的不可近似性》。《*ACM* 杂志》**62**（2015），第6期，第50号文章，1–60。[11] C. Gu、W. Wu 和 K. Yang, 《正则树上 q态反铁磁 Potts 模型在临界性处的幂律衰减》。《概率电子期刊》**30** （2025年），第19号论文，1–25。[12] J. Jonasson, 《正则树的均匀随机着色的唯一性》。《统计与概率通讯》**57** （2002），243–248。[13] Y. Polyanskiy 和 Y. Wu, 《信道和贝叶斯网络的强数据处理不等式》。载于《凸性与集中》，《IMA 数学及其应用丛书》，第161卷，Springer，2017年，211–249。

[14] A. Sinclair、P. Srivastava 和 M. Thurley，《有界度图上双状态反铁磁自旋系统的近似算法》。《统计物理学杂志》**155**（2014），666–686。[15] A. Sly 和 N. Sun，《 d-正则图上的双自旋模型计数》。概率年刊**42**（2014），第 6 期，2383–2416。[16] Y. Yin 和 C. Zhang，《稀疏随机图上的 Potts 模型抽样》。载于《近似、随机化与组合优化：算法与技术》（*APPROX/RANDOM 2016*），《莱布尼茨国际信息学会议论文集》，第 60 卷，达格斯图尔城堡，2016 年，47:1–47:22。[17] F. Peruggi、F. di Liberto 和 G. Monroy，《贝特格上的 Potts 模型：I. 一般结果》。《物理学杂志 *A*》**16**（1983），第 4 期，811–827。[18] C. Song、Z. Zhou 和 C. Gu，《人工智能辅助发现反铁磁波茨模型的多项式李雅普诺夫势函数》。载于第三届数学人工智能研讨会：迈向自我演进的科学智能体，2026年。