

人工智能问题中的相变现象研究

谷文祥 黄平 朱磊 殷明浩

(东北师范大学计算机科学与信息技术学院 长春 130117)

摘要 在人工智能研究领域的很多问题中存在着相变现象(phase transition)。问题中的某个参数发生较小的变化便会引起问题的某个属性发生突变。相变现象与问题求解结构有很大关系,将从相变现象的发展、相关概念以及相变现象与问题求解的关系等方面对相变现象做全面的论述,提出了有待解决的开放性问题,并对相变现象的研究给以总结和展望。

关键词 相变, SAT 问题, 参数问题, backbone 集合

中图分类号 TP18 **文献标识码** A

Research of Phase Transition in Artificial Intelligence

GU Wen-xiang HUANG Ping ZHU Lei YIN Ming-hao

(School of Computer Science and Information Technology, Northeast Normal University, Changchun 130117, China)

Abstract Phase transition exists in many problems of Artificial Intelligence. Phase transition is with a little change to the parameter there is a sharp transition to the system. There is a great relationship between phase transition and the structure of problem, this paper made more comprehensive introduction about the developing, related concepts of phase transition and the relationship between phase transition and the structure of problem. Moreover, summarized some unresolved questions and given the summary and outlook of research on phase transition.

Keywords Phase transition, Propositional satisfiability problem, Parameter problem, Backbone set

1 引言

人工智能领域中的很多问题是难以计算的。例如 SAT 问题的计算复杂性即为 NP 完全的^[1]。这意味着如果 $P \neq NP$ 成立,即无法在多项式时间内解决 SAT 问题。另一方面,目前的 SAT 问题求解器已经可以在 10s 以内处理包含 10 万个变量、100 万个子句以上规模的 SAT 问题实例。理论上的求解困难和实际中的求解高效形成了巨大反差,引起了研究人员的广泛关注。

1994 年, Kirkpatrick 和 Selman 在“Science”杂志上撰文指出,对于 k -SAT 问题存在从可满足到不可满足的突变现象,即所谓的“相变现象”。当 $\alpha < \alpha_c$ (α 与 α_c 均为子句个数与变量个数的比值)时, k -SAT 问题实例的可满足概率趋近于 1; 当 $\alpha > \alpha_c$ 时, k -SAT 问题实例的可满足概率趋近于 0。该文同时指出,在相变区域两侧较远的地方,大部分 SAT 实例一般容易求解,而在相变点附近 (α_c 称为相变点)大部分实例的求解通常是困难的^[2]。在此基础上,1996 年 Mitchell 等人给出了 SAT 问题中子句的个数与命题变量的个数的比值和命题可满足性的关系以及该比值和问题难度的关系^[3]。1999 年 Selman 等人“Nature”上指出,求解 k -SAT 问题在计算复杂性上的分布呈现出一种特殊的“easy-hard-easy”模式,即

当子句个数和变量个数的比值到达一定值时,问题从可满足跃迁为不可满足,从易于求解突变到难于求解又转向易于求解^[4]。

近年来,对相变现象的研究已经成为人工智能乃至计算机科学领域的研究热点。在 SAT 问题相变的基础上,研究人员对其他困难问题的相变现象做了深入研究。研究发现,在旅行商问题(Traveling Salesman Problem, TSP)、约束可满足问题(Constraint Satisfaction Problem, CSP)、量词布尔范式(Quantified Boolean Formula, QBF)、智能规划(Intelligent Planning)等问题中,都存在着相变现象。

对相变现象的研究不仅有助于研究人员理解导致求解问题困难的本质,而且激发研究人员针对相变区域问题设计更好的求解算法。以 SAT 问题为例,2002 年 Mézard 等人在“Science”杂志上提出调查传播(Survey Propagation, SP)算法,该算法源于统计物理学,可以在稍高于线性时间内判断具有 100 万变量规模的处于相变区域的 SAT 问题^[5]。此外,相变现象还与复杂问题结构中的隐蔽集、骨架集等结构密切相关。因此本文将从相变现象的发展、相关概念以及相变现象与问题求解的关系等方面对相变现象做全面的论述,提出有待解决的开放性问题,并对相变现象的研究给以总结和展望。

到稿日期:2010-06-02 返修日期:2010-08-21 本文受国家自然科学基金(60473042,60573067,60803102,61070084)资助。

谷文祥(1947-),男,博士生导师,主要研究方向为智能规划与规划识别、形式语言与自动机、模糊数学及其应用, E-mail: gwxx@nenu.edu.cn;

黄平(1986-),女,硕士生,主要研究方向为智能规划与规划识别;朱磊(1987-),男,硕士生,主要研究方向为智能规划与规划识别;殷明浩

(1979-),男,讲师,主要研究方向为智能规划与自动推理。

2 相关概念

在计算机科学领域,相变现象的研究最初源于 SAT 问题,首先介绍本文涉及的相关概念。

2.1 相关问题

定义 1(命题可满足问题, SAT) 给定一个命题公式 F , $X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 是 F 中变量的集合,命题可满足问题就是能否找到 X 的一组真值赋值,使得公式的值为真。若找到这样的赋值,则称其是可满足的,否则为不可满足的。

定义 2(约束可满足问题, CSP) CSP 问题是一个三元组 $F = \langle V, D, C \rangle$, 其中,

V 是变量的集合, $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$

D 是值域的集合, $D = \{D_1, D_2, \dots, D_n\}$

C 是约束的集合, $C = \{C_1, C_2, \dots, C_m\}$

对于每一个变量 v_i , 只能取其值域 D_i 里面的值, 一个约束 C 由 V 的子集 $\{v_1, v_2, \dots, v_k\}$ 和关系 $R_{1\dots k} \subseteq D_1 \times D_2 \times \dots \times D_k$ 组成。一个约束是可满足的当且仅当存在一组真值赋值是属于关系 $R_{1\dots k}$ 的。当所有的约束都被满足时, 我们就称这个 CSP 问题是可满足的, 否则为不可满足的。

定义 3(旅行商问题, TSP) TSP 是一个三元组 $T(C, D, L)$ 。其中 C 是城市的集合 $\{c_1, c_2, \dots, c_n\}$; D 是一个 $n \times n$ 矩阵, 矩阵中的每个元素为每对城市之间的距离 $d(c_i, c_j)$; L 是旅行长度, $L = \sum_{i=1}^{n-1} d(c_{\sigma(i)}, c_{\sigma(i+1)}) + d(c_{\sigma(n)}, c_{\sigma(1)})$, σ 是 n 个城市的排列。一个 TSP 问题就是确定是否存在长度小于等于 L 的线路访问所有 n 个城市。

定义 4(量化布尔公式问题, QBF Problem) QBF(Quantified Boolean Formula) 是一种带有存在量词和全称量词的命题逻辑公式, 形如 $Q_1 x_1 \dots Q_n x_n F$, 其中 $Q_i \in \{\exists, \forall\}$, F 是一个命题公式, $Q_1 x_1 \dots Q_n x_n$ 称为前缀。一个 QBF 问题就是满足量词约束的前提下, 求解满足命题公式 F 的变量的赋值。

如果公式中只存在量词, 那 QBF 问题就退化为一般的 SAT 问题, 因此可以说 QBF 问题是 SAT 问题的一种泛化。

定义 5(规划, Planning) 如果一个实体在初始状态下经过执行一系列动作, 最后到达目标状态, 那么这一系列动作, 严格地说, 动作 1, 动作 2, \dots , 动作 n 形成的动作序列就叫做一个规划。

定义 6(规划问题, Planning Problem) 一个规划问题是一个四元组 $T = \langle S, A, I, G, \rangle$, 其中,

S 是有限状态的集合; A 是有限动作的集合; $I \subseteq S$ 是初始状态集合; $G \neq \emptyset$ 是一个部分状态, 称为目标条件。

动作 $a \in A$ 是一个二元组 $\langle pre(a), eff(a) \rangle$, 分别表示 a 的前提条件和执行效果, 其中 $eff(a)$ 中每个效果是一个二元组 $\langle del(a), add(a) \rangle$, $del(a)$ 是删除效果, $add(a)$ 是添加效果。

一个规划解是一个动作序列 $\sigma = \langle a_0, a_1, \dots, a_{n-1} \rangle$, 其中 σ 在 I 上可用且 $G \subseteq Image[\sigma](I)$ 。

定义 7(RB 模型) 生成 CSP 实例的 RB 模型是 $RB(k, n, \alpha, r, p)$, 其中每个参数对应的是: $k \geq 2$, 是约束的维数; n 是总的变量数; α 是约束每个变量的值域, 即值域大小 $d = n^\alpha$, 并且我们约定每个变量值域的大小 d 都相同; r 是约束密度, 即约束个数 $m = r \ln(n)$; p 是约束紧度, 即对于每一个约束, 有 $q = p \cdot d^k$ 组赋值是不一致的。

根据 RB 模型的定义, 可以给出生成 CSP 实例的具体过

程:

(a) 随机、可重复地选择 $t = r \ln(n)$ 个约束, 每一个随机约束都不重复地选择 k 个变量。

(b) 均匀、不可重复地选择 $q = p \cdot d^k$ 组不一致的赋值组, 也即每一个约束关系恰好包含了 $(1-p) \cdot d^k$ 组一致的赋值组。

2.2 参数复杂性

一个参数问题可以表示为一个二元关系 $L \subseteq \Sigma^* \times \Sigma^*$, 其中 Σ 是固定的字母表。一个问题实例可以表示为一个二元组 $(x, k) \in L$, 其中 x 为问题的主体, k 为正整数表示问题的参数。我们称 L 是固定参数可解的 (Fixed-Parameter Tractable, FPT), 当且仅当 L 可以在时间 $O(f(k)n^c)$ 内求解, 其中 f 是参数 k 的多项式函数, c 为常数。文献[17]中给出了参数类问题的层次结构:

$$FPT \subseteq W[1] \subseteq W[2] \subseteq \dots \subseteq W[P] \subseteq XP$$

式中, XP 表示可以在 $O(f(k)n^{g(k)})$ 时间内解决的参数化问题, $f(k), g(k)$ 是关于 k 的多项式函数。

2.3 隐蔽集 (Backdoor Set) 和骨架集 (Backbone Set)

隐蔽集和骨架集是 SAT, CSP 等问题中的重要结构, 与问题求解难度以及问题的相变现象有密切关系。最初在 2003 年 Williams 等人为了分析基于 CSP 和 SAT 问题的回溯算法中的重尾现象提出了隐蔽集[6]。隐蔽集的大小和问题的难度有密切的关系。目前有 3 种隐蔽集: 强隐蔽集、删除隐蔽集和弱隐蔽集。若基本类是封闭的, 则删除隐蔽集和强隐蔽集等价[7]。

定义 8(强隐蔽集, Strong Backdoor[6]) 给定一个命题逻辑公式 $F, B \in Var(F)$, 如果对于 B 中变量的任意赋值都使得 $F[\tau]$ 在多项式时间内可解, 那么变量集合 B 就是强隐蔽集。

定义 9(弱隐蔽集, Weak Backdoor[8]) $B \in Var(F)$, 如果 B 中变量存在一个真值指派 τ 使得 $F[\tau]$ 在多项式时间内可解, 那么变量集合 B 就是弱隐蔽集。

定义 10(删除隐蔽集, Delete Backdoor[7]) $B \in Var(F)$ 是一个非空变量子集, 如果简化公式 $F - B$ 可在多项式时间内求解, 那么变量集合 B 是删除隐蔽集。

与隐蔽集密切相关的另一个重要的结构是骨架集。

定义 11(骨架集, Backbone Set[4]) 给定一个命题逻辑公式 F , 骨架集是一个变量的集合 $B \in Var(F)$, 在所有的可满足赋值中, B 中变量的赋值都相同。

Kilby 用实验的方法指出, 在可满足问题中, 骨架集和隐蔽集几乎没有交集, 且问题的难度与隐蔽集的大小相关, 而与骨架集大小基本无关[9]。

定义 12(支配团, Dominating Clique[10]) 给定图 $G(V, E)$, $N(v)$ 表示顶点 $v \in V$ 的邻居集合, G 的一个 α -threshold 支配团是顶点的子集 $V_D \subseteq V$, V_D 是一个团, 并且对于所有 $v \in V \setminus V_D$, $|N(v) \cap V_D| \geq \alpha$ 。一个 1-threshold 支配团简称为支配团。

定义 13(加权可满足问题, Weighted SAT Problem[11]) 加权可满足问题是一个二元组 $W-SAT(P, k)$, 其中 P 是一个 SAT 问题, k 是一个参数, 是否存在一个可满足赋值, 使得赋值中变量取值为真的个数为 k 。

3 相变现象的研究及其发展

1991年, Cheeseman 等人在 IJCAI91 中指出, 在哈密尔顿回路、图着色等问题中存在一个控制参数, 问题的某个属性会随着这个参数的改变而发生突变。同时他们提出一个猜想: 相变不仅是 NP 完全问题的一个共同现象, 而且可以作为这类问题的一个定义特征。1994 年 Kirkpatrick 和 Selman 在“Science”杂志上撰文明确指出 SAT 问题中存在相变现象。当子句个数与变量个数的比值达到某一临界值时, k -SAT 问题存在从可满足到不可满足的突变现象。事实上, 目前相变现象不仅出现在 SAT 问题等 NP 完全问题中, 同样存在于其他复杂类问题。

3.1 NP 问题中的相变现象

在 NP 问题中, 对相变现象的研究主要集中于 3 类经典 NP 问题、即命题可满足问题、约束可满足问题、旅行商问题。

3.1.1 命题可满足问题

1994 年 Kirkpatrick 和 Selman 在“Science”杂志上撰文指出, 对于 k -SAT 问题存在从可满足到不可满足的突变现象, 即所谓的“相变现象”。当 $\alpha < \alpha_c$ (α 与 α_c 均为子句个数与变量个数的比值) 时, k -SAT 问题实例的可满足概率趋近于 1; 当 $\alpha > \alpha_c$ 时, k -SAT 问题实例的可满足概率趋近于 0。

(1) 2-SAT 相变

Chvatal 等证明了在 2-SAT 中 $\alpha = 1$ ^[12]。换言之, 在 2-SAT 问题中, 当子句个数与变量个数比值小于 1 时, 2-SAT 问题基本上都是可满足的; 当子句个数与变量个数比值大于 1 时, 2-SAT 问题基本上都是不可满足的。

(2) 3-SAT 相变

在 3-SAT 问题中, Crawford 等人通过实验证明了 $\alpha \approx 4.27$, 如图 1 所示。当子句个数与变量个数比值小于 4.27 时, 问题实例的可满足概率几乎为 100%; 当子句个数与变量个数比值大于 4.27 时, 问题实例可满足的概率几乎为 0。问题的求解, 其难度也从易于求解跃迁为难于求解, 最后回到易于求解^[13]。

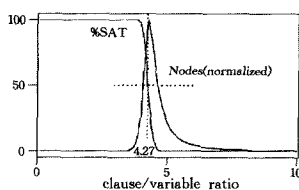


图 1 3-SAT 问题相变

实验中给出的相变点是可满足概率为 50% 时的参数值。理论上对相变点的研究是从上下界进行逼近。表 1 和表 2 给出了目前 3-SAT 问题的上下界研究进展。

表 1 3-SAT 相变点的上界

上界	作者	年份
4.49	Diaz et al.	2008
4.506	Dubois et al.	2000
4.571	Kaporis et al.	2007
4.596	Janson et al.	1999
4.602	Kirousis et al.	1998
4.642	Dubois & Boufkhad	1997
4.667	Kirousis et al.	1996
4.758	Kamath et al.	1994
5.081	Mafthoui & Fernandez	1993
5.191	John & Marvin	1983

表 2 3-SAT 相变点的下界

下界	作者	年份
3.52	Hajiaghayi et al.	2003
3.145	Achlioptas	2000
3.003	Frieze & Suen	1996
2.99	Chao & Franco	1986, 1990
2.67	Chvátal & Reed	1992
1.63	Broder et al.	1993

(3) $(2+p)$ -SAT 相变

当 $k=2$ 时, 问题是多项式时间可解的。而当 $k>2$ 时, 问题是 NP 的。由此, 人们开始研究子句的长度介于这两者之间, 即 2-SAT 和 3-SAT 时的混合问题的相变现象。1998 年, Monasson 和 Zecchina 研究了 $(2+p)$ -SAT 问题, 这是一种 2-SAT 和 3-SAT 的混合问题, 其中 p 是长度为 3 的子句在整个公式中的比例, 他们给出了 $(2+p)$ -SAT 问题相变点的上下界, $0.4 \leq p \leq 0.416$ 。当 $p \leq 0.4$ 时, 整个问题体现的是 2-SAT 的特征; 而当 $p > 0.416$ 时, 则更多地体现 3-SAT 的特征^[14]。

(4) k -SAT ($k \geq 3$) 相变

1999 年, 相变区域的存在性研究取得了突破性进展。Friedgut 证明了随机 k -SAT 问题的相变区域的存在, 并指出随着变量数的增加, 相变区域逐渐变窄, 但是相变点的位置也是不确定的^[15]。

(5) 主相似度相变

许可和李未也研究了 SAT 问题的相变现象, 证明了对于随机 k -SAT 模型, 当 α (子句数/变量数) 到达某个临界点时, 解的结构也会发生与可满足概率类似的突变现象, 可满足赋值之间的关系由差别很大突然变得很相似。他们证明了主相似度相变的存在性, 即

定理 1^[16] 对于随机 k -SAT 模型, 给定子句长度 $k (k \geq 5)$, 存在某个临界值 α_c (临界值 α_c 大小与 k 有关), 使得对于任意小的正值 ϵ , 有

$$\begin{cases} \lim_{r \rightarrow r_{cr}^-} S_{mj} = s_{1cr} \text{ 且 } S_{mj} < s_{1cr}, & \text{当 } \alpha = \alpha - \epsilon \\ \lim_{r \rightarrow r_{cr}^+} S_{mj} = s_{3cr} \text{ 且 } S_{mj} > s_{3cr}, & \text{当 } \alpha = \alpha + \epsilon \end{cases}$$

式中, $s_{1cr} < s_{3cr}$ 。 S_{mj} 是主相似度, 主相似度的大小代表了可满足赋值之间的相似程度, 主相似度的值越大, 表明可满足赋值之间越相似。 α 是子句数/变量数的比值, s_{1cr} 和 s_{3cr} 是相似度 (赋值相同的变量数/变量总数)。相变曲线如图 2 所示^[16]。在此基础上, 对于随机 CSP 问题, 他们提出了平均相似度的概念, 证明了 CSP 问题解的结构也存在相变现象^[17]。

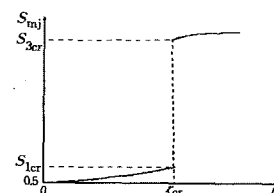


图 2 随机 k -SAT 相变

主相似度的相变说明了除可满足概率相变以外, SAT 问题还存在其他形式的相变现象。这就启发我们除研究可满足概率相变以外, 应多关注其他形式的相变现象, 从而更加全面地描绘出事物的本质。

3.1.2 约束可满足问题

一个随机二元 CSP 问题通常用四元组 $\langle n, d, p_1, p_2 \rangle$ 表示,其中 p_1 为约束密度, p_2 为约束紧度。生成一个随机问题的实例可分为两步。首先,可重复地选择 $t = p_1 \frac{n(n-1)}{2}$ 个约束,每个约束是不可重复地从 n 个变量中选两个;然后对于每个约束,不可重复地选择 $q = p_2 \cdot d^2$ 组不一致的赋值组^[18]。我们讨论的随机 CSP 问题的相变一般都是关于约束紧度 (p_2) 的相变现象。图 3 示出 $n=8, m=10, p_1=1.0$ 时,随着 p_2 的增加,在最大、中等和最小难度情况下一致性检测关于约束紧度的实验。从图中我们可以看到,中间难度 (medium) 曲线出现了从容易求解到难于求解最后又容易求解的 easy-hard-easy 现象。

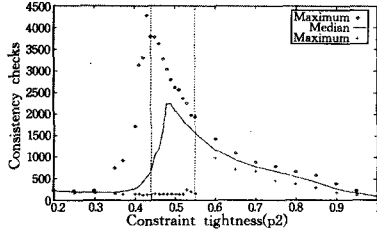


图 3 CSP 问题相变

由于随机 CSP 问题同 SAT 问题一样,虽然有相变现象,但是相变点的位置是不确定的。我们通过实验估计的相变点是取 50% 可满足时的参数值。虽然随机 CSP 问题相变点的不确定性我们没有证明,但是另一种 CSP 模型也即许可等人在 2000 年提出的 RB 模型^[19] 的相变点是确定的。他们从理论上证明了用 RB 模型生成的 CSP 问题的相变点是确定的。

定理 2^[19] 设 $r_{cr} = -\frac{\alpha}{\ln(1-p)}$, α 和 $p(\alpha > 1/k, 0 < p < 1, k \geq 1/(1-p))$ 是两个约束,那么

$$\begin{cases} \lim_{n \rightarrow \infty} \Pr(Sat) = 1, & \text{当 } r < r_{cr} \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \Pr(Sat) = 0, & \text{当 } r > r_{cr} \end{cases}$$

定理 3^[19] 设 $p_{cr} = 1 - e^{-\frac{\alpha}{r}}$, α 和 $r(\alpha > 1/k, r > 0, k e^{-\frac{\alpha}{r}} > 1)$ 是两个约束,那么

$$\begin{cases} \lim_{n \rightarrow \infty} \Pr(Sat) = 1, & \text{当 } p < p_{cr} \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \Pr(Sat) = 0, & \text{当 } p > p_{cr} \end{cases}$$

实验表明,用 RB 模型生成的实例确实存在相变现象,如图 4 所示^[20]。

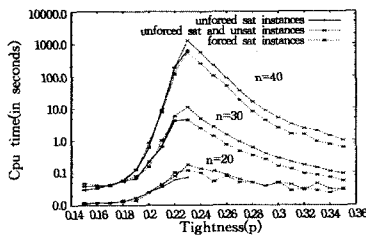


图 4 RB(2, {20, 30, 40}, 0.8, 3, p)

3.1.3 旅行商问题

1985 年, Lawler 提出了旅行商问题 (TSP)。最初, Kirkpatrick 和 Selman 认为 TSP 问题不存在明显的相变现象^[21]。1996 年, Gent 等人指出随机生成和标准测试的 TSP 问题事

实上存在相变现象,并且实际 TSP 问题要难于随机生成的 TSP 问题。该文指出,导致这一情况的发生可能是因为现实中的城市分布与随机生成的城市的分布不同^[22]。实验中还发现了一些比相变区域更困难的问题,推测是搜索中的回退不当造成的。根据实验估计,相变点 (l/\sqrt{nA}) 约为 0.75, 其中 l 表示路径长度, n 是城市的个数, 而 A 是 n 个城市平均分布的长方形区域面积。图 5 中改变的是参数中的 n , 图 6 中改变的是参数中的 l 。

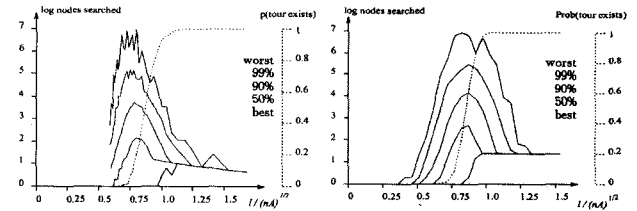


图 5 TSP 相变(改变 n)

图 6 TSP 相变(改变 l)

3.2 PSPACE 问题相变

3.2.1 量化布尔公式问题

Cadoli 等人研究了 QBF 的相变问题,他们指出 3QBF 比 2QBF 更困难。对于使用固定子句长度 (FCL) 生成的 k QBF 实例,可满足概率关于参数 α (子句数/每个量词约束的变量数) 出现了从 1 到 0 的突变现象,但是除了 2QBF-5/6CNF 和 3QBF-6CNF 的搜索难度有 easy-hard-easy 的现象,如图 7-图 9 所示,其他的都没有,如图 10 (括号中的表示每个量词约束的变量数) 所示。他们还分析了使用 FCL2 生成的实例,所有的实验都出现了可满足相变,搜索难度也出现了 easy-hard-easy 的现象。同时,他们考虑了每个量词约束的变量个数不同的情况 (这时的参数是子句数和量词约束的变量数的平均的比值),当全称量词约束的数目比较多时,相变区域更狭窄,这时最难的是 TRUE 实例,由于可以减少平均的尝试次数,使得这种情况会比两个量词约束变量数相同时简单;当存在量词约束的变量数多时,情况相反。进一步,当量词的个数是偶数时,最外层的量词是全称量词,所以最难的是 TRUE 实例,因为只要找到一个使得全称为真的赋值就可以停止;而对于奇数个量词,最外面的为存在量词,只要找到一个使得最外层变量为真的赋值使得整个公式为真就停止,所以最难的实例是 FALSE 实例^[23-25]。

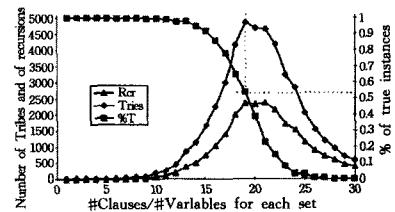


图 7 3QBF-6CNF(10)

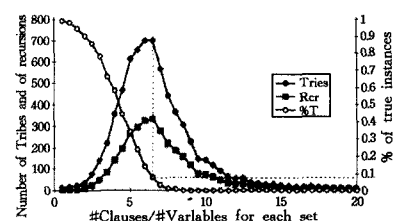


图 8 2QBF-5CNF(10)

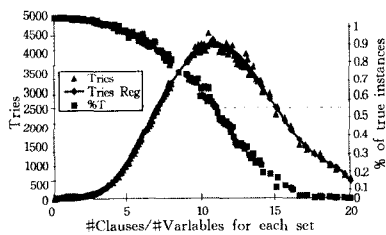


图9 2QBF-6CNF(10)

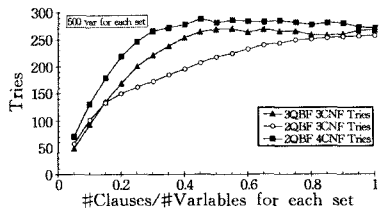


图10 2QBF-3CNF, 2QBF-4CNF 3QBF-3CNF(50)

要求每个文字至少在一个操作的效果中出现。而在 Model A 中,每个状态变量在操作的效果中出现的次数相同,并且每个状态变量以肯定和否定形式出现的次数也要求一样,这就避免了某些平凡不可解的实例。当状态变量 n 增大时,相变区域会越来越窄,Model A 的相变区域比 Model C 狭窄,据分析,这可能是由于 Model C 中状态变量作为效果的次数很少^[32-34]。图 11、图 12 分别为 Model C 和 Model A 的实验结果。另外,我们在另一篇文章中还给出了一致性规划问题的相变现象^[35]。

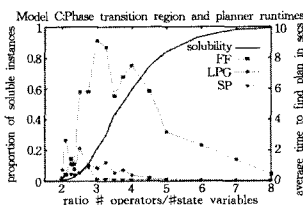


图11 Model C

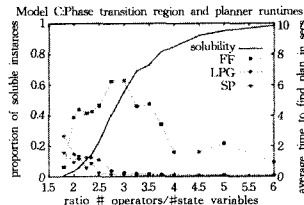


图12 Model A

1999年,Gent等人提出两种新的模型——Model A 和 Model B,从而避免了随机 QSAT 问题陷入平凡不可解的问题。他们的实验是在 2-QSAT 上进行的,当参数为 l/n (l 为子句的数目, n 是每个量词约束的变量数)时,出现了从几乎都可满足到几乎都不可满足的相变,讨论了在中等搜索难度 (Medium) 下的 easy-hard-easy 现象。该文还用约束 ($k = -\log_2(\text{一个状态是一个解的概率})$) 估计相变点的位置,但是准问题的太小

准确度没有 NP 完备问题的高,可能是指数级的状态空间之故。对于 2-QSAT,Model A 和 Model B 用约束估计的相变点约为 $-\frac{l}{n} \log_2(1 - \frac{1}{2^k})$ ^[26]。

2000年,Feldmann等人提出一种新的求解 QBF 的算法-QSOLVE,即利用新的启发式和改进以前的启发式来剪枝,还提出了基于并行搜索技术的算法-PQSOLVE。在他们的实验中,也出现了可满足度的相变和 easy-hard-easy 现象^[27]。2005年,Chen 和 Interian 提出了一种新的生成 QBF 的模型,用他们的新模型生成的 QBF 实例关于 α (子句数/存在变量数)的可满足度相变,其搜索难度也出现了 easy-hard-easy 的现象^[28]。Creignou 在 2007 年提出了 Q-XOR 问题,证明了其相变与某个 XOR 相同,不同的只是分布函数的层不同^[29]。随后,他又给出了 QSAT 相变的一些新的结果,对于 (1,2)-QSAT,有

$$\begin{cases} \lim_{n \rightarrow +\infty} P_{|\beta n(n)|,c} = 1, & \text{当 } \alpha < \alpha^*(\beta) \\ \lim_{n \rightarrow +\infty} P_{|\beta n(n)|,c} = 0, & \text{当 } \alpha > \alpha^*(\beta) \end{cases}$$

式中, β 满足 $\ln c + (2/c - 1) \ln(2 - c) = 1/\beta$ 且 $\beta * \ln 2 > 1$ 。也即若 β 的值固定,那么问题的相变点就是确定的^[30]。

3.2.2 规划问题

智能规划是当前人工智能领域中极为活跃的一个研究热点,在航空航天、机器人、智能企业和商业软件等都有极为重要的应用。

1996年,Bylander 分析了经典 STRIPS 规划。随着动作数量的增加,虽然相变曲线比较平滑,但规划实例确实出现了相变现象^[31]。Bylander 考虑的是相变区域之外的容易求解的实例。Rintanen 补充了这个问题,研究了相变区域的困难实例。他们提出了两个新的模型——Model A 和 Model C。Model C 中删除了 Bylander 模型中平凡不可解的实例,并且

3.3 参数复杂性相变

参数复杂性问题是目前的一个研究热点,主要是针对 NP 难解的问题,使其参数化后得到固定参数可解的精确解。例如,顶点覆盖问题是一个经典的 NP 难问题,通过应用参数理论的核心化技术,设计出 $O(kn + 1.286^k)$ 的精确算法,其中 k 是参数, n 是顶点数^[36]。很多 NP 问题都在参数复杂类中^[37,38]。针对参数复杂性问题相变的研究比较少,Gao 指出支配团问题和加权可满足问题是属于 W[2] 的,并且存在相变现象^[10,11]。

定理 4^[10] 给定随机图 $G(n, p)$, $\alpha \geq 1$ 为任意常数,那么 $\lim_{n \rightarrow \infty} P\{G(n, p) \text{ 有 } \alpha\text{-threshold 支配团}\} =$

$$\begin{cases} 0, & \text{如果 } p < \frac{3-\sqrt{5}}{2} \\ 1, & \text{如果 } p > \frac{3-\sqrt{5}}{2} \end{cases}$$

式中, n 为顶点数, p 为每条边出现的概率。

我们用 $M_{n,k}^{p_1, p_2, m}$ 表示加权可满足问题, n 是变量的个数,每个反单调二元子句被包含的概率为 p_1 , m 为单调子句的个数,且每个子句中变量出现的概率为 p_2 , k 为参数。则我们有如下定理。

定理 5^[10] 假设 $0 < p_1, p_2 < 1$ 是固定的常数, $b = (1 - (1 - p_2)k)$, $m = c \log(n)$, 那么

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(M_{n,k}^{p_1, p_2, m} \text{ 有解}) = \begin{cases} 1, & \text{如果 } c < -\frac{1}{\log b} \\ 0, & \text{如果 } c > -\frac{1}{\log b} \end{cases}$$

Gao 在另一篇文章中给出了另一种加权可满足问题。用 $F_{n,d}^{p,c}$ 表示一个有隐藏解的加权 d -SAT 问题实例, k 是参数, n 是变量数, d 是子句长度, p 是一个子句被包含的概率。用这个模型生成的实例的相变点是确定的。

定理 6^[51] 设 $p = \frac{c \log(n)}{n^{d-1}}$, $c > 0$ 是一个常数,令 $c^* = (2^d - 1)(d - 1)!$, 则

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P[F_{n,d}^{p,c} \text{ 是可满足的}] = \begin{cases} 0, & \text{如果 } c > c^* \\ 1, & \text{如果 } c < c^* \end{cases}$$

该文还证明了当 $p = \frac{c(\log(n) + c_1 \log(\log(n)))}{n}$, $c \geq 3$,

$c_1 > k-1$ 时, F_{T_1} 的不可满足实例是固定参数可解的^[11]。

4 backdoor 和 backbone 与相变的关系

Williams 等人在 2003 年提出了隐蔽集的概念,它是变量集的一个很小的子集,其定义与一个特定的子求解器有关^[6]。Williams 提出的是基于 SAT 和 CSP 问题的隐蔽集,而目前隐蔽集的应用已经推广到了其他很多问题,比如 #SAT^[39] 和 QBF^[40] 上。隐蔽集与问题求解难度有很大的关系,它可以有效地指导求解的搜索空间,从而加速求解速度,同时可以使原来难求解的问题变成易求解的子问题。而相变现象也与问题的难度有很大的关系。相变现象的发现改变了人们对最坏和平均情况下问题难度的认识。研究一个问题的相变现象可以让我们针对困难问题设计算法,也可以将其作为各种算法性能的一个评价标准。

Monasson 等人指出对于 $(2+p)$ -SAT 问题,骨架集的比率关于参数 α (子句数/变量数)有相变现象,如图 13 所示^[4]。2001 年,Zhang 研究了 3-SAT 和 MAX 3-SAT 问题上的骨架集问题,随着参数 α (子句数/变量数)的增加,骨架集出现了从几乎不存在到几乎所有的变量都是骨架集的现象,如图 14 所示。MAX 3-SAT 的骨架大小的相变点(50%)与 3-SAT 可满足相变点(50%)基本上吻合,如图 15 所示,并且两个曲线呈现出线性关系^[41]。

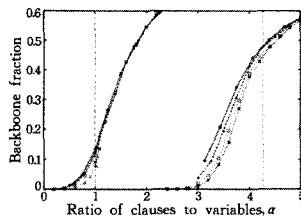


图 13 骨架关于 α 的相变

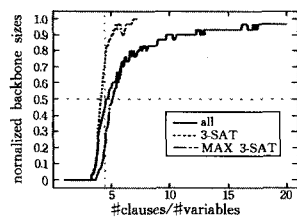


图 14 骨架集的相变现象

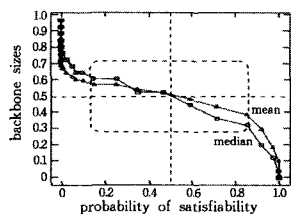


图 15 MAX 3-SAT 骨架集的大小和 3-SAT 可满足概率的关系

2004 年,Zhang 又研究了非对称 TSP 问题的骨架集和相变的关系。实验指出,随着城际距离精度的增加,问题的许多属性,包括问题的优化和骨架集大小,都有相变现象。随着距离精度提高,分支定界算法也出现从易到难的现象^[42]。

骨架集的大小与问题的难度有很大的关系,大量的骨架集意味着我们在搜索解的过程中容易陷入没有解的子空间,从而浪费时间。也就是说,如果骨架集越大,那么问题的解就形成了解簇,而使得问题难于求解。在优化和近似问题中,Slaney 和 Walsh 指出骨架集对于问题的影响有 3 种:第一种是类似于图着色的决策问题,骨架集的大小与问题的难度成正比;第二种是像 TSP 问题,问题的难度与骨架集的大小的关系不大或者是成反比的关系,但是搜索一个优化和近似解的代价是与骨架集的大小成正比的;最后一种情况是数的拆分问题,骨架集和问题难度包含了正反比两种情况^[43]。

5 未解决的问题

相变现象的研究目前已经成为人工智能研究的热点,目前还存在一些开放问题:

1) 对于随机 SAT 问题,除了 $k=2$ 时相变点是确定的,至今还没有人从理论上证明当 $k \geq 3$ 时相变点的确定性。能否从理论的角度证明其相变点的确切位置,是一个需要进一步研究的问题。

2) 对于参数复杂性问题,目前还没有人证明固定参数可解问题(FPT)相变现象的存在性。那么,FPT 是否和 P 问题一样存在着某个固定的相变点,就成为有待解决的问题。

3) Killy 指出问题的难度与最小强隐蔽集有关而与骨架的关系很弱,但同时我们又看到骨架与相变现象有很大的关系^[9],而相变也反映了问题的难度。因此,隐蔽集、骨架和相变与问题的难度的关系还需要更进一步的研究。

4) 目前发现对于欠约束区域,出现了比相变区域更难的问题,也即所谓的双相变现象。我们不能确定这种现象的出现是由于搜索算法选择不当还是问题本身的结构就是如此^[44-46]。

结束语 通过对国内外相变现象的分析,较为全面地介绍了相变现象的发展、相关概念以及相变现象与问题求解的关系等,并提出了有待解决的开放性问题。同时,对不同复杂度的问题,我们分析了具有代表性问题的相变现象。相变现象的研究有助于我们更进一步地认识问题困难的实质,从而有针对性地改进算法。希望本文的工作能对相关人员的研究提供帮助。

参考文献

- [1] Cook S A. The Complexity of Theorem-Proving Procedures[C]//STOC 1971. 1971;151-158
- [2] Kirkpatrick S, Selman B. Critical Behavior in the Satisfiability of Random Boolean Expressions [J]. Science, 1994, 264 (5163); 1297-1301
- [3] Selman B, Mitchell D G, Levesque H. Generating Hard Satisfiability Problems [J]. Artificial Intelligence, 1996, 81(1/2); 17-29
- [4] Remi M, Riccardo Z, Scott K. Determining computational complexity from characteristic 'phase transitions' [J]. Nature, 1999, 400; 133-137
- [5] Mezard M, Parisi G, Zecchina R. Analytic and algorithmic solution of random satisfiability problems [J]. Science, 2002, 297; 812-815
- [6] Williams R, Bomes C, Selman B. Backdoors to typical case complexity [C]//Proc of International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI'03). 2003; 1173-1178
- [7] Dilkina B, Gomes C P, Sabharwal A. Tradeoffs in the complexity of backdoor detection [C]//Proc CP'07. LNCS 4741. Springer-Verlag, 2007; 256-270
- [8] Nishimura, Ragde P, Szeider S. Detecting backdoor sets with respect to Horn and binary clauses [C]//Proceedings of SAT. 2004
- [9] Kilby P, Slaney J, Thiebaux S, et al. Backbones and Backdoors in

- Satisfiability[C]//AAAI. 2005
- [10] Gao Y. Random Instances of W[2]-Complete Problems: Thresholds, Complexity, and Algorithms[C]//SAT 2008. 2008; 91-104
- [11] Gao Y. Phase Transitions and Complexity of Weighted Satisfiability and Other Intractable Parameterized Problems [C] // AAAI. 2008; 265-270
- [12] Chvatal V, Reed B. Mirk Gets Some (the odds are on his side) [C]//33rd Annual Symposium on Foundations of Computer Science. Pittsburgh, PA, 1992; 620-627
- [13] Crawford J M, Auton L D. Experimental Results on the Cross-over Point in Satisfiability Problem[C]//Proceedings of AAAI'93. Aug. 1993; 21-27
- [14] Monasson R, Zecchina R. Tricritical Points in Random Combinatorics; the $2+p$ SAT Case[J]. J Phys A, 1998, 31; 9209-9217
- [15] Friedgut E. Sharp Thresholds of Graph Properties and the k -sat Problem[J]. Journal of the American Mathematical Society, 1999, 12; 1017-1054
- [16] 许可, 李未. SAT 问题的相变现象[J]. 中国科学 E 辑, 1999(04)
- [17] Xu K, Li W. On the Average Similarity Degree Between Solutions of Random k -SAT and Random CSPs[C]//CoRR cs/0008008. 2000
- [18] Smith B, Dyer M. Locating the phase transition in binary constraint satisfaction problems[J]. Artificial Intelligence, 1996, 81(11); 155-181
- [19] Xu K, Li W. Exact Phase Transitions in Random Constraint Satisfaction Problems[J]. Journal of Artificial Intelligence Research, 2000, 12; 93-103
- [20] Xu K, Boussemart F, Hemery F, et al. Random constraint satisfaction; Easy generation of hard (satisfiable) instances[J]. Artificial Intelligence, 2007, 171(8/9); 514-534
- [21] Kirkpatrick S, Selman B. Critical behavior in the satisfiability of random boolean expressions[J]. Science, 1994
- [22] Gent I P, Walsh T. The TSP phase transition[J]. Artificial Intelligence, 1996, 88(1/2); 349-358
- [23] Cadoli M, Giovanardi A, Schaefer M. Experimental Analysis of the Computational Cost of Evaluating Quantified Boolean Formulae[C]//AI * IA 1997. 1997; 207-218
- [24] Cadoli M, Giovanardi A, Schaefer M. An Algorithm to Evaluate Quantified Boolean Formulae [C] // AAAI/IAAI 1998. 1998; 262-267
- [25] Cadoli M, Schaefer M, Giovanardi A, et al. An Algorithm to Evaluate Quantified Boolean Formulae and Its Experimental Evaluation[J]. J Autom Reasoning, 2002, 28(2); 101-142
- [26] Gent I, Gent I P, Walsh T. Beyond NP the QSAT phase transition[C]//Proceedings of the Sixteenth National Conference on Artificial Intelligence. Menlo Park, 1999; 648-653
- [27] Feldmann R, Monien B, Schamberger S. A Distributed Algorithm to Evaluate Quantified Boolean Formulae [C] // AAAI/IAAI 2000. 2000; 285-290
- [28] Chen H, Interian Y. A model for generating random quantified boolean formulas [C] // Proceedings of the 19th International Joint Conference on Artificial Intelligence (IJCAI'2005). 2005; 66-71
- [29] Creignou N, Daudé H, Egly U. Phase Transition for Random Quantified XOR-Formulas[J]. Journal of Artificial Intelligence Research, 2007, 29; 1-18
- [30] Creignou N, Daudé H, Egly U, et al. (1,2)-QSAT; A Good Candidate for Understanding Phase Transitions Mechanisms[C]//SAT 2009. 2009; 363-376
- [31] Bylander T. A probabilistic analysis of propositional STRIPS planning[J]. Artificial Intelligence, 1996, 81(1/2); 241-71
- [32] Rintanen J. Complexity of Planning with Partial Observability [C]//Biundo S, Myers KL, Rajan K, eds. Proc of the ICAPS. Menlo Park; AAAI Press, 2004; 345-354
- [33] Rintanen J. Phase Transitions in Classical Planning; An Experimental Study[C]//ICAPS 2004. 2004; 101-110
- [34] Rintanen J. Phase Transitions in Classical Planning; An Experimental Study[C]//KR 2004. 2004; 710-719
- [35] Zhou J P, Huang P, Yin M H, et al. Phase transition of EXPSPACE-complete problems[J]. International Journal of Foundation of Computer Science 2010 (to appear)
- [36] Chen J. Parameterized computation and complexity; A new approach dealing with NP-hardness[J]. Journal of Computer Science, 2005, 20(1); 18-37
- [37] Downey R G, Fellows M R. Parameterized computational feasibility[M]. Feasible Mathematics II, Birkhauser, 1992
- [38] Chen J, Kanj I A, Jia W. Vertex Cover: Further Observations and Further Improvements[J]. Journal of Algorithms, 2001, 41; 80-301
- [39] Bacchus F, Dalmao S, Pitassi T. Algorithms and complexity results for #SAT and Bayesian inference[C]//44th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS'03). 2003; 304-351
- [40] Buning H, Karpinski M, Flogel A. Resolution for Quantified Boolean formulas[J]. Information and Computation, 1995, 117(1); 12-18
- [41] Zhang W X. Phase transitions and backbones of 3-SAT and Maximum 3-SAT[C]//Proc CP. 2001; 153-167
- [42] Zhang W. Phase Transitions and Backbones of the Asymmetric Traveling Salesman Problem[J]. Journal of Artificial Intelligence Research, 2004, 21; 471-497
- [43] Slaney J, Walsh T. Backbones in optimization and approximation [C]//Proc IJCAI-01. Seattle, WA, Morgan Kaufman, San Mateo, CA, 2001; 254-259
- [44] Hogg T, Williams C P. The hardest constraint problems; a double phase transition[J]. Artificial Intelligence, 1994, 69; 359-377
- [45] Crawford J M, Auton L D. Experimental Results on the Cross-over Point in Random 3-SAT[J]. Artif Intell, 1996, 81(1/2); 31-57
- [46] Gent I P, Walsh T. The Satisfiability Constraint Gap[J]. Artif Intell, 1996, 81(1/2); 59-80