Han Peters
Korteweg-de Vries Instituut
Universiteit van Amsterdam
h.peters@uva.nl

Guus Regts
Korteweg-de Vries Instituut
Universiteit van Amsterdam
g.regts@uva.nl

De oplossing

Een discrete vraag, een complexe oplossing

Han Peters is werkzaam in de complexe dynamica en Guus Regts in de discrete wiskunde en combinatoriek. In dit artikel beschrijven ze hoe hun samenwerking vanuit verschillende vakgebieden leidde tot de oplossing van een oud vermoeden van Sokal.

Klop klop klop, mijn collega Guus doet de deur open. “Mag ik je een vraag stellen, Han?”

Guus werkt in de discrete wiskunde en combinatoriek, een totaal andere richting dan mijn vakgebied, de complexe dynamica. Combinatorici zijn onder andere geïnteresseerd in structuren in grafen. Daar heb ik totaal geen verstand van, dus zijn vraag zal wel niet met wiskunde te maken hebben. Waarschijnlijk zal ik weer gevraagd worden voor een of andere saaie commissie.

Wat te doen? De deuropening is duidelijk geblokkeerd. Het raam staat open, maar springen uit de derde verdieping van het Korteweg-de Vries Instituut is geen aantrekkelijke optie. Misschien dat een plots opkomende buikpijn de zaak nog kan redden? Voordat ik een excuus klaar heb stelt Guus zijn vraag.

Discrete vraag. Definieer

$$f_\lambda(x) = \lambda \cdot \frac{1}{(1+x)^d}, \tag{1}$$

waar $d \geq 2$ een natuurlijk getal is. Voor welke complexe getallen λ geldt dat de baan

$$0, f_\lambda(0), f_\lambda(f_\lambda(0)), \ldots$$

het punt -1 vermijdt?

Dat is een verrassing! Niet alleen blijkt het wel degelijk om wiskunde te gaan, maar het is precies het soort wiskunde waarin ik geïnteresseerd ben: iteratie van holomorfe functies. Het is wel een hele vreemde vraag, want waar komt die functie f_λ vandaan, en wat is er zo bijzonder aan de punten 0 en -1? Maar goed, een gegeven paard kun je maar beter niet in de bek kijken, laten we proberen dit probleem op te lossen.

Het blijkt dat Guus niet zozeer geïnteresseerd is in alle geschikte parameters λ, maar in de *maximale samenhangende open deelverzameling van* $\mathbb{C}$ *die het punt* $\lambda = 0$ *bevat*. Deze vraag blijkt redelijk eenvoudig op te lossen met een stukje klassieke wiskunde dat zo’n honderd jaar geleden ontwikkeld werd door de Franse wiskundigen Julia en Fatou, in combinatie met recentere methoden uit de jaren tachtig.

Merk ten eerste op dat $f_\lambda(-1) = \infty$ en $f_\lambda(\infty) = 0$. Dus de baan van 0 gaat door het punt -1 dan en slechts dan als de baan

$$-1 \mapsto \infty \mapsto 0 \mapsto \lambda \mapsto \cdots$$

periodiek is.

De punten -1 en ∞ zijn twee bijzondere punten: het zijn de *kritieke punten* van de functie f_λ; de punten waar f_λ niet lokaal inverteerbaar is. Een topoloog zou zeggen: de rationale functie f_λ is een vertakte overdekking van de Riemannsfeer naar zichzelf, en de kritieke punten zijn precies de vertakkingspunten.

In de meeste gevallen kun je eenvoudig bepalen wat de kritieke punten zijn: het zijn de punten waar de afgeleide nul is. Dat gaat hier echter niet goed omdat je met het punt ∞ te maken hebt. Om te zien dat -1 en ∞ de punten zijn waar f_λ niet lokaal inverteerbaar is kun je f_λ samenstellen met de functie $x \mapsto \frac{1}{x}$, om daarna de afgeleide te nemen. Zo kun je het rekenen met ∞ omzeilen.

Kritieke punten spelen een belangrijke rol in ons begrip van complexe dynamische systemen:

Stelling. *Zij f een rationale functie van graad minstens 2, en neem aan dat f een aantrekkend vast punt p heeft. Dan is er een kritiek punt wiens baan naar p convergeert.*

Dus als onze functie f_λ een aantrekkend vast punt heeft, dan convergeert de unieke kritieke baan naar dat vaste punt. Het volgt dat deze kritieke baan niet door -1 kan gaan, want als $f_\lambda^n(-1) = -1$ dan is de baan periodiek en dus niet convergent.

Conclusie. *Als f_λ een aantrekkend vast punt heeft dan ligt -1 niet in de baan van 0.*

Een vast punt $p = f(p)$ is aantrekkend als er een omgeving $U(p)$ is waar alle banen naar p convergeren. Voor rationale functies is dit eenvoudig te karakteriseren: p is aantrekkend dan en slechts dan als $|f'(p)| < 1$. Merk nu op dat

$$f'_\lambda(p) = \frac{-d\lambda}{(1+p)^{d+1}} = \frac{-df(p)}{1+p} = \frac{-dp}{1+p}.$$

Een vast punt p is dus aantrekkend dan en slechts dan als

$$\left|\frac{dp}{1+p}\right| < 1,$$

en dit is de vergelijking van een cirkelschijf, die we aanduiden met U_d. Voor elke $p \in U_d$ is er een unieke $\lambda \in \mathbb{C}$ waarvoor p een vast punt is, namelijk de oplossing van

$$\lambda \cdot \frac{1}{(1+p)^d} = p,$$

gegeven door

$$\lambda = p(1+p)^d.$$

Gevolg. *Definieer de verzameling $V_d \subset \mathbb{C}$ door*

$$V_d := \{p(1+p)^d \colon p \in U_d\}.$$

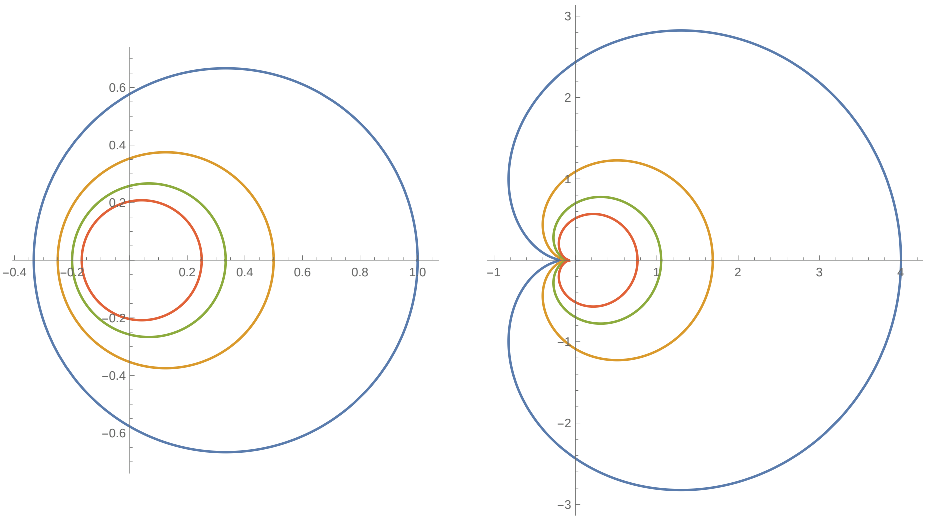
Als $\lambda \in V_d$ dan geldt dat $-1 \notin \{f_\lambda^{\circ n}(0)\}_{n\in\mathbb{N}}$.

Gebruikmakend van moderne technieken, ontwikkeld door Mañé, Sad en Sullivan [3] begin jaren tachtig, kunnen we zelfs het volgende concluderen:

Stelling. *De verzameling V_d is de maximale open samenhangende verzameling met de eigenschap dat $\lambda \in V_d$ impliceert $-1 \notin \{f_\lambda^{\circ n}(0)\}_{n\in\mathbb{N}}$.*

Het gaat te ver om de resultaten van Mañé, Sad en Sullivan hier precies te formuleren. Grof gezegd bewezen ze dat voor een parameter λ_0 waarvoor f_{λ_0} een vast punt heeft met afgeleide norm 1 de situatie uiterst onstabiel is. Zo instabiel zelfs dat voor elke willekeurige $x \in \mathbb{C}$ er een λ arbitrair dicht bij λ_0 ligt waarvoor $x \in \{f_\lambda^{\circ n}(0)\}_{n\in\mathbb{N}}$. Dit geldt dus ook voor het punt $x = -1$, en het volgt dat de samenhangende open verzameling V_d maximaal is.

Hiermee was de vraag van Guus opgelost. Maar wat bleek, dit was slechts het eenvoudigste geval van het probleem waarin hij eigenlijk geïnteresseerd was. Ik geef het woord aan Guus.



Figuur 1 De randen van de verzamelingen U_d (links) en V_d (rechts) voor graden 2 (buitenste) tot en met 5 (binnenste).

Een complex probleem

Zoals Han al schreef ben ik geïnteresseerd in structuren in grafen en in het bijzonder in *onafhankelijke verzamelingen*. Een onafhankelijke verzameling is een deelverzameling punten in een graaf waarvan elk tweetal punten *niet* verbonden is door een lijn. De genererende functie van het aantal onafhankelijke verzamelingen in een graaf $G = (V, E)$, is gedefinieerd als

$$Z_G(\lambda) := \sum_{\substack{I \subseteq V \\ I \text{ onafhankelijk}}} \lambda^{|I|}. \tag{2}$$

In de statistische mechanica staat dit polynoom bekend als de partitiefunctie van het 'hardcore'-model.

Partitiefuncties spelen een centrale rol in the statistische mechanica, en kunnen bijvoorbeeld gebruikt worden om faseovergangen te beschrijven in veel verschillende contexten. Denk daarbij aan de overgang van gas naar vloeistof, of aan kritieke temperaturen in magnetische objecten. In elk van deze toepassingen bevatten de grafen onvoorstelbaar veel punten, die bijvoorbeeld de atomen in een stuk ijzer representeren. Het feit dat deze grafen zo onvoorstelbaar groot zijn heeft als gevolg dat het bijna onmogelijk is om de partitiefunctie precies te berekenen. Sterker nog, het uitrekenen van partitiefuncties van het hardcore-model is 'NP-hard' [5]: er bestaan waarschijnlijk geen algoritmen die de partitiefunctie kunnen berekenen in een tijd die hoogstens polynomiaal groeit in het aantal punten.

In de afgelopen dertig jaar is er daarom veel interesse in het *benaderen* van partitiefuncties, tot op een kleine multiplicatieve foutmarge. Of benaderen wel doenbaar is hangt af van de locatie van de nulpunten van de partitiefunctie:

Stelling [1,6]. *Zij $\mathcal{G}_\Delta$ de collectie eindige grafen van maximum graad hoogstens Δ. Als $V \subset \mathbb{C}$ een open samenhangende deelverzameling is met $0 \in V$ waarvoor geldt dat $Z_G(\lambda) \neq 0$ voor alle $\lambda \in V$ en alle $G \in \mathcal{G}_\Delta$, dan bestaat er een algoritme dat $Z_G(\lambda)$ in polynomiale tijd benadert.*

Gemotiveerd door deze stelling, die trouwens in veel grotere algemeenheid geldt, was ik op zoek naar de grootste open samenhangende nulpuntsvrije locus V_Δ voor grafen van graad hoogstens Δ.

Eerder had Allan Sokal [9], een gerenommeerd mathematisch fysicus, maar ook bekend vanwege de 'Sokal hoax', het vermoeden geopperd dat voor elke $\Delta \in \mathbb{N}_{\geq 3}$ de verzameling V_Δ het reële halfopen interval

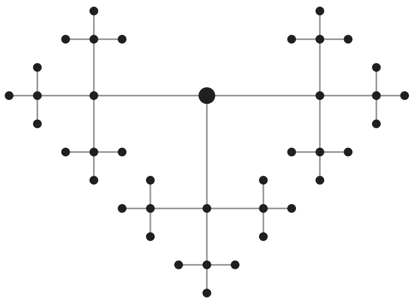
$$\left[0, \frac{(\Delta-1)^{\Delta-1}}{(\Delta-2)^{\Delta}}\right)$$

bevat. Dit vermoeden was een belangrijke drijfveer voor mijn zoektocht.

Maar wat heeft dit nu te maken met complexe dynamica? Het blijkt dat de nulpunten van Z_G op een bijzondere klasse van *recursief gedefinieerde* grafen beschreven kunnen worden aan de hand van een eenvoudige rationale functie.

Een boom heet een *Cayley-boom* als alle bladeren dezelfde afstand hebben tot een gemarkeerd punt v (de wortel), en als alle andere punten dezelfde graad 'naar beneden' hebben. Zie Figuur 2 voor een illustratie met graad naar beneden $d = 3$.

Een Cayley-boom heeft de bijzondere eigenschap dat als de wortel v wordt weggehaald, inclusief alle lijnen naar v, dan blijven er precies d Cayley-bomen over, waarbij de afstand van de bladeren tot de wortel 1 kleiner is. Het blijkt dat de partitiefuncties Z_G voor Cayley-bomen van verschillende hoogte aan elkaar gerelateerd zijn aan de hand van de functie f_λ. Deze



Figuur 2 Een Cayley-boom met $d = 3$.

relatie is echter niet direct, maar via een zogenaamde ratio.

Splits de som (2) als volgt in twee stukken: één som over de onafhankelijke verzamelingen die v bevatten, en één som over de onafhankelijke verzamelingen die v niet bevatten. Opgemerkt dat als een onafhankelijke verzameling de wortel v bevat, deze geen van de buren van v kan bevatten, komen we tot de volgende gelijkheid:

$$Z_G(\lambda) = Z_{G-v}(\lambda) + \lambda Z_{G \setminus N[v]}(\lambda).$$

Hier zijn $G - v$ en $G \setminus N[v]$ de grafen waaruit v respectievelijk v en zijn buren zijn weggehaald. Neem nu aan dat $Z_{G-v}(\lambda) \neq 0$, definieer de *ratio*,

$$R_{G,v} := \frac{\lambda Z_{G \setminus N[v]}(\lambda)}{Z_{G-v}(\lambda)},$$

en merk op dat

$$R_{G,v} \neq -1 \quad \Leftrightarrow \quad Z_G(\lambda) \neq 0.$$

Het probleem om een gebied te vinden zonder nulpunten vertaalt zich nu naar het probleem om een gebied te vinden waar de ratio nooit gelijk is aan -1. Het volgende lemma laat het nut van de ratio's zien.

Lemma. *Zij d vast, en schrijf T_n voor de Cayley-boom van hoogte n met wortel v_n. Dan geldt:*

$$\begin{aligned} R_{T_n, v_n} &= \lambda \left(\frac{1}{1 + R_{T_{n-1}, v_{n-1}}} \right)^d \\ &= f_\lambda^{\circ n}(\lambda) \\ &= f_\lambda^{\circ n+1}(0). \end{aligned}$$

Met andere woorden: we zijn geïnteresseerd in wanneer de baan van 0 onder iteratie van de functie f_λ het punt -1 vermijdt.

Ik had het gevoel dat een oplossing voor deze Cayley-bomen, die in zekere zin als extremale grafen gezien kunnen worden, tot een oplossing voor het algemene vermoeden van Sokal zou kunnen leiden. Echter, ik had niet de benodigde achtergrond in de complexe dynamica. Het was tijd om eens bij mijn collega Han op de deur te kloppen.

Naschrift

De oplossing van het complexe dynamica-vraagstuk leidde inderdaad tot een complete oplossing van het vermoeden van Sokal; ons gezamenlijk bewijs is te vinden in [7]. Onze samenwerking is niet gestopt bij het oplossen van het vermoeden van Sokal: het afgelopen jaar hebben we bovenstaande ideeën toegepast op de partitiefunctie van het Ising-model [8]. Onze gezamenlijke promovendus Pjotr Buys heeft recent laten zien dat het maximale gebied V_Δ, gevonden bij het bestuderen van Cayley-bomen, niet nulpuntsvrij is voor algemene grafen van begrensde graad [2]. Een precieze beschrijving van de maximale nulpuntsvrije locus is nog steeds een open probleem.

Referenties

1 A. Barvinok, *Combinatorics and Complexity of Partition Functions*, Algorithms and Combinatorics, Vol. 30, Springer, 2016.

2 P. Buys, On the location of roots of the independence polynomial of bounded degree graphs (2019), arXiv:1903.05462.

3 R. Mañé, P. Sad en D. Sullivan, On the dynamics of rational maps, *Ann. Sci. École Norm. Sup. (4)*, 16(2) (1983), 193–217.

4 C.N. Yang en T.D. Lee, Statistical theory of equations of state and phase transitions. I. Theory of condensation, *Physical Rev.* 87(3) (1952), 404–409.

5 M. Luby en E. Vigoda, Approximately counting up to four, *Proc. 29th ACM Symp. on Theory of Computing*, 1997, pp. 682–687.

6 V. Patel en G. Regts, Deterministic polynomial-time approximation algorithms for partition functions and graph polynomials, *SIAM J. on Computing* 46(6) (2017), 1893–1919.

7 H. Peters en G. Regts, On a conjecture of Sokal concerning roots of the independence polynomial, *Michigan Math. J.* 68(1) (2019), 33–55.

8 H. Peters en G. Regts, Location of zeros for the partition function of the Ising model on bounded degree graphs (2018), arXiv: 1810.01699. To appear in *J. of Lond. Math. Soc.*

9 A.D. Sokal, A personal list of unsolved problems concerning lattice gases and antiferromagnetic Potts models, *Markov Process. Related Fields* 7 (2001), 21–38.