

Metropolis Yöntemi:

Bu yöntemde esas olarak aşağıdaki basamaklar takip edilir:

- 1) Bütün dinamik değişkenler σ_i için birer değer atanır.
Değişkenler için aynı değer seçilmesi düzenli başlangıç (ordered start), farklı seçilmesi düzensiz başlangıç (disordered start) olarak adlandırılır.
- 2) Örgü üzerinde herhangi bir nokta seçilir. Bu noktada dinamik değişkenlerin komşuları ile etkileşimleri gözönüne alınarak yerel enerji değerleri hesaplanır.

3) Bu noktadaki dinamik değiştirildiğinde, E ve E' eski ve yeni enerji değerini göstermek üzere olasılık fonksiyonu

$$W(\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma'_i\}) = \begin{cases} \exp[-\beta(E' - E)], & E' \geq E \\ 1, & E' < E \end{cases}$$

ile ifade edilir. Yani enerji küçüldü ise değişim kabul edilir.

Enerji artmış ise

$$P = \exp(-\beta\Delta E)$$

Olasılığı keyfi olarak 0-1 arasında rasgele bir sayı üreticisi tarafından seçilen bir r sayısı ile karşılaştırılır.

$P > r$ ise değişim kabul edilir.

$P < r$ ise değişim reddedilir.

4) İşlem yeni bir örgü noktası ile devam eder.

Pratikte rasgele sayılara ihtiyaç var!

Spinlerin seçimi: rasgele veya sıralı olabilir.

Bu algoritma çok efektif değil, ancak her türlü problemde, uygulamada kullanılabilir!!!

Sabırsanız çok daha güçlü algoritmalar var!!!!

Heat-Bath (Isı Banyosu)

Bu yöntemde herhangi bir dinamik değişken σ_i 'nin σ_i' değerini alma olasılığı

$$P(U_\nu) = \frac{\exp[-\beta H(\sigma_i', U_\nu)]}{\sum_{\sigma_i} \exp[-\beta H(\sigma_i, U_\nu)]}$$

ifadesi ile verilir. Bu eşitliğe göre, bütün komşular sabit tutulurken dinamik değişken U_ν 'nin alabileceği tüm durumlar üzerinden toplam alınmaktadır. Yani bu durum, Metropolis algoritmasının aynı noktada birden fazla yapılması demektir.

Lokal Güncelleme Algoritmalarında Problemler:

Metropolis, ısı Banyosu vs. algoritmalar kritik nokta civarında zorlanır.

“Kritik Yavaşlama” Sistem faz geçiş sıcaklığı civarında dengeye ulaşmaya kadar gereken relaksasyon zamanı çok büyük olmaya başlar. Bu durum istatistiksel olarak bağımsız veri üretmeyi güçleştirir.

Relaksasyon zamanı sistem boyutunun bir üsteli olacak şekilde artış gösterir. Kritik yavaşlama olayı

Dinamik kritik üstel $\tau \propto L^z$ ile karakterize edilir. Bu istatistiksel olarak konfigürasyon yaratmak için gerekli zamandır.

$z \approx 2$ kritik noktada bu algoritmalar kullanışsız!!

Nasıl çözülür? Küme güncelleme Algoritmaları

Swendsen-Wang algoritması:

Kümeler belirlenerek, spinler küme halinde döndürülerek konfigürasyonlar yaratılır.

Wolff (tekli) küme algoritması:

Rasgele bir spin konumu seçilir ve çevresindeki küme belirlenir. Sonrasında konfigürasyonlar bu küme takip edilerek oluşturulur.