计算：万物的起源和终点

蒋炎岩

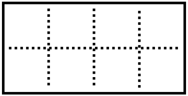
南京大学计算机科学与技术系

2014 年 1 月 21 日

这是一场怎样的报告？

如果有时光机
能回到十年之前
面对和你们同龄的自己
我应该对自己说点什么？

今天带给大家一个和方格有关的故事



Outline

- 从一个计数问题谈起
  - 一个家喻户晓的计数问题
  - 故事的缘起
- 进入微观世界
  - 神奇的物理世界
  - 统计物理与计数
- 生命与心灵的奇迹
  - 生命：物理世界中的计算机
  - 人造的智慧
- 计算：万物的起源和终点
  - 回归理论计算机科学
  - 起源即是终点

Outline

从一个计数问题谈起
- 一个家喻户晓的计数问题
- 故事的缘起

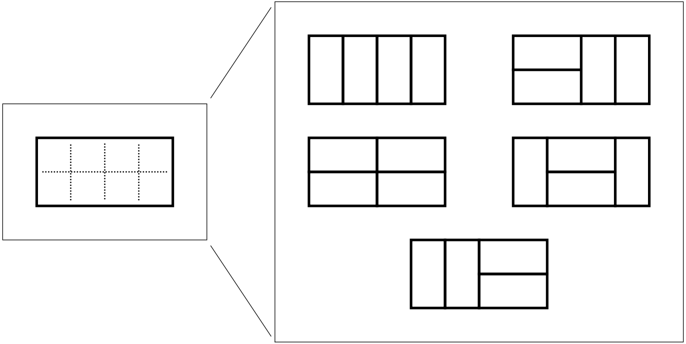
进入微观世界
- 神奇的物理世界
- 统计物理与计数

生命与心灵的奇迹
- 生命：物理世界中的计算机
- 人造的智慧

计算：万物的起源和终点
- 回归理论计算机科学
- 起源即是终点

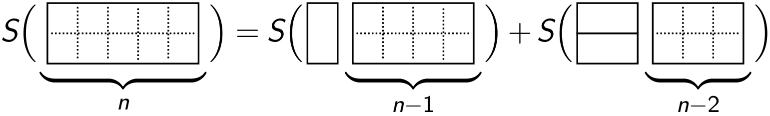
$2 \times n$ 覆盖问题

用 1×2 的多米诺骨牌，覆盖 $2 \times n$ 的方格，有多少种不同的覆盖方法？



$2 \times n$ 覆盖问题：解答

假设 $S(x)$ 为覆盖如 x 所示方格的方案数，考虑覆盖第一列的两种方案：

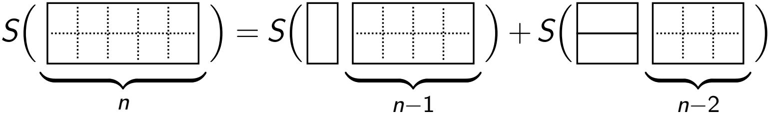


$$f_2(n) = \begin{cases} 1 & n \le 1 \\ f_2(n-1) + f_2(n-2), & n \ge 2 \end{cases}$$

解法：递推、通项公式、矩阵乘法……

$2 \times n$ 覆盖问题：解答

假设 $S(x)$ 为覆盖如 x 所示方格的方案数，考虑覆盖第一列的两种方案：

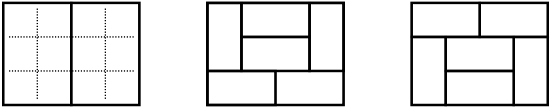


$$f_2(n) = \begin{cases} 1 & n \le 1 \\ f_2(n-1) + f_2(n-2), & n \ge 2 \end{cases}$$

解法：递推、通项公式、矩阵乘法……

$3 \times n$ 覆盖问题

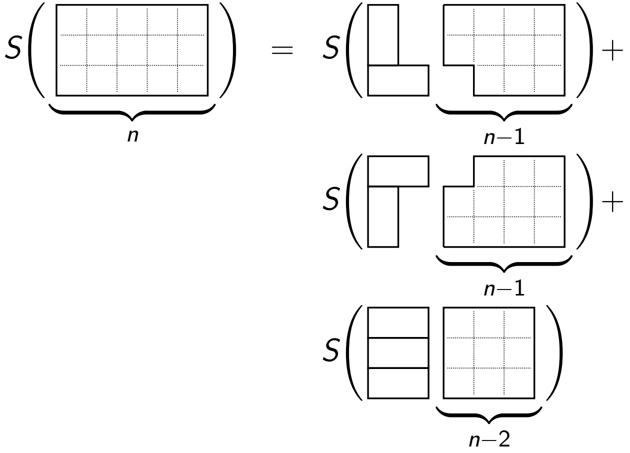
同样用 1×2 的多米诺骨牌，但是覆盖$3 \times n$的方格，有多少种不同的覆盖方法？



$f_3(4) = 3 \times 3 + 2 = 11$

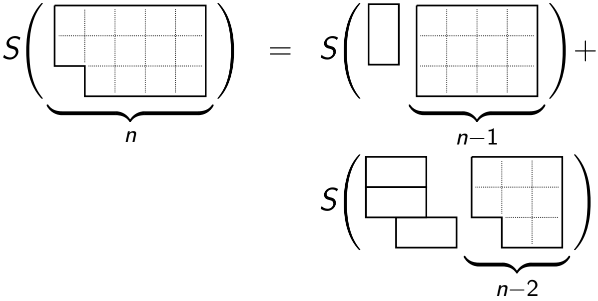
$3 \times n$ 覆盖问题：解答

同样考虑覆盖第一列的所有方案：

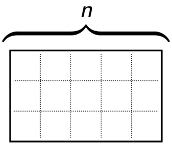


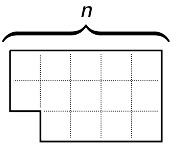
$3 \times n$ 覆盖问题：解答

同理考虑“缺一角”的方格：



$3 \times n$ 覆盖问题：解答

令 $f_3(n) = S\Bigg($ 

$\Bigg)$, $g_3(n) = S\Bigg($ 

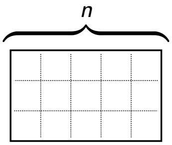
$\Bigg)$,

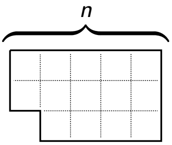
$$
\begin{cases}
f_3(n) = 2g_3(n-1) + f_3(n-2) \\
g_3(n) = f_3(n-1) + g_3(n-2)
\end{cases}
$$

用一些代数技巧，得到

$$
f_3(n) = 4f_3(n-2) - f_3(n-4) \qquad (n \geq 4)
$$

$3 \times n$ 覆盖问题：解答

令 $f_3(n) = S\Bigg($ 

$\Bigg)$, $g_3(n) = S\Bigg($ 

$\Bigg)$,

$$\begin{cases} f_3(n) = 2g_3(n-1) + f_3(n-2) \\ g_3(n) = f_3(n-1) + g_3(n-2) \end{cases}$$

用一些代数技巧，得到

$$f_3(n) = 4f_3(n-2) - f_3(n-4) \qquad (n \geq 4)$$

你能解决 $m \times n$ 的覆盖问题吗？

我们已经解决了 $2 \times n$ 和 $3 \times n$ 的覆盖问题，能够求解将 $m \times n$ 的方格用 1×2 骨牌覆盖的方案数 $f_m(n)$ 吗？

沿用之前的算法，我们可以求出：

$$f_4(n) = f_4(n-1) + 5_4 f(n-2) + f_4(n-3) - f_4(n-4)$$
$$f_5(n) = 15 f_5(n-4) - 32 f_5(n-8) + 15_5 f(n-12) - f_5(n-16)$$
$$\cdots\cdots$$

不幸的是，递推式的长度是指数增长的，刚才的思路并没有帮我们找到有效的解决方法。

你能解决 $m \times n$ 的覆盖问题吗？

我们已经解决了 $2 \times n$ 和 $3 \times n$ 的覆盖问题，能够求解将 $m \times n$ 的方格用 1×2 骨牌覆盖的方案数 $f_m(n)$ 吗？

沿用之前的算法，我们可以求出：

$$
\begin{gathered}
f_4(n) = f_4(n-1) + 5_4 f(n-2) + f_4(n-3) - f_4(n-4) \\
f_5(n) = 15 f_5(n-4) - 32 f_5(n-8) + 15_5 f(n-12) - f_5(n-16) \\
\cdots\cdots
\end{gathered}
$$

不幸的是，递推式的长度是指数增长的，刚才的思路并没有帮我们找到有效的解决方法。

Outline

- 从一个计数问题谈起
  - 一个家喻户晓的计数问题
  - 故事的缘起
- 进入微观世界
  - 神奇的物理世界
  - 统计物理与计数
- 生命与心灵的奇迹
  - 生命：物理世界中的计算机
  - 人造的智慧
- 计算：万物的起源和终点
  - 回归理论计算机科学
  - 起源即是终点

做这样的题有什么意义？

老师和家长的名言摘录

数学就是思维训练。
你以后就知道它有什么用了。
你不要管有什么用，做就行了。
参加竞赛可以上好大学，上好大学有好工作。

覆盖问题的真正意义

用计算的手段解释物理世界中的现象。

做这样的题有什么意义？

老师和家长的名言摘录

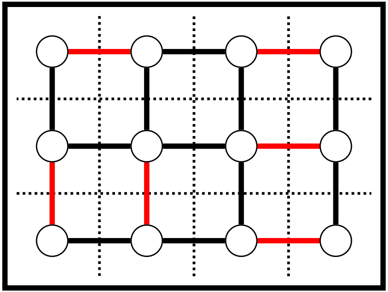
数学就是思维训练。
你以后就知道它有什么用了。
你不要管有什么用，做就行了。
参加竞赛可以上好大学，上好大学有好工作。

覆盖问题的真正意义

用计算的手段解释物理世界中的现象。

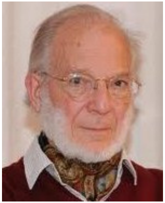
水面下的冰山

对于图 $G(V,E)$，给定 $M \subseteq E$，如果对于 $v \in V$ 满足 v 只被 M 中至多一条边包含，则 M 是 G 的一个匹配。
覆盖问题是平面图上的完备匹配计数问题的特例。



覆盖问题的解决

平面图完备匹配计数问题的多项式算法是由物理学家 Kasteleyn, Temperley 和 Fisher 在 1961 年首次独立给出的

FKT 定理 (覆盖问题推论)

$$f_m(n) = \prod_{j=1}^{m}\prod_{k=1}^{n}\left(4\cos^2\frac{\pi j}{m+1} + 4\cos^2\frac{\pi k}{n+1}\right)^{\frac{1}{4}}$$

Outline

从一个计数问题谈起
- 一个家喻户晓的计数问题
- 故事的缘起

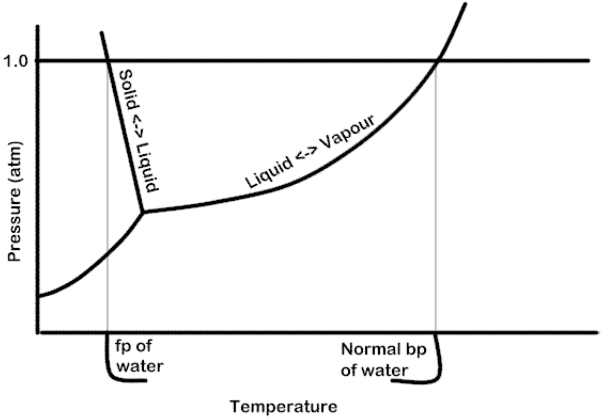
进入微观世界
- 神奇的物理世界
- 统计物理与计数

生命与心灵的奇迹
- 生命：物理世界中的计算机
- 人造的智慧

计算：万物的起源和终点
- 回归理论计算机科学
- 起源即是终点

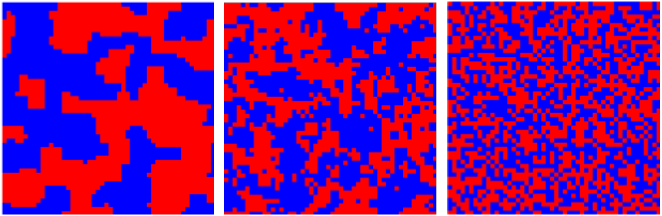
水加热为什么会沸腾？

液体究竟是什么？气体究竟是什么？为什么水加热会变成水蒸汽？



铁磁体加热为什么会失去磁性？

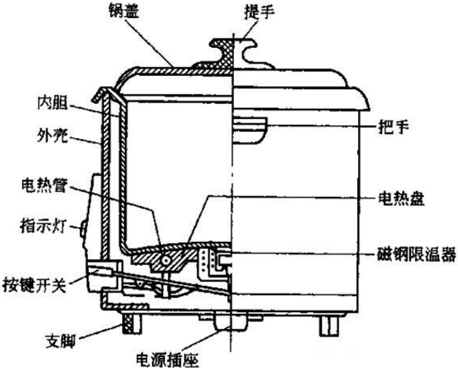
为什么铁磁体加热到特定的温度后忽然会失去磁性，冷却后磁性又会恢复？



$T \ll T_c$ $T = T_c$ $T \gg T_c$

铁磁体相变的应用

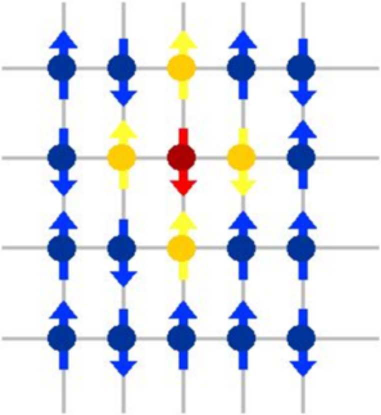
电饭锅是一个电加热器，磁铁会在水烧干 (即锅底温度达到 105 度) 后失去磁性，关闭开关。



Outline

磁铁的微观结构

在一个网格中布满了原子，每个原子的状态 (自旋) 只会影响相邻原子的状态。能量越低的状态，出现的可能越大。



铁磁体的 Ising 模型[1]

原子和原子间交互构成图 $G(V,E)$，边权 $A_{i,j}$
每个顶点代表一个原子，状态 $\sigma_i \in \{+1,-1\}$。

$$
\begin{array}{ccccccccc}
 & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \\
\cdots & & -1 & \cdots & +1 & \cdots & +1 & & \cdots \\
 & & \vdots & & \vdots & A_{i,j} & \vdots & & \\
\cdots & & +1 & \cdots & \sigma_i & \text{---} & \sigma_j & & \cdots \\
 & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \\
\cdots & & -1 & \cdots & +1 & \cdots & +1 & & \cdots \\
 & & \vdots & & \vdots & & \vdots & &
\end{array}
$$

[1]Lenz. Beiträge zum verständnis der magnetischen eigenschaften in festen körpern. In *Physikalische Zeitschrift*, 21, 613–615, 1920.

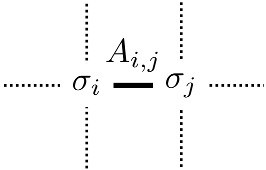
从微观到宏观

一个状态的能量是原子间交互能量的和

$$H(\sigma) = -\sum_{(i,j)\in E} A_{i,j}\sigma_i\sigma_j.$$

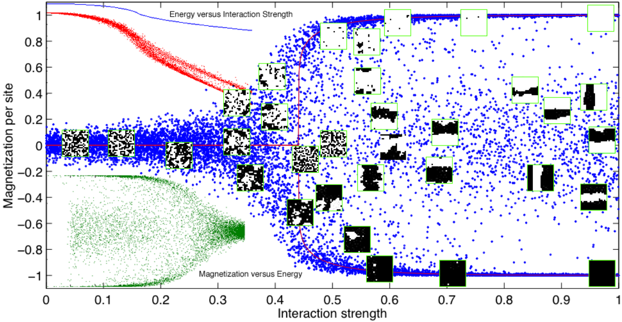
在温度 T 下，状态 σ 出现的概率为

$$Pr[X=\sigma] \propto e^{-H(\sigma)/(k_b T)}.$$



Ising 模型的物理意义

对于确定参数 A 的磁体，当温度 T 确定时，给定 σ 我们能计算它出现的概率。
Ising 模型是第一个解释相变的统计物理模型。



计算配分函数

温度 T 确定、A 确定，给定 σ 我们能计算它出现的概率。令 $\beta = 1/(k_b T)$：

$$H(\sigma) = -\sum_{(i,j)\in E} A_{i,j}\sigma_i\sigma_j, \; Z_\beta = \sum_\sigma e^{-\beta H(\sigma)}$$

$$Pr_\beta[\sigma] = \frac{e^{-\beta H(\sigma)}}{Z_\beta}$$

分母上的物理量 Z_β 被称为是配分函数 (Partition Function)。

$\boxed{\text{难题：}\sigma \text{ 有 } 2^{|V|} \text{ 个，如何高效地计算 } Z_\beta\text{？}}$

统计物理与计数

FKT 定理 (Part 1)[2]

建立 Ising 模型和匹配模型之间的数值关系：

$$Z_\beta = \sum_\sigma \prod_{(i,j)\in E} e^{A_{i,j}\sigma_i\sigma_j} \Leftrightarrow \mathrm{PerfMatch}(G) = \sum_M \prod_{(i,j)\in M} \tanh \beta A_{i,j}$$

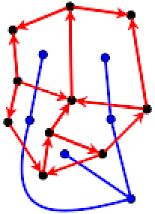
$$Z_\beta = 2^{|V|}\left(\prod_{(i,j)\in E} e^{-\beta A_{i,j}} \cosh \beta A_{i,j}\right) \mathrm{PerfMatch}(G)$$

[2]Fisher. On the dimer solution of planar Ising models. In *Journal of Mathematical Physics*, 7, 1776–1781, 1966.

统计物理与计数

FKT 定理 (Part 2)

为平面图 G 的每一条边确定方向得到 G'，使 G' 每个面上顺时针方向的边恰为奇数个 (Pfaffian Orientation)：



$$\mathrm{PerfMatch}(G) = \mathrm{pf}(G') = \sqrt{\det G'}$$

$$Z_\beta = 2^{|V|}\left(\prod_{(i,j)\in E} e^{-\beta A_{i,j}}\cosh \beta A_{i,j}\right)\sqrt{\det G'}$$

1×2 骨牌覆盖数是这个计数方法的一个推论。

Ising 模型的求解

(Onsager, 1940s) 二维格点上的通项公式

(Lee, Yang, 1950s) 二维格点的严格推导

(Fisher, Kasteleyn, Temperley, 1960s) 平面图的精确算法

(Valiant, 1970s) 计数的复杂性理论

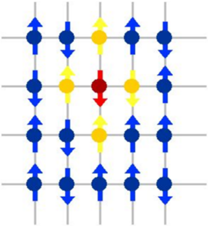
(Jerrum, Sinclair, 1980s) 任意图的随机近似算法

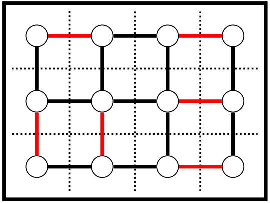
(Valiant, 2004) 全息图变换

(Cai, Lu, Xia, 2009) #CSP 的二分性定理

小结：物理与计算

我们相信物理世界是由简单精确的定律所支配，而



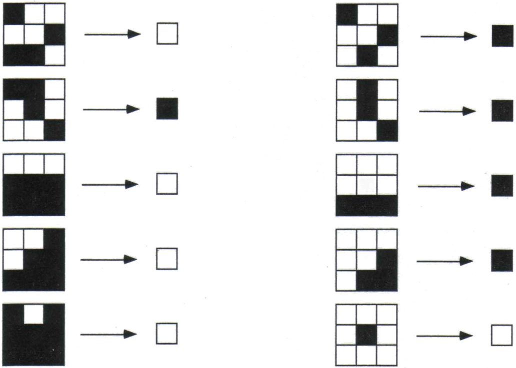


计算是理解物理世界规律的手段。

Outline

生命的游戏

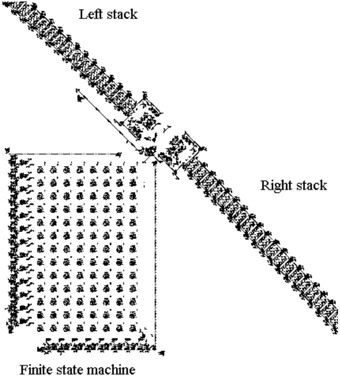
物理世界是孕育生命的温床，即便物理世界只是二维平面和简单的局部规则[3]。



[3]Gardner. Mathematical games: the fantastic combinations of John Conway's new solitaire game "life". In *Scientific American*, 223, 120-123, 1970.

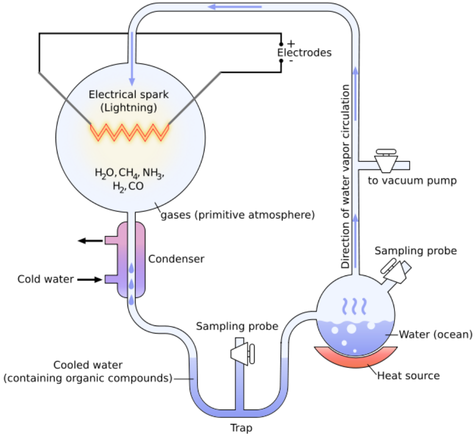
物理世界中的计算机

生命游戏是一种“细胞自动机”——如果我们有一套物理规律和一个初始状态，世界就开始了计算，开始孕育我们所见的一切。



生命即是计算

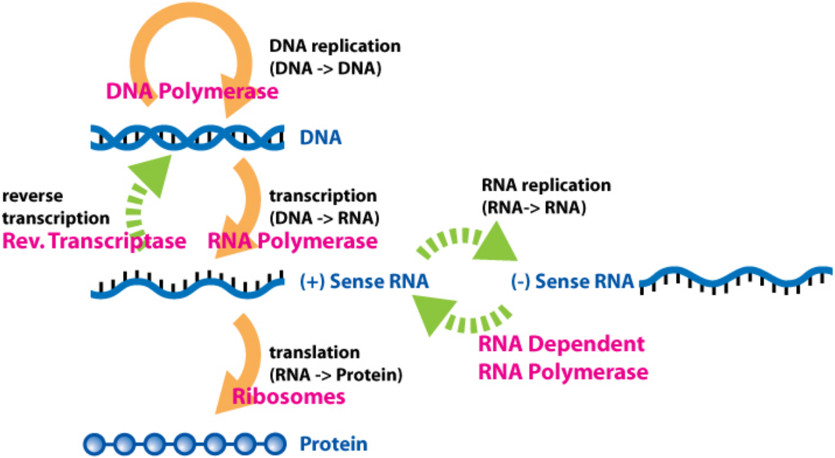
Miller–Urey 实验[4]：有 H_2O, CH_4, NH_3, H_2, CO 和能量，就能创造出生命诞生的条件。



[4] Hill and Nuth. “The catalytic potential of cosmic dust: implications for prebiotic chemistry in the solar nebula and other protoplanetary systems”. In *Astrobiology* 3(2): 291–304, 2003.

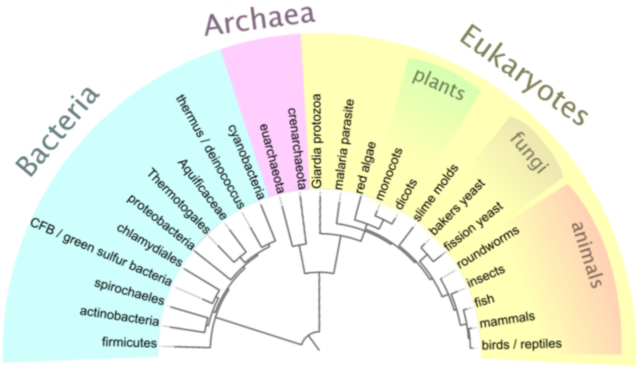
生命：物理世界里的计算机

生命诞生自建立在物理规律上的编码。
程序被刻在我们的 DNA 中，不断在物理世界中被执行。



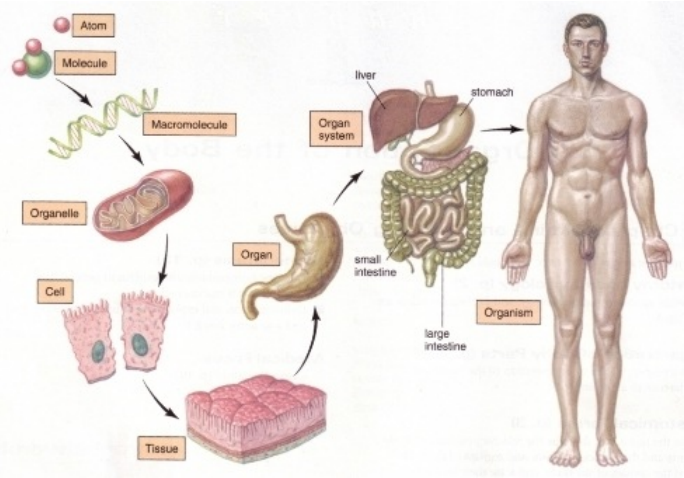
编码、融合与重生

我们的每一个细胞都承载了漫长的历史。
我们身体中的程序完成了无数次的修改、变化和淘汰。



上帝在寻找什么？

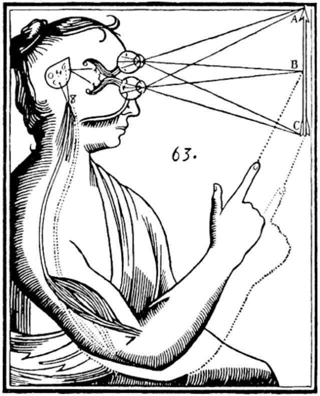
很遗憾，我们只知道“我们”只是这场旷日持久计算的中间结果。



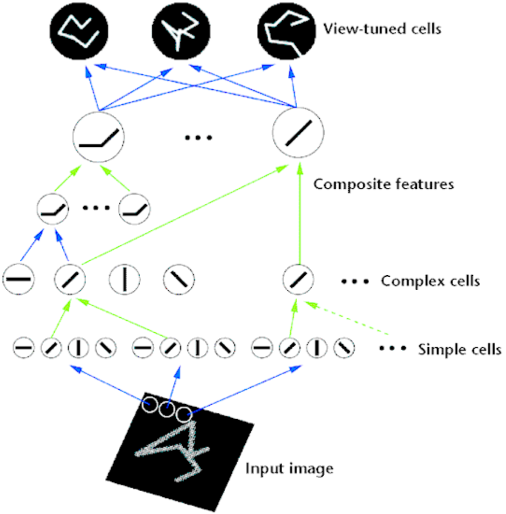
Outline

心灵与意识

感知 – 计算 – 效应的循环：生命世界最伟大的创造，心灵，也是计算的形式吗？还是连接另一个世界的桥梁？

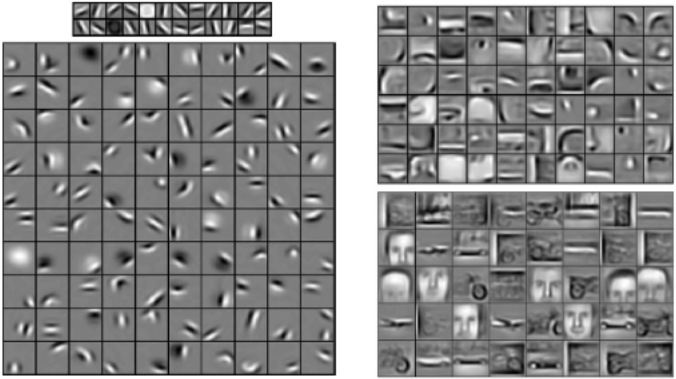


模拟出的心智：人工神经网络



模拟出的心智

我们透过计算重新认识自己，认识自己理解世界的方式。
人工神经网络[5]得到的图像分层表示：



[5]Lee et al. Unsupervised learning of hierarchical representations with convolutional deep belief networks. In *Communications of ACM*, 10(54), 95–103, 2011.

总结：起源即是终点

哲学的终极问题：如何认识我自己？
计算给我们提供了一个粗糙的答案：

生命是物理规律创造的计算机，

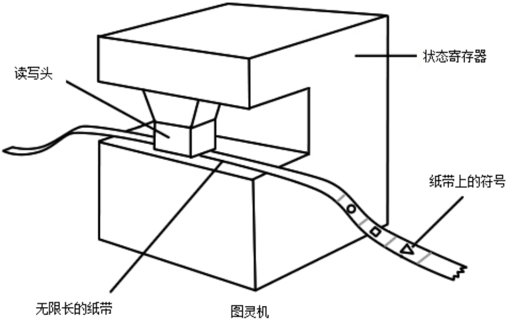
计算是理解物理世界乃至生命规律的工具。

Outline

- 从一个计数问题谈起
  - 一个家喻户晓的计数问题
  - 故事的缘起
- 进入微观世界
  - 神奇的物理世界
  - 统计物理与计数
- 生命与心灵的奇迹
  - 生命：物理世界中的计算机
  - 人造的智慧
- 计算：万物的起源和终点
  - 回归理论计算机科学
  - 起源即是终点

图灵的机器

图灵机 (Turing Machine) $M = \langle Q, \Gamma, b, \Sigma, \delta, q_0, F \rangle$
$M =$ 纸带 $+$ 程序 $\delta : Q \backslash F \times \Gamma \to Q \times \Gamma \times \{L, R\}$



现代计算机可以看作是有很长且能任意移动纸带的图灵机。

Church-Turing 论题

任何在算法上可计算的问题同样可由图灵机计算，当然包括你们在屏幕上看到的一切：你可以写出一个图灵机输出游戏的画面！

理论计算机科学：可计算性

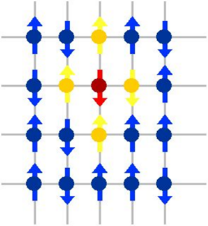
那是否意味着，我们有了计算机，就能计算一切？如果物理世界是由规律控制的，那我们是否能用计算预测未来？

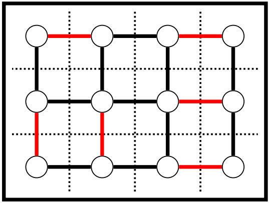
计算的能力

存在不可计算的问题，但离散有界的问题都可计算。

为什么无法模拟真实的物理世界？

需要足够大的计算机和足够长的时间，但这是我们没有的。





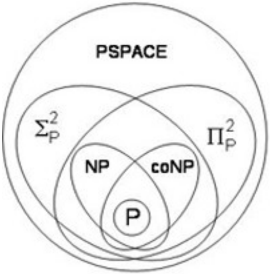
计算平面图的完备匹配数存在多项式时间 $O(n^{\omega})$ 的算法，但计算任意图的完备匹配数却是 #P-Complete 的[6]。目前已知的最好算法也是指数的。

[6] Valiant. "The complexity of computing the permanent". In *Theoretical Computer Science*, 8(2), 189–201.

理论计算机科学：计算复杂性

计算的限制

如果我们只有有限的时间和空间，什么问题可以解决，什么又不能？
特别的，就我们现今的计算机而言，我们能解决又不能解决什么问题？



Outline

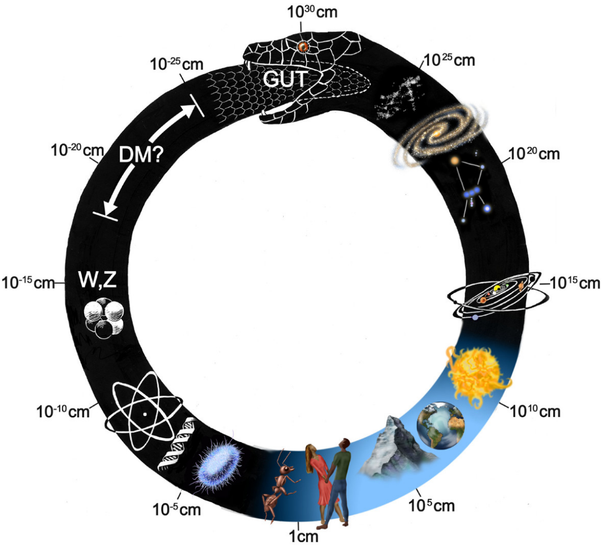
- 从一个计数问题谈起
  - 一个家喻户晓的计数问题
  - 故事的缘起
- 进入微观世界
  - 神奇的物理世界
  - 统计物理与计数
- 生命与心灵的奇迹
  - 生命：物理世界中的计算机
  - 人造的智慧
- 计算：万物的起源和终点
  - 回归理论计算机科学
  - 起源即是终点

我们身处何方，去到何处？

规则孕育了物理世界
物理世界创造了生命
生命拥有了意识和思维
思维认识了计算
计算回归了物理的本源
……

$\boxed{\text{我们为计算而生，终回到计算的长河中。}}$

起源即是终点



10^{30}cm
10^{-25}cm
GUT
10^{25}cm
10^{-20}cm
DM?
10^{20}cm
10^{-15}cm
W,Z
10^{15}cm
10^{-10}cm
10^{10}cm
10^{-5}cm
1cm
10^{5}cm

写在最后

只言片语的说教是苍白的
科学是深刻的，也非遥不可及的
请永葆应有的敬畏，和纯真的热情

——写给十年前的自己