

GENELLEŐTİRİLMİŐ KÜME ALGORİTMALARI

Genelleőtirilmiş küme günümüzde son derece popüler olan ve pek çok alanda uygulanabilir algoritmalar için kullanılan genel bir terimdir.

Bu ailede en çok bilinen algoritmalar,

- Multikanonik Monte Carlo yöntemi (Berg and Neuhaus, 1991; 1992; Berg)
- Exchange Monte Carlo (Kimura and Taki, 1991; Lyubartsev et al., 1992; Hukushima and Nemoto, 1996)
- Energy Landscape Paving
Hansmann & L. Wille

Bu algoritmalar fizikte çok farklı alanlardaki stokastik modellerin simülasyonlarında kullanılırlar,

- spin modelleri (Potts modeli (Liang, 1992; Kerler and Weber, 1993; Kronfeld, 1993; Houdayer, 2001; Novotyn, 2001)
- spin cam modelleri (Wang and Swendsen, 1988; Berg and Çelik, 1992a; Berg and Janke, 1992
- random field modelleri (Marinari and Parisi, 1992)
- kuantum spin modelleri (Kuznetsova et al., 1993; Sandvik, 1998)

- polimerler (Vorontsov-Velyaminov et al., 1996; Whittington, 2000) , örgü polimerleri ve proteinleri (Urakami and Takasu, 1996; Iba et al., 1998; Chikenji et al., 1999; Chikenji and Kikuchi, 2000)
- gerçek protein modelleri (Nakajima et al., 1997; Higo et al., 1997; 2001; Bartels and Karplus, 1998; Nakajima, 1998)
- Lennard Jones akışkanları (Wilding, 1995; 2001),
- kuantum gravite modelleri (Hotta et al., 1998)

Bu tekniklerin en önemli özelliđi, enerji ve sıcaklık uzayına sınırlandırılmıř olmamaları ve her türlü parametre ile çalışılabilme esnekliğini sağlamalarıdır.

Hatta fiziksel olmayan konfigürasyonlar da dağılım içerisinde elde edilebilmektedir.

Bu esneklik çeřitli bilgisayar uygulamaları ve özel modeller için "özel amaçlı" (special purpose) algoritmalarının dizaynını kolaylařtırmaktadır.

Neden Simülasyon ?

Analitik olarak çözümleri mümkün olmayan **karmaşık fiziksel sistemlerin** çözümünde simülasyon yöntemlerinin kullanılması ön plana çıkmıştır. Örneğin 2D Ising modelin analitik olarak kesin çözümü olmasına karşın 3D'da analitik çözüm yoktur ve ancak simülasyon teknikleri ile anlaşılabilir.

Simülasyonlarda karşılaşılan Güçlükler Nelerdir ?

Bunların başında serbest enerjinin pek çok yerel (local) minimumlarının bulunması ve simülasyon esnasında gerçek global minimum yerine sistemin yerel minimumlarında dolaşma

gelir. Bunun sonucunda global minimuma ulaşmamak tehlikesi mevcuttur. Bu durum az veya çok her sistem için kendini gösterir.

Simülasyonlarda dikkat edilmesi gereken diğer bir husus, "critical slowing down"

(Binder, 1979) olarak adlandırılan kritik yavaşlama olayıdır.

Sistem özellikle faz geçişi sıcaklığı civarında, dengeye ulaşınca kadar relaksasyon zamanı çok büyük olmaya başlar.

Bu durum istatistiksel olarak bağımsız veri üretmeyi güçleştirir.

Diğer bir güçlük, simülasyon yönteminin seçimidir. Simülasyon algoritmaları, istatistiksel olarak bağımsız yeni konfigürasyonlar yaratmak açısından birbirinden çok farklı özellikler içerir. Bu yöntemler arasında en yaygın olarak kullanılan Monte Carlo simülasyon yöntemi gösterilebilir.

Bir beklenen değerin hesaplanmasında bütün konfigürasyonlar üzerinden toplam alınması gerekir. Ancak üleşim fonksiyonunun direk olarak hesaplanması mümkün değildir. 50 x 50 'lik bir kare örgüde Ising model düşünülecek olursa, mümkün olan konfigürasyon sayısı $2^{50 \times 50} \sim 10^{753}$. Bu terimleri hesaplamak için **Teraflop** mertebesindeki bilgisayarlar bile yetersiz kalır.

Metropolis, heat-bath, cluster ... gibi algoritmalar Markov zincirini kullanarak Boltzmann olasılık dağılımı ile konfigürasyonlarını oluştururlar ve bu dağılım fonksiyonu kanonik kümeyi tanımlar.

Kanonik Yöntem

Gibbs kümesi için bir E enerji değerinde bulunma olasılığı

$$P^B \sim w^B n(E)$$

ile ifade edilir. Burada n(E) durum yoğunluğu, w^B ise

$$w^B = \exp(-\beta E)$$

olarak tanımlanan Boltzman ağırlık faktörüdür.

Kanonik Yöntemin Zorlukları

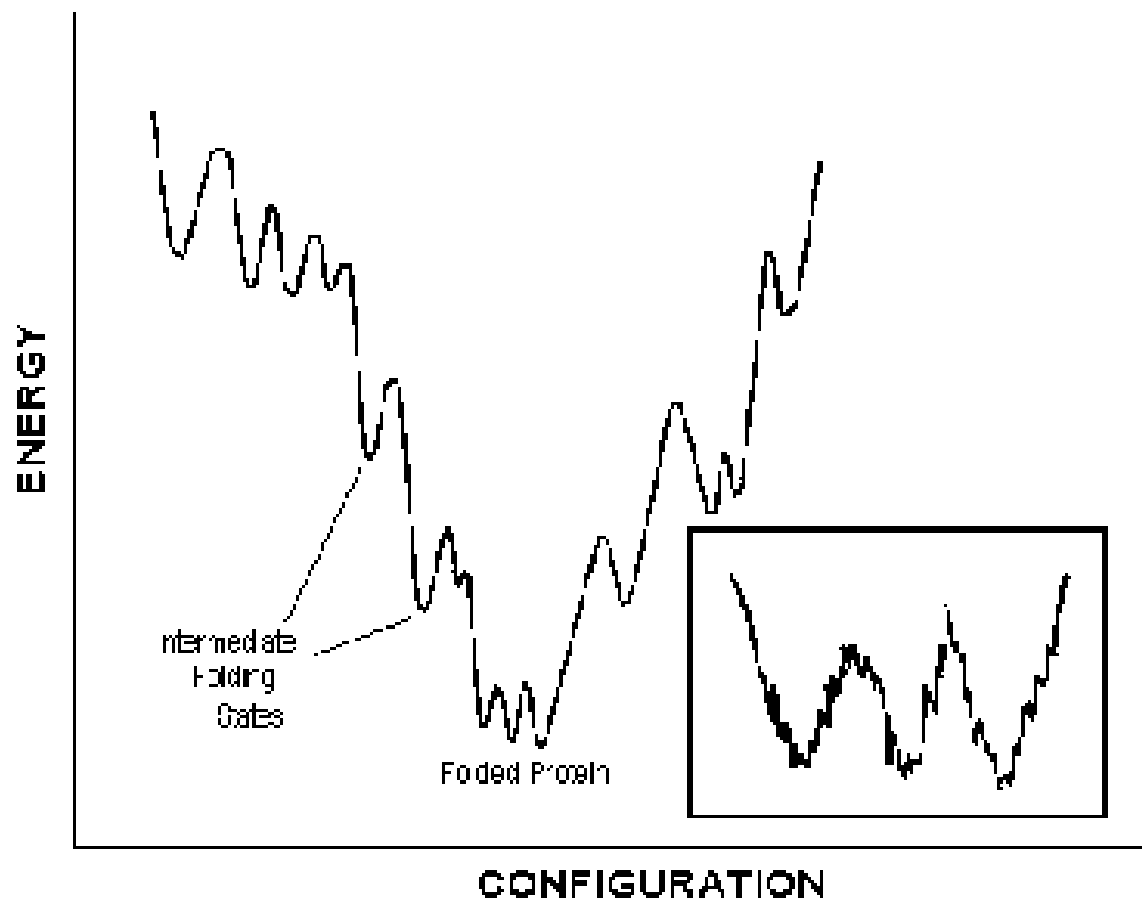
Kanonik kümelerde Monte Carlo simülasyon uygulamaları yapıldığı zaman birçok sorun ve zorluklar ortaya çıkar. Bunların en önemlileri sıralamak gerektiğinde:

- Sistemin istenilen her sıcaklığında ayrı bir simülasyon yapılması gerekir.
- Kritik yavaşlama problemi.
- Özellikle düşük sıcaklıklarda spin camları gibi çelişkili sınırlayıcılar

(conflicting constraint) içeren sistemlerde (nöron ağları, protein folding, v.b.), taban durumları çok sayıda çakışık vadiler

içerdiğinden kanonik simülasyonlarda bu vadilerden birinde kalınabilir.

Tüm faz uzayı taranamaz.



Dođal Kmeden Yapay Kmeye

Faz geiř noktası civarında gzlenen ekirdekleřme (nucleation) mekanizması ve asıl nemlisi kompleks sistemlerde gzlenen engebeli enerji profilinden dolayı yarı kararlı (metastable) yerel minimumlarda takılma problemleri arařtırmacıları modifiye dađılımlara yani Markov prosesi dıřındaki yapay kme dađılımlarına itmiřtir.

Genelleřtirilmiř kme algoritmalarında oluřturulan bu yapay konfigrasyon dađılımları tekrar eřitli teknikler ile asıl istatistiksel kmeye dnřtrlmektedir.

Bu algoritmalar, sıradan Monte Carlo yöntemleri ile doğrudan hesaplanamayan, çok değişkenli integralleri, çok katlı toplamları kolaylıkla çözüme imkanı vermektedir.

En önemlisi olan, Multikanonik algoritma, ağırlıklandırma bağıntısı ile birlikte kullanıldığında integralleri kolaylıkla hesaplama olanağı sağlamaktadır. Bu yöntemler "nadir" örneklenen konfigürasyonları da efektif olarak incelememizi kolaylaştırmaktadır.