Edital 01/2018

Probabilidade, algoritmos e mecânica estatística — transição de fase em complexidade computacional

Henrique Yuji Teixeira

(RA 21001515)

henrique.yuji@aluno.ufabc.edu.br

Jair Donadelli

(orientador)

jair.donadelli@ufabc.edu.br

Palavras-chave: complexidade computacional, transição de fase, vidros de spin (*spin glasses*), modelos probabilísticos, otimização combinatória

Área de conhecimento: 1.01.04.03-8 Matemática Discreta e Combinatória

1 Introdução

As estruturas discretas aleatórias foram, ao longo das últimas décadas, o centro de um desenvolvimento científico robusto envolvendo combinatória, mecânica estatística, complexidade computacional e teoria da informação. Na complexidade computacional, uma questão central é o famoso problema $\mathtt{P} \neq \mathtt{NP}$?; uma classe muito ampla de problemas computacionais de interesse prático, os problemas NP-difíceis, têm resistido a todas as tentativas de desenvolver algoritmos eficientes e, de fato, o famoso problema como posto aqui pergunta se existem tais algoritmos eficientes. Para entender por que todos os algoritmos atualmente conhecidos não conseguem resolver problemas NP-difíceis de forma eficiente, matemáticos e cientistas da computação têm estudado modelos aleatórios como, por exemplo, instâncias aleatórias de SAT, o problema de satisfazibilidade de fórmulas booleanas [8]. Uma hipótese intrigante é que, nesses modelos, o sucesso dos algoritmos "locais" é regido por uma transição de fase "dinâmica" que se assemelha à transição dos vidros da mecânica estatística. Em estudos recentes as noções-chave da Física Estatística, como "transição de fase" e "expoentes críticos", estão sendo aplicadas a uma variedade de questões de complexidade computacional e análise de algoritmos [14]. Também, pelo outro lado, as técnicas desenvolvidas em Combinatória e em Computação para analisar algoritmos probabilísticos são adotadas por probabilistas e físico-matemáticos para estudar sistemas de partículas e outros modelos físicos estocásticos [10, 12, 20].

Um elo entre a complexidade computacional surge ao estudar por que alguns problemas no modelo de Ising são analiticamente solucionáveis enquanto outros problemas similares não são. A complexidade algorítmica de se avaliar a função de partição do modelo ajuda a esclarecer a fronteira que separa os problemas analiticamente tratáveis dos intratáveis. Um problema fundamental na mecânica estatística é computar a função partição $Z_N(G) = \sum_\sigma \exp(-\beta E(\sigma))$, onde σ é uma configuração de N *spins* (representam momentos dipolares magnéticos de spins atômicos que podem estar em um de dois estados) organizados em um grafo G, permitindo que cada spin interaja com seus vizinhos, e $E(\sigma)$ é a energia da configuração. A avaliação da soma requer diretamente $O(2^N)$ operações. A noção de solução analítica não tem uma definição precisa, mas como requisito mínimo, queremos reduzir esse número de exponencial para polinomial em N. Calcular Z está intimamente relacionado a um problema #P-completo para grafos [7], portanto, não há esperança de encontrar uma solução analítica. Por outro lado, sabemos que é possível avaliar a função de partição dos sistemas de Ising em redes cristalinas planares em tempo polinomial[2, 17]. Ademais, o mecanismo para provar a tratabilidade ou intratabilidade computacional é o mesmo na mecânica estatística e na complexidade computacional: a redução de tempo polinomial de Karp; podemos classificar muitos outros problemas que surgem em física estatística de acordo com a complexidade computacional de avaliar sua função partição [21].

Outro elo entre a complexidade computacional e a física, e é aqui o nosso maior interesse, se dá pelos métodos da mecânica estatística usados na análise probabilística de problemas computacionais. Na mecânica estatística, usualmente, formula-se um problema de otimização como um vidro de *spin* e analisa-se as propriedades em baixa temperatura deste último. Podemos formalmente considerar problemas de otimização combinatória como modelos em mecânica estatística. A função custo é renomeada como Hamiltoniana, instâncias aleatórias são amostras de “desordem extinta”[1] e os estados fundamentais do modelo formal correspondem às soluções dos problemas de otimização. Desta forma, métodos desenvolvidos no âmbito da mecânica estatística de sistemas desordenados tornam-se ferramentas poderosas para a análise probabilística de problemas combinatórios. Essa abordagem descrita produz, geralmente, resultados que vão além dos resultados obtidos pelos métodos tradicionais. Os pesquisadores aplicaram métodos de mecânica estatística, por exemplo, ao Problema do Caixeiro Viajante [16, 9], a vários outros problemas em grafos [15, 6, 19, 3, 4] e ao Problema de Satisfazibilidade de fórmulas booleanas [13].

Outra observação surpreendente é o fato de que quando instâncias aleatórias de problemas computacionalmente intratáveis podem ser resolvidas em tempo polinomial, observa-se o tempo de execução exponencial quando parâmetros da instância aleatória são ajustados com cuidado, um cenário que corresponde a uma transição de fase em um sistema físico.

Transições de fase na complexidade computacional. A teoria da complexidade computacional é amplamente baseada na *análise de pior caso*, porém um algoritmo pode exigir tempo exponencial apenas em instâncias raras. Um exemplo famoso é o método simplex para programação linear que, apesar da complexidade exponencial do pior caso, é usado em muitas aplicações para resolver problemas realmente grandes, aparentemente as instâncias que determinam tempo de execução exponencial não aparecem em condições práticas. A

[1] Na física estatística, diz-se que um sistema apresenta desordem extinta (*quenched disorder*) quando alguns parâmetros que definem seu comportamento são variáveis aleatórias que não evoluem com o tempo, ou seja, são extintas ou congeladas. Vidro de *spins* são um exemplo típico.

programação linear está em P graças ao método elipsóide.

Cenários semelhantes são observados para problemas NP-difíceis, consideremos o 3-SAT, por exemplo. Ao gerar instâncias aleatórias com n variáveis e m cláusulas para um algoritmo força-bruta observamos tempo de execução polinomial a menos que a relação m/n seja cuidadosamente ajustada. Se m/n for muito pequeno o problema tem muitas soluções e um algoritmo esperto encontrará uma rapidamente; se m/n for muito grande tem muitas restrições contraditórias que, de novo, um algoritmo esperto descobrirá rapidamente [5]. As instâncias reais e duras são dadas para proporções $\alpha = m/n$ próximas a um valor crítico α_c [14]. A transição de fórmulas "esparsas" (α pequeno) para "densas" (α

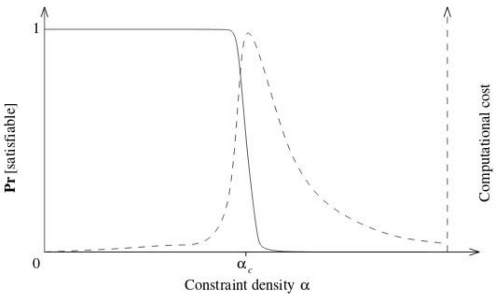

Figura 1: Representação esquemática da transição de fase no 3-SAT. Fonte: [18].

grande) traz as marcas de uma transição de fase em sistemas físicos. Transições de fase similares ocorrem em vários outros problemas de decisão ou otimização e os métodos matemáticos da mecânica estatística têm sido usados com sucesso para suas transições de fase em complexidade computacional.

2 Objetivos e metas

O objetivo geral com esse projeto é iniciar o aluno na prática de pesquisa e na formação científica no tema proposto, oferecer a oportunidade para aprender novas técnicas matemáticas de modelagem, simulação e resolução de problema. Além disso, como subproduto esperamos: incentivar o gosto do aluno pela pesquisa, desenvolver a criatividade e o raciocínio analítico; desenvolver maturidade matemática no aluno; ampliar os conhecimentos e habilidades do aluno; desenvolver no aluno a prática de leitura e compreensão de artigos científicos; qualificar o aluno para continuar seus estudos num programa de pós-graduação em um futuro breve.

Por ser um tema muito abstrato e que demanda maturidade não é esperado que apresentemos contribuições originais relevantes no final deste projeto. Em resumo, o principal foco é a formação do aluno para permitir contribuições ao tema no futuro.

Os objetivos específicos são: aprender os conceitos básicos da complexidade computacional, aprender os conceitos básicos de modelos e distribuições probabilísticas relevantes em uma parte da mecânica estatística, aprender como os conceitos anteriores são usados para estudar problemas computacionais.

3 Metodologia e Cronograma

A metodologia é tradicional ao estudo teórico. Faremos um estudo guiado do tema, a partir de desafios propostos pelo orientador em reuniões quinzenais o aluno deverá buscar os conceitos e técnicas (em livros e artigos que lhe serão indicados, quando for o caso) e desenvolver a solução a fim de atingir o objetivos expostos acima.

Os tópicos planejados para estudo são

1. Introdução às classes P, NP e #P de complexidade computacional, problemas de decisão, de contagem e de otimização.

2. Física Estatística e Teoria das Probabilidades: distribuição de Boltzmann, potenciais termodinâmicos, limite termodinâmico, modelos de Ising e vidro de spin.

3. Otimização combinatória

4. Otimização combinatória e modelos de vidro de spin

5. Redação de relatório.

As principais referências são [1, 11, 10, 12]

	08/18	09/18	10/18	11/18	12/18	1/19	2/19	3/19	4/19	5/19	6/19	7/19
1	X	X	X	X								
2				X	X	X	X					
3			X	X				X	X			
4								X	X	X	X	
5					X	X	X			X	X	X

Referências

[1] Sanjeev Arora and Boaz Barak. *Computational Complexity: A Modern Approach*. Cambridge University Press, New York, NY, USA, 1st edition, 2009.

[2] F. Barahona. On the computational complexity of Ising spin glass models. *Journal of Physics A Mathematical General*, 15:3241–3253, October 1982.

[3] Amir Dembo and Andrea Montanari. Gibbs measures and phase transitions on sparse random graphs. *Braz. J. Probab. Stat.*, 24(2):137–211, 07 2010.

[4] Alexander K Hartmann and Martin Weigt. Statistical mechanics of the vertex-cover problem. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 36(43):11069, 2003.

[5] Brian P. Hayes. Computing science: Can't get no satisfaction. *American Scientist*, 85(2):108–112, 1997.

[6] Aldous David J. The $\zeta(2)$ limit in the random assignment problem. *Random Structures & Algorithms*, 18(4):381–418, 2001.

[7] F. Jaeger, D. L. Vertigan, and D. J. A. Welsh. On the computational complexity of the jones and tutte polynomials. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 108(1):35–53, 1990.

[8] Scott Kirkpatrick and Bart Selman. Critical behavior in the satisfiability of random boolean expressions. *Science*, 264(5163):1297–1301, 1994.

[9] W. Krauth and M. Mézard. The cavity method and the travelling-salesman problem. *EPL (Europhysics Letters)*, 8(3):213, 1989.

[10] M. Loebl. *Discrete Mathematics in Statistical Physics: Introductory Lectures*. Advanced Lectures in Mathematics. Amer Mathematical Society, 2010.

[11] Domingos H. U. Marchetti. *Aplicações da Análise Combinatória à Mecânica Estatística*. 25 o Colóquio Brasileiro de Matemática. Instituto de Matemática Pura e Aplicada, 2005.

[12] M. Mézard and A. Montanari. *Information, Physics, and Computation*. Oxford Graduate Texts. OUP Oxford, 2009.

[13] Remi Monasson and Riccardo Zecchina. Statistical mechanics of the random k-satisfiability model. *Physical Review E*, 56(2):1357–1370, 1997.

[14] Remi Monasson, Riccardo Zecchina, Scott Kirkpatrick, Bart Selman, and Lidror Troyansky. Determining computational complexity from characteristic 'phase transitions'. *Nature*, 400(6740):133–137, July 1999.

[15] M. Mézard and G. Parisi. Replicas and optimization. *Journal de Physique Lettres*, 46(17):771–778, 1985.

[16] M. Mézard and G. Parisi. Mean-field equations for the matching and the travelling salesman problems. *EPL (Europhysics Letters)*, 2(12):913, 1986.

[17] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65(3-4):117–149, February 1944.

[18] A. Percus, G. Istrate, and C. Moore. *Computational Complexity and Statistical Physics*. Computational Complexity and Statistical Physics. Oxford University Press, USA, 2006.

[19] Shao-Meng Qin, Ying Zeng, and Hai-Jun Zhou. Spin-glass phase transitions and minimum energy of the random feedback vertex set problem. *Phys. Rev. E*, 94:022146, Aug 2016.

[20] Amanda Pascoe Streib. *Markov chains at the interface of combinatorics, computing and statisticl physics*. PhD thesis, Georgia Institute

of Technology, The address of the publisher, May 2012. Disponível em smartech.gatech.edu/bitstream/handle/1853/43628/streib_amanda_p_201205_phd.pdf?sequence=1&isAllowed=y.

[21] D. J. A. Welsh. The computational complexity of some classical problems from statistical physics. In *In Disorder in Physical Systems*, pages 307–321. Clarendon Press, 1990.