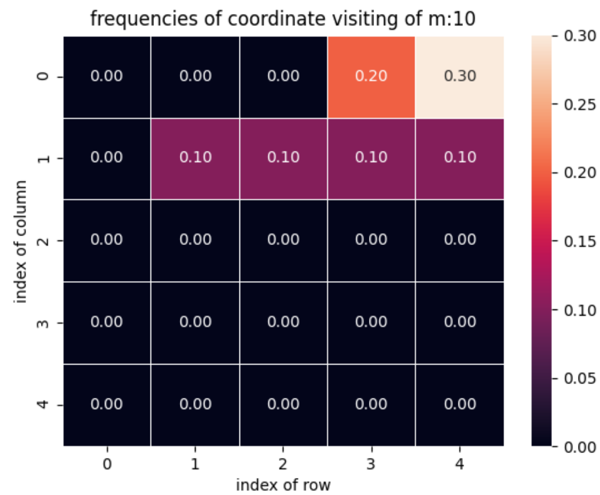
תרגיל 3 קורס 76562

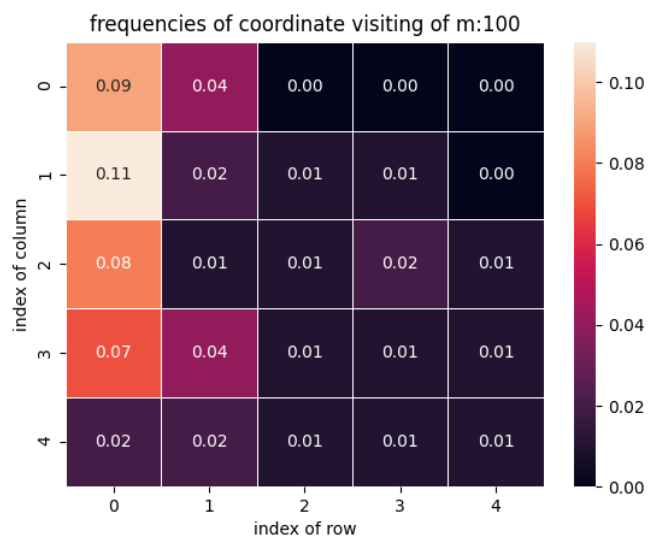
רינה קרנאוך ואופק קוה

סמסטר אביב 2021

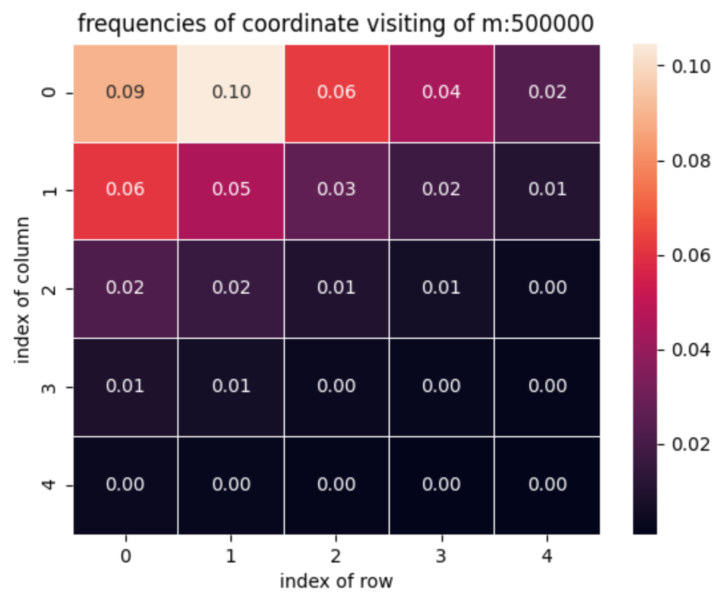
מונטה קרלו

2. מפות החום שקיבלנו הן:



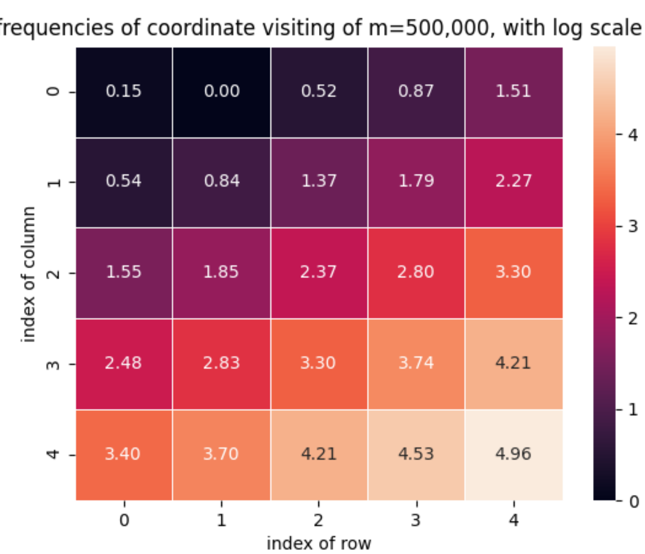


המשך בעמוד הבא.



3. כאשר הגדלנו את m נוכל לראות בגרפים שתדירות הביקורים בכל תא ותא קטנה, ובנוסף נפרסת על כמות תאים רחבה יותר. כאמור הטענה מתאימה לכך ש"בהרצה אינסופית" נבקר בכל תא ותא על פי התפלגות בולצמן, כפי שלמדנו.

4. קיבלנו את מפת החום הבאה –



5. נבחין כי בשורות ועמודות רציפות, כל עוד נלך רחוק יותר מהקצה השמאלי או העליון של המטריצה, נקבל ערכים גבוהים יותר. נבחין שבהרצה שלנו אנחנו מבקרים בחלק השמאלי העליון בעיקר(רנדומי לגמרי כמובן), והרי ההפרשים במפת החום הלוגריתמית קטנים יותר ככל שאנחנו מבקרים בשורות רציפות יותר.

כלומר ההפרש $np.\max\left(np.log1p(c)\right) - np.\log 1p(C)$ גדול יותר ככל שמבקרים פחות בקונפיגורציות מסוימות.

בנוסף נבחין כי גם רמות האנרגיה של התאים השמאליים-עליונים נמוכות יותר מביתר התאים(ניתן לראות זאת על פי $energy\ grid$, משתנה שיצרנו, והרי הבנייה של האלגוריתם שלנו בנויה כך שנמצא לבסוף "אנרגיה מינימלית".

6. **בונוס:** במקרים כאלו משתמשים בlog1p כדי "להחליק" את המידע שלנו כדי לקבל התפלגות מדויקת יותר.

נזכיר שעבור כל ערכי x נקבל –

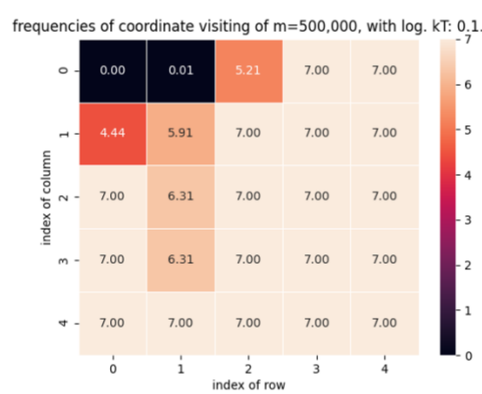
$$1 + x \le e^x \to \log(1+x) \le x$$

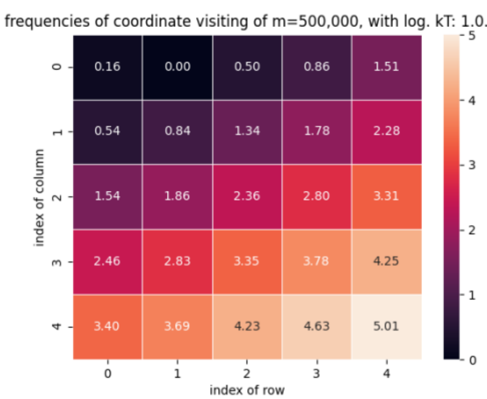
והרי עבור $visitor\ grid$ שנסמן בה את כל התאים שבוקרו אנחנו עלולים לקבל ערכים גדולים עבור m גדולים מאוד. נבחין כי $\log\,(1+x)$ הינו ערך לוגריתמי על כן נקבל סקאלה לוגריתמי למידע שבטבלה, אך עדיין נשמור על יחס סדר, הרי :

$$y \le x \to \log(y) \le \log(x) \to \log(y) \cdot e \le \log(x) \cdot e \to \log(y+1) \le \log(x+1)$$

כלומר עדיין נקבל פרישה של ביקורים בטבלה ששומרת על יחס סדר אך עם ערכים קטנים יותר. עצם כך שהערכים יהיו בסקאלה לוגריתמית מספקת לנו התפלגות "יחסית אחידה" שלא נפרשת על טווח ערכים גדול מתי שעלול לקרות עבור מספר הרצות גדול מאוד.

7. כעת עבור m=500,000 ושינויים ב$KT \in \{0.1,1.0,2.0,50.0\}$ נקבל:





הערך הדיפולטיבי הינו $kT = 0.1$. נבחין שבהשוואה למפה הדיפולטיבית, עבור ערכים קטנים מאוד נקבל הרבה הפרשים גבוהים לתדירויות שלנו, כאשר ההפרשים הנמוכים ממורכזים בעיקר באזור בו ביקרנו כמה שיותר. עבור ערכים גבוהים מאוד של kT נקבל ערכים גבוהים בקצוות אך ערכים נמוכים במרכז הgrid, ללא התאמה אל איפה ביקרנו.

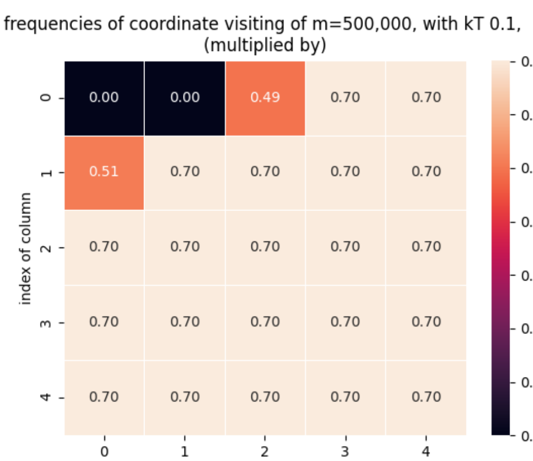
נראה שכל עוד kT עולה נקבל עבור m גדול יותר התפלגות אחידה יותר על התאים שבוקרו מה גם ערכים קטנים יותר בקונפיגורציות המרכזיות ולא בקצוות

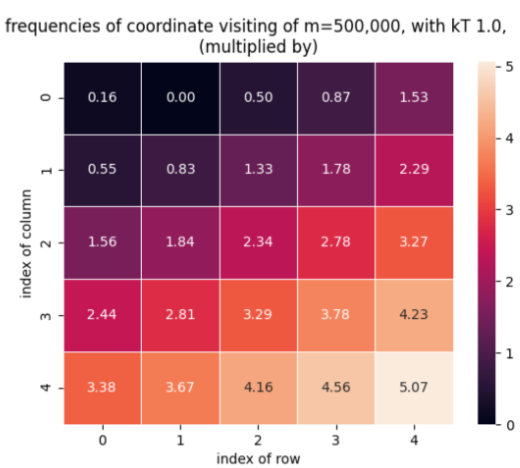
נבחין שעבור ערכים קרובים לדיפולטי (2.0) נקבל מפת חום דומה למפה הדיפולטיבית, והרי במקרים כאלו אכן החלוקה בkT קרובים מאוד איננה משפיעה רבות על השאיפה אל התפלגות בולצמן(שנובעת עבור m גדול כנ"ל), הרי ההסתברות מטרפוליס שתקבע לבסוף בעזרת "הטלת מטבע" בהסתברות זאת אם נזוז הינה –

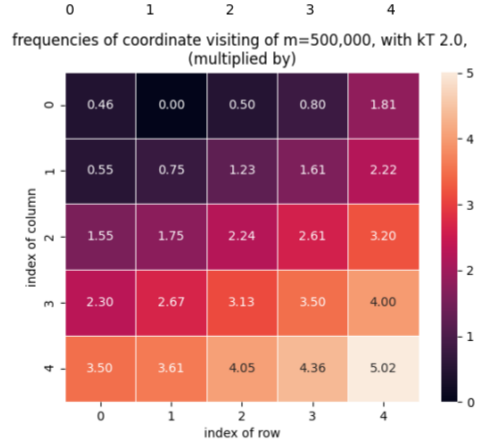
$$\min\left(\frac{\pi_{backward}}{\pi_{forward}} \cdot e^{-\frac{\Delta Energy}{k_B T}}, 1\right)$$

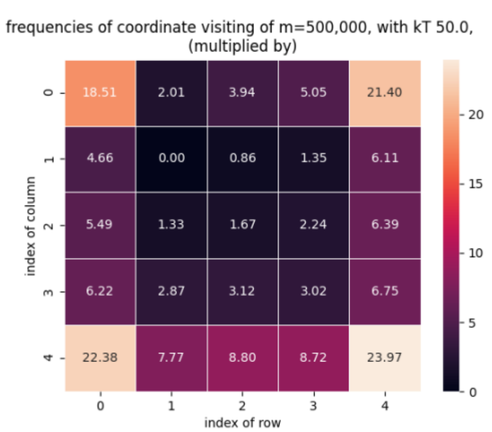
נבחין כי במפה הלוגריתמית ערכים בבעלי ערך גבוה מבוקרים מעט, וערכים בעלי ערך נמוך מבוקרים הרבה. כאשר כנראה שחלוקה בערכים גבוהים מאוד תספק לנו התפלגות ערכים במונה שהם קרובים ל1, על כן נזוז הרבה ממקום למקום כפי שנדמה בגריד עבור $kT = 50$, ועבור ערכים קטנים מאוד נבחר לזוז מעט, כפי שנראה עבור $kT = 0.1$, כי נקבל ערך אפסי עבור הערך מלעיל, על כן הסתברות מטרופוליס תהיה אפסית ולא נזוז.

8. נקבל את הגרפים הבאים –









9 . נבחין כי בין טווח הערכים המינימלי בגרפים שלא הוכפלו בkT לבין אלו שהוכפלו(בגריד יחיד) ישנם הפרשים גבוהים. בהכפלה נדמה שיצרנו פריסה על טווח ערכים מצומצם יותר עבור ערכי kT לא גבוהים מדי(לא נכון לגבי $kT = 50$), היות ומדובר בערך שלם ולכן הכפלה בו תגדיל את הפריסה.

10. עבור ערכי KT נמוכים מאוד נקבל שנישאר באותו המקום בעיקר, מה שמסתדר עם הטענה שלמדנו –

The Boltzmann distribution depends on the *in-silico* temperature **T**:

- At low temperatures, we will get stuck in local minima (we will always get zero if the energy rises even slightly)
- At high temperatures, we will always get 1 (jump between conformations like nuts).

והרי בחישובנו השתמשנו בחישוב מטרפוליס שעבור m גבוה כמו שלנו נשאף להתפלגות בולצמן, ונפעל כפי שמוצע. למרות זאת קיבלנו באופן בלתי צפוי שישנם 4 תאים שבוקרו בעיקר, (הכהים יותר), כאשר 2 בוקרו הרבה ועוד 2 מעט יחסית. כמובן שעבור מספר סופי התוחלת משתנה תחת סט הדגימות, כאשר פה "סט הדגימות" משתנה עקב הבחירה הרנדומית של התא ההתחלתי. ציפינו לא לזוז אך זזנו בטווח קצר של תאים שכנים. כמובן שעבור מספר סופי של הרצות הינו מאורע שונה ממספר אינסופי של הרצות(שלא אפשרי), ותוחלת התאים בהם נבקר עבור מספר גבוה של הרצות גם היא משתנה, כי ההרצות תלויות בהטלות מטבע ובחירות רנדומיות.

11. כעת יש לנו את פונקציה האנרגיה –

$$f(x,y) = x + \frac{1}{2}y \rightarrow \nabla f = \left(1, \frac{1}{2}\right)$$

נניח כי מרחב הקונפיגורציות לא בדיד אלא רציף.

נקבל שה - $force\ vector$ שלנו הוא –

$$f_v(x,y) = \left(-1, -\frac{1}{2}\right)$$

כלומר ה $force\ vector$ של כל קונפיגורציה זהה.