Conteo aproximado usando Gibbs Sampler para los modelos hard-core y q-coloring

Autores:

- Daniel Alejandro García Hernández
- David Camilo Cortes Salazar

En este notebook se encuentra una implementación de algunos resultados vistos en clase para el Gibbs Sampler aplicado a Hard-core y q-colorings.

Las librerías necesarias para ejectuar el código son:

In [9]:
```
import random
import numpy as np
import networkx as nx
from copy import deepcopy
import matplotlib.pyplot as plt
from sympy import symbols, simplify
```

Punto 1 - Valores aproximados a q-coloraciones (q-colorings) usando el teorema 9.1

Iniciamos definiendo algunas funciones que ya habían sido usadas en el programa de la Tarea 1.

Acto seguido, creamos la grilla del módelo. Para esto, usamos un grafo cuadrado 2D de NetworkX con colores que siguen una diagonal, asegurando así que el estado inicial es una q-coloración válida.

Este grafo recibe de input las dimensiones k del grafo, y el número q de colores. Se tiene las condiciones:

- $3 \leq k \leq 20$,
- $2 \leq q \leq 10$.

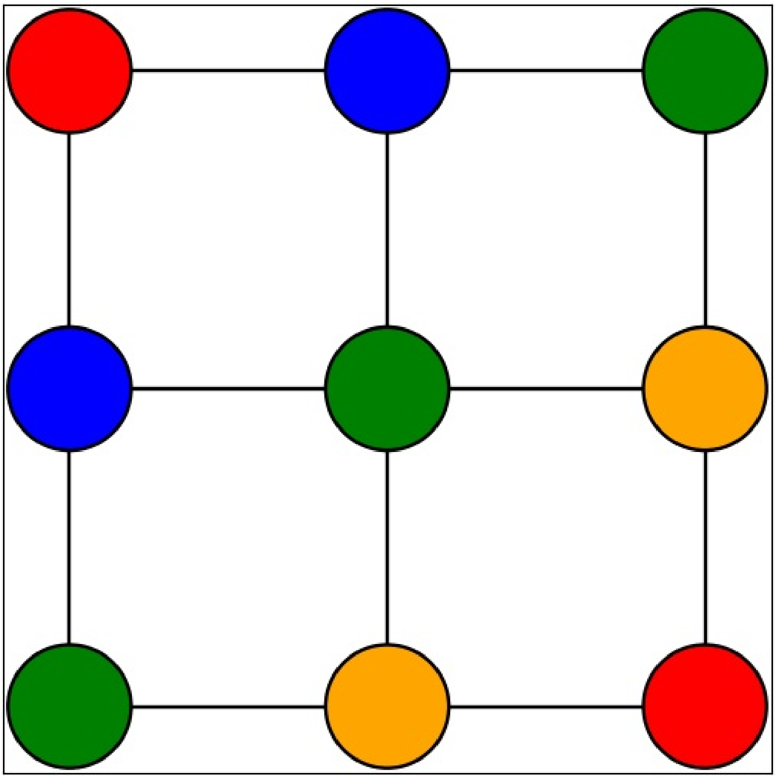
Los colores ya se encuentran en el código, por lo que no es necesario que el usuario los ingrese.

In [10]:
```
## Inputs del programa
"""
k: Dimensiones del lattice kxk
q: Numero de colores
d: Maximo numero de vecinos de algun nodo

Valores posibles:     3>= k >= 20   ->  d = 4    ->     q > 2d = 8

"""

k = 3
q = 4

## Lista de colores preestablecidos. Se usaran los primeros q
colors_list_complete = ["red", "blue", "green", "orange", "grey", "purple", "black", "magenta", "white", "cyan"
```

Ahora graficamos el grafo y la q-coloracion inicial

In [11]:
```
def restart_G(k, q, colors_list):
    """
    Hallar y reiniciar el valor del grafo y el color de los nodos
    :param k: Dimensions of the lattice
    :param q: Number of colors
    :param colors_list: Listas de colores
    :return: Grafo de networkx con forma de lattice cuadrado y el valor inicial de los colores tal que es q-colo
    """
    G = nx.grid_2d_graph(k, k)
    color_values = {node: colors_list[(i + i//k - (i//k)*k)%q] for i, node in enumerate(G.nodes())}

    return G, color_values



def plot_grid(G, color_values):
    """
    Grafica el grafo, con el color de los nodos dados
```

```
    :param G: Grafo de networkx
    :param color_values: Valor de colores de los nodos del grafo
    :return:
    """
    pos = {(x, y): (y, -x) for x, y in G.nodes()}

    options = {
        "font_size": 200,
        "node_size": int(30000/k**2),
        "edgecolors": "black",
        "linewidths": 1.7,
        "width": 1.7,
        "with_labels": False,
        "node_color": color_values.values(),
    }

    plt.figure(figsize=(5 + 0.1*k, 5 + 0.1*k))
    nx.draw_networkx(G, pos=pos, **options)
    plt.tight_layout()
    plt.show()


# Iniciar el valor de los colores
colors_list = colors_list_complete[:q:]
G, color_values = restart_G(k, q, colors_list)


# Graficar la grilla
plot_grid(G, color_values)
```



Ahora fijamos el numero de simulaciones y pasos del gibbs sampler que vamos a utilizar. Para esto, usaremos el resultado visto en el capitulo 9 del libro para definir una cota superior en estos valores si se cumplen las condiciones necesarias para calcularlos:

- Condiciones: Sean q y $d > 2$ tal que $q > 2d$
- Cota de Simulaciones: $\frac{48d^3k^3}{\epsilon^2}$
- Cota de Pasos (Gibbs Sampler): $k(\frac{2\log(k)+\log(\epsilon^{-1})+\log(8)}{\log(\frac{q}{2d})}+1)$

Note que si, por ejemplo, la cota de pasos es 100.000 y la cota de simulaciones es 100, el algoritmo tendra que realizar mas de $1.000.000$ pasos. Asi que para fijar los valores de estas variables haremos lo siguiente:

- Si el numero de simulaciones excede los 100.000, tomaremos solo $500 * k * log(k)$.

Por otra parte, si no se cumplen las condiciones necesarias para la definicion de las cotas ($q > 2d$), encontraremos que los pasos del Gibbs step darán números negativos. Por tanto, haremos lo siguiente:

- Si el número de pasos es menor a 0, tomaremos solo $200 * k * log(k)$.

In [12]:
```
def calculate_number_simulations(epsilon, k, q, d=4):
```

```
    top = 48 * (d**3) * k**3
    bot = epsilon**2
    return top/bot


def calculate_number_gibbs_steps(epsilon, k, q, d=4):
    if q==8: return int(200*k*np.log(k))
    top = 2*np.log(k) + np.log(1/epsilon) + np.log(8)
    bot = np.log(q / (2*d))
    ans = k*(top/bot + 1)
    return ans

def steps_validation(steps):
    return int(200*k*np.log(k)) if steps < 0 else int(steps) + 1

def simulations_validation(simulations):
    return int(500*k*np.log(k)) if simulations > 100000 else int(simulations) + 1
```

In [13]:
```
epsilon = 0.01

real_gibbs_steps = calculate_number_gibbs_steps(epsilon, k, q)
real_simulation_number = calculate_number_simulations(epsilon, k, q)

print(f"Cota gibbs steps: {real_gibbs_steps}")
print(f"Cota simulaciones: {real_simulation_number}")

gibbs_steps = steps_validation(real_gibbs_steps)
simulations_number = simulations_validation(real_simulation_number)

print(f"Gibss steps tomados: {gibbs_steps}")
print(f"Simulaciones tomadas: {simulations_number}")
```

```
Cota gibbs steps: -35.44134357365112
Cota simulaciones: 829440000.0
Gibss steps tomados: 659
Simulaciones tomadas: 1647
```

Visualizacion de pasos

Aquí queremos ver que obtenemos G_j añadiendo una arista a G_{j-1}. Para esto seleccionamos un j arbitrario para visualizar el funcionamiento de la construccion del grafo, miramos el enlace e_j, y verificamos si los colores son diferentes.

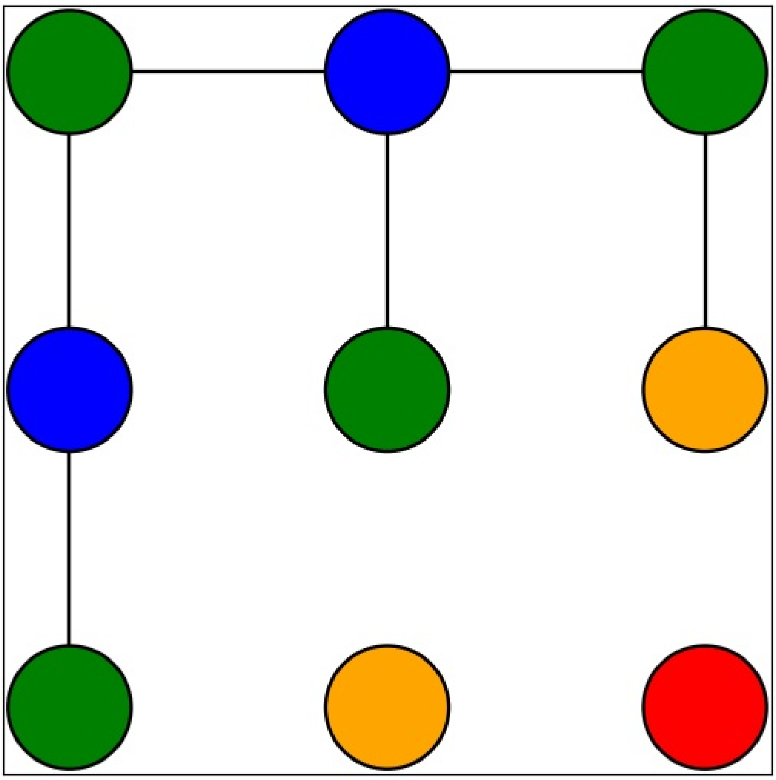
In [14]:
```
def find_valid_colors(G, color_values, x, y):
    colores_vecinos = set()

    for vecino in G.neighbors((x,y)):
        colores_vecinos.add(color_values[vecino])

    valid_colors = list(set(colors_list) - colores_vecinos)

    return valid_colors

def systematic_step(G, color_values, x, y):
    valid_colors = find_valid_colors(G, color_values, x, y)
    new_color = random.choice(valid_colors)
    color_values[(x,y)] = new_color

    return color_values

def find_systematic_evolution(G, color_values, n):
    for ii in range(n):
        x = ii % k
        y = (ii//k) % k
        color_values = systematic_step(G, color_values, x, y)

    return color_values

def random_step(G, color_values):
    x = random.choice(range(0,k))
    y = random.choice(range(0,k))

    valid_colors = find_valid_colors(G, color_values, x, y)
    new_color = random.choice(valid_colors)
    color_values[(x,y)] = new_color

    return color_values


def find_random_evolution(G, color_values, n):
    for _ in range(n):
        color_values = random_step(G, color_values)
```

```python
    return color_values

def find_Gj(G, j):
    edges = list(G.edges)
    edges_to_remove = edges[j+1 : len(edges)]
    Gj = deepcopy(G)

    for edge_to_remove in edges_to_remove:
        Gj.remove_edge(edge_to_remove[0], edge_to_remove[1])

    return Gj

def find_ej(G, j):
    edges = list(G.edges)
    e_j = edges[j]

    return e_j
```

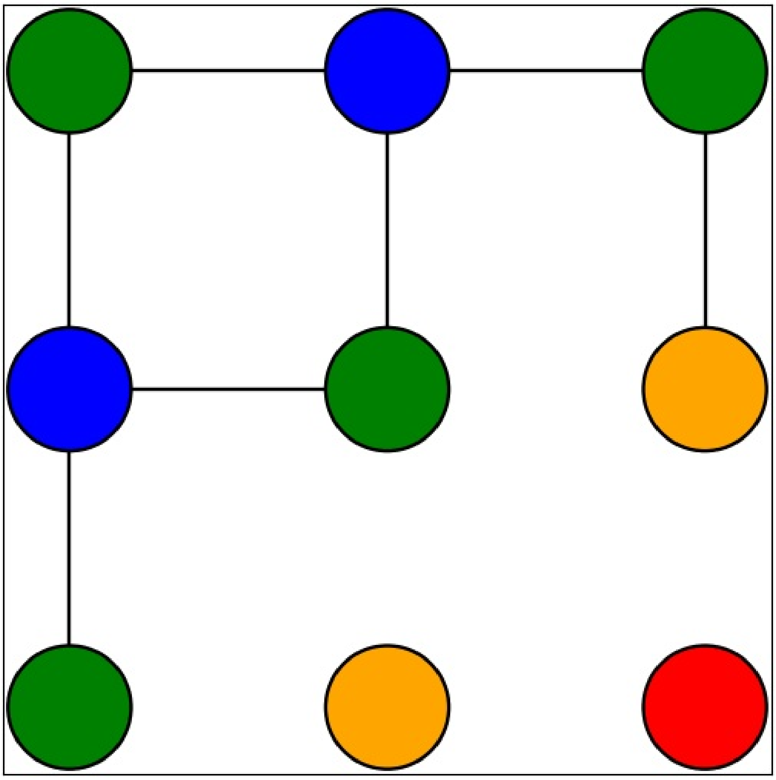
In [15]:

```python
G, color_values = restart_G(k, q, colors_list)

counter_they_are_equal = 0

j = 6

e_j = find_ej(G, j)

G_j_1 = find_Gj(G, j-1)

color_values = find_systematic_evolution(G_j_1, color_values, 1)

print('Vértice e_j  que estamos añadiendo:',  e_j)
print('Color de los nodos de e_j:', color_values[e_j[0]], color_values[e_j[1]])
print(f'Son diferentes?: {color_values[e_j[0]] != color_values[e_j[1]]}')


print("\nG_{j-1}:")
plot_grid(G_j_1, color_values)


## Verificacion. Grafica de G_j. Sirve para comparar con G_j_1 y ver el indice e_j
G_j = deepcopy(G_j_1)
G_j.add_edge(e_j[0], e_j[1])
print("\n\n\nG_{j}:")
plot_grid(G_j, color_values)
```

```
Vértice e_j  que estamos añadiendo: ((1, 0), (1, 1))
Color de los nodos de e_j: blue green
Son diferentes?: True

G_{j-1}:
```



G_{j}:



Algoritmo

Nuestro objetivo es calcular el número de q-coloraciones $Z_{\hat{k}}$ como una relación de cocientes. Para esto, calculamos $Z_{\hat{k}}$ a partir de la relación de producto telescópica:

- $Z_{\hat{k}} = Z_0 \prod_{j=1}^{\hat{k}} \frac{Z_j}{z_{j-1}}$

Donde Z_0 es el número de q-coloraciones posibles sin restricción y $\frac{Z_j}{z_{j-1}}$ es la probabilidad de que una coloración de G_{j-1} también sea válida para G_j.

Para esto, debemos estimar cada cociente $\frac{Z_j}{z_{j-1}}$. Esto lo hacemos iterando de la siguiente forma:

- Para cada nueva arista añadida en el grafo, ejecutamos el Gibbs sampler para generar múltiples q-coloraciones válidas del grafo anterior G_{j-1}
- Tomamos $\frac{Z_j}{z_{j-1}}$ como la proporción de coloraciones válidas de G_{j-1} que siguen siendo válidas en G_j. Es decir, sea N el número de coloraciones válidas generadas para G_{j-1} y M El número de coloraciones que siguen siendo validas en G_j, entonces $\frac{Z_j}{z_{j-1}} \approx \frac{M}{N}$.

Este algoritmo da como resultado final un conteo aproximado de q-coloraciones para el lattice de las dimensiones escogidas.

In [16]:
```
n_simulations = simulations_validation(calculate_number_simulations(epsilon, k, q))
n_gibbs_steps = steps_validation(calculate_number_gibbs_steps(epsilon, k, q))

q_colorings = q**(k*k)

G, color_values = restart_G(k, q, colors_list)

for j in range(1, len(list(G.edges()))):
    rho_j_1 = 0
    e_j = find_ej(G, j) # Edge which is in G_{j} but not in G_{j-1}

    for ii in range (n_simulations):
        G, color_values = restart_G(k, q, colors_list)

        G_j_1 = find_Gj(G, j-1)

        color_values = find_systematic_evolution(G_j_1, color_values, n_gibbs_steps)

        rho_j_1 += int(color_values[e_j[0]] != color_values[e_j[1]])

    rho_j_1 = rho_j_1 / n_simulations
    q_colorings *= rho_j_1
```

```
print(f"Condiciones: k={k}, q={q}")
print(f"Conteo Aproximado: {int(q_colorings)}")
```

```
Condiciones: k=3, q=4
Conteo Aproximado: 11545
```

Ahora, insertamos todo en una funcion para facilitar el reporte de los resultados.

In [17]:
```
def estimate_q_colorings(k, q, epsilon, colors_list=None):
    if colors_list is None:
        colors_list = ["red", "blue", "green", "orange", "grey", "purple", "black", "magenta", "white", "cyan"]

    n_simulations = simulations_validation(calculate_number_simulations(epsilon, k, q))
    n_gibbs_steps = steps_validation(calculate_number_gibbs_steps(epsilon, k, q))

    q_colorings = q**(k*k)

    G, color_values = restart_G(k, q, colors_list)
    for j in range(1, len(list(G.edges()))):
        rho_j_1 = 0
        e_j = find_ej(G, j) # Edge which is in G_{j} but not in G_{j-1}

        for ii in range (n_simulations):
            G, color_values = restart_G(k, q, colors_list)
            G_j_1 = find_Gj(G, j-1)
            color_values = find_systematic_evolution(G_j_1, color_values, n_gibbs_steps)
            rho_j_1 += int(color_values[e_j[0]] != color_values[e_j[1]])

        rho_j_1 = rho_j_1 / n_simulations
        q_colorings *= rho_j_1

    return q_colorings


def estimate_q_colorings_multiple_runs(k, q, epsilon, num_runs):
    q_colorings = []

    for _ in range(num_runs):
        new_value = estimate_q_colorings(k, q, epsilon)
        q_colorings.append(new_value)

    avg = np.average(q_colorings)
    std = np.std(q_colorings)

    return avg, std



def theoretical_q_colorings(k, q, q_colorings):
    G, color_values = restart_G(k, q, colors_list_complete[:q:])
    chromatic_poly = nx.chromatic_polynomial(G)
    x = symbols('x')
    exact = chromatic_poly.subs(x, q)
    error_perc = abs(q_colorings - exact)*100/exact

    return exact, error_perc



def print_q_colorings(k, q, epsilon, avg, std, exact_q_colorings, error_percentage):
    print(f'k Dimension del lattice: {k}')
    print(f'q Numero de colores: {q}')
    print(f'epsilon de la funcion: {epsilon}')
    print(f'Numero de simulaciones: {simulations_validation(calculate_number_simulations(epsilon, k, q))}')
    print(f'Numero de pasos de Gibbs sampler: {steps_validation(calculate_number_gibbs_steps(epsilon, k, q))}')
    print(f'Numero de q-coloraciones experimental: {avg:.1f}', u"\u00B1", f'{std:.1f}')
    print(f"Numero de q-coloraciones teórico: {exact_q_colorings}")
    print(f"Porcentaje de error: {error_percentage:.2f} %")
    print("=====================================")
    print()
```

Reporte Q-Coloraciones

Veamos como se comporta el conteo aproximado dando diferentes valores de epsilon sobre el mismo grafo, con varios números de colores: 4, 8, 12. El numero de pasos de las simulaciones y del gibbs sampler se toman de la misma forma que explicamos anteriormente.

In [27]:
```
errors_values = []
q_coloring_values = []
q_coloring_uncert = []
exact_values = []
```

```python
epsilon_values = [0.001, 0.01, 0.1]

def report_run_epsilon(k, q, num_runs):
    errors = []
    q_colorings_array = []
    q_colorings_uncert_array = []

    for epsilon in epsilon_values:
        avg, std = estimate_q_colorings_multiple_runs(k, q, epsilon, num_runs)
        exact, errors_perc = theoretical_q_colorings(k, q, avg)
        print_q_colorings(k, q, epsilon, avg, std, exact, errors_perc)
        errors.append(errors_perc)
        q_colorings_array.append(avg)
        q_colorings_uncert_array.append(2*std)

    errors_values.append(errors)
    q_coloring_values.append(q_colorings_array)
    q_coloring_uncert.append(q_colorings_uncert_array)
    exact_values.append(exact)


report_run_epsilon(k = 3, q = 4, num_runs = 2)
report_run_epsilon(k = 3, q = 8, num_runs = 2)
report_run_epsilon(k = 3, q = 12, num_runs = 2)
```

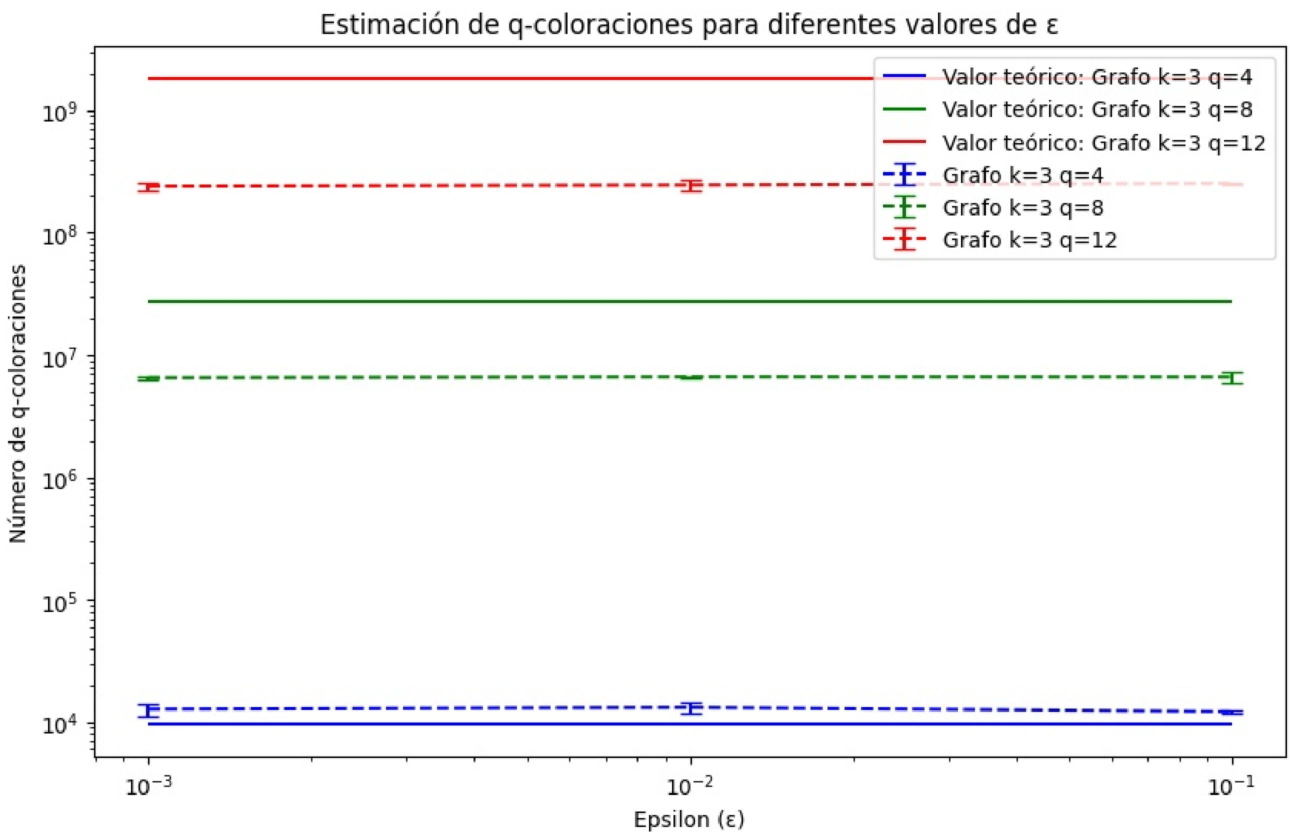
```
k Dimension del lattice: 3
q Numero de colores: 4
epsilon de la funcion: 0.001
Numero de simulaciones: 1647
Numero de pasos de Gibbs sampler: 659
Numero de q-coloraciones experimental: 12773.4 ± 740.0
Numero de q-coloraciones teórico: 9612
Porcentaje de error: 32.89 %
=====================================

k Dimension del lattice: 3
q Numero de colores: 4
epsilon de la funcion: 0.01
Numero de simulaciones: 1647
Numero de pasos de Gibbs sampler: 659
Numero de q-coloraciones experimental: 13205.0 ± 709.5
Numero de q-coloraciones teórico: 9612
Porcentaje de error: 37.38 %
=====================================

k Dimension del lattice: 3
q Numero de colores: 4
epsilon de la funcion: 0.1
Numero de simulaciones: 1647
Numero de pasos de Gibbs sampler: 659
Numero de q-coloraciones experimental: 12201.5 ± 156.8
Numero de q-coloraciones teórico: 9612
Porcentaje de error: 26.94 %
=====================================

k Dimension del lattice: 3
q Numero de colores: 8
epsilon de la funcion: 0.001
Numero de simulaciones: 1647
Numero de pasos de Gibbs sampler: 660
Numero de q-coloraciones experimental: 6528342.6 ± 115727.9
Numero de q-coloraciones teórico: 27350456
Porcentaje de error: 76.13 %
=====================================

k Dimension del lattice: 3
q Numero de colores: 8
epsilon de la funcion: 0.01
Numero de simulaciones: 1647
Numero de pasos de Gibbs sampler: 660
Numero de q-coloraciones experimental: 6628026.3 ± 36143.9
Numero de q-coloraciones teórico: 27350456
Porcentaje de error: 75.77 %
=====================================

k Dimension del lattice: 3
q Numero de colores: 8
epsilon de la funcion: 0.1
Numero de simulaciones: 1647
Numero de pasos de Gibbs sampler: 660
Numero de q-coloraciones experimental: 6614297.0 ± 365279.6
Numero de q-coloraciones teórico: 27350456
Porcentaje de error: 75.82 %
```

```
=====================================

k Dimension del lattice: 3
q Numero de colores: 12
epsilon de la funcion: 0.001
Numero de simulaciones: 1647
Numero de pasos de Gibbs sampler: 86
Numero de q-coloraciones experimental: 240462713.9 ± 8119240.2
Numero de q-coloraciones teórico: 1821684612
Porcentaje de error: 86.80 %
=====================================

k Dimension del lattice: 3
q Numero de colores: 12
epsilon de la funcion: 0.01
Numero de simulaciones: 1647
Numero de pasos de Gibbs sampler: 69
Numero de q-coloraciones experimental: 246042452.2 ± 12075649.5
Numero de q-coloraciones teórico: 1821684612
Porcentaje de error: 86.49 %
=====================================

k Dimension del lattice: 3
q Numero de colores: 12
epsilon de la funcion: 0.1
Numero de simulaciones: 1647
Numero de pasos de Gibbs sampler: 52
Numero de q-coloraciones experimental: 253568769.9 ± 2195303.8
Numero de q-coloraciones teórico: 1821684612
Porcentaje de error: 86.08 %
=====================================
```

Visualicemos el rendimiento del valor de estos epsilon, tanto en el número estimado de q-coloraciones como en el porcentaje de error que tiene esta estimación respecto al valor teórico. El valor teórico de q-coloraciones fue encontrado mediante el polinomio cromático

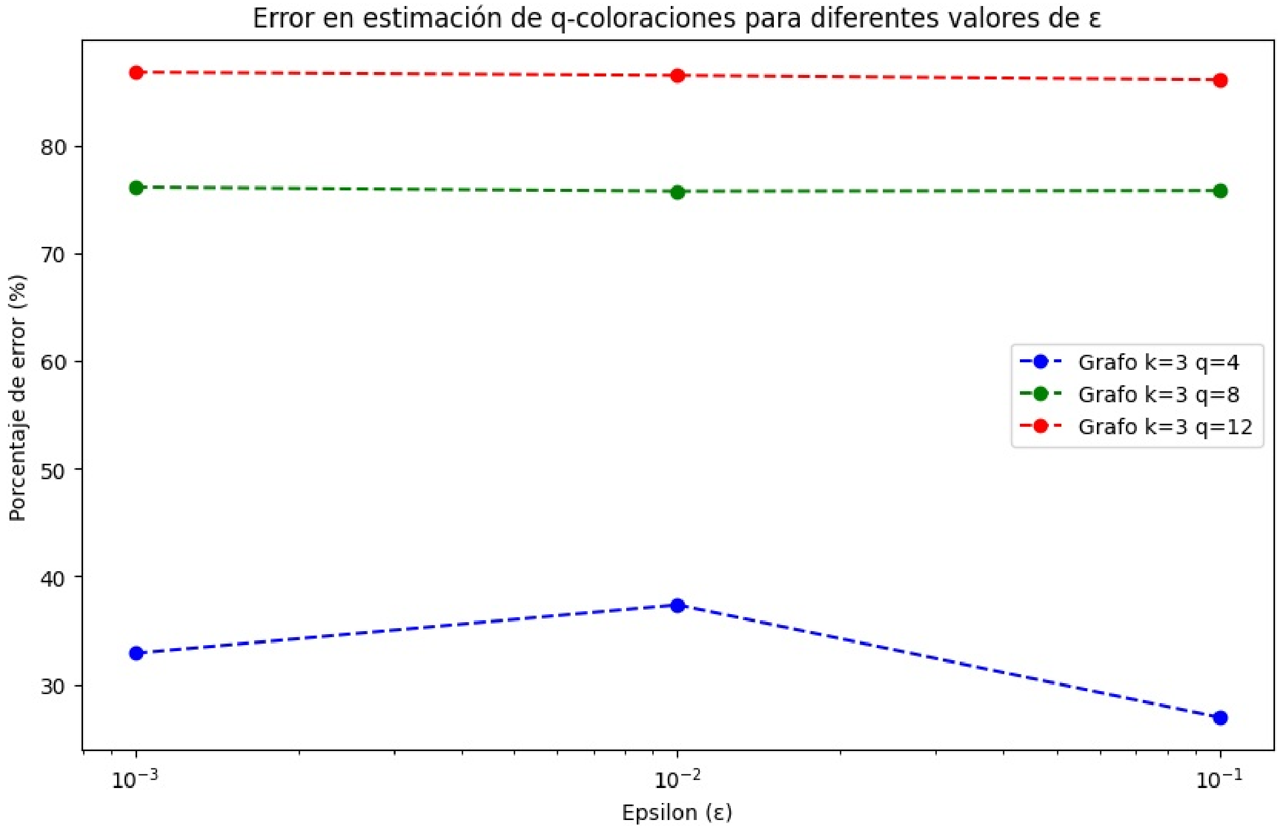
In [39]:

```
plt.figure(figsize=(10, 6))

plt.errorbar(epsilon_values, q_coloring_values[0], yerr=q_coloring_uncert[0], color='blue', linestyle='--', caps
plt.errorbar(epsilon_values, q_coloring_values[1], yerr=q_coloring_uncert[1], color='green', linestyle='--', ca
plt.errorbar(epsilon_values, q_coloring_values[2], yerr=q_coloring_uncert[2], color='red', linestyle='--', caps

plt.hlines(exact_values[0], min(epsilon_values), max(epsilon_values), color='blue', label='Valor teórico: Grafo
plt.hlines(exact_values[1], min(epsilon_values), max(epsilon_values), color='green', label='Valor teórico: Graf
plt.hlines(exact_values[2], min(epsilon_values), max(epsilon_values), color='red', label='Valor teórico: Grafo 


plt.xlabel('Epsilon (ε)')
plt.ylabel('Número de q-coloraciones')
plt.title('Estimación de q-coloraciones para diferentes valores de ε')

plt.legend()
plt.xscale("log")
plt.yscale("log")
#plt.grid(True)

plt.show()
```



In [40]:

```python
plt.figure(figsize=(10, 6))


plt.plot(epsilon_values, errors_values[0], color='blue', marker='o', linestyle='--', label='Grafo k=3 q=4')
plt.plot(epsilon_values, errors_values[1], color='green', marker='o', linestyle='--', label='Grafo k=3 q=8')
plt.plot(epsilon_values, errors_values[2], color='red', marker='o', linestyle='--', label='Grafo k=3 q=12')

plt.xlabel('Epsilon (ε)')
plt.ylabel('Porcentaje de error (%)')
plt.title('Error en estimación de q-coloraciones para diferentes valores de ε')

plt.legend()
plt.xscale("log")
#plt.grid(True)

plt.show()
```



Para finalizar, tenemos las siguientes conclusiones:

- La estimación del número de q-coloraciones tiene un error apreciable, pero se mantiene en el mismo orden de magnitud que el valor teórico dado por el polinomio cromático.
- El error aumenta a medida que aumenta el número de colores en el grafo.
- El valor de epsilon tiene un impacto despreciable en la estimación del número de q-coloraciones. Esto se debe a la cota superior de pasos que tomamos en el algoritmo, pues, si el número de pasos teórico es muy grande, se toma un número de pasos simplificado que no depende de epsilon.

Punto 2 - Valores aproximados de configuraciones factibles para el modelo Hard-Core

Teniendo ya la implementacion anterior para un conteo aproximado de configuraciones factibles, basta reemplazar la lógica en que se construye el grafo (elimiar las coloraciones) y cambiar el Gibbs sampler para que ahora sea de configuraciones factibles del modelo Hard-Core.

In [41]:

```
def restart_G_hard_core(k):
    # Create a lattice, kxk graph
    G = nx.grid_2d_graph(k, k)

    # Define the positions for plotting
    pos = {(x, y): (y, -x) for x, y in G.nodes()}

    # Color of the nodes
    color_values = {node: "white" for i, node in enumerate(G.nodes())}
    return G, color_values

def hard_core_step(G, color_values, x, y):

    coin = random.choice(("cara", "sello"))

    if coin == "cara":

        if "black" in [color_values[vecino] for vecino in [n for n in G.neighbors((x,y))]]: # Revisa si algun v
            color_values[(x,y)] = "white" # Si es cierto, el nodo se cambia a blanco
        else: color_values[(x,y)] = "black" # Si es falso, el nodo se cambia a negro

    else:
        color_values[(x,y)] = "white"

    return color_values

def find_hard_core_evolution(G, k, color_values, n):
    for ii in range(n):
        x = random.choice(range(0,k))
        y = random.choice(range(0,k))
        color_values = hard_core_step(G, color_values, x, y)

    return color_values
```

Algoritmo

El algoritmo funciona de forma análoga al anterior, siendo la única diferencia la implementación del Gibss sampler para tener en cuenta las condiciones de validez de una configuración bajo el modelo Hard-core (dos cuencas negras no pueden ser vecinas)

In [52]:

```
n_simulations = 100
n_gibbs_steps = 1000

G, color_values = restart_G_hard_core(k)

k = 3
factibles = 2**(k*k)

for j in range(1, len(list(G.edges()))):
    rho_j_1 = 0
    e_j = find_ej(G, j) # Edge which is in G_{j} but not in G_{j-1}

    for ii in range (n_simulations):
        G, color_values = restart_G_hard_core(k)

        G_j_1 = find_Gj(G, j-1)

        color_values = find_hard_core_evolution(G_j_1, k, color_values, n_gibbs_steps)
```

```
        rho_j_1 += int(not (color_values[e_j[0]] == "black" and color_values[e_j[1]] == "black"))

    rho_j_1 = rho_j_1 / n_simulations
    factibles *= rho_j_1

print(f"Conteo Aproximado: {int(factibles)} configuraciones válidas")
```

```
Conteo Aproximado: 93 configuraciones válidas
```

Finalmente, insertamos todo en una función para facilitar el reporte de los resultados.

In [53]:
```
def estimate_hard_core(k, simul, gstep):

    n_simulations = simul
    n_gibbs_steps = gstep

    factibles = 2**(k*k)

    G, color_values = restart_G_hard_core(k)
    for j in range(1, len(list(G.edges()))):
        rho_j_1 = 0
        e_j = find_ej(G, j) # Edge which is in G_{j} but not in G_{j-1}

        for ii in range (n_simulations):
            G, color_values = restart_G_hard_core(k)

            G_j_1 = find_Gj(G, j-1)

            color_values = find_hard_core_evolution(G_j_1, k, color_values, n_gibbs_steps)

            rho_j_1 += int(not (color_values[e_j[0]] == "black" and color_values[e_j[1]] == "black"))

        rho_j_1 = rho_j_1 / n_simulations
        factibles *= rho_j_1

    return factibles


def estimate_hard_core_multiple_runs(k, simul, gstep, num_runs):
    factibles = []

    for _ in range(num_runs):
        new_value = estimate_hard_core(k, simul, gstep)
        factibles.append(new_value)

    avg = np.average(factibles)
    std = np.std(factibles)

    return avg, std

def print_hard_core(k, avg, std, simul, gstep):
    print(f'k Dimension del lattice: {k}')
    print(f'Numero de simulaciones: {simul}')
    print(f'Numero de pasos de Gibbs sampler: {gstep}')
    print(f'Numero de configuraciones factibles : {avg:.1f}', u"\u00B1", f'{std:.1f}')
    print("=====================================")
    print()
```

Reporte Hard-Core

Veamos como se comporta el conteo aproximado para diferentes valores de los pasos del Gibbs sampler y de número de simulaciones.

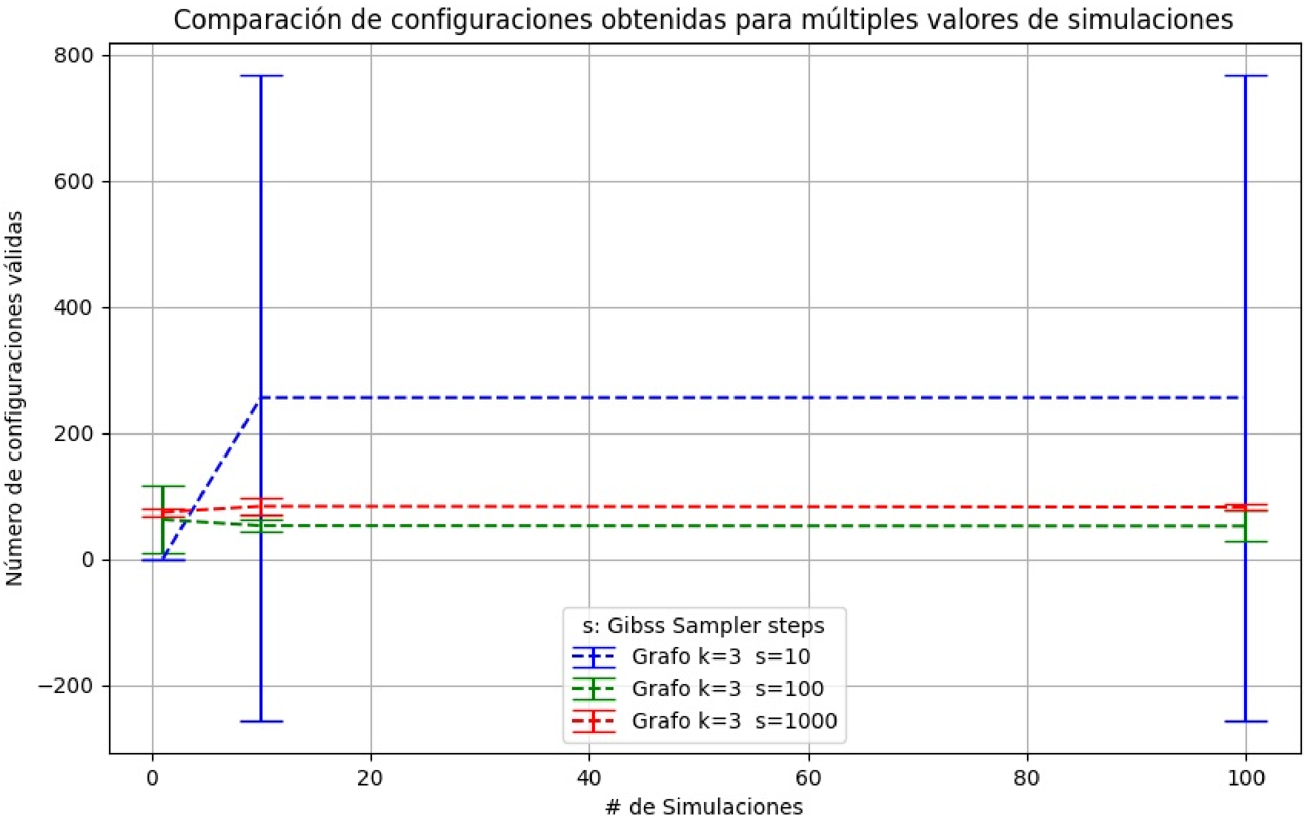
In [61]:
```
simulations_arr = [1, 10, 100]
gibbs_steps_arr = [100, 1000, 10000]


configs_number = []
configs_uncert = []

def report_run(k, num_runs):
    for simul in simulations_arr:
        configs_number_arr = []
        configs_uncert_arr = []

        for gstep in gibbs_steps_arr:
            avg, std = estimate_hard_core_multiple_runs(k, simul, gstep, num_runs)
            print_hard_core(k, avg, 2*std, simul, gstep)
            configs_number_arr.append(avg)
            configs_uncert_arr.append(2*std)

        configs_number.append(configs_number_arr)
        configs_uncert.append(configs_uncert_arr)
```

```
report_run(k = 3, num_runs = 2)
```

```
k Dimension del lattice: 3
Numero de simulaciones: 1
Numero de pasos de Gibbs sampler: 100
Numero de configuraciones factibles : 0.0 ± 0.0
=====================================

k Dimension del lattice: 3
Numero de simulaciones: 1
Numero de pasos de Gibbs sampler: 1000
Numero de configuraciones factibles : 256.0 ± 512.0
=====================================

k Dimension del lattice: 3
Numero de simulaciones: 1
Numero de pasos de Gibbs sampler: 10000
Numero de configuraciones factibles : 256.0 ± 512.0
=====================================

k Dimension del lattice: 3
Numero de simulaciones: 10
Numero de pasos de Gibbs sampler: 100
Numero de configuraciones factibles : 62.7 ± 52.9
=====================================

k Dimension del lattice: 3
Numero de simulaciones: 10
Numero de pasos de Gibbs sampler: 1000
Numero de configuraciones factibles : 52.7 ± 9.4
=====================================

k Dimension del lattice: 3
Numero de simulaciones: 10
Numero de pasos de Gibbs sampler: 10000
Numero de configuraciones factibles : 52.1 ± 24.2
=====================================

k Dimension del lattice: 3
Numero de simulaciones: 100
Numero de pasos de Gibbs sampler: 100
Numero de configuraciones factibles : 73.9 ± 5.9
=====================================

k Dimension del lattice: 3
Numero de simulaciones: 100
Numero de pasos de Gibbs sampler: 1000
Numero de configuraciones factibles : 83.5 ± 13.5
=====================================

k Dimension del lattice: 3
Numero de simulaciones: 100
Numero de pasos de Gibbs sampler: 10000
Numero de configuraciones factibles : 82.2 ± 5.2
=====================================
```

Visualicemos como se comporta el número de configuraciones válidas y la incertidumbre en relacion al numero de pasos del gibss sampler con las simulaciones

In [76]:
```
plt.figure(figsize=(10, 6))

plt.errorbar(simulations_arr, configs_number[0], yerr=configs_uncert[0], color='blue', linestyle='--', capsize=1
plt.errorbar(simulations_arr, configs_number[1], yerr=configs_uncert[1], color='green', linestyle='--', capsize=
plt.errorbar(simulations_arr, configs_number[2], yerr=configs_uncert[2], color='red', linestyle='--', capsize=10

plt.xlabel('# de Simulaciones')
plt.ylabel('Número de configuraciones válidas')
plt.title('Comparación de configuraciones obtenidas para múltiples valores de simulaciones')

plt.legend(title='s: Gibss Sampler steps')
#plt.xscale("log")
plt.grid(True)

plt.show()
```



Vemos que el número de configuraciones válidas se mantiene casi constante luego de 10 simulaciones. Adicionalmente, la incertidumbre para un número muy bajo de pasos del Gibss Sampler es enorme, pero para 10000 pasos toma un valor pequeño. Para mejorar la precisión de los resultados, vamos a tomar 20 simulaciones y 10000*k pasos del Gibss Sampler.

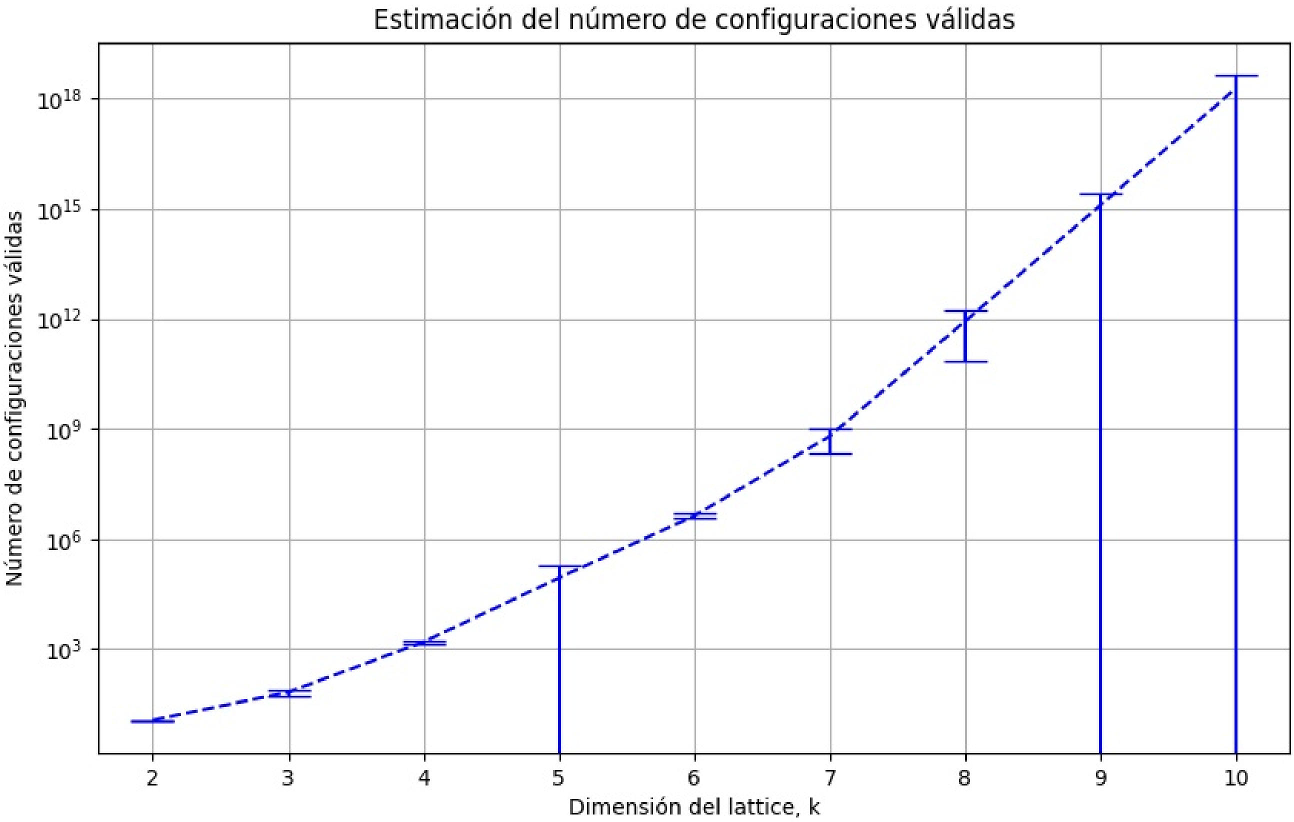
Con estos parámetros, veamos como se comporta el númer de configuraciones válidas para distintos valores de k:

In [97]:
```
simul = 20
gibbs_steps = 10000

configs_number = []
configs_uncert = []
k_values = range(2,11)


def report_run(k, num_runs):
    avg, std = estimate_hard_core_multiple_runs(k, simul, gibbs_steps*k, num_runs)
    print_hard_core(k, avg, 2*std, simul, gibbs_steps*k)
    configs_number.append(avg)
    configs_uncert.append(2*std)

for k in k_values:
    report_run(k = k, num_runs = 2)
```

```
k Dimension del lattice: 2
Numero de simulaciones: 20
Numero de pasos de Gibbs sampler: 20000
Numero de configuraciones factibles : 11.6 ± 0.1
=====================================

k Dimension del lattice: 3
Numero de simulaciones: 20
Numero de pasos de Gibbs sampler: 30000
Numero de configuraciones factibles : 67.3 ± 12.5
=====================================

k Dimension del lattice: 4
Numero de simulaciones: 20
Numero de pasos de Gibbs sampler: 40000
Numero de configuraciones factibles : 1565.7 ± 182.7
=====================================

k Dimension del lattice: 5
Numero de simulaciones: 20
Numero de pasos de Gibbs sampler: 50000
Numero de configuraciones factibles : 87259.0 ± 111581.5
=====================================

k Dimension del lattice: 6
Numero de simulaciones: 20
Numero de pasos de Gibbs sampler: 60000
Numero de configuraciones factibles : 4289656.1 ± 678575.2
=====================================

k Dimension del lattice: 7
Numero de simulaciones: 20
Numero de pasos de Gibbs sampler: 70000
Numero de configuraciones factibles : 634803998.6 ± 422306729.4
=====================================

k Dimension del lattice: 8
Numero de simulaciones: 20
Numero de pasos de Gibbs sampler: 80000
Numero de configuraciones factibles : 854045930412.6 ± 783798434509.2
=====================================

k Dimension del lattice: 9
Numero de simulaciones: 20
Numero de pasos de Gibbs sampler: 90000
Numero de configuraciones factibles : 1243856005143013.5 ± 1279348336320129.8
=====================================

k Dimension del lattice: 10
Numero de simulaciones: 20
Numero de pasos de Gibbs sampler: 100000
Numero de configuraciones factibles : 1883701180337389568.0 ± 2603090592792272896.0
=====================================
```

In [102…

```
plt.figure(figsize=(10, 6))


plt.errorbar(k_values, configs_number, yerr=configs_uncert, color='blue', linestyle='--', capsize=10)


plt.xlabel('Dimensión del lattice, k')
plt.ylabel('Número de configuraciones válidas')
plt.title('Estimación del número de configuraciones válidas')


plt.yscale("log")
plt.grid(True)

plt.show()
```



Notamos que laa incertidumbre relativa aumenta enormemente con la dimensión del lattice.

Como conclusión vemos que, en escala logarítmica, el número de configuraciones escala de forma aproximadamente cuadrática. Por lo tanto, nuestra hipótesis sobre comportamiento del modelo Hard-core para una lattice cuadrado es que el número de configuraciones válidas tiene un comportamiento asintótico de la forma $y \sim 10 ^k^2$ respecto las dimensiones del lattice.

Una nota final es que nos parece particularmente interesante que haya fórmula cerrada para el número exacto de q-coloraciones que tiene un grafo, pero no para su número de configuraciones válidas bajo un modelo Hard-core, dado que el primer problema parece, a priori, mucho más complejo.