

Multikanonik Yöntem

Bu simülasyonlarda cevaplanması gereken en önemli problem

"Sistemin çözümü için en uygun ağırlık faktörleri nedir?" sorusudur.

Genel Prosedür:

Ağırlık faktörlerinin tanımlanması

Büyük ölçekli simülasyon

İstenen sıcaklıklarda fiziksel niceliklerin beklenen değerlerin hesaplanması

- **Problem: Ağırlık faktörlerinin doğru hesaplanması**

- **Avantajlar:**

Enerji bariyerleri aşılabılır.

Genel minimumun bulunma olasılığı daha yüksektir.

Termodinamik nicelikler istenen tüm sıcaklıklarda bulunabilir.

Tarihçe: 1970'lerden beri çeşitli sistemlerin çözümü için probleme özgü önceden bilinmeyen ağırlık faktörleri bulunarak yapılan Monte Carlo simülasyonları ile sonuç aranmaktadır. çok kısıtlı alandaki uygulamalarla bile olsa bu metodlar sıklıkla geliştirilmeye çalışılmıştır.

1988'de İtalyan APE kollaborasyonunun yaptığı çalışmayla örgü ayar kuramındaki $SU(3)$ "deconfinement" (hapis) faz geçişinin herkesin inandığı gibi **birinci derece mi, yoksa ikinci derece olabilir mi?** sorusu gündeme gelmiştir.

Bu problem teorik yüksek enerji fiziği çalışan araştırmacıları birinci derece faz geçişlerini ayrıntılarıyla irdelemek üzere, yüksek performanslı bilgisayar çalışmalarına ve de algoritma dizaynına itmiştir. Yüzey gerilim katsayısının hesaplanmasının zor oluşuna karşın, bu yeni metodun ilk uygulamaları

2d $q=7$ Potts modelle ve daha sonrasında da SU(3) örgü ayar kuramıyla yapılmıştır (Baumann and Kost, 2001).

2d $q=10$ Potts model uygulaması içeren ilk çalışmalardır.

Multikanonik yöntem, **2d $q=10$** Potts modelin tam (exact) arayüzey gerilim (interface tension) hesaplarının yapılmasından sonra (Borgs and Janke, 1992) tam çözümler ile Multikanonik hesapların tam uyum içerisinde olmasıyla her alanda güvenilen, uygulanan bir yöntem haline gelmiştir.

Bu yöntem bazı **ferromagnetizma ve spin camı** modellerinde test edilmiştir (Berg and çelik, 1992a;çelik et al., 1993).

Multikanonik yöntem, her sistem için önceden bilinmeyen bir **parametrizasyon** ile enerji uzayında bir sabit olasılık dağılımının oluşturulmasını gerektirir. Kanonik simülasyon yöntemi ile sistemin fiziksel niceliklerini incelemek için ayrı ayrı noktalarda bağımsız simülasyonlar yaparak değerlendirilmesi çok büyük zaman gerektirecektir.

Multikanonik yöntemin kazandırdığı kolaylıklardan en önemlisi, **tek bir simülasyon** ile sistemin bütün özelliklerini taşıyan fiziksel nicelikleri ve parametrelerini değerlendirme olanağı vermesidir.

Multikanonik Yöntemin Avantajları

- Varyans minimum değerdedir.
- Enerji aralığına bağlı olarak, tüm β değerleri için kanonik üleşim fonksiyonu hesaplanabilir.
- Faz uzayının bir kısmına sınırlı kalmayıp $E_{\min} < E < E_{\max}$ aralığındaki tüm değerler eşolasıkla taranabilir.
- Tek bir simülasyon ile sistemin tüm sıcaklık aralığında taban durumları incelenebilir. önemli fiziksel nicelikler hesaplanabilir.

- Genellikle seçilen algoritmalara bağlı olan "slowing down" olayı, problem olmaktan çıkar.

Çelişkili sınır şartları altında çok düzensiz bir yapı gösteren sistemler,

"frustration" ve rastgelelik (randomness) gibi iki önemli öge içerirler. Bu tür özellik taşıyan sistemlerin tipik özelliği, taban düzeylerinin dejenere durumlara karşılık gelen birçok enerji minimumları (vadiler)' den oluşmuş olmasıdır. Bu tip dejenere minimumlar özelliği gösteren yapılar çok farklı alanlarda görülmektedir:

- Spin camları
- Nöron Ağları
- Optimizasyon problemleri (Traveling Salesman Problemi)
- Protein Katlanma Problemi
- Polimerler

Multikanonik algoritma iki basamaktan oluşmaktadır.

- 1)Öncelikle her sistem için önceden bilinmeyen ağırlık fonksiyonlarının elde edilmesi gerekmektedir.
- 2)Elde edilen ağırlık fonksiyonları ile Markov zincirine uygun Monte Carlo simülasyonu gerçekleştirilmektedir.
- 3)Kanonik fiziksel nicelikler çeşitli teknikler ile uzay tekrar dönüşüm edilerek hesaplanır.