

Università degli Studi di Salerno Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali

Tesi di Laurea Magistrale in Informatica

Titolo

Relatori

Prof. Vincenzo Auletta Dott. Diodato Ferraioli Candidato

Francesco Farina Matricola 0522500282

Anno Accademico 2015-2016

Dediche e ringraziamenti

Indice

1	Inti	roduzione	1				
2	Alcuni concetti base						
	2.1	Teoria dei Grafi	2				
		2.1.1 Grafo come modello della realtà	4				
	2.2	Modello di Ising	6				
		2.2.1 Partition Function	8				
	2.3	Cenni di probabilità e statistica	8				
	2.4	Processi Markoviani	9				
		2.4.1 Irriducibilità e periodicità	9				
		2.4.2 Distribuzione stazionaria	9				
		2.4.3 Catena di Markov Monte Carlo	9				
	2.5	Algoritmi di approssimazione	9				
3	Logit Dynamics 10						
	3.1	Definizione	10				
	3.2	Propiretà	10				
		3.2.1 Ergodicità	10				
		3.2.2 Logit dynamics e Glauber dynamics	10				
	3.3	Movitazioni	10				
	3.4	Alcuni Esperimenti	10				
4	Il lavoro di Jerrum e Sinclair 11						
	4.1	Spins world e Subgraphs world	11				
	4.2	Stima della Partition Function	11				
	4.3	Analisi del subgraphs-world process	11				
5	Miglioramenti apportati						
	5.1	Stato dell'arte	12				
		5.1.1 Miglioramenti Rinaldi	12				

INDICE					
5.2 Stima	Esperimenti	12			

	5.2	Stima della Partition Function	12		
		5.2.1 Numero di steps	12		
6	Mean Magnetic Moment				
	6.1	Lemma 8, Teorema 9	13		
	6.2	Approssimazione della funzione $odd(X) \dots \dots \dots \dots$	13		
		6.2.1 logm Subgraphs	13		
		6.2.2 Algoritmo L	13		
7	Implementazione e testing				
	7.1^{-}	Implementazione	14		
	7.2	Testing	14		
	7.3	DLib Python Wrapper	14		
8	Cor	nclusioni e sviluppi futuri	15		

15

Bibliografia

Introduzione

Alcuni concetti base

2.1 Teoria dei Grafi

La teoria dei grafi è una branca della matematica, nata nel 1700 con Eulero, che consente di descrivere le relazioni che intercorrono tra un insieme di oggetti.

Il grafo è lo strumento attraverso il quale tali relazioni possono essere espresse ed organizzate. Infatti, il grafo, consiste di oggetti chiamati nodi e relazioni tra coppie di questi oggetti detti archi; nodi connessi tra loro da un arco sono detti vicini o adiacenti.

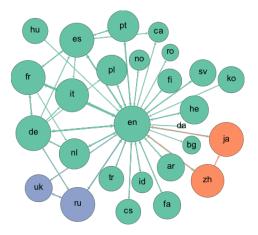


Figura 2.1: Wikipedia Multilingual Network Graph (July 2013)

La relazione tra una coppia di nodi può essere di due tipi:

- Simmetrica: l'arco connette i nodi con un collegamento bidirezionale ed è detto *indiretto*. Un grafo costituito di soli archi indiretti è anch'esso detto indiretto.
- Asimmetrica: l'arco connette i nodi con un collegamento unidirezionale ed è detto *diretto*. Un grafo costituito di soli archi diretti è anch'esso detto diretto.

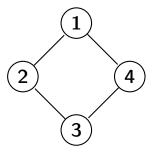


Figura 2.2: Grafo indiretto

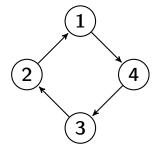


Figura 2.3: Grafo diretto

Un grafo può essere formalmente descritto come una coppia di insiemi $\mathbf{G} = (\mathbf{V}, \mathbf{E})$, dove V è l'insieme dei nodi ed E è l'insieme degli archi. Un arco e \in E è rappresentato come un sottoinsieme di due elementi di V, $e = \{u, v\}$ per $u, v \in V$.

Le rappresentazioni atte a descrivere un grafo sono molteplici:

- Rappresentazione grafica: ad ogni nodo corrisponde una figura circolare sul piano e ad ogni arco (i, j) corrisponde una linea che che collega il nodo i al nodo j.
- Matrice di adiacenza: matrice di dimensione $n \times n$, dove n è il numero di nodi, il cui elemento (i, j) assume valore 1 se esiste l'arco tra il nodo i ed il nodo j, 0 altrimenti.
- Lista di adiacenza: ad ogni vertice v è associata la lista dei nodi ad esso vicini.

Negli anni, gli studi sulla teoria dei grafi hanno prodotto una quantità enorme di definizioni e teoremi, per cui, di seguito vengono descritti solamente i concetti necessari alla comprensione di questo lavoro di tesi.

Sottografo. Un grafo H si dice sottografo di un grafo G se i vertici di H sono un sottoinsieme dei vertici di G e gli archi di H sono un sottoinsieme degli archi di G. Siano G = (V, E) ed $H = (V_1, E_1)$ due grafi. H è un sottografo di G se e solo se $V_1 \subseteq V$ ed $E_1 \subseteq E$. Un concetto particolarmente utile alla comprensione di questo lavoro è lo spanning subgraph: uno spanning subgraph H di un grafo G è un sottografo che contiene tutti i vertici di G, cioé $V_1 = V$.

Grado di un nodo. Il grado di un nodo v è il numero di nodi ad esso adiacenti ed è indicato con deg(v).

In un grafo diretto, si distinguono due tipi di grado:

- in-deg(v), il grado in ingresso del nodo v, dato dal numero di archi in cui v compare come nodo destinazione;
- out-deg(v), il grado in uscita del nodo v, dato dal numero di archi in cui v compare come nodo sorgente.

Cammino. Un cammino è una sequenza di nodi, in cui ogni coppia consecutiva della sequenza sia connessa da un arco. Formalmente, un cammino è una sequenza di vertici $v_0, v_1, \cdots, v_n \in V$ tale che $\{v_{i-1}, v_i\} \in E, \forall 1 \leq i \leq n$. Un cammino con almeno tre vertici distinti, i cui vertici di inizio e fine coincidono, è detto ciclo.

Grafo connesso. Un grafo è connesso se, per ogni coppia distinta di vertici (i, j), esiste un cammino da i a j.

2.1.1 Grafo come modello della realtà

I grafi hanno una grande utilità, in quanto consentono di astrarre le relazioni che intercorrono tra più oggetti, e di rappresentare tali relazioni in strutture su cui è possibile applicare modelli matematici. In [1] viene proposto un esempio reale: la Figura 2.4 rappresenta la struttura della rete Internet nel Dicembre del 1970, noto come ARPANET allora, composto solo da 13 macchine. I nodi rappresentano gli host, e vi è un arco tra due host se esiste una comunicazione diretta tra di essi. Come è possibile intuire, la posizione geografica dei nodi non ha molta importanza, ma quel che conta è il come ogni nodo sia connesso agli altri. Infatti la figura 2.5 mostra lo stesso grafo di ARPANET, attraverso una rappresentazione logica. Il grafo di ARPANET mostrato in precedenza è un esempio di communication network, i cui

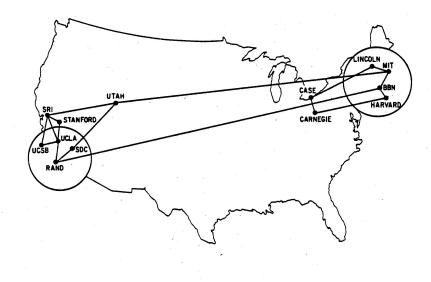


Figura 2.4: ARPANET nel Dicembre 1970

nodi sono computer o altri dispositivi capaci di inviare messaggi mentre gli archi rappresentano i collegamenti diretti lungo i quali tali messaggi possono viaggiare. Ma questo è solamente uno dei tipi di rete che possiamo avere. Le **social network** i cui nodi sono persone o gruppi di persone, ed i cui archi rappresentano un tipo di interazione (amicizia, inimicizia, ecc.), sono reti massive che al giorno d'oggi comprendono gran parte della popolazione

Le *information network* sono reti che rappresentano il mondo dell'informazione, i cui nodi sono le fonti di informazione e gli archi rappresentano collegamenti logici come riferimenti, citazioni identificati da hyperlink. A tale categoria appartiene il grafo del Web, così come la rete di documenti di Wikipedia.

mondiale, come ad esempio le reti di Facebook e Twitter.

Le *dependency network*, che descrivono le dipendenze esistenti in una collezione di oggetti. Ne sono esempi reti di dipendenze tra task, per cui sono stati sviluppati molti lavori, applicati anche in altri campi come lo studio del sistema immunitario e delle reti semantiche.

I grafi mostrano la loro grande utilità anche nelle *transportation network*, reti i cui nodi sono luoghi geografici ed i cui archi sono le linee stradali, ferroviarie o aeree che li collegano. Questo tipo di rete è stata di grande importanza nello sviluppo di concetti ed algoritmi su grafi, infatti molta della terminologia deriva dal mondo dei trasporti.

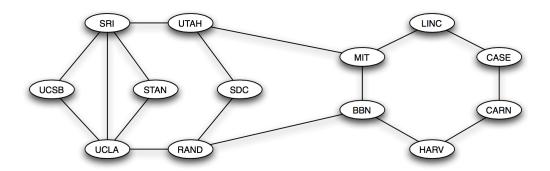


Figura 2.5: Grafo di ARPANET nel Dicembre 1970

Quindi, come si evince dai vari tipi di network descritte finora, i grafi sono uno strumento potente che trova applicazione nelle realtà più disparate, partendo dalla matematica ed informatica, fino ad arrivare agli studi della sociologia, biologia, linguistica, chimica e fisica. Ed è proprio l'ultimo ambito ad interessare questo lavoro di tesi: la fisica statistica è una branca della fisica che utilizza metodi della teoria delle probabilità e statistici, ed in particolare gli strumenti matematici usati per gestire grandi popolazioni ed approssimazioni, per la risoluzione di problemi fisici. Può descrivere una grande varietà di campi dotati di una natura stocastica intrinseca. Le sue applicazioni coinvolgono problemi nel campo della fisica, biologia, chimica, neurologia e scienze sociali.

Lo scopo finale per cui nasce la fisica statistica, in particolare la meccanica statistica, è quello di fornire strutture e strumenti per mettere in relazione proprietà microscopiche di atomi e molecole individuali rispetto a proprietà del materiale che possono essere osservate ad occhio nudo. Spiegando ad esempio la termodinamica come il risultato naturale di statistica, meccanica classica e meccanica quantistica al livello microscopico: il grafo riesce a modellare le particelle del sistema su cui agisce la dinamica del processo fisico.

2.2 Modello di Ising

Il modello di Ising è un classico problema combinatoriale della fisica statistica, studiato per la prima volta da Ernest Ising nel 1920. Tale modello è interessato alla fisica delle transizioni di fase, che occorrono quando un

piccolo cambiamento nei parametri, come temperatura o pressione, causa un grande cambiamento qualitativo nello stato del sistema. Le transizioni di fase sono comuni nella fisica, come ad esempio nel fenomeno del ferromagnetismo.

Uno degli scopi principali del modello di Ising è spiegare come interazioni di breve raggio tra le componenti del sistema siano in grado di dare luogo a comportamenti correlati di lungo raggio e, quindi, di predire in un certo senso il potenziale per una transizione di fase. Tale modello trova applicazione in molti ambiti, in generale in tutti quegli ambiti dove si studia il comportamento cooperativo di grandi sistemi: tali applicazioni sono possibili perché il modello di Ising può essere formulato come un problema matematico.

Una semplice definizione matematica del modello di Ising è data in [2] e in [3]: consideriamo una collezione di siti $[n] = \{0, 1, \dots, n-1\}$, in cui ogni coppia i, j ha associata un'energia di interazione V_{ij} . Nella maggior parte dei casi di interesse fisico, l'insieme E di coppie con energia di interazione non nulla forma un regular lattice graph ([n], E): detto anche mesh graph o grid graph, è un grafo la cui rappresentazione grafica sul piano forma delle tassellature regolari.

Il primo passo del modello è quello di assegnare ad ogni sito i una variabile σ_i , detta **spin**, con i = 1, ..., n. Le variabili σ_i possono assumere solo due valori, $\sigma_i = \pm 1$, che si possono definire come gli *stati* dei siti.

Una configurazione σ del sistema è un assegnamento di spin positivi ($\sigma_i = 1$) o negativi ($\sigma_i = 1$) ad ogni sito $i \in [n]$.

L'energia di una configurazione è data dall'Hamiltoniana del sistema: nella fisica matematica, tale quantità governa le dinamiche del sistema. Per il modello di Ising, l'Hamiltoniana è definita sotto un'assunzione ben precisa: si assume che solo le interazioni di breve raggio e con i siti più vicini e le interazioni dei siti con un "campo esterno" contribuiscono al livello di energia del sistema. Pertanto, per ogni configurazione $\sigma = (\sigma_1, \ldots, \sigma_n)$ si ha:

$$H(\sigma) = -\sum_{\{i,j\}\in E} V_{ij}\sigma_i\sigma_j - B\sum_{k\in[n]} \sigma_k$$
 (2.1)

in cui la prima sommatoria varia su tutte le coppie di vicini nel lattice graph mentre la seconda varia su tutti i siti del sistema. V_{ij} e B sono parametri associati rispettivamente alle interazioni dei vicini ed alle interazioni con il campo esterno.

Nel caso in cui tutte le energie di interazione siano non negative, tale sistema modella il comportamento di un *ferromagnete*: una configurazione "magnetizzata" (con la maggior parte di coppie di siti vicini aventi $\sigma_i = \sigma_i$), ha un

livello di energia più basso rispetto ad una configurazione non magnetizzata. Il parametro B corrisponde alla presenza di un "campo magnetico esterno".

2.2.1 Partition Function

La funzione di partizione è senza alcun dubbio l'oggetto di maggior rilievo introdotto dalla meccanica statistica. La si ottiene dall'esponenziazione dell'Hamiltoniana e sommando su tutte le possibili configurazioni σ , cioè su 2^n possibili assegnamenti di valori ± 1 alle n variabili $(\sigma_1, \ldots, \sigma_n)$:

$$Z = Z(V_{ij}, B, \beta) = \sum_{\sigma} exp(-\beta H(\sigma)).$$
 (2.2)

Nell'ambito della meccanica statistica, solitamente $\beta=1/kT$, dove k è la costante di Boltzmann e T è la temperatura ($\beta>0$).

La partition function è utilizzata come "denominatore" nel calcolo delle probabilità. In particolare, la probabilità che il sistema si trovi in una specifica configurazione σ è data dalla formula

$$P(\sigma) = \frac{e^{-\beta H(\sigma)}}{Z} \tag{2.3}$$

Il segno negativo apporta una maggiore probabilità agli stati con energia più bassa. Valori bassi di β , corrispondenti ad alta temperatura, tendono ad "appiattire" la distribuzione, rendendo così tutte le configurazioni equiprobabili o quasi. Alti valori di β , corrispondenti a bassa temperatura, tendono ad apportare maggiore probabilità agli stati con energia minore.

È possibile ottenere, a partire dalla partition function Z, due quantità altrettanto importanti, la mean energy $\epsilon = -\partial (\ln Z)/\partial \beta$ ed il mean magnetic moment $\mathcal{M} = \beta^{-1}\partial (\ln Z)/\partial \beta$.

2.3 Cenni di probabilità e statistica

Di seguito vengono riportati concetti e definizioni utili alla comprensione di questo lavoro di tesi (per maggiori dettagli consultare [4]).

Spazio delle probabilità. Tripla (Ω, F, P) , dove Ω è lo spazio campionario, cioè l'insieme dei possibili esiti (o outcome), F è l'insieme degli eventi, mentre $P: \mathcal{F} \to [0,1]$ è una funzione che assegna probabilità ad eventi. Variabile aleatoria. Definita su uno spazio di probabilità, esprime il valore numerico di un outcome di un evento. Una variabile aleatoria X è una funzione definita sullo spazio degli outcome Ω , ed associa ad ogni elemento di Ω un valore in \mathcal{R} . Sia X una variabile casuale che rappresenta il valore degli outcome di un certo evento e si assuma che tale evento possa avere solo un numero finito di possibili outcome. Sia Ω lo spazio campionario dell'esperimento. Una funzione di distribuzione per X

2.4 Processi Markoviani

- 2.4.1 Irriducibilità e periodicità
- 2.4.2 Distribuzione stazionaria
- 2.4.3 Catena di Markov Monte Carlo
- 2.5 Algoritmi di approssimazione

Logit Dynamics

- 3.1 Definizione
- 3.2 Propiretà
- 3.2.1 Ergodicità
- 3.2.2 Logit dynamics e Glauber dynamics
- 3.3 Movitazioni
- 3.4 Alcuni Esperimenti

Il lavoro di Jerrum e Sinclair

- 4.1 Spins world e Subgraphs world
- 4.2 Stima della Partition Function
- 4.3 Analisi del subgraphs-world process

Miglioramenti apportati

- 5.1 Stato dell'arte
- 5.1.1 Miglioramenti Rinaldi
- 5.1.2 Esperimenti
- 5.2 Stima della Partition Function
- 5.2.1 Numero di steps

Mean Magnetic Moment

- 6.1 Lemma 8, Teorema 9
- 6.2 Approssimazione della funzione odd(X)
- 6.2.1 logm Subgraphs
- 6.2.2 Algoritmo L

Implementazione e testing

- 7.1 Implementazione
- 7.2 Testing
- 7.3 DLib Python Wrapper

Conclusioni e sviluppi futuri

Bibliografia

- [1] D. Easley and J. Kleinberg, Networks, crowds, and markets: Reasoning about a highly connected world. Cambridge University Press, 2010.
- [2] B. A. Cipra, "An introduction to the ising model," *American Mathematical Monthly*, vol. 94, no. 10, pp. 937–959, 1987.
- [3] M. Jerrum and A. Sinclair, "Polynomial-time approximation algorithms for the ising model," *SIAM Journal on computing*, vol. 22, no. 5, pp. 1087–1116, 1993.
- [4] C. M. Grinstead and J. L. Snell, *Introduction to probability*. American Mathematical Soc., 2012.