Symulacje i algorytmiczne zastosowania łancuchów Markowa 25.04.2016

Lista nr 8

Paweł Lorek

Model Isinga. Dany jest graf $G = (V, K)$. Model Isinga jest to sposób wybrania losowego elementu z $\{-1, +1\}^V$.
Taki element $\mathbf{e} \in \{-1, +1\}^V$ nazywamy *konfiguracją* , dla ustalonej konfiguracji $\mathbf{e}(v) \in \{-1, +1\}$ jest wartością spinu w wierzchołku v.
Model Isinga, jest to wybranie losowego elementu $Y \in \{-1, +1\}^V$, który elementowi $\mathbf{e}$ przypisuje prawdopodobieństwo:

$$P(Y = \mathbf{e}) = \pi_{G,\beta}(\mathbf{e}) \equiv \pi(\mathbf{e}) = \frac{1}{Z_{G,\beta}} exp(-\beta H(\mathbf{e})), \quad \text{gdzie} \quad H(\mathbf{e}) = \sum_{\tilde{k}=(v_1,v_2)\in K} \mathbf{e}(v_1)\mathbf{e}(v_2).$$

$H(\mathbf{e})$ nazywane jest *energią* konfiguracji, zaś parametr $\beta \geq 0$ odwrotnością temperatury.

1. Rozważmy model Isinga na grafie $G = (V, K)$. Ustalmy wierzchołek v. Niech $\mathbf{e} \in \{-1, +1\}^{V \setminus \{v\}}$ będzie jakąś ustaloną konfiguracją przypisującą wartości -1 lub $+1$ wszystkich wierzchołkom *oprócz* wierzchołka v.

   Przez $\mathbf{e}^+$ oznaczmy konfigurację, która wierzchołkowi v przypisuje wartość $+1$, a na pozostałych wierzchołkach ma tą samą wartość co konfiguracja $\mathbf{e}$. Analogicznie, $\mathbf{e}^-$ jest konfiguracją, która wierzchołkowi v przypisuje wartość -1, a pozostałym te same wartości co konfiguracja $\mathbf{e}$. Pokaż, że

   $$\frac{\pi(\mathbf{e}^+)}{\pi(\mathbf{e}^-)} = exp(2\beta(k_+(v, \mathbf{e}) - k_-(v, \mathbf{e}))),$$

   gdzie $k_+(v, \mathbf{e})$ oznacza liczbę sąsiadów wierzchołka v, które mają spin $+1$, a $k_-(v, \mathbf{e})$ liczbę tych sąsiadów, które mają spin -1.

2. Rozważmy model Isinga na grafie $G = (V, K)$ (oznaczenia jak w zad. 1). Załóżmy, że konfiguracja Y zostałą wybrana zgodnie z rozkładem π. Wyobraźmy sobie, że patrzymy na konfigurację $Y(V \setminus \{v\})$, ale ukrywamy spin $Y(v)$ i otrzymujemy $Y(V \setminus \{v\}) = \mathbf{e}$. Jesteśmy zainteresowani w warunkowym rozkładzie wartości spinu w v. Pokaż, że

   $$\pi(Y(v) = +1 \mid Y(V \setminus \{v\}) = \mathbf{e}) = \frac{exp(2\beta(k_+(v, \mathbf{e}) - k_-(v, \mathbf{e})))}{1 + exp(2\beta(k_+(v, \mathbf{e}) - k_-(v, \mathbf{e})))}$$

3. Rozważmy model Isinga na grafie $G = (V, K)$ (oznaczenia jak w zad. 1). Ustalmy porządek na konfiguracjach: dla dwóch konfiguracji $\mathbf{e}, \mathbf{e}' \in \{-1, +1\}$ mamy $\mathbf{e} \preceq \mathbf{e}'$ jeśli $\mathbf{e}(w) \leq \mathbf{e}'(w)$ dla każdego $w \in V \setminus \{v\}$. Pokaż, że jeśli $\mathbf{e} \preceq \mathbf{e}'$, to

   $$\pi(Y(v) = +1 \mid Y(V \setminus \{v\}) = \mathbf{e}) \ \leq \ \pi(Y(v) = +1 \mid Y(V \setminus \{v\}) = \mathbf{e}')$$

4. *Proces urodzin i śmierci.* Niech X będzie łańcuchem Markowa na przestrzeni stanów $\mathbb{E} = \{0, 1, \ldots, N\}$ z następującą macierzą przejść:

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1-p_0 & p_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ q_1 & r_1 & p_1 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & q_2 & r_2 & p_2 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ 0 & 0 & 0 & q_i & r_i & p_i & 0\ldots & 0 \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & \ldots & & & & q_{N-1} & r_{N-1} & p_{N-1} \\ 0 & \ldots & & & & 0 & q_0 & 1-q_0 \end{bmatrix},$$

gdzie $p_0 > 0, q_0 > 0$, dla każdego $i \in \{1, \ldots, N-1\}$: $p_i > 0, q_i > 0, p_i + q_i + r_i = 1$.

Czy można wskazać jakieś rozsądne warunki na parametry tego łańcucha, przy których można zastosować ideę "kanapkowania", tzn. dla których można wskazać *monotoniczną funkcję updatującą*, czyli taką, że

$$\forall (i \leq j, i, j \in \{0, \ldots, N\} \; \forall (u \in [0,1]) \qquad \phi(i,u) \leq \phi(j,u) \; ?$$

5. Wskaż proces urodzin i śmierci, dla którego nie można zastosować idei "kanapkowania", tzn. dla którego nie istnieje monotoniczna funkcja updatująca. Odpowiedź uzasadnij.

6. Łańcuch Markowa X o macierzy przejść $\mathbf{P}$ na przestrzeni stanów $E = \{0, 1, \ldots, N\}$ z porządkiem liniowym $\leq$ nazywa się *stochastycznie monotonicznym* jeśli:

$$\forall (i \leq j) \forall (A \in \mathcal{U}) \quad P(i, A) \leq P(j, A),$$

gdzie $\mathcal{U}$ jest klasą tzw. zbiorów górnych, tzn. $A \in \mathcal{U}$ jeśli mamy następującą implikację: $(i \leq j, i \in A) \Rightarrow (j \in A)$ (słownie: jeśli mamy dwa stany, i mniejszy z nich należy do A, to większy też musi należeć do A).

Podaj warunki na to, by proces urodzin i śmierci z zad. 4 był stochastycznie monotoniczny.

7. Mamy dane $a = (a_1, \ldots, a_n), a_i \in \mathbb{N}$ oraz $b \in \mathbb{N}$.

Rozważmy przestrzeń "konfiguracji" $\{0,1\}^n$. Konfiguracje $x = (x_1, \ldots, x_n) \in \{0,1\}^n$ nazywamy *poprawną* jeśli $a \cdot x := \sum_{i=1}^{n} a_i x_i \leq b$. Skonstruuj łańcuch Markowa (algorytm), którego rozkładem stacjonarnym jest rozkład jednostajny na wszystkich poprawnych konfiguracjach, tzn.

$$\pi(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{Z} & \text{jeśli } x \text{ jest } \textit{poprawną} \text{ konfiguracją} \\ 0 & \text{w p.p.} \end{cases}$$

Uwaga: (Problem plecakowy) Jeśli wektor a oznacza wagi n przedmiotów, a b jest maksymalna pojemnością plecaka, wtedy Z można interpretować jako liczbę możliwych kombinacji przedmiotów, które mogą być umieszczone w plecaku.