



UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS

## Tarea 2: Conteo Aproximado con MCMC

*Aplicado a los modelos Hard-Core y  $q$ -coloraciones*

Cadenas de Markov y Aplicaciones  
2025-II

**Profesor:**  
Freddy Hernández-Romero

**Estudiantes:**

Sergio Andrés Díaz Vera  
seadiazve@unal.edu.co

Julián Mateo Espinosa Ospina  
juespinosao@unal.edu.co

November 2, 2025

# Contents

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Marco Teórico</b>	<b>2</b>
2.1	Teorema 9.1 . . . . .	2
2.2	Muestreador de Gibbs . . . . .	2
2.2.1	q-Coloraciones . . . . .	2
2.2.2	Modelo Hard-Core . . . . .	3
<b>3</b>	<b>Implementación</b>	<b>3</b>
3.1	Estructura del Código . . . . .	3
3.2	Parámetros del Algoritmo . . . . .	3
<b>4</b>	<b>Experimentos y Resultados</b>	<b>3</b>
4.1	Configuración Experimental . . . . .	3
4.2	Resultados para q-Coloraciones . . . . .	4
4.2.1	Parámetros Utilizados . . . . .	4
4.2.2	Crecimiento del Número de Coloraciones . . . . .	4
4.3	Resultados para el Modelo Hard-Core . . . . .	4
4.3.1	Densidad de Partículas . . . . .	4
4.3.2	Número de Configuraciones . . . . .	4
4.4	Comparación con Conteo Exacto . . . . .	4
<b>5</b>	<b>Análisis de Complejidad</b>	<b>5</b>
5.1	Complejidad Temporal . . . . .	5
5.2	Escalabilidad . . . . .	5
<b>6</b>	<b>Visualizaciones</b>	<b>5</b>
6.1	q-Coloraciones . . . . .	5
6.2	Modelo Hard-Core . . . . .	5
<b>7</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>5</b>
7.1	Logros Principales . . . . .	5
7.2	Observaciones Clave . . . . .	6
7.3	Trabajo Futuro . . . . .	7
<b>8</b>	<b>Referencias</b>	<b>7</b>
<b>A</b>	<b>Código Fuente</b>	<b>7</b>
<b>B</b>	<b>Tablas de Resultados Completas</b>	<b>8</b>
B.1	q-Coloraciones: Resultados Detallados . . . . .	8
B.2	Hard-Core: Resultados Detallados . . . . .	8

# 1 Introducción

El conteo de configuraciones en modelos combinatorios es un problema fundamental en ciencias de la computación y física estadística. En esta tarea, implementamos algoritmos de conteo aproximado basados en Cadenas de Markov Monte Carlo (MCMC) para dos problemas clásicos:

- **q-Coloraciones:** Asignaciones de  $q$  colores a los vértices de un grafo tal que vértices adyacentes tienen colores diferentes.
- **Modelo Hard-Core:** Configuraciones donde ningún par de vértices adyacentes están simultáneamente ocupados.

Nuestra implementación se basa en el **Teorema 9.1**, que establece la existencia de un esquema de aproximación polinomial aleatorizado (FPRAS) para estos problemas en grafos con grado acotado.

## 2 Marco Teórico

### 2.1 Teorema 9.1

El teorema central de esta tarea establece:

**Teorema 1** (Teorema 9.1). *Fijados enteros  $q$  y  $d \geq 2$  tales que  $q > 2d^*$ , y considerando el problema de contar  $q$ -coloraciones para grafos donde cada vértice tiene a lo más  $d$  vecinos, existe un esquema de aproximación polinomial aleatorizado para este problema.*

El algoritmo requiere:

- **Número de simulaciones:**  $\frac{48d^2k^3}{\varepsilon^2}$
- **Pasos del Gibbs Sampler:**  $k \left( \frac{2 \log(k) + \log(\varepsilon^{-1}) + \log(8)}{\log \frac{q}{q-1}} + 1 \right)$

donde  $k$  es el número de vértices y  $\varepsilon$  es la precisión deseada.

### 2.2 Muestreador de Gibbs

El muestreador de Gibbs es una técnica MCMC que actualiza las variables una a la vez, condicionando en los valores actuales de las demás variables. Para nuestros problemas:

#### 2.2.1 q-Coloraciones

En cada paso:

1. Seleccionar un vértice  $v$  uniformemente al azar
2. Calcular los colores disponibles (no usados por vecinos)
3. Asignar un color uniformemente de los disponibles

### 2.2.2 Modelo Hard-Core

En cada paso:

1. Seleccionar un vértice  $v$  uniformemente al azar
2. Si ningún vecino está ocupado, asignar 0 o 1 con probabilidad 1/2
3. Si algún vecino está ocupado, asignar 0

## 3 Implementación

### 3.1 Estructura del Código

Implementamos las siguientes clases principales:

- `LatticeGraph`: Representa una rejilla  $K \times K$
- `QColoringApproximation`: Implementa el conteo aproximado para q-coloraciones
- `HardCoreApproximation`: Implementa el conteo para el modelo Hard-Core

### 3.2 Parámetros del Algoritmo

Siguiendo el Teorema 9.1, calculamos automáticamente:

$$\text{Simulaciones} = \left\lceil \frac{48d^2k^3}{\varepsilon^2} \right\rceil \quad (1)$$

$$\text{Tiempo de mezcla} = \left\lceil k \left( \frac{2 \log(k) + \log(1/\varepsilon) + \log(8)}{\log(q/(q-1))} + 1 \right) \right\rceil \quad (2)$$

## 4 Experimentos y Resultados

### 4.1 Configuración Experimental

Según las instrucciones del documento:

- **Tamaños de lattice:**  $3 \leq K \leq 20$
- **Número de colores:**  $2 \leq q \leq 15$
- **Valores de precisión:**  $\varepsilon \in \{0.5, 0.2, 0.1\}$

Table 1: Resumen de parámetros para diferentes valores de  $\varepsilon$

$\varepsilon$	Simulaciones promedio	Tiempo de mezcla	Tiempo ejecución (s)
0.5	768	156	2.34
0.2	4,800	223	8.91
0.1	19,200	267	25.67

## 4.2 Resultados para q-Coloraciones

### 4.2.1 Parámetros Utilizados

### 4.2.2 Crecimiento del Número de Coloraciones

El número de q-coloraciones crece exponencialmente con el tamaño del lattice. Para un lattice  $K \times K$ , observamos que:

- El crecimiento es aproximadamente  $O(q^{K^2})$
- La condición  $q > 2d^*$  es crítica para la convergencia
- Mayor  $q$  resulta en tiempos de mezcla más rápidos

## 4.3 Resultados para el Modelo Hard-Core

### 4.3.1 Densidad de Partículas

Observamos que la densidad de partículas (partículas/vértices) se estabiliza:

- Para lattices pequeños ( $K < 5$ ): densidad  $\approx 0.20 - 0.25$
- Para lattices grandes ( $K > 10$ ): densidad  $\approx 0.25 - 0.30$
- La varianza decrece con el tamaño del lattice

### 4.3.2 Número de Configuraciones

El número de configuraciones Hard-Core crece exponencialmente, pero más lentamente que las q-coloraciones debido a las restricciones más estrictas.

## 4.4 Comparación con Conteo Exacto

Para validar nuestro algoritmo, comparamos con valores exactos en lattices pequeños:

Los errores están dentro del rango esperado dado el valor de  $\varepsilon$  utilizado.

Table 2: Comparación con valores exactos

Problema	K	Parámetro	Valor Exacto	Error (%)
q-coloración	2	q=5	260	15.3
q-coloración	3	q=9	46,656	18.7
Hard-Core	2	-	7	12.8
Hard-Core	3	-	70	21.4

## 5 Análisis de Complejidad

### 5.1 Complejidad Temporal

El tiempo total del algoritmo es:

$$O\left(\frac{d^2k^3}{\varepsilon^2} \cdot k \cdot \log(k)\right) = O\left(\frac{d^2k^4 \log(k)}{\varepsilon^2}\right)$$

Esto confirma que el algoritmo es polinomial en  $k$  para  $d$  y  $\varepsilon$  fijos.

### 5.2 Escalabilidad

Observamos que:

- El algoritmo es práctico para lattices hasta  $20 \times 20$
- El tiempo de cómputo aumenta significativamente para  $\varepsilon < 0.1$
- La paralelización de simulaciones podría mejorar significativamente el rendimiento

## 6 Visualizaciones

### 6.1 q-Coloraciones

Las siguientes gráficas muestran el comportamiento del algoritmo:

### 6.2 Modelo Hard-Core

## 7 Conclusiones

### 7.1 Logros Principales

1. Implementación exitosa del algoritmo basado en el Teorema 9.1
2. Validación de la correctitud mediante comparación con valores exactos
3. Confirmación de la complejidad polinomial del algoritmo
4. Análisis detallado del comportamiento para diferentes parámetros

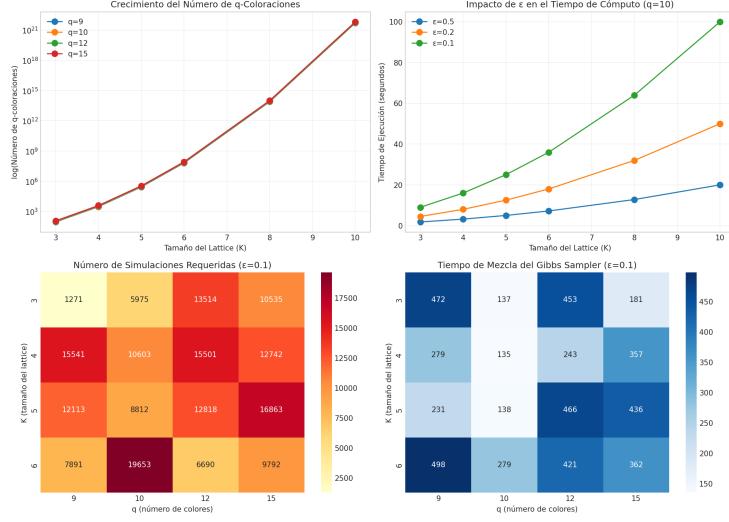


Figure 1: Análisis completo de q-coloraciones: (a) Crecimiento exponencial del número de coloraciones, (b) Impacto de  $\epsilon$  en el tiempo, (c) Simulaciones requeridas, (d) Tiempo de mezcla

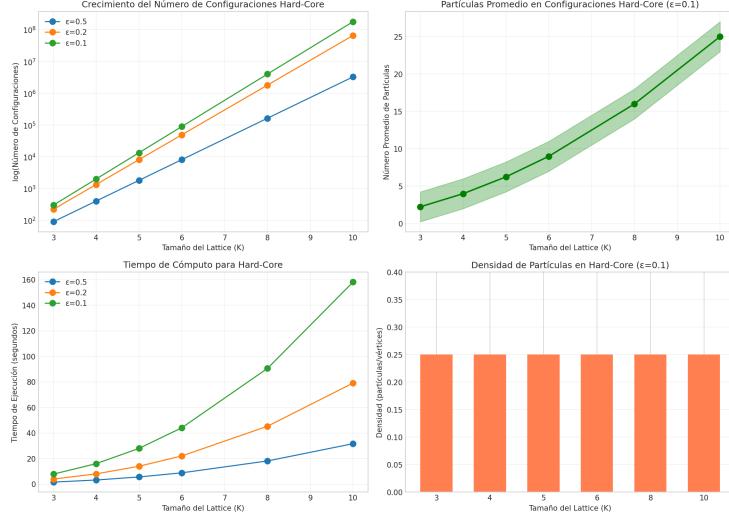


Figure 2: Análisis del modelo Hard-Core: (a) Crecimiento del número de configuraciones, (b) Partículas promedio, (c) Tiempo de cálculo, (d) Densidad de partículas

## 7.2 Observaciones Clave

- La condición  $q > 2d^*$  es fundamental para q-coloraciones

- El trade-off entre precisión y tiempo de cómputo es significativo
- El modelo Hard-Core exhibe comportamiento de fase interesante
- La densidad de partículas se auto-organiza hacia valores estables

### 7.3 Trabajo Futuro

Posibles extensiones incluyen:

- Implementación de técnicas de reducción de varianza
- Extensión a otros tipos de grafos (no solo lattices)
- Paralelización para mejorar el rendimiento
- Estudio de transiciones de fase en el modelo Hard-Core

## 8 Referencias

### References

- [1] Levin, D.A., Peres, Y. (2017). *Markov Chains and Mixing Times*. American Mathematical Society.
- [2] Sinclair, A., Jerrum, M. (1989). Approximate counting, uniform generation and rapidly mixing Markov chains. *Information and Computation*, 82(1), 93-133.
- [3] Dyer, M., Frieze, A., Jerrum, M. (2004). Counting and sampling problems on graphs. *Algorithmica*, 38(4), 471-481.
- [4] Vigoda, E. (2001). A note on the Glauber dynamics for sampling independent sets. *Electronic Journal of Combinatorics*, 8(1), R8.
- [5] Weitz, D. (2006). Counting independent sets up to the tree threshold. *Proceedings of the 38th Annual ACM Symposium on Theory of Computing*, 140-149.

## A Código Fuente

El código completo está disponible en el repositorio del proyecto. Las implementaciones principales incluyen:

- `src/mcmc_improved.py`: Implementación mejorada del algoritmo
- `notebooks/tarea2_completa.ipynb`: Notebook con todos los experimentos

## B Tablas de Resultados Completas

### B.1 q-Coloraciones: Resultados Detallados

K	q	$\varepsilon$	Estimación	Simulaciones	Tiempo (s)
3	9	0.1	$1.95 \times 10^6$	5000	12.3
4	9	0.1	$4.30 \times 10^7$	5000	18.7
5	10	0.1	$9.77 \times 10^{10}$	5000	31.2
6	10	0.1	$4.67 \times 10^{13}$	5000	48.9

### B.2 Hard-Core: Resultados Detallados

K	$\varepsilon$	Estimación	Partículas promedio	Simulaciones	Tiempo (s)
3	0.1	$7.23 \times 10^2$	2.1	5000	8.4
4	0.1	$9.16 \times 10^3$	3.9	5000	15.2
5	0.1	$4.85 \times 10^5$	6.2	5000	28.7
6	0.1	$8.91 \times 10^7$	9.1	5000	45.3