Zápočtová úloha č.3 — simulované žíhání pro hard-core model

Mějme čtvercovou mříž 10 x 10 bodů a každý bod spojíme hranou s jeho čtyřmi nejbližšími sousedy (body na hraně s méně - podle hard-core modelu) ve svislém a vodorovném směru. Úkolem je přiřadit vrcholům čísla 0 a 1 tak, aby žádné dva vrcholy spojené hranou neměly oba hodnotu 1. Otázka je, jakého maximálního počtu jedniček lze dosáhnout (u tohoto grafu je to triviálně 50, jako na šachovnici, ale u obecného grafu už to tak zřejmé být nemusí).

Buď ξ náhodná veličina s hodnotami v $\{0,1\}^{10\times 10}$ všech možných konfigurací s rozdělením daným pravděpodobnostmi

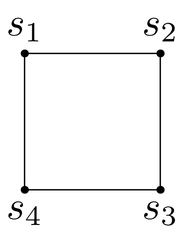
$$\mathbb{P}(\xi = \tilde{\xi}) = \begin{cases} C \cdot e^{\frac{n(\tilde{\xi})}{T}}, & \tilde{\xi} \text{ je přípustná,} \\ 0, & \text{jinak.} \end{cases}$$

kde C je normující konstanta, T je parametr teploty a $n(\xi)$ je počet jedniček v konfiguraci $\xi \in \{0,1\}^{10\times 10}$ (tedy ty konfigurace, které mají větší počet jedniček, jsou při pevné teplotě pravděpodobnější).

Úkoly:

1. Spočítejte podmíněnou pravděpodobnost $p(T)$, že vrchol v bude mít hodnotu 1 za podmínky všech ostatních vrcholů při pevné teplotě $T > 0$.
2. S použitím random scan Gibbs sampler navrhněte algoritmus simulovaného žíhání pro nalezení přípustné konfigurace s maximálním počtem jedniček. Vysvětlete, proč vypadá tak, jak vypadá.
3. Určete schéma bezpečného žíhání podle věty z přednášky. Jak dlouho by trvala simulace, kdyby jste ho použili?
4. Implementujte algoritmus simulovaného žíhání a ověřte, že lze skutečně dosáhnout 50ti jedniček. Schéma žíhání můžete použít i rychlejší, než to z předchozího bodu. Zkuste různá schémata žíhání. Co jste zjistili?
   Součástí řešení by měl být i grafický výstup, ze kterého bude patrné, jak probíhalo schéma žíhání.
5. Propočítejte a vysvětlete následující příklad varující před příliš rychlým schématem žíhání:

   Mějme stavový prostor $S = \{s_1, s_2, s_3, s_4\}$ a hledáme minimum funkce $h(s_1) = 1$, $h(s_2) = 2$, $h(s_3) = 0$ a $h(s_4) = 2$. Stavový prostor procházíme pomocí Metropolisova-Hastingsova algoritmu s Q odpovídající náhodné procházce na grafu

   Návrh v Metropolisově-Hastingsově algoritmu tedy volíme tak, že rovnoměrně náhodně vybereme stav mezi sousedy současného stavu, tedy $q_{ij} = \frac{1}{v_i}$, pokud s_j je soused s_i, kde v_i je počet sousedů s_i. V našem případě je $v_i = 2$ pro všechna i a pravděpodobnosti přijetí závisí pouze na podílu $f_{h,T}(s_j)/f_{h,T}(s_i)$. Určete matici pravděpodobností přechodu P_T při dané teplotě T Boltzmannova rozdělení.

Nechť nehomogenní markovský řetězec $\{X_n\}$ startuje v $X_0 = s_1$ a běží dle nějakého žíhacího schématu. Značíme $T^{(n)}$ teplotu v čase n a A jev, že řetězec zůstane v s_1 navždy. Potom je

$$\begin{aligned}
\mathsf{P}(A) &= \mathsf{P}(X_1 = s_1, X_2 = s_1, \dots) = \lim_{n\to\infty} \mathsf{P}(X_1 = s_1, \dots, X_n = s_1) \\
&= \lim_{n\to\infty} \mathsf{P}(X_1 = s_1 \mid X_0 = s_1)\mathsf{P}(X_2 = s_1 \mid X_1 = s_1) \cdot \mathsf{P}(X_n = s_1 \mid X_{n-1} = s_1) \\
&= \lim_{n\to\infty} \prod_{i=1}^{n} \left(1 - e^{-1/T^{(i)}}\right) = \prod_{i=1}^{\infty} \left(1 - e^{-1/T^{(i)}}\right).
\end{aligned}$$

Pro $0 \le u_i < 1$ platí $\prod_{i=1}^{\infty}(1-u_i) > 0 \Leftrightarrow \sum_{i=1}^{\infty} u_i < \infty$ (viz např W. Rudin (1977): Analýza v reálném a komplexním oboru, věta 15.5).
Odvoďte, že pokud jde teplota $T^{(n)}$ k nule příliš rychle, je nenulová pravděpodobnost, že řetězec zůstane v lokálním (nikoli globálním) minimu navždy.