Dipartimento di Fisica “Edoardo Amaldi”

Università degli Studi di Roma Tre

Scuola Dottorale in Scienze Matematiche e Fisiche
Sezione di Fisica - XXI ciclo

Tesi

Il Problema della Massima Clique: Teoria & Pratica

Relatore Interno
prof. Roberto Raimondi

Coordinatore
prof. Guido Altarelli

Relatore Esterno
prof.ssa Elisabetta Scoppola

Massimiliano Viale

A. A. 2008

a mamma e papà

Indice

Introduzione

Il problema di trovare le clique di un grafo appartiene a quel gruppo di problemi combinatoriali considerati un "paradigma" nell'ambito della *Teoria della Complessità Computazionale*. È stato uno tra i primi che Richard Karp, nell'articolo "Reducibility Among Combinatorial Problems" del 1972 [1], mostrò essere NP-completo e quindi "intrattabile". Nel linguaggio comune, con il termine clique (o "cricca" in italiano, dal significato alquanto negativo!) si vuole intendere un "informale e ristretto gruppo sociale formato da persone che condividono interessi o caratteristiche comuni". Questo termine è stato adottato in teoria dei grafi come sinonimo di sottografo completo, e cioè un sottoinsieme di nodi di un grafo ognuno dei quali è collegato da un arco con tutti gli altri nodi di tale sottoinsieme. L'importanza di questo problema è legata al fatto che, conoscere le clique, permette di comprendere le caratteristiche più profonde di un grafo. Lo studio del "call graph" è forse l'esempio più spettacolare che possiamo esibire per evidenziare questo aspetto. Da diversi anni, alcuni tra i più importanti esperti del settore come Abello, Pardalos, Resende e Feigenbaum a capo del gruppo, cercano di analizzare "mostri" formati da circa 54 milioni di nodi e 170 milioni di archi che sono stati ottenuti dai tabulati telefonici della AT&T Shannon Laboratories. Ogni numero di telefono costituisce un nodo del grafo ed un arco è inserito tra tutte quelle coppie di nodi che si telefonano frequentemente. All'inizio lo studio si è concentrato proprio sulla ricerca delle clique. Sono state trovate circa 14.000 clique formate da 30 nodi, quasi sicuramente le più grandi. Tale risultato poi è stato fondamentale per stimare il numero e la taglia delle componenti connesse del grafo, e cioè quei sottografi per i quali esiste sempre un cammino che, passando per gli archi, è in grado di mettere in comunicazione due nodi. L'analisi ha mostrato che il call graph possiede circa $3,7$ milioni di componenti connesse. Una componente è "gigante" ed è formata da circa 45 milioni di nodi che rappresentano praticamente l'80% del totale, mentre tutte le altre sono costituite tipicamente solo da coppie di nodi [2]. Sebbene il call graph sia di natura tutt'altro che casuale, i risultati ottenuti sono decisamente compatibili con quelli previsti nel caso in cui il grafo sia "estratto" dalla classe di Erdös-Reny. Per questi grafi è stato dimostrato che, anche una piccola percentuale di archi, è in grado di generare componenti connesse giganti capaci di "ricoprire" quasi tutto il grafo (Small World Experiment). Esistono moltissimi altri problemi, sicuramente meno suggestivi ma decisamente più attuali e concreti, che fanno riferimento al problema della clique. La gestione delle risorse di calcolo su diverse macchine o l'intimo funzionamento della rete Internet sono solo alcuni esempi per cui è necessario scontrarsi in una qualche maniera con tale problema. L'importanza di trovare le clique però non deve essere valutata solo sulla base delle dirette applicazioni a cui può far riferimento. Tutti i problemi NP-completi, infatti, devono la loro fama al fondamentale contributo di Stephen Cook e Richard Karp, (e per questo premiati entrambi con il Turing Award), alla teoria della complessità computazionale. Lo scenario che si presenta è quello per cui un qualunque problema può essere sempre riconducibile ad uno NP-completo con la conseguenza che i problemi NP-completi sono da considerarsi quelli più "duri" da risolvere. L'aspetto più importante però è che tutti i problemi NP-completi sono così intimamente legati tra loro che, trovare un algoritmo efficiente in grado di risolverne anche uno solo, coincide quasi automaticamente con l'aver trovato un algoritmo efficiente per risolverli tutti. Questa proprietà è quella che viene chiamata NP-completezza. La conseguenza principale di questo risultato è che possono esistere solo due possibilità: o tutti i problemi si possono risolvere con algoritmi che richiedono al più un numero di operazioni che cresce polinomialmente con la taglia del problema ($P = NP$) oppure nessuno tra i problemi NP-completi può essere risolto con un algoritmo del genere ($P \neq NP$). Per avere un'idea dell'importanza di questo risultato può essere curioso sapere che il Clay Mathematics Institute a Cambridge offre 1 milione di dollari a chi è in grado di esibire una dimostrazione rigorosa in grado di stabilire quale tra i due scenari è quello giusto. Questo perché tale problematica, presentata spesso con l'espressione P Vs NP, è stata inserita, all'unanimità dal mondo scentifico, tra i sette "Problemi del Millenio" (o forse adesso solo sei se la dimostrazione di Perelman sulla congettura di Poincarè si rivelerà esatta).

Per quale motivo però una tesi di dottorato in fisica dovrebbe occuparsi del problema delle clique? Al termine del corso di studi universitari ho avuto la fortuna di avere il Prof. Giorgio Parisi come relatore della mia tesi e sono stato "iniziato" alla teoria dei vetri di spin proprio poco tempo dopo che lo stesso Parisi, insieme a Mezard e Zecchina, mettevano a punto un algoritmo in grado di affrontare e risolvere efficacemente molte difficili istanze del problema di K-soddisfacibilità [3] [4], il problema che consiste nel soddisfare un certo numero di condizioni logiche formate da K variabili booleane. Il mio primo contatto con la fase di spin glass fu entusiasmante. Lo studio del modello di Sherrington-Kirkpatrick [5] prima, e la comprensione di modelli di sistemi disordinati sul reticolo di Bethe [6] poi, mi diede la netta sensazione di aver imparato tecniche raffinatissime ed estremamente potenti del tutto generali e dalle innumerevoli applicazioni [7].

Avevo avuto già una certa esperienza di programmazione di metodi Monte Carlo e il legame tra meccanica statistica e ottimizzazione mi era noto da tempo. Eppure è stato sorprendente per me accorgermi che il *Metodo delle Repliche* [8] e quello della *Cavità* [9] permettevano di fare ottimizzazione senza scomodare il "solito" algoritmo di ricottura simulata [10]. Il linguaggio della fisica, infatti, traduce bene l'intrattabilità di molti problemi d'ottimizzazione in termini di frustrazioni e disordine e parecchi concetti possono essere estesi con successo a classi molto ampie di problemi diversi permettendone l'analisi all'interno di un apparato teorico potente e robusto.

La mia tesi di laurea aveva lo scopo di verificare con "costosissime" simulazioni numeriche l'effettiva presenza a basse temperature della fase chiamata $1RSB$ per il Random $3SAT$. Poiché il problema del $3SAT$ si riduce ad un problema di clique, mi è sembrato naturale, una volta entrato a far parte del ciclo di dottorato di ricerca a Roma 3, seguire il consiglio di Giorgio Parisi e chiedere di lavorare insieme ad Elisabetta Scoppola che nel frattempo, insieme a Benedetto Scoppola e Antonio Iovanella, stavano lavorando su alcuni algoritmi random per la ricerca delle clique ispirati proprio a modelli di spin glass [11].

Gli algoritmi originali che abbiamo studiato e sviluppato in questi tre anni insieme consistono principalmente in due diverse maniere di costruire una *Catena di Markov* in grado di concentrare la misura sulle soluzioni del problema. Il grafo che determina l'istanza del problema è trasformato in un reticolo ed i nodi immaginati come siti che possono essere occupati da particelle. Le configurazioni che esplora la nostra dinamica stocastica a questo punto assomigliano molto a quelle di un gas di fermioni che occupano i siti del reticolo. Le hamiltoniane e pseudo-hamiltoniane che presentiamo in questo lavoro hanno come stato fondamentale proprio le configurazioni in cui le particelle occupano i nodi che formano la clique massimale del grafo. Una prima differenza sostanziale rispetto tutti gli altri algoritmi tradizionali e che la nostra dinamica Monte Carlo permette le transizioni anche verso quelle configurazioni che non corrispondono ad una clique. A prima vista le hamiltoniane che abbiamo utilizzato assomigliano molto a quella del modello di Sherrington-Kirkpatrick. L'utilizzo di numeri d'occupazione invece di spin di Ising, come vedremo anche nel capitolo 2, presenta alcune novità, ma non è stato questo il motivo principale per cui non abbiamo potuto sfruttare le stesse tecniche usate nel modello SK. Infatti, sebbene la traduzione dei nostri algoritmi nel linguaggio della meccanica statistica è avvenuta in maniera abbastanza naturale, e nonostante l'intrattabiltà del problema potesse essere compresa in termini sempre di frustrazioni e disordine, istanziando il problema delle clique su un grafo random della classe di Erdös-Rènyi, il metodo delle Repliche e quello della Cavità non potevano essere sfruttati con lo stesso successo a cui eravamo abituati con gli altri modelli. Il motivo principale di tale difficoltà è dovuto all'impossibilità di mantenere la densità di particelle costante quando si raggiunge il limite termodinamico e, infatti, le clique massimali di un grafo random sono dell'ordine del logaritmo della taglia del reticolo. Le configurazioni sulle quali la misura invariante della catena si concentra corrispondono quindi a quelle in cui il gas è estremamente rarefatto e, nel limite di volume infinito, la densità di particelle è nulla. Lavorare nel canonico e molta euristica sono stati quindi due ingredienti necessari che ci hanno permesso in parecchi casi di comprendere gli aspetti fondamentali di questi algoritmi. La media annealed della distribuzione d'equilibrio (la media sulle istanze della funzione di partizione piuttosto che, più giustamente, del suo logaritmo), è stato poi uno strumento molto utile che ci ha permesso di valutare con discreta confidenza alcune caratteristiche fondamentali come, ad esempio, le stime sulle temperature alle quali gli algoritmi sono in grado di trovare le clique. Le simulazioni numeriche hanno confermato infatti la ragionevolezza dei nostri risultati.

L'altro aspetto fondamentale di questo lavoro è stato valutare la velocità di convergenza all'equilibrio delle nostre catene di Markov, aspetto che è strettamente legato all'efficenza degli algoritmi. Il risultato di Jerrum, che dimostra come un semplice processo di Metropolis che cammina sulle clique di un grafo raggiunga l'equilibrio in un numero di passi che cresce più che polinomialmente con la taglia del grafo [12], è stato il punto di partenza della nostra ricerca su questo campo. Siamo stati in grado di esibire stime inferiori al tempo di mixing utilizzando la tecnica dei "colli di bottiglia" che sfrutta la proprietà della forma di Dirichlet di una catena di assumere come valore minimo proprio lo *spectral gap* della matrice di transizione che contiene tutta l'informazione necessaria sulla convergenza all'equilibrio. Trovare una stima superiore al tempo di mixing è molto più difficile. Recentemente stiamo lavorando su questa problematica sfruttando la teoria del potenziale e l'analogia tra catene di Markov e i circuiti elettrici [13]. Non siamo ancora in grado di esibire risultati soddisfacenti ma, l'apporto fondamentale di Alexander Gaudillière su questo argomento, ci ha indicato perlomeno una strada da percorrere e, se praticabile, confidiamo di venirne a capo in tempi ragionevoli.

Nel primo capitolo discuteremo sulla problematica P Vs NP soffermandoci sul meccanismo di riducibilità che permette di dimostrare che il problema delle clique è NP-completo e sulle stime del clique number (la cardinalità della clique massimale) di un grafo random.

Nel secondo capitolo ripercorreremo velocemente gli aspetti fondamentali della meccanica statistica e della fase di spin glass, mentre nell'ultima sezione ci dedicheremo allo studio di un modello disordinato di gas reticolare quasi del tutto simile al modello SK. Questo modello è stato preso in considerazione per due diversi motivi. Il primo è stato quello di mostrare come il metodo delle Repliche e quello della Cavità permettano di studiare un tipico problema d'ottimizzazione. Il secondo è stato quello di valutare le caratteristiche di un sistema disordinato quando si sostituiscono gli spin di Ising con variabili booleane.

Il terzo capitolo affronta il problema della convergenza all'equilibrio di catene di Markov finite. Vengono date le definizioni e le proprietà principali di una processo di Markov e vengono mostrate le tecniche con le quali è possibile stimare il tempo di mixing. L'ultima sezione del capitolo si occupa del Metropolis di Jerrum.

Il quarto capitolo invece è interamente dedicato ai due algoritmi per la ricerca delle clique che rappresentano la parte più originale del lavoro. Il primo è un semplice algoritmo Metropolis($\mathcal{M}$) che segue una dinamica alla Glauber, "flippando" cioè un sito alla volta. Discuteremo sul modo di lavorare di questo algoritmo e cercheremo di fare un po' di termodinamica. Il secondo algoritmo invece, cha abbiamo chiamato algoritmo di Cavity ($\mathcal{C}$), ha una dinamica più ricca e originale. Le configurazioni visitate da questo algoritmo sono quelle in cui il numero di particelle è fissato e la probabilità di transizione da una configurazione ad un'altra, che può essere ottenuta utilizzando una dinamica Kawasaki, permette di aggiornare più siti contemporaneamente e risentire meno dell'effetto delle frustrazioni. Dovrebbe avere sulla carta quindi caratteristiche tali da essere in certi regimi più efficiente di altri algoritmi random anche se le simulazioni numeriche non riescono a dare ancora una risposta definitiva alla questione. L'aspetto su cui più discuteremo sarà la possibilità di trasformare la dinamica di questo algoritmo in una statistica di Fermi.

La prima sezione dell'ultimo capitolo riporta, per completezza, la descrizione di alcuni tra gli algoritmi più famosi ed utilizzati per il problema delle clique. Nelle sezioni successiva presenteremo i risultati delle "costose" simulazioni numeriche effettuate per verificare la ragionevolezza del nostro studio teorico e comparare le prestazioni degli algoritmi random presentati in questo lavoro.

Capitolo 1

Il Problema della Clique (. . . e dintorni)

Il problema della massima clique appartiene alla classe dei problemi NP-hard che è direttamente riconducibile alla classe dei problemi NP-completi. Il significato di questa affermazione è l'argomento principale del presente capitolo. Nella sezione finale invece focalizzeremo l'attenzione al caso in cui le istanze del problema sono random.

1.1 P Vs NP

Cosa intendiamo per problema combinatoriale? Formalmente si può affermare che un problema combinatoriale consiste nel trovare, in uno spazio di configurazioni possibili tipicamente molto grande, quelle configurazioni che realizzano un certo obiettivo. Consideriamo ad esempio il problema di un commesso viaggiatore che deve visitare un certo numero di città e ritornare al punto di partenza cercando di percorrere la minor distanza possibile. Il *Travelling Salesman Problem* (TSP) è forse il più semplice e famoso esempio di problema di ottimizzazione. È noto, però, che trovare una soluzione a questo problema è un compito proibitivo già per un'istanza di appena poche decine di città. È semplice verificare che l'idea banale di provare tutte le configurazioni è assolutamente perdente. Se n è il numero delle città allora i *tour* possibili sono $n!/2n$ e ci vogliono n operazioni per calcolare la lunghezza di un tour. Quindi, già con $n = 30$, una macchina in grado di compiere un miliardo di operazioni al secondo impiegherebbe più di quattro milioni di miliardi di anni per raggiungere la soluzione. Una strada più praticabile potrebbe essere di provare a minimizzare i cammini localmente ed "incollare" poi adeguatamente i pezzi tra loro a formare il tour. Se ogni città possiede un numero esiguo di vicini, o si trovano a distanze parecchio diverse, questo approccio di ottimizzazione locale può essere di facile applicazione e parecchio efficiente da portare agevolmente alla soluzione. Quando, al contrario, ogni città possiede un numero notevole di vicini più o meno alla stessa distanza, diventa difficile suddividere le città in gruppi, i cammini locali possibili tendono a crescere in maniera eccessiva e diventa difficile scegliere proprio la combinazione di quelli che mi conducono all'ottimo. L'idea che questo piccolo esempio vuole suggerire è che, indipendentemente dall'astuzia dell'algoritmo utilizzato, il problema può rimanere sempre *intrattabile*.

1.1.1 I problemi di decisione

La *Teoria della Complessità Computazionale* è quella branca della teoria della computazione che cerca di valutare problemi ed algoritmi in base alle risorse necessarie per ottenere una soluzione ed il bellissimo libro di Garey-Jhonson *Computer & Intractability* [14] ne è da sempre il punto di riferimento principale. Una prima classificazione divide i problemi in base al tipo di obiettivo. Prendendo come esempio ancora il TSP potremmo chiederci:

Ricerca Quale tour è minore di d?

Enumerazione Quanti tour ci sono minori di d?

Decisione Esiste un tour minore di una certa distanza d?

Ottimizzazione Quanto è lungo il tour minimo?

Se immaginiamo di possedere un algoritmo in grado di rispondere al problema della ricerca dei tour minori di d allora, quasi automaticamente, siamo in grado di esibire algoritmi in grado di risolvere tutti gli altri obiettivi. Infatti, se conosco tutti i tour minori di d, li posso contare e risolvere il problema della numerazione. A questo punto si risponde YES al problema di decisione se e solo se il numero dei tour minori di d è maggiore o uguale ad uno. E se possiamo risolvere il problema di decisione per ogni valore di d allora, con poca spesa in più, è possibile risolvere infine anche il problema d'ottimizzazione di trovare il tour minimo mediante un semplice algoritmo di ricerca binaria che è un po' come cercare un nome all'interno di un elenco. All'inizio fisso due valori d_{min} e d_{max} tale che non esistono tour minori di d_{min} ed esistano sicuramente tour di lunghezza d_{max}. Ad ogni passo uso l'algoritmo per risolvere il problema di decisione per vedere se esistono tour minori di $d^* = (d_{min} + d_{max})/2$. Se esistono allora metto $d_{max} = d^*$ altrimenti $d_{min} = d^*$ e reitero il procedimento fino a convergere al tour ottimale. In una qualche maniera stiamo introducendo il concetto per cui, quando un problema A può essere risolto con l'algoritmo usato per un altro problema B allora B deve essere difficile almeno quanto A. Focalizzare l'attenzione solo su un obiettivo piuttosto che un altro sembra quindi modificare poco la natura del problema. La teoria quindi si occupa principalmente di classificare i problemi di decisione e cerca di risponde alla seguente domanda: **dato un problema di decisione, quante operazioni sono necessarie ad un calcolatore per ottenere una risposta?**

1.1.2 Macchina di Touring

Il calcolatore di riferimento è tipicamente una *Macchina di Touring*, un'astrazione necessaria per dare definizioni rigorose e precise di cosa è un'operazione, un programma o un'elaborazione. Nella sua versione deterministica DTM consiste principalmente di un insieme di stati di controllo s, una testina di lettura e scrittura ed un supporto di memorizzazione. Durante un'elaborazione, ad ogni *clock* o operazione, la macchina legge un carattere c dalla testina di input, passa da uno stato s ad un altro s', sposta la testina di lettura di una quantità h e scrive un altro carattere c' sull'output. In una DTM la scelta di s',c' ed h dipendono esclusivamente dallo stato s attuale della macchina e dal dato c letto in ingresso. Un programma quindi può essere pensato come l'insieme delle regole $A : (s, c) \longrightarrow (s', c', h) = A(s, c)$ che determinano l'evolversi del sistema. Quando vogliamo usare un algoritmo per risolvere un problema dobbiamo "programmare" la DTM e "tradurre" l'istanza del problema in un linguaggio comprensibile al programma tramite una stringa w di caratteri da dare in ingresso alla macchina. Quando focalizziamo l'attenzione sui problemi di decisione allora definiamo il *run-time* $t(w)$ come il numero di operazioni necessarie ad una DTM per giungere al termine dell'elaborazione rispondendo YES o NO.

1.1.3 Worst case run-time: le classi P ed NP

L'idea è quella di servirsi di questa informazione per dare un ordinamento ai problemi di decisione, dal più facile al più difficile (e magari pure degli algoritmi, dal più efficiente al più costoso). Più è alto il run-time più il problema è difficile (o l'algoritmo meno efficiente). Poiché a parità di lunghezza della stringa d'ingresso $|w|$ alcuni casi potrebbero essere più banali degli altri, istanze diverse di uno stesso tipo di problema potrebbere avere di conseguenza run-time parecchi diversi. La quantità più interessante da indagare per valutare il problema nel suo complesso è quindi il *worst case run time* definito come:

$$t_{wc}(n) = \max_{w:|w|=n} t(w).$$

Questa definizione ci permette adesso di classificare i problemi di decisione a seconda dell'andamento di $t_{wc}(n)$. Si dice che un problema appartiene alla classe P se esiste un α tale che, definitivamente, $t_{wc}(n) \simeq n^{\alpha}$. P sta per *polynomial time* ed indica quindi la classe dei problemi che, indipendentemente dal valore di α, possono essere risolti, al massimo, in un tempo polinomiale rispetto alla taglia n del problema. Immaginiamo adesso che il nostro problema abbia una risposta affermativa, ed un *oracolo* sia in grado di darcene una prova. In pratica, nel caso del problema del commesso viaggiatore, un oracolo fornisce un tour più corto di d per provare, con un piccolo conto, che la risposta al nostro problema è affermativa. Diciamo adesso che un problema appartiene alla classe NP se la predizione di un oracolo può essere verificata in un tempo polinomiale con una macchina di Touring. Ovviamente se un problema può essere risolto in un tempo polinomiale allora potrà essere sicuramente verificato in un tempo polinomiale motivo per cui è evidente che la classe P è contenuta nella classe NP. Una forma equivalente ma più raffinata per definire la classe NP necessita del concetto di macchina di Touring *non deterministica* (NDTM). Senza addentrarci troppo nella definizione, una macchina non deterministica può essere istruita, a parità di stato, a compiere azioni diverse È come se ad ogni clock duplicasse se stessa e su ognuna di esse svolgesse un'azione diversa. Con una macchina del genere si potrebbe risolvere il problema del commesso viaggiatore in un numero di passi proporzionale al numero n delle città. Al primo passo la macchina fa n copie di se stessa, una per ogni città. Al secondo passo ogni macchina sceglie una città diversa da quella di partenza e ne memorizza la distanza. Successivamente ogni macchina continua a duplicarsi scegliendo ogni volta una città diversa e sommando le distanze per ottenere la lunghezza del tour finché, dopo n passi, tutti gli $n!/2n$ tour possibili sono stati provati rendendo banale la scelta di quello più corto. La sigla NP sta per *non deterministic polynimial time* e costituisce quindi la classe dei problemi che possono essere risolti con una NDTM in un numero di operazioni polinomiale rispetto al size del problema. In parole semplici, la classe dei problemi NP contiene in pratica tutti i problemi di decisione. Quelli *intrattabili* non appartengono alla classe P ed il numero di operazioni necessarie al più efficiente degli algoritmi per ottenerne una soluzione richiede un numero di operazioni che, per definizione, deve crescere più che polinomialmente col size del problema, ad esempio, qualcosa del tipo $t_{wc}(n) \sim e^{\gamma n}$ o $t_{wc}(n) \sim n^{\gamma \log n}$.

1.1.4 NP-completezza

Che relazione c'è tra la classe P e la classe NP? È una domanda da un milione di dollari! Finora non è stato trovato nessun algoritmo in grado di trovare la soluzione al problema del commesso viaggiatore in un tempo polinomiale. Non possiamo affermare quindi che il problema appartiene alla classe P ma non possiamo nemmeno ancora affermare il contrario perché non siamo stati capaci di trovare l'algoritmo necessario. Il concetto di *riducibilità* però suggerisce una via di fuga da questa situazione. I problemi di decisione, come vedremo in esempio nella prossima sottosezione, si possono trasformare uno nell'altro un po' come abbiamo fatto nel caso del commesso viaggiatore trasformando un problema di decisione in uno d'ottimizzazione. Formalmente si dice che il problema A è *riducibile* al problema B, e si scrive $A \propto B$, se esiste un algoritmo polinomiale che trasforma ogni istanza di A in istanze di B così che l'istanza di B ha una risposta affermativa se e solo se la corrispettiva istanza di A ha una risposta affermativa. L'idea sfruttata da questa definizione è che, se il problema A è riducibile al problema B allora, sicuramente, B dovrà essere difficile almeno quanto A. È ovvio intanto che, se il problema B appartiene alla classe P ed A è riducibile a B allora anche A appartiene alla classe P e può essere quindi risolto in un tempo polinomiale. Ecco quindi un'altra definizione che permette di collocare i problemi che ancora risultano *intrattabili.* Si dice che un problema C appartiene alla classe dei problemi NP-completi ($C \in NPC$) se

- appartiene alla classe NP,
- ogni problema della classe NP è riducibile a C.

In una qualche maniera si vuole affermare che, se tutti i problemi della classe NP possono essere trasformati in un problema NP-completo allora i problemi della classe NPC deveno essere i più difficili problemi in NP. Per definizione però, anche ogni problema NP-completo può essere riducibile ad un altro problema in NPC. Questo comporta che abbiamo due soli possibili scenari. O le classi P ed NPC sono completamente disgiunte $P \cap NPC = \emptyset \longrightarrow P \neq NP$. oppure, se possiamo esibire un algoritmo in grado di risolvere un problema NP-completo in un tempo polinomiale, allora tutti i problemi in NP dovranno essere risolubili in un tempo polinomiale e la classe P e la classe NP coincideranno $P = NP$. L'ultima ipotesi, a dire il vero, è considerata molto remota ma non esiste ancora nessuna dimostrazione definitiva in grado di confermarlo.

1.2 Il problema della clique

Per dimostrare l'appartenenza di un problema C alla classe dei problemi NPC, è sufficente mostrare un problema sicuramente NP-completo riducibile al problema C. Ma è necessario conoscere almeno un problema sicuramente NP-completo per innescare il meccanismo di riducibilità in altri problemi.

1.2.1 Teorema di Cook: il problema di soddisfacibilità

L'apporto fondamentale dato da Cook alla teoria della complessità computazionale è stato quello di dimostrare che il problema di soddisfacibilità (SAT) è NP-completo. Siano U un insieme di N variabili booleane $u_i = \{0, 1\}$ ed indichiamo con $\overline{u_i}$ la loro negazione logica. Una condizione di k *letterali* $c = \{z_1^c, z_2^c, \ldots, z_k^c\}$ su U è definita come un sottoinsieme di U formato da $|c| = k$ elementi in cui ogni z_j^c prende il valore di una variabile di U o la sua negazione. Si dice che la condizione c è soddisfatta se è solo se almeno una delle variabili z_j^c che la compongono vale 1. Nella stessa forma con la quale è presentato il problema nel Garey-Jhonson allora:

SATISFIABILITY (SAT)

Istanza Sia dato un insieme di variabili booleane $u_i \in U$ ed un insieme di condizioni $c \in C$ tra queste variabili.

Domanda Esiste una scelta per le u_i che soddisfa tutte le condizioni?

La dimostrazione che questo problema è NP-completo è abbastanza laboriosa ([14] pag. 38-44). L'approccio deve essere quello di sfruttare solo la definizione di NP-completezza e far vedere che ogni problema $C \in NP$ può essere ridotto in un SAT con un algoritmo polinomiale. Se evitiamo di essere rigorosi possiamo comunque intuire perché ciò è vero. Il SAT, infatti, è il problema del tutto generale di soddisfare un certo numero di condizioni. Si può immaginare allora il perché esiste sempre un'opportuna codifica di un qualunque problema che possa essere posta sotto questa forma. Grazie a questo risultato adesso possiamo usare il meccanismo di riducibilità del SAT in altri problemi di decisione per stabilire quali tra questi sono intrattabili.

1.2.2 $SAT \propto 3SAT$

Dimostriamo ora che una qualunque istanza di un SAT può essere ridotta con un algoritmo polinomiale in un'istanza del problema $3SAT$.

3-SATISFIABILITY ($3SAT$)

Istanza Sia dato un insieme di variabili booleane $u_i \in U$ ed un insieme di condizioni C formate esclusivamente da 3 letterali ($\forall c \in C \quad |c| = 3$).

Domanda Esiste una scelta per le u_i che soddisfi tutte le condizioni?

La tecnica è quella di costruire un insieme C' di condizioni formate da 3 letterali che, se soddisfatte, soddisfano tutte le condizioni in C del problema SAT di partenza. La cosa più semplice da fare è quella di focalizzare l'attenzione su una clausola $c \in C$ alla volta ed aggiungere per ognuna di esse un set di variabili $y_{c_1}, \ldots, y_{c_l}$ con le quali costruire un certo numero di condizioni c'_m di 3 letterali che sono soddisfatte tutte quante se e solo se la condizione di partenza c è soddisfatta. Sia $c = \{z_1, z_2, \ldots, z_l\}$ una condizione di C. Se $k = 3$ allora basta prendere la condizione così com'è $c'_1 = c$. Se $k = 1$ invece si introducono $l = 2$ nuove variabili y_1 e y_2 e si costruiscono $m = 4$ condizioni di 3 letterali formate dalla variabile z_1 di c e da tutte le possibili condizioni che posso formare con y_1 e y_2

$$c'_1 = \{z_1, y_1, y_2\} \;\; c'_2 = \{z_1, \overline{y_1}, y_2\} \;\; c'_3 = \{z_1, y_1, \overline{y_2}\} \;\; c'_4 = \{z_1, \overline{y_1}, \overline{y_2}\}$$

Se $k = 2$ basta invece introdurre solo $l = 1$ variabile y_1 formando $m = 2$ condizioni.

$$c'_1 = \{z_1, z_2, y\} \;\; c'_2 = \{z_1, z_2, \overline{y}\}$$

Il meccanismo per $k \geq 3$ è giusto un pochino più complicato. Introduciamo $l = k - 3$ variabili $\{y_1, \ldots, y_l\}$ e formiamo le seguenti $m = k - 2$ condizioni

$$c'_1 = \{z_1, z_2, y_1\}$$

$$c'_i = \{\overline{y_{i-1}}, y_i, z_{i+1}\} \quad i = 2, \ldots, k-3$$
$$c'_{k-2} = \{\overline{y_{k-3}}, z_{k-1}, z_k\}$$

Noi verificheremo che questa scelta funziona provandolo nel caso $k = 5$ ricalcando la dimostrazione completa riportata in [14]. Le condizioni da formare a questo punto sono 3.

$$c'_1 = \{z_1, z_2, y_1\} \quad c'_2 = \{\overline{y_1}, y_2, z_3\} \quad c'_3 = \{\overline{y_2}, z_4, z_5\}$$

Notiamo intanto che, se la condizione c non è soddisfatta, non c'è scelta possibile di y_1 e y_2 in grado di soddisfare tutte e 3 le clausole. Se invece la condizione c è soddisfatta allora significa che almeno una delle condizioni è soddisfatta automaticamente indipendentemente dalla scelta di y_1 e y_2. In questo caso è facile verificare che esiste sempre una scelta per y_1 e y_2 in grado poi di soddisfare le altre due. Dovrebbe essere facile convincersi che questa trasformazione richiederà, al più, un numero di operazioni proporzionale al numero delle clausole del $3SAT$ e quindi l'algoritmo è polinomiale e il $3SAT$ è NP-completo.

1.2.3 Grafi

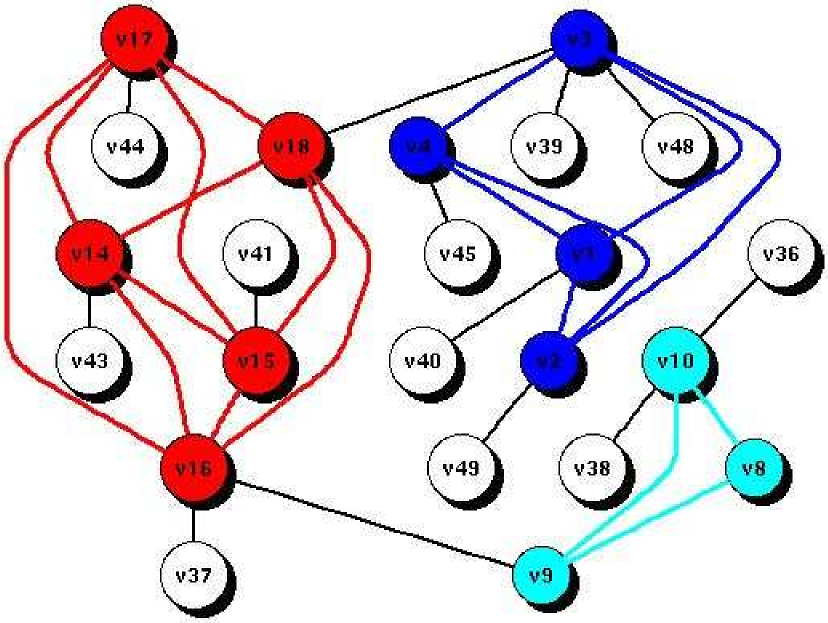
La dimostrazione che il $3SAT$ è un problema NP-completo è il passo necessario che permette di dimostrare l'appartenenza alla classe NPC dei problemi ai quali ci riferiremo nel resto del lavoro. È necessario ricordare prima alcune nozioni basilari sulla teoria dei grafi. Per una trattazione completa sull'argomento si può vedere [15].

Definition. *Un grafo $G = (V, E)$ è formato da una coppia ordinata di insiemi disgiunti con $E \subseteq V \times V$ formato da coppie non ordinate di V.*

L'insieme $V = \{1, 2, \ldots, |V|\}$ è chiamato insieme dei nodi (o vertici) mentre l'insieme $E = \{e_1, e_2, \ldots, e_{|E|}\}$ è quello degli archi (o edge) che connettono le coppie di nodi dove $\{i, j\}$ e $\{j, i\}$ sono lo stesso edge. Se $\{i, j\} \in E$ si dice che i nodi sono adiacenti (o vicini) ed il grado di un vertice i è definito come il numero di archi connessi con tale vertice $d_i = |v_i|$ con $v_i = \{j \in V \setminus i \ : \ \{i, j\} \in E\}$. Dato $G = (V, E)$ definiamo il suo grafo complementare $G^c = (V, E^c)$ come quel grafo formato dallo stesso insieme dei nodi V ma insieme di archi E^c per cui vale $\{i, j\} \in E^c \iff \{i, j\} \notin E$. In pratica c'è un arco dove prima non c'era e viceversa. Se per ogni coppia di nodi esiste un arco che li collega allora si dice che il grafo G è *completo*.

$$G \text{ è completo} \quad \iff \quad \{i, j\} \in E \ \ \forall i, j \in V \ \ i \neq j$$

Quando invece l'insieme V può essere diviso in due sottoinsiemi disgiunti V_1 V_2 tale che gli unici archi che esistono sono quelli che uniscono i nodi di V_1 con i nodi di V_2 allora il grafo si dice *bipartito*. Sia ora $U \subset V$ un sottoinsieme di nodi ed $E_U = E \cap (U \times U)$ il sottoinsieme di archi di E che collegano solo le coppie di nodi appartenenti ad U. La coppia $G_U = (U, E_U)$ forma quello che è chiamato sottografo di G indotto da U. Se U è tale per cui G_U è completo si dice che U è una *clique* del grafo G. In figura abbiamo riportato un esempio in cui abbiamo colorato le clique di un piccolo grafo.



Con queste notazioni possiamo adesso presentare in maniera semplice alcuni tra i più famosi problemi di decisione su grafi.

VERTEX COVER (VC)

Istanza Sia $G = (V, E)$ un grafo e $k \leq |V|$ un intero positivo.

Domanda Esiste un sottoinsieme $U \subset V$ tale che $|U| \leq k$ e per ogni $\{i, j\} \in E$ almeno uno tra i e j appartiene ad U? (È possibile ricoprire tutto il grafo scegliendo solo gli archi connessi ad un sottoinsieme di, al massimo, k nodi.)

CLIQUE

Istanza Sia $G = (V, E)$ un grafo e $k \leq |V|$ un intero positivo.

Domanda Esiste un sottoinsieme $U \subset V$ tale che $|U| \geq k$ e che il sottografo $G_U = (U, E_U)$ indotto da U è completo? (Esiste una clique di almeno ordine k?)

HAMILTONIAN CIRCUIT (HC)

Istanza Sia $G = (V, E)$ un grafo.

Domanda Esiste un ordinamento dei vertici $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ con $n = |V|$ tali che $\{v_i, v_{i+1}\} \in E$ con $v_{n+1} = v_1$? (Esiste un tour possibile tra tutti i nodi?)

INDIPENDENT SET (IS)

Istanza Sia $G = (V, E)$ un grafo e $k \leq |V|$ un intero positivo.

Domanda Esiste un sottoinsieme $U \subset V$ con $|U| \geq k$ tale che, per ogni coppia $i, j \in U$, non esiste un edge che li connetta ($\{i, j\} \notin E$) (Esiste un sottoinsieme di nodi che non si parlano di almeno k nodi?)

BALANCED COMPLETE BIPARTITE SUBGRAPH ($BCBS$)

Istanza Sia $G = (V, E)$ un grafo bipartito e $k \leq |V|$ un intero positivo.

Domanda Esistono due sottoinsiemi disgiunti $V_1, V_2 \in V$ con $|V_1| = |V_2| \geq k$ tale che, per ogni coppia $i \in V_1$ e $j \in V_2$ esiste sempre l'edge $\{i, j\} \in E$ che li connette? (Esiste un sottografo bipartito e completo di almeno k nodi)

1.2.4 $3SAT \propto VC \propto CLIQUE$

Questi problemi sono tutti NP-completi. Lo verifichiamo adesso per alcuni di questi. Dobbiamo osservare intanto che VERTEX COVER, CLIQUE ed INDIPENDENT SET sono intimamente legati tra loro. È facile convincersi che un CLIQUE istanziato su di un grafo G non è nient'altro che un INDIPENDENT SET definito sul grafo complementare G^c, e viceversa. Il VERTEX COVER definito su G con $k \leq |V|$, poi, si può trasformare in un CLIQUE semplicemente cercando nel grafo complementare di VC i sottografi completi di ordine almeno $|V| - k$ in quanto, per definizione di grafo complementare, esisteranno per forza tutti gli archi tra gli elementi non usati nel ricoprimento. Esibire un algoritmo polinomiale in grado di trasformare il 3SAT in un VERTEX COVER è quindi sufficiente a dimostrare l'appartenenza di CLIQUE alla classe dei problemi NP-completi. Il meccanismo passa attraverso tre fasi. Siano U l'insieme di variabili booleane e C l'insieme di condizioni di 3 letterali che istanziano il 3SAT. Per costruire il grafo $G = (V, E)$ del VERTEX COVER si parte con $V = E = \emptyset$ e si aggiungono nodi ed archi nella maniera che segue.

1 Per ogni variabile $u_i \in U$ aggiungo due nodi u_i e $\overline{u_i}$ ed un edge che li connette $e_i = \{u_i, \overline{u_i}\}$

2 Per ogni condizione $c \in C$ del 3SAT aggiungo tre nodi $\{z_1^c, z_2^c, z_3^c\}$ e tre archi

$$\{\{z_1^c, z_2^c\}, \{z_2^c, z_3^c\}, \{z_3^c, z_1^c\}\}$$

3 Per ogni nodo z_j^c del punto 2 costruisco un arco verso il corrispettivo nodo u_i o $\overline{u_i}$ del punto 1 a seconda di come il letterale z_j^c compare nella condizione c

Osserviamo adesso che, se n è il numero delle variabili booleane e m quello delle condizioni da soddisfare, per ottenere un ricoprimento completo del grafo devo necessariamente scegliere, per ogni i, almeno un nodo tra u_i e $\overline{u_i}$ e, per ogni clausola c, almeno due nodi tra z_1^c,z_2^c e z_3^c per un totale di $k = n + 2m$ nodi. È immediato convincersi che non può esistere un ricoprimento più piccolo di così. Se tale ricoprimento esiste allora implica che è possibile soddisfare tutte le condizioni del $3SAT$ semplicemente prendendo come soluzione i nodi del punto 1 che fanno parte della soluzione del VC. Nella stessa maniera, se esiste una soluzione del $3SAT$, allora esiste un ricoprimento di ordine k per il VERTEX COVER. Se invece non c'è modo di trovare una soluzione al $3SAT$ significa che esisterà sempre almeno una condizione violata e, per tale condizione, se voglio ricoprire sono costretto a prendere almeno un nodo in più del caso soddisfacibile (devo prendere i tre nodi z_1^c, z_2^c e z_3^c, oppure due di essi e il nodo u_i o $\overline{u_j}$ che serve per ricopre l'arco aggiunto al punto 3) ed il ricoprimento minimo si può ottenere solo con almeno $k+1$ nodi. È facile convincersi che questa è una trasformazione polinomiale e quindi abbiamo dimostrato che il VERTEX COVER è un problema NP-completo e di conseguenza anche CLIQUE ed INDIPENDENT SET. In [14] si possono trovare anche le riduzioni del VERTEX COVER in HAMILTONIAN CIRCUIT rendendo poi semplicissima la dimostrazione che il problema del commesso viaggiatore è NP-completo. Si fissa la distanza tra le città i e j ad 1 se $\{i, j\} \in E$ e a 2 altrimenti. Se esiste un circuito hamiltoniano allora il tour minimo tra le città vale $|V|$, altrimenti sono costretto a far passare il commesso viaggiatore su almeno un arco che vale 2 ed il tour minimo per forza di cose, è maggiore di $|V|$. Il BALANCED COMPLETE BIPARTITE SUBGRAPH invece lo abbiamo voluto citare, sebbene non sia tra i problemi più famosi, proprio perché si ricollegherà ad un aspetto di questo lavoro. La sua appartenenza alla classe dei problemi NP-completi si dimostra con una semplice riduzione di CLIQUE. Se $G = (V, E)$ è il grafo di partenza, il grafo bipartito si costruisce intanto raddoppiando il numero dei nodi $G' = (V \cup \overline{V}, E')$ e disegnando gli archi $\{i, \overline{i}\} \in E'$. A questo punto, per ogni edge $\{i, j\} \in E$, si aggiungono a G' gli archi $\big\{\{i, \overline{j}\}, \{\overline{i}, j\}\big\} \in E'$ e l'istanza è pronta. A questo punto è evidente che un $BCBS$ di cardinalità k sarà presente se e solo se esisterà una clique di cardinalità k.

1.3 Grafi random & cliques

Una comprensione precisa del perché certi problemi risultato intrattabili è necessaria per riuscire a sviluppare algoritmi astuti in grado di risolverli. Ogni istanza però ha tipicamente una storia a sè ed è complicato ragionare in un così ampio spazio di possibilità. La soluzione è salomonica, restringere il campo ad un sott'insieme il più ampio possibile ma che contenga istanze che godano di proprietà comuni per le quali è possibile fare una trattazione abbastanza generale.

1.3.1 Maximum Clique Problem

L'analogo problema d'ottimizzazione per CLIQUE è il MAXIMUM CLIQUE (MC) che consiste, dato un grafo, nel trovare la cardinalità del sottografo completo più grande. Se $\mathcal{K}(G)$ è l'insieme delle clique del grafo $G = (V, E)$,

$$\mathcal{K}(G) = \{C \subset V \ : \ \{i, j\} \in E \ \ \forall i, j \in C \ \ j \neq i\} ,$$

allora il nostro problema è quello di ricavare ciò che è chiamato *clique number* $\omega(G)$, la cardinalità della clique massima del grafo.

$$\omega(G) = \max_{C \in \mathcal{K}(G)} |C|$$

Il MAXIMUM CLIQUE è un problema NP-hard nel senso che non è un problema di decisione ma è comunque direttamente riconducibile ad un problema NP-completo. Se riuscissimo ad ottenere una soluzione del MAXIMUM CLIQUE avremmo sempre una risposta da dare a CLIQUE: YES quando cerchiamo clique di ordine minore o uguale del clique number e NO altrimenti. MAXIMUM CLIQUE quindi deve essere difficile almeno quanto CLIQUE. La natura del problema dipende crucialmente dalle caratteristiche del grafo. Intanto è evidente che se il grafo possiede un numero modesto di nodi è possibile provare tutte le configurazioni possibili ed ottenere la soluzione esatta al problema con un numero ragionevole di operazione. Di conseguenza è possibile ricavare facilmente tutte le clique di un grafo anche nel caso in cui il grado dei nodi si mantenesse piccolo. Se scegliamo un nodo a caso il problema si ridurrebbe a quello di ricavare la clique massima all'interno del piccolo grafo formato solo dai *vicini* del nodo stesso, motivo per cui posso provare tutte le configurazioni possibili. Indicando con $c_{max} = \max_{i \in V} c_i$ il grado massimo dei nodi del grafo e scorrendo di volta in volta tutti i nodi si otterrebbe il risultato desiderato in un numero di operazioni dell'ordine $\mathrm{O}\left(|V| \, c_{max} 2^{c_{max}}\right)$ nel peggiore dei casi. Nel caso in cui c_{max} è abbastanza piccola la clique massima può essere trovata in un tempo polinomiale. Ben diverso il caso in cui il grado di molti nodi è proporzionale al size stesso del grafo $c_i \sim |V|$. Ma è proprio in questi casi che la questione diventa più interessante.

1.3.2 La classe di Erdös-Rènyi

Per mostrare le caratteristiche peculiari del problema delle clique è necessario restringere l'attenzione ad una classe d'istanze in grado di rappresentare il più possibile una situazione tipica. La scelta più diffusa consiste nell'estrarre le istanze dalla classe dei grafi random di Erdös-Rènyi $\mathcal{G}(n, p)$, la classe dei grafi di n vertici per cui ognuno dei $\binom{n}{2}$ possibili edge è presente con probabilità p. Estrarre un grafo dalla classe di Erdös-Rènyi è operativamente semplice. Per ogni coppia non ordinata $e_{ij} = \{i, j\}$ si estrae indipendentemente un numero $r \in [0, 1)$ da una distribuzione uniforme e, quando $r < p$, l'edge e_{ij} è aggiunto al grafo. Se fissiamo l'attenzione su di un singolo nodo i allora, quando $G \in \mathcal{G}(n, p)$, la probabilità che abbia v vicini è binomiale di parametri n e p

$$\mathrm{Prob}\left(|\{j \in V \setminus i \ : \ e_{ij} \in E\}| = v\right) \ \longrightarrow \ B_{n,p}(v) = \binom{n}{v} p^v \left(1 - p\right)^{n-v} ,$$

e il grado di ogni nodo si mantiene perciò vicino a np con fluttuazioni dell'ordine $n^{-1/2}$. Consideriamo adesso una quantità $\mathcal{O}(G)$ che misura una qualche caratteristica del grafo G come, ad esempio, il grado medio di un nodo o proprio il numero delle clique di un grafo. Se $G \in \mathcal{G}(n,p)$ è possibile ottenere stime precise su alcuni importanti osservabili $\mathcal{O}(G)$. Nel Bollobas [15] ad esempio si possono trovare molte dimostrazioni che evidenziano come quasi tutti i grafi random, quando $n \to \infty$, condividono praticamente le stesse caratteristiche.

1.3.3 Stima del clique number

Nel nostro caso ci limiteremo a focalizzeremo l'attenzione solo su ciò che ci interessa: il clique number. Iniziamo con il valutare il numero di clique di cardinalità k all'interno di un grafo G. Se indichiamo con $\mathbb{1}_{\mathcal{K}(G)}(S)$ la funzione caratteristica dell'insieme $\mathcal{K}(G)$,

$$\mathbb{1}_{\mathcal{K}(G)}(S) = \begin{cases} 1 & \text{se } S \in \mathcal{K}(G) \\ 0 & \text{se } S \notin \mathcal{K}(G) \end{cases}$$

e con $\mathcal{X}_k$ l'insieme delle possibile scelte di k nodi,

$$\mathcal{X}_k = \{S \subseteq V \ : \ |S| = k\},$$

allora il numero di clique di ordine k può essere scritto come

$$Y_k(G) = |\{S \in K(G) \ : \ |S| = k\}| = \sum_{S \in \mathcal{X}_k} \mathbb{1}_{\mathcal{K}(G)}(S)$$

Il valore aspettato della variabile $Y_k(G)$ adesso può essere calcolato facilmente.

$$\overline{Y_k} = \sum_{G \in \mathcal{G}(n,p)} \mathcal{P}(G) \left[\sum_{S \in \mathcal{X}_k} \mathbb{1}_{\mathcal{K}(G)}(S) \right] = \sum_{S \in \mathcal{X}_k} \left[\sum_{G \in \mathcal{G}(n,p)} \mathcal{P}(G) \mathbb{1}_{\mathcal{K}(G)}(S) \right]$$

La somma dentro la parentesi quadra coincide con la probabilità di estrarre un grafo che ha S come clique. Vale quindi $p^{\binom{k}{2}}$ come la probabilità di disegnare un arco per ognuna delle $\binom{k}{2}$ coppie di nodi possibili in S senza curarsi del resto.

$$\overline{Y_k} = \sum_{S \in \mathcal{X}_k} p^{\binom{k}{2}} = \binom{n}{k} p^{\binom{k}{2}}$$

Adesso possiamo pensare di stimare il clique number $\omega(G)$ con il più grande valore di k per cui, in media, ho almeno una clique.

$$\omega(G) \simeq \max \left\{ k \ : \ \overline{Y_k} \geq 1 \right\} =: \omega^*$$

e quindi ω^* deve essere tale da verificare le seguenti disequazioni

$$\binom{n}{\omega^*} p^{\binom{\omega^*}{2}} \geq 1 \qquad \binom{n}{\omega^* + 1} p^{\binom{\omega^*+1}{2}} < 1$$

Se osserviamo che $\overline{Y_1} = n > 1$ e $\overline{Y_n} = p^{\binom{n}{2}} < 1$ e che

$$r_k = \frac{\overline{Y_{k+1}}}{\overline{Y_k}} = \frac{n-k}{k+1} p^k,$$

allora significa che $\overline{Y_k}$ in funzione di k cresce e si mantiene al di sopra di 1 fino a quando $r_k > 1$ dopo di che decresce fino a scendere sicuramente al di sotto di 1. Sfruttando l'approssimazione di Stirling

$$\sqrt{2\pi n}\,(n/e)^n \leq n! \leq e^{1/12n} \sqrt{2\pi n}\,(n/e)^n \qquad \binom{n}{k} \leq \frac{n^k}{k!} \leq \frac{1}{2\sqrt{k}} \left(\frac{en}{k}\right)^k \leq \left(\frac{en}{k}\right)^k,$$

e passando ai logaritmi otteniamo

$$0 \leq \log \binom{n}{k} - \binom{k}{2} \log(1/p) \leq k \left[\log\left(\frac{en}{k}\right) - \frac{1}{2}(k-1)\log(1/p) \right] =$$

$$= k \left[\left(\log n - \frac{\log(1/p)}{2} k \right) - \log k + 1 + \frac{1}{2} \log(1/p) \right].$$

È evidente che per sperare di essere vicini allo 0 occorre $k \sim \mathrm{O}(\log n)$. Se poniamo quindi $k = c \log_{1/p} n$ possiamo ricavare una stima di ω^*.

$$\left(1 - \frac{1}{2}c\right) - \frac{\log\log n}{\log n} + \frac{1 + \log \frac{\log(1/p)}{\sqrt{p}c}}{\log n} \geq 0 \longrightarrow \omega^* = 2\log_{1/p} n - \mathrm{O}(\log\log n) = (2-\gamma)\log_{1/p} n$$

Questo risultato è utile per mostrare che, se $n \gg 1$, per quasi tutti i grafi $G \in \mathcal{G}(n,p)$, la probabilità di avere una clique di cardinalità $\omega^* + 2$ diventa nulla. Infatti, sfruttando il fatto che, se x è intero e non negativo vale la seguente disuguaglianza

$$\overline{x} = \sum_{x \geq 1} \mathcal{P}(x)\, x \geq \sum_{x \geq 1} \mathcal{P}(x) = \mathcal{P}(x > 0),$$

allora, poiché $\overline{Y_{\omega^*+1}} < 1$, è facile verificare che

$$\mathcal{P}[\omega(G) \geq \omega^* + 2] = \mathcal{P}[Y_{\omega^*+2}(G) > 0] \leq \overline{Y_{\omega^*+2}} =$$

$$= \frac{n - \omega^* - 1}{\omega^* + 2} p^{\omega^*+1} \overline{Y_{\omega^*+1}} \leq \frac{n}{\omega^*} p^{\omega^*} = \mathrm{O}\left(\frac{1}{n^{1-\gamma}\log n}\right) \overset{n \gg 1}{\longrightarrow} 0.$$

Per mostrare che il clique number è proprio ω^* occorre ancora provare che

$$\mathcal{P}[\omega(G) \geq \omega^*] = \mathcal{P}[Y_{\omega^*}(G) > 0] \overset{n \gg 1}{\longrightarrow} 1.$$

L' idea è quella di sfruttare la ben nota disuguaglianza di Chebyshev's.

$$\mathcal{P}[|x - \mu| \geq t] \leq \left(\frac{\sigma}{t}\right)^2 \qquad \mu = \sum_x \mathcal{P}(x)\, x, \quad \sigma^2 = \sum_x \mathcal{P}(x)\, [x - \mu]^2.$$

Se x è intero non negativo e poniamo $t = \mu$ allora

$$\mathcal{P}[|x - \mu| > \mu] = \sum_{x \geq 2\mu} \mathcal{P}(x) + \sum_{x \leq 0} \mathcal{P}(x) \geq \mathcal{P}(x = 0)$$

$$\mathcal{P}(x = 0) \leq \left(\frac{\sigma}{\mu}\right)^2 \longrightarrow \mathcal{P}(x > 0) \geq 1 - \left(\frac{\sigma}{\mu}\right)^2$$

Occorre quindi calcolare la varianza di $Y_k(G)$

$$\sigma^2_{Y_k} = \overline{Y_k^2} - \overline{Y_k}^2.$$

Il metodo è analogo a quello usato per calcolare $\overline{Y_k}$.

$$\overline{Y_k^2} = \sum_{G \in \mathcal{G}(n,p)} \mathcal{P}(G) \left[\sum_{S \in \mathcal{X}_k} \mathbb{1}_{\mathcal{K}(G)}(S) \right]^2 = \sum_{S, S' \in \mathcal{X}_k} \left[\sum_{G \in \mathcal{G}(n,p)} \mathbb{1}_{\mathcal{K}(G)}(S) \mathbb{1}_{\mathcal{K}(G)}(S') \right]$$

Stavolta l'ultimo termine coincide con la probabilità di estrarre un grafo che ha sia S che S' come clique. Se $|S \cap S'| = q$ allora questa probabilità coincide con la probabilità di disegnare $2\binom{k}{2} - \binom{q}{2}$

edge e quindi, per portare a termine il calcolo, basta contare il numero dei modi in cui è possibile ottenere tale configurazione.

$$\overline{Y_k^2} = \sum_{q=0}^{k} \binom{n}{k}\binom{k}{q}\binom{n-k}{k-q} p^{2\binom{k}{2}-\binom{q}{2}} = \left[\binom{n}{k} p^{\binom{k}{2}}\right]^2 \sum_{q=0}^{k} \frac{\binom{k}{q}\binom{n-k}{k-q}}{\binom{n}{k}} p^{-\binom{q}{2}}$$

$$\left(\frac{\sigma_{Y_k}}{\overline{Y_k}}\right)^2 = \sum_{q=0}^{k} \frac{\binom{k}{q}\binom{n-k}{k-q}}{\binom{n}{k}} \left(p^{-\binom{q}{2}} - 1\right)$$

Per arrivare al risultato voluto dobbiamo utilizzare ancora la formula di Stirling.

$$\sum_{q=0}^{k} \frac{\binom{k}{q}\binom{n-k}{k-q}}{\binom{n}{k}} \left(p^{-\binom{q}{2}} - 1\right) \le \frac{(n-k)!}{n!} \sum_{q=0}^{k} \binom{k}{q} k^q (n-k)^{k-q} p^{-q(q-1)/2} \le$$

$$\le \frac{(n-k)!}{n!} p^{k/2} \sum_{q=0}^{k} \binom{k}{q} \left(kp^{-k/2}\right)^q (n-k)^{k-q} \le \left[\frac{1+kp^{-k/2}/n}{1-k/n}\sqrt{p}\right]^k$$

Se poniamo $k = \omega^* = (2-\gamma)\log_{1/p} n$ con $\gamma \sim \mathrm{O}(\log(\log n)/\log n)$ allora

$$\left(\frac{\sigma_{Y_k}}{\overline{Y_k}}\right)^2 \le \left[\frac{1+2n^{-\gamma/2}\log_{1/p} n}{1-2n^{-1}\log_{1/p} n}\sqrt{p}\right]^k.$$

Poichè $\gamma > 0$ il termine tra parentesi quadra è definitivamente minore di 1. Se scegliamo n abbastanza grande affinché questo termine valga un qualunque valore $a \in (0,1)$ allora

$$\mathcal{P}(x > 0) \ge 1 - \left(\frac{\sigma}{\mu}\right)^2 \ge 1 - a^{\log n} \overset{n \gg 1}{\longrightarrow} 1.$$

Abbiamo appena dimostrato quindi che, per quasi tutti i grafi $G \in \mathcal{G}(n,p)$, il valore asintotico di $\omega(G)$ fluttua al massimo di una unità dal valore $\omega^* = (2-\gamma)\log_{1/p} n$.

A dispetto della semplicità con la quale abbiamo ricavato con buonissima approssimazione il clique number per i grafi random trovarne effettivamente le clique più grandi è un compito estremamente arduo. Intanto, se trovo una clique di ordine k che probabilità ho che questa clique sia contenuta in una più grande? Posso pensare di stimare questa probabilità con la frazione di clique di ordine k contenute in clique di ordine $k+1$ e osservando che una clique di ordine $k+1$ contiene $k+1$ clique di ordine k.

$$\mathcal{P}_{grow}[k \to k+1] \simeq \frac{(k+1)\overline{Y_{k+1}}}{\overline{Y_k}} = (n-k)p^k \simeq \frac{1}{n^\epsilon}\left(1 - \mathrm{O}\left(\frac{\log n}{n}\right)\right) \qquad k = (1+\epsilon)\log_{1/p} n$$

La stima mostra che la probabilità che la clique sia aumentabile tende asintoticamente a zero non appena si considerano clique poco più grandi della metà della clique massima. Questo risultato, combinato all'osservazione che $\overline{Y_k}$ ha un massimo proprio in $k = \log_{1/p} n = \omega^*/2$ e che il numero delle clique più grandi è infinitamente più piccolo di quelle di ordine $\omega^*/2$, è già un buonissimo motivo per cui trovare clique più grandi della metà della clique massima è parecchio difficile. Un algoritmo che costruisce la clique aggiungendo un nodo di volta in volta tenderà a presentare clique non aumentabili di ordine $\omega^*/2$. Tenere in maggiore considerazione nodi con alta cardinalità non migliorerebbe comunque la situazione. Solo una frazione dei vicini di un nodo dell'ordine $\mathrm{O}(\log n/n)$ "partecipa" alla costruzione delle clique più grandi. La probabilità di pescare proprio i vicini "giusti" perciò tende asintoticamente a zero indipendentemente dalla cardinalità del nodo.

Capitolo 2

Termodinamica & Ottimizzazione

Da diversi anni la meccanica statistica è un utile strumento che ha permesso di ricavare informazioni sulla complessità di molti e importanti problemi d'ottimizzazione. Nella prima parte richiameremo alcune nozioni basilari di meccanica statistica e termodinamica ed il noto legame con l'ottimizzazione. Nella seconda parte discuteremo dei risultati ottenuti dallo studio dei vetri di spin e di come l'analisi della fase di spin glass permetta d'interpretare l'intrattabilità di alcuni problemi di ottimizzazione in termini di frustrazioni, stati metastabili e complessità. Nella sezione finale abbiamo voluto provare ad applicare il metodo della cavità ad una variante sul reticolo del modello di Sherrington-Kirkpatrick con lo scopo di studiare un tipico problema di ottimizzazione.

2.1 Meccanica Statistica

L'uso massiccio del calcolatore come strumento necessario per lavorare su ciò che abbiamo fin qui presentato comporta inevitabilmente una traduzione di una moltitudine di problemi sotto forma di operazioni logiche tra valori booleani. La natura binaria di questi valori permette di trattare tali problemi utilizzando, talvolta con ottimi risultati, strumenti tipici della fisica teorica. Praticamente tutti i problemi di ottimizzazioni consistono principalmente in:

- un insieme $\mathcal{X}$ di configurazioni $\mathcal{C} \in \mathcal{X}$ possibili,
- una funzione $\mathcal{H}(\mathcal{C})$ da minimizzare (cost function).

Pensiamo ora ad $\mathcal{H}(\mathcal{C})$ come l'energia di un qualche sistema fisico e $\mathcal{C}$ come i numeri quantici o le grandezze dinamiche che ne determinano lo stato. La dinamica di tale sistema potrà essere assolutamente fuori dal comune ma, se immaginiamo il sistema all'equilibrio, allora possiamo provarne a fare la termodinamica. L'idea è quella di "contare" le configurazioni che hanno una certa energia E

$$\mathcal{N}(E) = \sum_{\mathcal{C}\in\mathcal{X}} \delta(\mathcal{H}(\mathcal{C}) - E) \qquad \delta(\mathcal{H}(\mathcal{C}) - E) = \begin{cases} 1 & \text{se } E = \mathcal{H}(\mathcal{C}) \\ 0 & \text{se } E \neq \mathcal{H}(\mathcal{C}) \end{cases}$$

Il nostro problema d'ottimizzazione può essere risolto quindi se riusciamo a valutare l'energia minima E_{min} per la quale esiste almeno una configurazione.

$$\mathcal{N}(E_{min}) \geq 1 \quad \mathcal{N}(E_{min} - \delta) = 0 \quad \forall\, \delta > 0$$

Ma poiché il logaritmo di $\mathcal{N}(E)$ è proprio l'entropia del nostro sistema allora l'idea è quella di fare la "termodinamica" del nostro problema di ottimizzazione.

Un sistema fisico con un alto numero di gradi di libertà viene infatti generalmente trattato con la meccanica statistica. Si cerca cioè di dedurre le proprietà termodinamiche di un sistema partendo dalla conoscenza delle sue proprietà microscopiche. Postulando semplici proprietà diventa poi possibile valutare la natura degli stati d'equilibrio del sistema. Vogliamo riportare adesso alcune nozioni fondamentali. Per una trattazione completa dell'argomento si rimanda ad esempio a [16].

2.1.1 Ensembles di Gibbs

Si considera innanzitutto uno spazio di volume V in cui sono confinate un certo numero k di particelle. L'idea è quella di associare un'opportuna misura di probabilità $\mathcal{P}(\mathcal{C})$ ad ogni configurazione $\mathcal{C} \in \mathcal{X}_k$ del sistema di k particelle. Tipicamente si tende a spiegare l'approccio immaginando di possedere un *ensamble* e cioè un numero enorme di copie del mio sistema fisico che evolvono indipendentemente l'una dall'altra. Quando tutte le copie sono all'equilibrio termodinamico possiamo pensare $\mathcal{P}(\mathcal{C})$ come la probabilità di "estrarre" dall'ensamble un sistema che si trova nella configurazione $\mathcal{C}$. L'entropia del sistema è definita come $\mathcal{S} := -\sum_{\mathcal{C}\in\mathcal{X}_k} \mathcal{P}(\mathcal{C}) \ln(\mathcal{P}(\mathcal{C}))$. Il secondo principio della termodinamica impone che l'entropia per un sistema isolato all'equilibrio non può mai diminuire. Se $\mathcal{H}(\mathcal{C})$ è l'hamiltoniana del sistema dobbiamo cercare la distribuzione di probabilità $\mathcal{P}(\mathcal{C})$ che massimizza l'entropia ad energia media $\mathcal{E} = \langle \mathcal{H}(\mathcal{C}) \rangle = \sum_{\mathcal{C}\in\mathcal{X}_k} \mathcal{P}(\mathcal{C})\mathcal{H}(\mathcal{C})$ fissata. Ciò può essere fatto, introducendo un opportuno parametro β, l'inverso della temperatura assoluta, mediante la tecnica dei moltiplicatori di Lagrange ottenendo come soluzione proprio la distribuzione di Boltzmann

$$\mathcal{P}(\mathcal{C}) = \frac{1}{\mathcal{Q}_k(\beta)} e^{-\beta\mathcal{H}(\mathcal{C})} \qquad \mathcal{C} \in \mathcal{X}_k$$

con

$$\mathcal{Q}_k(\beta) = \sum_{\mathcal{C}\in\mathcal{X}_k} e^{-\beta\mathcal{H}(\mathcal{C})} = \int dE\, \mathcal{N}(E) e^{-\beta E}.$$

La dipendenza da β può essere eliminata fissando l'energia media del sistema

$$\mathcal{E} = \langle \mathcal{H}(\mathcal{C}) \rangle = - \left. \frac{\partial \log \mathcal{Q}_k(\beta)}{\partial \beta} \right|_{\beta=\beta(\mathcal{E})}$$

per ottenere l'entropia

$$\mathcal{S}(\mathcal{E}) = \beta(\mathcal{E})\mathcal{E} + \ln(\mathcal{Q}_k(\beta(\mathcal{E})))$$

e verificare che tutto sia consistente

$$\frac{\partial\, \mathcal{S}(\mathcal{E})}{\partial\, \mathcal{E}} = \beta = \frac{1}{T}.$$

Tutta l'informazione è contenuta quindi nella *funzione di partizione canonica* $\mathcal{Q}_k(\beta)$. L'energia libera $\mathcal{F}(\beta)$ del sistema di k particelle all'equilibrio diviso la temperatura assoluta non è altro che la trasformata di Legendre dell'entropia e dunque

$$\mathcal{F}(\beta) = -\frac{1}{\beta} \log \mathcal{Q}_k(\beta)$$

Da questa può dedursi poi tutto il resto della termodinamica come, ad esempio, il calore specifico a volume costante

$$C_v = \frac{\partial\, \mathcal{E}}{\partial\, T} = -\beta^2 \frac{\partial^2\, \beta\mathcal{F}(\beta)}{\partial\, \beta^2} = \frac{\left\langle (\mathcal{H}(\mathcal{C}) - \mathcal{E})^2 \right\rangle}{T^2}$$

2.1.2 Limite termodinamico

Il nodo cruciale sta nell'applicazione del teorema del limite centrale quando, mantenendo la densità $\rho = k/V$ costante, si fa crescere il volume V. Detto meglio, lo scopo è quello di valutare la probabilità di "pescare" dall'ensemble un sistema in un certo stato termodinamico una volta che sia il numero delle particelle che il volume sono infiniti. Vogliamo raggiungere quello che si chiama *limite termodinamico*. Tutte le quantità estensive dovrebbero crescere linearmente con il numero k di particelle. Ci aspettiamo quindi che, nel limite $k \to \infty$, l'energia per particella $e = \mathcal{E}/k$ sia un valore finito. La validità della meccanica statistica si basa sul fatto che, quando il volume è infinito, la stragrande maggioranza dei sistemi dell'ensemble canonico ha energia prossima ad ke e solo questi stati contribuiscono all'entropia.

Quando vogliamo studiare sistemi in cui il numero di particelle k non è una quantità conservata dobbiamo modificare solo lievemente il nostro approccio. Tra i moltiplicatori di Lagrange appare adesso anche il potenziale chimico μ (o alternativamente la fugacità $z = e^{\beta\mu}$). La probabilità $\mathcal{P}(\mathcal{C})$ che massimizza l'entropia vale adesso

$$\mathcal{P}(\mathcal{C}) = \frac{e^{\beta(\mu k - \mathcal{H}(\mathcal{C}))}}{\mathcal{Z}(\beta,\mu)} \qquad \mathcal{C} \in \mathcal{X} = \bigcup_{k=0}^{\infty} \mathcal{X}_k$$

con

$$\mathcal{Z}(\beta,\mu) = \sum_{k=0}^{\infty} e^{\beta\mu k} \sum_{\mathcal{C}\in\mathcal{X}_k} e^{-\beta\mathcal{H}(\mathcal{C})} = \sum_{k=0}^{\infty} z^k \mathcal{Q}_k(\beta) = \mathcal{Z}(\beta,z)$$

da cui si ricava il numero medio di particelle

$$\langle k \rangle = \frac{\sum_{k=0}^{\infty} k z^k \mathcal{Q}_k(\beta)}{\mathcal{Z}(\beta,z)} = z\frac{\partial \log \mathcal{Z}(\beta,z)}{\partial z},$$

e l'energia media

$$\mathcal{E} = \langle \mathcal{H}(\mathcal{C}) \rangle = \frac{\sum_{k=0}^{\infty} z^k \sum_{\mathcal{C}\in\mathcal{X}_k} \mathcal{H}(\mathcal{C}) e^{-\beta\mathcal{H}(\mathcal{C})}}{\mathcal{Z}(\beta,z)} = -\frac{\partial \log \mathcal{Z}(\beta,z)}{\partial \beta}.$$

Tutta l'informazione adesso è contenuta nella funzione di partizione *gran-canonica* $\mathcal{Z}(\beta,\mu)$. Ricavando β e μ dalle ultime due equazioni, possiamo dedurre tutta la termodinamica sfruttando il fatto che

$$\beta PV = \log \mathcal{Z}(\beta,\mu).$$

È possibile verificare che, nel limite termodinamico, la distribuzione è piccata proprio sulle configurazioni di $k \simeq \langle k \rangle$ particelle che hanno energia $E \simeq \langle \mathcal{H}(\mathcal{C}) \rangle$ e che le fluttuazioni da tali valori sono dell'ordine $\mathrm{O}\left(k^{-1/2}\right)$. Per $k \to \infty$ dunque, l'ensemble gran-canonico è perfettamente equivalente all'ensemble canonico.

2.1.3 Stato fondamentale

È noto che abbassando la temperatura anche l'energia del sistema diminuisce. Quando la temperatura è molto vicino allo zero assoluto la probabilità che un sistema abbia una certa energia è sostanzialmente diversa da zero solo per energie prossime all'energia minima, l'energia dello stato fondamentale. Il nesso tra i problemi di ottimizzazione e la meccanica statistica è ora evidente. La configurazione ottimale coincide con quello che nel formalismo fisico viene chiamato stato fondamentale (ground state). Qualcuno potrebbe obiettare che in fondo non ci abbiamo guadagnato alcunché. È naturale che la funzione di partizione canonica, per come è definita nel limite $\beta \to \infty$ sia dominata dai contributi dovuti alle configurazioni di bassa energia e sembra superfluo scomodare la meccanica statistica solo per questo. La traduzione in realtà è molto vantaggiosa. Innanzitutto ci permette di confrontare quantitativamente e qualitativamente le caratteristiche di problemi diversi grazie all'utilizzo dello stesso linguaggio fisico che, mediante un formalismo chiaro e robusto, è in grado di "misurare" la complessità del problema. Inoltre le tecniche sviluppate per lo studio dei vetri di spin e sistemi disordinati in genere stanno recentemente ispirando una nuova serie di algoritmi che in alcuni casi interessanti sembrano avere un'efficienza parecchio maggiore rispetto a quelli tradizionali.

2.2 La fase di Spin Glass

Il modello di Sherrington-Kirkpatrick (SK) [5] è una pietra miliare nonché paradigma nel campo dei vetri di spin. Le tecniche utilizzate per la sua comprensione sono state riproposte con discreto successo in parecchi altri casi rendendo possibile la creazione di una teoria in grado di trattare i sistemi disordinati in genere. Nella sezione che seguirà, con un modello leggermente diverso, ripresenteremo la tecnica con la quale è stato possibile ottenere la termodinamica del modello. In [17] è possibile trovare una bellissima dimostrazione che la soluzione ottenuta con tale tecnica è proprio esatta. Noi vogliamo però fin d'ora focalizzare l'attenzione sulle conclusioni alle quali questa trattazione è arrivata. Il motivo è dovuto al fatto che le caratteristiche che emergono dal modello SK sono comuni a tantissimi altri modelli ed inoltre, in merito proprio ai problemi d'ottimizzazione, permettono d'interpretare l'intrattabilità in termini di disordine, frustrazioni e stati metastabili.

2.2.1 Frustrazioni & Disordine

Consideriamo k individui $i \in \{1, \dots, k\}$ che, a coppie, possono essere amici o nemici. Il nostro scopo è quello di dividere gli individui in due gruppi cercando di ottenere il massimo della *soddisfazione*. Il grado di soddisfazione di una qualunque configurazione può essere indicato, ad esempio, dal numero delle coppie soddisfatte, cioè quelle formate da amici che si trovano nello stesso gruppo e nemici che si trovano in gruppi diversi, e sottrarci poi le coppie insoddisfatte, e cioè tutte le altre. A tal fine, per formalizzare il tutto, utilizziamo k variabili σ_i per rappresentare una configurazione, dove $\sigma_i = \pm 1$ a seconda del gruppo di appartenenza dell'individuo i, e definiamo $J_{ij} = 1$ se i e j sono amici e $J_{ij} = -1$ altrimenti. Osserviamo adesso che la quantità $1 - J_{ij}\sigma_i\sigma_j$ vale 0 se e solo se due amici si trovano nello stesso gruppo o due nemici si trovano in gruppi diversi e che invece vale 2 altrimenti (l'insoddisfazione aumenta!). Questo è un problema d'ottimizzazione ed il nostro obiettivo è quello di trovare la configurazione che realizza il minimo della seguente funzione

$$\mathcal{H}(\sigma) = - \sum_{1 \leq i < j \leq k} J_{ij}\sigma_i\sigma_j.$$

Una maniera di risolvere iterativamente questo problema potrebbe essere la seguente. A turno viene chiesto ad ogni individuo di cambiare gruppo di appartenenza o di rimanere dov'è. L'individuo sceglierà di cambiare solo se questo aumenterà la propria soddisfazione a discapito però di quei nemici che se lo ritroveranno nello stesso gruppo (e al proprio turno quindi potrebbero aver voglia di andar via) e degli amici che ha abbandonato (che tenderanno successivamente a seguirlo). In seguito vedremo che questa maniera di cercare le soluzioni coincide in pratica con quello che è chiamato "algoritmo di Metropolis a temperatura zero".

Per capire se il problema è di facile o difficile soluzione bisogna porci delle semplici domande. Come ci comportiamo nei casi in cui tre individui a, b e c, si odiano l'un l'altro? Oppure a è amico di b e b è amico di c mentre a e c si odiano? In certe situazioni s'innesca un circolo vizioso per il quale gli individui continueranno a rincorrersi o ad evitarsi all'infinito senza riuscire ad ottenere una configurazione soddisfacente per tutti. Non c'è ovviamente nessuna possibilità di fare tutti contenti e abbiamo l'imbarazzo della scelta tra diverse configurazioni equivalenti. È questa proprietà che suggerisce di definire *disordinato* quel sistema che, come il nostro, ha più modi di essere ordinato. Si può notare che le difficoltà nascono quando $J_{ab}J_{bc}J_{ca} = -1$. In questo caso si usa dire che siamo in presenza di una *frustrazione*. Più il numero delle frustrazioni è grande, più difficile è trovare la configurazione di massima soddisfazione. La presenza di frustrazioni è quindi una delle cause principali della nascita del disordine.

2.2.2 Stati metastabili & Complessità

L'approccio fisico riesce a tradurre bene l'intrattabilità di questo problema. D'altra parte, la forma che abbiamo ottenuto per la funzione costo da minimizzare non a caso è identica al modello SK. Quello che emerge dallo studio di questo modello è che, per k grandi, l'hamiltoniana tende a presentare un numero enorme di minimi locali separati l'uno dall'altro da alte barriere d'energia. Possiamo stimare brutalmente l'altezza di queste barriere prendendo J_{ij} e σ_i completamente random. L'energia fluttua dal suo valore medio di una quantità proporzionale a k e supporremo che questo sia anche l'ordine di grandezza delle barriere di energia che separano i minimi della funzione. A temperature sufficientemente basse un dinamica Metropolis che flippa uno spin alla volta tende a rimanere "incastrata" nel bacino d'attrazione di uno di questi minimi e vi rimane intrappolata fin quando non riuscirà a superare barriere di energia di ordine $\mathrm{O}(k)$, barriere che quindi divergono nel limite termodinamico. È quella che nel modello SK viene chiamata la fase di spin glass. I numeri di occupazione sono quindi come *congelati* e sono permesse solo quelle piccole variazioni che non aumentano troppo l'energia. La maniera di trattare questo fenomeno è quella di associare ad ogni minimo dell'hamiltoniana uno stato metastabile in quanto il tempo che il sistema rimarrà nei pressi di tale minimo senza uscirne potrebbe essere talmente lungo da apparire a tutti gli effetti come uno stato di equilibrio. A meno di aspettare che il sistema sia entrato e uscito più volte dai diversi stati metastabili, le medie temporali saranno fortemente diverse dalle medie d'ensemble e dipenderanno dalla situazione iniziale. Se a questo aggiungiamo che il numero di stati metastabili cresce esponenzialmente con il size del sistema allora, quando abbassiamo troppo la temperatura, andiamo a rallentare drasticamente la convergenza all'equilibrio e, per $k \to +\infty$, è come se l'ergodicità venisse a mancare. In termini di ottimizzazione quindi, un algoritmo Metropolis difficilmente riuscirà a ricavare l'energia dello stato fondamentale. Gli stati metastabili non saranno ovviamente tutti equivalenti. Quelli più popolati dell'ensemble saranno quelli associati ai minimi più profondi dell'energia e con un ampio bacino d'attrazione (maggiore entropia), quelli che, coerentemente con i principi base della termodinamica, hanno i più bassi valori di energia libera. L'idea è quella di contare quanti stati metastabili ci sono per ogni valore di energia libera [18]. Indichiamo con $\alpha = 1, \dots, \mathcal{M}$ gli stati metastabili. Nel limite termodinamico gli stati sono divisi uno dall'altro da alte barriere d'energia e possiamo immaginare di "scomporre" la funzione di partizione.

$$\mathcal{Q}_k(\beta) = \sum_{\alpha} \sum_{\mathcal{C} \in \alpha} e^{-\beta \mathcal{H}(\mathcal{C}))} \simeq \sum_{\alpha} e^{\beta F^{\alpha}(\beta)} \simeq \int_{F_m}^{F_M} dF \, \mathcal{N}(F, V) \, e^{-\beta F}$$

dove $\mathcal{N}(F)$, che in generale dipende dalla temperatura, è il numero di stati metastabili che hanno energia libera F. Supporremo ragionevolmente che il numero di tali stati è sostanzialmente diverso da zero solo all'interno di un certo intervallo $[F_m, F_M]$. Il logaritmo di questo numero è chiamato *complessità*. Poiché ci aspettiamo che la complessità, un po' come l'entropia, sia una grandezza estensiva allora, se k è il numero delle particelle, nel limite termodinamico deve valere

$$\log \mathcal{N}(F) =: \Sigma_k(F) \simeq k\Sigma(F/k) = k\Sigma(f) \quad F_m = kf_m \quad F_M = kf_M,$$

come dire, appunto, che il numero di stati metastabili cresce esponenzialmente con la taglia del problema. Prendendo il massimo dell'esponente si ricava la densità di energia libera da cui dedurre il resto della termodinamica

$$\beta f(\beta) = \min_{f \in [f_m, f_M]} \left(\beta f - \Sigma(f) \right).$$

Tipicamente la complessità è una funzione crescente rispetto al suo argomento f. I possibili scenari quindi sono due. In un caso il minimo si trova all'interno dell'intervallo $[f_m, f_M]$ e la soluzione può essere ricavata dall'equazione

$$\left. \frac{\partial \Sigma(f)}{\partial f} \right|_{f = f^*(\beta)} = \beta.$$

(e quindi deve valere $\Sigma''(f) < 0$) ottenendo così

$$f(\beta) = f^*(\beta) - \Sigma(f^*(\beta))$$

Ci troviamo nella fase di alte temperature ed il numero dei minimi in cui è conveniente stare per il sistema sarà dell'ordine di $e^{k\Sigma(f^*(\beta))}$. Nel caso in cui il minimo invece si trova agli estremi dell'intervallo $[f_m, f_M]$, fase di basse temperature, abbiamo tipicamente $f^* = f_m$, pochi stati contribuiscono alla media ed il contributo della complessità all'energia libera totale è quindi nulla. Conoscere la forma di $\Sigma(f)$ è cruciale per comprendere le caratteristiche di un sistema ed è strettamente legata all'ottimizzazione. Immaginiamo di essere in grado di valutare

$$e^{-k\gamma\Phi(\gamma)} = \sum_{\alpha} e^{-k\gamma f^\alpha} \simeq \int_{f_m}^{f_M} df\ e^{-k(\gamma f - \Sigma(f))}$$

In questa maniera, se stimiamo l'integrale con il punto di sella, la funzione $\Phi(\gamma)$ è legata alla complessità mediante l'usuale trasformata di Legendre, un po' come l'entropia è legata all'energia libera.

$$\gamma\Phi(\gamma) = \min_f (\gamma f - \Sigma(f)) = \gamma f^*(\gamma) - \Sigma(f^*(\gamma)) \qquad \left.\frac{\partial\,\Sigma(f)}{\partial\, f}\right|_{f=f^*(\gamma)} = \gamma$$

Si può vedere adesso che, scegliere di annullare la derivata di $\Phi(\gamma)$ coincide con il ricavare il valore di energia libera per cui la complessità è nulla.

$$\left.\frac{\partial\,\Phi(\gamma)}{\partial\,\gamma}\right|_{\gamma=\gamma_0} = 0 \ \longrightarrow\ \Sigma(f^*(\gamma_0)) = \Sigma(f_m) = 0$$

La condizione $\Sigma(f_m) = 0$ coincide con l'affermare che non ci sono stati con energia libera minore di f_m. Ricordando che in generale sia $\Phi(\gamma)$ che $\Sigma(f)$ dipendono dalla temperatura e dal potenziale chimico, quando mandiamo $\beta \to \infty$, per ogni stato α, l'energia libera deve valere

$$kf_\alpha = \min_{\mathcal{C}\in\alpha} \mathcal{H}(\mathcal{C}).$$

Questo significa che, necessariamente,

$$f_m = \min_\alpha f_\alpha = \frac{1}{k} \min_{\mathcal{C}\in\mathcal{X}_k} \mathcal{H}(\mathcal{C})$$

che è l'energia dello stato fondamentale. Quindi, almeno in linea di principio, posso servirmi della complessità $\Sigma(f)$ (o della sua trasformata di Legendre $\Phi(\gamma)$) per trovare una soluzione ad un problema d'ottimizzazione.

2.3 Un modello disordinato di gas su reticolo

In questa sezione ripercorreremo le tecniche utilizzate con il modello SK presentate in maniera esauriente nel bellissimo *Spin Glass Theory And Bejond* [19] adattandole però ad un particolare problema d'ottimizzazione. La traduzione nel linguaggio della meccanica statistica di questo problema coincide con un modello disordinato di gas su reticolo che, alla fine degli anni '90, è stato studiato da Russo utilizzando il metodo delle repliche [20].

2.3.1 Il problema UBQP

Consideriamo il seguente problema. Sia $\mathbf{J}$ una matrice simmetrica reale di $n \times n$ elementi $J_{ij} = J_{ji}$ e siano $\sigma = \{\sigma_i\}_{i=1,\dots,n} \in \mathcal{X} = \{0,1\}^n$ l'insieme formato da un certo numero n di variabili booleane $\sigma_i \in \{0,1\}$. Come dobbiamo scegliere le σ_i affinché sia minima la seguente quantità?

$$\mathcal{H}^{\mathbf{J}}(\sigma) = \sum_{1 \le i < j \le n} J_{ij}\sigma_i\sigma_j$$

Si può dimostrare che l' *Unconstrain Binary Quadratic Problem* (UBQP) è un problema NP-completo [14] e si presta bene come esempio per mostrare come l'approccio termodinamico possa fornire utili risultati. Intanto la funzione costo che dobbiamo minimizzare è l'hamiltoniana di un gas su reticolo formato da n siti. Nel nostro caso n rappresenta il volume del sistema mentre σ_i è il numero d'occupazione del sito i e vale 1 se e solo se è occupato da una particella. Le J_{ij} rappresentano l'eventuale interazione tra due particelle che occupassero i siti i e j. Dal punto di vista termodinamico quindi il passo da compiere è quello di introdurre temperatura β e potenziale chimico μ e ricavare la funzione di partizione gran-canonica.

$$\mathcal{Z}^{\mathbf{J}}(\beta,\mu) = \sum_{k=1}^{n} e^{\beta\mu k}\mathcal{Q}_k^{\mathbf{J}}(\beta) \qquad \mathcal{Q}_k^{\mathbf{J}}(\beta) = \sum_{\sigma\in\mathcal{X}_k} e^{-\beta\mathcal{H}^{\mathbf{J}}(\sigma)} \qquad \mathcal{X}_k = \left\{\sigma \in \mathcal{X} \ : \ \sum_{i=1}^{n}\sigma_i = k\right\}$$

2.3.2 Quenched average

Tutte le quantità termodinamiche però dipenderanno dalle J_{ij} Se vogliamo studiare il problema in generale pare quindi abbastanza inutile fissare l'attenzione su una scelta in particolare. L'idea è quella di assegnare ad ogni istanza $\mathbf{J}$ una certa probabilità $\mathcal{P}(\mathbf{J})$ di essere estratta. In questa maniera l'obiettivo diventa quello di comprendere le caratteristiche delle istanze *tipiche* di questo sottoinsieme valutando come le grandezze termodinamiche fluttuano dal loro valore medio nel passare da un'istanza all'altra. La speranza è che, per quasi tutte le istanze $\mathbf{J}$, la media d'ensemble $\langle\mathcal{O}\rangle^{\mathbf{J}}$ di un qualunque osservabile $\mathcal{O}$ (così come le grandezza termodinamiche), si discostino poco, nel limite termodinamico, dalla loro media sulle istanze $\overline{\mathcal{O}} = \sum_{\mathbf{J}} \mathcal{P}(\mathbf{J}) \langle\mathcal{O}\rangle^{\mathbf{J}}$

$$\text{Prob}\left[\langle\mathcal{O}\rangle^{\mathbf{J}} \simeq \overline{\mathcal{O}}\right] \overset{k\to\infty}{\longrightarrow} 1.$$

Se la forma della $\mathcal{P}(\mathbf{J})$ è opportuna questa proprietà è verificata e si dice che l'osservabile $\mathcal{O}$ è una quantità che si *auto-media*. Nel nostro caso sceglieremo di estrarre le J_{ij} indipendentemente e dalla stessa distribuzione gaussiana.

$$\mathcal{P}(\mathbf{J}) = \prod_{1\le i<j\le n} \mathcal{P}(J_{ij}) = \prod_{1\le i<j\le n} \mathcal{G}_s(J_{ij} - x_0) \qquad \mathcal{G}_s(x - x_0) = \frac{e^{-(x-x_0)^2/2s^2}}{\sqrt{2\pi}s}$$

Il modello a questo punto pare del tutto identico a quello di Sherrington-Kirkpatrick. L'uso di variabili booleane piuttosto che spin di Ising però rappresentano una differenza che deve rendere cauto l'approccio. Innanzitutto osserviamo che l'hamiltoniana del modello SK, in assenza di campo magnetico esterno, è invariante sotto l'operazione d'inversione di tutti gli spin. La quantità $\sigma_i\sigma_j$ nel caso SK assume due valori, ± 1, e per entrambi ci sono due scelte possibili per σ_i e σ_j che li realizzano. Nel nostro caso invece $\sigma_i\sigma_j = 1$ se e solo se $\sigma_i = \sigma_j = 1$ e corrisponde a solo una scelta sulle quattro possibili. Questo di fatto rompe la simmetria sotto inversione di tutte le σ_i e sembra rappresentare una differenza considerevole. È importante poi ricordare che stiamo trattando un gas su reticolo, n deve essere considerato il volume del sistema e non il numero di particelle, e la quantità da mediare non è quindi l'energia libera come avviene per SK bensì il logaritmo della funzione di partizione gran-canonica.

$$\beta P n = \sum_{\mathbf{J}} \mathcal{P}(\mathbf{J}) \log \mathcal{Z}^{\mathbf{J}} = \overline{\log \mathcal{Z}^{\mathbf{J}}}$$

Il nostro compito è cercare di valutare questa espressione nel limite termodinamico.

2.3.3 Stima annealed

Come facciamo a calcolare la media sulle $\mathbf{J}$? Innanzitutto proviamo facendo una semplificazione. Se le fluttazioni di $\mathcal{Z}^{\mathbf{J}}$ da un'istanza ad un'altra sono abbastanza piccole allora è ragionevole credere che:

$$\overline{\log \mathcal{Z}^{\mathbf{J}}} \simeq \log \overline{\mathcal{Z}^{\mathbf{J}}}.$$

Questo tipo di approssimazione viene chiamata *annealed* e può essere utile per valutare un comportamento qualitativo del sistema e gli ordini di grandezza in gioco delle funzioni termodinamiche Sfruttando le proprietà degli integrali gaussiani

$$\int dx\, \mathcal{G}_s(x - x_0)\; e^{Ax} = e^{\left(A^2 s^2/2 + A x_0\right)},$$

il calcolo della media può essere facilmente eseguito.

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}_A = \overline{\mathcal{Z}^{\mathbf{J}}} &= \sum_{\mathbf{J}} \mathcal{P}(\mathbf{J}) \sum_{\sigma \in \mathcal{X}} \exp\left\{\beta\mu \sum_{i=1}^{n} \sigma_i - \beta \mathcal{H}^{\mathbf{J}}(\sigma)\right\} = \\
&= \sum_{\sigma} e^{\beta\mu \sum_i \sigma_i} \prod_{1 \le i < j \le n} \left\{ \int dx\, \mathcal{G}_s(x - x_0)\; e^{-\beta x \sigma_i \sigma_j} \right\} = \\
&= \sum_{\sigma} \exp\left\{\beta\mu \sum_{i=1}^{n} \sigma_i + \frac{1}{2}\beta s \left(\beta s - 2\frac{x_0}{s}\right) \sum_{1 \le i < j \le n} \sigma_i \sigma_j\right\}
\end{aligned}$$

Perché abbia senso il limite termodinamico la varianza s^2 e la media della distribuzione devono avere un andamento $\mathrm{O}(1/n)$, proprio come nel modello SK.

$$s^2 = \frac{J^2}{n} \qquad x_0 = \frac{J_0}{n}$$

Per semplificare le cose conviene poi riscalare di un fattore $1/J$ tutte le quantità delle dimensioni di un'energia

$$\beta J \longrightarrow \beta \qquad \frac{\mu}{J} \longrightarrow \mu \qquad \frac{J_0}{J} \longrightarrow J_0$$

Il conto può essere portato adesso fino in fondo introducendo la funzione entropia di una binomiale $I_p(x)$ usata nella teoria delle larghe deviazioni [21]

$$\binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \quad \overset{k=nx}{\longrightarrow} \quad \frac{e^{-n I_p(x)}}{\sqrt{2\pi n x (1-x)}}$$

$$I_p(x) = x \log\left(\frac{x}{p}\right) + (1-x)\log\left(\frac{1-x}{1-p}\right),$$

con cui ricavare una stima del coefficiente binomiale

$$\binom{n}{k} \simeq \frac{e^{nS(x)}}{\sqrt{2\pi n x(1-x)}} \qquad S(x) = \log 2 - I_{1/2}(x) = -x\log x - (1-x)\log(1-x).$$

Mettendo tutto insieme

$$\mathcal{Z}_A = \sum_{k=0}^{n} \binom{n}{k} e^{\beta\mu k + \frac{1}{2n}\beta(\beta - 2J_0)\binom{k}{2}} = \int_0^1 \frac{dx\, e^{n\beta\left(p(x) + \mathrm{O}(1/N)\right)}}{\sqrt{2\pi n x(1-x)}}$$

con

$$p(x) = \mu x + \frac{1}{4}\beta\gamma x^2 + \frac{1}{\beta}S(x) \qquad \gamma = 1 - 2\frac{J_0}{\beta}.$$

Per $n \to \infty$ l'integrale può essere calcolato con il metodo di punto di sella prendendo il massimo dell'esponente dell'integrando. Indichiamo con P_A il valore di pressione ottenuto con la stima annealed e con ρ il valore che massimizza $p(x)$

$$P_A := p(\rho) = \max_{x\in[0,1]} p(x).$$

Innanzitutto mostriamo che la soluzione dell'equazione di punto di sella coincide con la densità media di particelle ρ. Usando la stessa approssimazione, se $n \gg 1$, allora

$$\mathcal{Z}_A \overline{\left\langle \sum_{i=1}^{n} \sigma_i \right\rangle} = \overline{\sum_{\sigma\in\mathcal{X}} \left(\sum_{i=1}^{n}\sigma_i\right) e^{\beta\left[\mu\sum_{i=1}^{n}\sigma_i - \mathcal{H}^{\mathbf{J}}(\sigma)\right]}} = \sum_{k=0}^{n}\binom{n}{k} k\, e^{\beta\left[\mu k + \frac{1}{2n}(\beta - 2J_0)\binom{k}{2}\right]},$$

da cui si ricava appunto

$$\frac{1}{n}\overline{\left\langle \sum_{i=1}^{n}\sigma_i \right\rangle} = \rho = \int_0^1 \frac{dx\, x\, e^{n\beta(p(x) - P_A)}}{\sqrt{2\pi n x(1-x)}}.$$

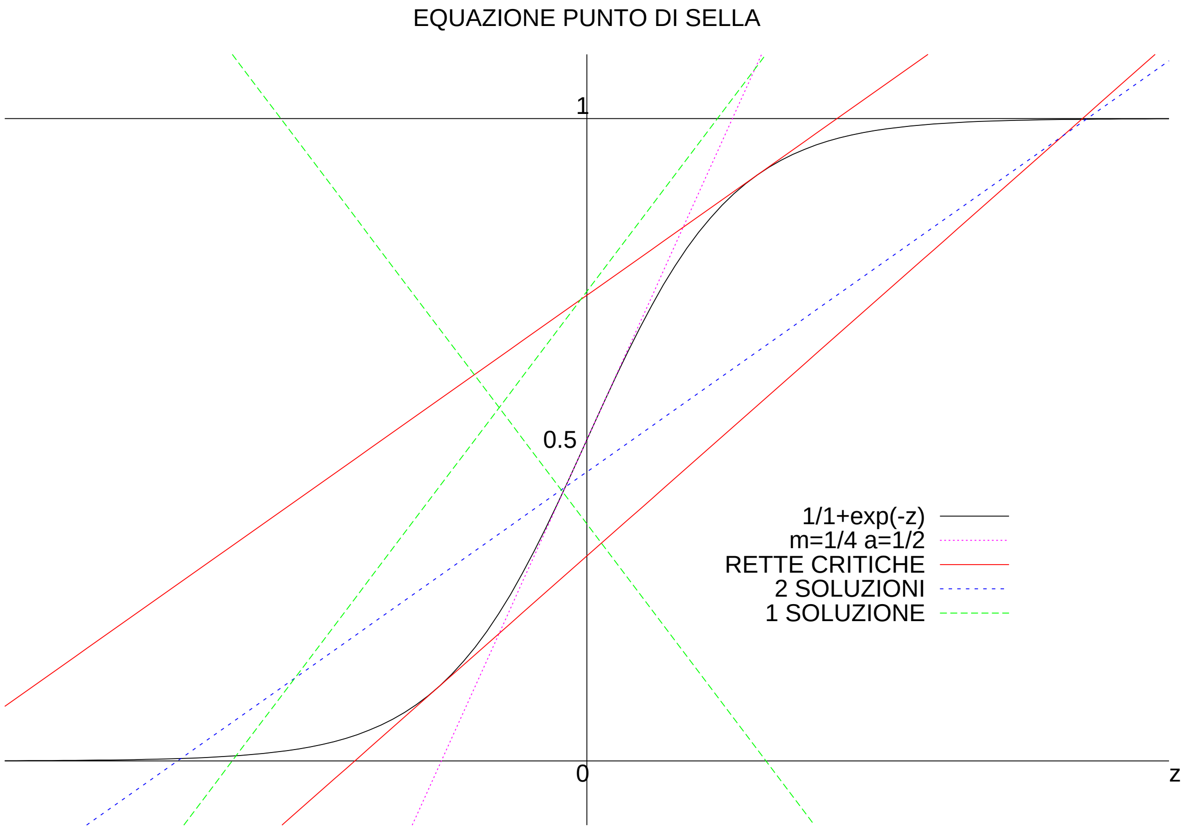
Poiché $p(x)$ è una funzione abbastanza semplice per trovare il massimo è sufficiente annullare la derivata prima e controllare dallo studio del segno che sia un massimo.

$$p'(x) \geq 0 \longrightarrow x \leq \frac{1}{1 + e^{-\beta(\mu + \beta\gamma x/2)}}$$

Se cerchiamo la soluzione all'equazione di punto di sella si osservano alcune cose interessanti. Conviene porre $\mu = -\frac{1}{2}\beta\gamma\alpha$ tenendo solo in α l'informazione sul potenziale chimico.
Questo semplifica le cose e aiuta a valutare per bene anche la fase di basse temperature.
Definiamo quindi $z = \frac{1}{2}\beta^2\gamma(x-\alpha)$ e sostituiamo nell'equazione

$$\frac{2}{\beta^2\gamma}z + \alpha = \frac{1}{1+e^{-z}} = mz + \alpha$$

Stiamo cercando le intersezioni della curva $(1+e^{-z})^{-1}$ con la retta di coefficiente angolare $m = 2/\left(\beta^2\gamma\right)$ ed intercetta α. Il numero di queste intersezioni dipende dai valori di m e α. Se $m \leq 0$ o $m \geq 1/4$ le cose rimangono semplici, esiste solo una soluzione ed è proprio un massimo per la $p(x)$. Se invece $0 < m < 1/4$ le soluzioni possono essere più di una a seconda del valore di α.



In particolare se definiamo:

$$\alpha_\pm(m) := \frac{1}{2} \pm \Delta(m) \qquad \Delta(m) := \frac{1}{2}\sqrt{1-4m} - m\log\left(\frac{(1-2m)+\sqrt{1-4m}}{2m}\right)$$

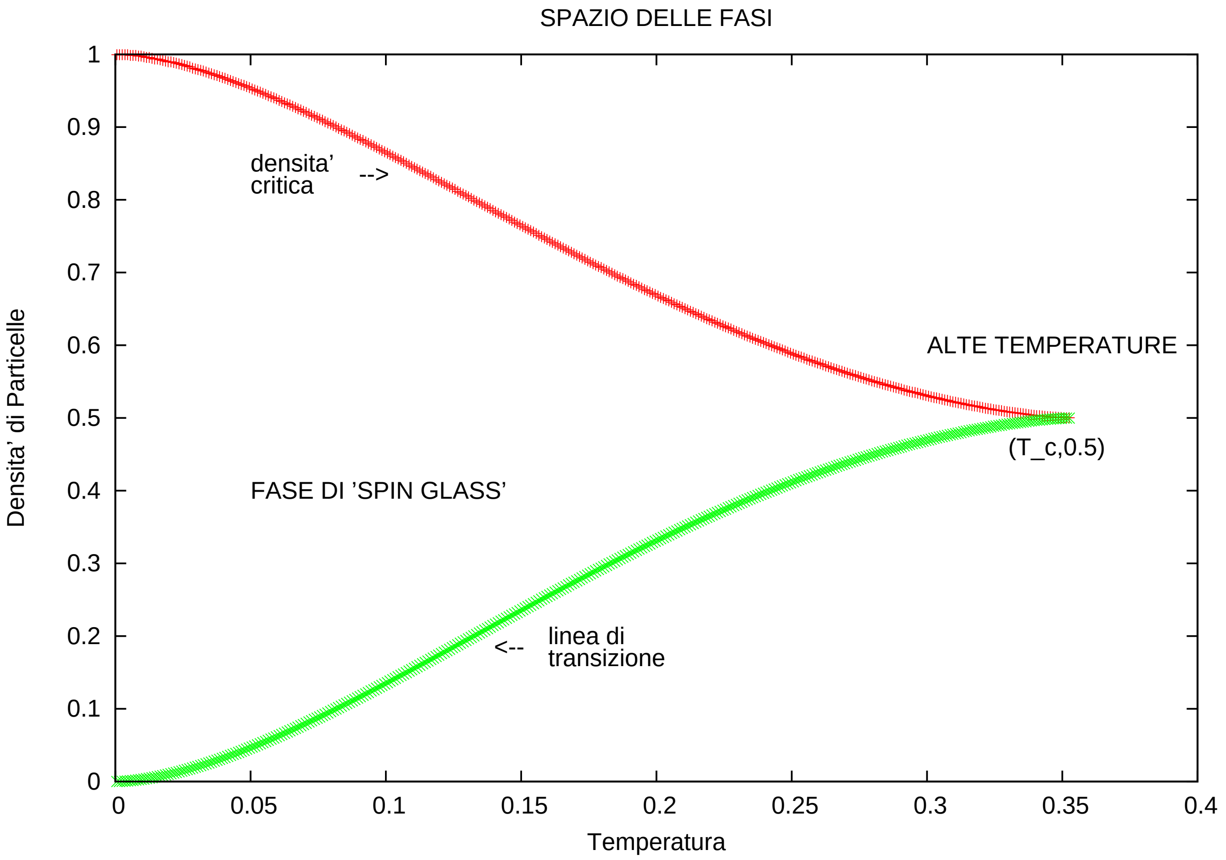
allora

- se $\alpha \notin [\alpha_-(m), \alpha_+(m)]$ ho 1 sola soluzione ed è un massimo,
- se $\alpha = \alpha_\pm(m)$ ho 2 soluzioni, ma una è un flesso orizzontale mentre l'altra è il massimo,
- se $\alpha \in (\alpha_-(m), \alpha_+(m))$ ho 3 soluzioni e 2 massimi relativi e devo sceglierlo imponendo la continuità delle funzioni termodinamiche.

Questa è una situazione tipica quando siamo in presenza di una transizione di fase. Esprimiamo la temperatura in funzione del coefficiente angolare m

$$T = \frac{1}{\beta} = \frac{1}{2}m\left(\sqrt{\frac{2}{m}+J_0^2} - J_0\right)$$

La soglia $m = 1/4$ individua una temperatura critica $T_c = (\sqrt{8+J_0^2} - J_0)/8$ al di sotto della quale il comportamento può essere qualitativamente diverso dalla fase di alte temperature $T \gg T_c$.
Le $\alpha_\pm(m)$ invece delimitano la "striscia" di potenziale chimico (e quindi anche le densità critiche) che andrà a costituire il diagramma di fase del sistema. Non tutti i valori di α però hanno significato fisico. Quando non ci sono particelle l'energia vale 0 e il potenziale chimico deve essere negativo ($\alpha > 0$). Allo zero assoluto poi, per avere almeno una soluzione, deve valere $\alpha \in [0,1]$. In altri termini se $\alpha > 1$ non ci sono particelle, mentre se $\alpha < 0$ tutti i siti sono occupati. Quando parto ad alte temperature con $\alpha > 1/2$ la soluzione è $\rho < 1/2$ mentre per $\alpha < 1/2$ abbiamo $\rho > 1/2$.



Quando abbasso la temperatura compaiono altre soluzioni ma, se voglio imporre la continuità delle funzioni termodinamiche allora deve valere $\alpha > 1/2 \iff \rho < 1/2$ oppure $\alpha < 1/2 \iff \rho > 1/2$. In figura abbiamo riportato nel piano costituito dalla temperatura e dalla densità di particelle il diagramma di fase nel caso $J_0 = 0$. A destra di $T_c = 0.35355$, al di sotto e al disopra delle due curve c'è sempre una sola soluzione. Nello spazio compreso tra le due curve devo invece scegliere la soluzione imponendo la continuità delle funzioni termodinamiche rispetto al potenziale chimico μ. Nel punto in cui le due curve si incontrano il potenziale chimico vale $\mu_c = -0.70711$ e la densità critica è $1/2$. Considerata la somiglianza con il modello SK questo scenario è in linea con quello che ci aspettavamo. Proviamo a ricavare il resto della termodinamica. Per ricavare l'energia media mi basta sfruttare il fatto che

$$\int dx\, \mathcal{G}_s\,(x - x_0)\ e^{Ax} x = \left(As^2 + x_0\right) e^{\left(A^2 s^2/2 + Ax_0\right)},$$

allora

$$E_A = \overline{\langle \mathcal{H}^{\mathbf{J}}\,(\sigma)\rangle} = \overline{\sum_{\sigma \in \mathcal{X}} e^{\beta\left[\mu \sum_{i=1}^{n} \sigma_i - \mathcal{H}^{\mathcal{J}}(\sigma)\right]} \sum_{1 \leq i < j \leq n} J_{ij}\sigma_i\sigma_j} = -\frac{1}{n}\,(\beta - J_0)\,\overline{\left\langle \sum_{1 \leq i < j \leq n} \sigma_i\sigma_j \right\rangle}$$

La densità di energia media vale quindi

$$e_A = \frac{E_A}{n\rho} = -\frac{1}{2}\,(\beta - J_0)\,\rho.$$

Nel caso di alte temperature questi risultati sembrano tutti ragionevolmente corretti. Se $T \gg T_c$ si può ricavare una soluzione esplicita all'equazione di punto di sella.

$$\rho \simeq \frac{1}{2} + \frac{1}{4T}\left(\mu - \frac{J_0}{2}\right) + \frac{1}{8T^2}\left(1 - \mu J_0 + \frac{1}{2}J_0^2\right)$$

Ad alte temperature una configurazione tipica presenta più o meno metà siti occupati ed il valore $J_0/2$ rappresenta la soglia al di sopra della quale il potenziale chimico tende ad aumentare il numero delle particelle. Se scriviamo $\mu = J_0/2 + \epsilon$ allora

$$\rho \simeq \frac{1}{2} + \frac{1}{4T}\epsilon \quad e_A \simeq \frac{1}{4}J_0 - \frac{1}{8T}(2 - \epsilon J_0)$$

Se $J_0 > 0$ (o $J_0 < 0$) significa che, in media, le J_{ij} positive sono di numero maggiore (o minore) rispetto alle J_{ij} negative. Se abbasso di poco la temperatura il sistema deve dimunuire (o aumentare) di poco il numero di particelle per scendere in energia. Ma cosa succede se abbasso troppo la temperatura? Ricaviamo l'entropia per particella.

$$s_A = \beta e_a + \frac{\beta}{\rho}(P_A - \mu\rho) = \frac{1}{\rho}S(\rho) - \frac{1}{4}\beta^2\rho = \frac{1}{\rho}\left[S(\rho) - \left(e_A - \frac{1}{2}J_0\rho\right)^2\right].$$

Si può pensare di stimare l'energia dello stato fondamentale andando a cercare il valore di energia più basso che annulla l'entropia.

$$s_A = 0 \longrightarrow e_{g.s.} = \frac{1}{2}J_0\rho - \sqrt{S(\rho)}$$

I risultati sono ancora qualitativamente ragionevoli. Se $J_0 = 0$ il valore minimo dell'energia si realizza per $\rho = 1/2$ e possiamo considerarla una stima inferiore all'energia dello stato fondamentale $e_{g.s.} \geq -\sqrt{\log(2)} = -0.832556$. Se invece $J_0 > 0$ il minimo si ottiene per $\rho < 1/2$, meno della metà dei siti sono occupati perché, in proporzione, ci sono più J_{ij} positive che negative. Così come, se $J_0 < 0$, il minimo si realizza invece per $\rho > 1/2$. Affinché tutto sia coerente però l'entropia deve essere una quantità sempre positiva. Se andiamo a sostituire all'energia la sua espressione in termini di ρ e T si vede che, non appena la temperatura scende al di sotto di una certa soglia (che dipende dal numero di particelle), l'entropia diventa negativa ed il nostro approccio ha qualche problema.

$$s_A \geq 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \left|e_A - \frac{1}{2}J_0\rho\right| \leq \sqrt{S(\rho)} \quad \Longleftrightarrow \quad T \geq \frac{\rho}{2\sqrt{S(\rho)}}.$$

2.3.4 Il metodo delle repliche

È possibile fare di meglio. L'idea usata per il modello SK è stata quella di sfruttare la seguente uguaglianza.

$$\overline{\log \mathcal{Z}^{\mathbf{J}}} = \lim_{r \to 0} \frac{\overline{(\mathcal{Z}^{\mathbf{J}})^r} - 1}{r}$$

Se r è intero la quantità $\left(\mathcal{Z}^{\mathbf{J}}\right)^r$ non è altro che la funzione di partizione di r sistemi identici ed indipendenti uno dall'altro. Il *Metodo delle Repliche* dunque si propone di ricavare l'energia libera media del sistema mediante un opportuno prolungamento analitico della funzione $\overline{(\mathcal{Z}^{\mathbf{J}})^r}$. Negli anni '80 Giorgio Parisi ha presentato un meccanismo di rottura di simmetria di replica con cui realizzare tale prolungamento analitico in grado di condurre alla soluzione esatta del modello SK. Considerata la somiglianza del nostro modello con quello di Sherrington e Kirkpatrick è naturale provare ad utilizzarla così come fatto da Russo in [20]. I calcoli sono praticamente analoghi ad SK e, per semplicità, porremo $J_0 = 0$. Si introduce quindi una matrice simmetrica $\mathbf{Q} = \{q_{ab}\}_{1 \leq (a,b) \leq r}$ con $q_{aa} = m_a$ e si sfruttano le proprietà degli integrali gaussiani. Eliminando i termini che sono trascurabili per $n \to \infty$ si ottiene la seguente espressione.

$$e^{nr\beta P} = \int d\mathbf{Q} e^{nr\beta p_r(\mathbf{Q})}$$

con

$$p_r(\mathbf{Q}) = \frac{1}{r\beta}\log\mathcal{Z}_r(\mathbf{Q}) - \frac{1}{r}\beta\left\{\frac{1}{4}\sum_{a=1}^{r} m_a^2 + \frac{1}{2}\sum_{1\le a<b\le r} q_{ab}^2\right\}$$

$$\mathcal{Z}_r(\mathbf{Q}) = \sum_{\mathbf{s}\in\mathbf{S}} e^{-\beta\mathcal{H}_r(\mathbf{s})} \quad \mathcal{H}_r(\mathbf{s}) = -\sum_{a=1}^{r}\left(\mu + \frac{1}{2}\beta m_a\right)s_a - \beta\sum_{1\le a<b\le r} q_{ab}s_a s_b \quad \mathbf{s}\in\mathbf{S} = \{0,1\}^r$$

Per raggiungere l'obbiettivo la procedure corretta da seguire è quella di toccare il limite termodinamico $n\to\infty$ solo dopo aver fatto il limite $r\to 0$. Scambiare i limiti però presenta parecchi vantaggi. L'integrale può essere stimato correttamente con il metodo del punto di sella ricavando così la stima della pressione P "tipica"

$$P = \lim_{r\to 0}\min_{\mathbf{Q}} p_r(\mathbf{Q}),$$

e le equazioni della sella possono essere poste in forma autoconsistente

$$\frac{\partial\, p_r(\mathbf{Q})}{\partial\, q_{ab}} = 0 \longrightarrow \begin{cases} \forall a & q_{aa} = m_a = \langle s_a\rangle = (\mathcal{Z}_r(\mathbf{Q}))^{-1}\sum_{\mathbf{s}\in\mathbf{S}} s_a e^{-\beta\mathcal{H}_r(\mathbf{s})} \\ \forall\, a<b & q_{ab} = \langle s_a s_b\rangle = (\mathcal{Z}_r(\mathbf{Q}))^{-1}\sum_{\mathbf{s}\in\mathbf{S}} s_a s_b e^{-\beta\mathcal{H}_r(\mathbf{s})} \end{cases}$$

Un piccolo conto inoltre permette di dare anche un significato fisico agli elementi della matrice $\mathbf{Q}$. Consideriamo il nostro ensemble all'equilibrio e peschiamo a caso due sistemi. Indichiamo con σ e τ gli stati in cui si trovano tali sistemi e con $q(\sigma,\tau) = \sum_{i=1}^{n}\sigma_i\tau_i/n$ l'*overlap* tra questi due stati. L'overlap misura la frazione di particelle che "condividono" il sito e noi vogliamo ricavarne la distribuzione di probabilità media.

$$\mathcal{P}(q) = \overline{(\mathcal{Z}^{\mathbf{J}})^{-2}\sum_{\sigma,\tau\in\mathcal{X}}\delta\left(q - q(\sigma,\tau)\right)e^{-\beta\mathcal{H}^{\mathbf{J}}(\sigma)-\beta\mathcal{H}^{\mathbf{J}}(\tau)}}$$

Sfruttando il fatto che, se $\mathcal{O}(\sigma)$ è un qualunque osservabile, allora

$$\overline{\langle\mathcal{O}(\sigma)\rangle} = \lim_{r\to 0}\frac{1}{r}\sum_{a=1}^{r}\overline{\langle\mathcal{O}(\sigma^{(a)})\rangle\ (\mathcal{Z}^{\mathbf{J}})^r}$$

possiamo ricavare la trasformata di Laplace della $\mathcal{P}(q)$ usando le repliche.
Il conto è del tutto analogo a quello svolto per ricavare $\overline{(\mathcal{Z}^{\mathbf{J}})^r}$.

$$\tilde{\mathcal{P}}(y) = \int d\,q\,\mathcal{P}(q)\,e^{yq} = \lim_{r\to 0}\binom{r}{2}^{-1}\sum_{1\le a<b\le r} e^{yq_{ab}} \longrightarrow \mathcal{P}(q) = \binom{r}{2}^{-1}\sum_{1\le a<b\le r}\delta(q - q_{ab})$$

Similmente si ricava anche la distribuzione di probabilità della densità di particelle $\rho = \sum_{i=1}^{n}\sigma_i/n$.

$$\mathcal{P}(\rho) = \frac{1}{r}\sum_{a=1}^{r}\delta(\rho - m_a).$$

Ovviamente m_a e q_{ab} devono essere le soluzioni dell'equazione di punto di sella ed è chiaro adesso che la probabilità di pescare due stati con overlap q (o uno stato con densità di particelle m) è pari alla frazione degli elementi fuori dalla diagonale di $\mathbf{Q}$ che valgono q (o alla frazione di elementi della diagonale di $\mathbf{Q}$ che valgono m). Assumiamo che, analogamente al modello SK, $m_a = \rho\ \forall\ a$. In pratica stiamo imponendo che, all'equilibrio, tutti i sistemi dell'ensemble hanno più o meno lo stesso numero di particelle. In questa maniera possiamo ricavare, nel limite termodinamico, la densità di energia media e di entropia per particella come limite per $r\to 0$ delle seguenti espressioni

$$e = \lim_{n\to\infty}\frac{\overline{\langle\mathcal{H}^{\mathbf{J}}(\sigma)\rangle}}{n\rho} = \lim_{r\to 0} e_r \quad e_r = -\frac{\beta}{2\rho}\left(\rho^2 - \frac{2}{r}\sum_{1\le a<b\le r} q_{ab}^2\right)$$

$$s = \lim_{n\to\infty} \frac{\mathcal{S}}{n\rho} = \lim_{r\to 0} s_r \quad s_r = \frac{1}{r\rho} \log \mathcal{Z}_r(\mathbf{Q}) - \frac{3}{2}\beta e_r - \beta\mu$$

La questione sottile che rimane da affrontare adesso è quella di trovare un opportuno prolungamento analitico per r non intero e per riuscirci dobbiamo adottare lo schema di rottura di simmetria di replica proposto da Parisi. Poiché il gruppo delle permutazione di r elementi è un invariante del problema il primo passo da provare potrebbe essere quello di scegliere lo stesso valore per tutti gli elementi di $\mathbf{Q}$. All'inizio quindi le r repliche vengono considerate tutte uguali e si cerca la soluzione dell'equazione di punto di sella nel sottospazio di $\mathbf{Q}$ in cui $q_{ab} = q_0 \ \forall a, b$ (soluzione RS). Successivamente rompiamo la simmetria di replica dividendo le $r = g_0$ repliche in r/g_1 gruppi di g_1 repliche ed imponiamo che l'overlap tra repliche dello stesso gruppo valga $q_1 > q_0$ mentre overlap tra repliche di gruppi diversi resti q_0. (soluzione $1RSB$). A questo punto posso rompere ancora la simmetria dividendo le g_1 repliche di ogni gruppo in g_1/g_2 gruppi di $g_2 < g_1$ repliche ed imporre che l'overlap tra le repliche dello stesso gruppo valga adesso $q_2 > q_1$ (soluzione $2RSB$). Dovrebbe essere chiaro a questo punto che l'operazione di dividere le repliche di un gruppo in più gruppi può essere fatta teoricamente all'infinito (*Full Replica Scheme Breaking* $FRSB$).
In pratica, per l rotture, devo introdurre un insieme di interi

$$n = g_0 \geq g_1 \geq \cdots \geq g_l \geq g_{l+1} = 1$$

e gli overlap

$$q_0 < q_1 < \cdots < q_l$$

con i quali costruire la mia matrice $\mathbf{Q}$. Si trova facilmente che gli elementi della matrice uguali a q_t saranno $n(g_t - g_{t+1})$ e quindi, con questo *ansatz* per la $\mathbf{Q}$, la distribuzione degli overlap $\mathcal{P}(q)$ prenderebbe la forma

$$\mathcal{P}(q) = \lim_{r\to 0} \sum_{t=0}^{l} \delta(q - q_t) \frac{g_t - g_{t+1}}{r - 1} = \sum_{t=0}^{l} \delta(q - q_t)(g_{t+1} - g_t).$$

C'è da notare che, nel limite $r \to 0$, poiché non c'è più motivo di considerare i g_t interi, allora

$$0 = g_0 \leq g_1 \leq \cdots \leq g_l \leq g_{l+1} = 1$$

e la $\mathcal{P}(q)$ non è mai negativa. La soluzione esatta al problema SK si trova portando infinite rotture ed introducendo un'opportuna funzione $q(x)$ definita in $x \in [0, 1]$ come

$$q(x) = q_t \text{ se } x \in [g_t, g_{t+1}). \quad x(q) = \int_0^q d\, q' \, \mathcal{P}(q') \quad x(q(x)) = x$$

Nel pieno spirito di una teoria di campo medio l'effetto di questa procedura sarà quello di trasformare il problema di ricavare la termodinamica del sistema in quello di trovare la $\mathcal{P}(q)$ che massimizza (o minimizza) un opportuno funzionale e la $\mathcal{P}(q)$ diventa il parametro d'ordine del sistema. In [22] sono riportate la soluzione RS e $1RSB$ e uno studio sulla loro stabilità nel regime di basse temperature. La soluzione RS ($\forall\, a, b \ \ q_{ab} = q$), ad esempio, porta alle seguenti equazioni per ρ e q,

$$\rho = \lim_{r\to 0} \frac{1}{r} \sum_{a=1}^{r} \langle s_a \rangle = \int dx\, \mathcal{G}_{\sqrt{q}}(x) \left(1 + e^{-\beta[\mu + \beta(\rho - q)/2 + x]}\right)^{-1}$$

$$q = \lim_{r\to 0} \frac{1}{\binom{r}{2}} \sum_{1\leq a<b\leq r} \langle s_a s_b \rangle = \int dx\, \mathcal{G}_{\sqrt{q}}(x) \left(1 + e^{-\beta[\mu + \beta(\rho - q)/2 + x]}\right)^{-2},$$

che, una volta risolte, permettono di ottenere la termodinamica dalla pressione.

$$P = \frac{1}{2}\rho e + \frac{1}{\beta} \int dx\, \mathcal{G}_{\sqrt{q}}(x) \log\left(1 + e^{\beta[\mu + \beta(\rho - q)/2 + x]}\right) \qquad e = -\frac{\beta}{2\rho}\left(\rho^2 - q^2\right)$$

Noi vogliamo provare ad ottenere gli stessi risultati ma utilizzando il *metodo della cavità*.

2.3.5 Il metodo della cavità

Qual'è il significato della soluzione RS? Il metodo della cavità è in grado d'interpretare fisicamente il risultato ottenuto con le repliche. L'idea generale di tale tecnica è quello di comparare le caratteristiche di un reticolo di n siti con quello di $n+1$ siti. La mera esistenza del limite termodinamico implica che le differenze tra i due sistemi sono controllabili. Vogliamo riproporre quindi lo stesso approccio utilizzato con il metodo SK facendo attenzione al fatto che abbiamo a che fare con un gas su di un reticolo. Consideriamo quindi un reticolo di n siti in equilibrio con la misura gran canonica $\pi_n(\sigma) = \mathcal{Z}_n^{-1} \exp\left(\beta\mu \sum_{i=1}^n \sigma_i - \beta\mathcal{H}_n(\sigma)\right)$ ed aggiungiamo un sito con numero d'occupazione τ estraendo dalla gaussiana le costanti di accoppiamento K_i del nuovo venuto con i vecchi siti. L'hamiltoniana del nuovo sistema vale quindi

$$\mathcal{H}_{n+1}(\sigma,\tau) = \mathcal{H}_n(\sigma) + \tau \sum_{i=1}^n K_i\sigma_i$$

così la distribuzione di probabilità può scriversi

$$\pi_{n+1}(\sigma,\tau) = \frac{\mathcal{Z}_n}{\mathcal{Z}_{n+1}} \pi_n(\sigma) e^{\beta\tau\left(\mu - \sum_{i=1}^n K_i\sigma_i\right)}$$

La quantità $h_0(\sigma) = -\sum_{i=1}^n K_i\sigma_i$ misura l'azione delle particelle del sistema sul nuovo sito così come, in generale, il *campo di cavità* $h_i(\sigma) = -\sum_{j\neq i} J_{ij}\sigma_j$ rappresenta il contributo di tutte le particelle sul sito i quando questo non è occupato. Nel pieno spirito di una teoria di campo medio assumiamo ora che le n variabili σ_i siano completamente scorrelate tra loro con m_i come numeri d'occupazione medi e quindi si può scrivere

$$\pi_n(\sigma) = \prod_{i=1}^n \left[m_i\sigma_i + (1-m_i)(1-\sigma_i)\right].$$

Valutiamo con questa approssimazione la distribuzione di probabilità del campo di cavità $h_0(\sigma)$.

$$\mathcal{P}(h_0) = \sum_{\sigma\in\mathcal{X}} \pi_n(\sigma)\delta(h(\sigma) - h_0)$$

Passando al logaritmo della trasformata di Fourier e ricordando che i termini K_i sono di ordine $n^{-1/2}$ si può verificare che, per il teorema del limite centrale per $n\to\infty$, la $\mathcal{P}(h_0)$ è una distribuzione gaussiana centrata in $H = -\sum_{i=1}^n K_i m_i$ e varianza $S^2 = \sum_{i=1}^n K_i^2 m_i(1-m_i)$. Il valore di H d'altra parte è indipendente dal valore dell'energia in quanto è funzione solo dei nuovi accoppiamenti K_i mentre l'energia è funzione solo dei vecchi J_{ij}. Si può osservare però che, che nel sistema di $n+1$ siti, la probabilità del campo h_0 non è più gaussiano ma è correlata con il valore di τ.

$$\mathcal{P}(h_0,\tau) = \sum_{\sigma\in\mathcal{X}} \pi_{n+1}(\sigma,\tau)\delta\left(h_0(\sigma) - h_0\right) = \frac{\mathcal{Z}_n}{\mathcal{Z}_{n+1}} \mathcal{G}_S\left(h_0 - H\right) e^{\beta(\mu+h_0)\tau}$$

Imponendo la normalizzazione della probabilità allora

$$\frac{\mathcal{Z}_{n+1}}{\mathcal{Z}_n} = \left[1 + e^{\beta(\mu + H + \frac{1}{2}\beta S^2)}\right]$$

possiamo ricavare il numero d'occupazione medio ed il campo che agisce sul sito.

$$\langle\tau\rangle = \left[1 + e^{-\beta(\mu+H+\frac{1}{2}\beta S^2)}\right]^{-1} \qquad \langle h_0\rangle = H + \beta S^2 \langle\tau\rangle$$

Si nota subito che al campo di cavità del nuovo sito deve essere aggiunto un termine che tiene conto dell'effetto di reazione del sito stesso sugli altri. Se riconosciamo la densità media e l'overlap

$$\rho = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n m_i \quad q = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n m_i^2$$

allora, poiché $\overline{K_i^2} = 1/n$, possiamo pensare di stimare S^2 con il suo valore medio $S^2 \simeq \rho - q$ Volendo imporre una certa consistenza, possiamo dedurre da questi risultati un'equazione analoga a quella di Thouless, Anderson e Palmer (TAP) per una qualunque istanza $\mathbf{J}$ ricavando H da una delle equazioni e sostituendolo nell'altra.

$$m_i = \frac{1}{1 + e^{-\beta(\mu + h_i)}}$$

$$h_i = -\sum_{j \neq i} J_{ij} m_j - \beta(\rho - q)(m_i - \frac{1}{2})$$

Per ottenere il risultato finale dobbiamo ancora mediare sulle istanze, operazione che nel metodo delle repliche viene fatto invece fin dall'inizio del calcolo. Possiamo applicare ancora il teorema del limite centrale per la quantità $H = -\sum_{i=1}^{n} K_i m_i$ ottenendo, per $n \to \infty$, sempre una distribuzione gaussiana di media 0 e varianza q.

$$\mathcal{P}(H) = \int \prod_{i=1}^{n} \left[dK_i \mathcal{G}_{\frac{1}{\sqrt{n}}}(K_i) \right] \delta(H + \sum_{i=1}^{n} K_i m_i)) \simeq \mathcal{G}_{\sqrt{q}}(H)$$

Quando mediamo sulle istanze il nuovo sito non ha nulla di particolare ed in pratica possiamo considerare $\overline{\langle \sigma_i \rangle^l} = \overline{\langle \sigma_j \rangle^l}$. Affinché tutto sia consistente deve valere quindi

$$\rho = \overline{\langle \tau \rangle} = \int dH \; \mathcal{G}_{\sqrt{q}}(H) \langle \tau \rangle$$

$$q = \overline{\langle \tau \rangle^2} = \int dH \; \mathcal{G}_{\sqrt{q}}(H) \langle \tau \rangle^2$$

e coincide con l'equazione di punto di sella ottenuta con il metodo delle repliche. Per ricavare la termodinamica dobbiamo stare un pochino più attenti. Le K_i del nostro sistema di $n+1$ spin sono state estratte da una distribuzione di probabilità che è quella relativa al sistema di n spin e quindi l'hamiltoniana $\mathcal{H}_{n+1}$ che abbiamo utilizzato è in realtà un pochino diversa da quella vera $\mathcal{H}^t_{n+1}$. Poiché si può scrivere

$$\beta \mathcal{H}_{n+1} = \beta \sqrt{\frac{n+1}{n}} \mathcal{H}^t_{n+1} \simeq \beta(1 + \frac{1}{2n}) \mathcal{H}^t_{n+1} = \beta' \mathcal{H}^t_{n+1},$$

la questione allora può essere facilmente risolta comprendendo che la funzione di partizione gran canonica che abbiamo calcolato va interpretata come quella di un sistema di $n+1$ siti che si trova ad una temperatura e ad un potenziale chimico leggermente diverso da quella del sistema di n siti da cui l'abbiamo ricavato. In pratica:

$$\mathcal{Z}_{n+1}(\beta, \mu) = \mathcal{Z}^t_{n+1}(\beta(1 + 1/2n), \mu(1 - 1/2n))$$

per cui, trascurando i termini di ordine $\mathrm{O}\left(n^{-2}\right)$,

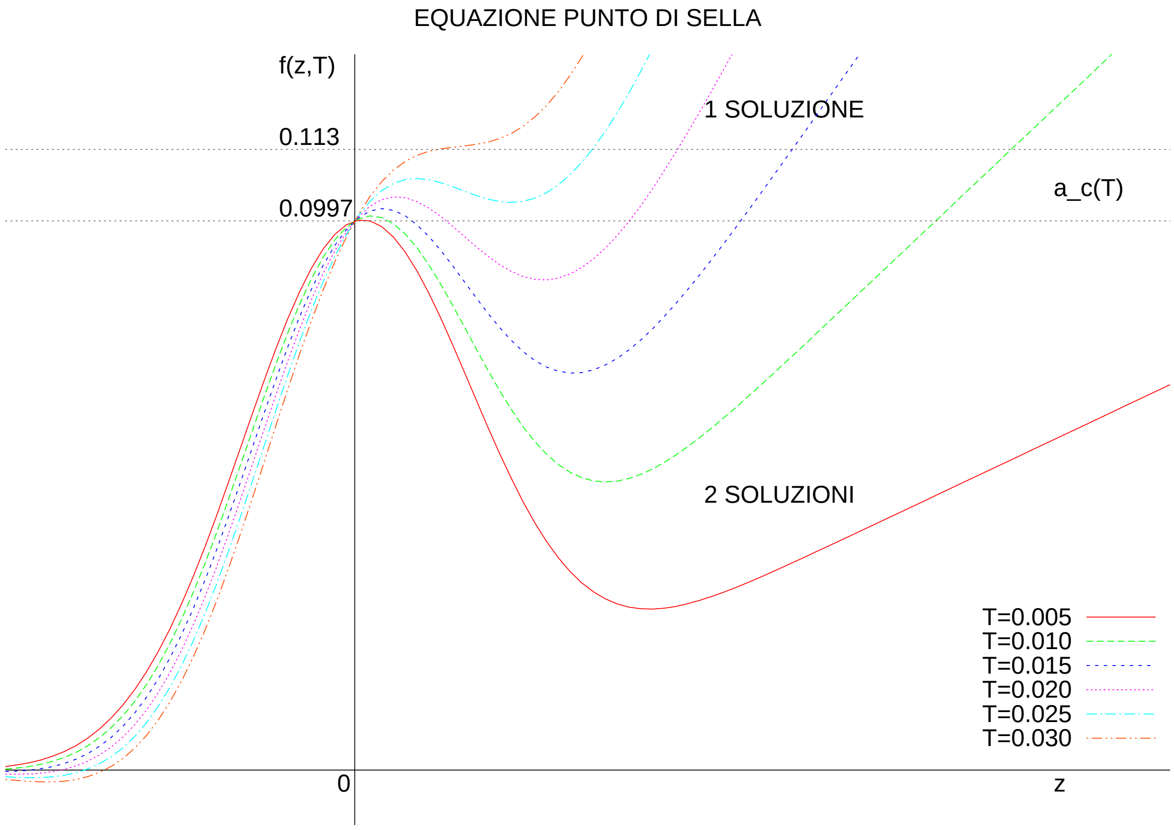
$$\log \mathcal{Z}^t_{n+1}(\beta, \mu) + \frac{1}{2n} \left\{ \beta \frac{\partial \log \mathcal{Z}^t(\beta, \mu)}{\partial \beta} - \mu \frac{\partial \log \mathcal{Z}^t(\beta, \mu)}{\partial \mu} \right\} = \beta P(n+1) - \frac{1}{2n} \beta \langle \mathcal{H}(\sigma) \rangle$$

Per consistenza con il fatto che le σ_i con questo metodo sono scorrelate è facile convincersi che l'energia media deve valere

$$\langle \mathcal{H}(\sigma) \rangle = -\frac{n}{2} \langle h_0 \rangle \langle \tau \rangle .$$

Quando mediamo sulle istanze il logaritmo di $\mathcal{Z}_{n+1}/\mathcal{Z}_n$, allora,

$$P = -\frac{1}{4} \overline{\langle h_0 \rangle \langle \tau \rangle} + \frac{1}{\beta} \int dH \; \mathcal{G}_{\sqrt{q}}(H) \log \left[1 + e^{\beta(\mu + H + \frac{1}{2}\beta(\rho - q))} \right]$$



e sfruttando l'integrazione per parti,

$$\overline{\langle h_0 \rangle \langle \tau \rangle} = \int dH \mathcal{G}_{\sqrt{q}}(H) \frac{H}{1 + e^{-\beta(\mu + \beta(\rho - q)/2 + H)}} + \beta(\rho - q)\rho = \beta(\rho^2 - q^2)$$

È facile accorgersi adesso che abbiamo ottenuto proprio la stessa soluzione RS. Proviamo a vedere le soluzioni quando $\beta \to \infty$. Definendo $b = \rho - q$ e scalando il potenziale chimico $\mu = -\beta\alpha/2$ allora, per $\beta \to \infty$,

$$\rho = \int_{-\infty}^{z} dx\ \mathcal{G}_1(x) = \mathrm{erf}\,(z) \qquad b = \frac{1}{4}\mathcal{G}_1(z)$$

$$z = \frac{\beta}{2\sqrt{q}}(b - \alpha)$$

Sostituendo quindi in b e q le loro espressioni in funzione di z si ottiene un'equazione per z in funzione solo della temperatura T e del potenziale chimico α. Conviene porre

$$\alpha = f(z, T) = \frac{1}{4}\mathcal{G}_1(z) + 2Tz\sqrt{\mathrm{erf}(z) + \frac{1}{4}\mathcal{G}_1(z)}$$

e controllare al variare di T la forma della $f(z, T)$ per vedere quante intersezioni con α sono possibili. In figura abbiamo riportato la forma della $f(z, T)$ in funzione di diversi valori di T. Si vede bene che per $T \ll T_c$ esiste una zona per cui sono presenti due soluzioni. Se $\alpha > \alpha_c = 0$. la soluzione è 1 sola e, per $T \to 0$, si trova per $z \gg 1$

$$f(z, T) \simeq 2Tz \quad \rho = \mathrm{erf}\left(\frac{\alpha}{2T}\right) \simeq q$$

2.3.6 Soluzione 1RSB

La discussione sulla complessità e il metodo della cavità sono fondamentali per capire il motivo fisico per cui, nel metodo delle repliche una volta rotta la simmetria e divise le repliche in r/g gruppi di g repliche, è necessario massimizzare il logaritmo della funzione di partizione delle r repliche anche rispetto alla variabile g. Riconsideriamo la TAP equation allo zero assoluto.

$$m_i = \frac{1}{2}\left(1 + \operatorname{sign}\left(\mu + h_i\right)\right),$$

Possiamo trovare le soluzioni della TAP equation con un semplice dinamica di Galuber che "flippa" i siti uno alla volta solo per orientarli nella direzione dei rispettivi campi ma senza mai aumentare l'energia. Poiché l'energia non può diminuire all'infinito, ad un certo punto convergerò verso una soluzione dell'equazione. Se parto da configurazioni diverse e ripeto più volte l'algoritmo mi accorgerò, all'interno di un intervallo di potenziale chimico, dell'esistenza di un numero enorme di soluzioni diverse. È ad ognuna di queste soluzioni che noi vogliamo associare uno stato metastabile. Immaginiamo quindi di avere un certo numero $\mathcal{M}$ di stati *puri* $\alpha = 1, 2, \ldots, \mathcal{M}$, cioè tali che all'interno di uno stato α i numeri di occupazioni σ_i siano scorrelati tra loro e di media m_i^α, e fissiamo l'overlap tra gli stati

$$q_{\alpha\beta} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} m_i^\alpha m_i^\beta = \begin{cases} q_0 & \text{se } \alpha \neq \beta \\ q_1 & \text{altrimenti} \end{cases}.$$

Per ogni singolo stato α il metodo della cavità può essere riproposto nella stessa maniera con la quale abbiamo ricavato la soluzione RS. Il campo di cavità che agisce sul nuovo venuto è sempre gaussiano ma di media $H^\alpha = -\sum_{i=1}^{n} K_i m_i^\alpha$ che varia da stato a stato ed ha però varianza $S^2 \simeq \sum_{i=1}^{n} K_i^2 m_i^\alpha(1 - m_i^\alpha) = \rho - q_1$. Occorre adesso un minimo d'attenzione perché stiamo lavorando nel gran-canonico e dobbiamo far svolgere al potenziale termodinamico $-PV$ le stesso ruolo che ha l'energia libera nel canonico. Per semplicità quindi prendiamoci per il momento la libertà di definire l'energia libera F tramite la relazione

$$\beta F_n^\alpha = -\log \mathcal{Z}_n^\alpha.$$

In questa maniera è possibile riproporre lo stesso meccanismo usato nel modello SK. Quando aggiungo un sito, l'energia libera di uno stato α viene shiftata di una quantità pari a

$$\beta\left(F_{n+1}^\alpha - F_n^\alpha\right) = \beta\Delta F\left(H^\alpha\right) = -\log\left(\frac{\mathcal{Z}_{n+1}^\alpha}{\mathcal{Z}_n^\alpha}\right) = -\log\left[1 + e^{\beta(\mu + H^\alpha + \beta(\rho - q_1)/2)}\right],$$

ed il campo di cavità che agisce sul nuovo sito non è più gaussiano ma è correlato con il numero d'occupazione τ

$$\mathcal{P}\left(h_0, \tau \,|H^\alpha\right) = \mathcal{G}_{\sqrt{\rho - q_1}}(h_0 - H^\alpha)\frac{e^{\beta(\mu + h_0)\tau}}{1 + e^{\beta(\mu + H^\alpha + \beta(\rho - q_1)/2)}}$$

Un semplice conto sfruttando sempre la trasformata di Fourier e le proprietà degli integrali gaussiani permette di verificare che, al variare degli accoppiamenti K_i, la probabilità che i campi H^α assumano i valori $H^1, \ldots, H^{\mathcal{M}}$ vale, nel limite $n \to +\infty$,

$$\mathcal{P}(H^1, \ldots, H^{\mathcal{M}}) = \int \prod_{i=1}^{n}\left[dK_i \mathcal{P}(K_i)\right] \prod_{\alpha=1}^{\mathcal{M}} \delta(H^\alpha + \sum_{i=1}^{n} K_i m_i^\alpha) =$$

$$= \int dH\, \mathcal{G}_{\sqrt{q_0}}(H) \prod_{\alpha=1}^{\mathcal{M}} \mathcal{G}_{\sqrt{q_1 - q_0}}(H^\alpha - H)$$

Possiamo interpretare questo risultato con il fatto che, fissata un'istanza, le H^α sono variabili gaussiane scorrelate intorno ad un valore medio H che dipende dall'istanza ed ha anch'esso distribuzione gaussiana. A questo punto del metodo della cavità si introduce il concetto di *random free energy*. Si assume che l'energia libera di uno stato puro è una variabile casuale estratta da una distribuzione esponenziale

$$\mathcal{P}(F) = xe^{x(F-F_c)}\theta\left(F_c - F\right)$$

e non esistono stati al di sopra della soglia F_c. In questa maniera, poiché la probabilità del campo H^α è indipendente dal valore di F^α dello stato puro, possiamo stimare il numero di stati che hanno energia libera F e campo di cavità H_0 semplicemente moltiplicando le due probablità.

$$\mathcal{N}_n\left(F, H_0\right) \sim e^{x(F-F_n)}\theta\left(F_n - F\right)\mathcal{G}_{\sqrt{q_1-q_0}}\left(H_0 - H\right)$$

Quando aggiungiamo un sito deve valere

$$\mathcal{N}_{n+1}\left(F, H_0\right) = \int dF'\mathcal{N}_n\left(F'\right)\delta\left(F - F' - \Delta F\left(H_0\right)\right)\mathcal{G}_{\sqrt{q_1-q_0}}\left(H_0 - H\right).$$

Imponiamo ora che il sistema di $n+1$ spin abbia le stesse proprietà del sistema di n spin, cioè la stessa distribuzione esponenziale delle variabili F (osserviamo che la distribuzione esponenziale è l'unica che riproduce se stessa dopo un'integrazione) e l'indipendenza di queste dal campo di cavità.

$$\mathcal{N}_{n+1}\left(F, H_0\right) \sim e^{x(F-F_{n+1})}\mathcal{Q}\left(H_0|H\right)$$

Dalla normalizzazione si ottiene che

$$\Delta\mathcal{F}(x) = -\frac{1}{x}\log\left\{\int dH_0\mathcal{G}_{\sqrt{q_1-q_0}}(H_0 - H)e^{-x\Delta F(H_0)}\right\}$$

e la $\mathcal{Q}\left(H_0|H\right)$ non è più gaussiana

$$\mathcal{Q}\left(H_0|H\right) = \frac{\mathcal{G}_{\sqrt{q_1-q_0}}(H_0 - H)e^{-x\Delta F(H_0)}}{\int dH_0\mathcal{G}_{\sqrt{q_1-q_0}}(H_0 - H)e^{-x\Delta F(H_0)}},$$

Il campo che agisce sul nuovo sito è correlato poi col suo numero d'occupazione τ.

$$\mathcal{P}^*(h_0, \tau|H) = \int dH_0\mathcal{Q}(H_0|H)\mathcal{P}(h_0, \tau|H_0)$$

Adesso, per calcolare i valori aspettati, si somma su τ e si integra su h_0 e H_0 sfruttando le proprietà degli integrali gaussiani e l'integrazione per parti.

$$\langle\tau\rangle = \tilde{m}(H) = \int dH_0\ \mathcal{Q}(H_0|H)\left[1 + e^{-\beta(\mu+H_0+\frac{1}{2}(\rho-q_1))}\right]^{-1}$$

$$\langle h_0\rangle = H + \beta(\rho - xq_0 - (1-x)q_1)\langle\tau\rangle$$

Risolvendo la seconda equazione per H e sostituendo nella prima otteniamo una sorta di TAP equation associata alla soluzione $1RSB$

$$h_i = -\sum_{j\neq i} J_{ij}m_j - \beta\left\{\rho - xq_0 - (1-x)q_1\right\}m_i$$

$$m_i = \tilde{m}(h_i).$$

Adesso, per ottenere la soluzione finale dobbiamo mediare sulle istanze. Al solito, non cè motivo di preferire un sito piuttosto che un altro. Intanto è ragionevole che la densità media verifichi la seguente equazione

$$\rho = \overline{\langle\tau\rangle} = \int dH\ \mathcal{G}_{\sqrt{q_0}}(H)\ \tilde{m}(H).$$

Adesso basta ricordare che q_0 è l'overlap tra stati diversi

$$q_0 = \overline{(\tilde{m}(H))^2} = \int dH\, \mathcal{G}_{\sqrt{q_0}}(H)\ (\tilde{m}(H))^2$$

mentre q_1 è l'auto-overlap tra le configurazioni che si trovano all'interno dello stesso stato

$$q_1 = \overline{\int dH_0 \mathcal{Q}(H_0|H) \left[1 + e^{-\beta(\mu + H_0 + (\rho - q_1)/2)}\right]^{-2}}.$$

Queste equazioni adesso coincidono perfettamente con quelle ottenute applicando il metodo delle repliche. Per completare il lavoro dobbiamo esibire l'espressione della complessità o la sua trasformata di Legendre. Innanzitutto, affinché tutto sia coerente, abbiamo visto che il numero di stati metastabili incrementa secondo la legge

$$e^{\Sigma_{n+1}(F)} = \int d\, H_0\, e^{\Sigma_n(F - \Delta F(H_0))} \mathcal{G}_{\sqrt{q_1 - q_0}}(H_0 - H) \simeq$$

$$\simeq e^{\Sigma_n(F)} \int d\, H_0\, e^{-\frac{\partial \Sigma_n(F)}{\partial F}\Delta F(H_0)} \mathcal{G}_{\sqrt{q_1 - q_0}}(H_0 - H)\,.$$

Indichiamo con $x = \frac{\partial \Sigma(F)}{\partial F}$ e passiamo ai logaritmi.

$$\Sigma_{n+1}(F) = \Sigma_n(F) - x\Delta\mathcal{F}(x)$$

Esplicitiamo per un momento le variabili da cui dipende la complessità

$$\Sigma_n(F) = n\Sigma\left(F/n, \beta, \mu\right) = n\Sigma(f, \beta, \mu),$$

e ricordiamoci di riscalare la temperatura ed il potenziale chimico quando passo da n a $n+1$.

$$(n+1)\Sigma\left(f(1 - 1/n), \beta(1 + 1/2n), \mu(1 - 1/2n)\right) \simeq$$

$$\simeq (n+1)\Sigma\left(f, \beta, \mu\right) - f\frac{\partial \Sigma}{\partial f} + \frac{1}{2}\beta\frac{\partial \Sigma}{\partial \beta} - \frac{1}{2}\mu\frac{\partial \Sigma}{\partial \mu}.$$

Sostituendo nell'equazione e spostando qualche termine allora

$$fx - \Sigma(f) = x\Delta\mathcal{F}(x) + \frac{1}{2}\beta\frac{\partial \Sigma}{\partial \beta} - \frac{1}{2}\mu\frac{\partial \Sigma}{\partial \mu}.$$

Siamo riusciti ad ottenere quello che volevamo. Se prendo il minimo su f del lato sinistro dell'equazione a x fissato (e guarda caso proprio $f = \frac{\partial \Sigma}{\partial f}$), allora il lato destro è proprio la trasformata di Legendre della complessità come spiegato nella prima sezione di questo capitolo.

$$x\Phi(x) = \min_f \left(fx - \Sigma(f)\right)$$

Osservando poi che

$$\frac{\partial\left(x\Phi(x)\right)}{\partial \beta} = -\frac{\partial \Sigma}{\partial \beta} \quad \text{e} \quad \frac{\partial\left(x\Phi(x)\right)}{\partial \mu} = -\frac{\partial \Sigma}{\partial \mu}$$

allora, in definitiva,

$$\Phi(x) = \Delta\mathcal{F}(x) - \frac{1}{2}\beta\frac{\partial \Phi}{\partial \beta} + \frac{1}{2}\mu\frac{\partial \Phi}{\partial \mu}.$$

Questa è una equazione differenziale alle derivate parziali per la $\Phi(x)$. Una volta fatta la media sulle istanze, la $\Phi(x)$ dipende dalla temperatura, dal potenziale chimico e dal parametro x. Confrontiamo questo risultato con l'espressione della pressione che si ottiene dalle repliche.

$$-P = \overline{\Delta\mathcal{F}(\beta g)} + \frac{1}{4}\beta\left[\rho^2 - gq_0^2 - (1-g)q_1^2\right]$$

Un conto semplice ma lungo permette di verificare che, effettivamente, $P = -\Phi(\beta g)$. Nella fase di Spin Glass solo un numero finito di stati contribuisce alla media termodinamica e sono quelli che hanno i valori più bassi di energia libera (o i valori più alti di pressione). Massimizzare $\Phi(x)$ quindi coincide con il trovare il valore di pressione per la quale la complessità è nulla.

2.3.7 Conclusioni

In questa sezione abbiamo voluto mostrare come sia possibile ricavare alcune importanti informazioni su un problema d'ottimizzazione utilizzando la meccanica statistica e, in particolare, le tecniche sviluppate per lo studio dei vetri di spin. Risolvendo le equazioni di punto di sella e ricavando numericamente i potenziali termodinamici possiamo stimare, ad esempio, l'energia dello stato fondamentale (e quindi dell'ottimo) mentre l'informazione sulla complessità misura l'intrattabilità del problema in base al suo grado di disordine. È bene osservare che il metodo della cavità ha suggerito inoltre una maniera di trovare la soluzione del problema semplicemente risolvendo la TAP equation. Questo aspetto è importante alla luce dei recenti successi ottenuti da una nuova classe di algoritmi ispirati proprio al metodo della cavità. È il caso del *Survey Inspiraded Decimation Algorithm*(SID) [4], che è in grado di trovare brillantemente la soluzione di molte e difficili istanze del problema $3SAT$ sulle quali gli altri algoritmi tradizionali hanno fallito.

Capitolo 3

Markov Chain Monte Carlo

Nella prima sezione discuteremo delle proprietà fondamentali delle catene di Markov finite ed alcune tecniche utilizzate per valutare l'efficienza di un algoritmo Metropolis. In seguito mostreremo un esempio concreto con il quale tali tecniche permettono di verificare, nel caso di grafi random, l'intrattabilità del problema delle clique.

3.1 Il problema della convergenza all'equilibrio

I metodi Monte Carlo consistono in algoritmi random sviluppati per risolvere svariati tipi di problemi come, ad esempio, trovare il minimo di una funzione o stimare un integrale multidimensionale. L'algoritmo *Metropolis*, che presenteremo tra breve, è usatissimo proprio in meccanica statistica per cercare di campionare lo spazio delle configurazioni da una distribuzione di Gibbs. Dal punto di vista di un problema d'ottimizzazione quindi si potrebbe sfruttare tale algoritmo a basse temperature per fare in modo che la probabilità di passare sullo stato fondamentale (e di conseguenza, ricavare la soluzione al mio problema) sia la più alta possibile. Ma quanto tempo è necessario prima che ciò accada? In questo capitolo mostreremo alcuni aspetti e risultati fondamentali per comprendere il problema della convergenza all'equilibrio di catene di Markov.

3.1.1 Definizioni

Consideriamo l'evoluzione temporale a tempi discreti $(X_0, X_1, X_2, \dots, X_t, \dots)$ di un sistema che, ad ogni istante, passa da uno stato ad un altro tra quelli di un insieme $\mathcal{X}$ di stati possibili. Se la legge che determina il passaggio da uno stato ad un altro è di tipo probabilistico il processo è di tipo *stocastico* e le X_t sono a tutti gli effetti variabili casuali estratte da una certa legge di probabilità μ (e si scrive $X \sim \mu$). Quando la probabilità di transizione da un stato ad un altro dipende unicamente dallo stato attuale del sistema e non dalla sua storia o dal tempo t allora si dice che il processo è *omogeneo* e *markoviano* e tutta l'informazione sulla dinamica stocastica è data dalla conoscenza della probabilità di transizione $P_{ab} \in [0,1]$ da un qualunque stato a ad un qualunque altro stato b. Le P_{ab} devono essere ovviamente ben normalizzate $\sum_{b \in \mathcal{X}} P_{ab} = 1 \ \ \forall a \in \mathcal{X}$. Quando gli stati possibili sono in un numero finito si tende chiamare tale processo stocastico *catena di Markov omogenea a stati discreti* e le probabilità P_{ab} a questo punto formano una matrice $\mathbf{P}$ detta *matrice di transizione* della catena. Le catene di Markov possono essere classificate in base alle proprietà della matrice di transizione. Un concetto importante da considerare è quello della *comunicazione* tra gli stati. Lo stato a comunica con lo stato b se è possibile, prima o poi, giungere in b partendo da a. Se anche b comunica con a allora i due stati si dicono *intercomunicanti*. Quando gli stati possono essere divisi in più sottoinsiemi per cui le transizioni da un sottoinsieme ad un altro sono vietate la catena è detta *decomponibile*. Stati appartenenti a sottoinsiemi diversi non comunicano sicuramente tra loro e partendo da uno stato in un certo sottoinsieme diventa impossibile uscire dal sottoinsieme stesso. L'approccio più ragionevole da tenere in questo caso diventa quello di "spezzare" la catena in più catene, una per ogni sottoinsieme. La catena è invece detta *riducibile* quando esiste un sottoinsieme i cui stati non comunicano affatto con il resto degli stati. Prima o poi il sistema rimarrà intrappolato in questo sottoinsieme ed è ragionevole semplificare la catena eliminando tutti gli stati che definitivamente non verrano più visitati. Una catena che non può più essere ulteriormente ridotta o decomposta viene detta *irriducibile*. Tutti gli stati di una catena irriducibile sono quindi intercomunicanti tra loro. Ma occorre essere più precisi. È evidente che, per una catena di Markov, la probabilità di avere una data storia $(a = i_0, i_1, \ldots, i_t = b)$ di t passi è data semplicemente da:

$$\mathcal{P}\left(X_0 = a, X_1 = i_1, \ldots, X_n = b\right) = \prod_{s=1}^{t} P_{i_{s-1}i_{s m}}$$

Per cui, se sommo sugli stati intermedi, posso ottenere la probabilità di andare dallo stato a allo stato b in t passi come elemento dell' t-esima potenza della matrice di transizione $P^{(t)}_{a\to b} = \left(\mathbf{P}^t\right)_{ab}$. Se fissiamo l'attenzione su un singolo stato a la quantità $P^{(t)}_{a\to a} = p_t$ soddisfa quindi tutte le condizione per considerare l'evento "passaggio per a" un evento ricorrente poiché la probabilità che l'evento si verifichi dopo t passi dipende esclusivamente dall'ultimo tempo in cui è avvenuto. Consideriamo ora per un momento un semplice random walk sui vertici di un quadrato. Se parto dall'angolo in alto a sinistra posso ritornarci solo dopo un numero pari di passi. Quando p_t è diversa da zero solo per t multiplo intero di un certo periodo lo stato è detto *periodico*. Se l'evento è aperiodico e $S_T = \sum_{t=1}^{T} p_t < \infty$ per $T \to \infty$, allora significa che p_t va a zero così velocemente che il sistema in pratica passa per lo stato a un numero finito di volte e lo stato in questione è detto *transiente*. Se al contrario $S_T \to \infty$ lo stato è detto *ritornante* ed, in particolare, se $p_t \to$ *costante* allora si dice che è *ergodico* mentre, se $p_t \to 0$, *ritornante nullo*. Nel caso di un qualunque processo di Markov è possibile dimostrare che gli stati sono tutti dello stesso tipo ed il processo viene quindi classificato solo in base alla proprietà di tali stati (periodico, aperiodico, transiente, ergodico). È importante osservare che il caso periodico può essere sempre ricondotto a quello aperiodico osservando il sistema solo a tempi multipli del periodo. Nel caso di catene di Markov irriducibili aperiodiche a stati discreti si dimostra infatti che gli stati non possono essere né transienti né ritornanti nulli [23] e quindi, in definitiva, *una la catena di Markov irriducibile ed aperiodica a stati discreti è sempre egodica ed il passaggio per ogni stato è quindi definitivamente certo.* In pratica esiste sempre un $M > 0$ tale che $P^{(t)}_{ab} > 0 \ \ \forall\, a, b \in \mathcal{X}$ e $\forall\, t \geq M$.

3.1.2 Distribuzione stazionaria

Consideriamo adesso l'insieme Ω delle distribuzioni (o misure) di probabilità definita sullo spazio degli stati $\mathcal{X}$ di una catena di Markov. In pratica, se il numero degli stati è finito, una misura $\mu \in \Omega$ è rappresentato da un vettore riga $(\mu_a)_{a\in\mathcal{X}}$ per cui vale $\mu_a > 0 \ \forall\ a \in \mathcal{X}$ e $\sum_{a\in\mathcal{X}} \mu_a = 1$. Vogliamo chiederci come la dinamica stocastica della catena fa evolvere una misura nel tempo. Nel linguaggio degli *ensemble* si può sempre pensare ad una moltitudine di sistemi identici che evolvono indipendentemente l'uno dall'altro con la medesima matrice di transizione $\mathbf{P}$ e indicare con $\mu^{(t)}_a$ la frazione di sistemi che al tempo t occupano lo stato a. Ovviamente deve valere $\sum_{a\in\mathcal{X}} \mu^{(t)}_a = 1$. Se facciamo tendere all'infinito il numero di sistemi dell'ensemble allora, per la legge dei grandi numeri, la distribuzione iniziale degli stati rappresentata dal vettore riga $\mu^{(0)} = \left(\mu^{(0)}_a\right)_{a\in\mathcal{X}}$ evolverà semplicemente seguendo l'usuale regola di prodotto righe per colonne $\mu^{(1)} = \mu^{(0)}\mathbf{P}$, e più in generale,

$$\mu^{(t)} = \mu^{(t-1)}\mathbf{P} = \mu^{(t-2)}\mathbf{P}^2 = \cdots = \mu^{(1)}\mathbf{P}^{t-1} = \mu^{(0)}\mathbf{P}^t$$

È facile verificare che la $\mu^{(t)}$ rimane una distribuzione ben normalizzata come deve essere affinché tutto sia consistente:

$$\sum_{b\in\mathcal{X}} \mu^{(t+1)}_b = \sum_{b\in\mathcal{X}}\sum_{a\in\mathcal{X}} \mu^{(t)}_a P_{ab} = \sum_{a\in\mathcal{X}} \mu^{(t)}_a \left[\sum_{b\in\mathcal{X}} P_{ab}\right] = \sum_{a\in\mathcal{X}} \mu^{(t)}_a = 1.$$

Definition. *Una distribuzione stazionaria (o misura invariante) per una catena di Markov è un vettore riga* $\pi = (\pi_a)_{a\in\mathcal{X}}$ *che soddisfa le seguenti proprietà:*

- $\pi_a \geq 0 \ \ \forall a \in \mathcal{X}$
- $\sum_{a\in\mathcal{X}} \pi_a = 1$
- $\pi = \pi\mathbf{P} \quad \forall b \in \mathcal{X}$

È immediato dimostrare per induzione che, se la distribuzione iniziale $\mu^{(0)}$ coincide proprio con una distribuzione stazionaria π per la catena allora $\mu^{(t)} = \pi \ \ \forall t > 0$.

$$\left.\begin{array}{r} \mu^{(1)} = \mu^{(0)}\mathbf{P} = \pi\mathbf{P} = \pi \\ \mu^{(t)} = \pi \end{array}\right\} \longrightarrow \mu^{(t+1)} = \mu^{(t)}\mathbf{P} = \pi\mathbf{P} = \pi.$$

La specializzazione del teorema di Perron-Frobenius applicato alle matrici stocastiche a questo punto è il risultato fondamentale che mostra l'utilità delle catene di Markov nel problema del campionamento e di quanto vitale sia l'informazione contenuta nella misura stazionaria.

Theorem. *Se* $\mathbf{P}$ *la matrice di transizione di una catena di Markov irriducibile ed aperiodica allora le seguenti affermazioni sono vere.*

- *Esiste ed è unica la misura stazionaria* $\pi = \pi\mathbf{P}$ *della catena.*
- $\lim_{t\to\infty} \left(\mathbf{P}^t\right)_{ab} = \pi_b \quad \forall\, a \in \mathcal{X}$.

In [24] è possibile trovare una delle tantissime e diverse dimostrazioni di questo teorema. Per noi sarà istruttivo solo verificare la proprietà ergodica della catena. Consideriamo un osservabile $\mathcal{O}$ del sistema (in pratica una qualche funzione sullo spazio degli stati) ed immaginiamo che la successione di stati $(x_0, x_1, \ldots, x_t, \ldots)$ rappresenti la storia della catena. Su questa storia possiamo definire la *media temporale* di $\mathcal{O}$ come:

$$\overline{\mathcal{O}} = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \sum_{t<T} \mathcal{O}(x_t)$$

La proprietà ergodica si traduce affermando che questo limite è indipendente dalla storia del sistema e coincide con la *media d'ensemble* $\langle \mathcal{O} \rangle$. Dimostriamo quest'affermazione calcolando la media temporale delle funzioni caratteristiche $\mathbb{1}_a(x)$ degli stati $a \in \mathcal{X}$ del sistema e mediando sulle storie possibili.

$$\mathbb{E}\left[\frac{1}{T}\sum_{t<T} \mathbb{1}_a(x_t)\right] = \frac{1}{T}\sum_{t<T} \mathbb{E}\left[\mathbb{1}_a(x_t)\right] = \frac{1}{T}\sum_{t<T}\sum_{x\in\mathcal{X}} \left(\mathbf{P}^t\right)_{x_0,x} \mathbb{1}_a(x) = \frac{1}{T}\sum_{t<T} \left(\mathbf{P}^t\right)_{x_0,a}$$

La legge dei grandi numeri ed il teorema di Perron-Frobenius permettono quindi di affermare che nel caso di una catena irriducibile ed aperiodica

$$\lim_{T\to\infty} \frac{1}{T}\sum_{t<T} \mathbb{1}_a(x_t) = \pi_a$$

e la media temporale di $\mathcal{O}$ può essere quindi ricalcolata ottenendo

$$\overline{\mathcal{O}} = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T}\sum_{t<T}\sum_{a\in\mathcal{X}} \mathbb{1}_a(x_t)\mathcal{O}(a) = \sum_{a\in\mathcal{X}} \mathcal{O}(a)\left[\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\sum_{t<T}\mathbb{1}_a(x_t)\right] = \sum_{a\in\mathcal{X}} \pi_a \mathcal{O}(a) = \langle \mathcal{O} \rangle\,.$$

Le $\langle \mathcal{O} \rangle$ sono dette *medie d'ensemble.* Riconsideriamo adesso la distribuzione iniziale degli stati $\mu^{(0)}$. Per una catena ergodica, poiché abbiamo visto che $\mu^{(t)} = \mu^{(0)}\mathbf{P}^t$, allora

$$\mu_a^{(t)} = \sum_{b\in\mathcal{X}} \mu_b^{(0)} \left(\mathbf{P}^t\right)_{ba} \overset{t\to\infty}{\longrightarrow} \pi_a.$$

In definitiva: *qualunque distribuzione iniziale convergerà alla distribuzione stazionaria.* Quando focalizziamo l'attenzione sull'evoluzione di un singolo sistema, dopo aver aspettato per un numero di passi opportuno, la frequenza con la quale visiterò un certo stato sarà proprio pari alla distribuzione invariante della catena. Quando ciò accade diciamo che il processo è in *equilibrio* e, a questo punto, posso campionare gli stati con la distribuzione stazionaria. È questa proprietà che rende le catene di Markov uno strumento fondamentale per "riprodurre" misure di probabilità. Ma come faccio ad ottenere una catena in grado di convergere alla misura che voglio?

3.1.3 Catene reversibili & algoritmo Metropolis

Una catena di Markov si dice *reversibile* se esiste una distribuzione di probabilità π per cui, se $\mathbf{P}$ è la matrice di tansizione della catena, vale la *condizione del bilancio dettagliato*

$$\pi_a P_{ab} = \pi_b P_{ba} \quad \forall\ a, b \in \mathcal{X}.$$

È facile osservare che se tale π esiste allora vale $\sum_{a\in\mathcal{X}} \pi_a P_{ab} = \pi_b$ e le catene reversibili ergodiche meritano quindi un'attenzione privilegiata in quanto la π che soddisfa la condizione di bilancio dettagliato è proprio la distribuzione stazionaria della catena. Questa proprietà permette di costruire facilmente una catena di Markov che converge a qualunque misura si desideri. Sia π la misura che voglio riprodurre e consideriamo un sistema che al tempo t si trova nello stato $x_t = a$. Scegliamo adesso arbitrariamente un'altra configurazione b con l'unico accorgimento che tale algoritmo di scelta sia simmetrico scambiando tra loro a e b. Si potrebbe scegliere, ad esempio, una delle variabili del sistema a caso e aumentarla o diminuirla di una certa quantità nel caso di variabili continue oppure "flipparla" nel caso di spin o variabili booleane (dinamica alla "Glauber"). A questo punto si valuta la quantià π_b/π_a. Se $\pi_b/\pi_a > 1$ si accetta il cambiamento, il sistema salta nello stato b e si pone $x_{t+1} = b$. Se invece $\pi_b < \pi_a$ si estrae un numero random r con probabilità uniforme nell'intervallo $[0, 1)$ e se $r < \pi_b/\pi_a$ si pone $x_{t+1} = b$. In tutti gli altri casi il sistema rimane dov'è e si pone $x_{t+1} = a$. In pratica stiamo imponendo che la probabilità di transizione dallo stato a allo stato b valga 1 se $\pi_b > \pi_a$ (vado sicuramente verso gli stati più probabili) e valga π_b/π_a altrimenti (salto in uno stato meno vantaggioso con probabilità π_b/π_a). È facile verificare che tale prescrizione soddisfa la condizione di bilancio dettagliato e che pertanto il processo convergerà proprio verso la misura invariante π. Quello che abbiamo presentato è chiamato algoritmo *Metropolis* ed è l'ingrediente fondamentale in grado d'innescare un meccanismo che converga alla misura di Gibbs. Sia $\mathcal{H}(\mathcal{C})$ l'hamiltoniana di un sistema fisico, $T = 1/\beta$ la temperatura di equilibrio termodinamico alla quale vogliamo portare il sistema e $\mathcal{C}_t$ lo stato del sistema al tempo t.

1 Si sceglie una configurazione $\mathcal{C}^*$ a caso (in modo però che l'algoritmo di scelta sia simmetrico rispetto allo scambio di $\mathcal{C}_t$ con $\mathcal{C}^*$)

2 Si valuta la quantità $\Delta = \mathcal{H}(\mathcal{C}^*) - \mathcal{H}(\mathcal{C}_t)$:

- se $\Delta < 0$ lo stato $\mathcal{C}^*$ è più vantaggioso in termini energetici e si pone $\mathcal{C}_{t+1} = \mathcal{C}^*$;
- se $\Delta > 0$ il salto aumenterebbe l'energia e quindi lo accetto solo con probabilità $e^{-\beta\Delta}$.

3 Ricomincio dal punto 1.

Se $\mathcal{H}(\mathcal{C})$ è la funzione costo da minimizzare di un problema d'ottimizzazione allora non ci resta altro da fare che diminuire la temperatura ed aspettare che la catena mi faccia passare sullo stato fondamentale dove la misura si concentra. Sembrerebbe tutto perfetto, l'algoritmo è affidabile, e, in linea di principio dovrebbe essere abbastanza astuto da esplorare solo una piccola porzione dello spazio delle fasi, quella rilevante. Ma quanti passi sono necessari per raggiungere l'equilibrio? Purtroppo, sebbene non ci sia praticamente limite ai problemi che possono essere affrontati sfruttando l'algoritmo Metropolis, quando trattiamo un problema NP-completo dobbiamo mettere in preventivo che il nostro tentativo potrebbe fallire.

3.1.4 Mixing time

La proprietà di ergodicità afferma che, prima o poi, il sistema passerà sicuramente per qualunque configurazione. Ma ciò che è "matematicamente" ergodico non è detto appaia tale nella realtà di una simulazione numerica. L'efficienza di un algoritmo Metropolis dipenderà ad esempio dalla velocità con la quale la catena raggiunge l'equilibrio. Conoscere il tempo necessario per riprodurre la distribuzione stazionaria è l'informazione principale che vogliamo cercare di ottenere. Un semplice conto può servire per introdurre la problematica. Consideriamo per semplicità una catena reversibile ergodica per cui abbiamo visto che vale $\pi_a P_{ab} = \pi_b P_{ba}$ con π distribuzione stazionaria. Indicando con $\rho_a^2 = \pi_a$ si può mostrare che

$$P_{ab} = \rho_a^{-1} S_{ab} \rho_b \quad \forall\, a, b \in \mathcal{X}$$

ed $\mathbf{S}$ è una matrice simmetrica. Se $\mathcal{M}$ è il numero di stati della catena allora, per il teorema spettrale, la matrice $\mathbf{S}$ ha $\mathcal{M}$ autovalori reali e può essere diagonalizzata da una matrice ortogonale. Ordiniamo gli autovalori $\left\{\lambda_{(m)}\right\}_{m=1,\ldots,\mathcal{M}}$ dal più grande al più piccolo in valore assoluto e indichiamo con $\left\{\mathbf{u}^{(m)}\right\}_{m=1,\ldots,\mathcal{M}}$ i rispettivi autovettori associati che formeranno la base ortonormale che diagonalizza la matrice.

$$\mathbf{S}\mathbf{u}^{(m)} = \lambda_{(m)}\mathbf{u}^{(m)} \;\longrightarrow\; S_{ab} = \sum_{m=1}^{\mathcal{M}} u_a^{(m)} u_b^{(m)} \lambda_{(m)} \;\longrightarrow\; P_{ab} = \sum_{m=1}^{\mathcal{M}} \rho_a^{-1} u_a^{(m)} \rho_b u_b^{(m)} \lambda_{(m)}$$

$$\sum_{a\in\mathcal{X}} u_a^{(m)} u_a^{(m')} = \delta_{mm'}$$

Poiché, dopo un tempo t,

$$\left(\mathbf{P}^t\right)_{ab} = \rho_a^{-1} \left(\mathbf{S}^t\right)_{ab} \rho_b,$$

allora

$$\left(\mathbf{P}^t\right)_{ab} = \sum_{m=1}^{\mathcal{M}} \rho_a^{-1} u_a^{(m)} \rho_b u_b^{(m)} \lambda_{(m)}^{(t)} = \lambda_{(1)}^{(t)} \left[\rho_a^{-1} u_a^{(1)} \rho_b u_b^{(1)} + \sum_{m=2}^{\mathcal{M}} \rho_a^{-1} u_a^{(m)} \rho_b u_b^{(m)} \left(\frac{\lambda_{(m)}}{\lambda_{(1)}}\right)^t\right].$$

È evidente che gli autovalori della matrice $\mathbf{P}$ coincidono con quelli della matrice $\mathbf{S}$. Poiché la catena è ergodica, affinché $\left(\mathbf{P}^t\right)_{ab}$ converga a π_b, deve valere

$$1 = \lambda_{(1)} > \left|\lambda_{(2)}\right| \geq \left|\lambda_{(3)}\right| \geq \cdots \geq \left|\lambda_{(\mathcal{M})}\right| \geq 0. \quad u_a^{(1)} = \rho_a$$

$$\left(\mathbf{P}^t\right)_{ab} = \pi_b + \sqrt{\frac{\pi_b}{\pi_a}} \sum_{m=2}^{\mathcal{M}} u_a^{(m)} u_b^{(m)} \lambda_{(m)}^{(t)} \overset{t\to\infty}{\longrightarrow} \pi_b$$

Nel nostro caso l'autovalore 1 è unico e non degenere. In generale però la struttura di una catena di Markov finita si riflette fedelmente sulla struttura degli autovalori di modulo 1 e sui rispettivi autovettori (in generale più autovalori uguali ad 1 corrispondono a catene riducibili o decomponibili e, nel caso di catene periodiche con periodo T, esistono T autovalori λ_j di modulo 1 nella forma $\lambda_j = \exp\left(2\pi i \left(j-1\right)/T\right)$ [23]). Il calcolo precedente mostra quindi come evolve nel tempo una distribuzione iniziale $\mu^{(0)}$ nel caso di catene reversibili.

$$\mu_b^{(t)} = \sum_{a\in\mathcal{X}} \mu_a^{(0)} \left(\mathbf{P}^t\right)_{ab} \overset{t\to\infty}{\simeq} \pi_b + C \cdot e^{-t/\tau} \left(1 + \mathrm{O}\left(\left|\frac{\lambda_{(3)}}{\lambda_{(2)}}\right|^t\right)\right) \qquad \frac{1}{\tau} = \log\left(\frac{1}{\left|\lambda_{(2)}\right|}\right)$$

L'idea intuitiva (per altro giusta!) è che τ indichi più o meno il rate con la quale la catena converge alla misura invariante. Dopo un tempo $k\tau$, infatti, la differenza tra la distribuzione degli stati e e quella invariante della catena sarà di ordine e^{-k} e τ è quindi un indice del *tempo di rilassamento all'equilibrio* della catena. Per formalizzare al meglio il problema della convergenza all'equilibrio occorre introdurre però alcune semplici nozioni. Precisiamo intanto il modo con cui valutare la vicinanza o meno di due distribuzioni.

Definition. *La Distanza in Variazione Totale* $\|\mu - \nu\|_{TV}$ *tra due distribuzioni di probabilità* $\mu, \nu \in \Omega$ *è definita come:*

$$\|\mu - \nu\|_{TV} := \frac{1}{2} \sum_{a \in \mathcal{X}} |\mu_a - \nu_a| = \max_{A \subseteq \mathcal{X}} |\mu_A - \nu_A| \quad \textit{con} \quad \mu_A = \sum_{a \in A} \mu_a$$

La seconda uguaglianza può essere facilmente dimostrata [25]. Tale definizione di distanza è opportuna in quanto ci assicura di esplorare tutto lo spazio $\mathcal{X}$ prima di considerare due distribuzioni effettivamente "vicine". Se la catena è ergodica ovviamente:

$$\left\| \left(\mathbf{P}^t\right)_{a\cdot} - \pi \right\|_{TV} = \frac{1}{2} \sum_{b \in \mathcal{X}} \left| \left(\mathbf{P}^t\right)_{ab} - \pi_b \right| \overset{t \to \infty}{\longrightarrow} 0 \quad \forall a \in \mathcal{X},$$

$$\left\| \mu \mathbf{P}^t - \pi \right\|_{TV} = \frac{1}{2} \sum_{b \in \mathcal{X}} \left| \sum_{a \in \mathcal{X}} \mu_a \left(\mathbf{P}^t\right)_{ab} - \pi_b \right| \overset{t \to \infty}{\longrightarrow} 0 \quad \forall \mu \in \Omega$$

Per valutare il tempo necessario affinché la catena converga dobbiamo chiederci quanta differenza dalla distribuzione stazionaria possiamo tollerare.

Definition. *Sia* μ *una qualunque distribuzione di probabilità su* $\mathcal{X}$*. Il tempo di mixing* $\tau_{mix}(\epsilon)$ *di una catena di Markov è definito come:*

$$\tau_{mix}(\epsilon) := \inf \left\{ t : \max_{a \in \mathcal{X}} \left\| \left(\mathbf{P}^t\right)_{a\cdot} - \pi \right\|_{TV} \leq \epsilon \right\} = \inf \left\{ t : \max_{\mu \in \Omega} \left\| \mu \mathbf{P}^t - \pi \right\|_{TV} \leq \epsilon \right\}.$$

In pratica ci stiamo assicurando che, per qualunque distribuzione iniziale μ e nella peggiore delle ipotesi, dopo un tempo $\tau_{mix}(\epsilon)$, l'evoluta della distribuzione di partenza sarà sicuramente distante dalla misura invariante per meno della soglia fissata ϵ. Per ragioni storiche il valore di soglia $\epsilon = 1/4$ è quello più comunemente utilizzato ma, come vedremo, scelte diverse risultano praticamente irrilevanti.

3.1.5 Spectral gap

Mostreremo ora come il secondo autovalore più grande in valore assoluto della matrice di transizione contenga tutta l'informazione necessaria per valutare la velocità di convergenza all'equilibrio di una catena di Markov. Più precisamente, se $\lambda_{(m)}$ sono gli autovalori di $\mathbf{P}$ definiamo *spectral gap* Λ:

$$\Lambda = 1 - \lambda_* \qquad \left|\lambda_{(m)}\right| \leq \lambda_* = \max_{m \geq 2} \left|\lambda_{(m)}\right|.$$

In virtù di questa definizione, riprendendo il calcolo precedente sulla catene reversibile, possiamo affermare che:

$$\left| \frac{\left(\mathbf{P}^t\right)_{ab}}{\pi_b} - 1 \right| \leq \frac{1}{\sqrt{\pi_a \pi_b}} \sum_{m=2}^{M} \left| u_a^{(m)} u_b^{(m)} \lambda_{(m)}^{(t)} \right| \leq \frac{1}{\sqrt{\pi_a \pi_b}} \lambda_*^t \sum_{m=2}^{M} \left| u_a^{(m)} \right| \left| u_b^{(m)} \right|.$$

Gli $u_a^{(m)}$ (con $u_a^{(1)} = \sqrt{\pi_a}$) non sono niente altro che gli elementi della matrice ortogonale che diagonalizza la matrice simmetrica $\mathbf{S}$.

$$\sum_{m=1}^{M} u_a^{(m)} u_b^{(m)} = \sqrt{\pi_a \pi_b} + \sum_{m=2}^{M} u_a^{(m)} u_b^{(m)} = \delta_{ab}.$$

Questa proprietà insieme alla disuguaglianza di Cauchy-Schwartz $\vec{u} \cdot \vec{v} \leq |\vec{u}|\,|\vec{v}|$ permette di mostrare che:

$$\left|\frac{(\mathbf{P}^t)_{ab}}{\pi_b} - 1\right| \leq (1-\Lambda)^t \frac{1}{\sqrt{\pi_a \pi_b}} \sqrt{\sum_{m=2}^{M} \left|u_a^{(m)}\right|^2} \sqrt{\sum_{m=2}^{M} \left|u_b^{(m)}\right|^2} \leq$$

$$\leq (1-\Lambda)^t \sqrt{\frac{1-\pi_a}{\pi_a}} \sqrt{\frac{1-\pi_b}{\pi_b}} \leq (1-\Lambda)^t \frac{1}{\sqrt{\pi_a \pi_b}} \leq \frac{(1-\Lambda)^t}{\pi_{min}} \qquad \pi_{min} = \min_{a \in \mathcal{X}} \pi_a$$

Utilizzando la definizione di tempo di mixing allora:

$$\max_{a \in \mathcal{X}} \left\| (\mathbf{P}^t)_{a\cdot} - \pi \right\|_{TV} \leq \frac{1}{2} \frac{(1-\Lambda)^t}{\pi_{min}}$$

$$\tau_{mix}(\epsilon) \leq \inf \left\{ t : \frac{1}{2} \frac{(1-\Lambda)^t}{\pi_{min}} \leq \epsilon \right\} = \frac{\log(1/(2\pi_{min}\epsilon))}{\log(1/(1-\Lambda))}$$

Valutiamo ora il tempo di mixing nel caso in cui lo spectral gap assuma alcuni valori limite.

$$\tau_{mix}(\epsilon) \leq \frac{\log(1/2\pi_{min}\epsilon)}{\log(1/(1-\Lambda))} \quad \simeq \quad \begin{cases} \mathrm{O}\left(|\log\delta|^{-1}\right) \xrightarrow{\delta \to 0} 0 & \Lambda = 1-\delta \\ C/\Lambda & \Lambda \ll 1 \end{cases}$$

Questa stima mostra che sicuramente la velocità di convergenza aumenta al crescere di Λ. Quello che però non è ancora chiaro è se il tempo di mixing diverge quando $\Lambda \to 0$. Si rende necessaria una stima dal basso. Innanzitutto è facile verificare che gli autovettori destri $\phi^{(m)}$ della matrice $\mathbf{P}$ si possono ottenere facilmente dagli autovettori $\mathbf{u}^{(m)}$ della matrice simmetrica $\mathbf{S}$.

$$\mathbf{P}\phi^{(m)} = \lambda_{(m)}\phi^{(m)} \qquad \phi_a^{(m)} = u_a^{(m)}/\sqrt{\pi_a} \qquad \phi_a^{(1)} = 1 \;\; \forall a \in \mathcal{X}$$

$$\sum_{a \in \mathcal{X}} \phi_a^{(m)} \pi_a = \sum_{a \in \mathcal{X}} u_a^{(m)} u_a^{(1)} = \delta_{m\,1}$$

Se definiamo $\|f\|_\infty = \max_{a \in \mathcal{X}} |f_a|$ allora, $\forall m \neq 1$,

$$\left|\phi_a^{(m)}\right| \left|\lambda_{(m)}\right|^t = \left| \sum_{b \in \mathcal{X}} (\mathbf{P}^t)_{ab} \, \phi_b^{(m)} \right| \leq \sum_{b \in \mathcal{X}} \left| (\mathbf{P}^t)_{ab} - \pi_b \right| \left|\phi_b^{(m)}\right| \leq 2 \left\|\phi^{(m)}\right\|_\infty \max_{a \in \mathcal{X}} \left\| (\mathbf{P}^t)_{a\cdot} - \pi \right\|_{TV}.$$

Scegliendo a in modo che $\left|\phi_a^{(m)}\right| = \left\|\phi^{(m)}\right\|_\infty$ e usando la definizione di tempo di mixing possiamo finalmente ricavare

$$\left|\lambda_{(m)}\right|^{\tau_{mix}(\epsilon)} \leq 2\epsilon \;\longrightarrow\; \tau_{mix}(\epsilon) \geq \frac{\log(1/2\epsilon)}{\log(1/\lambda_*)}$$

Combinando questo risultato con il precedente si giunge finalmente a dimostrare, per lo meno nel caso di catene reversibili, l'intima connessione, del tempo di mixing con lo spectral gap della matrice di transizione.

$$\frac{\log(1/2\epsilon)}{\log(1/(1-\Lambda))} \;\leq\; \tau_{mix}(\epsilon) \;\leq\; \frac{\log(1/2\epsilon) + \log(1/\pi_{min})}{\log(1/(1-\Lambda))}$$

3.1.6 Bottleneck method

Lo spectral gap può essere calcolato solo in alcuni casi particolari. Nei casi più interessanti invece ricavarne anche solo una stima decente è un problema di difficile soluzione. È interessante mostrare come lo spectral gap possa essere ricavato, almeno in linea di principio, come soluzione ad un principio variazionale.

Definition. *Sia* $\mathbf{P}$ *la matrice di transizione di una catena ergodica reversibile ed* f *una qualunque funzione sullo spazio* $\mathcal{X}$ *L'espressione*

$$\mathcal{D}(\mathbf{f}) := \frac{1}{2} \sum_{a,b \in \mathcal{X}} |f_a - f_b|^2 \pi_a P_{ab}$$

è chiamata **forma di Dirichlet** *associata alla catena.*

Vogliamo ora dimostrare il seguente teorema.

Theorem. *Siano* $1 = \lambda_{(1)} > \lambda_{(2)} \geq \cdots \geq \lambda_{(\mathcal{M})} > -1$ *gli autovalori della matrice di transizione di una catena ergodica e reversibile ordinati dal più grande al più piccolo e sia* $Var_\pi(\mathbf{f})$ *la varianza di* $\mathbf{f}$ *rispetto alla misura* π*.*

$$Var_\pi(\mathbf{f}) := \sum_{a \in \mathcal{X}} \pi_a f_a^2 - \left(\sum_{a \in \mathcal{X}} \pi_a f_a \right)^2$$

Per qualunque scelta di $\mathbf{f}$ *tale che* $Var_\pi(\mathbf{f}) \neq 0$ *la seguente espressione è vera.*

$$1 - \lambda_{(2)} = \min_{\mathbf{f}} \left\{ \frac{\mathcal{D}(\mathbf{f})}{Var_\pi(\mathbf{f})} \right\} \leq \frac{\mathcal{D}(\mathbf{f})}{Var_\pi(\mathbf{f})} =: \mathcal{E}(\mathbf{f})$$

Adattiamo la dimostrazione di questo teorema [26] solo nel caso di una catena reversibile. Se riprendiamo i conti precedenti ed indichiamo con $g_a = \sqrt{\pi_a} f_a$ è facile verificare intanto le seguenti uguaglianze.

$$\mathcal{D}(\mathbf{f}) = \sum_{a,b \in \mathcal{X}} g_a \left[\delta_{ab} - S_{ab} \right] g_b = (\mathbf{g}, (\mathbf{I} - \mathbf{S}) \mathbf{g}) \qquad (\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{a \in \mathcal{X}} x_a y_a$$

$$Var_\pi(\mathbf{f}) = \sum_{a \in \mathcal{X}} g_a \left[\delta_{ab} - \sqrt{\pi_a}\sqrt{\pi_b} \right] g_b = (\mathbf{g}, (\mathbf{I} - \mathbf{A}) \mathbf{g}) \qquad A_{ab} = \sqrt{\pi_a}\sqrt{\pi_b}.$$

Cambiamo ora la base in quella formata dagli autovettori della matrice simmetrica $\mathbf{S}$ e scriviamo $\mathbf{g}$ in termine delle nuove coordinate.

$$\mathbf{g} = \sum_{m=1}^{\mathcal{M}} c_m \mathbf{u}^{(m)}$$

Poiché la nuova base è ortonormale e $\lambda_{(1)} = 1$ con $u_a^{(1)} = \sqrt{\pi_a}$ la dimostrazione del teorema diventa immediata.

$$\mathcal{E}(\mathbf{f}) = \frac{\mathcal{D}(\mathbf{f})}{Var_\pi(\mathbf{f})} = \frac{\sum_{m=2}^{\mathcal{M}} c_m^2 \lambda_{(m)}}{\sum_{m=2}^{\mathcal{M}} c_m^2} \geq 1 - \lambda_{(2)}$$

È importante sottolineare che, se $\lambda_{(2)}$ non è il secondo autovalore più grande in valore assoluto (può capitare, infatti, che ci sia un autovalore più vicino a -1 di quanto non lo sia $\lambda_{(2)}$ ad 1), il minimo della $\mathcal{E}(\mathbf{f})$ non coincide più con lo spectral gap ma rimane comunque un upper bound per lo stesso.

$$\Lambda \leq 1 - \lambda_{(2)} \leq \mathcal{E}(\mathbf{f})$$

Se fosse possibile, un'idea potrebbe essere quella di studiare la catena solo a tempi pari in modo che la matrice di transizione iterata due volte $\mathbf{P}_{(2)} = \mathbf{P}^2$ contenga solo autovalori positivi. Abbiamo appena visto quindi che, per qualunque funzione $\mathbf{f}$ tale che $Var_\pi(\mathbf{f}) \neq 0$, è possibile ottenere una stima inferiore del tempo di mixing.

$$\tau_{mix}(\epsilon) \geq \frac{\log(1/2\epsilon)}{\log(1/(1-\mathcal{E}(\mathbf{f})))}$$

L'idea è quella di scegliere astutamente la $\mathbf{f}$ in modo che la $\mathcal{E}(\mathbf{f})$ possa essere calcolata più facilmente ed incrociare le dita sperando che la stima non sia troppo "generosa". Consideriamo un sottoinsieme $S \subseteq \mathcal{X}$, indichiamo con S^c il suo complementare ($S \cup S^c = \mathcal{X}$ e $S \cap S^c = \emptyset$) e prendiamo come funzione di prova $\mathbf{f}$ proprio la funzione caratteristica di questo sottoinsieme.

$$f_a = \mathbb{1}_S(a) = \begin{cases} 1 & \text{se } a \in S \\ 0 & \text{se } a \notin S \end{cases}$$

Questa scelta permette di scrivere $\mathcal{E}(\mathbf{f})$ in termini di alcune grandezze significative. Innanzitutto ricaviamo la forma di Dirichlet e $Var_\pi(\mathbf{f})$,

$$\mathcal{D}(\mathbf{f}) = \sum_{a\in S} \pi_a \left[1 - \sum_{b\in S} P_{ab}\right] = \sum_{a\in S}\sum_{b\in S^c} \pi_a P_{ab} = Q(S)$$

$$Var_\pi(\mathbf{f}) = \sum_{a\in S}\pi_a - \left[\sum_{a\in S}\pi_a\right]^2 = \pi(S)(1-\pi(S)) \qquad \pi(S) = \sum_{a\in S}\pi_a.$$

$Q(S)$ in pratica non è altro che la probabilità di uscire da S in condizioni di equilibrio. Se scegliamo S in modo che $\pi(S) < 1/2$ allora è facile verificare che vale anche la seguente disuguaglianza

$$\mathcal{E}(\mathbf{f}) = \frac{Q(S)}{\pi(S)(1-\pi(S))} = \Phi'(S) \;\leq\; 2\frac{Q(S)}{\pi(S)} = \Phi(S).$$

Per interpretare questo risultato osserviamo intanto che, in termini di ensemble, $\Phi(S)$ indica la percentuale di sistemi in S che, all'equilibrio ed in un passo, sfuggono da S stesso. Minimizzare $\Phi(S)$ significa quindi andare a cercare i "colli di bottiglia" e cioè quei sottoinsiemi di stati dai quali è più difficile uscire.

$$\Lambda \leq \min_{S\subseteq\mathcal{X}} \Phi'(S) \;=\; I' \;\;\leq\;\; I \;=\; \min_{S\subseteq\mathcal{X}} \Phi(S)$$

I e I' sono chiamate *costanti isoperimetriche*. Più I è piccola più la presenza di questi sottoinsiemi tende a rallentare la convergenza ed una loro sovrastima permette di ricavare quindi un limite inferiore al tempo di mixing. Vogliamo adesso presentare un semplice esempio in grado di illustrare la questione. Consideriamo il seguente modello formato da n spin di Ising,

$$\mathcal{H}(\sigma) = -\frac{1}{n}\sum_{1\leq i<j\leq n}\sigma_i\sigma_j.$$

L'interazione è ferromagnetica e a lungo raggio ed il modello è praticamente quello di Curie-Weiss. Il fattore $1/n$ serve per ottenere un limite termodinamico finito. L'hamitoniana è simmetrica rispetto all'inversione di tutti gli spin e dipende esclusivamente dal modulo della magnetizzazione $M = \sum_{i=1}^n \sigma_i = nm$. Se però aggiungiamo un piccolo campo magnetico esterno h possiamo rompere la simmetria. La densità di energia a questo punto vale circa $e(m) = -m(h+m/2)$ e presenta due minimi nei pressi di $m = \pm 1$ ed un massimo in $m = -h$.

Valutiamo ora la funzione di partizione nel caso di $n \gg 1$.

$$\mathcal{Q}(\beta) = e^{-\beta n f(\beta)} = \int_{-1}^{1} dx\; e^{n g(x)}$$

$$\text{con } g(x) = S\left(\frac{1+x}{2}\right) + \beta h x + \frac{1}{2}\beta x^2 \quad \text{e } S(y) = -y\log y - (1-y)\log(1-y)$$

Adesso possiamo stimare il tutto con il massimo dell'esponente

$$-\beta f(\beta) = \max_{x\in[-1,1]} g(x) = g(m),$$

ma dobbiamo studiare il segno delle derivate

$$g'(x) \geq 0 \;\longrightarrow\; x \leq \tanh[\beta(h+x)]$$

$$g''(x) \geq 0 \;\longrightarrow\; \begin{cases} \text{mai} & \text{se } T > 1 \\ |x| \leq \sqrt{1-T} & \text{se } T < 1 \end{cases}$$

Nella zona di alte temperature $T \gg 1$ ho un unico punto di sella, metà degli spin sono orientati in un verso e la densità di magnetizzazione è pressoché nulla. Appena $T < 1$ però la $g(x)$ presenta due massimi che si spostano verso $m = \pm 1$ mano a mano che la temperatura diminuisce. Lo stato fondamentale coincide con quello in cui tutti gli spin sono orientati nella direzione di h ma è ovvio che, se dovessi trovarmi nel bacino d'attrazione dell'altro minimo, devo superare la barriera d'energia di ordine $\mathrm{O}(n)$ che si trova nei pressi di $m \simeq 0$ per cadere dentro lo stato fondamentale. Siamo quindi in presenza di uno stato metastabile. Se consideriamo un Metropolis in cui flippo uno spin alla volta, il collo di bottiglia è rappresentato proprio dalla possibilità di "saltare" dall'insieme S delle configurazioni che hanno magnetizzazione $M < 0$ a quello S^c che contiene invece le configurazioni che hanno $M \geq 0$. Poiché la probabilità di transizione è diversa da zero solo tra stati che differiscono solo di uno spin allora è possibile raggiungere S_c solo partendo da uno stato di magnetizzazione $M = -2$ e $Q(S)$ può essere quindi facilmente calcolata. Se chiamiamo π_M il peso totale delle configurazioni di magnetizzazione M e con E_M il valore dell'energia di tali configurazioni allora

$$Q(S) = \pi_{-2}\frac{n/2}{n}\exp\{-\beta(E_0 - E_2)\} \simeq \frac{1}{2}\exp\{n(\beta f(\beta) + g(0))\} = \frac{1}{2}e^{-nC(\beta)}$$

e $C(\beta)$ è una quantità sicuramente positiva poiché $-\beta f(\beta)$ è il massimo della $g(x)$. Osserviamo adesso che, se $h = 0$, gli stati di magnetizzazione M e $-M$ hanno, per simmetria, lo stesso peso. Se adesso prendo h abbastanza piccolo in modo che, ad esempio, $1/3 < \pi(S) < 1/2$, allora

$$\Lambda \leq 2\frac{Q(S)}{\pi(S)} \leq 3e^{-nC(\beta)}.$$

Abbiamo dimostrato quindi che il tempo di mixing, proprio come ci aspettavamo, cresce esponenzialmente con la taglia del sistema.

3.1.7 Reti elettriche & catene di Markov

La tecnica dei colli si bottiglia è una maniera semplice che permette di ottenere però solo una stima inferiore al tempo di mixing. Spiegandolo in maniera poco ortodossa: con tale stima possiamo solo affermare che la convergenza all'equilibrio è "più lenta di Tizio" e mai che è "più veloce di Caio". Per poter cercare di rispondere alla seconda domanda però le cose si fanno un po' più complicate. L'idea principale si basa sull'analogia che si può stabilire tra i cammini aleatori e i circuiti elettrici come descritto, ad esempio, nel bellissimo [13]. Consideriamo una catena di Markov reversibile tra gli stati $a \in \mathcal{X}$. Sia $\mathbf{P}$ la sua matrice di transizione e π la sua misura invariante. Immaginiamo adesso di costruire un circuito elettrico i cui nodi sono gli stati della catena ed inserire tra ogni coppia di nodi a e b una conduttanza (l'inverso della resistenza) pari a $c_{ab} := \pi_a P_{ab} = c_{ba}$. Una volta stabilite le condizioni al contorno, inserendo ad esempio un generatore di tensione tra due nodi (indichiamoli con A e B e definiamo $\partial\mathcal{X} := \{A, B\}$ e $\overline{\mathcal{X}} = \mathcal{X} \setminus \partial\mathcal{X}$), per ricavare la corrente $\mathbf{i}$ che circola tra le maglie del circuito dobbiamo risolvere il problema di Dirichlet e trovare il potenziale di equilibrio $\mathbf{v}$ che coinciderà con l'unica funzione armonica che soddisfa le condizioni al contorno. A questo punto la corrente che scorre dal nodo a al nodo b deve seguire la legge di Ohm

$$i_{ab} = c_{ab}(v_a - v_b) = -i_{ba} \quad \forall\, a, b \in \mathcal{X}$$

e verificare il primo principio di Kirchoff

$$i_a := \sum_{b \in \mathcal{X}} i_{ab} = 0 \quad \forall\, a \in \overline{\mathcal{X}}.$$

L'osservazione importante è che l'energia dissipata w_{ab} dalla resistenza $r_{ab} := c_{ab}^{-1}$ deve valere

$$w_{ab} = (v_a - v_b)^2\, i_{ab} = c_{ab}\,(v_a - v_b)^2 = r_{ab}\, i_{ab}^2 = w_{ba}.$$

e che quindi l'energia dissipata dall'intero circuito W ha un aspetto familiare

$$W = \frac{1}{2} \sum_{a,b \in \mathcal{X}} w_{ab} = \frac{1}{2} \sum_{a,b \in \mathcal{X}} \pi_a P_{ab}\, |v_a - v_b|^2 = \mathcal{D}(\mathbf{v}).$$

È la forma di Dirichlet di $\mathbf{v}$ associata alla catena (il fattore $1/2$ serve proprio a contare solo una volta le coppie di nodi distinti). È noto ora che il potenziale d'equilibrio $\mathbf{v}$ di un circuito può essere ricavato come la soluzione ad un principio variazionale, il principio di Thomson, per cui il potenziale che si stabilisce tra i nodi di un circuito deve essere quello che, per il secondo principio della termodinamica, minimizza l'energia dissipata.

$$\mathcal{D}(\mathbf{v}) \leq \mathcal{D}(\mathbf{f}) \quad \forall \mathbf{f}$$

Definiamo un flusso $\mathbf{j}$ da A a B come una qualunque corrente che verifica il primo principio di Kirchoff

$$j_{ab} = -j_{ab} \quad \forall\, a, b \in \mathcal{X}$$

$$j_a := \sum_{b \in \mathcal{X}} j_{ab} = 0 \quad \forall\, a \in \overline{\mathcal{X}}.$$

Osserviamo intanto che

$$j_A + j_B = \sum_{a\in\mathcal{X}} j_a = \frac{1}{2}\sum_{a,b\in\mathcal{X}} (j_{ab} + j_{ba}) = 0$$

da cui $j_A = -j_B$ e che, data una qualunque funzione $\mathbf{f}$ definita sui nodi del circuito

$$\sum_{a,b\in\mathcal{X}} (f_a - f_b)j_{ab} = \sum_{a\in\mathcal{X}} \left(f_a \sum_{b\in\mathcal{X}} j_{ab} \right) + \sum_{b\in\mathcal{X}} \left(f_b \sum_{a\in\mathcal{X}} j_{ba} \right) = 2(f_A - f_B)j_A.$$

Se $j_A = 1$ si dice che il flusso $\mathbf{j}$ è unitario. Questa equazione può essere vista come una legge di conservazione dell'energia. Se $\mathbf{f} = \mathbf{v}$ e $\mathbf{j} = \mathbf{i}$ allora

$$(v_A - v_B)i_A = \mathcal{D}(\mathbf{v}).$$

Se mettiamo un generatore di tensione da 1 Volt ai capi A e B allora, per il teorema di Thèvenin, il mio circuito visto dai capi A e B è equivalente a quello formato da un generatore di 1 Volt disposto in serie con una conduttanza pari a $C_{AB}^{eff} = \mathcal{D}(\mathbf{v})$. Se invece mettiamo un generatore di corrente di 1 Ampere allora, per il teorema di Norton, il circuito visto da A e B è equivalente a quello formato da un generatore di corrente di 1 Ampere disposto in parallelo ad una resistenza pari a $R_{AB}^{eff} = \mathcal{D}(\mathbf{v})$. La conversione da un circuito Thèvenin equivalente ad uno Norton equivalente impone poi $R_{AB}^{eff} = 1/C_{AB}^{eff}$. Il principio di Thomson quindi si può tradurre nella seguente maniera

$$\frac{1}{R_{AB}^{eff}} = C_{AB}^{eff} = \mathcal{D}(\mathbf{v}) \leq \mathcal{D}(\mathbf{f}) \quad \forall\, \mathbf{f} \;\text{ con }\; f_A = 1 \text{ e } f_B = 0$$

Quindi $\mathcal{D}(\mathbf{f})$ è una stima superiore per C_{AB}^{eff} ed una stima inferiore per R_{AB}^{eff}. Dato invece un flusso unitario $\mathbf{j}$ e indicando con $\mathcal{D}^*(\mathbf{j})$ la forma di Dirichlet associata a $\mathbf{f}$ per cui vale la legge di Ohm $(f_a - f_b) = r_{ab}j_{ab}$, allora

$$\frac{1}{C_{AB}^{eff}} = R_{AB}^{eff} = \frac{1}{2}\sum_{a,b\in\mathcal{X}} r_{ab}i_{ab}^2 \leq \frac{1}{2}\sum_{a,b\in\mathcal{X}} r_{ab}j_{ab}^2 = \mathcal{D}^*(\mathbf{j}) \qquad \text{con } \mathbf{j} \text{ flusso unitario da } A \text{ a } B.$$

e $\mathcal{D}^*(\mathbf{j})$ è un upper bound per R_{AB}^{eff} e un lower bound per C_{AB}^{eff}. Vediamo adesso come possiamo utilizzare queste informazioni per ricavare una stima superiore al tempo di mixing. Il punto di partenza è la disuguaglianza di Poincareè. Se riesco a trovare un $\mathcal{T}$ tale per cui

$$Var_\pi(\mathbf{f}) \leq \mathcal{T}\mathcal{D}(\mathbf{f}) \quad \forall\, \mathbf{f}$$

allora, se ci ricordiamo che il minimo di $\mathcal{E}(\mathbf{f}) = \mathcal{D}(\mathbf{f})/Var_\pi(\mathbf{f})$ coincide proprio con lo spectral gap, deve valere

$$\mathcal{E}(\mathbf{f}) \geq \frac{1}{\mathcal{T}} \quad \forall\, \mathbf{f} \;\longrightarrow\; \frac{1}{\Lambda} \geq \mathcal{T}$$

e $\mathcal{T}$ diventa in pratica una stima superiore del tempo di mixing.

Dal principio di Thomson e dalla bilinearità di $\mathcal{D}(\mathbf{f})$ si ricava

$$|f_a - f_b|^2 \leq R_{ab}^{eff}\mathcal{D}(\mathbf{f})$$

Moltiplicando ambo i membri per $\pi_a\pi_b$ e sommando sugli stati allora

$$Var_\pi(\mathbf{f}) \leq \frac{1}{2}\sum_{a,b\in\mathcal{X}} \pi_a\pi_b R_{ab}^{eff}\mathcal{D}(\mathbf{f}).$$

Questa stima però non è molto buona. Consideriamo ad esempio un semplice cammino aleatorio unidimensionale in cui il sistema salta sul nodo alla sua destra o alla sua sinistra con probabilità 1/2. La misura stazionaria è uniforme e, se n è il numero di siti, allora il circuito elettrico è costituito da resistenze tutte uguali che valgono $r = 2n$ disposte in serie. Se facciamo che però il walker si muove su una circonferenza allora la resistenza equivalente che devo mettere tra il nodo a e il nodo $b = a + i$ si ottiene mettendo in parallelo due serie di resistenze

$$\frac{1}{R_{ab}^{eff}} = \frac{1}{ir} + \frac{1}{(n-i)r} \longrightarrow R_{ab}^{eff} = ri\left(1 - \frac{i}{n}\right).$$

Sommando su a e b si ricava

$$\mathcal{T} = \frac{1}{2n^2}\sum_{ab} R_{ab}^{eff} = \frac{1}{2}r\sum_{i=0}^{n}\frac{i}{n}\left(1-\frac{i}{n}\right) \overset{n\gg 1}{\longrightarrow} \frac{1}{6}n^2$$

ed il tempo di mixing viene quindi abbastanza sovrastimato considerato che questo semplice random walk si dovrebbe mettere in equilibrio in n passi. Prendiamo un altro esempio. Consideriamo adesso un random walk su un grafo completo $G = (V, E)$ formato da n nodi $a \in V$ in cui ad ogni passo salto da un nodo ad un altro con probabilità uniforme ($\pi_a = 1/n \;\; P_{ab} = 1/(n-1)$). Poiché ogni coppia di nodi è collegata dalla stessa resistenza $r = n(n-1)$ allora, quando inserisco il generatore di tensione da un 1 Volt tra due nodi qualunque a e b, tutti gli altri nodi si troveranno per forza allo stesso valore di potenziale. Di conseguenza tra due nodi diversi da a a e b non circola la corrente e posso non considerare la resistenza che c'è tra questi. In pratica, ogni altro nodo diverso da a e b "riceve" la corrente esclusivamente da a e la "restituisce" solo a b. La corrente in questo passaggio ha attraversato solo la serie formata da due resistenze di valore r. Il calcolo della resistenza equivalente R_{ab}^{eff} diventa quindi estremamente semplice perché a questo mi basta fare il parallelo tra la resistenza r tra a e b e $n-2$ resistenze di valore $2r$.

$$\frac{1}{R_{ab}^{eff}} = \frac{1}{r} + \frac{n-2}{2r} = \frac{1}{2(n-1)}$$

Allora

$$\mathcal{T} = \frac{1}{2}\sum_{a,b\in V}\pi_a\pi_b R_{ab} = n-1.$$

Anche in questo caso la stima superiore al tempo di mixing non è buona in quanto è evidente che questo random walk raggiunge l'equilibrio in un solo passo. In pratica quello che sembra è che la stima che si ottiene con questa tecnica pare sovrastimata di un fattore pari alla taglia del sistema. È possibile fare di meglio? Il motivo per cui il metodo precedente sovrastima troppo il tempo di mixing è dovuto al fatto che, per molti e diversi valori di a e b, può accadere $|f_a - f_b|^2 = R_{ab}^{eff}\mathcal{D}(\mathbf{f})$. Se voglio migliorare la mia stima, tra le coppie a e b per cui sussiste l'uguaglianza dovrei far scorrere più corrente possibile in modo da rendere la resistenza R_{ab}^{eff} più piccola.

Consideriamo per questo un circuito un po' diverso. Per ogni coppia a e b introduciamo una serie di pesi $w^{ab}_{xy} = w^{ab}_{yx}$ con cui modificare la conduttanza tra x e y

$$c^{ab}_{xy} = c_{xy} w^{ab}_{xy} \quad r^{ab}_{xy} = \frac{r_{xy}}{w^{ab}_{xy}}$$

e un flusso unitario da a a b $j^{ab}_{xy} = -j^{ab}_{yx}$. Valutiamo l'energia della rete così modificata su cui scorre la corrente j^{ab}_{xy}

$$\mathcal{D}^*_{ab}(\mathbf{j}^{ab}) = \frac{1}{2} \sum_{x,y \in \mathcal{X}} r^{ab}_{xy} \left(j^{ab}_{xy} \right)^2$$

Dove con $\mathcal{D}_{ab}(f)$ intendiamo la forma di Dirichlet definita sulla rete modificata. Usiamo adesso il nostro principio variazionale

$$|f_a - f_b|^2 \leq \mathcal{D}^*_{ab}(\mathbf{j}^{ab}) \mathcal{D}_{ab}(f) = \mathcal{D}^*_{ab}(\mathbf{j}^{ab}) \sum_{x,y \in \mathcal{X}} c_{xy} w^{ab}_{xy} |f_x - f_y|^2$$

Moltiplicando per $\pi_a \pi_b$ e sommando su a e b

$$Var_\pi(\mathbf{f}) \leq \frac{1}{2} \sum_{a,b \in \mathcal{X}} \pi_a \pi_b \mathcal{D}^*_{ab}(\mathbf{j}^{ab}) \sum_{x,y \in \mathcal{X}} c_{xy} w^{ab}_{xy} |f_x - f_y|^2 =$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{x,y \in \mathcal{X}} c_{xy} |f_x - f_y|^2 \sum_{a,b \in \mathcal{X}} \pi_a \pi_b w^{a,b}_{xy} \mathcal{D}^*_{ab}(\mathbf{j}^{ab}) \leq \mathcal{D}(f) \max_{x,y \in \mathcal{X}} \sum_{a,b \in \mathcal{X}} \pi_a \pi_b w^{a,b}_{xy} \mathcal{D}^*_{ab}(\mathbf{j}^{ab})$$

e quindi, in termini di disuguglianza di Poincarè

$$\mathcal{T} = \max_{x,y \in \mathcal{X}} \sum_{a,b \in \mathcal{X}} \pi_a \pi_b w^{a,b}_{xy} \mathcal{D}^*_{ab}(\mathbf{j}^{ab})$$

Questa formula è molto generale. Scelte diverse per w^{ab} e $\mathbf{j}^{ab}$ corrispondono a diverse stime conosciute. Ad esempio, scegliendo come flusso unitario semplicemente un cammino γ^{ab} da a a b e prendendo $w^{ab}_{xy} = \left| j^{ab}_{xy} \right|$ si ottiene la stima di Diaconis e Strook [27]

$$\mathcal{T} = \max_{x,y \in \mathcal{X}} \sum_{a,b \in \mathcal{X}} \pi_a \pi_b \sum_{x',y' \in \gamma^{ab}} r_{x'y'},$$

oppure, sempre con il cammino γ^{ab}, ponendo $w^{ab}_{xy} = \left| r_{xy} j^{ab}_{xy} \right|$, si ottiene la stima di Sinclair [28]

$$\mathcal{T} = \max_{x,y \in \mathcal{X}} \sum_{a,b \in \mathcal{X}} \pi_a \pi_b r_{xy} \left| \gamma^{ab} \right|,$$

3.2 Algoritmo di Jerrum ($\mathcal{J}$)

Intorno al 1992 Jerrum nel suo articolo *Large Clique Elude the Metropolis Process* [12] ha dimostrato l'andamento più che polinomiale del tempo di mixing di un semplice random walk sulle clique di un grafo. In questa sezione presenteremo l'algoritmo e ripercorreremo la dimostrazione di questo fondamentale risultato.

3.2.1 Descrizione

Vogliamo definire adesso una catena di Markov che mostreremo convergere ad una misura che è concentrata proprio sulle clique più grandi. Sia $G(V,E)$ un grafo con $|V| = n$ e $C_t \in \mathcal{K}(G)$ una sua qualunque clique e fissiamo il valore di un parametro $\lambda > 1$. La clique C_t può essere considerata come lo stato in cui si trova il sistema al tempo t La modalità con cui si passa allo stato successivo C_{t+1} è la seguente. Un nodo a caso v viene estratto uniformemente dall'insieme V.

- se $v \notin C_t$ e $(C_t \cup v) \in \mathcal{K}(G)$ si pone $C_{t+1} = C_t \cup v$

  (aggiungo un nodo con probabilità 1 se aumenta la clique),

- se $v \in C_t$ si estrae a caso un numero r dall'intervallo $[0,1)$ e se $r < 1/\lambda$ si pone $C_{t+1} = C_t \setminus v$

  (tolgo un nodo dalla clique con probabilità $1/\lambda$)

- in tutti gli altri casi si pone $C_{t+1} = C_t$.

Riassumendo, se C e C' sono due clique distinte del grafo allora la probabilità di transizione $\mathcal{P}(C \to C')$ della catena di Markov che abbiamo appena definito operativamente vale

$$\mathcal{P}\left(C \to C'\right) = \begin{cases} \frac{1}{n} & \text{se } |C' \setminus C| = 1 \text{ e } C \subset C' \\ \frac{1}{n\lambda} & \text{se } |C \setminus C'| = 1 \text{ e } C' \subset C \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

La probabilità di rimanere dove sono è definita ovviamente per complementarietà $\mathcal{P}(C \to C) = 1 - \sum_{C' \neq C} \mathcal{P}(C, C')$. È facile a questo punto verificare che la seguente distribuzione $\pi(C)$

$$\pi(C) = \frac{\lambda^{|C|}}{\mathcal{Z}} \qquad \mathcal{Z} = \sum_{C \in \mathcal{K}(G)} \lambda^{|C|}$$

soddisfa la condizione di bilancio dettagliato con la catena appena descritta.

$$\pi(C)\,\mathcal{P}\left(C \to C'\right) = \pi\left(C'\right)\mathcal{P}\left(C' \to C\right)$$

La nostra catena di Markov è dunque reversibile e converge ad una misura che, all'aumentare del parametro λ, tende a concentrarsi su clique sempre più grandi. Ma occorre essere più precisi. Se indichiamo con $\mathcal{K}_k$ l'insieme delle clique di ordine k la probabilità di "pescare" all'equilibrio una clique di ordine k vale

$$\pi(\mathcal{K}_k) = \sum_{C \in \mathcal{K}_k} \pi(C) = \frac{\sum_{C \in \mathcal{K}_k} \lambda^k}{\mathcal{Z}} = \frac{Y_k(G)\,\lambda^k}{\mathcal{Z}}.$$

Tipicamente le clique più grandi sono una frazione infinitesima delle clique totali di un grafo. Per questo motivo il forte contributo dovuto a λ grande potrebbe venire controbilanciato dall'altissimo numero di clique più piccole.

3.2.2 Termodinamica

Nel caso in cui il grafo è random $G \in \mathcal{G}(n,p)$ è possibile fare qualche stima per sapere quanto grande deve essere λ affinché la misura si concentri sulle clique massime. Occorre innanzitutto massimizzare $\pi(\mathcal{K}_k)$. È facile convincerci che, per via delle caratteristiche della quantità $Y_k(G)$, il valore massimo di $\pi(\mathcal{K}_k)$ nel caso di un grafo random si può ottenere semplicemente come soluzione alla seguente equazione

$$\frac{\pi(\mathcal{K}_{k+1})}{\pi(\mathcal{K}_k)} = \lambda \frac{Y_{k+1}(G)}{Y_k(G)} \simeq 1.$$

Abbiamo visto che le fluttuazioni delle variabili $Y_k(G)$ da un grafo all'altro tendono asintoticamente ad annullarsi non appena consideriamo clique grandi la metà di quella massima. Quindi, assumendo $k = (1+\epsilon)\log_{1/p} n$, possiamo ragionevolmente pensare di risolvere l'equazione passando ai valori medi.

$$\overline{\left(\frac{Y_{k+1}(G)}{Y_k(G)}\right)} \simeq \frac{\overline{Y_{k+1}}}{\overline{Y_k}} = \frac{n-k}{k+1}p^k = \frac{1}{\lambda} \quad \longrightarrow \quad \epsilon \simeq \frac{\log\lambda}{\log n} + \mathrm{O}\left(\frac{\log(\log n)}{\log n}\right)$$

Il conto mostra che, per sperare di concentrarsi sulle clique massime che hanno $\epsilon \simeq 1$, occorre avere $\lambda \sim n$. D'altra parte, se poniamo $\log\lambda = \beta(\mu+1)$, allora, possiamo pensare la $\mathcal{Z}$ come la funzione di partizione gran-canonica di un sistema di hamiltoniana $\mathcal{H}(C) = -|C|$ in cui n è il numero di siti di un reticolo e l'energia diminuisce all'aumentare del numero di siti occupati da particelle. Ma solo le configurazioni che formano una clique sono possibili e lo stato fondamentale coincide con la clique di ordine massimo. Una stima annealing allora può essere istruttiva per avere un'idea del tipo di termodinamica che può uscir fuori. Ponendo allora $\log\lambda = \gamma\log n$ e $k = (1+\epsilon)\log_{1/p} n$, tenendo solo i termini più grandi con $n \gg 1$ e usando il metodo del punto di sella possiamo ricavare

$$\overline{\log\mathcal{Z}} \simeq \log\overline{\mathcal{Z}} = \log\left[\sum_{k=0}^{n} \overline{Y_k} n^{\gamma k}\right] \simeq (\log n)^2 \max_{\epsilon\in[0,1)} \frac{1+\epsilon}{\log(1/p)}\left(\gamma + \frac{1}{2}(1-\epsilon)\right)$$

Come ci aspettavamo, il massimo si realizza proprio per $\epsilon = \gamma$. A questo punto però è importante fare un'osservazione. Il logaritmo della funzione di partizione cresce proporzionalmente a $\log n$ ed il limite termodinamico ha caratteristiche inusuali rispetto al caso classico. Indicando genericamente con V il volume del reticolo, se andiamo a ricavare la pressione infatti

$$\gamma PV = \frac{1}{2}(\mu+1)(1+\epsilon)^2 \log_{1/p} n.$$

Si potrebbe pensare di superare il problema considerando il volume del sistema di ordine $\log n$ invece che n. Ma perché il limite termodinamico abbia senso anche tutte le grandezze estensive devono avere lo stesso andamento. Sfortunatamente, sebbene l'energia media sembra seguire questa prescrizione come si può verificare con la solita stima annealed,

$$\mathcal{E} = \overline{\langle\mathcal{H}\rangle} \simeq -\frac{\sum_{k=1}^{n} Y_k\ \lambda^k\ k}{\overline{\mathcal{Z}}} \simeq -(1+\epsilon)\log_{1/p} n,$$

lo stesso non può dirsi per l'entropia,

$$\frac{\mathcal{S}}{\log n} = \frac{1}{2}\left(1-\epsilon^2\right)\log_{1/p} n$$

Il nostro approccio ha quindi diversi problemi. Le caratteristiche del nostro modello appaiono drasticamente diverse da quelle usuali e occorre cautela nell'interpretare i risultati termodinamici. È confortante però osservare che l'entropia è negativa non appena $\epsilon > 1$, proprio come dovrebbe essere.

3.2.3 Stima inferiore del mixing time

Per renderci conto dell'efficienza di tale algoritmo proviamo a stimare il tempo di mixing. La dimostrazione originale è riportata in [12]. Consideriamo quindi l'insieme $\mathcal{K}_k = \{C \in \mathcal{K}(G) \,:\, |C| = k\}$ delle clique di ordine k e definiamo il sottoinsieme delle m-gateways $\mathcal{M}_G$ come l'insieme di tutte quelle clique di ordine k per le quali esiste un cammino di transizioni permesse in grado di condurmi verso una clique di ordine $m > k$ passando per configurazioni di almeno $k+1$ nodi. In pratica, se $C_0 \in \mathcal{M}_G$ allora esiste una storia $(C_1, C_2, \ldots, C_t, \ldots, C_s)$ per cui $|C_t| > |C_0| = k$ e $|C_s| = m$. L'insieme delle m-gateways permette di suddividere lo spazio delle configurazioni in due partizioni disgiunte S e S^c. S è l'insieme delle clique che possono essere ottenute dalla clique vuota senza mai attraversare un m-gateway (ma $\mathcal{M}_G \subset S$) ed $S^c = \mathcal{K}(G) \setminus S$. L'osservazione importante da fare è che, se voglio sperare di ottenere una clique di ordine m, dovrò necessariamente passare per un m-gateway e questo costituisce un effettivo "collo di bottiglia" del nostro algoritmo. La probabilità di passare dall'insieme S all'insieme S^c può essere quindi ragionevolmente usata per ricavare la forma di Dirichlet con la quale ottenere un limite superiore per lo spectral gap e, di conseguenza, un limite inferiore al mixing time.

$$\Lambda \leq 2\frac{\sum_{C\in S}\sum_{C'\in S^c}\pi(C)\,\mathcal{P}(C\to C')}{\pi(S)} \qquad \pi(S) = \sum_{C\in S}\pi(C)$$

Poiché $\mathcal{P}(C \to C') \neq 0$ se e solo se $C \in \mathcal{M}_G$ possiamo limitare superiormente il numeratore con $\pi(\mathcal{M}_G)$. Considerato poi che $\mathcal{K}_k \subset S$ anche il denominatore può essere limitato inferiormente da $\pi(\mathcal{K}_k)$. Mettendo tutto insieme e ricordando che le clique di $\mathcal{M}_G$ e $\mathcal{K}_k$ hanno lo stesso ordine k (e quindi lo stesso peso λ^k) allora

$$\Lambda \leq 2\frac{|\mathcal{M}_G|}{|\mathcal{K}_k|}.$$

Se guardiamo questa espressione ci accorgiamo che non è nient'altro che la probabilità che una clique di ordine k sia un m-gateway. Nel caso di grafi random questa quantità può essere stimata col procedimento che segue. Indichiamo con $\mathcal{H}$ l'insieme di tutte le coppie (G, C) dove G è un grafo di n vertici in $\mathcal{G}(n,p)$ mentre C è una clique di ordine k di G. È possibile estrarre un elemento di $\mathcal{H}$ in maniera uniforme nella seguente maniera.

- **1** Scelgo con probabilità uniforme k nodi tra gli n disponibili.
- **2** Disegno tutti gli archi tra questi nodi formando quindi una clique di ordine k.
- **3** Connetto con un arco tutte le coppie di nodi che rimangono con probabilità p.

Indichiamo adesso con $\mathcal{Y}$ l'insieme di tutte le coppie (G, C) dove G è sempre un grafo random di n vertici mentre C stavolta è un m-gateaway di G di cardinalità k. Se prendiamo un elemento $(G, C) \in \mathcal{Y}$ allora, per definizione, deve esistere un cammino che parte da C e giunge ad una clique di ordine m senza mai passare per clique di ordine minore o uguale a k. Sia C' è la prima clique che soddisfa la condizione $|A| = a = m - k$ con $A = C' \setminus C$. Poiché $C' = A \cup (C' \cap C)$ e $|C'| > k$ e quindi $|C' \cap C| > k - a$ allora deve esistere un insieme $B \subset C$ di cardinalità $|B| = b = k - a$ tale che il grafo bipartito indotto da A e B sia completo (alla peggio mi basta prendere un sottoinsieme di b nodi in $C' \cap C$). Se estraggo un elemento (G, C) dall'insieme $\mathcal{H}$ allora si capisce che $|\mathcal{Y}| \,/\, |\mathcal{H}|$ è la probabilità che C sia un m-gateway che allora non può essere più grande della probabilità che esistano due insiemi $A \subseteq V \setminus C$ e $B \subseteq C$ tali che $|A| = a$ e $|B| = b = k - a$ e che il sottografo bipartito indotto da A e B sia completo. Questa probabilità stavolta può essere stimata passando ai valori medi. Se pesco $(G, C) \in \mathcal{H}$ allora la probabilità che a nodi di $V \setminus C$ siano collegati ad altri b nodi in C intanto è pari alla probabilità di disegnare ab archi. Considerato che ci sono $\binom{n-k}{a}$ modi di scegliere a nodi in $V \setminus C$ e $\binom{k}{b}$ di scegliere $b = k - a$ nodi in C allora, sfruttando l'approssimazione di Stirling

$$\frac{|\mathcal{Y}|}{|\mathcal{H}|} \leq \binom{n-k}{a}\binom{k}{a}p^{ab} \leq \left(\frac{e^2(n-k)kp^b}{a^2}\right)^a$$

Se $n \gg 1$, ponendo $m = (1+\epsilon)\log_{1/p} n$ e $k = (1+t\epsilon)\log_{1/p} n$ con $t \in [0,1)$ e trascurando i termini definitivamente più piccoli si ricava

$$\frac{|\mathcal{Y}|}{|\mathcal{H}|} \leq n^{-(2t-1)(1-t)\epsilon^2 \log_{1/p} n} = n^{-\Omega \log_{1/p} n}$$

Ci rimane solo da dimostrare che la stima che abbiamo ottenuto si avvicina a $|\mathcal{M}_G| / |\mathcal{K}_k|$ quando $G \in \mathcal{G}(n,p)$. Per come abbiamo definito l'estrazione di una coppia (G, C) è chiaro intanto che, passando ai valori medi, deve valere

$$\frac{\overline{|\mathcal{M}_G|}}{\overline{|\mathcal{K}_k|}} = \frac{|\mathcal{Y}|}{|\mathcal{H}|}.$$

Abbiamo visto alla fine del primo capitolo che, per quasi tutti i grafi,

$$\text{Prob}\left\{|\mathcal{K}_k| = Y_k(G) \simeq \overline{Y_k}\right\} \overset{n\to\infty}{\longrightarrow} 1$$

Possiamo allora ragionevolmente pensare di limitare inferiormente il denominatore $|\mathcal{K}_k|$ con $\overline{Y_k}/2$. Per limitare superiormente il numeratore $|\mathcal{M}_G|$ è sufficiente considerare la disuguaglianza di Markov,

$$\text{Prob}\{X \geq \alpha\} = E\left[\mathbb{1}_{X>a}\right] \leq E\left[\mathbb{1}_{X>a}\frac{X}{a}\right] \leq \frac{E[X]}{a}.$$

Scegliendo adesso una qualunque funzione polinomiale $\gamma(n)$ che diverge per $n \to \infty$ si ottiene

$$\text{Prob}\left\{|\mathcal{M}_G| \geq \gamma(n)\overline{|\mathcal{M}_G|}\right\} \leq \frac{1}{\gamma(n)}$$

e posso quindi limitare superiormente $|\mathcal{M}_G|$ con $\gamma(n)\overline{|\mathcal{M}_G|}$. In definitiva

$$\Lambda \leq 2\frac{|\mathcal{M}_G|}{|\mathcal{K}_k|} \leq 4\gamma(n)\frac{\overline{|\mathcal{M}_G|}}{\overline{|\mathcal{K}_k|}} \leq 4\gamma(n)n^{-\Omega \log_{1/p} n},$$

da cui si deduce finalmente l'andamento del tempo di mixing

$$\tau_{mix} \geq \frac{1}{4\gamma(n)} n^{\Omega \log_{1/p} n}.$$

Se $t \in (1/2, 1)$ allora l'esponente è positivo e questo significa che, quando cerchiamo clique più grandi della metà della clique massima, il numero di passi necessari a questo algoritmo per passare da una clique di ordine k ad una di ordine m cresce più che polinomialmente con la taglia del sistema. In particolare $\max_{t\in(0,1)} \Omega = \epsilon^2/8$. D'altra parte l'esperienza accumulata con i vetri di spin aveva già suggerito questo scenario. Alle temperature bassissime alle quali devo simulare il sistema per trovare clique grandi l'ergodicità viene meno ed il sistema s'intrappola in uno stato metastabile. Vogliamo rimarcare anche che, con un ragionamento solo un po' più complicato, è possibile dimostrare che lo stesso fenomeno è presente comunque anche quando clique di cardinalità molto più grande di quella teorica vengono aggiunte a mano ad istanze random [12].

Capitolo 4

Spin Glass Idea

In questo capitolo presenteremo un approccio al problema delle clique sfruttando la meccanica statistica e l'esperienza acquisita dallo studio dei vetri di spin.

4.1 Gas su reticolo & problema della clique

Vogliamo proporre adesso un modello di gas su reticolo in grado di "tradurre" il problema della massima clique nel linguaggio della fisica. La forma è del tutto analoga a quella utilizzata per studiare il problema UBQP. Le istanze tipiche con le quali cercheremo di comprendere le caratteristiche generali del problema però sono tali da rendere complicato l'uso delle tecniche standard ed introduce nuove questioni.

4.1.1 Definizioni

Sia $G = (V, E)$ un grafo con $V = \{1, 2, \dots, n\}$ e $\mathcal{X} = \{0, 1\}^n$ lo spazio di configurazioni di n variabili booleane σ_i. Diciamo che $A \subseteq V$ è il supporto di $\sigma \in \mathcal{X}$ se $\sigma_i = 1 \iff i \in A$. Per ogni configurazione $\sigma \in \mathcal{X}$ (o supporto $A \subseteq V$) vogliamo definire la seguente funzione.

$$\mathcal{H}(\sigma) = 2 \sum_{\substack{i,j \in V \\ i<j}} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - h \sum_{i \in V} \sigma_i = 2 \sum_{\substack{i,j \in A \\ i<j}} J_{ij} - h\,|A| = \mathcal{H}(A)$$

$$J_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{se} \quad \{i, j\} \in E \\ 1 & \text{se} \quad \{i, j\} \notin E \end{cases}$$

Questa è l'hamiltoniana di un gas su reticolo formato da $|V| = n$ siti in cui esiste un'interazione antiferromagnetica solo per quelle particelle del gas che occupano una coppia di siti non collegati da un edge. σ_i rappresenta quindi il numero d'occupazione del sito i; quando una particella occupa il sito i allora $\sigma_i = 1$, in caso contrario $\sigma_i = 0$. In seguito non faremo differenza tra la configurazione σ ed il suo supporto ed useremo di volta in volta la forma più conveniente. I siti i e j sono detti "vicini" se $J_{ij} = 1$. h invece è un campo esterno che tenda ad aumentare il numero delle particelle del gas e può essere interpretato come il potenziale chimico del sistema.

4.1.2 Stato Fondamentale

Vogliamo mostrare ora che, per $h < 2$, lo stato fondamentale di $\mathcal{H}(\sigma)$ è ottenuto proprio quando le particelle occupano solo i siti che formano una clique massimale. Osserviamo innanzitutto che

$$\sum_{\substack{i,j\in V\\ i<j}} J_{ij}\sigma_i\sigma_j \geq 0 \quad \forall\sigma \in \mathcal{X}.$$

Sia $\mathcal{K}(G)$ l'insieme delle clique del grafo G e $C \in \mathcal{K}(G)$. Per definizione, esiste un edge per ogni coppia di nodi $i, j \in C$ e per queste coppie vale sicuramente $J_{ij} = 0$. Se C è il supporto di σ allora

$$\sum_{\substack{i,j\in V\\ i<j}} J_{ij}\sigma_i\sigma_j = \sum_{\substack{i,j\in C\\ i<j}} J_{ij} = 0 \iff C \in \mathcal{K}(G),$$

e, di conseguenza, se $C \in \mathcal{K}(G)$ ed $A \subseteq V$ con $|A| = |C|$ allora

$$\mathcal{H}(A) \geq \mathcal{H}(C) = -h|C|.$$

Abbiamo dimostrato che, a parità di numero di particelle, le configurazioni che hanno supporto sulle clique sono quelle più favorevoli dal punto di vista energetico. Se $\omega(G)$ è la cardinalità della clique più grande di G allora

$$\mathcal{H}(C) \geq -h\omega(G) \quad \forall\, C \in \mathcal{K}(G).$$

Rimane quindi solo da dimostrare che non esiste una configurazione con più di $\omega(G)$ particelle che abbia un energia minore di $-h\omega(G)$. La dimostrazione segue dalla seguente uguaglianza con $A \cap B = \emptyset$.

$$\mathcal{H}(S = A \cup B) = \mathcal{H}(A) + \mathcal{H}(B) + 2\sum_{i\in A}\sum_{j\in B} J_{ij},$$

Se B è la clique più grande contenuta in S allora ogni nodo di A avrà almeno un edge mancante con un nodo di B per cui

$$\mathcal{H}(S) \geq \mathcal{H}(A) - h|B| + 2|A| \geq -h|B| + |A|(2-h) \geq -h\omega(G) + |A|(2-h)$$

Se $h < 2$ allora ogni possibile altra configurazione ha energia maggiore di $-h\omega(G)$ ed abbiamo così terminato la nostra dimostrazione. Se pesiamo le configurazioni con la misura di Gibbs

$$\pi(\sigma) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}}{\mathcal{Z}} \qquad \mathcal{Z} = \sum_{\sigma\in\mathcal{X}} e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}$$

allora, per $\beta \gg 1$, la misura si concentra sulle clique più grandi.

4.1.3 L'Algoritmo Metropolis ($\mathcal{M}$)

Esaminiamo adesso in maggior dettaglio l'algoritmo Metropolis che converge alla misura $\pi(\sigma)$. Sia σ la configurazione alla quale si trova il sistema ad un certo istante di tempo ed i un nodo estratto a caso ed uniformemente in V. Se indichiamo con $\sigma^{(i)}$ la configurazione che si ottiene da σ "flippando" il nodo i ($\sigma_i \to 1 - \sigma_i$), allora

$$\Delta(\sigma, \sigma^{(i)}) := \mathcal{H}(\sigma^{(i)}) - \mathcal{H}(\sigma) = (2\sigma_i - 1)\, h_i(\sigma)$$

$$h_i(\sigma) = h - 2\sum_{j\in V\setminus i} J_{ij}\sigma_j.$$

La probabilità con la quale il nodo viene flippato è quindi pari a $e^{-\beta[\Delta(\sigma,\sigma^{(i)})]_+}$ dove con $[x]_+$ indichiamo la parte positiva di x.

Se ora fissiamo la temperatura ad un valore abbastanza basso quello che segue è la descrizione di un algoritmo che può essere usato, in linea di principio, per trovare una clique massimale.

1 si sceglie la taglia m della clique da trovare e si parte da una configurazione a caso σ;

2 un nodo i viene estratto a caso con probabilità uniforme in V e si valuta la quantità $\Delta(\sigma, \sigma^{(i)})$:

- se $\Delta(\sigma, \sigma^{(i)}) \leq 0$ metto $\sigma = \sigma^{(i)}$, (l'energia non aumenta e accetto sicuramente il cambiamento),
- se $\Delta > 0$ estraggo un numero random r uniformemente nell'intervallo $[0, 1)$
  - se $r < e^{-\beta|\Delta(\sigma,\sigma^{(i)})|}$ metto $\sigma = \sigma^{(i)}$
  - altrimenti lascio la configurazione σ inalterata

  (l'energia aumenta è accetto il cambiamento solo con probabilità $e^{-\beta|\Delta(\sigma,\sigma^{(i)})|}$;

3 se σ ha supporto su una clique e $\sum_{i\in V} \sigma_i \geq m$ ho risolto il problema, altrimenti ricomincio dal punto 2.

Cosa ci aspettiamo da questo algoritmo? Considerato il tipo di hamiltoniana, la natura NP-hard del problema e l'esperienza acquisita con i vetri di spin, possiamo ragionevolmente supporre che, purtroppo, al di sotto di una certa temperatura, la dinamica rimarrà incastrata in una qualche sorta di stato metastabile. Possiamo renderci conto di come lavora l'algoritmo andando ad esaminare la modalità di transizione. Fissata una qualunque configurazione del sistema σ definiamo il supporto ed il suo complementare

$$S = \{i \in V \mid \sigma_i = 1\} \quad S_c = V \setminus S,$$

e i seguenti insiemi

$$F_l = \left\{ i \in S \mid \sum_{j\in(V\setminus i)} J_{ij}\sigma_j = \sum_{j\in(S\setminus i)} J_{ij} = l \right\}, \quad D_l = \left\{ i \in S_c \mid \sum_{j\in S} J_{ij} = l \right\},$$

$$R = F_0, \quad A = D_0.$$

Qual è il significato di tale suddivisione? Innanzitutto è evidente che l'insieme R corrisponde proprio ad una clique contenuta in S e che l'insieme A contiene tutti quei nodi per i quali esiste un edge con ogni nodo di S. Quindi, flippare un nodo di R "riduce" il size della clique, al contrario, flippare un nodo di A ne "aumenta" la cardinalità. È bene tenere presente però che R non è la clique più grande contenuta in S ma sicuramente costituirà una sua parte. Quindi, quando R aumenta o si riduce, anche la clique più grande di S aumenta o si riduce. Gli insiemi F_l e D_l, per $l \geq 1$, contengono invece quei nodi per i quali è assente l'edge con almeno un elemento di S. Togliere dall'insieme S un nodo di F_l quindi contribuisce a "formare" una clique al contrario di come aggiungere un nodo di D_l contribuisce a "distruggerla". Senza contare la possibilità di non flippare alcuno spin allora i possibili scenari sono quattro, aumentare, ridurre, formare o distruggere la clique. Possiamo stimare la probabilità che si verifichi uno scenario piuttosto che un altro. Se i è il nodo che abbiamo estratto, è possibile ricavare la probabilità che la mossa $\sigma \to \sigma^{(i)}$ sia accettata al variare dell'insieme al quale i appartiene.

$$\Delta(\sigma, \sigma^{(i)}) = \begin{cases} -(2l-h) & \text{se} \quad i \in F_l \\ (2l-h) & \text{se} \quad i \in D_l \end{cases} \longrightarrow \mathcal{P}_{accept}(\sigma \to \sigma^{(i)}) = \begin{cases} 1 & i \in A \\ e^{-\beta h} & i \in R \\ 1 & i \in F_l \quad l \geq 1 \\ e^{-\beta(2l-h)} & i \in D_l \quad l \geq 1 \end{cases}$$

È importante adesso fare un paio di osservazioni. È evidente che tutte le mosse che conducono verso una clique sono sicuramente accettate. Per questo motivo le clique possono essere pensate come una specie di bacino d'attrazione per la dinamica. Se $\beta \to \infty$ solo queste mosse sono possibili ed il mio algoritmo, dopo una brevissima transizione, si riduce in pratica a quello del Greedy (l'algoritmo che, partendo dall'insieme vuoto, aggiunge di volta in volta un nodo a caso tra quelli che formano clique con il resto della configurazione). Le transizioni meno vantaggiose invece vengono governate dal campo magnetico h e dalla temperatura β. Se scriviamo $h = 1 + \delta$ e $\lambda = e^{\beta h}$ allora possiamo cogliere le analogie tra questo Metropolis e quello proposto da Jerrum che abbiamo presentato al termine del capitolo 3.

$$\mathcal{P}_{accept}(\sigma \to \sigma^{(i)}) = \begin{cases} 1 & i \in A \cup F_l \quad l \geq 1 \\ \lambda^{-1} & i \in R \\ \leq \lambda^{-1} e^{2\beta\delta} & i \in D_l \quad\quad l \geq 1 \end{cases}$$

Il parametro δ regola la "disponibilità" del nostro algoritmo ad aggiungere un nodo saltando su configurazioni che non sono clique. Se $\delta > 0$ ($h > 1$) è più facile accettare che un nodo "distruttore" venga aggiunto piuttosto che accettare di diminuire la cardinalità della clique. Al contrario se $\delta < 0$ ($h < 1$) questa disponibilità a passare su configurazioni che non sono clique si preclude sempre più all'aumentare di β ed il nostro algoritmo diventa del tutto simile al Metropolis di Jerrum. Occorre però essere più precisi. Dobbiamo tener conto che, in entrambi gli algoritmi, il nodo da flippare viene estratto a caso. Per questo motivo le quantità più interessanti da valutare sono le seguenti.

- probabilità di aumentare la clique $\mathcal{P}_A = \frac{|A|}{V}$
- probabilità di ridurre la clique $\mathcal{P}_R = \frac{|R|}{|V|} e^{-\beta h}$
- probabilità di formare la clique $\mathcal{P}_F = \sum_{l \geq 1} \frac{|F_l|}{|V|}$
- probabilità di distruggere la clique $\mathcal{P}_D = e^{\beta h} \sum_{l \geq 1} \frac{|D_l|}{|V|} e^{-2\beta l}$
- probabilità di non fare nulla $\mathcal{P}_N = 1 - (\mathcal{P}_A + \mathcal{P}_R + \mathcal{P}_F + \mathcal{P}_D)$

Tipicamente, quando la dinamica ci ha portato ad una clique non aumentabile, i nodi "distruttori" sono notevolemente più numerosi di tutti gli altri. La probabilità di pescare un nodo di questo tipo è quindi molto vicina ad 1 e questo fatto, a meno di temperature bassissime, potrebbe riuscire a controbilanciare il contributo sfavorevole dovuto al δ negativo. Nel caso in cui il grafo sia random però è possibile ricavare una stima che mostra che ciò non succede. Sia $G \in \mathcal{G}(n, p)$ ed immaginiamo che il sistema si trovi in una configurazione che ha supporto proprio su di una clique C con $|C| = m$. Ovviamente, con le nostre definizioni, $R = C$. D_l è l'insieme di quei nodi che non hanno un edge con l nodi della clique. Vogliamo stimare questo numero con il suo valor medio.

$$\overline{|D_l|} = \overline{\sum_{i \in V \setminus C} \delta \left(\sum_{j \in C} J_{ij} - l \right)} = (n - m) \binom{m}{l} (1 - p)^l \, p^{m-l}$$

Nel nostro caso il range che dobbiamo esplorare è quello delle clique grandi almeno la metà di quella massima. Abbiamo visto nel capitolo precedente che, per $n \gg 1$, se vogliamo concentrare la misura sulle clique di cardinalità $m = (1 + \epsilon) \log_{1/p} n$, dobbiamo imporre che il parametro di Jerrum sia di ordine $\log n$. Imponendo quindi $\log \lambda = \beta h = \epsilon \log n$ allora,

$$\frac{\overline{\mathcal{P}_D}}{\overline{\mathcal{P}_R}} = \frac{n - m}{m} e^{2\beta h} p^m \left[\left(1 + \frac{1 - p}{p} e^{-2\beta} \right)^m - 1 \right] \simeq \left(\frac{1}{n} \right)^{\epsilon \frac{1-\delta}{1+\delta}} \frac{1 - p}{p} \left(1 - \mathrm{O}\left(\frac{\log n}{n} \right) \right).$$

Poiché $\delta \in (-1, 1)$ l'esponente di $1/n$ è sempre positivo e dunque, nel limite $n \to \infty$ e per qualunque scelta di δ, la possibilità di distruggere la clique rispetto al ridurla tende a 0. Il nostro algoritmo quindi è del tutto simile all'algoritmo di Jerrum che "cammina" solo sulle clique del grafo.

4.1.4 Termodinamica

Siamo interessati a valutare le proprietà del sistema all'equilibrio. Considerata la sua somiglianza con i vetri di spin siamo tentati di utilizzare le medesime tecniche cha abbiamo adottato con successo per l'UBQP problem.

Problemi con il metodo delle repliche

Il piccolo conto che segue permette di ottenere una forma tipica per la funzione di partizione media di r repliche. Sia $f(x)$ una qualunque funzione e $s_1, s_2, \dots, s_r$ r variabili che possono valere solo 0 o 1. Se $x = \sum_{a=1}^{r} s_a$ posso scrivere

$$f\left(\sum_{a=1}^{r} s_a\right) = \int dx\; f(x)\delta\left(x - \sum_{a=1}^{r} s_a\right) = \int dx\; f(x)\int \frac{dq}{2\pi} e^{iqx}\prod_{a=1}^{r}\left(1 + s_a(e^{-iq}-1)\right).$$

Definendo

$$\Sigma_t(s) = \sum_{1\le a_1 < a_2 < \dots < a_t \le r} s_{a_1}s_{a_2}\dots s_{a_t} \qquad \Sigma_0(s) = 1 \quad \Sigma_r(s) = s_1 s_2 \dots s_r,$$

allora

$$\prod_{a=1}^{r}(1+\alpha s_a) = \sum_{t=0}^{r}\Sigma_t(s)\alpha^t,$$

e quindi, con $\alpha = e^{-iq-1}$ e dopo qualche conto si ottiene

$$f\left(\sum_{a=1}^{r} s_a\right) = \sum_{t=0}^{r}\Sigma_t(s)\sum_{l=1}^{t}\binom{t}{l}(-1)^{t-l}f(l).$$

Grazie a questa uguaglianza possiamo utilizzare il metodo delle repliche. Calcoliamo la funzione di partizione gran-canonica media delle r repliche mediando sui grafi $G \in \mathcal{G}(n,p)$.

$$\mathcal{Z}_r = \sum_{\sigma^{(1)},\dots,\sigma^{(r)}\in\mathcal{X}} e^{\beta h\sum_{a=1}^{r}\sum_{i\in V}\sigma_i^{(a)}}\overline{\prod_{\substack{i,j\in V\\ i<j}} e^{-2\beta J_{ij}\sum_{a=1}^{r}\sigma_i^{(a)}\sigma_j^{(a)}}} =$$

$$= \sum_{\sigma^{(1)},\dots,\sigma^{(r)}\in\mathcal{X}} e^{\beta h\sum_{a=1}^{r}\sum_{i\in V}\sigma_i^{(a)}}\prod_{\substack{i,j\in V\\ i<j}}\left(p + (1-p)e^{-2\beta\sum_{a=1}^{r}\sigma_i^{(a)}\sigma_j^{(a)}}\right)$$

Se definiamo ora

$$v(x) = -\frac{1}{\beta}\log\left(p + (1-p)e^{-2\beta x}\right) \qquad z_t = \sum_{l=1}^{t}\binom{t}{l}(-1)^{t-l}v(l) \quad v(0) = z_0 = 0$$

allora

$$\sum_{\substack{i,j\in V\\ i<j}}\log\left(p + (1-p)e^{-2\beta\sum_{a=1}^{r}\sigma_i^{(a)}\sigma_j^{(a)}}\right) = -\beta\sum_{t=1}^{r} z_t\sum_{1\le a_1<a_2<\dots<a_t\le r}\binom{\sum_{i\in V}\sigma_i^{(a_1)}\sigma_i^{(a_2)}\dots\sigma_i^{(a_t)}}{2}$$

Se adesso introduciamo le variabili gaussiane $\{q_{a_1\ldots a_t}\}$ possiamo portare a termine il calcolo. Indichiamo con $\mathbf{S}$ l'insieme dei possibili valori di r variabili booleane $\mathbf{s} = \{s_a\}_{a=1,\ldots,r} \in \mathbf{S}$.

$$\mathcal{Z}_r = \int \prod_{t=1}^{r} \left[\prod_{1\le a_1<\cdots<a_t\le r} \left(i\sqrt{\frac{n\beta n z_t}{2\pi}} \right) dq_{a_1\ldots a_t} \right] e^{-rn\beta g_r(\mathbf{Q})}$$

$$g_r(\mathbf{Q}) = -\frac{1}{2}\sum_{t=1}^{r}(nz_t) \sum_{1\le a_1<\cdots<a_t\le r} q^2_{a_1\ldots a_t} - \frac{1}{\beta}\log \sum_{\mathbf{s}\in\mathbf{S}} e^{-\beta\mathcal{H}^{(r)}(\mathbf{s})}$$

$$\mathcal{H}^{(r)}(\mathbf{s}) = h\sum_{a=1}^{r} s_a + \sum_{t=1}^{r}(nz_t) \sum_{1\le a_1<\cdots<a_t\le r} (q_{a_1\ldots a_t} - \frac{1}{2n}) s_{a_1}\ldots s_{a_t}$$

È chiaro che solo nel caso in cui $z_t \sim \mathrm{O}\,(1/n)$ abbiamo la speranza che questo approccio ci conduca ad uno scenario familiare. Purtroppo, se $\beta \gg 1$, un piccolo sviluppo mostra che

$$z_t \sim \log p + \mathrm{O}\left(e^{-2\beta}\right)$$

e l'unico modo di mettere le cose a posto è quello di imporre $p = 1 - \alpha/n$ (se riscalo la temperatura complico ancora di più le cose). Ma d'altra parte è normale che ciò accada. In questo caso, infatti, i siti del nostro reticolo avrebbero circa α vicini, indipendentemente dal size del reticolo, localmente la struttura è ad albero ed il modello è più vicino a quello di un gas su di un reticolo di Bethe, modello del tutto diverso da quello che ci siamo prefissati di studiare e per il quale il metodo delle repliche ha già dato ottimi risultati.

Stima Annealed

Abbiamo visto che, poiché la misura si concentra sulle clique, allora il numero di particelle medio nel caso di grafi random dovrà essere dell'ordine $\log n$. Non ho quindi la possibilità di mantenere la densità di particelle costante quando, per valutare il limite termodinamico, mando il volume del reticolo all'infinito. Per cercare di aggirare questo problema allora potrebbe essere opportuno fissare il numero di particelle e lavorare nel canonico nella speranza di ottenere qualche informazione. Il conto con le repliche a questo punto sarebbe del tutto analogo ma con la differenza sostanziale di avere le $\sigma_i^{(a)}$ correlate alle $\sigma_j^{(a)}$ dal vincolo del numero delle particelle complicando notevolmente la somma sulle configurazioni. Questa volta il metodo delle repliche quindi non può esserci d'aiuto e, considerato lo stretto legame con le repliche, anche il metodo della cavità soffrirà degli stessi problemi. Noi, più umilmente, proveremo con una stima annealed tentando comunque un approccio simile a quello della cavità. Consideriamo quindi un reticolo formato da n siti su cui disporre k particelle. Indichiamo con $\mathcal{X}_k$ lo spazio delle configurazioni di k particelle e con $\mathcal{H}^{(n)}(\sigma)$ l'hamiltoniana del sistema di n siti in cui possiamo porre $h = 0$ perchè siamo nel canonico. La probabilità $\pi_k^{(n)}(\sigma)$ di pescare nel canonico una configurazione $\sigma \in \mathcal{X}_k$, vale

$$\pi_k^{(n)}(\sigma) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}^{(n)}(\sigma)}}{\mathcal{Q}_k^{(n)}(\beta)}\,\delta\left(\sum_{i\in V}\sigma_i - k\right) \qquad \mathcal{Q}_k^{(n)}(\beta) = \sum_{\sigma\in\mathcal{X}_k} e^{-\beta\mathcal{H}^{(n)}(\sigma)}$$

Adesso aggiungiamo un nuovo sito e indichiamo con τ il suo numero d'occupazione. Se indichiamo con K_i gli accoppiamenti che il nuovo sito ha con quelli vecchi l'hamiltoniana diventa

$$\mathcal{H}^{(n+1)}(\sigma,\tau) = \mathcal{H}^{(n)}(\sigma) + 2\tau\sum_{i\in V} K_i\sigma_i,$$

così la probabilità di pescare nel sistema di $n+1$ siti una configurazione (σ, τ) di $k+1$ particelle vale

$$\pi_{k+1}^{(n+1)}(\sigma, \tau) = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}^{(n+1)}(\sigma,\tau)}}{\mathcal{Q}_{k+1}^{(n+1)}(\beta)} \, \delta\left(\sum_{i\in V} \sigma_i + \tau - k - 1\right).$$

Se indichiamo con $\rho = \langle \tau \rangle_{k+1}^{(n+1)}$ il numero d'occupazione medio del nuovo sito, allora, deve valere

$$\rho = \frac{\mathcal{Q}_k^{(n)}(\beta)}{\mathcal{Q}_{k+1}^{(n+1)}(\beta)} \sum_{\sigma\in\mathcal{X}_k} \pi_k^{(n)}(\sigma) e^{-2\beta \sum_{i\in V} K_i \sigma_i}$$

e, imponendo la normalizzazione,

$$1 - \rho = \frac{\mathcal{Q}_{k+1}^{(n)}(\beta)}{\mathcal{Q}_{k+1}^{(n+1)}(\beta)},$$

da cui

$$\frac{\rho}{1-\rho} = \frac{\mathcal{Q}_k^{(n)}(\beta)}{\mathcal{Q}_{k+1}^{(n)}(\beta)} \sum_{g=0}^{k} e^{-2\beta g} \sum_{\sigma\in\mathcal{X}_k} \pi_k^{(n)}(\sigma) \, \delta\left(\sum_{i\in V} K_i \sigma_i - g\right)$$

L'approssimazione forte che vogliamo fare si basa sull'osservazione che il valore del campo di cavità dipende dai nuovi K_i mentre la $\pi_k^{(n)}(\sigma)$ dipende dai vecchi J_{ij} e quindi sembrano scorrelati. Immaginiamo adesso che $\sum_{i\in V} K_i = l$. Se pesco una configurazione $\sigma \in \mathcal{X}_k$ a caso, la probabilità $P(g)$ che il campo di cavità che agisce sul nuovo sito sia g è pari alla probabilità di aver disposto g particelle nei siti con $K_i = 1$ e le restanti $k - g$ particelle nei siti con $K_i = 0$ e quindi

$$P(g) \simeq \frac{\binom{l}{g}\binom{n-l}{k-g}}{\binom{n}{k}} = \frac{\binom{n-k}{l-g}}{\binom{n}{l}} \binom{k}{g}.$$

Abbiamo già visto che, nel caso di grafi random, quando voglio cercare clique grandi almeno la metà di quella massima il numero di particelle deve essere dell'ordine $k \sim \log(n)$. Nel nostro caso quindi $l \sim n$, $g \sim k$ e $n \gg k$. Posso allora semplificare ponendo $l = nx$ e, se $n, k \gg 1$ e fare la stima con le larghe deviazioni. Tenendo solo i termini più grandi allora

$$P(g) \simeq \binom{k}{g} \, (1-x)^k \; e^{-gS'(x)}.$$

con

$$S(x) = -x \log x - (1-x) \log(1-x) \qquad S'(x) = \log(1-x) - \log x.$$

Noi vogliamo assumere che, anche quando le σ non sono scelte a caso,

$$\sum_{\sigma\in\mathcal{X}_k} \pi_k^{(n)}(\sigma) \, \delta\left(\sum_{i\in V} K_i \sigma_i - g\right) \simeq P(g).$$

Proviamo a valutare le conseguenze di questa approssimazione ricavando l'incremento di energia libera dal sistema quando aggiungo una particella. Poiché la densità di particelle è fissata allora è ragionevole porre $\rho = k/n$. Se poi vogliamo trovare le clique su un grafo random allora mi conviene imporre $k = (1+\epsilon)\log_{1/p}(n)$. Adesso, passando ai logaritmi e tenendo solo i termini più grandi otteniamo

$$\beta \Delta F(\beta, x) := \beta(F_{k+1}(\beta) - F_k(\beta)) \simeq -k \left[\frac{\log(1/p)}{1-\epsilon} + \log\left(1 - x + xe^{-2\beta}\right) + \mathrm{O}\left(\frac{\log\log n}{\log n}\right)\right]$$

È facile convincersi che abbiamo ottenuto nient'altro che una stima annealed della funzione di partizione canonica. Ricaviamo la variazione di energia

$$\Delta E(\beta, x) := \frac{\partial\, \beta(\Delta F(\beta, x))}{\partial\, \beta} = k \left[1 + \frac{1-x}{x} e^{2\beta}\right]^{-1}$$

Quando aggiungo una particella in un certo sito l'incremento di energia corrisponde al numero di archi mancanti tra questo sito e gli altri del supporto. Per sperare di stare concentrati sulle clique dobbiamo quindi imporre che non ci siano archi mancanti e che l'energia totale del sistema si mantenga quindi minore di 2.

$$E = k\Delta E(\beta, x) < 2 \longrightarrow \beta > \log k + \frac{1}{2}\log\frac{x}{2(1-x)} - \mathrm{O}\left(\frac{1}{(\log n)^2}\right) \longrightarrow$$

$$\longrightarrow T < \frac{1}{\log k}\left[1 + \mathrm{O}\left(\frac{1}{\log k}\right)\right] =: T_c$$

$1/\log k$ è quindi l'ordine di grandezza della temperatura più alta alla quale possiamo mettere il sistema per sperare di rimanere concentrati sulle clique. Occorre adesso avere un'idea delle grandezze in gioco. Nella tabella abbiamo riportato il clique number $\omega(G)$ e le temperature "critiche" di questo algoritmo di Metropolis $T_c^{\mathcal{M}}$ e dell'algoritmo di Jerrum per cui abbiamo visto che $T_c^{\mathcal{J}} = 1/\log n$.

$G \in \mathcal{G}(n,p)$		$p = 0.5$		$p = 0.7$	
n	$T_c^{\mathcal{J}}$	$\omega(G)$	$T_c^{\mathcal{M}}$	$\omega(G)$	$T_c^{\mathcal{M}}$
128	0.2061	10	0.4343	16	0.3607
256	0.1803	12	0.4024	20	0.3339
512	0.1603	13	0.3899	23	0.3189
1024	0.1443	15	0.3693	26	0.3069
2048	0.1312	17	0.3530	29	0.2969
4096	0.1202	19	0.3396	33	0.2860
8192	0.1110	20	0.3338	36	0.2791
16384	0.1030	22	0.3235	39	0.2730
2^{18}	0.080	29	0.2970	53	0.2519
2^{20}	0.072	33	0.2860	61	0.2433
2^{30}	0.048	52	0.2531	97	0.2186

Due osservazioni sono importanti. La crescita lentissima del logaritmo (e del logaritmo del logaritmo) fa variare le temperature critiche di pochissimo tra una taglia e l'altra. Tra 100 e 100000 la temperatura critica del Metropolis si è ridotta solo di un quarto. Le ultime due righe e mezzo poi rappresentano taglie praticamente impossibili da trattare. Per memorizzare la matrice delle adiacenze di un grafo di 1 milione di nodi occorrono 64 Gigabytes di RAM (l'ordine dei nodi di un grafo random e proporzionale alla taglia del grafo, usare liste di vicini per ogni nodo può, al più, dimezzare la memoria necessaria) e non è facile trovare calcolatori con tali quantità di memoria. In definitiva, in tutti i casi praticabili, la nostra stima suggerisce che la temperatura alla quale deve lavorare l'algoritmo per essere il più efficiente possibile deve variare poco da taglia a taglia. Nel capitolo che segue vedremo che le simulazioni numeriche hanno confermato una certa validità di questo ragionamento.

4.1.5 Stima del Mixing Time

Adesso dimostreremo che il tempo di mixing di questo algoritmo Metropolis cresce più che polinomialmente con il size del grafo. La tecnica sarà quella dei colli di bottiglia. Il primo passo è quello di adattare al nostro caso la definizione di m-gateway introdotta quando abbiamo usato la stessa tecnica per stimare il tempo di mixing dell'algoritmo di Jerrum. In tutti quei casi in cui non sussisteranno ambiguità, non faremo distinzione tra una configurazione $\sigma \in \mathcal{X}$ ed il suo supporto $A \in V$. Dato $G = (V, E)$ con $|V| = n$ indichiamo con $\omega(\sigma)$ la cardinalità della clique più grande contenuta in σ. Sia $\mathcal{K}_k$ l'insieme delle clique di ordine k e $\mathcal{C}_k$ l'insieme delle configurazioni per cui

$$\mathcal{C}_k := \{\sigma \in \mathcal{X} \ : \ \omega(\sigma) = k\}.$$

Adesso diciamo che $\sigma \in \mathcal{C}_k$ è un m-gateway se esiste un cammino di transizioni permesse $\sigma = \sigma_0, \sigma_1, \ldots, \sigma_t, \ldots, \sigma_s$ per cui $\forall t > 0 \quad \sigma_t \in \cup_{l>k}\mathcal{C}_l$ e $\sigma_s \in \mathcal{C}_m$ ed indichiamo con $\mathcal{M}_G^*$ l'insieme di tutte le m-gateways. In pratica stiamo dicendo che, se $\sigma \in \mathcal{M}_G^*$, tutte le configurazioni della storia contengono una clique più grande di k. Così come abbiamo fatto per l'algoritmo di Jerrum, dividiamo adesso lo spazio delle configurazioni in due partizioni disgiunte S e S^c. S è l'insieme delle configurazioni che si possono essere dal vuoto senza mai attraversare un m-gateway (ma, al solito $\mathcal{M}_G^* \subset S$) e $S^c = \mathcal{X} \setminus S$. Il nostro collo di bottiglia consiste nel passare da S a S^c e, come da prescrizione, la probabilità che questo evento accada è una stima superiore dello spectral gap Λ della catena.

$$\Lambda \leq 2\frac{\sum_{\sigma\in S}\sum_{\sigma'\in S^c}\pi(\sigma)P(\sigma,\sigma')}{\sum_{\sigma\in S}\pi(\sigma)}$$

Poiché $P(\sigma, \sigma') \neq 0 \iff \sigma \in \mathcal{M}_G^*$ possiamo maggiorare il numeratore con $\pi(\mathcal{M}_G^*) = \sum_{\sigma\in\mathcal{M}_G^*}\pi(\sigma)$ e, considerato che $\sum_{\sigma\in S}\pi(\sigma) > \sum_{\sigma\in\mathcal{C}_k}\pi(\sigma) = \pi(\mathcal{C}_k)$ allora possiamo limitare inferiormente il denominatore con $\pi(\mathcal{C}_k)$, ottenendo

$$\Lambda \leq 2\frac{\pi(\mathcal{M}_G^*)}{\pi(\mathcal{C}_k)}.$$

Sia $\sigma \in \mathcal{C}_k$ e $\sigma_c \subseteq \sigma$ la clique più grande di ordine k contenuta in σ e indichiamo con $\overline{\sigma} = \sigma \setminus \sigma_c$. Con questa prescrizione andiamo a valutare l'hamiltoniana calcolata in σ

$$\mathcal{H}(\sigma) = \mathcal{H}(\sigma_c) + 2\sum_{\substack{i\in\overline{\sigma}\\ j\in\sigma_c}} J_{ij} + \sum_{\substack{i,j\in\overline{\sigma}\\ i\neq j}} J_{ij} - h\,|\overline{\sigma}| \quad \geq \quad \mathcal{H}(\sigma_c) + 2\sum_{\substack{i\in\overline{\sigma}\\ j\in\sigma_c}} J_{ij} - h\,|\overline{\sigma}|.$$

e usiamo la disuguaglianza per limitare il peso della configurazione σ

$$\pi(\sigma) \leq \pi(\sigma_c)e^{\beta\left(h|\overline{\sigma}|-2\sum_{\substack{i\in\overline{\sigma}\\ j\in\sigma_c}} J_{ij}\right)}.$$

La quantità

$$l_i(\sigma_c) = \sum_{j\in\sigma_c} J_{ij} \qquad \forall\, i \in V \setminus \sigma_c$$

rappresenta il numero di archi mancanti tra il nodo $i \in \overline{\sigma}$ e la configurazione σ_c e non dipende dalla scelta di $\overline{\sigma}$. Definiamo adesso con $\mathcal{A}_{\sigma_c}$ l'insieme di tutte le configurazioni $\sigma \in \mathcal{C}_k$ che contengono σ_c e valutiamo il peso statistico di questo insieme

$$\pi(\mathcal{A}_{\sigma_c}) = \sum_{\sigma\in\mathcal{A}_{\sigma_c}} \pi(\sigma) \ \leq \ \pi(\sigma_c) \sum_{\overline{\sigma}\subseteq V\setminus\sigma_c} \prod_{i\in\overline{\sigma}} e^{\beta(h-2l_i(\sigma_c))}$$

Se definiamo

$$g_l := |\{i \in V \setminus \sigma_c \ : \ l_i(\sigma_c) = l\}| \qquad \sum_{l=1}^{k} g_l = n - k$$

e pensiamo l come un livello di energia e g_l come la sua degenerazione, allora la sommatoria sulle $\overline{\sigma}$ può essere interpretata come la funzione di partizione gran-canonica di un gas di fermioni con $n-k$ siti disponibili, e quindi

$$\pi\left(\mathcal{A}_{\sigma_c}\right) \leq \pi(\sigma_c)\prod_{l=1}^{k}\left(1+e^{\beta(h-2l)}\right)^{g_l} = \pi(\sigma_c)\mathcal{Z}(\sigma_c)$$

Abbiamo voluto solo ricordare che la funzione di partizione dipende da σ_c. La sommatoria parte da $l=1$ perché, per definizione, σ_c è la clique più grande contenuta in σ e quindi ogni nodo di $\overline{\sigma}$ deve avere almeno un arco mancante con σ_c. Immaginiamo adesso che esista una funzione $Z(n)$ tale che, definitivamente, $\forall \sigma_c \in \mathcal{K}_k \;\; \mathcal{Z}(\sigma_c) < Z(n)$ e sia $\mathcal{M}_G = \mathcal{M}_G^* \cap \mathcal{K}_k$ l'insieme delle m-gateways che sono anche clique. Allora, poiché ogni clique pesa nella stessa maniera,

$$\pi(\mathcal{M}_G^*) \leq \sum_{\sigma_c \in \mathcal{M}_G} \pi\left(\mathcal{A}_{\sigma_c}\right) \leq \pi(\sigma_c)\left|\mathcal{M}_G\right| Z(n)$$

mentre, poiché $\mathcal{K}_k \subseteq \mathcal{C}_k$, allora

$$\pi(\mathcal{C}_k) \geq \pi(\mathcal{K}_k) = \pi(\sigma_c)\left|\mathcal{K}_k\right|.$$

La forma adesso è del tutto simile a quella ottenuta quando abbiamo stimato la costante isoperimetrica per l'algoritmo di Jerrum, possiamo quindi riutilizzarne il risultato nel caso di grafi random.

$$\Lambda \leq 2\frac{|\mathcal{M}_G|}{|\mathcal{K}_k|}Z(n) \leq 4\gamma(n)Z(n)n^{-\Omega \log_{1/p} n}$$

Rimane solo da dimostrare che $Z(n)$ è piccola o cresce meno velocemente di $n^{\Omega \log_{1/p} n}$ per verificare che il tempo di mixing di questo algoritmo cresce più che polinomialmente con la taglia del sistema Proviamo quindi a valutare il logaritmo di $\mathcal{Z}(\sigma_c)$. Se dentro la somma facciamo le seguenti sostituzioni $l =: kz$, $h =: k\tilde{h}$ e poniamo $k = (1+\epsilon)\log_{1/p} n$ allora

$$\log \mathcal{Z}(\sigma_c) = \sum_{l=1}^{k} g_l \log\left(1+n^{-\beta(1+\epsilon)(2z-\tilde{h})/\log(1/p)}\right)$$

Abbiamo visto che per trovare le clique dobbiamo mettere $h<2$, ma allora, visto che la somma parte da $l=1$, l'esponente di n dentro il logaritmo è sempre negativo. Vogliamo notare intanto che, se $\beta \to \infty$, allora $\mathcal{Z}(\sigma)=1$. Abbiamo già visto che la dinamica a temperatura zero del Metropolis coincide con quella del Greedy e, di conseguenza, in questo modo abbiamo ricavato una stima inferiore al tempo di mixing per tale algoritmo e coincide perfettamente con quella di Jerrum.
Per tutte le altre temperature, con $n \gg 1$, considerato che abbiamo $g_l \sim \mathrm{O}(n)$, otteniamo

$$\log \mathcal{Z}(\sigma_c) \leq n^{1-\beta(1+\epsilon)(2z-\tilde{h})/\log 1/p},$$

e, non appena la temperatura è abbastanza bassa, siamo liberi di scegliere, definitivamente, una funzione $Z(n)$ piccola quanto voglio,

$$\beta > \frac{\log 1/p}{(1+\epsilon)(2z-\tilde{h})} = \beta_0 \;\longrightarrow\; \mathcal{Z}(\sigma_c) \leq \exp\left(\frac{1}{n^{c(\beta-\beta_0)}}\right) \overset{n\gg 1}{\longrightarrow} 1.$$

4.2 L'Algoritmo di Cavity ($\mathcal{C}$)

In questa sezione presenteremo un nuovo algoritmo euristico per trovare la clique massima di un grafo che è ispirato al concetto di campo di cavità.

4.2.1 Un Hamiltoniana di coppie

Consideriamo il nostro reticolo composto da n siti ed una coppia di configurazioni $\sigma, \tau \in \mathcal{X}$ formata ognuna, al solito, da n variabili booleane. Introduciamo a questo punto la seguente hamiltoniana $\mathcal{H}_2(\sigma, \tau)$ definita sulla coppia σ, τ,

$$\mathcal{H}_2(\sigma, \tau) = \sum_{\substack{i,j \in V \\ i \neq j}} J_{ij} \sigma_i \tau_j - h \sum_{i \in V} \sigma_i \tau_i.$$

La somma $i \neq j \in V$ si estende a tutte le coppie ordinate di elementi di V (tranne $i = j$) e J_{ij} sono le stesse della sezione precedente e dipendono dal grafo. Possiamo pensare σ_i e τ_i come i numeri d'occupazione del sito i da parte di due tipi di particelle. Le particelle dello stesso tipo non interagiscono tra loro e l'energia aumenta tra particelle diverse che occupano siti "vicini" (con $J_{ij} = 1$) mentre, per via della presenza del campo $h > 0$, l'energia diminuisce quando due particelle occupano lo stesso sito.
Se definiamo $h_i(\sigma) = h\sigma_i - \sum_{j \in V \setminus i} J_{ij} \sigma_j$ allora è semplice osservare che l'hamiltoniana è simmetrica sotto l'operazione di scambio $\sigma \leftrightarrow \tau$

$$\mathcal{H}_2(\sigma, \tau) = -\sum_{i \in V} h_i(\sigma_i) \tau_i = -\sum_{i \in V} h_i(\tau) \sigma_i = \mathcal{H}_2(\tau, \sigma)$$

e che, se $\sigma = \tau$, allora $\mathcal{H}_2(\sigma, \sigma) = \mathcal{H}(\sigma)$, del tutto identica all'hamiltoniana della sezione precedente. Valutiamo adesso lo stato fondamentale.
Un semplice conto mostra che, ponendo $\sigma \cap \tau = \sigma_c$, $\sigma' = \sigma \setminus \sigma_c$ e $\tau' = \tau \setminus \sigma_c$ con $\sigma' \cap \tau' = \emptyset$, allora

$$\mathcal{H}_2(\sigma, \tau) \geq \sum_{\substack{i \in \sigma_c \\ j \in \sigma'}} J_{ij} + \sum_{\substack{i \in \sigma_c \\ j \in \tau'}} J_{ij} + \mathcal{H}(\sigma_c) \quad \forall\, \sigma, \tau \in \mathcal{X}.$$

Abbiamo visto in precedenza che, se $h < 2$, il minimo di $\mathcal{H}(\sigma_c)$ si ottiene quando σ_c è proprio una clique massimale. Di conseguenza, se poniamo $|\sigma_c| = \omega(G)$ allora, per definizione, ogni sito di σ' e τ' deve avere un arco mancante con almeno un sito di σ_c, da cui

$$\mathcal{H}_2(\sigma, \tau) \geq \left|\sigma'\right| + \left|\tau'\right| + \mathcal{H}(\sigma_c) \geq -h\omega(G).$$

È evidente a questo punto che il minimo di $\mathcal{H}_2(\sigma, \tau)$ è proprio $-h\omega(G)$ e viene assunto se e solo se σ è una clique massimale e $\sigma = \tau$. È facile mostrare poi che, fissando il numero di particelle, e cioè imponendo che $\sum_{i \in V} \sigma_i = \sum_{i \in V} \tau_i = k$ ($\sigma, \tau \in \mathcal{X}_k$), allora $\mathcal{H}_2(\sigma, \tau)$ è minima sempre quando σ e τ hanno supporto sulla stessa clique di ordine k ma indipendentemente dal valore del campo h (purchè $h > 0$).

4.2.2 Descrizione dell'algoritmo

Stavolta vogliamo provare una strada diversa. Fino a questo momento ci siamo preoccupati di mettere in piedi algoritmi Metropolis che convergevano alla misura di Gibbs. Questa volta invece vogliamo usare l'hamiltoniana $\mathcal{H}_2(\sigma, \tau)$ in una maniera un po' inusuale e servircene per definire la probabilità di transizione $P(\sigma, \tau)$ da una configurazione σ a una τ di una nuova catena di Markov imponendo però che la dinamica conservi il numero di particelle.

$$P(\sigma, \tau) = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}_2(\sigma, \tau)}}{\mathcal{Q}_\sigma(\beta)} \qquad \mathcal{Q}_\sigma(\beta) = \sum_{\tau \in \mathcal{X}_k} e^{-\beta \mathcal{H}_2(\sigma, \tau)} \qquad \sigma, \tau \in \mathcal{X}_k$$

Se a prima vista può sembrare complicato, la maniera di implementare il passo Monte Carlo che riproduce questa probabilità di transizione è invece estremamente semplice. Basta osservare che, una volta fissata la configurazione σ, le variabili τ_i sono correlare solo attraverso il vincolo delle k particelle ma la probabilità di transizione è una misura prodotto.

$$P(\sigma, \tau) \sim \prod_{i \in V} e^{\beta h_i(\sigma)\tau_i}$$

Il problema quindi si risolve mettendo di volta in volta in equilibrio termodinamico le τ_i mediante una dinamica Kawasaki.

1 Scelgo una coppia a caso i e j con $\tau_i = 1$ e $\tau_j = 0$.

2 Valuto la quantità $\Delta = h_i(\sigma) - h_j(\sigma)$,

- se $\Delta \leq 0$ scambio τ_i con τ_j
- altrimenti scambio τ_i con τ_j con probabilità $e^{-\beta\Delta}$
  (estraendo al solito un numero random uniformemente nell'intervallo $[0, 1)$).

3 Ricomincio dal punto 1.

Per qualunque valore di β la convergenza all'equilibrio di questa dinamica è notevolmente veloce. Mi basta, infatti, aspettare che tutte le coppie siano state provate per un totale, al massimo, di $k \cdot n$ passi. Adesso che abbiamo risolto il problema d'implementare la transizione cerchiamo la misura invariante alla quale converge questa catena. Consideriamo la seguente misura $\pi(\sigma)$

$$\pi(\sigma) = \frac{\mathcal{Q}_\sigma(\beta)}{\mathcal{Q}(\beta)} \qquad \mathcal{Q}(\beta) = \sum_{\sigma \in \mathcal{X}_k} \mathcal{Q}_\sigma(\beta).$$

Un semplice conto che sfrutta la simmetria di $\mathcal{H}_2(\sigma, \tau)$ mostra che questa misura $\pi(\sigma)$ verifica la condizione di bilancio dettagliato con $P(\sigma, \tau)$,

$$\pi(\sigma)P(\sigma, \tau) = \pi(\tau)P(\tau, \sigma) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}_2(\sigma,\tau)}}{\mathcal{Q}(\beta)}.$$

Di conseguenza $\pi(\sigma)$ è la misura invariante della catena. Quando $\beta \to \infty$ la somma $\mathcal{Q}_\sigma(\beta)$ sulle τ è dominata ovviamente dalle configurazioni τ che realizzano il minimo della $\mathcal{H}_2(\sigma, \tau)$ a σ fissato. Poiché abbiamo visto che, al meglio, $\mathcal{H}_2(\sigma, \tau) = -hk$ quando $\sigma_i = \tau_i$ ed il supporto è una clique, allora la misura $\pi(\sigma)$ è concentrata proprio dove vogliamo. Possiamo adesso esibire un nuovo algoritmo per cercare le clique di ordine k.

1 Si sceglie una configurazione a caso $\sigma \in \mathcal{X}_k$

2 Si calcolano i campi $h_i = h_i(\sigma)$ e si "estrae" la configurazione successiva τ con probabilità $P(\sigma, \tau)$ usando la dinamica Kawasaki.

3 Se τ ha supporto su una clique ho risolto il problema altrimenti metto $\sigma = \tau$ e ricomincio dal punto 2.

È curioso osservare che, ad ogni passo dell'algoritmo, diversi siti sono aggiornati e la dinamica può essere considerata come una versione canonica di un automa cellulare probabilistico [29].

4.2.3 Stima Annealed

Stavolta non è giusto parlare di termodinamica nel termine classico del termine. Il peso di una configurazione $\sigma \in \mathcal{X}_k$ è proporzionale a $\mathcal{Q}_\sigma(\beta)$ e non si può mettere nella forma di Gibbs $e^{-\beta\mathcal{H}(\sigma)}$. Osserviamo però che la seguente quantità

$$\Delta_\sigma(\beta) := -\frac{\partial \log \mathcal{Q}_\sigma(\beta)}{\partial \beta} = \sum_{\tau\in\mathcal{X}_k} P(\sigma,\tau)\mathcal{H}_2(\sigma,\tau)$$

contiene l'informazione sul numero medio di legami rotti tra la configurazione σ e quella successiva "estratta" dalla dinamica Kawasaki. Per scegliere la temperatura in modo da concentrarci sulle clique noi dobbiamo imporre che questa quantità, quando non è negativa, sia sempre abbastanza piccola.
Proviamo a valutarla con una stima annealed mediando sulle istanze random della classe $\mathcal{G}(n,p)$.

$$\overline{\log \mathcal{Q}_\sigma(\beta)} \simeq \log \overline{\mathcal{Q}_\sigma(\beta)}$$

Quando medio sulle istanze

$$\overline{\mathcal{Q}_\sigma(\beta)} = \overline{\sum_{\tau\in\mathcal{X}_k} e^{-\beta\mathcal{H}_2(\sigma,\tau)}} = \sum_{\tau\in\mathcal{X}_k} e^{\beta h\sum_{i\in V}\sigma_i\tau_i} \prod_{\substack{i,j\in V\\ i<j}} \overline{e^{-\beta J_{ij}(\sigma_i\tau_j+\sigma_j\tau_i)}} =$$

$$\sum_{\tau\in\mathcal{X}_k} e^{\beta h\sum_{i\in V}\sigma_i\tau_i} \prod_{\substack{i,j\in V\\ i<j}} \left(p+(1-p)e^{-\beta(\sigma_i\tau_j+\sigma_j\tau_i)}\right),$$

e, se definiamo la funzione $v(x)$ che, per $x>0$, è sempre non negativa e monotona decrescente

$$v(x) := -\frac{1}{x}\log\left(p+(1-p)e^{-x}\right) \geq 0 \quad v'(x)<0 \quad \forall\, x>0,$$

allora

$$\overline{\mathcal{Q}_\sigma(\beta)} = e^{-\beta v(\beta)k^2} \sum_{\tau\in\mathcal{X}_k} \exp\left\{\beta\left[(h+v(2\beta))\sum_{i\in V}\sigma_i\tau_i + (v(\beta)-v(2\beta))\left(\sum_{i\in V}\sigma_i\tau_i\right)^2\right]\right\}.$$

La somma si estende su tutte le configurazioni τ di k particelle, ma gli elementi della somma dipendono esclusivamente dall'overlap $q=\sum_{i\in V}\sigma_i\tau_i$ tra σ e τ. Una volta che la configurazione σ è fissata allora, per semplificare il conto, devo solo contare il numero di modi in cui posso scegliere τ in modo da avere con σ un overlap q, e dunque

$$\overline{\mathcal{Q}_\sigma(\sigma)} = e^{-\beta v(\beta)k^2} \sum_{q=0}^{k} \binom{k}{q}\binom{n-k}{k-q} \exp\left\{\beta\left[(h+v(2\beta))\,q + (v(\beta)-v(2\beta))q^2\right]\right\}$$

Come si può notare tale espressione non dipende da σ e questo significa che la stima annealed non distingue tra configurazioni diverse.
Poniamo adesso $q=kz$ e ricaviamo n dalla formula $k=(1+\epsilon)\log_{1/p} n$.
Usando la formula di Stirling e le larghe deviazioni possiamo stimare i binomi di Newton

$$\binom{n-k}{k-q} \simeq \left(\frac{e(n-k)}{k-q}\right)^{k-q} \simeq \exp\left\{k^2\left[\frac{1-z}{1+\epsilon}\log\frac{1}{p} + \mathrm{O}\left(\frac{\log\log n}{\log n}\right)\right]\right\}$$

$$\binom{k}{q} \simeq \frac{e^{kS(z)}}{\sqrt{2\pi k z(1-z)}} \qquad S(z) = -z\log z - (1-z)\log(1-z).$$

Se adesso sostituiamo la somma con un integrale e poniamo $h = k\tilde{h}$ allora

$$\overline{\mathcal{Q}_\sigma(\sigma)} = \int_0^1 dz \frac{e^{k^2 f(z)}}{\sqrt{2\pi k z(1-z)}}$$

con

$$f(z) = \frac{1-z}{1+\epsilon} \log\frac{1}{p} + \beta\left[(v(\beta) - v(2\beta))z^2 + \tilde{h}z - v(\beta)\right]$$

Al solito possiamo stimare l'integrale con il metodo del punto di sella; $f(z)$ è semplicemente una parabola. Poiché $v'(\beta) < 0$ e quindi $v(\beta) > v(2\beta)$ la funzione è convessa ed il vertice della parabola è un minimo.

Il punto di sella perciò deve essere trovato agli estremi dell'intervallo d'integrazione. Valutiamo per questo $f(0)$ in 0 e 1.

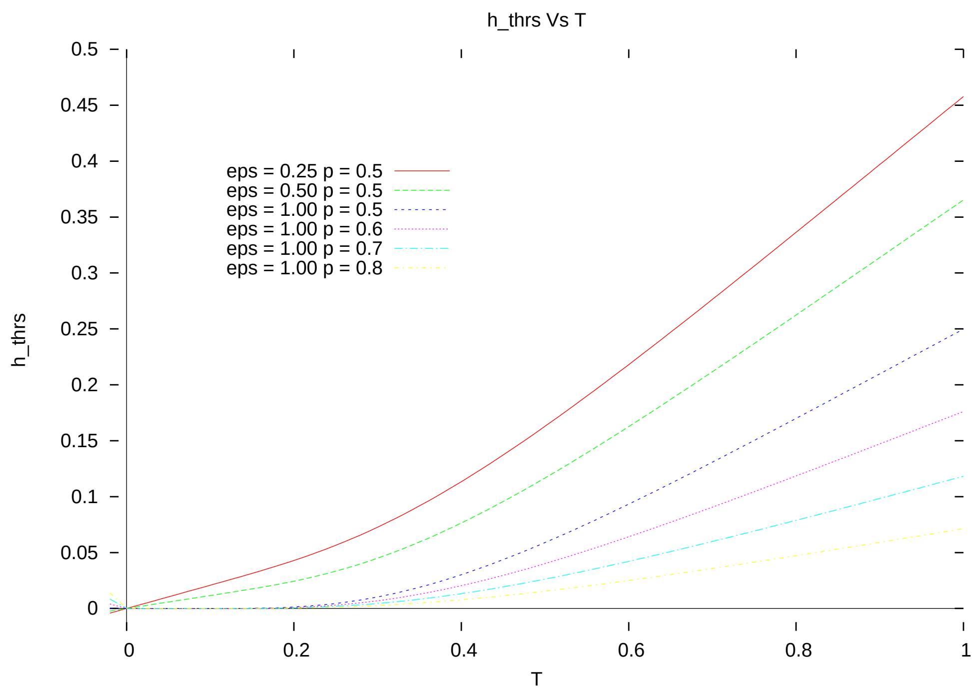
$$f(0) = \frac{1}{1+\epsilon}\log\frac{1}{p} - \beta v(\beta)$$

$$f(1) = \beta\left(\tilde{h} - v(2\beta)\right)$$

Se $f(0) > f(1)$ significa che la dinamica tenderà a spostare tutte le particelle in altri siti così che al termine del Kawasaki mi ritroverò con una configurazione completamente diversa da quella di partenza. Se $f(1) > f(0)$ invece solo poche particelle verranno spostate dai loro livelli di energia e la configurazione d'arrivo avrà una grande intersezione con σ. Quindi, una volta che la temperatura è fissata, il valore del campo esterno h è quello che stabilisce dove si trova il punto di sella. In pratica esiste una soglia h_{thrs} pari a

$$h_{thrs} = \frac{1}{\beta(1+\epsilon)}\log\frac{1}{p} - (v(\beta) - v(2\beta)) = \frac{1}{\beta k}\log n - (v(\beta) - v(2\beta))$$

che separa due diverse maniere di operare dell'algoritmo. Nella figura è mostrato l'andamento di h_{thrs} in funzione della temperatura per qualche valore di ϵ e p.



Ecco quello che accade.

- Se $\tilde{h} > h_{thrs}$ **l'algoritmo cerca le clique.**
  Questo è evidente perché abbiamo dimostrato che se $h > 0$ allora $\mathcal{H}(\sigma, \tau)$ è minima proprio quando $\tau = \sigma$ e σ è una clique.

- Se $\tilde{h} < h_{thrs}$ **l'algoritmo cerca i BCBS.**
  In questo regime possiamo utilizzare la stessa tecnica ma per risolvere su un grafo bipartito il problema del BALANCED BALANCED COMPLETE BIPARTITE SUBGRAPH ($BCBS$) che è il problema NP-completo che abbiamo presentato al termine della seconda sezione del capitolo 1. Per dimostrare questa affermazione prendiamo un grafo bipartito $G = (V_1 \cup V_2, E)$ ed il problema di trovare un $BCBS$ di almeno ordine k. Anche se il grafo è bipartito non c'è nessun problema ad usare le stesse definizioni di prima con $V = V_1 \cup V_2$. Le J_{ij} sono scelte nella stessa maniera così come l'hamiltoniana $\mathcal{H}_2(\sigma, \tau)$ con la quale definire la dinamica Kawasaki che, a basse temperatura, cercherà comunque di scegliere τ in modo che il numero di archi mancanti con σ sia il minimo possibile. Immaginiamo di partire da una configurazione $\sigma \in V_1$. Poiché sicuramente $J_{ij} = 1$ se i e j appartengono entrambi o a V_1 o a V_2, mi aspetto che le configurazioni $\tau \in \mathcal{X}_k$ che hanno molti siti in comune con σ siano particolarmente svantaggiate. Se poi $\tilde{h} < h_{thrs}$ abbiamo visto che, a maggior ragione, la dinamica tenderà a spostare tutte le particelle dai siti con $\sigma_i = 1$. Al termine del ciclo Kawasaki quindi posso ragionevolmente sperare di ottenere $\tau \in V_2$ e, poiché ho cercato di minimizzare il numero di archi mancanti, allora $\sigma \cup \tau$ potrebbe essere un $BCBS$. Questa idea di usare lo stesso algoritmo per il problema dei $BCBS$ è ancora in fase embrionale ma alcune simulazioni numeriche fatte con $h < 0$ sembrano confermare questo scenario.

Ritorniamo adesso al problema delle clique, facciamo quindi $\tilde{h} > h_{thrs}$ e ricaviamo $\Delta_\sigma(\beta)$.

$$\Delta_\sigma(\beta) = k^2 \frac{\partial\, \beta(\tilde{h} - v(2\beta))}{\partial\, \beta} = k^2 \left(\frac{1}{1 + \frac{p}{1-p} e^{2\beta}} - \tilde{h} \right)$$

Affinché una clique sia un bacino d'attrazione per la dinamica devo fare in modo di non aver legami mancanti tra σ e τ per cui, come per il Metropolis, devo imporre $\Delta_\sigma(\beta) < 2$ da cui

$$\beta > \log k + \log \left[\frac{\tilde{h}(1-p)}{p(1-\tilde{h})} \right]$$

Abbiamo ricavato in pratica la stessa temperatura ottenuta con l'algoritmo Metropolis della sezione precedente. Questo risultato è comprensibile. La maniera con cui abbiamo stimato la temperatura massima per la quale la misura rimane concentrata sulle clique è stata sempre quella di imporre di camminare su configurazioni che hanno pochissimi archi mancanti. In questa situazione, considerata la somiglianza tra le due hamiltoniane $\mathcal{H}(\sigma)$ e $\mathcal{H}_2(\sigma, \tau)$, i salti di energia che posso accettare per i due diversi algoritmi sono praticamente identici. Quindi, se per entrambi decido la stessa probabilità di transizione allora anche la temperatura da scegliere sarà uguale per tutti e due gli algoritmi. L'algoritmo di Cavity però, poiché lavora nel canonico, esplora una parte molto più piccola di configurazioni rispetto all'algoritmo Metropolis. Anche con l'hamiltoniana $\mathcal{H}(\sigma)$ è possibile fare una dinamica Kawasaki per lavorare nel canonico ma le simulazioni numeriche che abbiamo effettuato hanno mostrato inequivocabilmente che in questa maniera l'algoritmo è tutt'altro che efficace perché, alle temperature alle quali la misura è concentrata sulle clique, tende a rimanere fortemente intrappolato nelle configurazioni di bassa energia. Nella tabella della pagina seguente abbiamo riportato, per alcune diverse taglie di grafi random con densità $p = 0.5$ e $p = 0.7$, il valore della soglia kh_{thrs} quando la temperatura vale proprio $T_c = 1/\log \omega(G)$. Si vede bene che il valore assunto dalla soglia varia pochissimo all'aumentare della taglia del grafo e, tipicamente, vale circa 1 per $p = 0.5$ e 0.85 per $p = 0.7$.

$G \in \mathcal{G}(n,p)$	$p = 0.5$			$p = 0.7$		
n	$\omega(G)$	T_c	$kh_{thrs}(T_c)$	$k = \omega(G)$	T_c	$kh_{thrs}(T_c)$
128	10	0.4343	0.9944	16	0.3607	0.8686
256	12	0.4024	0.9278	20	0.3339	0.7984
512	13	0.3899	1.0362	23	0.3189	0.8139
1024	15	0.3693	0.9851	26	0.3069	0.8322
2048	17	0.3530	0.9442	29	0.2969	0.8526
4096	19	0.3396	0.9106	33	0.2860	0.8157
8192	20	0.3338	1.0115	36	0.2791	0.8402
16384	22	0.3235	0.9818	39	0.2730	0.8658
2^{18}	29	0.2970	1.0073	53	0.2519	0.8683
2^{20}	33	0.2860	0.9713	61	0.2433	0.8290
2^{30}	52	0.2531	0.9599	97	0.2186	0.8571

4.2.4 Statistica di Fermi della transizione

Iniziamo a vedere più in dettaglio cosa accade con l'algoritmo di Cavity quando mando $\beta \to \infty$. La storia $(\sigma^{(0)}, \sigma^{(1)}, \dots, \sigma^{(t)}, \dots)$ in questo caso è determinata dalla seguente relazione

$$\mathcal{H}_2(\sigma^{(t-1)}, \sigma^{(t)}) = \min_{\tau \in \mathcal{X}_k} \mathcal{H}_2(\sigma^{(t-1)}, \tau) = -\max_{\tau \in \mathcal{X}_k} \sum_{i \in V} h_i(\sigma^{(t)})\tau_i = \mathcal{H}_2(\sigma^{(t)}, \sigma^{(t-1)}),$$

La dinamica a temperatura zero in pratica sceglie di collocare le particelle di volta i volta nei k siti più vantaggiosi, quelli sui quali agiscono i k campi di cavità che hanno valore maggiore, ed è facile mostrare che $\mathcal{H}_2(\sigma^{(t)}, \sigma^{(t+1)})$ è una quantità che non aumenta mai

$$\mathcal{H}_2(\sigma^{(t)}, \sigma^{(t+1)}) = -\max_{\tau \in \mathcal{X}_k} \sum_{i \in V} h_i(\sigma^{(t)})\tau_i \ \leq \ -\sum_{i \in V} h_i(\sigma^{(t)})\sigma_i^{(t-1)} = \mathcal{H}_2(\sigma^{(t-1)}, \sigma^{(t)}).$$

Poiché l'energia non può diminuire all'infinito, da un certo punto in poi dovrò rimanere "intrappolato" da qualche parte. I problemi nascono quando si arriva a quelle configurazioni σ^* per cui

$$\min_{\tau \in \mathcal{X}_k} \mathcal{H}_2(\sigma^*, \tau) = \mathcal{H}_2(\sigma^*, \sigma^*).$$

Questo significa che la trappola si presenta ogni volta che la configurazione σ è tale per cui

$$h^0_{max} = \max_{i \in (V \setminus S)} h_i(\sigma) \leq \min_{i \in S} h_i(\sigma) = h^1_{min}$$

In questa maniera infatti, la dinamica a temperatura zero, riempie necessariamente sempre gli stessi siti. Analizziamo in maggiore dettaglio il fenomeno. Fissiamo l'attenzione su una configurazione $\sigma \in \mathcal{X}_k$ ed andiamo a valutare i campi di cavità che agiscono sulle τ_i.

$$h_i(\sigma) = h\sigma_i - \sum_{j \in V \setminus i} J_{ij}\sigma_j = h\sigma_i - l_i(\sigma)$$

Il valore di $l_i(\sigma)$ è il numero di archi mancanti tra il sito i e il supporto σ e noi vogliamo contare quanti siti ne hanno un certo numero. Mi conviene suddividere a questo punto lo spazio delle fasi definendo i seguenti insiemi al variare di $s \in \{0,1\}$ ed $l \in \{0, 1, \dots, k-s\}$,

$$g_{s,l} = \{i \in \sigma \ \mid \ \sigma_i = s \text{ e } l_i(\sigma) = l\}.$$

L'insieme $g_{s,l}$ contiene quindi tutti quei siti su cui agisce un campo di cavità $hs - l$ e posso riscrivere l'hamiltoniana $\mathcal{H}_2(\sigma, \tau)$ in termini di numeri d'occupazione $\rho_{s,l} = \sum_{i \in g_{s,l}} \tau_i$ dei livelli d'energia $e_{s,l} = l - hs$.

$$\mathcal{H}_2(\sigma, \tau) \ \longrightarrow \ \mathcal{H}_\sigma(\rho) = \sum_{s=0}^{1} \sum_{l=0}^{k-s} e_{s,l}\rho_{s,l} \qquad \rho = \{\rho_{s,l}\}_{\substack{s=0,1 \\ l=0,1,\dots,k-s}}$$

Per semplicità d'esposizione, etichettiamo ogni livello (s, l) con un indice $i \in \{1, 2, \dots, 2k+1\}$ che cresce all'aumentare dell'energia ($i < j \iff e_i < e_j$), e, in tutti quei casi in cui il contesto non porterà ad ambiguità, utilizziamo lo stesso simbolo g_i per indicare indistintamente l'insieme o la sua cardinalità $|g_i|$. Ogni livello d'energia e_i è g_i volte degenere e, poiché abbiamo a che fare con fermioni, ogni sottolivello può essere occupato al più da una particella. Se ricordiamo inoltre che il numero di particelle è fissato allora le ρ_i devono soddisfare i seguenti vincoli

$$\rho_i \leq g_i \quad k = \sum_i \rho_i =: k(\rho).$$

Adesso abbiamo tutti gli ingredienti necessari per cercare di capire qualcosa in più sulla dinamica adottando una statistica di Fermi. Lavorare nel gran-canonico è più conveniente, possiamo scordarci del vincolo sul numero di particelle e sommare su tutte le possibili scelte di ρ_i, servendoci solo poi del potenziale chimico per ripristinarlo. In questa maniera possiamo trasformare la probabilità di transizione nella misura di Gibbs,

$$P(\sigma, \tau) \longrightarrow \frac{e^{\beta(\mu k(\rho) - \mathcal{H}_\sigma(\rho))}}{\mathcal{Z}_\sigma} \quad \mathcal{Z}_\sigma = \sum_{\mathbf{n}} e^{\beta(\mu k(\rho) - \mathcal{H}_\sigma(\rho))}.$$

Il calcolo della funzione di partizione $\mathcal{Z}_\sigma$ è semplicissimo. Seguendo il procedimento in [16] infatti, considerato che ci sono $\mathcal{W}(\rho) = \binom{g}{\rho}$ modi di disporre ρ particelle in g livelli, allora

$$\mathcal{Z}_\sigma = \sum_\rho \prod_i \binom{g_i}{\rho_i} e^{\beta \rho_i (\mu - e_i)} = \prod_i \left(1 + e^{\beta(\mu - e_i)}\right)^{g_i}$$

$$\log \mathcal{Z}_\sigma = \sum_i g_i \log\left(1 + e^{\beta(\mu - e_i)}\right).$$

In questo ensemble quindi il numero d'occupazione del livello e_i fluttua dal suo valore medio

$$\langle \rho_i \rangle = \frac{g_i}{1 + e^{-\beta(\mu - e_i)}},$$

di una quantità pari a

$$\sqrt{\left\langle (\rho_i - \langle \rho_i \rangle)^2 \right\rangle} = \sqrt{\frac{e^{-\beta(\mu - e_i)}}{g_i}} \langle \rho_i \rangle.$$

Tutte le espressioni dipendono dal potenziale chimico μ che deve essere scelto in modo da soddisfare, in media, il vincolo sul numero di particelle

$$k = \sum_i \langle \rho_i \rangle.$$

È utile a questo punto, per valutare la termodinamica, esprimere tutto in termini della frazione di particelle che occupano un livello di energia imponendo $\langle \rho_i \rangle = g_i x_i$. In questa maniera si può scrivere

$$x_i = \frac{e^{\beta(\mu - e_i)}}{1 + e^{\beta(\mu - e_i)}} \longrightarrow \beta(\mu - e_i) = \log x_i - \log(1 - x_i).$$

Moltiplicando entrambi i membri dell'espressione di sopra per $g_i x_i$,
introducendo $S(x) = -x \log x - (1-x)\log(1-x) \geq 0$, sommando su i, e osservando che, a questo punto,

$$\mathcal{E} = \langle \mathcal{H}_\sigma(\rho) \rangle = \sum_i g_i x_i e_i$$

$$\log \mathcal{Z}_\sigma = -\sum_i g_i \log(1 - x_i),$$

posso ottenere un'espressione vantaggiosa per la pressione

$$Pn = \mu k - \mathcal{E} + \frac{1}{\beta} \sum_i g_i S(x_i),$$

dalla quale il termine entropico emerge in maniera naturale

$$\mathcal{S} = \sum_i g_i S(x_i).$$

Quando la temperatura è abbastanza bassa la frazione di siti occupati di un livello di energia "collassa" in zero o uno (livello tutto vuoto o tutto pieno) a seconda del valore dell'energia.

$$x_i \simeq \begin{cases} 1 - e^{-\beta|\mu - e_i|} & \text{se } e_i < \mu \\ e^{-\beta|\mu - e_i|} & \text{se } e_i > \mu \end{cases}$$

Allo zero assoluto però le k particelle occuperanno solo i k sottolivelli disponibili più bassi in energia ed il valore del potenziale chimico viene chiamato a questo punto *energia di Fermi*. Sperando di non creare ambiguità, definiamo adesso con f l'indice del livello di energia maggiore che, allo zero assoluto, è occupato da almeno una particella. Per noi questo sarà il livello di Fermi ed e_f e g_f saranno l'energia di tale livello e la sua degenerazione. Indicheremo invece con μ_f il valore vero dell'energia di Fermi, quello cioè che si ricava imponendo il vincolo delle k particelle

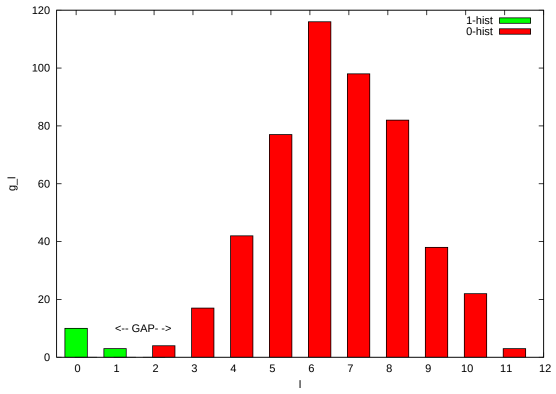
$$k = \sum_i g_i x_i = \sum_{i<f} g_i + g_f x_f.$$

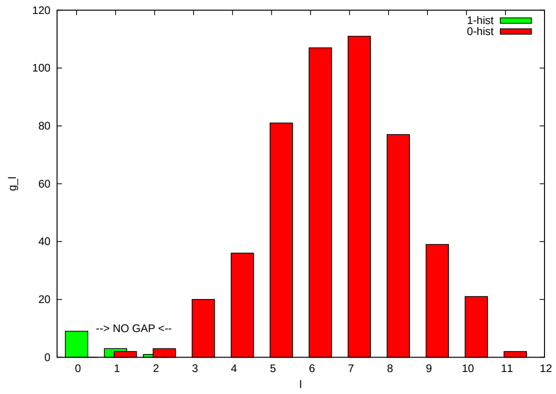
rendendo l'energia la minima possibile

$$\mathcal{E}_m = \min_{\tau \in \mathcal{X}_k} \mathcal{H}_2(\sigma, \tau) = \sum_{i<f} g_i e_i + g_f x_f e_f,$$

$$Pn = e_f k - \mathcal{E}_m + T(k \log \frac{x_f}{1 - x_f} + g_f S(x_f)).$$

Il piccolo termine entropico è presente quando il livello di Fermi non è completamente occupato e più scelte sono possibili; se $x_f = 1$ ovviamente scompare. In pratica tutta l'informazione su questo sistema è contenuta nelle g_i. Torniamo adesso alla convenzione $i \longrightarrow (s, l)$. Le $g_{0,l}$ e le $g_{1,l}$ possono essere rappresentate separatamente come due istogrammi. Ogni istogramma indica, per ogni livello energetico, i sottolivelli disponibili nei quali posso mettere le particelle. L'1-istogramma è quello relativo ai siti già occupati ($s = \sigma_i = 1$) e, rispetto allo 0-istogramma, che si riferisce invece ai siti non occupati ($s = \sigma_i = 0$), è shiftato leggermente verso destra per via del campo esterno $h > 0$. Quando l'ultimo livello disponibile dell'1-istogramma ha energia maggiore del primo livello disponibile dello 0-istogramma i due istogrammi si sovrappongono. In questo caso affermiamo che non c'è "gap" e, a qualunque temperatura, ho una buona probabilità che la dinamica mi faccia saltare sempre su configurazioni diverse. Aumentando il valore di h l'1-istogramma scorre sempre più verso destra, il gap aumenta e la dinamica a basse temperature si ferma. Le figure mostrano un tipico esempio nel caso in cui il grafo e random e k è dell'ordine della clique massima.





Quando c'è gap quindi, per saltare su configurazioni diverse, sono costretto ad alzare la temperatura. La congettura sull'efficienza di questo algoritmo è quindi legata alla possibilità di un bilanciamento tra una temperatura abbastanza bassa da farmi concentrare sulle clique ma anche abbastanza alta da permettermi un buon mescolamento. Consideriamo quindi il caso, estremo ma tipico, in cui σ ha supporto proprio su una clique e io voglio trovare il modo di uscire da questa configurazione. I campi di cavità, per tutti i siti con $\sigma_i = 1$, vale $-h$ e l'1-istogramma è costituito semplicemente da k sottolivelli di energia $-h$. Indichiamo con $c = \min\{l \mid g_{0,l} \geq 1\}$ l'energia del primo livello disponibile dello 0-istogramma così il gap di energia vale $\Delta_{gap} = c + h$. Vogliamo scegliere la temperatura minima che ci permetta di avere 1 particella nel livello c mantenendo le altre nel livello $-h$.
Possiamo provare a fare una stima risolvendo le equazioni $\langle \rho_{1,0} \rangle = k - 1$ e $\langle \rho_{0,c} \rangle = 1$ ottenendo

$$T_{thrs} = (c + h)\frac{1}{\log\left((k-1)(g_c - 1)\right)} \sim \Delta_{gap}\frac{1}{\log\left(kg_c\right)}$$

$$\mu = -h + T_{thrs}\log\left(k-1\right) \sim \Delta_{gap}\frac{\log k}{\log\left(kg_c\right)}$$

Se voglio riempire i livelli successivi devo alzare la temperatura al di sopra della soglia T_{thrs}. La soglia non dipende solo dal gap di energia. Se i livelli successivi a quello di Fermi hanno molti siti disponibili c'è una certa probabilità di riempirli anche a bassa temperatura.

4.2.5 Stime su grafi random

Quando abbiamo a che fare con i random graph possiamo ricavare qualche stima. Fissiamo una configurazione di k siti e, per semplicità, assumiamo che gli indici dei siti non occupati siano i primi $n - k$. Il valore del campo di cavità di un sito non occupato corrisponde al numero di archi mancanti tra questo sito e i siti del supporto. Se il grafo è random di densità p possiamo pensare di stimare la probabilità che i siti non occupati abbiano $(l_1, l_2, \ldots, l_{n-k})$ archi mancanti estraendo le J_{ij} dopo aver fissato la configurazione. Le diverse quantità l_i, infatti, dipendono tutti da J_{ij} diverse, sono scorrelate tra loro e sono in pratica tutte estratte dalla stessa distribuzione binomiale $B_{k,d}(l)$ con $d = 1 - p$.

$$P(l_1, l_2, \ldots, l_{n-k}) = \prod_{i=1}^{n-k} B_{k,d}(l_i) \qquad B_{k,d}(l) = \binom{k}{l} d^l (1-d)^{k-l}$$

Se adesso andiamo a contare i siti che hanno lo stesso numero di edge mancanti possiamo ricavare la probabilità delle quantità $g_{0,l} =: g_l$.

$$P(g_0, g_1, \ldots, g_k) = (n-k)! \prod_{l=0}^{k}\left[\frac{(B_{k,d}(l))^{g_l}}{g_l!}\right] \qquad \sum_{l=0}^{k} g_l = (n-k)$$

In questa maniera possiamo ricavare facilmente la probabilità che il livello di energia $e_{0,L} = l$, indipendentemente dagli altri livelli, abbia g_l sottolivelli in cui mettere le particelle

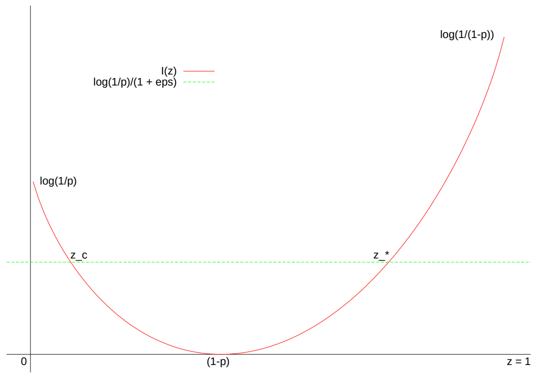
$$P(g_l) = \binom{n-k}{g_l} \left(B_{k,d}(l)\right)^{g_l} \left(1 - B_{k,d}(l)\right)^{n-k-g_l}.$$

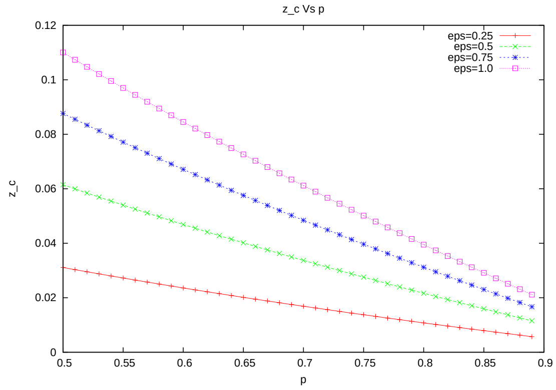
In pratica la distribuzione di g_l è binomiale di parametri $n - k$ e $d_l := B_{k,d}(l)$. Vogliamo adesso valutare le fluttuazioni di g_l dal suo valore medio $\overline{g_l}$ nel caso in cui $k = (1+\epsilon)\log_{1/p} n$ e $n \gg 1$. Ponendo $l = kz$ possiamo scrivere allora

$$d_l \xrightarrow{l=kz} d_z \simeq \frac{e^{-kI_d(z)}}{\sqrt{2\pi kz(1-z)}} \qquad I_d(z) = z\log\frac{z}{d} + (1-z)\log\frac{1-z}{1-d}$$

e ricavare il valore medio e le fluttuazioni relative.

$$\overline{g_l} \xrightarrow{l=nz} \overline{g_z} \simeq \exp\left\{-k\left[I_d(z) - \frac{\log\frac{1}{p}}{1+\epsilon}\right]\right\} \qquad \frac{\sqrt{\overline{g_z^2} - \overline{g_z}^2}}{\overline{g_z}} \simeq \exp\left\{\frac{1}{2}k\left[I_d(z) - \frac{\log\frac{1}{p}}{1+\epsilon}\right]\right\}$$





Dalla figura si vede che le fluttuazioni si mantengono piccole solo all'interno dell'intervallo $[z_c, z^*]$ che si stringe sempre di più all'aumentare di ϵ. Se noi vogliamo cercare le clique siamo interessati ai livelli di energia più bassi. Il problema è che, se $l < kz_c$, non siamo in grado di controllare il valore di g_l. In questo caso però $g_l < 1$ e, in media, non ci sono livelli disponibili su cui mettere le particelle. In figura viene riportato l'andamento di z_c in funzione della densità degli archi p per qualche valore di ϵ. L'andamento è praticamente lineare almeno per i valori di p non troppo vicini ad 1. Nel caso delle clique massime con $\epsilon = 1$ si può fittare con una retta ricavando

-1

$$z_c(p) = -0.230201(p - \frac{1}{2}) + 0.1080885 \longrightarrow \begin{cases} z_c(0.5) = 0.1080885 \\ z_c(0.6) = 0.0850684 \\ z_c(0.7) = 0.0620483 \end{cases}$$

Una volta che $z > z_c$ "entro" dentro la binomiale ed il numero dei livelli disponibili cresce velocemente. Fissata la temperatura e ricavato il potenziale chimico ll numero di particelle che occupano il livello $l = kz$ è vicino a

$$\rho_z = \frac{g_z}{1 + e^{-\beta(\mu - kz)}}.$$

Il livello successivo si trova a $z + \delta z$ con $\delta z = 1/k$ per cui.

$$g_{z+\frac{1}{k}} = g_z e^{-I'_d(z)} \quad \longrightarrow \quad \frac{g_{l+1}}{g_l} \simeq \frac{(k-l)(1-p)}{lp}$$

$$\rho_{z+\frac{1}{k}} \simeq \rho_z e^{-I'_d(z)} e^{-\gamma\beta} \qquad \frac{\rho_{l+1}}{\rho_l} = \frac{g_{l+1}}{g_l} e^{-\gamma\beta}$$

$$[0,1] \ni \gamma \stackrel{\beta \gg 1}{=} \begin{cases} 0 & \text{se} \quad \mu \geq 1 + kz \\ |1 + kz - \mu| & \text{se} \quad kz < \mu < kz + 1 \\ 1 & \text{se} \quad \mu < kz \end{cases}$$

La tabella della pagina seguente riporta per alcune taglie di grafi il valore del primo livello riempibile $a = [kz_c] + 1$ degli 0-istogrammi quando cerco le clique massimali. Abbiamo usato la formula della sezione precedente per ottenere la temperatura di soglia T_{thrs} che mi permette di uscire da una configurazione che ha supporto su una clique nel caso in cui $h = 1$. Nell'ultime colonna invece abbiamo riportato g_{a+1}/g_a e ρ_{a+1}/ρ_a con $\gamma = 1$ per mostrare la velocità con la quale aumentano i livelli disponibili ed avere un'idea della frazione di particelle che riesce a saltare sul livello successivo a quello riempibile quando la temperatura è quella di soglia T_{thrs}.

$G \in \mathcal{G}(n,p)$	$p = 0.5$						$p = 0.7$					
n	k	a	g_a	T_{thrs}	g_{a+1}/g_a	ρ_{a+1}/ρ_a	k	a	g_a	T_{thrs}	g_{a+1}/g_a	ρ_{a+1}/ρ_a
128	10	2	5.19	0.5510	2.67	0.43	16	1	2.55	0.3178	3.21	0.13
256	12	2	3.93	0.5758	3.34	0.72	20	2	6.57	0.4290	2.57	0.24
512	13	2	4.75	0.5254	3.67	0.54	23	2	6.22	0.4216	3.00	0.28
1024	15	2	3.23	0.5812	4.34	0.78	26	2	5.59	0.4217	3.43	0.32
2048	17	2	2.11	0.6952	5.00	1.17	29	2	4.85	0.4273	3.86	0.38
4096	19	3	7.54	0.6292	4.00	0.82	33	3	13.49	0.5008	3.21	0.43
8192	20	3	8.88	0.5989	4.25	0.80	36	3	12.16	0.5027	3.54	0.50
16384	22	3	6.01	0.6443	4.75	1.00	39	3	10.69	0.5077	3.86	0.54
2^{18}	29	4	11.60	0.7026	5.00	1.20	53	4	15.97	0.6008	4.20	1.18
2^{20}	33	4	4.99	0.8248	5.80	1.71	61	4	6.56	0.6885	4.89	1.15
2^{30}	52	6	4.85	1.1364	6.57	2.73	97	7	34.54	0.8666	4.82	1.53

4.2.6 Stima del tempo di mixing

Adesso useremo il metodo dei colli di bottiglia per ottenere una stima inferiore al tempo di mixing. Il nostro primo obiettivo è quello di trovare un insieme di configurazioni dalle quali è difficile sfuggire. Abbiamo visto che, per cercare di uscire da un clique, devo superare il gap di energia in modo da poter mettere particelle nello 0-istogramma. Al solito, non distingueremo tra una configurazione $\sigma \in \mathcal{X}$ e il suo supporto $A \subseteq V$. Sia $\mathcal{K}_k(G)$ l'insieme delle clique di ordine k del grafo G e sia $\sigma_0 \in \mathcal{K}_k(G)$ una clique che crea un gap di energia pari ad $c+h$ e cioè tale che c è il primo livello disponibile dello 0-istogramma. Definiamo a questo punto il seguente insieme

$$S = \left\{ \sigma \in \mathcal{X}_k : \mathcal{H}_2(\sigma, \sigma_0) = \min_{\tau \in \mathcal{X}_k} \mathcal{H}_2(\sigma, \tau) \right\} \qquad S^c = \mathcal{X}_k \setminus S$$

In pratica stiamo affermando che l'insieme S è formato da tutte quelle configurazioni che, allo zero assoluto, saltano sulla clique σ_0. Poiché una volta che sono su σ_0 per uscire devo superare un gap di energia $c+h$ allora l'insieme S rappresenta una specie di "bacino d'attrazione" per la clique. Se quindi voglio passare ad un'altra clique devo valutare la probabilità di saltare fuori dell'insieme S.

$$\Phi(S) = 2 \frac{\sum_{\sigma \in S} \sum_{\sigma' \in S^c} \pi(\sigma) P(\sigma, \sigma')}{\sum_{\sigma \in S} \pi(\sigma)} = 2 \frac{\sum_{\sigma \in S} \sum_{\sigma' \in S^c} e^{-\beta \mathcal{H}_2(\sigma, \sigma')}}{\sum_{\sigma \in S} \mathcal{Q}_\sigma(\beta)}$$

Poiché $\sigma_0 \in S$ allora $\sum_{\sigma \in S} \mathcal{Q}_\sigma(\beta) \geq \mathcal{Q}_{\sigma_0}(\beta)$ e posso limitare inferiormente il denominatore con $e^{\beta h k}$. Se riesco a dimostrare che

$$\mathcal{H}_2(\sigma, \sigma') \geq \Omega k^2 \quad \forall\, \sigma \in S \ \text{ e} \, \forall\, \sigma' \in S^c$$

posso limitare il numeratore con $|S|\,|S^c|\, e^{-\beta \Omega k^2}$. E, poiché $|S \cup S^c| = |\mathcal{X}_k| = \binom{n}{k}$, sicuramente $|S|\,|S^c| \leq \binom{n}{k}^2/4$, e allora

$$\Phi(S) \leq \frac{1}{2} \binom{n}{k}^2 e^{-\beta h k} e^{-\beta \Omega k^2}.$$

Nel caso in cui il grafo sia random, come nel caso di Jerrum, dobbiamo valutare questo numero, per le clique grandi almeno la metà di quella massimale. Se quindi poniamo $k = (1+\epsilon)\log_{1/p}(n)$ e usiamo la formula di Stirling otteniamo

$$\Phi(S) \leq \exp\left[-k^2 \left(\beta \Omega - \frac{2}{1+\epsilon} \log \frac{1}{p} \right) \right].$$

A questo punto, se riesco a far vedere che per ogni valore di $\epsilon > 0$ e $c \geq 1$ esiste un β_0 per cui, se $\beta > \beta_0$, l'esponente è negativo, allora sono riuscito a dimostrare che il tempo di mixing a basse temperature è almeno dell'ordine $\mathrm{O}\left(n^{\log n}\right)$. La dimostrazione di questo risultato passa attraverso le seguenti fasi.

1 Dimostriamo che per $\sigma' \in S^c$ con $|\sigma_0 \cap \sigma'| = k - l$ esiste sempre un $\gamma < 1$ tale che

$$\left|\sigma' \setminus \sigma_0\right| = l \geq \gamma c.$$

In generale, se $\sigma \cap \tau = \emptyset$, allora vale la formula

$$h_i(\sigma \cup \tau) = h_i(\sigma) + h_i(\tau).$$

e quindi posso scrivere $h_i(\sigma_0) = h_i(\sigma_0 \cap \sigma') + h_i(\sigma_0 \setminus \sigma')$. Il campo di cavità che agisce sul sito i quando la configurazione è σ' vale quindi

$$h_i(\sigma') = h_i(\sigma_0) + h_i(\sigma' \setminus \sigma_0) - h_i(\sigma_0 \setminus \sigma')$$

Poiché $\forall\, \sigma \in \mathcal{X}$ sicuramente $-|\sigma| \leq h_i(\sigma) \leq h$ e

$$\left|h_i(\sigma') - h_i(\sigma_0)\right| = \left|h_i(\sigma' \setminus \sigma_0) - h_i(\sigma_0 \setminus \sigma')\right| \leq l + h.$$

Adesso, se per assurdo $l \leq \gamma c$, poiché per definizione di σ_0 abbiamo $h_i(\sigma_0) \leq -c$, allora

$$\begin{cases} i \in \sigma_0 & h_i(\sigma') \geq -\gamma c \\ \\ i \notin \sigma_0 & h_i(\sigma') \leq h_i(\sigma_0) + h + \gamma c \quad \leq h - (1-\gamma)c \end{cases}$$

Abbiamo visto che devo cercare di mettere meno gap possibile tra l'1-istogramma e lo 0-istogramma per avere mescolamento e quindi è ragionevole scegliere $h \simeq 1$ mentre c tipicamente è dell'ordine di qualche unità. Di conseguenza, non appena $\gamma < (1 - h/c)/2 \leq 1/2$, significa che $\forall\, i \in \sigma_0$ e $\forall\, j \notin \sigma_0$ allora $h_i(\sigma') \geq h_j(\sigma')$ e quindi $\min_\tau \mathcal{H}_2(\sigma', \tau) = \mathcal{H}_2(\sigma', \sigma_0)$. Ma allora significa che $\sigma' \in S$ contrariamente all'ipotesi di partenza $\sigma' \in S^c$.

2 Verifichiamo adesso che, se $\sigma' \in S^c$, allora

$$\mathcal{H}_2(\sigma', \sigma_0) \geq hk + \gamma c(c - h)$$

Innanzitutto, $\forall\, i \notin \sigma_0$ e per definizione di σ_0, deve valere $h_i(\sigma_0) \leq -c$, ma allora

$$\mathcal{H}_2(\sigma', \sigma_0) = -\sum_{i \in \sigma' \cap \sigma_0} h_i(\sigma_0) - \sum_{i \in \sigma' \setminus \sigma_0} h_i(\sigma_0) \geq h(k - l) + lc \geq hk + \gamma c(c - h).$$

3 Dimostriamo che per ogni $\sigma \in S$ e $\sigma' \in S^c$

$$\mathcal{H}_2(\sigma, \sigma') \geq \Omega k^2$$

Usando il γ del punto **1** dividiamo le configurazioni $\sigma \in S$ in due sottoinsiemi S_n e S_f.

$$S_n = \{\sigma \in S \;:\; |\sigma \setminus \sigma_0| < \gamma c\} \qquad S_n \cup S_f = S$$

$$S_f = \{\sigma \in S \;:\; |\sigma \setminus \sigma_0| \geq \gamma c\} \qquad S_n \cap S_f = \emptyset$$

Se $\sigma \in S_f$, per lo stesso motivo del punto **2**, abbiamo

$$\mathcal{H}_2(\sigma, \sigma') \geq \mathcal{H}_2(\sigma, \sigma_0) \geq hk + \gamma c(c - h) =: \Omega_1 k^2$$

Se $\sigma \in S_n$, seguendo la procedura del punto **1**, allora

$$|h_i(\sigma) - h_i(\sigma_0)| \leq |\sigma \setminus \sigma_0| + h \quad \longrightarrow \quad h_i(\sigma) \leq h_i(\sigma_0) + h + |\sigma \setminus \sigma_0| \leq h_i(\sigma_0) + h + \gamma c$$

e di conseguenza, se $i \notin \sigma_0$,

$$h_i(\sigma) \leq -(1-\gamma)c + h.$$

In definitiva, se $\sigma \in S_n$, per le conseguenze del punto **1**

$$\mathcal{H}_2(\sigma, \sigma') \geq - \sum_{i \in \sigma' \setminus \sigma_0} h_i(\sigma) \geq \left|\sigma' \setminus \sigma_0\right| [(1-\gamma)c - h] \geq \gamma c \,[(1-\gamma)c - h] =: \Omega_2 k^2$$

Ponendo infine $h =: k\tilde{h}$ e $c =: kz_c$ con $z_c > \tilde{h}$ e scegliendo

$$\Omega = \max\{\Omega_1, \Omega_2\} = \gamma z_c(z_c - \tilde{h}) + \tilde{h},$$

abbiamo $\mathcal{H}_2(\sigma, \sigma') \geq \Omega k^2$ come volevamo.

Poiché $\Omega > 0$ per qualsiasi scelta di $z_c > \tilde{h} > 0$ e $\epsilon > 1$ allora definendo

$$\beta_0 := \frac{2}{\Omega(1+\epsilon)} \log \frac{1}{p}$$

otteniamo finalmente la stima superiore allo spectral gap Λ

$$\Lambda \leq e^{-k^2 \Omega(\beta - \beta_0)},$$

e quindi, con $\beta > \beta_0$ e ponendo $k \sim \log n$, ricaviamo che il tempo di mixing, proprio come ci aspettavamo, cresce più che polinomialmente con la taglia del sistema.

4.3 Osservazioni

In questo capitolo abbiamo provato a capire come funzionano i due algoritmi. I risultati teorici combinati alla nostra esperienza di simulazioni numeriche ci permettono di riassumere gli aspetti principali che devono essere presi in considerazione.

1 Entrambi gli algoritmi hanno un tempo di mixing dell'ordine $\mathrm{O}\left(n^{\log n}\right)$

2 Il comportamento dell'algoritmo di Metropolis è molto simile a quello di Jerrum se β è abbastanza grande e $h < 1$.

3 Affinché la misura si concentri sulle clique di ordine k la temperatura deve essere dell'ordine $T_c \sim 1/\log(k)$ per entrambi gli algoritmi

4 Per evitare che l'algoritmo di Cavity rimanga intrappolato devo avere abbastanza energia per superare il gap tra l'1-istogramma e lo 0-istogramma in modo ed ottenere un certo mescolamento. La soglia T_{thrs} è il valore di temperatura per la quale questo avviene con una probablità non troppo piccola.

5 Se il grafo e random i livelli successivi al primo occupato dello 0-istogramma iniziano ad avere un numero considerevole di sottolivelli. Se la temperatura è più alta di T_{thrs} allora, con alta probabilità, inizierò a riempire con le particelle anche questi livelli e la misura non si concentrerà più sulle clique.

6 Una volta fissata la temperatura T ed il numero di particelle k esiste un valore del campo esterno h_{thrs} al di sopra della quale l'algoritmo di Cavity trova le clique mentre al di sotto trova i $BCBS$. Se però h è troppo grande aumenta il gap di energia e la dinamica rischia di rimanere congelata.

7 Poiché l'algoritmo di Cavity è teoricamente in grado di trovare anche i $BCBS$ significa che, se cerco le clique in un grafo che è "quasi" bipartito, allora anche i $BCSB$ rappresentano una trappola per questo algoritmo che inizia ad oscillare tra due configurazioni che hanno una piccola intersezione in comune e ogni nodo di una configurazione è connesso con quasi tutti gli altri nodi dell'altra.

Capitolo 5

Algoritmi random in pratica

In questo capitolo mostreremo i risultati di "costosissime" elaborazioni al computer che avevano lo scopo di valutare l'efficienza degli algoritmi random per la ricerca delle clique e la ragionevolezza o meno delle nostre previsioni teoriche. Gli algoritmi di Metropolis ($\mathcal{M}$) e di Cavity ($\mathcal{C}$), in quanto parte più originale del lavoro, saranno ovviamente presi in maggior considerazione nella seconda sezione del capitolo. Molte simulazioni, infatti, sono state necessarie; innanzitutto per valutare le temperature alle quale gli algoritmi sono in grado di trovare le cliques più velocemente, ed in seguito per confrontare tali parametri ottimali con quelli ricavati teoricamente. Nell'ultima sezione sono riportati i risultati delle elaborazioni effettuate per confrontare tra loro $\mathcal{M}$, $\mathcal{C}$, l'algoritmo di Jerrum ($\mathcal{J}$), che è stato illustrato alla fine del capito 3, e il Greedy ($\mathcal{G}$), un algoritmo random standard a cui abbiamo già accennato e che verrà illustrato in maggior dettaglio nella prima sezione di questo capitolo dove, per completezza, abbiamo voluto descrivere anche alcuni algoritmi deterministici tra i più famosi.

5.1 Algoritmi standard

In questa sezione presenteremo gli algoritmi di ricerca più diffusi e utilizzati per risolvere il problema della massima clique. Gli algoritmi si dividono principalmente in due gruppi

- Gli **algoritmi completi** risolvono il problema esattamente, senza nessuna approssimazione. L'algoritmo deterministico per eccellenza è ovviamente quello che valuta tutte le possibilità. Immaginiamo di voler sapere se il grafo G ha una clique di ordine almeno k. Si parte dal primo nodo e si sceglie il vicino dall'indice più basso. Adesso guardiamo l'insieme formato dai vicini di entrambi e, se non è vuoto, prendiamo sempre il nodo dall'indice più basso che si trova in questo insieme. Abbiamo costruito una clique di ordine 3. Si prosegue guardando il vicinato dei nodi scelti e prendendo quelli "lessicograficamente" minori finché la clique non può essere più aumentata. Se la cardinalità della clique è maggiore di k allora il problema è risolto. Altrimenti si torna indietro e si elimina dalla clique l'ultimo nodo aggiunto e si sceglie il secondo in ordine lessicografico tra i vicini della clique rimasta. Via via si vanno a scegliere i nodi di ordine lessicografico sempre maggiori finché non si è trovata una clique di ordine k oppure non si è provato alla fine tutte le combinazioni possibili. Questa tecnica sarà la stessa che sfrutterà *Cliquer*, l'algoritmo che presenteremo nella prossima sezione.

- Gli **algoritmi euristici** sono quelli che, pur tentando e avvicinandosi molto, non garantiscono però che il risultato sia ottimale. L'idea generale è sempre lo stessa; cercare di esplorare una spazio più piccolo di configurazioni nella maniera più astuta possibile. Per questo gli algoritmi euristici sono anche i più veloci e spesso gli unici in grado di dare qualche risposta utile in un tempo ragionevole quando la taglia del problema diventa troppo grande. Una suddivisione viene fatta anche in base alla presenza o meno di una qualche componente casuale. L'esperienza tende a considerare però *deterministico* anche quell'algoritmo per cui la componente random svolga un ruolo secondario rispetto all'idea principale dell'algoritmo. Nelle sottosezioni che seguono presenteremo le idee del *Reactive Local Search (RLS)* di Battiti e Protasi, un algoritmo "quasi-deterministico" considerato lo stato dell'arte nel problema delle clique, e, successivamente, descriveremo l'algoritmo random per eccellenza: il *Greedy*.

5.1.1 Cliquer: un algoritmo esatto

Innanzitutto vogliamo mostrare un algoritmo completo ideato da Ostegard [30] in grado di valutare tutte le opportunità senza necessariamente fare tutti i tentativi possibili. Assumiamo che $V = \{v_1, v_2, \ldots, v_n\}$ sia un qualunque ordinamento dei nodi del grafo. Indichiamo con $S_i = \{v_1, v_2, \ldots, v_i\} \subset V$ l'insieme dei primi i nodi e definiamo $c\,(i)$ la taglia della clique massima nel sottografo indotto proprio da S_i È ovvio che, per ogni i, due soli casi sono possibili. O $c\,(i+1) = c\,(i)$ oppure $c\,(i+1) = c\,(i) + 1$. L'osservazione importante è che il caso $c\,(i+1) = c\,(i) + 1$ si verifica se e solo se esiste una clique in S_{i+1} che contiene il nodo v_{i+1}. Questa proprietà ci permetterà adesso di mettere a punto una strategia per riconoscere ed evitare le strade che non conducono a nulla. Partiamo con $c\,(1) = 1$ ed immaginiamo di conoscere il valore di $c\,(i)$. Per sapere quale valore dobbiamo inserire in $c\,(i+1)$ dobbiamo cercare in S_{i+1} una clique di ordine $c\,(i) + 1$ che contenga il nodo v_{i+1}. Sul sottografo indotto da S_{i+1} possiamo utilizzare l'algoritmo completo presentato in precedenza che prova tutte le configurazioni costruendo la clique a partire dal nodo v_{i+1} e seguendo l'ordinamento lessicografico $\{v_i, v_{i-1}, \ldots, v_1\}$. Immaginiamo di essere arrivati ad un certo punto ad una clique di ordine W con il nodo v_j prossimo candidato all'inserimento. Se $W + c\,(j) \leq c\,(i)$ allora siamo certi che, aggiungendo il nodo v_j non avremo modo, proseguendo, di ottenere una clique di ordine $c\,(i) + 1$ e quindi, se vogliamo risparmiare, possiamo evitarlo. Con l'aiuto di questa "potatura", pur senza provare tutte le configurazioni possibili, possiamo essere certi del valore da inserire in $c\,(i+1)$ e passare quindi al nodo successivo. Se ogni volta che $c\,(i)$ aumenta ho l'accortezza di memorizzare la clique più grande trovata, allora, al termine dell'elaborazione, avrò risposto al problema della massima clique con "oracolo" annesso. L'efficienza di questo algoritmo è strettamente legata al modo con cui i nodi vengono ordinati. La scelta che secondo [30] pare più ragionevole è quella di ordinare i nodi scegliendo intanto per v_1 il nodo con grado minimo. I nodi successivi $v_2, v_3, \ldots, v_i$, si ottengono poi scegliendo di volta in volta il nodo di grado minore del sottografo indotto da tutti quei nodi che ancora non sono stati ordinati. L'idea euristica che sta alla base di questo ordinamento è la seguente. Le prime clique sono cercate tra i nodi che, in linea teorica, appartengono con minore probabilità alla clique massima. In questa maniera l'ordinamento cerca di mantenere il valore di $c(i)$, almeno per i primi passi, il più basso possibile. Via via che si aggiungono altri nodi la ricerca completa nel sottografo indotto inizia a costare parecchio in termini di calcolo ma, se i valori dei $c(i)$ antecedenti sono abbastanza bassi, posso allora sperare di ottenere grosse potature e risparmiare risorse.

5.1.2 Reactive Local Search Algorithm (RLS): un algoritmo deterministico

Un algoritmo di ricerca locale consiste tipicamente in un "cammino" tra le possibili configurazioni cercando di scegliere di volta in volta la strada che pare più vantaggiosa. Nel caso delle clique esiste una maniera molto intuitiva di implementare questo paradigma. L'idea è quella passare da una clique ad un'altra aggiungendo o togliendo di volta in volta il nodo a seconda della convenienza. Sia $G = (V, E)$ un grafo e $C \in \mathcal{K}\,(G)$ una clique di G. Definiamo i seguenti insiemi.

$$A = \{u \in (V \setminus C) \;:\; (C \cup u) \in \mathcal{K}\,(G)\}$$

$$B_v = \{u \in A \;:\; (u, v) \in E\} \quad \forall v \in A$$

L'insieme A contiene i nodi che possono essere aggiunti alla clique C per formarne una più grande. $|B_v|$ indica invece il grado del nodo v nel sottografo indotto da A. Se l'insieme A non è vuoto possiamo "saltare" su una clique di cardinalità maggiore semplicemente aggiungendo un nodo di A. Quale nodo mi conviene scegliere? È ovvio che, una volta scelto il nodo v, al passo successivo l'insieme A "collassa" in B_v. Sembra conveniente quindi scegliere il nodo con $|B_v|$ maggiore per cercare di massimizzare le scelte possibili al passo successivo. Se l'insieme A è però vuoto e la clique che ho ottenuto non è del size che volevo come mi comporto? Occorre dare una prescrizione per togliere un nodo dalla clique C. Definiamo l'insieme D_v

$$D_v = \{u \in (V \setminus C) \ : \ (C \setminus v) \cup u \in \mathcal{K}(G)\} \quad \forall v \in C.$$

L'insieme D_v contiene quei nodi che non appartengono a C che hanno però un legame con tutti i nodi di C tranne che con v e quindi, in assenza di v formerebbero una clique con i nodi di $C \setminus v$. Togliere il nodo v in questo caso significa passare da $A = \emptyset$ a $A = D_v$ con la possibilità quindi di ricreare i presupposti minimi per aumentare il size della clique. Di conseguenza, per lo stesso motivo per cui conveniva aggiungere il nodo con $|B_v|$ maggiore così adesso conviene togliere il nodo con $|D_v|$ maggiore per massimizzare le nostre chance di successo. La "ricetta" che abbiamo appena descritto è quella di un tipico algoritmo di ricerca locale che cerca le clique più grandi ottimizzando di volta in volta la singola mossa. È evidente però che riesce ad essere abbastanza efficiente solo nel caso in cui c'è una diretta proporzionalità tra il grado di un nodo e la taglia delle cliques alle quali il nodo appartiene. Inoltre, per via della sua natura fortemente deterministica, soffre comunque del problema di ripercorrere sempre le stesse strade. Anche quando più nodi soddisfano i requisiti necessari per essere aggiunti o tolti e la scelta viene affidata al caso la situazione non migliora e rapidamente si esauriscono le strade diverse che questo algoritmo può percorrere. Per migliorarlo è quindi necessario costringere il cammino a percorrere anche le strade meno vantaggiose pur di evitare configurazioni già visitate. Una maniera semplice e ragionevole per ottenere questo scopo è quella di evitare di "muovere" i nodi che sono stati selezionati da poco. Proviamo a formalizzare questo concetto. Si fissa un certo tempo t_T detto tempo di "tabù" ed un insieme di nodi P che all'inizio dell'elaborazione non contiene alcun nodo. Quando un nodo è selezionato per essere aggiunto o tolto dalla clique C viene inserito nell'insieme P e vi rimane per le prossime t_T mosse. L'idea a questo punto è semplicemente quella di scegliere di volta in volta di muovere sempre i nodi più vantaggiosi ma tra quelli però che non si trovano nell'insieme P. Si usa quindi dire che le mosse dei nodi in P sono "proibite". Ricapitoliamo quindi la singola mossa di questo algoritmo di ricerca locale con proibizioni. Sia C la clique alla quale mi trovo e A, B_v, D_v e P definiti come sopra con $M = V \setminus P$ l'insieme complementare dei nodi proibiti e cioè quelli che possono essere mossi.

- **1** Valuto le quantità $|A \cap M|$ e $|C \cap M|$.
  - Se $|A \cap M| \geq 1$ e $d_{max} = \max_{v \in A \cap M} |B_v|$ scelgo uniformemente e random un nodo u tra quelli dell'insieme $\{v \in A \cap M \mid |B_v| = d_{max}\}$ e pongo $C = C \cup u$.
  - Se $|A \cap M| = 0$, $|C \cap M| \geq 1$ e $d_{max} = \max_{v \in C \cap M} |D_v|$ scelgo uniformemente e random u nell'insieme $\{v \in A \cap M \mid |D_v| = d_{max}\}$ e pongo $C = C \setminus u$.
  - Se $|A \cap M| = 0$ e $|C \cap M| = 0$ non ho altra alternativa che togliere dalla clique un nodo a caso u e mettere $C = C \setminus u$.
- **2** Aggiorno la lista dei nodi proibiti; aggiungo il nodo u all'insieme P e tolgo da questo insieme i nodi che hanno scontato il tempo di tabù t_T.

Non è facile però scegliere un valore adeguato del tempo di tabù t_T in grado di costringere l'algoritmo su strade sempre diverse. Se il tempo di tabù è troppo corto rischio di trovare sempre le stesse clique, se invece è troppo lungo tendo a precludermi i passi più vantaggiosi. La soluzione proposta da Battiti e Protasi in [31] è quella di modificare il valore di t_T nel corso dell'elaborazione e cercare di adattarlo a seconda di quello che sta succedendo. In pratica il tempo di tabù viene aumentato ogni volta che una clique già visitata ricompare troppo presto (fino ad un massimo di $|V| - 2$ altrimenti non posso fare alcuna mossa), ed invece viene diminuito (fino ad un minimo di

1) quando visito clique diverse. Questa idea di *reazione alla memoria* del tempo di tabù è l'idea nuova che sembra conferire all'algoritmo RLS un'efficienza maggiore rispetto agli altri algoritmi tradizionali. Mettendo queste idee tutte insieme possiamo esplicitare l'algoritmo di ricerca di una clique di ordine k nel grafo $G(V, E)$ con il seguente "pseudo-codice".

- **1** Scelgo a caso un nodo u tra quelli di grado massimo. Inizio con $C_{max} = C = P = u$, $t = t_I = 0$, $t_T = 1$ e $Z = C$. C è la clique che rappresenta lo stato attuale del sistema mentre P la lista dei nodi proibiti. In C_{max} memorizzeremo di volta in volta la clique più grande che abbiamo trovato. t è il numero dei passi, t_I è l'ultimo tempo in cui ho incrementato t_T, mentre Z è l'insieme delle clique che sono state già visitate. Assumiamo che, se $C \in Z$, allora t_C indica il tempo di ultima visita, e cioè l'ultimo passo in cui la clique C è stata trovata.

- **2** Cerco la mossa migliore aggiungendo o togliendo un nodo con il procedimento descritto prima. Aggiorno quindi la clique C ed incremento il tempo $t = t + 1$

- **3** Valuto se C appartiene o no all'insieme Z

  - Se $C \in Z$ e $(t - t_C) < 2(|V| - 1)$ significa che ho ritrovato la stessa clique troppo presto e devo aumentare il tempo di tabù ponendo $t_T = \min\{\max\{1.1T, T+1\}\ , |V| - 2\}$ e segnalando l'incremento di questo $t_I = t$. La soglia $2(|V| - 1)$ è scelta in modo d'assicurarci che i cicli corti siano causati effetivamente dal meccanismo di proibizione visto che tutti i nodi sono stati proibiti almeno 2 volte.
  - Se $C \in Z$ oppure $(t - t_C) \geq 2(|V| - 1)$ ho trovato una nuova clique oppure ritrovato una vecchia ma dopo un numero di passi ragionevoli e lascio quindi invariato il tempo di tabù.

- **4** Aggiungo all'insieme Z l'eventuale nuova clique C trovata ed aggiorno per questa il tempo di ultima visita $t_C = t$. Se $|C| \geq |C_{max}|$ allora pongo $C_{max} = C$. Se poi $|C_{max}| \geq k$ ho risolto il problema e posso terminare, altrimenti continuo.

- **5** Se $t - t_I > 10\,|C_{max}|$ significa che è un po' di tempo che non incremento il tempo di tabù e quindi la mia storia segue strade tendenzialmente diverse. Ho quindi una certa libertà di diminuire t_T ponendo $t_T = \max\{\min\{0.9T, T-1\}\ , 1\}$ per aumentare le possibilità che la singola mossa ottimizzi meglio. Il valore di $10\,|C_{max}|$ è scelto euristicamente per dare a tutti i membri di una clique parecchie chances di essere sostituiti prima di decrementare il tempo di tabù.

- **6** Ricomincio dal punto 2

Ovviamente si può pensare di scegliere un tempo massimo oltre il quale ricominciare dal punto 1 partendo da un nodo diverso. L'efficienza di questo algoritmo però non è legata soltanto alla modalità della mossa ma anche dalla maniera con cui può essere implementato. Scegliendo opportune strutture di dati per memorizzare le informazioni è possibile l'aggiornamento di tutte le quantità che ci interessano ed effettuare un passo dell'algoritmo in un numero di operazioni che, alla peggio, è pari alla taglia del grafo. Per concludere, l'RLS è, finora, l'algoritmo più efficiente tra quelli testati con i Benchmarks del DIMACS.

5.1.3 Greedy: un semplice random walk

L'algoritmo euristico per eccellenza è invece quello che costruisce la clique aggiungendo un nodo a caso. Implementare un greedy per cercare le clique di un grafo è estremamente semplice. Sia $G = (V, E)$ un grafo e $\mathcal{K}(G)$ l'insieme delle sue clique. Esiste una clique di almeno cardinalità k?

- **1** Si sceglie a caso un nodo v uniformemente in V e si pone $C = \{v\}$
- **2** Si guarda l'insieme $U_C = \{u \in V \setminus C \,:\, C \cup u \in \mathcal{K}(G)\}$ dei vicini di C :
  - se $|U_C| > 0$ si estrae uniformemente e random un nodo u dall'insieme U_C, si pone $C = (C \cup u)$ e si ricomincia dal punto 2,
  - altrimenti, se $|U_C| = 0$, non possiamo più aggiungere nodi e dobbiamo valutare la cardinalità della clique che abbiamo ottenuto; se $|C| \geq k$ allora abbiamo risolto il problema altrimenti dobbiamo fare un altro tentativo e ripartire dal punto 1.

In pratica il greedy estrae a caso una clique tra quelle che non sono più aumentabili. Per valutarne l'efficienza dobbiamo chiederci quante volte dobbiamo ripetere l'estrazione per sperare di ottenere una clique di un certo ordine m. Sia $Y_l(G)$ il numero di cliques di ordine l del grafo G e indichiamo con $P(l)$ la probabilità che l'algoritmo raggiunga in un tentativo una qualunque clique di ordine l. Quando questa clique è contenuta in una più grande l'algoritmo è in grado di fare un passo in più e aumentare la taglia della clique. Una volta che la clique di ordine l è stata trovata quindi per stimare la probabilità $P(l+1)$ di trovare una clique più grande mi devo chiedere quante clique di ordine l sono contenute in quelle di ordine $l+1$. Con questa prescrizione allora è evidente che

$$P(l+1) \leq P(l)\frac{(l+1)Y_{l+1}(G)}{Y_l(G)}$$

da cui, scegliendo $k < m$, posso ricavare

$$\frac{P(m)}{P(k)} = \prod_{l=k}^{m-1} \frac{P(l+1)}{P(l)} \leq \prod_{l=k}^{m-1} \frac{(l+1)Y_{l+1}(G)}{Y_l(G)} = \frac{m!\,Y_m(G)}{k!\,Y_k(G)}$$

Se il grafo e random e cerchiamo clique grandi almeno la metà di quella massima possiamo stimare adeguatamente le $Y_l(G)$ con il loro valore medio ottenendo

$$\frac{P(m)}{P(k)} \leq \frac{m!\,\overline{Y_m}}{k!\,\overline{Y_k}} = \frac{(n-k)!}{(n-m)!} p^{\binom{m}{2}-\binom{k}{2}} \leq \left[np^{\frac{1}{2}(m+k-1)}\right]^{(m-k)}.$$

In definitiva, ponendo $m = (1+\epsilon)\log_{1/p} n$ e $k = (1+t\epsilon)\log_{1/p} n$ con $t \in (0,1)$, abbiamo

$$\frac{P(m)}{P(k)} \leq n^{-\frac{1}{2}(1-t^2)\epsilon^2 \log_{1/p} n} = n^{-\Omega \log_{1/p} n}.$$

In pratica, poiché $\Omega > 0$ per qualunque valore di $t \in (0,1)$, allora, anche assumendo $P(k) = 1$, la probabilità di ottenere in un tentativo una clique di ordine m va a zero velocemente con la taglia del sistema. La forma che abbiamo ottenuto d'altra parte può essere interpretata come la probabilità di passare da una clique di ordine k ad una di ordine m. È chiaro quindi che in questa maniera non abbiamo fatto altro che seguire la stessa "ricetta" che abbiamo utilizzato nei capitoli precedenti per stimare superiormente lo spectral gap di una catena con il metodo dei colli di bottiglia. Il numero minimo di ripartenze necessarie N_t per trovare una clique di ordine m può essere stimato a questo punto semplicemente imponendo $N_t P(m) = 1$. Si verifica immediatamente che, proprio come ci aspettavamo, N_t cresce più che polinomialmente con la taglia n del problema, praticamente nella stessa maniera con cui cresce il tempo di mixing degli altri algoritmi random di cui abbiamo discusso precedentemente.

5.2 Ricerca della temperatura ottimale

Gli algoritmi Metropolis e Cavity dipendono entrambi da due parametri: la temperatura ed il campo esterno. I risultati teorici che abbiamo ricavato nel precedente capitolo suggeriscono un comportamento alquanto simile all'algoritmo di Jerrum nel caso in cui la taglia dei grafi è molto grande. Quando invece la taglia non è eccessivamente grande ci aspettiamo che esistano valori che rendono gli algoritmi abbastanza efficienti. In questa sezione vogliamo mostrare i risultati di simulazioni numeriche che avevano lo scopo di cercare le temperature ottimali nel caso di grafi random (così da confrontarle anche con le stime ottenute teoricamente) e verificare se effettivamente gli algoritmi sono in grado di saltare da una clique massimale ad una altra senza rimanere intrappolati. Prima di presentare i risultati vogliamo fare un paio di premesse sul modo di contare le operazioni e i passi degli algoritmi.

5.2.1 Contare le operazioni

La quantità di riferimento sul quale dobbiamo focalizzare l'attenzione è il numero di operazioni richieste per calcolare un campo di cavità. L'algoritmo Metropolis per valutare la possibilità di flippare un sito deve calcolare un campo di cavità mentre l'algoritmo di Cavity deve calcolare i campi di cavità di ogni sito prima di avviare la dinamica Kawasaki. Sia h è il numero di operazioni necessarie per calcolare un campo di cavità. Se voglio trovare una clique di cardinalità k in un grafo di taglia n allora con il Metropolis mi occorrono nh operazioni per aggiornare tutti i siti mentre con il Cavity, poiché devo calcolare n campi di cavità e il Kawasaki va in equilibrio dopo kn operazioni, possiamo dire che tutti i siti vengono aggiornati in circa $n(k + h)$ operazioni. Noi diremo che Cavity o Metropolis hanno fatto un passo quando tutti i siti sono stati aggiornati. È importante osservare che il Metropolis in un passo ha n possibilità di trovare una clique mentre il Cavity una sola. Anche l'algoritmo di Jerrum, per decidere di flippare un sito deve calcolare in pratica un campo di cavità e, come il Metropolis, ha bisogno di nh operazioni per aggiornare tutti i siti e fare un passo. L'algoritmo del Greedy, invece, al primo passo fa n operazioni e poi, una volta trovati i vicini del primo nodo, deve solo aggiungere gli altri nodi aggiornando di volta in volta la lista dei vicini. Si può pensare quindi che anche il Greedy ottiene una clique più o meno in nh operazioni. Generalmente $h \sim k$ e, quindi che tutti gli algoritmi richiedono più o meno lo stesso numero di operazioni. In realtà però il tempo macchina necessario per fare un passo, a parità di numero di operazioni, dipende generalmente dall'algoritmo considerato per via degli effetti dovuti alla gestione della memoria del calcolatore e alla maniera con cui i dati vengono prelevati e riportati sulla RAM. Gli algoritmi $\mathcal{G}$, $\mathcal{J}$ e $\mathcal{M}$, per come li abbiamo implementati, consumano generalmente la stessa quantità di risorse ed il tempo macchina necessario per fare un passo è quindi dello stesso ordine di grandezza per tutti e tre. L'algoritmo $\mathcal{C}$ invece, poiché ad ogni passo deve prelevare più volte dalla memoria l'informazione sui campi di cavità, richiede generalmente un tempo che, sperimentalmente, è circa 6-8 volte maggiore del tempo necessario per fare un passo con gli altri algoritmi. È importante però evidenziare che tale fattore di proporzionalità non aumenta con il crescere della taglia del problema. In tutti i casi che abbiamo osservato si mantiene praticamente costante per taglie che vanno da 100 a 10000 nodi e possiamo quindi considerare tutti gli algoritmi appartenenti alla stessa classe computazionale.

5.2.2 Metropolis

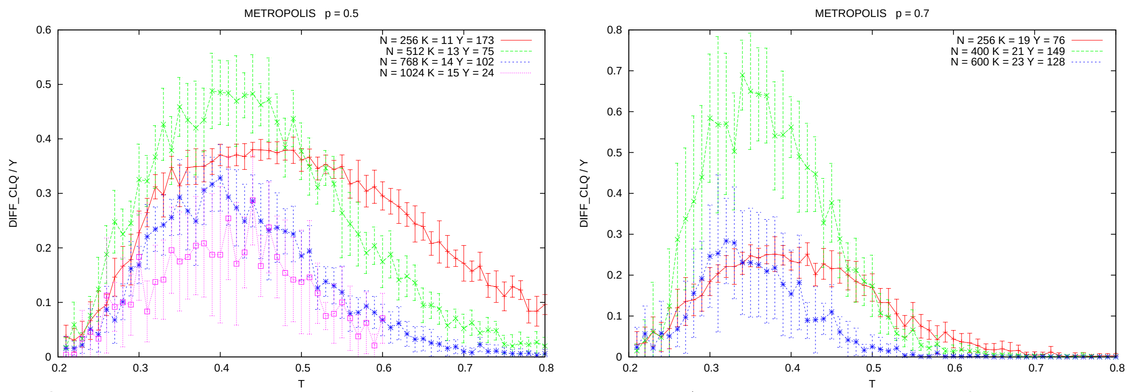
Nel capitolo precedente abbiamo visto che il semplice algoritmo Metropolis dovrebbe concentrarsi sulle clique non appena la temperatura è più piccola di $T_c = 1/\log\omega(G)$. La modalità con la quale abbiamo scelto di fare una simulazione numerica per valutare la ragionevolezza di questa stima è la seguente. Un grafo random è stato estratto per ogni taglia n e densità p che abbiamo considerato e sia k l'ordine della clique da trovare. All'inizio della simulazione la temperatura è fissata ad un valore abbastanza alto $T \simeq 0.8$.

1 Si estrae una configurazione qualunque di k particelle.

2 Si effettuano n^2 passi tenendo il conto del numero di clique differenti di ordine k che vengono trovate.

3 Mantenendo la stessa temperatura si ricomincia dal punto 1 con una configurazione diversa per un certo numero di volte ($\simeq 50 \div 100$) dopo di che si abbassa la temperatura ($\Delta T \simeq 0.01$) fino a $T \simeq 0.2$ (o prima se l'algoritmo non riesce più a trovare le cliques).

In tutti i casi abbiamo fissato il campo esterno ad $h = 1$.

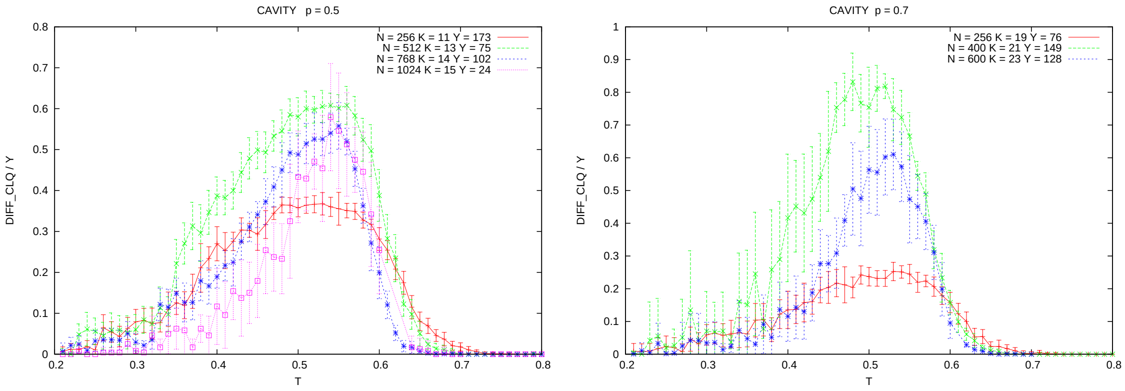


Le figure illustrano bene i risultati della simulazione. Abbiamo riportato in funzione della temperatura la frazione di cliques diverse trovate in n^2 passi (abbiamo stimato con $\overline{Y_k}$ il numero di quelle totali). Il valore è ottenuto come media sulle ripartenze motivo per cui abbiamo aggiunto anche le fluttuazioni. Dai grafici è evidente una buona corrispondenza con le nostre previsioni teoriche. Per ogni taglia i picchi delle "campane" si trovano più o meno alla stesse temperatura, che è quella stimata teoricamente, e shiftano solo debolmente verso sinistra all'aumentare della taglia. Il caso $p = 0.7$, poi, mostra come, all'aumentare della densità degli archi, le temperature ottimali via via diminuiscono. Nelle nostre simulazioni ci siamo preoccupati di stampare anche il numero delle volte totali in cui una clique, differente o meno, è stata trovata. Questo ci ha permesso di vedere effettivamente che, a temperature troppo basse, il problema vero non è quello di trovare una clique ma di rimanere intrappolato intorno alla stessa configurazione. Nella tabella abbiamo riportato le nostre previsioni sulle temperature T_c ottimali per diverse taglie di grafi random.

$G \in \mathcal{G}(n,p)$	$p = 0.5$			$p = 0.7$		
n	$\omega(G)$	T_c	T_{thrs}	$\omega(G)$	T_c	T_{thrs}
128	10	0.4343	0.8264	16	0.3607	0.5880
256	12	0.4024	0.8638	20	0.3339	0.6113
400	13	0.3899	0.7981	21	0.3285	0.6042
512	13	0.3899	0.7881	23	0.3189	0.6008
600	14	0.3789	0.7641	23	0.3189	0.5922
768	14	0.3789	0.7373	25	0.3107	0.5817
1024	15	0.3693	0.7350	26	0.3069	0.6009

5.2.3 Cavity

Anche per l'algoritmo di Cavity abbiamo seguito lo stesso schema del Metropolis per verificare a quale temperature l'algoritmo si rivelava essere più efficiente. Il valore del campo esterno è stato fissato ad $h = 1$ per le istanze con densità $p = 0.5$ e, a $h = 0.85$ per le istanze con densità $p = 0.7$ come le prescrizioni riportate nel capitolo 4, questo per cercare di rendere il gap tra l'1-istogramma e 0-istogramma il più piccolo possibile mantenendo la misura concentrata sulla clique. In tabella abbiamo riportato, per le taglie che abbiamo simulato, le temperature di soglia $T_{thrs} = \Delta_{gap}/\log((g_a - 1)(k - 1))$ al di sopra delle quali l'algoritmo tende a riempire parecchio anche i livelli dello 0-istogramma successivi al gap sfuggendo quindi dalle clique.



In figura si vede bene che, almeno per i per grafi di densità $p = 0.7$, i risultati della simulazione sono in ottimo accordo con le stime teoriche mentre per i grafi di densità $p = 0.5$ cè una certa discrepanza che migliora all'aumentare della taglia del grafo. Il picco della campana non si trova a intorno a T_c, come nel caso del Metropolis, ma ad una temperatura più alta. Questo perché l'algoritmo di Cavity passa su configurazioni diverse solo se riesce a superare il gap di energia e mettere le particelle nel primo livello disponibile dello 0-istogramma. Fintanto che la temperatura è quella giusta allora l'algoritmo è concentrato sulle clique ma riesce a sfuggire agevolmente dal bacino d'attrazione di queste. Non appena la temperatura è intorno al valore di 0.6, che, nel caso di densità $p = 0.7$, è proprio dello stesso ordine di T_{thrs}, le campane iniziano a "crollare". La temperatura infatti diventa abbastanza alta da superare quanto basta il gap d'energia da mettere le particelle anche nei livelli successivi al primo disponibile dello 0-istogramma e faccio fatica quindi a ricostruire la clique con la dinamica Kawasaki. Nel caso $p = 0.5$ la T_{thrs} stimata teoricamente non corrisponde al risultato della simulazione sebbene sembri avvicinarsi al valore della tabella all'aumentare della taglia del grafo. Qualitativamente però lo scenario è quello che ci aspettiamo. Se confrontiamo questi risultati con quelli ottenuti con il Metropolis ci accorgiamo che la frazione di clique diverse trovate da Cavity è tendenzialmente maggiore rispetto a quella del Metropolis. La spiegazione è dovuta al fatto che lo spazio di configurazioni esplorato da Cavity, poiché lavora con un numero di particelle fissate, è molto più piccolo di quello esplorato dal Metropolis. Se la temperatura per entrambi gli algoritmi è quella giusta per trovare le clique ed evitare di rimanere intrappolati allora, a parità di numero passi, l'algoritmo di Cavity riesce ad esplorare più a fondo lo spazio delle configurazioni che contano.

5.3 AlgoGrafoRandom Cup

Uno degli obiettivi principali di questo lavoro è stato quello di stabilire quale fosse, tra Greedy ($\mathcal{G}$), Jerrum ($\mathcal{J}$), Metropolis ($\mathcal{M}$) e Cavity ($\mathcal{C}$), l'algoritmo random migliore per la ricerca delle clique. La natura casuale di tali algoritmi impone però una certa cautela nell'interpretare il risultato ottenuto da poche elaborazioni in quanto l'esito positivo o negativo di una ricerca della clique massimale dipende crucialmente dalle condizioni iniziali e dalla natura dell'istanza. L'esempio più semplice da mostrare è quello del Greedy che sceglie il primo nodo tra quelli che non fanno parte di nessuna clique massimale oppure il caso in cui la clique massimale è una sola ma esiste invece un numero enorme di quelle appena più piccole. Di conseguenza, per non far dipendere i nostri risultati troppo dalla fortuna è cercare di decretare un vincitore (se c'è!), è necessario testare gli algoritmi su diverse istanze e ripetere più volte l'elaborazione su ognuna di esse in modo da ottenere quindi una statistica affidabile. Considerata la natura "hard" del problema però, quando la taglia del problema cresce troppo, questo approccio diventa troppo costoso da poter essere sostenuto. Il compromesso che ci è sembrato più ragionevole è stato quello di considerare il solo caso dei grafi random ed utilizzare le informazioni che si potevano estrarre da simulazioni fatte su piccole scale di tempo. In questa maniera, la buona statistica che si può ottenere su grafi di taglia piccola e media può essere utilizzata per estrapolare l'andamento anche per le taglie più grandi. Oltretutto, poichè la maggior parte del lavoro fa riferimento ai grafi random ci è sembrato opportuno effettuare test approfonditi principalmente su questo tipo di istanze. Al termine del capitolo, comunque, abbiamo riportato i risultati di qualche test effettuato su alcuni benchmarks del DIMACS.

5.3.1 Apparato sperimentale

I nostri programmi sono stati scritti tutti in C++. Abbiamo cercato di mantenere il numero delle operazioni il più piccolo possibile tenendo comunque ben presente il meccanismo con cui i dati vengono prelevati dalla memoria e cercando di evitare un overhead da recupero. I programmi sono stati fatti girare su diversi calcolatori. In particolare un quadriprocessore Power Mac G5 Quad da 2.5 GHz con 8 Gigabytes di RAM e tre quadriprocessori Intel Xeon 5160 da 3.0 GHz da 16 Gigabytes di RAM ciascuno.

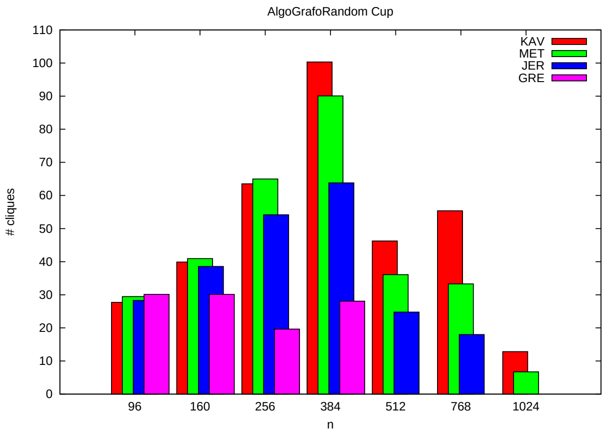
5.3.2 Regolamento

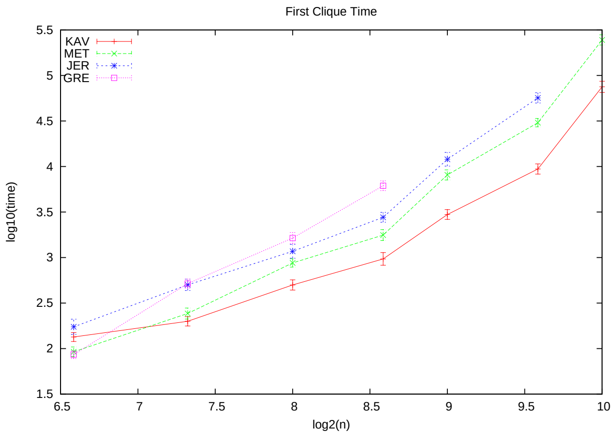
Le taglie dei grafi con cui abbiamo effettuato le simulazioni vanno da $n = 96$ a $n = 1024$, la densità degli archi è fissata a $p = 0.5$. Il numero di grafi estratti varia da 16 per le taglie più grosse fino a 128 per quelle più piccole. Per ogni grafo abbiamo rilanciato gli algoritmi dalle 16 alle 128 volte ed osservato la capacità di questi di trovare, partendo da una configurazione a caso, le cliques in n^2 passi. Abbiamo concesso ad ogni algoritmo n^2 passi per trovare una clique massimale (rilassamento) e, nel caso di successo, altri n^2 passi per trovarne altre ma differenti (mescolamento). Il campo magnetico è stato fissato per $\mathcal{M}$ e $\mathcal{C}$ a $h = 1$ e, considerato che $\log(\omega(G))$ varia poco da grafo a grafo, abbiamo scelto le temperature che ci sembravano il miglior compromesso tra le nostre stime e i risultati della sezione precedente. Per l'algoritmo $\mathcal{J}$ abbiamo scelto il λ ottimale ricavato da altre simulazioni mentre $\mathcal{G}$ non ha parametri. Per valutare gli algoritmi a questo punto abbiamo stabilito di osservare principalmente il numero di passi necessari per trovare la prima clique e il numero di clique diverse trovate nei successivi n^2 passi mediando infine sulle ripartenze e sui grafi della stessa taglia.

5.3.3 Risultati

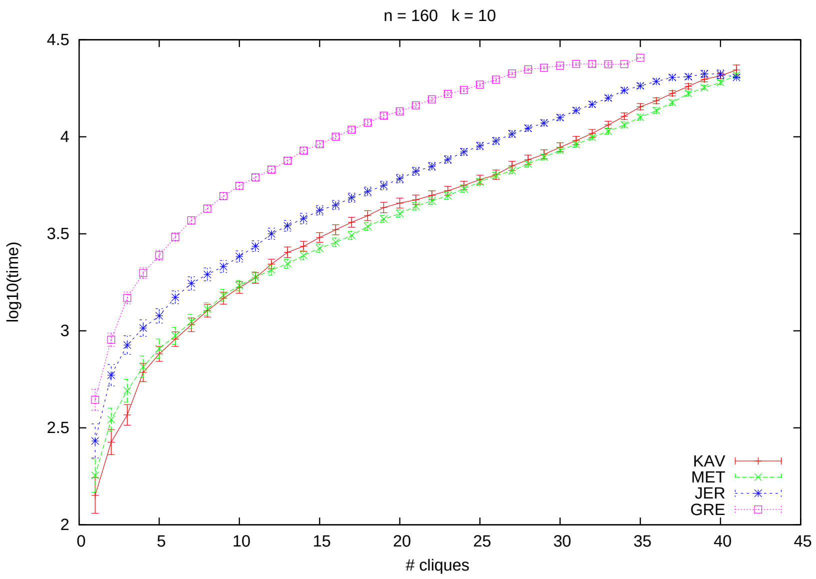
Nella colonna di sinistra abbiamo riportato il numero medio di clique diverse trovate, mentre in quella di destra il numero medio di passi necessari per trovare la prima clique (se < 1 o ∞ significa che, per più grafi e in più della metà delle ripartenze, l'algoritmo non ha trovato cliques; ci sembra opportuno inoltre far osservare che l'effetto "campana" della figura di sinistra è dovuto esclusivamente ad una coincidenza e dipende dal numero di clique massimali presenti in un grafo; se questo contiene 10 cliques allora la colonna non potrà mai essere più alta di 10). È parecchio evidente da questi risultati che, perlomeno nel caso di grafi random di densità $p = 0.5$, l'algoritmo che si comporta meglio è $\mathcal{C}$ mentre $\mathcal{G}$, come ci aspettavamo, è praticamente incapace di trovare clique massimali quando la taglia del grafo è dell'ordine di 512. Il semplice $\mathcal{M}$ rimane comunque un algoritmo interessante e la sua peculiarità di camminare anche su configurazioni che non sono clique lo rende decisamente più efficiente di $\mathcal{J}$ che invece passa solo da una clique all'altra. Osserviamo in particolare che, nel caso $n = 1024$, mentre $\mathcal{J}$ e $\mathcal{G}$ non trovano niente, $\mathcal{C}$ trova in media un numero di clique diverse doppio rispetto ad $\mathcal{M}$ ed il numero di passi per trovare la prima è circa tre volte più piccolo.

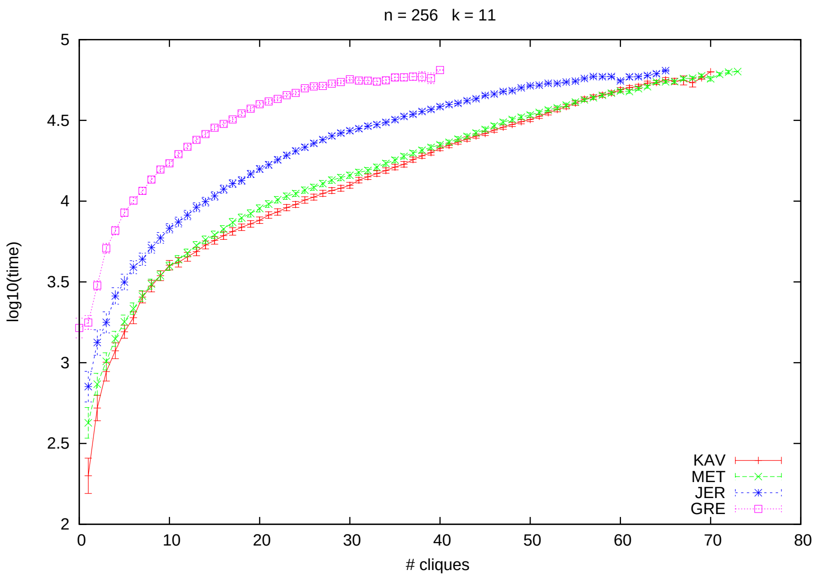
# cliques differenti in n^2 passi				$\mathcal{G}(n, 1/2)$		# passi per trovare la prima			
$\mathcal{C}$	$\mathcal{M}$	$\mathcal{J}$	$\mathcal{G}$	n	$\omega(G)$	$\mathcal{C}$	$\mathcal{M}$	$\mathcal{J}$	$\mathcal{G}$
27.72	29.45	28.30	30.11	96	9	134.016	92.18	173.296	85.875
39.87	40.94	37.78	30.12	160	10	199.312	242.925	5012.71	517.5
63.5	64.97	53.90	19.64	256	11	500.25	873.387	1170.1	1639.38
100.31	90.06	63.80	28.08	384	12	965.484	1764.85	2766.73	6148.38
46.25	36.08	24.77	< 1	512	13	2970.55	8077.62	12003.4	∞
55.36	33.30	17.98	< 1	768	14	9385.44	30284.4	56719.3	∞
12.85	6.73	< 1	< 1	1024	15	74992.8	245464	∞	∞

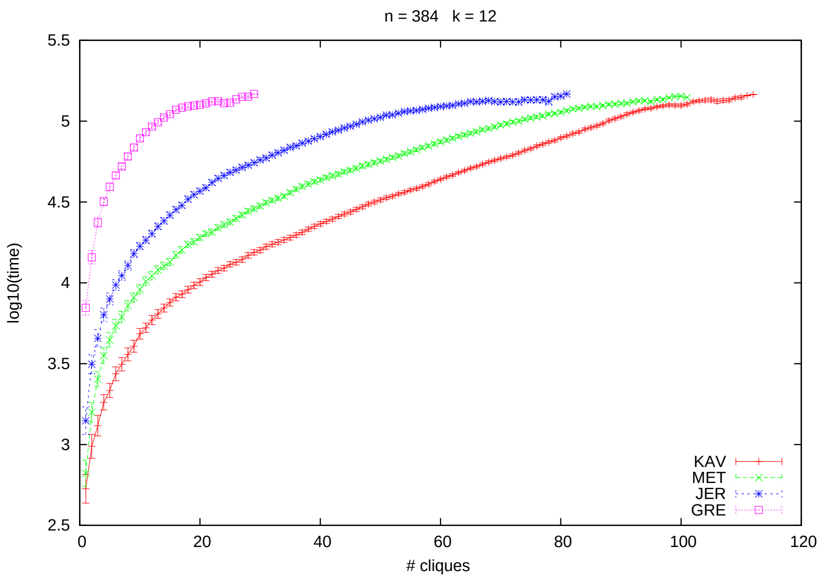


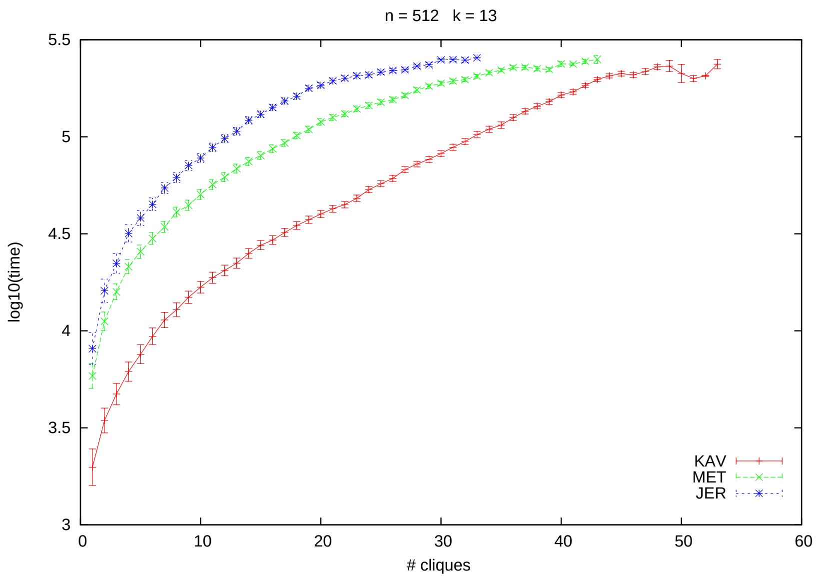


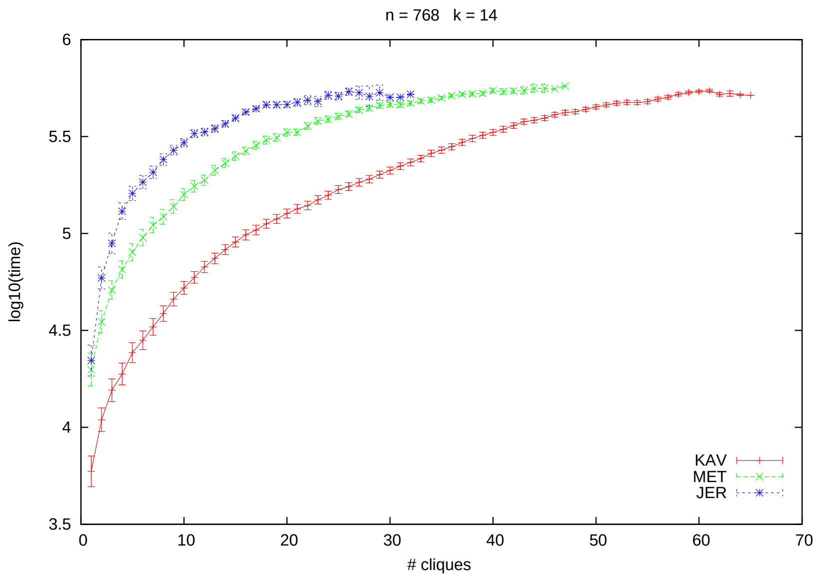
I grafici della pagina seguente sottolineano ancora meglio questa supremazia. Per le diverse taglie considerate abbiamo riportato il numero medio di passi necessari all'algoritmo per trovare il numero di clique riportato in ascissa. L'algoritmo $\mathcal{C}$, oltre a trovare più clique, è in grado di passare più velocemente da una all'altra e quindi, come ci aspettavamo, questo significa che risente meno degli altri dell'effetto delle frustrazioni e riesce a sfuggire più facilmente dal bacino d'attrazione di una clique. In definitiva, ci sentiamo di dire che, perlomeno quando l'istanza è random di densità $p = 0.5$, Cavity è il migliore algoritmo random per la ricerca delle cliques massimali.

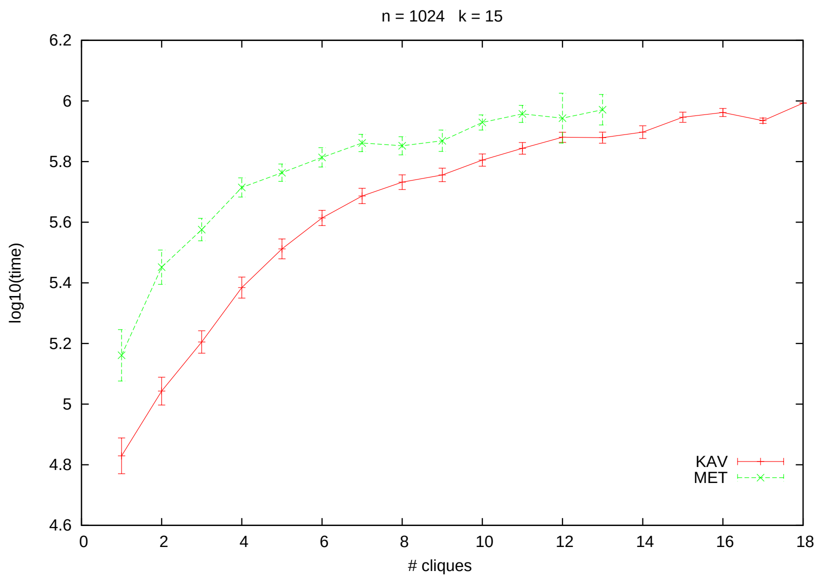

n = 160 k = 10
log10(time)
# cliques
KAV
MET
JER
GRE


n = 256 k = 11
log10(time)
# cliques
KAV
MET
JER
GRE


n = 384 k = 12
log10(time)
# cliques
KAV
MET
JER
GRE


n = 512 k = 13
log10(time)
# cliques
KAV
MET
JER


n = 768 k = 14
log10(time)
# cliques
KAV
MET
JER


n = 1024 k = 15
log10(time)
# cliques
KAV
MET

5.3.4 DIMACS Benchmarks

L'algoritmo $\mathcal{C}$ però, a differenza degli altri algoritmi, lavora nel canonico, l'ordine della clique da trovare è fissato fin dall'inizio ed occorre conoscere l'ordine della massima clique per poter inizializzarne correttamente i parametri. Quando l'ordine della massima clique non è noto dobbiamo modificare l'algoritmo per renderlo capace di incrementare all'occorrenza la taglia della clique da cercare. L'idea è quella di partire con una taglia appena superiore a quella di un clique sicuramente presente (quella che si ottiene con un $\mathcal{G}$ ad esempio) e lanciare quindi l'algoritmo. Ogni volta che una clique viene trovata in un numero massimo P di passi si "aggiunge una particella" e si "premia" l'algoritmo con altri P passi. In questa maniera si trovano via via clique sempre più grandi e l'algoritmo si arresta solo quando in P passi non trova più nessuna clique ed esibisce in output la più grande che ha trovato fino a quel momento. Il problema fondamentale consiste nel fatto che la temperatura per $\mathcal{C}$ dipende crucialmente dal numero di particelle e dalla densità degli archi. Nel caso di grafi random la scelta più obiettiva è quella di provare di volta in volta diversi valori di temperatura intorno a quella ottimale stimata teoricamente ($\beta \sim \log k$). In tutti gli altri casi si può pensare di stimare la densità degli archi con il numero medio v dei vicini di un nodi e scegliere di conseguenza la temperatura di riferimento identica a quella che si assumerebbe nel caso in cui il grafo sia random di densità $p = v/n$. Successivamente si fa variare la temperatura intorno a tale valore e si incrociano le dita. Applicando anche agli altri algoritmi lo stesso meccanismo di premiazione e di scelta dei parametri ottimali possiamo valutare e confrontare la capacità di questi di trovare la massima clique di un grafo qualunque. In questa maniera siamo riusciti a testare gli algoritmi sui benchmarks del DIMACS. Sulla singola istanza ogni algoritmo è stato tentato 10 volte ed abbiamo "messo in palio" premi di $P = 100 \cdot n$ passi. Nelle tabelle che seguono abbiamo riportato, per alcuni valori diversi di T e λ ($h = 1$ per $\mathcal{M}$ e $\mathcal{C}$), la clique massima trovata, il tempo macchina che è stato speso per trovarla ed il numero di tentativi che hanno avuto esito sufficientemente positivo. Innanzitutto dobbiamo verificare che il modo in cui vogliamo effettuare il test, almeno nel caso random e taglie piccole e medie, permette sempre agli algoritmi di trovare cliques grandi. La prima tabella si riferisce quindi a diverse istanze di grafi random ed i risultati sembrano positivi. Rimane evidente che $\mathcal{G}$ ha le prestazioni peggiori. Tutti gli altri algoritmi invece si comportano praticamente nella stessa maniera se il grafo è piccolo e la densità di archi non troppo alta. Non appena la densità o la taglia del grafo aumenta l'algoritmo di Jerrum comincia ad avere, rispetto agli altri due, un certo calo di prestazioni. Riesce quasi sempre a trovare clique massimali ma non con la stessa frequenza con la quale riescono $\mathcal{M}$ e $\mathcal{C}$. A densità $p = 0.9$, però, $\mathcal{J}$ trova clique abbastanza più piccole degli altri due. Prendendo il miglior risultato, nel caso $n = 1000$ e $p = 0.9$, $\mathcal{J}$ trova 64 una sola volta, $\mathcal{C}$ trova 67 cinque volte mentre $\mathcal{M}$ trova 67 una volta sola. Con $n = 1500$ e $p = 0.9$ $\mathcal{J}$ trova al massimo 68, mentre gli altri 72. In pratica $\mathcal{M}$ e $\mathcal{C}$ sembrano prevalere abbastanza nettamente sugli altri algoritmi e comportarsi sui grafi random in maniera ragionevolmente compatibile a quello previsto dal nostro studio teorico. Le tabelle successive sono quelle relative ai risultati ottenuti con i benchmarks del DIMACS. Sebbene i risultati delle prime due tabelle siano abbastanza buoni da convincerci di essere vicini a capire come scegliere i parametri giusti ed adattare quindi gli algoritmi ad istanze qualunque, ecco che l'ultima tabella ci ricorda quanto ancora dobbiamo lavorare. In certi casi, infatti, siamo lontanissimi dalla clique massimale e $\mathcal{J}$ addirittura surclassa in molti casi $\mathcal{M}$ e $\mathcal{C}$, evidenziando quindi come la maniera di scegliere la temperatura, immaginando che le istanze siano casuali quando non lo sono affatto, è decisamente perdente. A soffrire maggiormente di questo fatto è proprio $\mathcal{C}$ che, in alcuni casi, non riesce assolutamente a crescere di taglia. Questo non significa però che l'algoritmo di Cavity non è in grado di trovare le massime cliques dei benchmarks. Simulazioni effettuate in maniera un po' euristica in cui i parametri sono stati aggiustati "a mano" (guidati dall'andamento di alcune quantità come l'energia o l'overlap tra una configurazione e la successiva) hanno mostrato che, in 10 ripartenze di $100 \cdot n$ passi, l'algoritmo $\mathcal{C}$ è in grado di trovare la soluzione di 58 benchmarks su 68 e in 6 casi sui 10 rimasti trova cliques di appena un nodo più piccole di quella massima.

Concedendo poi un tempo più lungo e più ripartenze è possibile arrivare alla soluzione di 62 istanze benchmarks. Quelle che l'algoritmo non riesce a risolvere, tutte "brock", resistono tenacemente ad ogni nostra euristica.

Graphs		$\mathcal{G}$reedy			$\mathcal{J}$errum				$\mathcal{M}$etropolis				$\mathcal{C}$avity			
tbbga_n.p	$\omega(G)$	k	#/10	time(ms)	λ	k	#/10	time(ms)	T	k	#/10	time(ms)	T	k	#/10	time(ms)
tbbga_200.5	11	11	9	1270	0.05	11	10	460	0.3	10	9	930	0.45	11	1	4220
					0.1	11	10	50	0.35	11	6	420	0.5	11	7	6540
					0.2	11	9	330	0.4	11	10	270	0.55	11	10	2520
tbbga_200.7	19	19	1	19620	0.05	19	8	420	0.3	18	4	1210	0.45	19	1	46910
					0.1	19	9	400	0.35	19	1	22260	0.5	19	1	60830
					0.2	19	8	520	0.4	19	8	790	0.55	19	3	95020
tbbga_200.9	42	40	1	73720	0.05	42	4	300	0.3	42	3	4500	0.45	42	6	63100
					0.1	42	3	3030	0.35	42	6	3600	0.5	42	7	26360
					0.2	42	4	1960	0.4	42	9	1240	0.55	42	4	46860
tbbga_500.5	14	13	7	2660	0.05	14	5	6670	0.3	13	4	9130	0.45	13	5	11060
					0.1	14	5	2080	0.35	14	1	88460	0.5	14	1	431820
					0.2	14	4	20510	0.4	14	2	16790	0.55	14	1	257000
tbbga_500.7	22	20	8	3650	0.05	22	2	11660	0.3	21	8	19140	0.45	22	2	233890
					0.1	22	5	5620	0.35	22	3	20340	0.5	22	4	26420
					0.2	22	6	10610	0.4	22	7	8640	0.55	22	10	3520
tbbga_500.9	*58*	49	3	325000	0.05	56	6	29980	0.3	56	4	15450	0.45	56	2	125260
					0.1	57	1	79070	0.35	57	3	57230	0.5	57	1	3355040
					0.2	57	1	16890	0.4	57	10	10000	0.55	57	9	462480
tbbga_1000.5	15	14	8	35240	0.05	15	3	34970	0.3	14	4	3590	0.45	14	10	5560
					0.1	15	2	16060	0.35	14	10	5980	0.5	15	1	815910
					0.2	14	10	10310	0.4	15	2	249120	0.55	15	2	305510
tbbga_1000.7	*26*	23	1	558080	0.05	25	2	93220	0.3	24	4	41800	0.45	24	8	8290
					0.1	25	1	171520	0.35	25	2	32400	0.5	25	5	1027310
					0.2	24	9	880	0.4	25	6	9180	0.55	26	1	4471230
tbbga_1000.9	*69*	56	1	3584480	0.05	64	1	110000	0.3	64	2	942700	0.45	65	1	7200510
					0.1	62	4	61690	0.35	67	1	898920	0.5	65	8	745520
					0.2	62	6	37560	0.4	67	1	551610	0.55	67	5	5256750
tbbga_1500.5	*16*	15	3	80190	0.05	16	2	95260	0.3	16	1	592000	0.45	16	1	71470
					0.1	16	1	46550	0.35	16	1	177940	0.5	15	10	4400
					0.2	15	9	3760	0.4	15	10	18570				
tbbga_1500.7	*28*	24	4	179740	0.05	26	3	148420	0.3	26	2	659500	0.45	26	4	282460
					0.1	26	2	263530	0.35	26	7	235480	0.5	26	7	91730
					0.2	26	4	63140	0.4	27	2	254840				
tbbga_1500.9	*75*	59	7	292080	0.05	67	2	25330	0.3	70	5	209020	0.45	71	1	309640
					0.1	68	1	732150	0.35	72	2	477480	0.5	72	1	44464880
					0.2	67	6	100550	0.4	72	2	578800				

Graphs		$\mathcal{G}$reedy			$\mathcal{J}$errum				$\mathcal{M}$etropolis				$\mathcal{C}$avity			
Benchmarks	$\omega(G)$	k	#/10	time(ms)	λ^{-1}	k	#/10	time(ms)	T	k	#/10	time(ms)	T	k	#/10	time(ms)
C125.9	34	34	4	922	0.05	34	10	16	0.3	34	10	383	0.45	34	9	742
					0.1	34	10	8	0.35	34	10	109	0.5	34	10	719
					0.15	34	10	39	0.4	34	10	55				
C250.9	44	41	1	5125	0.05	44	3	2516	0.3	44	1	17906	0.45	44	6	23805
					0.1	44	4	3773	0.35	44	8	383	0.5	44	9	8563
					0.15	44	2	3680	0.4	44	10	188				
C500.9	57	48	3	92133	0.05	53	4	8626	0.3	55	5	17031	0.45	56	1	294656
					0.1	53	6	1367	0.35	56	4	64093	0.5	56	5	62555
					0.15	53	4	3273	0.4	57	1	78946				
C1000.9	68	56	4	472554	0.05	61	2	96359	0.3	65	1	280344	0.45	64	8	67672
					0.1	61	2	10578	0.35	68	1	501227	0.5	68	1	4841383
					0.15	61	1	54188	0.4	67	4	69383				
C2000.9	≥ 80	62	9	650000	0.05	67	5	42813	0.3	74	4	832070	0.45	75	1	7185922
					0.1	67	2	292875	0.35	76	1	2605055	0.5	76	1	15410899
					0.15	68	1	549923	0.4	75	1	318274				
C4000.5	≥ 18	17	2	621086	0.05	17	3	405140	0.3	17	2	441156	0.45	17	7	94820
					0.1	17	4	970790	0.35	17	6	184523				
					0.15	17	4	297359	0.4	17	9	11742				
DSJC500.5	14	13	6	6750	0.05	13	10	234	0.3	13	1	29032	0.45	13	6	1523
					0.1	13	10	23	0.35	13	10	469	0.5	13	10	7852
					0.15	13	10	1547	0.4	13	8	1484				
DSJC1000.5	15	15	1	59843	0.05	15	2	68616	0.3	14	4	438	0.45	14	10	3375
					0.1	15	1	80695	0.35	14	10	4344	0.5	15	2	475508
					0.15	15	4	19391	0.4	15	4	44273				
keller4	11	11	10	0	0.05	11	10	0	0.3	11	10	8	0.45	11	5	9063
$n = 171$					0.1	11	10	0	0.35	11	10	0	0.5	10	2	11414
$d = 0.65$					0.15	11	10	0	0.4	11	10	8				
keller5	≥ 27	26	5	21109	0.05	27	9	6695	0.3	27	1	54086	0.45	16	3	797
$n = 776$					0.1	27	6	12079	0.5	27	7	4102				
$d = 0.75$					0.15	27	10	3906	0.4	27	10	3820				
c-fat200-1	12	12	10	0	0.05	12	4	563	0.3	12	1	0	0.45	12	3	1117
$d = 0.077$					0.1	12	5	0	0.35	12	3	1406	0.5	12	5	0
					0.15	12	4	0	0.4	12	5	688				
c-fat200-2	24	24	10	0	0.05	23	3	445	0.3	23	1	5932	0.45	23	2	9320
$d = 0.163$					0.1	22	5	0	0.35	23	3	2532	0.5	23	4	0
					0.15	23	2	1781	0.4	23	2	0				
c-fat200-5	58	58	10	0	0.05	58	4	1047	0.3	58	3	2578	0.45	58	2	0
$d = 0.426$					0.1	58	2	1062	0.35	58	7	3828	0.5	58	5	28477
					0.15	58	3	1047	0.4	58	3	2524				
c-fat500-1	14	14	10	0	0.05	14	2	10266	0.3	14	3	22608	0.45	14	2	9212
$d = 0.036$					0.1	13	2	18110	0.35	14	1	36088	0.5	14	5	0
					0.15	14	2	7774	0.4	14	1	31523				
c-fat500-2	26	26	10	0	0.05	26	4	0	0.3	26	5	0	0.45	26	4	0
$d = 0.073$					0.1	26	4	2656	0.35	26	4	0	0.5	26	5	0
					0.15	26	4	2664	0.4	26	1	21600				
c-fat500-5	64	64	10	0	0.05	64	2	2899	0.3	63	3	33744	0.45	64	2	8
$d = 0.186$					0.1	64	2	3164	0.35	64	2	0	0.5	64	1	450774
					0.15	64	1	23624	0.4	64	1	16618				
c-fat500-10	126	126	10	0	0.05	124	2	12383	0.3	126	4	0	0.45	126	1	2748485
$d = 0.374$					0.1	125	1	19935	0.35	126	4	26546	0.5	126	6	23
					0.15	124	1	27404	0.4	126	2	39437				
gen200_p0.9_44	44	38	1	29328	0.05	44	10	352	0.3	40	8	2711	0.45	43	1	66086
					0.1	44	10	266	0.35	44	1	16267	0.5	43	1	169923
					0.15	44	9	1359	0.4	44	8	1180				
gen200_p0.9_55	55	53	1	41008	0.05	55	10	156	0.3	44	2	4679	0.45	44	1	135891
					0.1	55	10	141	0.35	55	1	3742	0.5	55	3	122015
					0.15	55	10	211	0.4	55	10	1164				
gen400_p0.9_55	55	46	2	25977	0.05	51	1	29251	0.3	53	1	92564	0.45	52	1	345484
					0.1	50	5	9180	0.35	54	1	63726	0.5	55	1	743109
					0.15	50	4	2070	0.4	55	2	36507				
hamming6-2	32	32	10	0	0.05	32	10	0	0.3	32	10	39	0.45	32	6	31
$n = 64$					0.1	32	10	0	0.35	32	10	16	0.5	32	7	2923
$d = 0.9$					0.15	32	10	0	0.4	32	10	0				
hamming6-4	4	4	10	0	0.05	4	10	0	0.3	4	10	0	0.45	4	10	0
$n = 64$					0.1	4	10	0	0.35	4	10	0	0.5	4	10	0
$d = 0.35$					0.15	4	10	0	0.4	4	10	0				
hamming8-2	128	128	3	67196	0.05	127	2	10827	0.3	106	2	9172	0.45	128	1	97516
$n = 256$					0.1	127	2	8469	0.35	128	3	4586	0.5	125	1	4125
$d = 0.97$					0.15	127	2	1164	0.4	128	10	1789				
hamming8-4	16	16	10	39	0.05	16	10	8	0.3	16	10	78	0.45	13	1	74883
$n = 256$					0.1	16	10	8	0.35	16	10	8	0.5	12	6	6266
$d = 0.64$					0.15	16	10	0	0.4	16	10	0				

Graphs		$\mathcal{G}$reedy			$\mathcal{J}$errum				$\mathcal{M}$etropolis				$\mathcal{C}$avity			
Benchmarks	$\omega(G)$	k	#/10	time(ms)	λ^{-1}	k	#/10	time(ms)	T	k	#/10	time(ms)	T	k	#/10	time(ms)
johnson8-2-4	4	4	10	0	0.05	4	10	0	0.3	4	10	0	0.45	4	10	0
$n = 28$					0.1	4	10	0	0.35	4	10	0	0.5	4	10	0
$d = 0.55$					0.15	4	10	0	0.4	4	10	0				
johnson8-4-4	14	14	10	0	0.05	14	10	0	0.3	14	10	39	0.45	14	4	1407
$n = 70$					0.1	14	10	0	0.35	14	10	0	0.5	14	9	47
$d = 0.77$					0.15	14	10	0	0.4	14	10	0				
johnson16-2-4	8	8	10	0	0.05	8	10	0	0.3	8	10	0	0.45	8	10	8
$n = 120$					0.1	8	10	0	0.35	8	10	0	0.5	8	10	180
$d = 0.765$					0.15	8	10	0	0.4	8	10	0				
johnson32-2-4	16	16	10	0	0.05	16	10	0	0.3	16	10	0	0.45	16	2	401414
$n = 496$					0.1	16	10	0	0.35	16	10	0				
$d = 0.88$					0.15	16	10	0	0.4	16	10	0				
p_hat300-1	8	8	10	8	0.05	8	10	31	0.3	8	9	344	0.45	8	8	266
$d = 0.25$					0.1	8	10	39	0.5	8	10	203	0.35	8	10	180
					0.15	8	10	23	0.4	8	10	86				
p_hat300-2	25	25	1	14913	0.05	25	10	16	0.3	25	10	195	0.45	25	10	352
$d = 0.49$					0.1	25	10	16	0.5	25	10	109	0.5	25	10	461
					0.15	25	10	16	0.4	25	10	78				
p_hat300-3	36	33	2	12250	0.05	36	9	859	0.3	36	8	10641	0.45	36	6	26476
$d = 0.75$					0.1	36	10	219	0.35	36	10	258	0.5	36	9	1352
					0.15	36	10	945	0.4	36	10	211				
p_hat500-1	9	9	10	164	0.05	9	10	23	0.3	9	10	586	0.45	9	10	39
$d = 0.25$					0.1	9	10	0	0.35	9	10	47	0.5	9	10	70
					0.15	9	10	109	0.4	9	10	39				
p_hat500-2	36	33	1	114383	0.05	36	10	102	0.3	36	10	2641	0.45	36	10	844
$d = 0.5$					0.1	36	10	219	0.35	36	10	297	0.5	36	10	1102
					0.15	36	10	78	0.4	36	10	94				
p_hat500-3	≥ 50	44	2	127687	0.05	50	1	32766	0.3	50	5	2516	0.45	50	10	19188
$d = 0.75$					0.1	50	2	7999	0.35	50	10	930	0.5	50	10	36211
					0.15	50	4	15086	0.4	50	10	1078				
p_hat700-1	11	11	1	16930	0.05	11	10	906	0.3	10	3	11297	0.45	11	2	68727
$d = 0.25$					0.1	11	10	227	0.35	11	8	7211	0.5	11	8	14594
					0.15	11	10	891	0.4	11	9	297				
p_hat700-2	44	39	1	78836	0.05	44	10	234	0.3	44	10	2008	0.45	44	10	859
$d = 0.5$					0.1	44	10	648	0.35	44	10	930	0.5	44	10	672
					0.15	44	10	750	0.4	44	10	813				
p_hat700-3	≥ 62	54	2	112258	0.05	62	2	31484	0.3	62	10	2609	0.45	62	10	30664
$d = 0.75$					0.1	62	1	24289	0.35	62	10	1445	0.5	62	10	7086
					0.15	62	4	1047	0.4	62	10	1414				
p_hat1000-1	≥ 10	10	10	2727	0.05	10	10	117	0.3	10	10	5211	0.45	10	10	180
$d = 0.245$					0.1	10	10	117	0.35	10	10	563	0.5	10	10	422
					0.15	10	10	172	0.4	10	10	578				
p_hat1000-2	≥ 46	41	1	544571	0.05	46	10	773	0.3	46	10	17359	0.45	46	10	89961
$d = 0.49$					0.1	46	10	1461	0.35	46	10	867	0.5	46	10	2508
					0.15	46	10	3117	0.4	46	10	438				
p_hat1000-3	≥ 68	54	3	8789	0.05	67	1	61633	0.3	68	5	21328	0.45	68	3	151016
$d = 0.75$					0.1	67	1	192595	0.35	68	10	34109	0.5	68	8	16797
					0.15	67	1	107422	0.4	68	10	3188				
p_hat1500-1	12	11	10	2102	0.05	12	3	39813	0.3	11	9	33719	0.45	11	10	695
$d = 0.25$					0.1	12	2	131007	0.35	11	10	3852	0.5	12	1	68953
					0.15	12	2	44555	0.4	12	4	2703				
p_hat1500-2	≥ 65	51	5	75367	0.05	65	7	23516	0.3	65	9	33141	0.45	65	9	4430
$d = 0.50$					0.1	65	3	23898	0.35	65	10	2289	0.5	65	10	7117
					0.15	65	5	14055	0.4	65	10	2234				
p_hat1500-3	≥ 94	71	2	894898	0.05	93	2	391860	0.3	94	10	46789	0.45	94	10	35039
$d = 0.75$					0.1	92	2	95969	0.35	94	10	38578	0.5	94	10	37539
					0.15	92	3	68383	0.4	94	10	3273				
sanr200_0.7	18	18	1	10758	0.05	18	10	63	0.3	18	3	3250	0.45	18	5	1273
					0.1	18	10	78	0.35	18	5	2055	0.5	18	6	7305
					0.15	18	10	78	0.4	18	10	188				
sanr200_0.9	42	39	5	14898	0.05	42	5	1016	0.3	42	2	4250	0.45	42	2	66507
					0.1	42	7	1039	0.35	42	3	6962	0.5	42	6	50578
					0.15	42	5	523	0.4	42	8	258				
sanr400_0.5	13	12	10	86	0.05	13	8	1836	0.3	12	5	10641	0.45	13	4	3148
					0.1	13	7	63	0.35	13	6	2406	0.5	13	7	5961
					0.15	13	8	289	0.4	13	6	539				
sanr400_0.7	21	20	2	10914	0.05	21	8	1594	0.3	20	8	1141	0.45	21	4	1117
					0.1	21	9	219	0.35	21	4	6734	0.5	21	9	3273
					0.15	21	9	500	0.4	21	10	1641				

Graphs		$\mathcal{G}$reedy			$\mathcal{J}$errum				$\mathcal{M}$etropolis				$\mathcal{C}$avity			
Benchmarks	$\omega(G)$	k	#/10	time(ms)	λ^{-1}	k	#/10	time(ms)	T	k	#/10	time(ms)	T	k	#/10	time(ms)
san200_0.7_1	30	30	10	281	0.05	16	9	188	0.3	18	1	4906	0.45	16	5	1289
					0.1	16	9	39	0.35	17	4	2195	0.5	16	1	67617
					0.15	17	1	430	0.4	17	1	4906				
san200_0.7_2	18	18	4	3133	0.05	14	5	148	0.3	15	1	6765	0.45	13	6	3531
					0.1	14	7	117	0.35	14	9	23	0.5	12	6	8226
					0.15	14	6	78	0.4	14	4	469				
san400_0.5_1	13	13	9	5195	0.05	9	1	8360	0.3	8	9	0	0.45	7	9	16
					0.1	8	8	938	0.35	8	8	7953	0.5	7	4	305
					0.15	9	1	2196	0.4	8	6	6766				
san200_0.9_1	70	70	9	4078	0.05	48	2	172	0.3	60	1	19064	0.45	51	1	112039
					0.1	48	4	742	0.35	60	1	26772	0.5	45	4	28172
					0.15	48	6	172	0.4	52	1	12149				
san200_0.9_2	60	60	4	2289	0.05	60	9	1242	0.3	45	2	7203	0.45	47	1	41930
					0.1	60	10	1055	0.35	60	10	2359	0.5	47	1	131383
					0.15	60	10	773	0.4	60	10	1008				
san200_0.9_3	44	37	2	12781	0.05	44	10	789	0.3	38	1	11898	0.45	38	2	9430
					0.1	44	10	563	0.35	40	1	8453	0.5	38	4	12477
					0.15	44	10	336	0.4	44	4	5172				
san400_0.7_1	40	40	9	3336	0.05	22	1	15655	0.3	21	5	6664	0.45	20	6	141
					0.1	21	6	734	0.35	21	8	0	0.5	19	3	123437
					0.15	22	1	5570	0.4	22	1	3453				
san400_0.7_2	30	30	1	53709	0.05	17	1	11953	0.3	18	1	1305	0.45	16	5	54469
					0.1	18	1	20335	0.35	18	1	27797	0.5	15	4	9625
					0.15	17	4	781	0.4	17	3	3258				
san400_0.7_3	22	17	9	2625	0.05	16	4	4399	0.3	18	2	6109	0.45	13	4	703
					0.1	16	6	297	0.35	18	1	7656	0.5	12	2	50055
					0.15	16	3	4578	0.4	16	8	336				
san400_0.9_1	100	84	1	135829	0.05	53	4	1375	0.3	61	1	29898	0.45	54	1	627227
					0.1	53	4	11054	0.35	54	3	26155	0.5	51	1	974516
					0.15	53	4	4735	0.4	54	2	2242				
brock200_1	21	20	5	656	0.05	21	4	70	0.3	20	5	133	0.45	21	2	21976
$d = 0.745$					0.1	21	7	578	0.35	21	3	391	0.5	21	5	2320
					0.15	21	4	1469	0.4	21	7	453				
brock200_2	12	12	10	8	0.05	12	1	3281	0.3	10	10	211	0.45	11	1	6243
$d = 0.496$					0.1	12	3	2172	0.35	11	3	1258	0.5	11	6	4399
					0.15	12	1	1594	0.4	11	5	516				
brock200_3	15	15	10	16	0.05	14	10	47	0.3	13	9	39	0.45	14	2	4477
$d = 0.605$					0.1	14	10	102	0.35	14	2	4758	0.5	14	6	250
					0.15	14	10	94	0.4	14	9	172				
brock200_4	17	17	2	1625	0.05	16	10	39	0.3	16	3	469	0.45	16	7	703
$d = 0.658$					0.1	17	1	4392	0.35	16	8	469	0.5	16	8	70
					0.15	17	1	1304	0.4	16	10	94				
brock400_1	27	23	8	10047	0.05	25	1	21852	0.3	25	1	46994	0.45	25	2	120415
$d = 0.75$					0.1	25	2	10734	0.35	25	3	1570	0.5	25	2	32695
					0.15	25	2	14117	0.4	25	5	805				
brock400_2	29	23	4	21212	0.05	24	10	359	0.3	24	4	383	0.45	25	3	8766
$d = 0.75$					0.1	24	10	797	0.35	25	3	9500	0.5	25	2	119929
					0.15	25	2	12210	0.4	25	7	1852				
brock400_3	31	24	1	4938	0.05	25	3	9024	0.3	24	3	20445	0.45	24	7	18843
$d = 0.75$					0.1	25	1	23516	0.35	25	1	42414	0.5	25	2	190539
					0.15	25	1	8946	0.4	25	7	2625				
brock400_4	33	33	1	5742	0.05	26	1	1180	0.3	24	6	1016	0.45	25	1	186142
$d = 0.75$					0.1	25	2	8672	0.35	25	2	16047	0.5	25	6	16148
					0.15	25	2	11453	0.4	25	8	3352				
brock800_1	23	19	10	16234	0.05	20	10	4055	0.3	20	3	4625	0.45	21	1	57125
$d = 0.65$					0.1	20	7	250	0.35	21	1	24695	0.5	20	10	8242
					0.15	20	9	1203	0.4	21	2	59867				
brock800_2	≥ 21	20	2	78141	0.05	20	10	2922	0.3	20	5	33132	0.45	20	8	9273
$d = 0.65$					0.1	20	10	2891	0.35	21	2	48196	0.5	21	3	294312
					0.15	21	1	92296	0.4	21	1	87523				
brock800_3	25	19	10	16156	0.05	20	10	3836	0.3	20	6	7391	0.45	21	1	109735
$d = 0.65$					0.1	20	10	1297	0.35	20	9	1195	0.5	21	3	250718
					0.15	21	1	87251	0.4	21	2	7211				
brock800_4	≥ 21	20	1	70249	0.05	21	1	56211	0.3	20	3	50946	0.45	20	4	1625
$d = 0.65$					0.1	20	7	1094	0.35	21	2	111782	0.5	20	10	15211
					0.15	20	6	9992	0.4	21	1	38704				

Conclusione

L'idea principale che di questo lavoro è quella di sfruttare la meccanica statistica, la teoria sui vetri di spin e le proprietà delle catene di Markov per creare, comprendere e sviluppare due nuovi algoritmi random per la ricerca della clique: un Metropolis con dinamica alla Glauber ($\mathcal{M}$) ed un algoritmo ispirato al metodo della cavità ($\mathcal{C}$). Al confronto con altri algoritmi random più famosi, che abbiamo mostrato essere casi particolari di $\mathcal{M}$, le loro prestazioni sembrano decisamente migliori. In particolare, la dinamica originale di $\mathcal{C}$ è quella che, alla luce di simulazioni numeriche, sembra essere la più promettente. Abbiamo dimostrato in maniera rigorosa però che, per tutti gli algoritmi considerati, il tempo di mixing cresce più che polinomialmente con la taglia del problema. In questo senso è vero che, se la taglia del grafo è elevata, gli algoritmi $\mathcal{C}$ e $\mathcal{M}$ sono destinati inesorabilmente a comportarsi come quello di Jerrum ($\mathcal{J}$) o, peggio, come il Greedy ($\mathcal{G}$). Le simulazioni numeriche mostrano però una supremazia di $\mathcal{M}$ e $\mathcal{C}$ rispetto a $\mathcal{J}$ e $\mathcal{G}$ che ci è sembrato opportuno indagare.

La prima novità che gli algoritmi $\mathcal{C}$ e $\mathcal{M}$ hanno rispetto a tutti gli altri consiste nell'avere la possibilità di "camminare" su configurazioni che non sono cliques. In questa maniera hanno a disposizione, in linea di massima, più vie d'uscita quando rimangono intrappolati in uno "stato metastabile" che non sia l'ottimo. I due parametri a disposizione, temperatura e campo esterno, hanno il ruolo cruciale di regolare proprio questa disponibilità dell'algoritmo di "rompere" le cliques. La scelta ottimale dovrebbe essere quella che mi permette di passare il più velocemente possibile da una clique ad un'altra. In altri termini dobbiamo cercare di scegliere i parametri in modo che l'algoritmo riesca a trovare i minimi della funzione costo e, nello stesso tempo, sia poi in grado di sfuggire velocemente dal loro bacino d'attrazione. Lo studio teorico che abbiamo affrontato aveva quindi l'obiettivo principale di ricavare i valori giusti di temperatura T e campo magnetico h per $\mathcal{M}$ e $\mathcal{C}$. Da questo punto di vista l'algoritmo di Cavity si è rivelato, oltre che oggetto di studio, anche un utile strumento in grado di mostrare le peculiarità tipiche del problema delle clique. La possibilità di trasformarne la dinamica in una statistica di Fermi, ci ha infatti permesso di comprendere meglio la maniera con la quale gli algoritmi lavorano suggerendoci poi il meccanismo migliore per ottenere le cliques. Il lavoro teorico su $\mathcal{C}$ ci ha permesso quindi di capire dove nascono delle difficoltà, individuare e classificare le "trappole" per la dinamica e stimare il gap di energia che deve essere superato per uscirne. È stato anche possibile osservare che, per valori negativi del campo esterno h, la misura invariante di Cavity smette di concentrarsi sulle clique e si concentra invece sui $BCBS$. In linea di principio quindi $\mathcal{C}$ è un algoritmo in grado di risolvere anche un altro problema NP-completo.

Le simulazioni numeriche hanno verificato come, nel caso di istanze random, le stime annealed siano abbastanza ragionevoli da presentare correttamente il "panorama" di energie in gioco. Su questo aspetto è possibile anche congetturare che tali stime potrebbero essere addirittura migliori se le grandezze in gioco fossero effettivamente grandi. Infatti, c'è sempre da tenere in seria considerazione che le clique massimali sono generalmente di qualche ordine di grandezza più piccole rispetto alla taglia del grafo. Nel caso dei grafi random abbiamo visto che la crescita è addirittura solo logaritmica e bisogna quindi essere cauti nelle stime di larghe deviazioni quando l'ordine della clique è solo di poche decine di nodi.

Noi crediamo che l'ingrediente fondamentale per completare in maniera quasi definitiva l'analisi di questi algoritmi sia una stima dall'alto del tempo di mixing che sappiamo essere per tutti gli algoritmi dell'ordine $\tau_{mix} \sim n^{\Omega \log n}$. Il nodo della questione è legato alla crescita lentissima del logaritmo. Il valore della costante Ω, di conseguenza, può essere abbastanza importante da stabilire differenze sostanziali tra un algoritmo ed un altro ed il successo o meno di una particolare scelta dei parametri T e h di cui Ω è, in linea di principio, funzione. Ricavarne un stima dall'alto permetterebbe quindi di guidare la scelta della temperatura e del campo magnetico ottimale e di decretare definitivamente quale algoritmo sia più efficiente. Le idee sulle quali stiamo lavorando in questo momento si basano sull'analogia tra reti elettriche e catene di Markov presentate nel capitolo 2. Anche in questo caso le caratteristiche di $\mathcal{C}$ rispetto agli altri algoritmi tornano decisamente più utili. La forma della probabilità di transizione e quella della misura invariante, infatti, sono tali da permetterci di fare calcoli altrimenti impossibili con gli altri algoritmi. Confidiamo di venirne a capo in tempi brevi.

Nel caso di grafi qualunque per adesso siamo costretti a fare parecchia euristica. Per cercare di capire come comportarci, abbiamo effettuato al variare di T e h alcune simulazioni e stampato alcuni osservabili per tutta la storia del sistema. Quello che più è sembrato evidente da questi test è che gli algoritmi lavorano nella maniera più efficace quando l'energia media si mantiene dell'ordine di un paio di unità e le cliques sono ottenute per fluttuazioni di energia. Il problema è che non sempre ciò accade. Molto dipende dalla natura del grafo se non è random e, quando le clique grandi sono poche, diventa oltremodo difficile pescarle con una fluttuazione. La nostra esperienza ci suggerisce comunque che, perlomeno per grafi di taglia < 16000, esistono dei valori ottimali per temperatura e campo h che rendono $\mathcal{C}$ un algoritmo decisamente efficiente. Una soluzione potrebbe essere allora quella di possedere due "manopole" in grado di modificare temperatura e campo esterno a seconda dell'andamento dell'elaborazione ma a quel punto l'algoritmo richiederebbe l'intervento umano diventando quindi meno interessante. L'idea potrebbe essere allora quella di sfruttare un meccanismo di memoria reattiva come accade nell'algoritmo RLS, in grado di trovare da solo i parametri giusti. Noi, per il momento, siamo capaci di farlo solo guardando dei grafici.

In definitiva, l'algoritmo $\mathcal{M}$ non ha nulla di veramente particolare. È praticamente una dinamica alla Glauber che soffre della presenza di frustrazioni ed è stretto parente di $\mathcal{J}$ e $\mathcal{G}$. L'algoritmo $\mathcal{C}$, sebbene richieda per fare un passo qualche risorse di calcolo in più, è quello che possiede le potenzialità maggiori. Le simulazioni hanno mostrato la capacità di tale algoritmo di trovare, alle temperature giuste, un numero considerevole di cliques diverse rispetto agli altri. Si potrebbe tentare quindi di sfruttare la proprietà di $\mathcal{C}$ di trovare tante clique, anche non massimali, utilizzando un algoritmo completo su un sottoinsieme decisamente più piccolo per verificare velocemente e con esattezza se una o più di queste clique trovata da $\mathcal{C}$ è contenuta in una clique più grande.

In definitiva, il problema delle clique rimane intrattabile (non sarebbe potuto essere altrimenti!), ma noi crediamo (o perlomeno speriamo!) di aver introdotto qualche nuova idea in grado di farci avvicinare di mezzo nodo in più alla clique massimale.

Bibliografia

[1] R. Karp. Reducibility among combinatorial problems. *Plenum Press*, 1972.

[2] M. G. C. Resende J. Abello, P. Pardalos. On maximum clique problems in very large graphs. 1999.

[3] M. Mézard G. Parisi R. Zecchina. Analytic and algorithmic solution of random satisfiability problems. *Science*, 297(10.1126/science.107328):812–815, 2002.

[4] M. Mézard R. Zecchina. The random k-satisfiability problem: From an analytic solution to an efficient algorithm. *arXiv: cond-math*, (0207194), 2003.

[5] D. Sherrington S. Kirkpatrick. Infinite-ranged models of spin glasses. *Phys. Rev.*, pages 4384–4403, 1978.

[6] M. Mézard G. Parisi. The bethe lattice spin glass revisiteded. *arXiv: cond-math*, (0009418), 2003.

[7] G. Parisi. Constraint optimizazion and statistical mechanics. *arXiv: cond-math*, (0312011), 2004.

[8] G. Parisi. Replica and glasses. *arXiv:cond-math*, (9907052), 1999.

[9] M. Mézard G. Parisi M. A. Virasoro. Sk model: The replica solution without replicas. *Europhys. Lett.*, pages 77–82, 1986.

[10] S. KirkpatricK C.D. Gellatt M.P. Vecchi. Optimization by simulated annealing. *Science*, 220(4598):671–680, 1983.

[11] A.Iovanella B.Scoppola E.Scoppola. Some spin glass ideas applied to the clique problem. *Journal of Statistic Physics*, 126:895–915(21), 2007.

[12] M. Jerrum. Large clique elude the metropolis process. *Random Structures and Algoritms*, 3(4), 1992.

[13] J.L. Snell P.G. Doyle. Random walks and electric networks. *arXiv:math*, (0001057), 2000.

[14] M. R. Garey D. S. Johnson. *Computer And Intractability: A Guide Of The Theory Of NP-Completeness*. Freeman, New York, 1976.

[15] B. Bollobas. *Random Graph*. Cambridge University Press, 2001.

[16] K. Huang. *Meccanica Statistica*. Zannichelli, 1987.

[17] F. Guerra. Spin glass. *arXiv: cond-math*, (0507581), 2005.

[18] G. Parisi. Glasses, replicas and all that. *arXiv:cond-math*, (0301157), 2003.

[19] M. Mézard G. Parisi M. A. Virasoro. *Spin Glass Theory And Beyond*. World Scientific, 1987.

[20] F. M. Russo. On lattice gas models for disordered systems. *arXiv: cond-math*, (9710334), 1997.

[21] F. den Hollander. *Large Deviation*. American Mathematical Society, 2000.

[22] F. M. Russo. Lattice analogue of sk model: A paradigm for the glass transition. *arXiv: cond-math*, (9711013), 1998.

[23] E. Marinari G. Parisi. Trattatello di probabilitá. Ufficio Dispense presso il Dipartimento Di Fisica dell' Universitá La Sapienza di Roma.

[24] O. Häggström. *Finite Markov Chains And Algorithmic Applications*. Cambridge university Press, 2002.

[25] Y. Peres. Mixing for markov chains and spin system. Technical report, U.C. Berkeley, 2005.

[26] L. Saloff-Coste. *Lectures On Finite Markov Chains*. Springer Berlin / Heidelberg, 1997.

[27] P.Diaconis D.Strook. Geometric bound for eigenvalues of markov chains. *Ann. Appl. Probab.*, 1:36–61, 1991.

[28] A. Sinclair. Improved bounds for mixing rates of markov chains and multicommodity flowput. *Combin. Probab. Com.*, 1:351–370, 1992.

[29] P.Y. Louis P. Dai Pra. Stationary measures and phase transition for a class of pca. *ESAIM: Probability And Statistics*, 6:89–104, 2002.

[30] P. R. J. Ostegard. A fast algorithm for the maximum clique problem. *Discrete Applied Mathematics*, (120):197–207, 2002.

[31] R. Battiti M. Protasi. Reactive local search for the maximum clique problem. *Algorithmica*, 29(4):610–637, 2001.

Thanks

Un ringraziamento fortissimo ad Elisabetta Scoppola perché è stato stata sempre disponibile e comprensiva e ha sopportato le mia maniera di fare i conti e sporcare la lavagna; a ragione, tutti gli altri dottorandi me la invidiano. Benedetto Scoppola che per me è sempre stato un mito dai tempi in cui faceva l'assistente a Gallavotti. Ringrazieró per bene pure Antonio Iovanella appena mi porterá dal giapponese! Un abbraccio speciale ad Alexandre Gaudillière perché è una persona speciale, mi ha fatto rivenire voglia di pensare comunista e con lui ho affrontato la piú grande impresa della mia vita; . . . 30 Km a piedi tra le Calanques ti legano per la vita! Giorgio Parisi che per me è un super-eroe dai super-poteri ed Andrea Cavagna e Irene Giardina che sono in grado di fare miracoli pure loro. Un'abbraccione a tutti i compagni di dottorato: Christian, Luca, Simona, Sara, Elena & Claudio, Gabriele e Valentino. Un ringraziamento anche alla Professoressa Paola Gallo che m'ha dato una mano ad arrotondare lo stipendio ed ho pure imparato qualcosa. Un abbraccione ad Andrea non vedo l'ora di dirti "bella zi'!" Un bacione a Giorgia, te vojo bene e vedrai che 'sto strazio de' universitá finirá pure per te. E adesso i riconoscimenti speciali per chi m'ha aiutato veramente a finire questa tesi (che è stato un parto!): grazie Andre' pe' la stampante laser (e a colori)...è solo una delle tante altre cose che hai fatto per me; bella Robe' (sono ringraziamenti ufficiale e ti devo chiamare per nome) . . . adesso so' veramente affari tuoi!; Un abbraccione a mia cugina Francesca che è la più forte vidogiocatrice che conosco e un buffetto ad Antonio anche se è della Lazio. Un bacio a Claudia e Giulia (e a Stefano no perchè è cattivo!) . . . adesso c'ho più tempo per voi! Grazie a mio fratello Marco che non s'arrabbia più di tanto se dentro casa non faccio niente e grazie a mia sorella Monica che non s'arrabbia più di tanto per quello che, invece, faccio dentro casa! Grazie a Romolo e a Francesco per tutte le volte che mi sopportano quando sono polemico. Grazie a Valentina e una lacrima per il suo cheese-cake! Un saluto a Gianfranco alla maniera dei motociclisti che usano Linux. Un abbraccio forte a Chiara che gli voglio tanto bene. Un bacione a Laura che a volte mi manca . . . io e te tacos e cinese x tutta la vita! Un grazie a Loredana perchè ormai tocca toglierli il joypad dalle mani. Grazie Enza, giuro che mi faccio perdonare . . . basta che non sia troppo faticoso! Un grandissimo bacio e abbraccio a Tiziana alla quale voglio bene e senza la quale questa tesi avrebbe contenuto così tanti errori grammaticali da non farmi meritare neanche la licenza elementare . . . vedrai che tutto andrà ok . . . basta che smette di piovere! Grazie Alessandro che mi sostieni ogni volta che barcollo . . . appoggiati pure a me qualche volta! Grazie a Roberto e Manuele . . . mi siete venuti in mente e ho sorriso! Un pensiero alla donnina del Village, quello sempre. A Luca, Roberto, Marco e Federico voglio ringraziarli sul campo di calcetto! Un grazie a Giorgio Mattei perchè è la persona migliore che ho mai conosciuto. Grazie anche a Battiato e ai Radiohead per avermi fatto compagnia in tutte queste nottate. Grazie Francesca per avermi fatto fare il puzzle e Riccardino tu cresci bene. Un bio-grazie a Flavio perchè ha contribuito fortissimamente a farmi stare bene ed a Ilaria che sopporta noi e la nostra crisi adolescenziale! Grazie Christian perché è solo merito tuo se sono della Roma. Grazie Cinzia, scrivermi con te m'ha fatto pensare a tante cose. Un saluto a Diego e Valerio, la vostra compagnia e sempre impagabile . . . ad uno racconterò di Linux, l'altro lo batterò alla ps3 un giorno! Grazie di cuore a zie Licia senza la quale la mia vita sarebbe ancora più disordinata di quanto non lo sia già. E alla fine, solo perchè sia più evidente degli altri, grazie a mia madre e mio padre, gli unici genitori che ho mai voluto avere.