

Od verig Markova do Metropolisoroga alg.

$$M(RT)^2$$

Sistem v stanju X

Zanima nas minimizacija energije $E(x)$

Verige Markova: diskretna stanja X_t ob diskretnih časih t

$$X_0, X_1, \dots$$

So brez spomina!

$$P(X_{t+1} = S_{t+1} \mid X_t = S_t, X_{t-1} = S_{t-1}, \dots) = P(X_{t+1} = S_{t+1} \mid X_t = S_t)$$

Te niso važni!
Samo prva prejšnja točka
vpliva.

Prehodna matrika: $K_{ij} = P(X_{t+1} = s_i \mid X_t = s_j)$

Vektor stanja: $\vec{P}_t = (P_{0t}, P_{1t}, \dots)$

Začnemo s \vec{P}_0 ,

$$\vec{P}_t = K^t \vec{P}_0$$

...lahko se zgoditi, da dosežemo stacionarno porazdelitev

$$\vec{\pi} = K^{\infty} \vec{P}$$

Podrobno razvrezeje

$$K_{ij} P_j = K_{ji} P_i$$

$$P(X_{t+1} = s' \mid X_t = s) P(X_t = s) =$$

$\xleftarrow{\text{prehod}}$

$$= P(X_{t+1} = s \mid X_t = s') P(X_t = s')$$

OZ.

$$P(s \rightarrow s') P(s) = P(s' \rightarrow s) P(s')$$

Zdaj pa:

$$\frac{P(s \rightarrow s')}{P(s' \rightarrow s)} = \frac{P(s')}{P(s)}$$

Korak $s \rightarrow s'$ razcepimo na dva koraka (proposer/instrumental in acceptance).

$$P(S \rightarrow S') = Q(S \rightarrow S') \underbrace{g(S \rightarrow S')}$$

proposal conditional probability

acceptance probability

(Verjet. za sprejetje naslega predloga)

Torej =

$$\frac{Q(S \rightarrow S') g(S \rightarrow S')}{Q(S' \rightarrow S) g(S' \rightarrow S)} = \frac{P(S')}{P(S)}$$

$$\frac{g(S \rightarrow S')}{g(S' \rightarrow S)} = \frac{Q(S' \rightarrow S) P(S')}{Q(S \rightarrow S') P(S)}$$

Definiramo še sprejemljivost = acceptance :

$$g(S, S') = \min \left\{ 1, \frac{Q(S' \rightarrow S) P(S')}{Q(S \rightarrow S') P(S)} \right\}$$

2. nalog: Some context

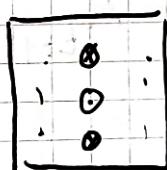
X je ena konfiguracija spinske mreže

značenje $E(X)$ = energija

Zdaj pa nahljivo obrnemo en spin in dobimo X' .

Odlučimo se, ali X' je boljše (E manjši) ali pa nekaj naredimo

Myself deluj glede na razmerje $\frac{g}{g'}$.



↑ spin up/down

Metropolitsov algoritem

enac realizacija X

Začnemo z začetnim stanjem X_t

↑ ob času t

1.) Izberamo $Y_t \sim Q(y | X_t)$ načeloma žreb lahko
odvisen od trenutnega stanja
"porazdeljena po"

2) $X_{t+1} = \begin{cases} Y_t & \text{z verjetnostjo } g(X_t, Y_t) \\ X_t & \text{sicer} \end{cases}$

Pomeni, da ne vemo
katergač bomo
prevrnil

Preprostnejša oblika je: Neodvisni metropolitsov algo.

Začnemo z X_0 :

1.) Izberamo $Y_t \sim Q(y)$

2.) $X_{t+1} = \begin{cases} Y_t & \text{z verjetnostjo min } \left\{ 1, \frac{P(Y_t)Q(X_t)}{P(X_t)Q(Y_t)} \right\} \\ X_t & \text{sicer} \end{cases}$

$e^{-E(x_t)/k_B T}$ "spin flip"

delamo "poteze" = (malce) spremimo stanje sistema (npr. gibanje)

Ta algoritem konvergira k stacionarni porazdelitvi. (sistem stanje sistema se pri $t \rightarrow \infty$ ne spreminja več), in to neodvisno od $Q(\dots)$

"poteza": $X \rightarrow X'$ $\Delta E = E(x') - E(x) < 0$ potezo spremimo



$E(x)$



$E(x')$

$\bar{c}_e > 0 \Rightarrow \xi \sim U(0,1)$ in potezo spremimo \bar{c}_e je $\xi < e^{-\Delta E/k_B T}$

Sicer pa zavrnemo (obdržimo staro stanje).

Z bolj prefinjeno izbiro potez lahko pohitrimo iteracijo, konvergira pa v vselikor.
(Q spremenil na nekej kar več).

1. naloge: Molekularna Verižica

$$E = \sum_{i=1}^{17} \alpha h_i + \underbrace{\sum_i \frac{1}{2} (h_{i+1} - h_i)^2}_{\frac{1}{2} h^2}$$

$$\alpha = \frac{Mg}{hd^2} \rightarrow 1 \quad \text{elastična člen}$$

Eta konfig.
nikeste
molekule.

Začni z naložljivino konfiguracijo:

i) Naredimo eno samo potezo $h_i \rightarrow h_i + \delta_i$

± 1

ii) Gledamo ~~na~~ ΔE in delamo metropolis

delci spregetih potez

\rightarrow Odrisnost, Temp. \Rightarrow

\rightarrow log je ni $h = -18$ meje

\rightarrow začni pogoj:

če gre $T \rightarrow \infty$

gre sprememba vse.

\rightarrow prizahujemo verižico

$\left\{ \begin{array}{l} T = \text{Skalirna boljša} \\ \text{Spušča naprej} \end{array} \right.$

iz lokalnih mln.

Pri racunu ΔE ni treba računati celotnih vsot (neumno že smo naredili local change)

$$E = \dots$$

$$E' = \sum_i \alpha (h_i + \delta_i) + \frac{1}{2} \left\{ \dots + (x_{i+1} - x_i - \delta_i)^2 + (x_i + \delta_i - x_{i-1})^2 + \dots \right\}$$

$$\Delta \bar{E} = E' - E =$$

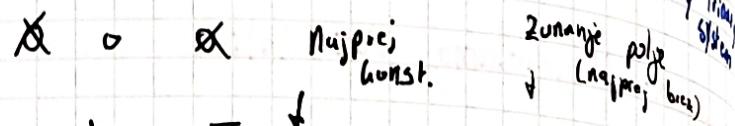
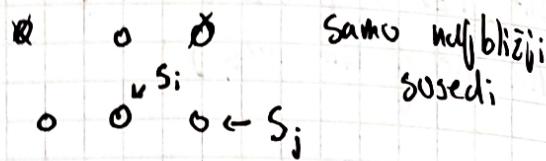
$$= \delta_i^2 - \delta_i (h_{i+1} - 2h_i + h_{i-1}) \alpha$$

Naloge 2

Periodični približni pogoj je da
čes met inf medij

$$N \times N = 100 \times 100$$

500 × 500 zelo lepo



$$E(x) = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j + \sum_i H_i S_i$$

pazi $i = (i_x, i_y)$

$$S = S_{i_x i_y} = \pm 1$$

Ena sama poteka : enega obrnes.

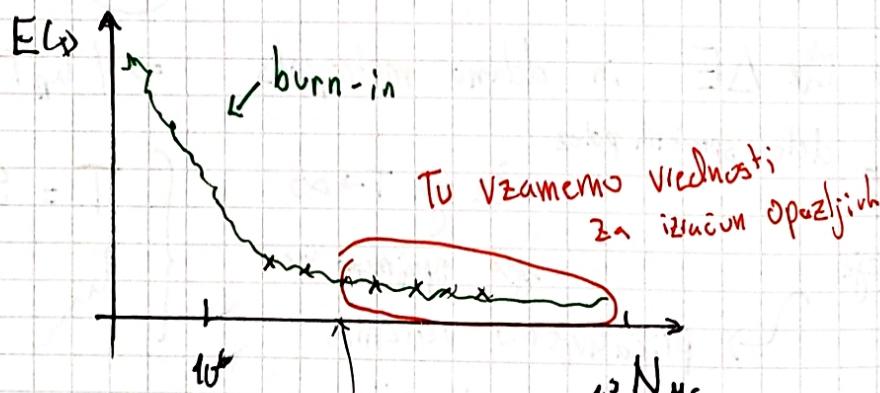
ΔE se spet lepo izračuna:

ninem je to velja za fiks konst.

$$\Delta E = E(x') - E(x) = 2 \sum S_{i,j} [S_{i-1,j} + S_{i+1,j} + S_{i,j-1} + S_{i,j+1}] + 2 H_S$$

+
za oddočitev po metropolisu.

Cellular
Automata

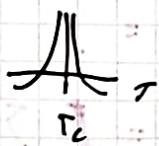


Opazljivka: Magnetizacija;

$$M = \frac{1}{N} \sum_i S_i$$

Vsebuje 100 točk npr.
da ni konvolucija.

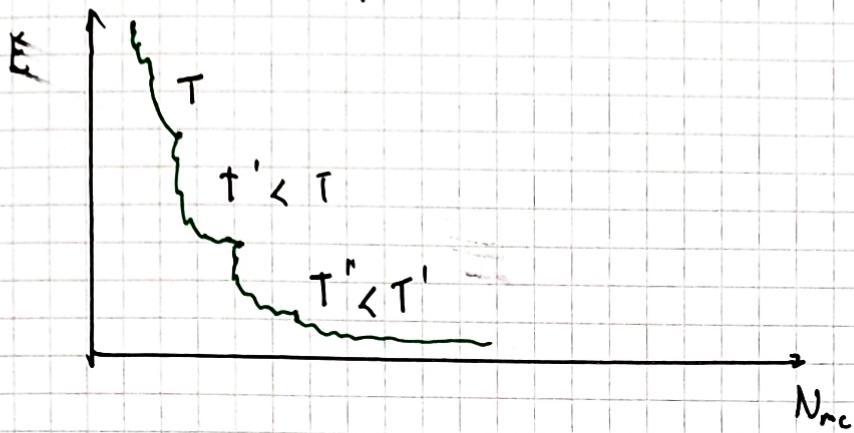
$$\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{N k T}$$



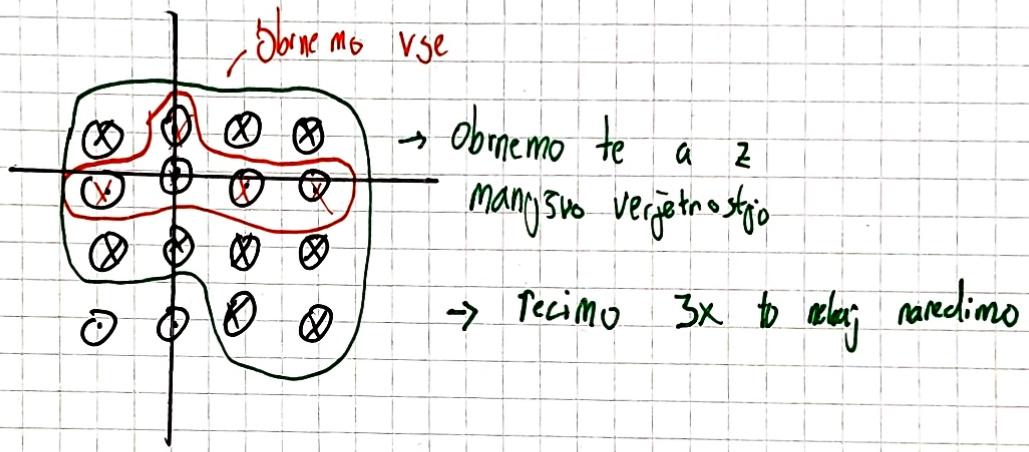
$$C = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{n k T^2}$$

Simulated annealing:

Lepše je, če sistem previdno ohlagamo



Wolfje algo. za flip spinov na mreži v grčah namest enga.



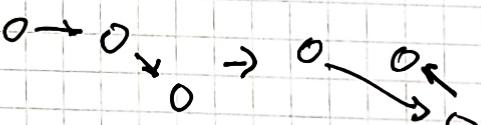
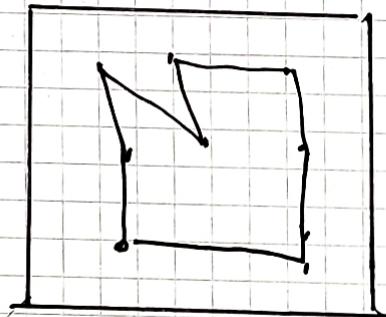
Nedobrevno: Trgovski potnik

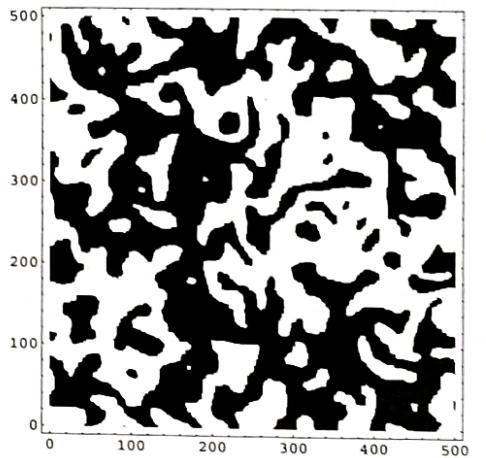
"energija" = dolžina poti

$$E(X) = \sum_{i=1}^{N-1} \sqrt{(x_{i,m} - x_{i+1})^2 + (y_{i,m} - y_{i+1})^2}$$

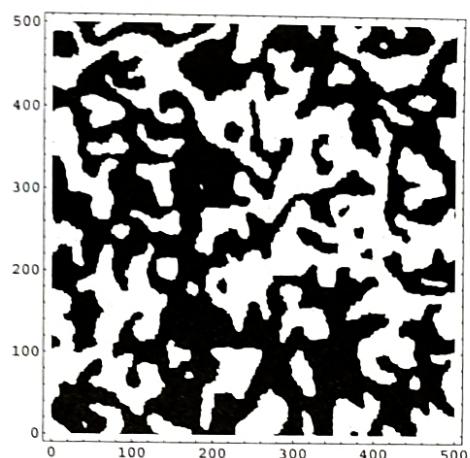
da bo čim boljši poti obiskevši vse in

če vrnil v izvor, poteka je spremembu poti

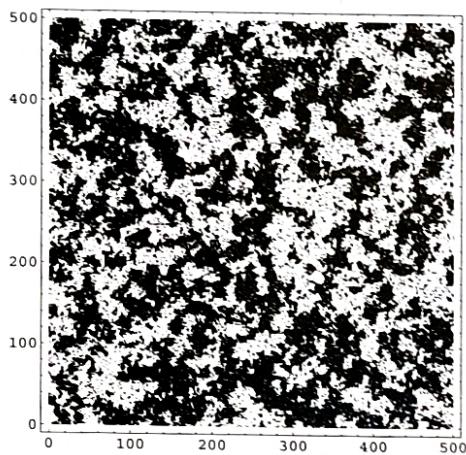




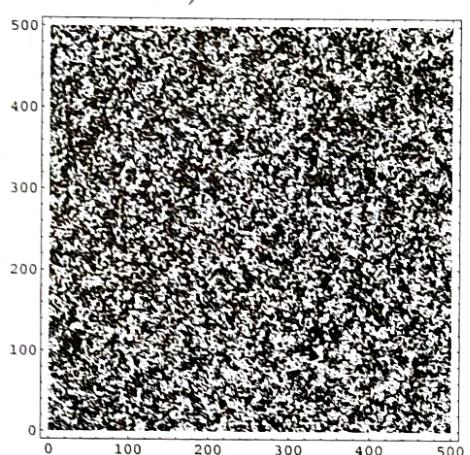
a) $T = 0.001$



b) $T = 1.0$

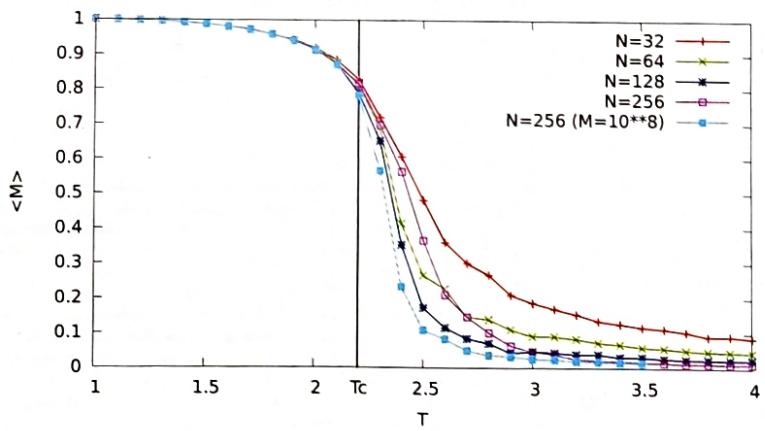


c) $T = 2.3$

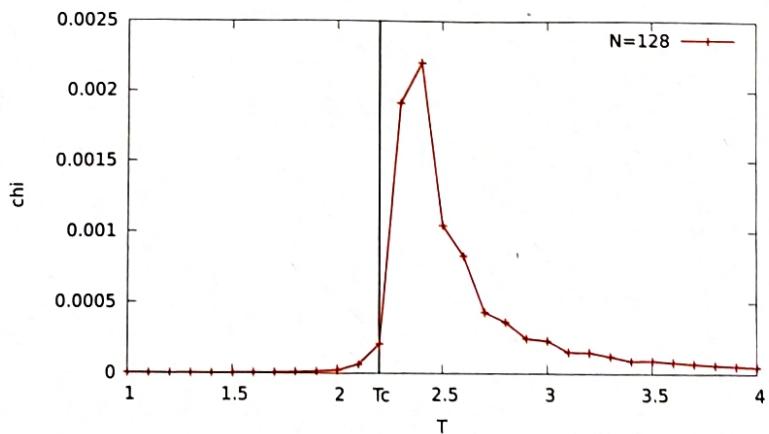


d) $T = 3.0$

$J=1, H=0, M=10^{**7}$



$J=1, H=0, M=10^{**8}$



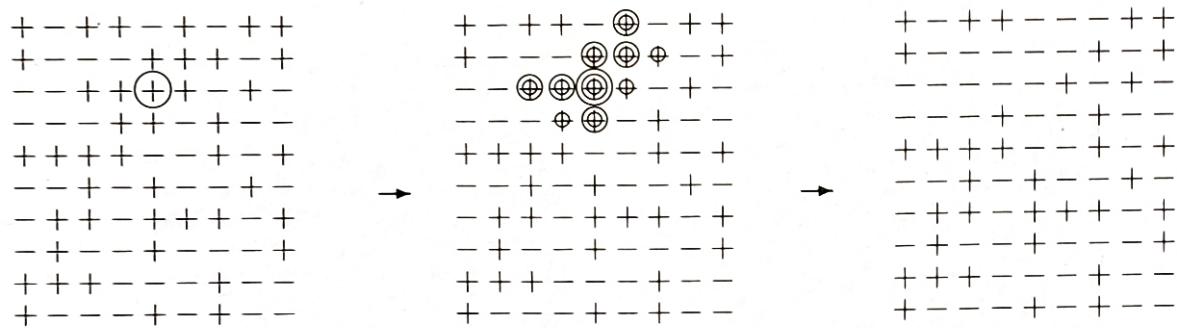
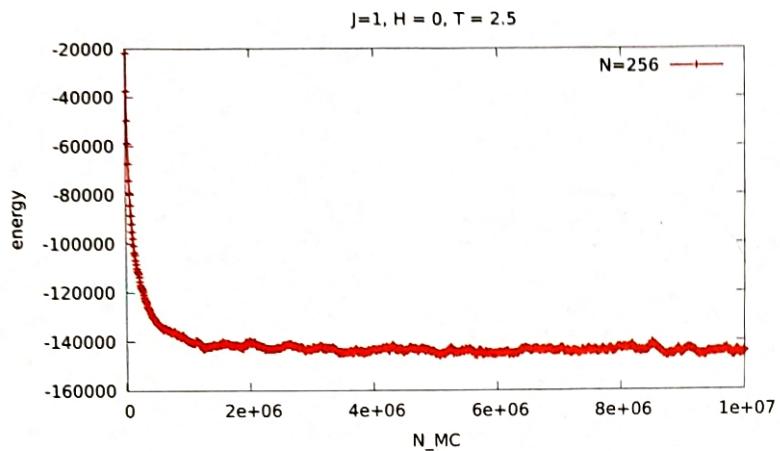


Figure 7.3: One Step of Wolff's Algorithm

Spin-spin correlation function. Correlation length

