交互作用粒子系统的分析与计算研究进展

◆ 李　磊 [1,2,†]　凌舒扬 [3,†]　王振富 [4,†]

1. 上海交通大学自然科学研究院，上海　200240；

2. 上海交通大学数学科学学院，上海　200240；

3. 上海纽约大学，上海市人工智能与深度学习前沿科学研究基地，上海　200127；

4. 北京大学北京国际数学研究中心，北京　100871

摘　要　作为一类基本的统计物理微观模型，交互作用粒子系统（多体系统）在从传统的物理、化学和生物到社会科学、数据科学等领域都发挥着重要的作用。由于初始数据的不确定性、交互作用的随机性以及环境噪声的影响，大部分的交互作用粒子系统都带有随机性。简要介绍了交互作用粒子系统的研究进展。在理论分析方面，介绍利用相对熵和调整自由能等工具处理具有奇异交互作用的交互作用粒子系统的平均场极限的新研究进展，同时也介绍交互作用粒子系统能量函数景观关于信噪比的精准相变关键值，以及斯蒂弗尔流形上粒子在梯度流的全局收敛性与信噪比的非随机充分条件等的新研究结果。在数值计算方面，介绍基于随机思想设计复杂度低且并行效率高的模拟和抽样算法方面的研究进展。这为我国在相关方面的数学研究和应用提供有力支撑。

关键词：交互作用粒子系统；随机多体系统；平均场极限；相变；非凸优化；随机分批

中图分类号：O17　　**文献标识码：**A

文章编号：1009-2412(2023)04-0059-06

DOI：10.3969/j.issn.1009-2412.2023.04.009

1　交互作用粒子系统简介及研究现状

多体系统通常也被称为交互作用粒子系统（简称“粒子系统”），泛指描述具有相互作用的粒子群体演化的模型，是由基本的物理定律（如薛定谔方程或牛顿定律等）得出的一类微观模型。经典的例子包括通过库伦势相互作用的等离子体模型和分子动力学模型，以及通过万有引力势相互作用的天体物理模型[1-2]。当然，如今粒子系统模型的应用已远超物理学的范畴，广泛出现在如脑神经模型[3]、社会科学中的群体问题[4-5]、统计抽样及机器学习[6]等领域。数学上，许多宏观的偏微分方程模型也有对应的粒子系统，如二维纳维-斯托克斯（Navier-Stokes）方程[7-9]可以由点涡(point vortex)模型来近似。由于初始数据的不确定性、交互作用的随机性以及环境噪声的影响，大部分的交互作用粒子系统都带有随机性，这类模型也被称为“随机多体系统”。本文考虑由常微分方程组或者随机微分方程组描述的带有随机性的粒子系统，不涉及量子多体系统以及离散状态空间的粒子系统。

描述粒子系统的方程从原理上来看似乎比较简单，但是研究却极其困难，因为粒子数目 N 通常非常巨大。在常见的物理系统中，粒子数目 N 可以达到 10^{23} 的数量级，而在其他应用中，粒子数目也有百万至亿以上的数量级。粒子系统在粒子数目很大的时候会出现很多统计性质，如相变现象，而这些统计性质几乎不可能通过微观模型进行分析。针对该问题，最常用的研究方法是复杂性约化，即通过一定的混沌性假设推导介观或宏观的非线性偏微分方程以及一些分布依赖的随机过程来描述粒子系统的统计行为。数学上关于多体粒子系统的分析，一方面是严格证明从微观粒子模型到介观或宏观连续模型过渡的极限过程。此类工作最早可以追溯到推

收稿日期：2023-06-08　　修回日期：2023-07-15

项目资助：国家重点研发计划青年科学家项目（2021YFA1002800）。

通信作者：李磊，副教授，leili2010@sjtu.edu.cn。

† 表示对本文的贡献等同。

导玻尔兹曼方程方面的工作，后来成为希尔伯特第六问题的一部分，其中一类重要问题是严格建立平均场尺度下的大粒子极限，即平均场极限。另一方面是基于粒子模型或宏观的偏微分方程模型来分析粒子系统本身的统计性质，如相变等。

从数学上严格证明粒子系统的平均场极限可以追溯到二十世纪六七十年代 McKean[10]、Braun 等 [1] 以及 Dobrushin[2] 等的研究。这些经典的研究成果以及后来很多推广的结论本质上是柯西–李普希茨（Cauchy-Lipschitz）理论中的稳定性估计，具体做法包括耦合的方法 [11–12] 以及极限偏微分方程在测度空间解的稳定性估计（如 Dobrushin 估计 [2]）。对于很多实际的物理模型，交互作用力实际上是奇异的，如库伦力和点涡模型中毕奥–萨伐尔律（Biot-Savart）的相互作用、天体模型以及趋化模型 [13] 中的万有引力型的吸引作用等。而上述的经典方法很难应用到这些奇异相互作用的研究中，因此目前的研究重点之一是针对奇异相互作用建立严格的平均场极限以及研究涨落行为。

相变指物态的转变，用数学描述，即当参数（如磁场、温度和信噪比等）发生变化后，粒子系统自由能函数的极小值点数量及位置或者极小值处某个有物理意义的导数发生突变的过程（一个极小值点为一个相），这方面已经有很多相关研究 [14–16]。很多非凸优化问题，如相位恢复 [17]、角同步化 [18] 和张量计算 [19] 等，可以被视为对于某一个交互粒子系统对应的能量函数的极小化问题。梯度流方法常常能收敛到全局最优解，这可以从能量函数关于信噪比变化的相变来理解。优化问题中的输入数据，也就是粒子之间的交互作用关系可以视为“信号 + 噪声”形式。这个“信号”和“噪声”是广义的，如数据量与图连接度可以认为是信号强度的度量。事实上，在信噪比大的时候，很多非凸目标函数仅有一个局部最优解，但是当噪声变大时，会产生大量的局部最优解。探索非凸能量函数的景观（也就是最优解和鞍点的数量和分布等）如何依赖于信噪比大小的关系对求解非凸优化问题具有重要的科学意义。另外，在动力系统领域，考虑齐次藏本模型（Kuramoto model）在什么条件下能拥有全局同步化的性质是一直以来被广泛关注的问题 [20–22]，而这个问题其实是研究能量函数景观随着图连接度何时发生相变的问题。

在数值计算上，基于宏观偏微分方程模型进行数值模拟虽然效率高，但有时候无法准确描述粒子层面的一些性质 [23]，因此人们也致力于直接模拟微观的粒子系统 [24]，以期较为准确地分析其统计性质。交互作用导致直接模拟粒子系统的复杂度为 $O(N^2)$，即使通过周期盒子或者巨粒子（macroparticles）等方式使得粒子数目低于 10^{23} 的数量级，直接模拟在目前也是不现实的。因此，人们致力于构造 $O(N \log N)$ 或者 $O(N)$ 的计算方法。同时，在当今摩尔定律逐渐失效的背景下，利用计算机集群来进行并行计算是提升计算速度的主要途径之一。因此，研究复杂度低且并行效率高的模拟及抽样算法是非常重要的。

其他相关的研究还包括从数据学习粒子系统的相互作用核函数 [25]、研究吸引—排斥模型自由能函数的全局最小值点等 [26–27]。本文主要介绍关于粒子系统以下 3 个方面的研究进展：①具有奇异交互作用的粒子系统的平均场极限及涨落分析；②能量函数景观随信噪比变化的相变分析；③基于随机思想的新型计算方法。

2 具有奇异交互作用的粒子系统的平均场极限与涨落分析

建立具有奇异交互作用的粒子系统到极限偏微分方程的平均场极限，尤其是给出关于粒子数目 N 的收敛速率具有重要意义。然而不论是基于极限方程的稳定性估计，还是耦合的方法，都要求交互作用力是李氏连续的。自二十世纪八九十年代以来，基于紧性 / 弱收敛的方法得到了一系列定性收敛的结果，如二维点涡模型收敛到欧拉方程或者纳维–斯托克斯的结果 [9,28–29]。由于方法的限制，这些结果不能给出关于粒子数目 N 的收敛速度。

近年来，关于具有奇异交互作用的粒子系统，尤其是一阶系统的平均场极限这个问题取得了很大的进展，主要原因是引入了相对熵 [8,30]、调整（势）能量（modulated energy）[31] 以及调整自由能（modulated free energy）[13] 等新的定量分析工具。很多以前解决不了的问题，如建立点涡模型（有粘）收敛到二维纳维–斯托克斯方程的速率 [8]、有库伦力或者更奇异的里斯（Riesz）类型排斥力梯度流的平均场极限 [31]，以及有对数作用势的吸引力的一阶系统的平均场极限 [13] 等问题，都得到了很好的处理。相对熵 / 调整能量的方法需要极限方程有一定的正则性，使用的是基于弱强唯一性类型的推理。其中，Jabin 等 [8] 通过控制粒子系统的联合分布和极限系统分布的相对

熵的增长来得到平均场极限和混沌传播的速度，这个速度在相对熵意义下是最优的。该结果利用了随机系统的熵耗散性质，并且被用来处理一类奇异交互作用的情况，如作用力可以在负索伯列夫空间，特别包含了点涡模型逼近二维纳维–斯托克斯方程的情形。Bresch 等 [13] 结合了相对熵和调整能量的方法，使用调整自由能来控制粒子系统的收敛，得到 PKS（Patlak-Keller-Segel）趋化模型在所有次临界的情形下粒子逼近的速率。这时，主要的难点在于证明调整自由能在渐近意义下可以控制相对熵，从而可以作为一个度量收敛的泛函，主要的大偏差估计反映了扩散项和吸引的漂移项之间的竞争关系。同样地，构造一个有物理意义的能量泛函来度量粒子系统与极限偏微分方程的距离是处理类似问题的一个好思路。

对于一阶系统的平均场极限进行比较深入的了解之后，下一个问题是如何刻画粒子系统在极限偏微分方程附近的涨落行为，能否得到动力学版本的大偏差估计等。Wang 等 [32] 研究了一般的具有奇异作用力的粒子系统在其平均场极限方程附近的涨落行为，发现涨落测度的极限可以用一个随机偏微分方程来刻画。Chen 等 [33] 对于环面上的有黏性的点涡模型的大偏差进行了刻画。另外，Chen 等 [34] 探讨了交互作用势函数正定性以及负定性对涨落抑制以及提升的影响。这些关于粒子系统涨落的研究有望加深对交互作用如何影响物理系统统计性质的理解，也有助于研究一些基于粒子系统的抽样算法。

3 能量函数景观随信噪比变化的相变分析

目前关于能量函数景观与信噪比关系的研究重点是发现一个关于信噪比的相变关键值，使得景观在这一关键值附近发生本质的变化，如当信噪比减小时，景观中包含的极小值从一个变成多个。这一关键问题的解决将为非凸问题的全局求解奠定理论基础 [18–19,35–36]。之前对于粒子系统中景观的研究主要集中在假设粒子处在二维单位圆周上 [18]，同时假设粒子之间的耦合满足矩阵的尖刺模型，也就是耦合矩阵可以分解成一个低秩的信号矩阵和噪声在实际应用中（如求解半正定规划），对于粒子处在单位圆的假设过于严苛，无法运用到更广泛的范围。目前的研究主要关注能量函数在单位球面和斯蒂弗尔流形（Stiefel manifold）上的景观与耦合矩阵中信噪强度的关系。Ling[35] 刻画了在斯蒂弗尔流形上粒子的全局收敛性与信噪比的非随机充分条件，并且该条件可以用于一大类的随机模型，如基于随机块模型（stochastic block model）的社群发现问题，以及冷冻电镜中出现的图像对齐问题等。这将 Bandeira 等 [18] 的结果从圆周群推广到非交换的正交矩阵群，并刻画了全局最优解的结果 [36–37]。主要技术手段和路线，首先是通过凸松弛和对偶方法来建立某一给定的粒子状态在什么情况下是全局最优解的充分条件。其次需要对能量函数在流形上局部极值条件进行分析，得出所有的极小值点都在耦合矩阵的信号附近 [35]。这里借鉴了证明格罗腾迪克（Grothendieck）不等式的随机舍入方法来刻画驻点二阶信息。最后证明在信号附近存在有且仅有一个极小值点，同时该点满足凸松弛的 KKT（Karush-Kuhn-Tucker）最优化条件。

在对精准相变关键值的完整刻画方面，现有的研究主要是对于齐次藏本模型在厄多斯–瑞尼（Erdős-Rényi，ER）图上的全局同步化问题。Ling 等 [20] 提出相变的准确值应该与 ER 图何时是完全连接的条件相吻合。这一猜想在后续 Kassabov 等 [21–22] 的研究中基本得到刻画，说明齐次藏本模型的能量函数的景观仅有一个全局（局部）最优解，当且仅当 ER 图是连接的。主要的思路是通过将粒子所在区域进行分割并一一分析对应区域的景观等；核心的工具是通过核稳定性条件来建立在全局极小解邻域内粒子数量与邻域大小相关的递推关系，又被称为扩音论证（amplification argument）[21–22]。该论证方式依赖于图的非负性来建立核稳定性，因而尚未直接推广到更广泛的情形，但该想法为其他情形（如符号图等）的求解提供了一定的思路。

4 基于随机思想的新型计算方法

关于微观粒子系统的直接模拟，传统的 $O(N \log N)$ 或者 $O(N)$ 的算法包括基于多级展开的数码法 [38]、快速多极子方法 [24]，以及基于网格求和的粒子—粒子粒子—网格（particle-particle particle-mesh，PPPM）方法 [39] 等。对于基于多级展开的方法，数据结构较为复杂，而且线性复杂度前的系数较大，只有当粒子数目 N 非常大的时候才体现出优势。 而对于基于网格求和的 PPPM 方法，由于求和通常是基于快速傅里叶变换实现的，并行效率受到较大限制。

受到随机梯度下降算法的启发，Jin 等[40]提出了一个基于随机分组的模拟算法——随机分批方法 (random batch method, RBM) 。该方法是在每个计算步骤将 N 个粒子随机分成许多小组，每组只有少量的粒子，粒子之间的相互作用在小组内进行，这样每一步的计算量就降到了 $O(N)$。随着时间演化，时间上这种随机近似的累积会在平均意义下逼近原有动力学。虽然不同时间区间上多体系统的状态并不独立，但可以给出符合“大数定律”的误差估计，证明了该方法在平均场尺度下其均方误差不依赖于 N，因此该算法在固定步长时对粒子数目 N 很大的情形也是有效的。事实上，在合理假设下，能够证明该算法是关于大粒子极限的平均场极限是渐近保持的。该算法在求解泊松—能斯特—普朗克（Poisson-Nernst-Planck，PNP）等方程中表现出计算效率上的优势[23]。类似的随机思想被应用到了库伦相互作用粒子系统中[41]。传统的基于快速傅里叶变换网格求和的 PPPM 算法并行效率不太理想。Jin 等[41]基于埃瓦尔德（Ewald）分解，未使用 PPPM 中快速傅里叶变换的思想，转而利用重要性采样的思路来进行傅里叶空间的求和，设计了“随机分批埃瓦尔德”（Random Batch Ewald，RBE）方法。该方法也将单步计算量降为 $O(N)$，并且测试发现该算法在同样精度前提下的中央处理器（CPU）耗时与并行效率均好于 PPPM 算法。

除了对粒子系统的直接模拟，从其热平衡的吉布斯分布中抽样也是需要关注的重要问题，这将有助于计算系统的状态方程等。Li 等[42]基于势函数的分解，利用势函数光滑部分与随机分批的思想产生一个提议构型，然后利用短程奇异部分来做拒绝修正。该抽样算法可以视为传统梅特罗波利斯—黑斯廷斯（Metropolis-Hastings）算法的特例，但由于结合了随机分批的思想，移动一个粒子生成新构型的复杂度降为了 $O(1)$，而且由于拒绝修正步势函数是局部的，该算法的并行效率也较高。

随机分批粒子系统不仅是一种模拟方法，而且在多个问题中是更为准确的模型，如玻尔兹曼方程的粒子算法和观点动力学的模拟等。Jin 等[43]研究了随机分批模型的平均场模型，并研究了该类平均场模型与非线性福克—普朗克方程（nonlinear Fokker-Planck equation）的关系。这类平均场模型有望用来设计新的算法，并为新的问题（如量子多体问题）提供解决思路。

5 总结与展望

综上所述，随机多体系统是非常基本的统计物理微观模型，对从传统的物理、化学和生物到新兴社会科学以及数据科学，特别是非凸优化领域都极为重要。本文从具有奇异交互作用的粒子系统的平均场极限及涨落分析、能量函数景观随信噪比变化的相变分析、基于随机思想的新型计算方法 3 个方面介绍了关于粒子系统的最新研究进展以及主要的研究方法。

而上述这 3 个方面还有很多问题有待深入研究。针对平均场极限这个问题，研究具有奇异相互作用的牛顿力学系统（二阶粒子系统）的平均场极限分析更为困难，目前只有少量的相关研究成果[1–2]。最近，Bresch 等[44]通过 BBGKY（Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon）的方法得到了一个混沌传播的结果，但是没有收敛速率。在非凸优化中能量景观的刻画方面，未来将集中在广义斯蒂弗尔流形上某些随机模型（如矩阵尖刺模型）的能量景观的相变关系，以及藏本模型在带符号图上的全局同步化性质等。现有的方法在处理带符号的耦合图时仍无法得到在信息论意义上的最佳情形，仍是领域内重要的公开问题[22]。而物理体系中粒子系统的相变问题是解决更加困难的问题。在计算方法方面，需要进一步设计粒子系统在等温等压系综和巨正则系综下并行效率较高的模拟和抽样算法，还需要从数学上研究这些算法的误差估计、渐近行为以及可扩展性。对于一些重要的应用场景，如等离子体模拟中，设计保结构的渐近保持算法也极为重要。

参考文献

[1] BRAUN W, HEPP K. The Vlasov dynamics and its fluctuations in the 1/N limit of interacting classical particles[J]. Communications in mathematical physics, 1977, 56(2): 101–113.

[2] DOBRUSHIN R. Vlasov equations[J]. Functional analysis and its applications, 1979, 13(2): 115–123.

[3] BALADRON J, FASOLI D, FAUGERAS O, et al. Mean-field description and propagation of chaos in networks of Hodgkin-Huxley and Fitz Hugh-Nagumo neurons[J]. The journal of mathematical neuroscience, 2012, 2(1): 1–50.

[4] KURAMOTO Y. Self-entrainment of a population of coupled non-linear oscillators[C]//International Symposium on Mathematical Problems in Theoretical Physics. Berlin: Springer, 1975: 420–422.

[5] CARRILLO J A, CHOI Y P, HAURAY M. The derivation of swarming models: mean-field limit and Wasserstein distances[C]//Collective dynamics from bacteria to crowds. Vienna: Springer, 2014: 1–46.

[6] MEI S, MONTANARI A, NGUYEN P M. A mean field view of the landscape of two-layer neural networks[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2018, 115(33): 7665–7671.

[7] GOODMAN J, HOU T Y, LOWENGRUB J. Convergence of the point vortex method for the 2-D Euler equations[J]. Communications on pure and applied mathematics, 1990, 43(3): 415–430.

[8] JABIN P, WANG Z F. Quantitative estimates of propagation of chaos for stochastic systems with kernels[J]. Inventiones mathematicae, 2018, 214(1): 523–591.

[9] OSADA H. Propagation of chaos for the two-dimensional Navier-Stokes equation[J]. Proceedings of the Japan Academy, series A: mathematical sciences, 1986, 62(1): 8–11.

[10] MCKEAN H P. Propagation of chaos for a class of non-linear parabolic equations[C]// Stochastic differential equations (lecture series in differential equations, session 7). Fiapre: Catholic University, 1967: 41–57.

[11] SZNITMAN A S. Topics in propagation of chaos[M]. Berlin: Springer, 1991: 165–251.

[12] GUILLIN A, LIU W, WU L, et al. The kinetic Fokker-Planck equation with mean field interaction[J]. Journal de mathématiques pures et appliquées, 2021, 150(5): 1–23.

[13] BRESCH D, JABIN P E, WANG Z. Mean-field limit and quantitative estimates with singular attractive kernels[EB/OL].[2023–05–26]. https: //arxiv.org/abs/2011.08022.

[14] JAEGER G. The Ehrenfest classification of phase transitions: introduction and evolution[J]. Archive for history of exact sciences, 1998, 53(1): 51–81.

[15] DAWSON D A. Critical dynamics and fluctuations for a mean-field model of cooperative behavior[J]. Journal of statistical physics, 1983, 31(1): 29–85.

[16] CARRILLO J A, GVALANI R S, PAVLIOTIS G A, et al. Long-time behaviour and phase transitions for the McKean-Vlasov equation on the torus[J]. Archive for rational mechanics and analysis, 2020, 235(1): 635–690.

[17] SUN J, QU Q, WRIGHT J. A geometric analysis of phase retrieval[J]. Foundations of computational mathematics, 2018, 18: 1131–1198.

[18] BANDEIRA A S, BOUMAL N, VORONINSKI V. On the low-rank approach for semidefinite programs arising in synchronization and community detection[EB/OL].[2023–05–26]. http: //proceedings.mlr.press/v49/bandeira16.pdf.

[19] AROUS G B, MEI S, MONTANARI A, et al. The landscape of the spiked tensor model[J]. Communications on pure and applied mathematics, 2019, 72(11): 2282–2330.

[20] LING S, XU R, BANDEIRA A S. On the landscape of synchronization networks: a perspective from nonconvex optimization[J]. SIAM journal on optimization, 2019, 29(3): 1879–1907.

[21] KASSABOV M, STROGATZ S H, TOWNSEND A. A global synchronization theorem for oscillators on a random graph[J]. Chaos: an interdisciplinary journal of nonlinear science, 2022, 32(9): 093119.

[22] KASSABOV M, STROGATZ S H, TOWNSEND A. Sufficiently dense Kuramoto networks are globally synchronizing[J]. Chaos: an interdisciplinary journal of nonlinear science, 2021, 31(7): 073135.

[23] LI L, LIU J G, TANG Y. Some random batch particle methods for the Poisson-Nernst-Planck and Poisson-Boltzmann equations[EB/OL].[2023–05–24]. https: //arxiv.org/abs/2004.05614.

[24] GAREENGARD L, ROKHLIN V. A fast algorithm for particle simulations[J]. Journal of computational physics, 1987, 73(2): 325–348.

[25] LU F, ZHONG M, TANG S, et al. Nonparametric inference of interaction laws in systems of agents from trajectory data[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2019, 116(29): 14423–14433.

[26] CARRILLO J A, SHU R. From radial symmetry to fractal behavior of aggregation equilibria for repulsive-attractive potentials[J]. Calculus of variations and partial differential equations, 2023, 62(1): 28.

[27] CARRILLO J A, SHU R. Global minimizers of a large class of anisotropic attractive-repulsive interaction energies in 2D[EB/OL].[2023–04–27]. https: //arxiv.org/pdf/2202.09237v1.pdf.

[28] SCHOCHET S. The weak vorticity formulation of the 2-D Euler equations and concentration-cancellation[J]. Communications in partial differential equations, 1995, 20(5/6): 1077–1104.

[29] FOURNIER N, HAURAY M, MISCHLER S. Propagation of chaos for the 2D viscous vortex model[J]. Journal of the European mathematical society, 2014, 16(7): 1423–1466.

[30] JABIN P E, WANG Z. Mean field limit and propagation of chaos for Vlasov systems with bounded forces[J]. Journal of functional analysis, 2016, 271(12): 3588–3627.

[31] SERFATY S. Mean field limit for Coulomb-type flows[J]. Duke mathematical journal, 2020, 169(15): 2887–2935.

[32] WANG Z, ZHAO X, ZHU R. Gaussian fluctuations for interacting particle systems with singular kernels[EB/OL].[2023–06–06]. https: //arxiv.org/abs/2105.13201.

[33] CHEN C, GE H. Sample-path large deviation principle for a 2-D stochastic interacting vortex dynamics with singular kernel[EB/OL].[2023–06–06]. https: //arxiv.org/abs/2205.11013.

[34] CHEN J, LI L. Fluctuation suppression and enhancement in

interacting particle systems[EB/OL].[2023-06-06]. https: //arxiv.org/abs/2204.07757.

[35] LING S. Solving orthogonal group synchronization via convex and low-rank optimization: tightness and landscape analysis[J]. Mathematical programming, 2022, 200(1): 589-628.

[36] MEI S, MISIAKIEWICZ T, MONTANARI A, et al. Solving SDPs for synchronization and MaxCut problems via the Grothendieck inequality[EB/OL].[2023-06-07]. https: //arxiv.org/abs/1703.08729.

[37] MARKDAHL J, THUNBERG J, GONCALVES J. High-dimensional Kuramoto models on Stiefel manifolds synchronize complex networks almost globally[J]. Automatica, 2020, 113: 108736.

[38] BARNES J, HUT P. A hierarchical O(*N* log *N*) force-calculation algorithm[J]. Nature, 1986, 324(6096): 446-449.

[39] LUTY B A, DAVIS M E, TIRONI I G, et al. A comparison of particle-particle, particle-mesh and Ewald methods for calculating electrostatic interactions in periodic molecular systems[J]. Molecular simulation, 1994, 14(1): 11-20.

[40] JIN S, LI L, LIU J G. Random batch methods (RBM) for interacting particle systems[J]. Journal of computational physics, 2020, 400(1): 108877.

[41] JIN S, LI L, XU Z, et al. A random batch Ewald method for particle systems with Coulomb interactions[J]. SIAM journal on scientific computing, 2021, 43(4): 937-960.

[42] LI L, XU Z, ZHAO Y. A random-batch Monte Carlo method for many-body systems with singular kernels[J]. SIAM journal on scientific computing, 2020, 42(3): 1486-1509.

[43] JIN S, LI L. On the mean field limit of the Random Batch Method for interacting particle systems[J]. Science China mathematics, 2022, 65(1): 1-34.

[44] BRESCH D, JABIN P E, SOLER J. A new approach to the mean-field limit of Vlasov-Fokker-Planck equations[EB/OL].[2023-06-07]. https: //arxiv.org/pdf/2203.15747.pdf.

Analysis and Computation for Interacting Particle Systems

LI Lei[1,2], LING Shuyang[3], WANG Zhenfu[4]

1. Institute of Natural Sciences, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240;
2. School of Mathematical Sciences, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240;
3. New York University Shanghai, Shanghai Frontier Science Center of Artificial Intelligence and Deep Learning, Shanghai 200127;
4. Beijing International Center for Mathematical Research, Peking University, Beijing 100871

(Lei Li, Shuyang Ling and Zhenfu Wang contribute equally to this article)

Abstract: As a class of fundamental microscopic models in statistical physics, interacting particle systems (or many-body systems) play important roles in the fields ranging from physics, chemistry, biology to social sciences and data sciences etc. Due to the randomness in the initial data and the interaction, and noise from the environment, most interacting particle systems are stochastic. This paper gives a brief introduction to the research progress on interacting particle systems. For the theoretical analysis, how the tools of relative entropy is reviewed. The modulated free energy etc. could be used for the rigorous justification of the mean field limit with singular kernels. In addition, this paper reviews the recent works that characterize the sharp critical SNR for the phase transition of the energy landscape of particle systems, and sufficient conditions for the SNR under which the energy landscape associated with particles on Stiefel manifolds only has a unique local (global) minimizer. For the scientific computation, this paper reviews several new simulation and sampling algorithms based on random strategies, which enjoy low complexity and high parallel efficiency. These results will provide strong support for the relevant applications.

Keywords: interacting particle systems; stochastic many-body systems; mean field limit; phase transition; nonconvex optimization; random batch