



复杂系统与计算统计物理

徐莉梅^{1*}, 金瑜亮^{2*}, 孙刚³, 周海军², 赵鸿⁴, 马余强^{5*}

1. 北京大学物理学院, 北京 100871;

2. 中国科学院理论物理研究所, 北京 100190;

3. 北京师范大学物理学系, 北京 100875;

4. 厦门大学物理科学与技术学院, 厦门 361005;

5. 南京大学物理学院, 南京 210093

*联系人, 徐莉梅, E-mail: limei.xu@pku.edu.cn; 金瑜亮, E-mail: yuliangjin@mail.itp.ac.cn; 马余强, E-mail: myqiang@nju.edu.cn

收稿日期: 2024-03-08; 接受日期: 2024-03-11; 网络出版日期: 2024-03-21

摘要 用统计物理和计算物理方法研究复杂系统是当前物理学的重要前沿之一. 本文主要针对国家自然科学基金“计算物理”申请代码所覆盖的“复杂系统与计算统计物理”方向的现状和前沿挑战进行简单介绍, 探讨新兴领域, 并对其未来发展进行展望.

关键词 复杂系统, 统计物理计算方法, 无序体系, 非平衡热力学, 非线性动力学

PACS: 89.75.-k, 05.10.-a, 61.43.-j, 05.70.Ln, 05.45.-a

1 背景与现状

复杂系统泛指无法用简单物理规律描述的体系, 其典型特征是组成单元之间以及体系与环境间的多体相互作用导致了多尺度、非线性、非平衡等效应, 从而在宏观上呈现出与简单体系截然不同的性质. 复杂系统的研究对象既包括可呈现结构无序、复杂流体特性的颗粒物质、胶体、高分子聚合物、液晶、生物体等物质体系, 也包括极其复杂的地球与气候系统, 还包括社交网络、人工神经网络等复杂网络体系. 因此, 复杂系统科学与其他领域高度交叉, 研究内容涉及物理、化学、生命科学、材料科学、神经科学、人工智能、社会金融系统、人文社科等多个领域的前沿问

题. 复杂系统和统计物理、计算物理结合, 成为推动当代物理学发展的强大驱动力之一^[1-4]. 2021年, 三位科学家因其对复杂系统研究的突出贡献而获得了诺贝尔物理学奖, 标志着复杂系统的研究成为物理学前沿的重要分支. 其中, Manabe^[2]和Hasselmann在气候预报上的成功, 正是非线性动力学、统计物理、计算物理交叉融合的成果; 而Parisi^[3]在自旋玻璃方面的开创性工作则是应用统计物理思想和方法研究复杂体系的重要里程碑.

复杂系统丰富的性质和现象来源于大量个体的相互作用和集体行为, 契合统计物理的研究范畴. 基于计算机而发展起来的计算方法是研究复杂体系强有力的工具, 与解析理论、实验观测等其他研究手段既相互

引用格式: 徐莉梅, 金瑜亮, 孙刚, 等. 复杂系统与计算统计物理. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2024, 54: 247108

Xu L M, Jin Y L, Sun G, et al. Complex systems and computational statistical physics (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2024, 54: 247108, doi: 10.1360/SSPMA-2024-0096

独立, 又互为补充. 传统的统计物理计算方法, 如蒙特卡罗方法、分子动力学模拟、连续介质有限元模拟、非线性方程方法等, 都在复杂系统的研究中得到了广泛的应用, 同时也面临着新的挑战. 近年来, 随着大数据分析、机器学习、人工神经网络等算法技术的蓬勃发展, 复杂系统的研究范式得到了进一步的拓展. 总的来说, 复杂系统多尺度、非线性、远离平衡态、多体效应、多样性等特征, 超越了现有物理理论的一般适用范围. 发掘纷杂多样的现象背后的本质物理机制, 从而将这类体系的理解纳入到物理学的框架中, 是复杂系统研究的主要目标.

本文旨在抛砖引玉, 通过综述复杂系统与计算统计物理的学科现状和前沿挑战, 启发未来的突破. 接下来我们首先介绍本领域常用的计算方法, 然后把研究问题分为与复杂系统结构、热力学、动力学相关的三类分别讨论. 本领域中的新兴方向, 例如与人工智能的交叉研究以及基于超级计算机的大规模计算, 将单独介绍. 最后, 我们对本文进行总结并对学科未来的发展进行展望.

2 方法、问题与前沿挑战

2.1 复杂系统与统计物理计算方法

本节我们介绍统计物理与复杂系统的常见计算方法. 其中蒙特卡罗方法和分子动力学模拟是最被广泛使用的方法, 前者起源于统计力学的系综理论, 后者则模拟大量粒子遵循牛顿运动方程的动力学演化过程. 非线性方程数值计算的方法被用于研究和弛豫、输运、涨落等现象相关的非线性动力学过程. 能量绘景方法是针对具有大量亚稳态或局域能量极小值的热力学体系而设计的优化算法, 在过冷液体、玻璃等系统中有广泛应用. 此外, 在复杂体系、统计物理与人工智能、高性能计算的交叉领域, 各种新方法在近年来也不断涌现并蓬勃发展.

2.1.1 蒙特卡罗方法

蒙特卡罗方法用统计力学的思想计算物理量的系综平均值, 并通过重要性采样解决在计算配分函数时遇到的高维积分问题. 蒙特卡罗方法被广泛应用于研究复杂系统的结构、有序程度、相变及临界现象等问题^[5,6]. 其发展经历了几个阶段, 从20世纪50年代的Me-

tropolis算法^[7], 到80年代的团簇算法^[8], 再到21世纪初的蠕虫算法^[9], 在处理随机采样效率、动力学行为模拟、高维势能面和局域能量极小点计算等问题上都有了长足进步. 蒙特卡罗方法与不同的数值技术相结合, 发展出了蒙特卡罗重整化群^[10]、蒙特卡罗数值解析延拓^[11,12]和蒙特卡罗转移矩阵^[13]等新方法. 近二十年来, 路径蒙特卡罗和费曼图图形蒙特卡罗等^[14,15]先进复杂的算法也陆续出现. 目前, 蒙特卡罗方法在一些情况下仍存在局限性, 特别是对于费米子多体体系和具有复杂能量绘景的玻璃态体系, 采样效率尚待进一步提高.

2.1.2 分子动力学模拟

分子动力学模拟追踪每一个粒子按照牛顿方程的动态演化过程. 因此, 与蒙特卡罗算法相比, 分子动力学可以模拟“真实”的动力学过程^[16,17]. 在复杂系统中, 分子动力学模拟面临着新的挑战, 包括如何高效地模拟多时空尺度的动力学、如何获得稀有事件、如何模拟缓慢的非平衡弛豫过程等. 分子动力学与增强取样技术(如元动力学、伞型抽样和向前流抽样等方法)结合^[18,19], 其效率得到了有效提高, 被用于研究结晶成核、材料生长、非平衡态转变、离子传输、结构演化以及生物系统中的动态行为等问题^[20-23]. 分子动力学模拟结合机器学习和人工智能技术, 可能成为在不同维度和不同尺度上解决复杂系统动力学问题的有效手段^[24,25].

2.1.3 非线性方程数值计算

复杂系统中的非线性问题一般情况下无法进行严格的解析求解, 这时数值计算成为必不可少的替代工具. 自1953年Fermi等人^[26]使用计算机研究非线性耦合振子系统的能均分问题以来, 数值方法已被广泛应用于非线性动力学及非平衡统计物理的研究. 近年来, 非平衡统计物理研究主要涉及弛豫(热化)、输运和涨落三个方面, 非线性在其中都扮演着重要的角色, 其对应的数值方法也得到了迅速发展. 例如, 对于布朗马达和低维系统热传导问题, 发展了随机微分方程的数值解法^[27]及事件驱动算法^[28]; 对于哈密顿系统的热化问题, 发展了高精度保能量的辛算法^[29]; 对于离散状态的随机过程, 发展了Gillespie算法^[30]; 对于量子开放系统, 发展了级联运动方程和数值重整化群方法^[31]. 另

外,在混沌动力学方面,目前对少体系统的研究已经较为深入^[32],而对大自由度系统混沌行为的理解则并不清楚.在这方面,发展高自由度系统李雅普诺夫指数谱的数值算法^[33],将有助于理解在热力学极限下的热化行为.

2.1.4 能量绘景方法

玻璃态也称非晶态,即原子或分子排布不具有重复单元,且动力学过程极为缓慢的物质形态.无序玻璃态体系存在大量的热力学亚稳态(局域能量极小值对应的构型).在这类体系中,如果弛豫时间远超模拟或实验时间尺度,我们不会观测到热力学稳态(如晶体);这时,理解亚稳态的性质就极为重要.1969年Goldstein^[34]在研究过冷液体动力学行为时首次提出了能量绘景方法,此后,该方法逐渐成为研究玻璃态体系的常用有效手段.能量绘景描述了系统的势能或自由能在构型空间中的分布,可用来计算系统的配分函数,进而获得系统的自由能、物态方程等宏观物性.能量绘景上鞍点的分布和性质,可以用来研究非平衡动力学过程,例如蛋白质的折叠动力学等^[35-37].能量绘景的概念和算法也可拓展到其他领域,用于研究优化问题的解空间、金融系统中的关键节点和崩溃风险等问题^[38].需要指出的是,大量复杂体系能量绘景上的局域极小值数量与体系规模呈指数关系^[39],这意味着一般算法无法在多项式时间内遍历所有极小值.因而,能量绘景方法和计算复杂度理论领域的非确定性多项式时间问题(NP问题)有着深刻的联系.

2.2 复杂系统中与结构相关的计算问题

2.2.1 非晶物质结构序参量

在玻璃等非晶物质中,原子或分子排列不呈现晶体序,因而也无法明确定义位错和旋向失配等结构缺陷.寻找非晶物质中的隐藏结构“序”,定位缺陷,并将其与材料性能关联是一项具有挑战性的任务.这类体系的结构往往跨越多个空间尺度,一般情况下难以穷举所有本征结构.近年来,随着计算方法的发展,攻克这一难题有了可能性.例如,用本征振动模式反映体系的结构和力学等信息^[40,41];从“拓扑序”的角度来表征结构特征^[42];利用大数据分析以及主动学习等方法挖掘隐藏序参量等^[43].这类研究还有助于揭示有序结构如何从无序体系中诞生并演化^[44],对于理解液体结晶

的微观机制等问题有重要意义.

2.2.2 生物大分子构象

生物大分子(如蛋白质、核酸等)在发挥生物功能时,其特定构象或者构象系综的形成至关重要.其中蛋白质折叠问题(指氨基酸序列信息所对应的一维结构如何通过氨基酸相互作用折叠形成特定的三维结构的问题)涉及复杂的微观因素,如氢键、范德华相互作用、静电相互作用、疏水相互作用、骨架二面角倾向性、链构象熵等.这些微观因素的异质性导致形成的结构缺乏对称性和正则性,并且对应的自由能极其复杂.核酸折叠过程也具有类似性质,而且折叠形成的三维结构更加动态.此外,自然界中广泛存在固有无序蛋白,在生理状态下不会折叠形成特定三维结构的蛋白质,其动态构象系综及所介导的液-液相分离是当前研究的前沿研究方向之一^[45].生物大分子系统的复杂特点使得传统的统计物理解析研究方法(例如高分子理论等)几乎全都失效.因此,用计算机模拟,特别是分子动力学模拟方法,在保留分子相互作用细节的基础上对生物大分子的结构、热力学和动力学进行研究变得十分必要.然而,目前分子动力学方法主要适用于研究有限数目的小型简单蛋白质的折叠过程^[46],并且在预测稳定性和热力学性质上存在不足.因此,发展更大时空尺度的高效算法成为当前的迫切需求.此外,生物大分子折叠的热力学和动力学过程与人工合成大分子的差异,尤其是从一个随机的构型折叠到三维天然结构的动力学过程缓慢的问题,尚未完全解决.这涉及多种因素,包括生物大分子的复杂性以及可能存在的调节机制,是一个当前生命科学与统计物理交叉领域的重要挑战.因此,发展针对生物大分子高度异质系统的统计理论也将对改进相关分子动力学模拟方法具有指导意义.

2.2.3 复杂网络拓扑结构

很多实际复杂体系可以在数学上抽象成由节点和连边所组成的图,称为复杂网络.常见的复杂网络包括社会关系网络、电力网络、通讯网络、神经网络、蛋白质和基因相互作用网络、金融网络、医学网络等.复杂网络通常包含大量节点和连接,展现出高度复杂的拓扑结构与丰富的特性^[47].例如,在“小世界”网络中^[48],大部分节点通过短距离的边相互连接,同时由

于一些长距离的“跳跃”连接使得节点间的平均距离显著减小; 在无标度网络中^[49], 只有少量的节点拥有非常高的度(连接数), 而大部分节点的度非常低, 这使得网络具有高鲁棒性和抗攻击性; 在模块化网络(如生物学网络和社交网络)中^[50], 节点被分成不同的模块或社区, 每个模块内部连接密集, 而模块之间则连接稀疏; 在分层网络(如信息网络)中^[51,52], 节点被组织成多个层次, 每个层次内部连接密集, 而层次之间的连接稀疏. 在实际系统中, 这些拓扑结构之间并不一定相互独立. 实际上, 许多网络可能同时具有多种拓扑特征. 用计算和数值统计方法研究复杂网络拓扑结构既面临挑战, 又充满机遇. 复杂网络作为复杂系统的基本数学模型, 深入研究其结构特性对于理解各种复杂系统的性质、功能和行为具有重要科学和应用价值.

2.3 复杂系统中与热力学相关的计算问题

2.3.1 计算方法研究非平衡相变的热力学本质

非平衡相变的物理机制是当代统计物理的核心问题之一. 类似于平衡态相变, 非平衡相变也分为连续相变(序参量连续变化、关联长度发散)和不连续相变(序参量不连续变化)两类. 非平衡体系中常见的相变(或转变)包括过冷液体的玻璃化、定向渗流、吸收相变、浸润相变、颗粒物质的阻塞相变、非晶固体的屈服和熔化、活性物质的动力学相变等^[53-56]. 这其中的一些非平衡相变(例如活性物质的动力学相变)^[54]完全是由动力学驱动的, 与热力学无关. 而另外一些非平衡相变(例如过冷液体的玻璃化转变)过程则与热力学密切相关^[57,58]. 理解这些非平衡相变过程的热力学机制是对平衡态热力学和统计物理、平衡态相变理论的重要拓展. 然而, 由于体系处于非平衡态, 在系综的构建、微观构型的采样、热力学量的统计等方面都会遇到新的计算问题. 例如, Kauzmann佯谬^[59]问题, 即当过冷液体在快速降温至某一温度时, 过冷液体的熵低于晶体的熵, 液态转变为“理想玻璃”态的设想^[60]. 然而, 要验证理想玻璃相变的存在性, 需要在模拟中获得低温平衡液态, 这对蒙特卡罗、分子动力学模拟的效率都提出了挑战.

2.3.2 自旋玻璃中的热力学问题、计算方法及在其他领域的应用

自旋玻璃具有典型的玻璃态特征: 自旋的指向随

机无序, 同时体系的动力学弛豫时间发散. 很多具有多体相互作用的系统(如磁性系统和混合物)都呈现自旋玻璃的性质^[61,62]. 自旋玻璃中的核心热力学问题是在有限维度下, 自旋玻璃相变是否严格存在^[63-65]. 有限维自旋玻璃系统的低温性质也是前沿挑战问题之一. 自旋玻璃模型同时也是无序复杂系统的基本数学模型, 在神经科学、生物信息学、人工智能、认知科学等领域都有广泛应用^[66-69]. 针对自旋玻璃中的自由能和熵等热力学量的计算, 物理学家在平均场理论的启发下发展了消息传递算法^[66,70]. 近年来, 消息传递算法在处理组合优化问题和约束满足问题上展现出了很好的效果^[71,72]. 面临的挑战是如何进一步提高消息传递算法的效率和精度, 使复杂能量绘景的结构更好地体现在迭代方程中, 并拓展有丰富内部结构的大规模组合优化问题. 自旋玻璃平均场理论与深度神经网络的结合也是近期有望取得重要进展的前沿研究课题. 自旋玻璃方法用于随机组合优化问题和随机统计推断问题的求解^[73,74], 对于理解NP-完备计算复杂性的本质有重要的意义, 并有助于启发新的优化算法思想的产生.

2.4 复杂系统中与动力学相关的计算问题

2.4.1 软物质非平衡动力学和流变学

软物质的概念最早由1991年诺贝尔物理学奖得主 de Gennes^[75]提出, 是一类在热涨落或外力下较容易产生结构变化的物质, 包括高分子、液晶、胶体、玻璃、颗粒物质、活性物质以及一些生物物质等. 在软物质体系中, 基本单元通过相互作用涌现出复杂的结构和动力学^[76,77]. 传统的分子动力学模拟、蒙特卡罗模拟、针对连续介质的有限元模拟以及近年来迅速发展的机器学习、神经网络等计算方法都在软物质研究中扮演了重要角色^[78,79].

软物质的动力学行为大致分为两大类: 自发的非平衡动力学过程 and 在外力作用下的流变学行为. 自发动力学包括非平衡初态的结构弛豫、自组装、蛋白质折叠等过程^[80,81]. 分子动力学模拟可为理解这些过程提供详细的微观结构和动力学演化信息. 近年来, 元动力学(Metadynamics)^[82]、副本交换动力学^[83]、交换蒙特卡罗^[84]等加速方法使得计算机模拟在某些体系中达到甚至超过实验的时间尺度, 为建立微观机制和宏观现象的联系提供了极大便利. 在外力或形变下,

软物质体系呈现出极为丰富的流变学行为^[56,85]. 这里的外力不仅指压缩、剪切等常见的机械力, 也包括电磁作用、活性自驱动力等更广义的相互作用. 在较小外力下, 软物质体系往往呈现可逆的线性或非线性的弹性形变; 当应力超过弹性极限时, 发生不可逆的塑性形变; 进一步增加应力则可能导致永久性的整体破坏-屈服. 由于软物质的固态不具备周期性晶体结构、液态不属于简单牛顿流体, 因此传统的固体和液体理论都不适用. 目前, 分子动力学、离散元方法等模拟和计算手段成为研究软物质流变学不可或缺的工具. 另外, 流变学仿真模拟对于软物质材料的开发和实际应用有重要意义.

2.4.2 活性物质动力学

活性物质泛指通过微尺度的能量耗散维持非平衡状态的系统, 包括细胞骨架、组织细胞、微观和宏观生物群落以及人工制造的活性液晶、胶体、机器人集群等. 由于非平衡特性的存在, 活性物质表现出多种反常的热力学和动力学特性. 例如, 在没有吸引相互作用条件下形成动力学团簇和相分离^[86]、低维下形成违背Mermin-Wagner定理的长程序^[87]、在缺乏长程耦合和内在振荡条件下出现集体同步振动^[88]、偏离临界点的巨数涨落和超均匀涨落^[89]等. 分子动力学模拟、蒙特卡罗方法、格子玻尔兹曼机、离散元方法、多粒子碰撞动力学、粒子-流场耦合方法、流体动力学方程数值解等计算方法可用来研究活性粒子间的微观相互作用和运动模式以及集体动力学、相分离、相变和自组装等宏观现象^[90,91]. 其中活性向列相拓扑缺陷和活性湍流的大尺度动力学^[92]、互易和手性对称性破缺等机制导致的拓扑非平庸动力学态^[93]、活性玻璃态和经典玻璃态的区别和联系^[94]等问题的研究特别依赖高效的理论计算方法. 此外, 活性物质的自驱动力引起的动力学和无活性物质的剪切流变学之间, 也可能存在共性^[95]. 发展活性物质的模型, 通过大规模模拟及数值计算获得可靠的宏观动力学和相变信息, 揭示非平衡条件下的普适性原理, 是理论计算的主要任务.

2.4.3 复杂网络动力学

复杂网络不但有丰富的静态拓扑结构, 也可以有复杂的动力学过程. 基于统计物理的计算方法是研究复杂网络动态行为的关键工具. 复杂网络中的动力学

相关问题包括: 基于微分方程、离散时间步或者Agent-Based模拟等方法, 结合动态模型, 研究网络的时间演化过程(例如随时间变化的节点状态、连接的建立和断裂等); 基于拉普拉斯矩阵的控制策略、自适应控制等方法研究复杂网络的节点同步和临界现象, 并进一步控制网络行为^[96]; 利用随机过程和随机图理论研究网络中的随机事件和概率性行为(如随机游走、马尔可夫链等)^[49]. 这些方法不仅可以用以研究网络的演化、稳定性和动态行为, 还可以对网络结构进行采样, 把网络的局部或者全局拓扑结构嵌入到向量空间中, 为网络上的机器学习技术提供基础.

2.4.4 神经网络脉冲动力学

生物神经网络系统中, 单个神经元收集其他神经元传递的电信号, 整合这些输入信号, 再发送动作电位到其他神经元细胞, 进而驱动个体产生动作对环境作出反应. 神经元细胞的相互作用形成一个巨大的神经网络, 内部有多种层次结构和时间尺度, 且系统时时刻刻都处于动态更新的状态. 研究脉冲神经网络模型是理解生物神经网络的学习、记忆、认知决策等集体性质的重要途径^[97]. 近年来神经科学实验观测手段有许多革命性进步, 数据累积越来越多, 定量研究神经系统的信息处理机制逐渐成为统计物理与计算物理的前沿课题. 在单个神经元的层次, 实验表明单个锥体神经元细胞已经是一个复杂的信息处理系统^[98]. 在神经元相互作用的层次, 需要考虑超出Hebbian学习机制的高阶学习机制^[99], 并从能量利用和信息传输优化的角度看待网络结构的演化和连接参数的复杂性^[100].

2.5 复杂体系、统计物理与人工智能的交叉研究

2.5.1 用统计物理方法研究人工智能算法机制

人工智能、机器学习算法的研究关心数据变量的联合分布, 而统计物理则关心微观构型的联合分布, 这两者有着深刻而广泛的相似性. 事实上, 20世纪80年代非监督学习兴起之时, 在经典的机器学习模型中, 统计物理玻尔兹曼分布就已被用来描述数据变量的联合分布概率, 从而逐步建立了两个领域的联系. 例如, 著名的霍普菲尔德(Hopfield)人工神经网络^[101]和统计物理的伊辛(Ising)模型非常相似. 在人工智能领域中应用广泛的玻尔兹曼学习机^[102], 其结构和算法都基于玻尔兹曼分布. 最近发展的基于神经网络的生成模型(如扩

散模型等)^[103]也受到了统计物理的启发. 另外, 统计物理的一些基本概念, 如熵(信息熵)、自由能、能量绘景等, 也被应用于人工神经网络的理解和算法设计^[104].

目前, 机器学习, 特别是基于深度人工神经网络的机器学习, 存在着“黑箱”特征, 缺乏可解释性和透明性. 神经网络的设计往往基于经验和常识, 缺乏一般性的理论指导. 统计物理和复杂系统科学的深度介入可能为揭示机器学习的深层运行机制提供突破. 例如, 神经网络作为一个复杂动力学系统, 被发现具有相变和自组织临界现象, 特别是在深度网络中, 算法的泛化能力或推广能力随着网络的复杂度增加具有类似从玻璃态到晶体态的相变. 深层神经网络解空间的结构与玻璃态物质的相空间的结构具有相似性, 这种结构也许可以解释深层神经网络的高效性和泛化能力^[105,106]. 另外, 神经网络的优化求解过程也很类似于无序玻璃体系的非平衡动力学弛豫过程^[107].

2.5.2 用人工智能算法研究复杂体系

近年来, 人工智能蓬勃发展, AlphaGo, AlphaFold, ChatGPT等软件的横空出世, 预示着人工智能将深刻地影响人类社会各个方面, 包括科学研究的范式. 复杂系统并不满足简单统一的物理规律; 同时, 由于实验技术和模拟方法的迅速发展, 积累了各类复杂体系的大量观测数据. 这些特点使得复杂系统成为运用人工智能工具开展研究的理想平台. 例如, 在分子生物学方面, 人工智能方法在蛋白质折叠和蛋白质设计方面取得了突飞猛进的成果^[108]; 在分子动力学模拟中, 通过深度神经网络从*ab initio*方法所产生的数据中学习力场, 大幅度加速了模拟的计算速度和提升了计算精度^[109]; 在经典统计物理中, 利用自回归神经网络表达变分分布, 通过强化学习优化变分自由能拟合玻尔兹曼分布^[43]; 在无序体系的研究中, 基于人工智能的方法被用于探测隐藏结构序参量^[110]; 在相变研究中, 机器学习方法被用于识别相变并确定临界性质^[111]; 在活性物质的研究中, 数据驱动模型研究及运动方程的机器学习被用于识别、分类丰富的非线性集体动力学^[112]; 在量子计算领域, 张量网络方法已经在设计机

器学习高效算法方面展现了优越性, 并用经典计算机挑战了量子霸权^[113,114]; 在复杂网络领域, 图卷积或图注意力神经网络方法被用于分析和预测复杂网络的结构和动态特性等.

2.6 基于超级计算机的大规模高性能计算

当代计算能力的突飞猛进得益于软件算法以及计算机硬件相辅相成的发展, 特别是GPU与超级计算机的出现及其与并行算法的高效结合, 为大规模高性能计算提供了可能. 近年来, 为解决统计物理、复杂系统领域的核心计算问题, 诞生了一些专用的超级计算机. 例如, 美国D. E. Shaw研究中心建造的Anton超级计算机, 可以高效地对蛋白质和其他生物大分子进行分子动力学模拟^[115]. 意大利和西班牙的研究团队建造的Janus超级计算机^[116], 专门用于自旋玻璃体系的模拟; 在某些情况下, Janus超算获得的微观计算结果在空间规模和时间尺度上已可比拟宏观实验结果^[117]. 新一代E级(每秒浮点运算百亿亿次)超算的出现也为解决复杂系统、统计物理中长期遗留的计算难题提供了契机.

3 总结

本文主要针对复杂系统与统计物理中常用的计算方法、核心问题以及新兴方向进行了简单介绍. 近年来, 在国家自然科学基金委员会的大力支持和积极推动下, 我国复杂系统与统计物理交叉领域的研究队伍逐渐壮大. 统计物理计算方法应用在复杂系统, 特别是生命系统、软物质与玻璃体系、复杂网络、机器学习与人工智能等领域, 取得了一批有国际影响力的成果, 极大地拓宽了物理学研究的内涵. 复杂系统、统计物理与计算物理已经形成了相互交融、相互促进、共同发展的局面. 在“计算物理”代码下新增“复杂系统与计算统计物理”方向, 这一举措将为我国复杂系统与计算统计物理学科的发展带来更广阔的发展空间, 有望进一步推动国内学者在交叉领域取得重要成果并对开辟科技前沿做出贡献.

致谢 本文在撰写过程中咨询了汤超、邓友金、黄吉平、王延珩、张潘、吕琳媛、童华、贺达海、胡延庆、施夏清、雷群利、丁泓铭、李敬源、杨晓静、陈杰等多位同行专家, 参考了他们的意见, 在此一并感谢.

参考文献

- 1 Warshel A. Multiscale modeling of biological functions: From enzymes to molecular machines (Nobel Lecture). *Angew Chem Int Ed*, 2014, 53: 10020–10031
- 2 Manabe S. Nobel Lecture: Physical modeling of Earth's climate. *Rev Mod Phys*, 2023, 95: 010501
- 3 Parisi G. Nobel Lecture: Multiple equilibria. *Rev Mod Phys*, 2023, 95: 030501
- 4 Fang X, Kruse K, Lu T, et al. Nonequilibrium physics in biology. *Rev Mod Phys*, 2019, 91: 045004
- 5 Binder K. The Monte Carlo method for the study of phase transitions: A review of some recent progress. *J Comput Phys*, 1985, 59: 1–55
- 6 Shao H, Guo W, Sandvik A W. Quantum criticality with two length scales. *Science*, 2016, 352: 213–216
- 7 Metropolis N, Ulam S. The Monte Carlo method. *J Am Statistical Assoc*, 1949, 44: 335–341
- 8 Wolff U. Collective Monte Carlo updating for spin systems. *Phys Rev Lett*, 1989, 62: 361–364
- 9 Prokof'ev N, Svistunov B. Worm algorithms for classical statistical models. *Phys Rev Lett*, 2001, 87: 160601
- 10 Swendsen R H. Monte Carlo renormalization group. *Phys Rev Lett*, 1979, 42: 859–861
- 11 Jarrell M, Gubernatis J E. Bayesian inference and the analytic continuation of imaginary-time quantum Monte Carlo data. *Phys Rep*, 1996, 269: 133–195
- 12 Shao H, Sandvik A W. Progress on stochastic analytic continuation of quantum Monte Carlo data. *Phys Rep*, 2023, 1003: 1–88
- 13 Wang J S, Swendsen R H. Transition matrix Monte Carlo method. *J Statistical Phys*, 2002, 106: 245–285
- 14 Prokof'ev N V, Svistunov B V. Polaron problem by diagrammatic quantum Monte Carlo. *Phys Rev Lett*, 1998, 81: 2514–2517
- 15 Van Houcke K, Kozik E, Prokof'ev N, et al. Diagrammatic Monte Carlo. *Phys Procedia*, 2010, 6: 95–105
- 16 Alder B J, Wainwright T E. Phase transition for a hard sphere system. *J Chem Phys*, 1957, 27: 1208–1209
- 17 Rahman A. Correlations in the motion of atoms in liquid argon. *Phys Rev*, 1964, 136: A405–A411
- 18 Torrie G M, Valleau J P. Nonphysical sampling distributions in Monte Carlo free-energy estimation: Umbrella sampling. *J Comput Phys*, 1977, 23: 187–199
- 19 Laio A, Parrinello M. Escaping free-energy minima. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2002, 99: 12562–12566
- 20 ten Wolde P R, Frenkel D. Computer simulation study of gas-liquid nucleation in a Lennard-Jones system. *J Chem Phys*, 1998, 109: 9901–9918
- 21 Zhang Y, Voth G A. Combined metadynamics and umbrella sampling method for the calculation of ion permeation free energy profiles. *J Chem Theor Comput*, 2011, 7: 2277–2283
- 22 Furini S, Domene C. Computational studies of transport in ion channels using metadynamics. *Biochim Biophys Acta (BBA)-Biomembranes*, 2016, 1858: 1733–1740
- 23 Gao Q, Ai J, Tang S, et al. Fast crystal growth at ultra-low temperatures. *Nat Mater*, 2021, 20: 1431–1439
- 24 Jackson N E, Savoie B M, Statt A, et al. Introduction to machine learning for molecular simulation. *J Chem Theor Comput*, 2023, 19: 4335–4337
- 25 Tang B, Song Y, Qin M, et al. Machine learning-aided atomic structure identification of interfacial ionic hydrates from AFM images. *Natl Sci Rev*, 2023, 10: nwac282
- 26 Fermi E, Pasta J, Ulam S. Collected Papers of E. Fermi edited by E Segre. Chicago: University of Chicago Press, 1965
- 27 Honeycutt R L. Stochastic Runge-Kutta algorithms. I. White noise. *Phys Rev A*, 1992, 45: 600–603
- 28 Casati G, Prosen T. Anomalous heat conduction in a one-dimensional ideal gas. *Phys Rev E*, 2003, 67: 015203
- 29 Skokos C, Krimer D O, Komineas S, et al. Delocalization of wave packets in disordered nonlinear chains. *Phys Rev E*, 2009, 79: 056211
- 30 Gillespie D T. Stochastic simulation of chemical kinetics. *Annu Rev Phys Chem*, 2007, 58: 35–55
- 31 Lambert N, Raheja T, Cross S, et al. QuTiP-BoFiN: A bosonic and fermionic numerical hierarchical-equations-of-motion library with applications in light-harvesting, quantum control, and single-molecule electronics. *Phys Rev Res*, 2023, 5: 013181
- 32 Eckmann J P, Ruelle D. Ergodic theory of chaos and strange attractors. *Rev Mod Phys*, 1985, 57: 617–656
- 33 Gallavotti G. The Fermi-Pasta-Ulam Problem: A Status Report. New York: Springer, 2008
- 34 Goldstein M. Viscous liquids and the glass transition: A potential energy barrier picture. *J Chem Phys*, 1969, 51: 3728–3739
- 35 Mallamace F, Corsaro C, Mallamace D, et al. Energy landscape in protein folding and unfolding. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2016, 113: 3159–

3163

- 36 Sun G, Xu L, Giovambattista N. Anomalous features in the potential energy landscape of a waterlike monatomic model with liquid and glass polymorphism. *Phys Rev Lett*, 2018, 120: 035701
- 37 Liu Y, Sun G, Xu L. Glass polyamorphism in gallium: Two amorphous solid states and their transformation on the potential energy landscape. *J Chem Phys*, 2021, 154: 134503
- 38 Massen C P, Doye J P K. Identifying communities within energy landscapes. *Phys Rev E*, 2005, 71: 046101
- 39 Stillinger F H, Weber T A. Hidden structure in liquids. *Phys Rev A*, 1982, 25: 978–989
- 40 Silbert L E, Liu A J, Nagel S R. Normal modes in model jammed systems in three dimensions. *Phys Rev E*, 2009, 79: 021308
- 41 Sun G, Harrowell P. A general structural order parameter for the amorphous solidification of a supercooled liquid. *J Chem Phys*, 2022, 157: 024501
- 42 Wu Z W, Chen Y, Wang W H, et al. Topology of vibrational modes predicts plastic events in glasses. *Nat Commun*, 2023, 14: 2955
- 43 Schoenholz S S, Cubuk E D, Sussman D M, et al. A structural approach to relaxation in glassy liquids. *Nat Phys*, 2016, 12: 469–471
- 44 Sarupria S, Hall S W, Rogal J. Machine learning for molecular simulations of crystal nucleation and growth. *MRS Bull*, 2022, 47: 949–957
- 45 Hyman A A, Weber C A, Jülicher F. Liquid-liquid phase separation in biology. *Annu Rev Cell Dev Biol*, 2014, 30: 39–58
- 46 Chung H S, Piana-Agostinetti S, Shaw D E, et al. Structural origin of slow diffusion in protein folding. *Science*, 2015, 349: 1504–1510
- 47 Kantarci B, Labatut V. Classification of complex networks based on topological properties. In: Proceedings of the 2013 International Conference on Cloud and Green Computing. Piscataway: IEEE, 2013. 297–304
- 48 Watts D J, Strogatz S H. Collective dynamics of “small-world” networks. *Nature*, 1998, 393: 440–442
- 49 Barabasi A L, Albert R. Emergence of scaling in random networks. *Science*, 1999, 286: 509–512
- 50 Kashtan N, Alon U. Spontaneous evolution of modularity and network motifs. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2005, 102: 13773–13778
- 51 Lü L Y, Zhou T. Link Prediction (in Chinese). Beijing: Higher Education Press, 2013 [吕琳媛, 周涛. 链路预测. 北京: 高等教育出版社, 2013]
- 52 Lü L, Chen D, Ren X L, et al. Vital nodes identification in complex networks. *Phys Rep*, 2016, 650: 1–63
- 53 Stillinger F H, Debenedetti P G. Glass transition thermodynamics and kinetics. *Annu Rev Condens Matter Phys*, 2013, 4: 263–285
- 54 Täuber U C. Phase transitions and scaling in systems far from equilibrium. *Annu Rev Condens Matter Phys*, 2017, 8: 185–210
- 55 Sun G, Xu J, Harrowell P. The mechanism of the ultrafast crystal growth of pure metals from their melts. *Nat Mater*, 2018, 17: 881–886
- 56 Pan D, Wang Y, Yoshino H, et al. A review on shear jamming. *Phys Rep*, 2023, 1038: 1–18
- 57 Martyushev L M, Konovalov M S. Thermodynamic model of nonequilibrium phase transitions. *Phys Rev E*, 2011, 84: 011113
- 58 Urbani P, Jin Y, Yoshino H. The Gardner Glass. Spin Glass Theory and Far Beyond: Replica Symmetry Breaking after 40 Years. Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2023. 219–238
- 59 Kauzmann W. The nature of the glassy state and the behavior of liquids at low temperatures. *Chem Rev*, 1948, 43: 219–256
- 60 Parisi G, Zamponi F. Mean-field theory of hard sphere glasses and jamming. *Rev Mod Phys*, 2010, 82: 789–845
- 61 Kjäll J A, Bardarson J H, Pollmann F. Many-body localization in a disordered quantum Ising chain. *Phys Rev Lett*, 2014, 113: 107204
- 62 Harris R, Sato Y, Berkley A J, et al. Phase transitions in a programmable quantum spin glass simulator. *Science*, 2018, 361: 162–165
- 63 Fisher D S, Huse D A. Equilibrium behavior of the spin-glass ordered phase. *Phys Rev B*, 1988, 38: 386–411
- 64 Binder K, Schröder K. Phase transitions of a nearest-neighbor Ising-model spin glass. *Phys Rev B*, 1976, 14: 2142–2152
- 65 Kawashima N, Young A P. Phase transition in the three-dimensional $\pm J$ Ising spin glass. *Phys Rev B*, 1996, 53: R484–R487
- 66 Mezard M, Montanari A. Information, Physics, and Computation. New York: Oxford University Press, 2009
- 67 Zhou H J. Spin Glass and Message-Passing (in Chinese). Beijing: Science Press, 2015 [周海军. 自旋玻璃与消息传递. 北京: 科学出版社, 2015]
- 68 Yoshizawa T, Fumoto M, Yasukawa T J G I. Prediction of protein conformations by a spin glass model (I). *Genome Inform*, 1993, 4: 188–196
- 69 Venturelli D, Mandrà S, Knysh S, et al. Quantum optimization of fully connected spin glasses. *Phys Rev X*, 2015, 5: 031040
- 70 Mézard M, Parisi G, Virasoro M A. Spin Glass Theory and Beyond: An Introduction to the Replica Method and Its Applications. Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 1987
- 71 Kirkpatrick S, Gelatt Jr. C D, Vecchi M P. Optimization by simulated annealing. *Science*, 1983, 220: 671–680
- 72 Pelikan M, Goldberg D E. Hierarchical BOA solves Ising spin glasses and maxsat. In: Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference. Chicago: Springer, 2003. 1271–1282

- 73 Zhou H J. Spin glass approach to the feedback vertex set problem. *Eur Phys J B*, 2013, 86: 455
- 74 Franz S, Leone M, Ricci-Tersenghi F, et al. Exact solutions for diluted spin glasses and optimization problems. *Phys Rev Lett*, 2001, 87: 127209
- 75 de Gennes P G. Soft Matter. *Science*, 1992, 256: 495–497
- 76 Jones R A L. Soft Condensed Matter. 6th ed. Oxford: Oxford University Press, 2002
- 77 Doi M. Soft Matter Physics. Oxford: Oxford University Press, 2013
- 78 Praprotnik M, Site L D, Kremer K. Multiscale simulation of soft matter: From scale bridging to adaptive resolution. *Annu Rev Phys Chem*, 2008, 59: 545–571
- 79 Berthier L, Reichman D R. Modern computational studies of the glass transition. *Nat Rev Phys*, 2023, 5: 102–116
- 80 Debenedetti P G, Stillinger F H. Supercooled liquids and the glass transition. *Nature*, 2001, 410: 259–267
- 81 Dill K A, Ozkan S B, Shell M S, et al. The protein folding problem. *Annu Rev Biophys*, 2008, 37: 289–316
- 82 Barducci A, Bonomi M, Parrinello M. Metadynamics. *WIREs Comput Mol Sci*, 2011, 1: 826–843
- 83 Sugita Y, Okamoto Y. Replica-exchange molecular dynamics method for protein folding. *Chem Phys Lett*, 1999, 314: 141–151
- 84 Ninarello A, Berthier L, Coslovich D. Models and algorithms for the next generation of glass transition studies. *Phys Rev X*, 2017, 7: 021039
- 85 Bonn D, Denn M M, Berthier L, et al. Yield stress materials in soft condensed matter. *Rev Mod Phys*, 2017, 89: 035005
- 86 Marchetti M C, Joanny J F, Ramaswamy S, et al. Hydrodynamics of soft active matter. *Rev Mod Phys*, 2013, 85: 1143–1189
- 87 Chaté H. Dry aligning dilute active matter. *Annu Rev Condens Matter Phys*, 2020, 11: 189–212
- 88 Chen C, Liu S, Shi X, et al. Weak synchronization and large-scale collective oscillation in dense bacterial suspensions. *Nature*, 2017, 542: 210–214
- 89 Narayan V, Ramaswamy S, Menon N. Long-lived giant number fluctuations in a swarming granular nematic. *Science*, 2007, 317: 105–108
- 90 Shaebani M R, Wysocki A, Winkler R G, et al. Computational models for active matter. *Nat Rev Phys*, 2020, 2: 181–199
- 91 Ma Z, Yang M, Ni R. Dynamic assembly of active colloids: Theory and simulation. *Advcd Theor Sims*, 2020, 3: 2000021
- 92 Shi X Q, Ma Y Q. Topological structure dynamics revealing collective evolution in active nematics. *Nat Commun*, 2013, 4: 3013
- 93 Shankar S, Souslov A, Bowick M J, et al. Topological active matter. *Nat Rev Phys*, 2022, 4: 380–398
- 94 Berthier L, Kurchan J. Non-equilibrium glass transitions in driven and active matter. *Nat Phys*, 2013, 9: 310–314
- 95 Liao Q, Xu N. Criticality of the zero-temperature jamming transition probed by self-propelled particles. *Soft Matter*, 2018, 14: 853–860
- 96 Arenas A, Díaz-Guilera A, Kurths J, et al. Synchronization in complex networks. *Phys Rep*, 2008, 469: 93–153
- 97 Wang C M, Chen X Y, Zhang T Q, et al. Neural Modeling in Action: BrainPy (in Chinese). Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2023 [王超名, 陈啸宇, 张天秋, 等. 神经计算建模实战: 基于BrainPy. 北京: 电子工业出版社, 2023]
- 98 Aru J, Suzuki M, Larkum M E. Cellular mechanisms of conscious processing. *Trends Cogn Sci*, 2020, 24: 814–825
- 99 Capone C, Lupo C, Muratore P, et al. Beyond spiking networks: The computational advantages of dendritic amplification and input segregation. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2023, 120: e2220743120
- 100 Bialek W. Ambitions for theory in the physics of life. arXiv: 2401.15538
- 101 Hopfield J J. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities. *Proc Natl Acad Sci USA*, 1982, 79: 2554–2558
- 102 Ackley D, Hinton G, Sejnowski T. A learning algorithm for boltzmann machines. *Cogn Sci*, 1985, 9: 147–169
- 103 Zhang L, Han J, Wang H, et al. Deep potential molecular dynamics: A scalable model with the accuracy of quantum mechanics. *Phys Rev Lett*, 2018, 120: 143001
- 104 Wu D, Wang L, Zhang P. Solving statistical mechanics using variational autoregressive networks. *Phys Rev Lett*, 2019, 122: 080602
- 105 Geiger M, Spigler S, d’Ascoli S, et al. Jamming transition as a paradigm to understand the loss landscape of deep neural networks. *Phys Rev E*, 2019, 100: 012115
- 106 Yoshino H. Spatially heterogeneous learning by a deep student machine. *Phys Rev Res*, 2023, 5: 033068
- 107 Baity-Jesi M, Sagun L, Geiger M, et al. Comparing dynamics: Deep neural net works versus glassy systems. In: Proceedings of the International Conference on Machine Learning. Stockholm: PMLR, 2018. 314–323
- 108 Anand N, Eguchi R, Mathews I I, et al. Protein sequence design with a learned potential. *Nat Commun*, 2022, 13: 746
- 109 Schran C, Thiemann F L, Rowe P, et al. Machine learning potentials for complex aqueous systems made simple. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2021, 118: e2110077118

- 110 Noé F, Olsson S, Köhler J, et al. Boltzmann generators: Sampling equilibrium states of many-body systems with deep learning. *Science*, 2019, 365: eaaw1147
- 111 Li H, Jin Y, Jiang Y, et al. Determining the nonequilibrium criticality of a Gardner transition *via* a hybrid study of molecular simulations and machine learning. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2021, 118: e2017392118
- 112 Cichos F, Gustavsson K, Mehlig B, et al. Machine learning for active matter. *Nat Mach Intell*, 2020, 2: 94–103
- 113 Pan F, Chen K, Zhang P. Solving the sampling problem of the sycamore quantum circuits. *Phys Rev Lett*, 2022, 129: 090502
- 114 Pan F, Zhang P. Simulation of quantum circuits using the big-batch tensor network method. *Phys Rev Lett*, 2022, 128: 030501
- 115 Shaw D E, Deneroff M M, Dror R O, et al. Anton, a special-purpose machine for molecular dynamics simulation. *Commun ACM*, 2008, 51: 91–97
- 116 Belletti F, Cotallo M, Cruz A, et al. Janus: An FPGA-based system for high-performance scientific computing. *Comput Sci Eng*, 2009, 11: 48–58
- 117 Baity-Jesi M, Calore E, Cruz A, et al. Matching microscopic and macroscopic responses in glasses. *Phys Rev Lett*, 2017, 118: 157202

Complex systems and computational statistical physics

XU LiMei^{1*}, JIN YuLiang^{2*}, SUN Gang³, ZHOU HaiJun², ZHAO Hong⁴ & MA YuQiang^{5*}

¹ School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China;

² Institute of Theoretical Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;

³ School of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China;

⁴ College of Physics and Technology, Xiamen University, Xiamen 361005, China;

⁵ School of Physics, Nanjing University, Nanjing 210093, China

*Corresponding authors (XU LiMei, email: limei.xu@pku.edu.cn; JIN YuLiang, email: yuliangjin@mail.itp.ac.cn; MA YuQiang, email: myqiang@nju.edu.cn)

Using computational methods grounded in statistical mechanics to explore the behavior of complex systems and uncover underlying fundamental principles is on the frontiers of physics and interdisciplinary fields. This article delivers an overview of the current status and challenges in complex systems and computational statistical physics, discussing emerging directions and potential advancement in the future. We hope this article can provide some useful guidance for funding applications in the direction of “complex systems and computational statistical physics” funded by the National Natural Science Foundation of China.

complex systems, computational statistical physics, amorphous materials, non-equilibrium thermodynamics, nonlinear dynamics

PACS: 89.75.-k, 05.10.-a, 61.43.-j, 05.70.Ln, 05.45.-a

doi: [10.1360/SSPMA-2024-0096](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2024-0096)