

Paralel Tempering Algoritması

Engelibeli enerji profiline sahip olan sistemlerde, özellikle de düşük sıcaklıklarda efektif simülasyon sağlar.

Birçok farklı disiplinde kullanım alanı bulunmaktadır.

- Biyolojik moleküller
- Biyoinformatik
- Klasik ve Kuantum çelişkili sınır şartları içeren sistemlerde
- QCD
- Spin camları

Bu sistemlerin genel özelliği;

- Kompleks sistemler olmaları
- Enerji profilleri engebeli
- Düşük sıcaklıklarda ΔE büyük olduğunda

$$P_{\text{accept}} = \min(1, e^{-\Delta E/T})$$

Asla kabul edilmeyecek

Bu problem nasıl aşılır??

- 1) Ya bariyerlerden dolaşılır. Tunneling!
- 2) Bariyerlerden sistem ısıtılarak atlanabilir.

Algoritma Nasıl Çalışıyor?

- Molekülün farklı sıcaklıklarda N tane kopyası oluşturulur.
- Farklı kopyalar arasında konfigürasyonlar deyiş-tokuş edilir.
- Birleşik sistemin her C durumunun sahip olduğu ağırlık faktörü,

$$w(C) = \exp\left(-\sum_i^N E(C_i) / k_B T\right)$$

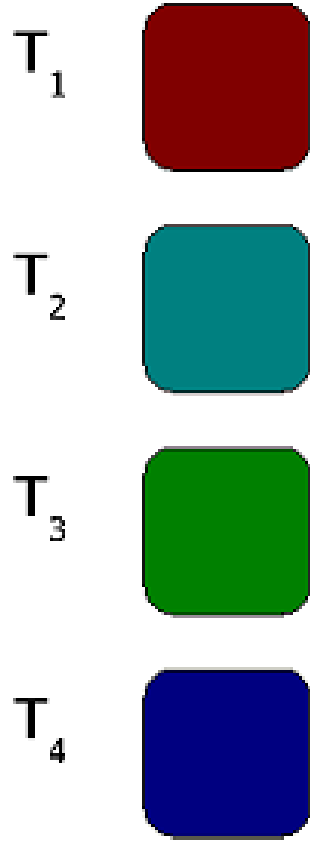
Burada C , i . kopyanın bir konfigürasyonunu göstermektedir.

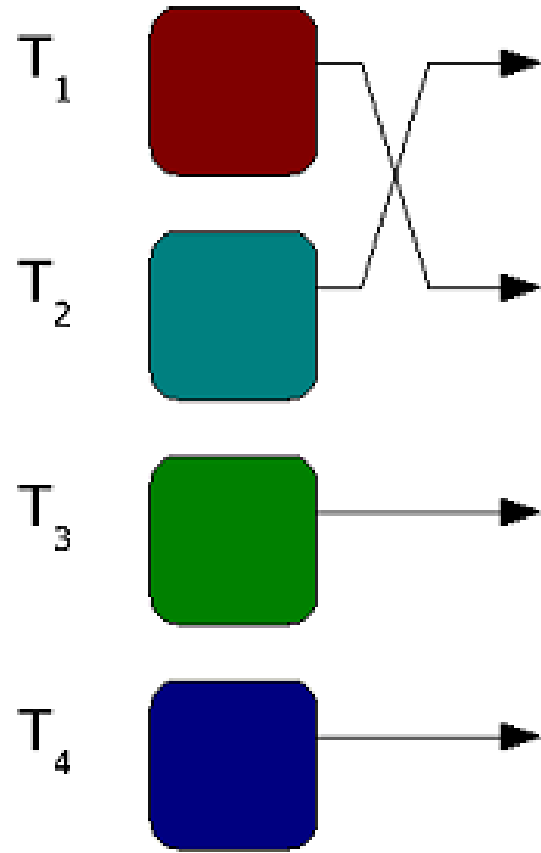
- Deyiş-tokuş işlemi Monte Carlo prosesine göre yapılır.

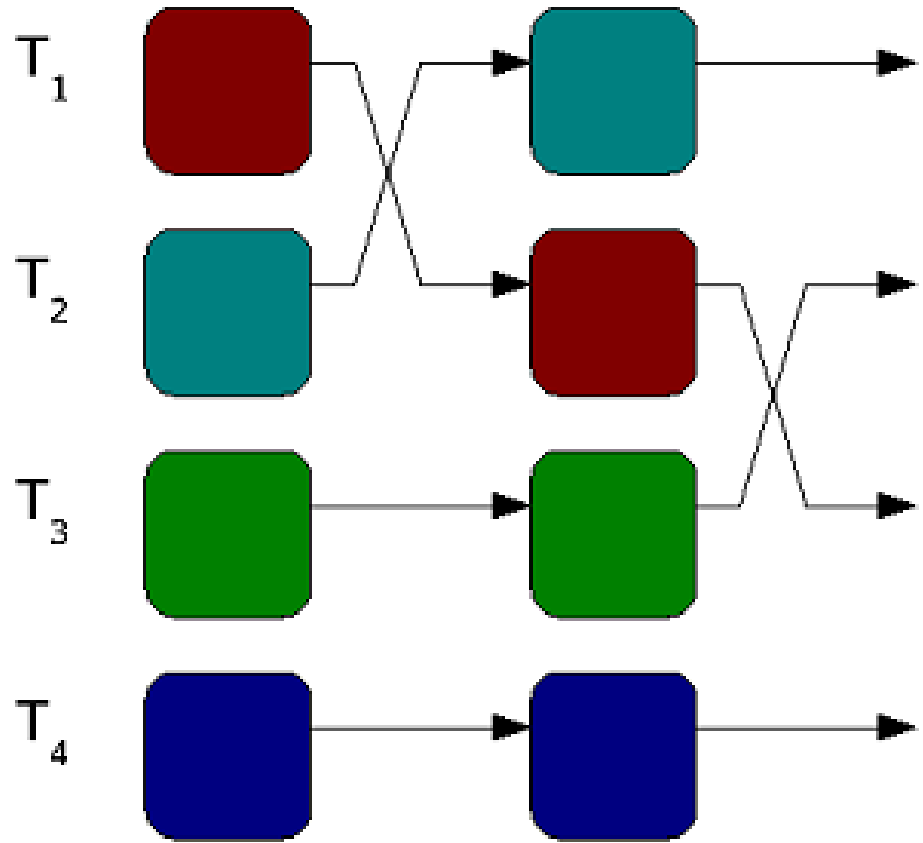
- i,j gibi iki kopyanın konfigürasyonları arasındaki değiş tokuş ağırlık faktörü,

$$w(C \rightarrow C') = \min \left(1, \exp \left\{ -\frac{E(C_j)}{k_B T_i} - \frac{E(C_i)}{k_B T_j} + \frac{E(C_i)}{k_B T_i} + \frac{E(C_j)}{k_B T_j} \right\} \right)$$

Çalışma prensibini irdeleyelim







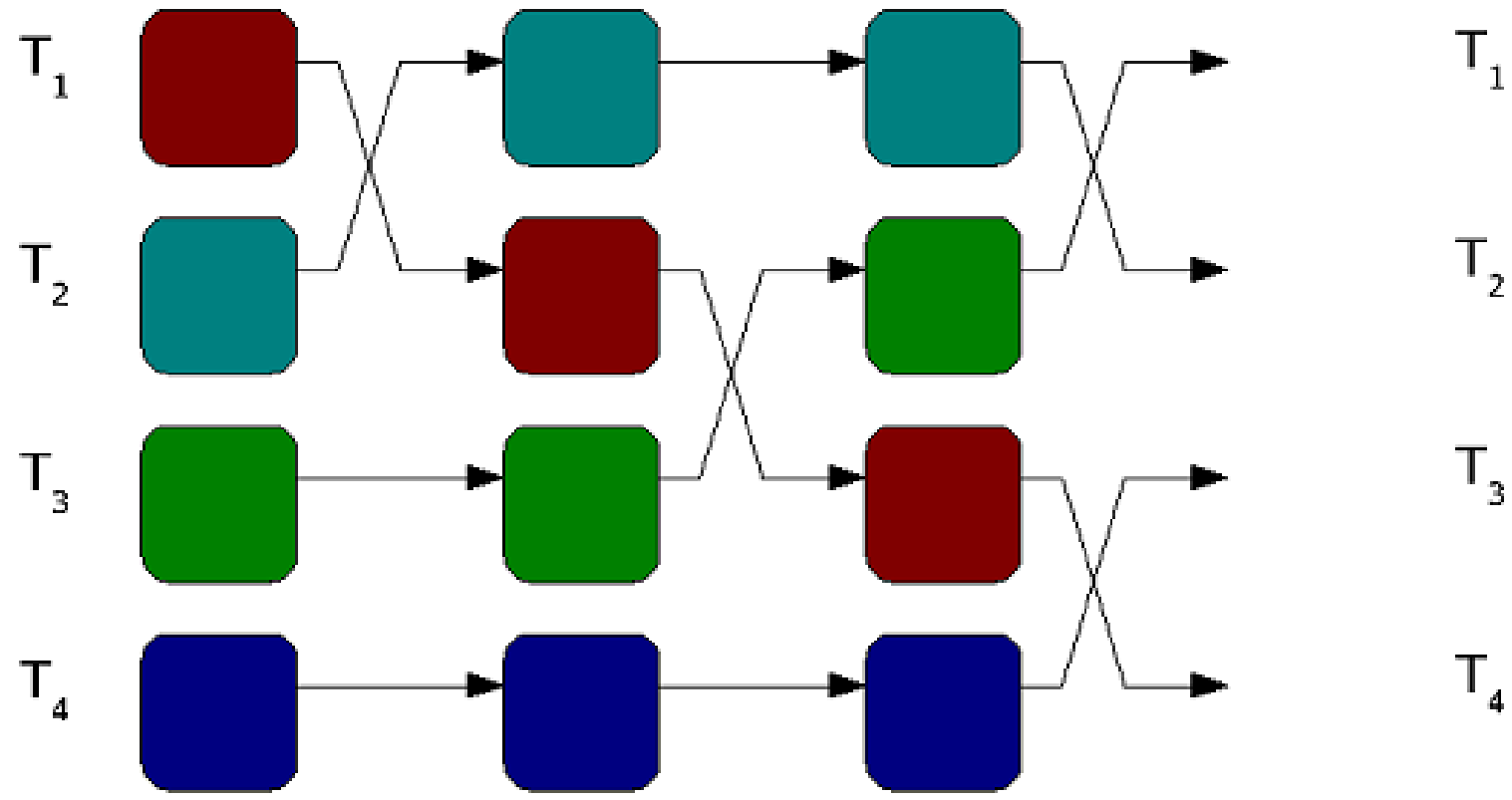
T_1

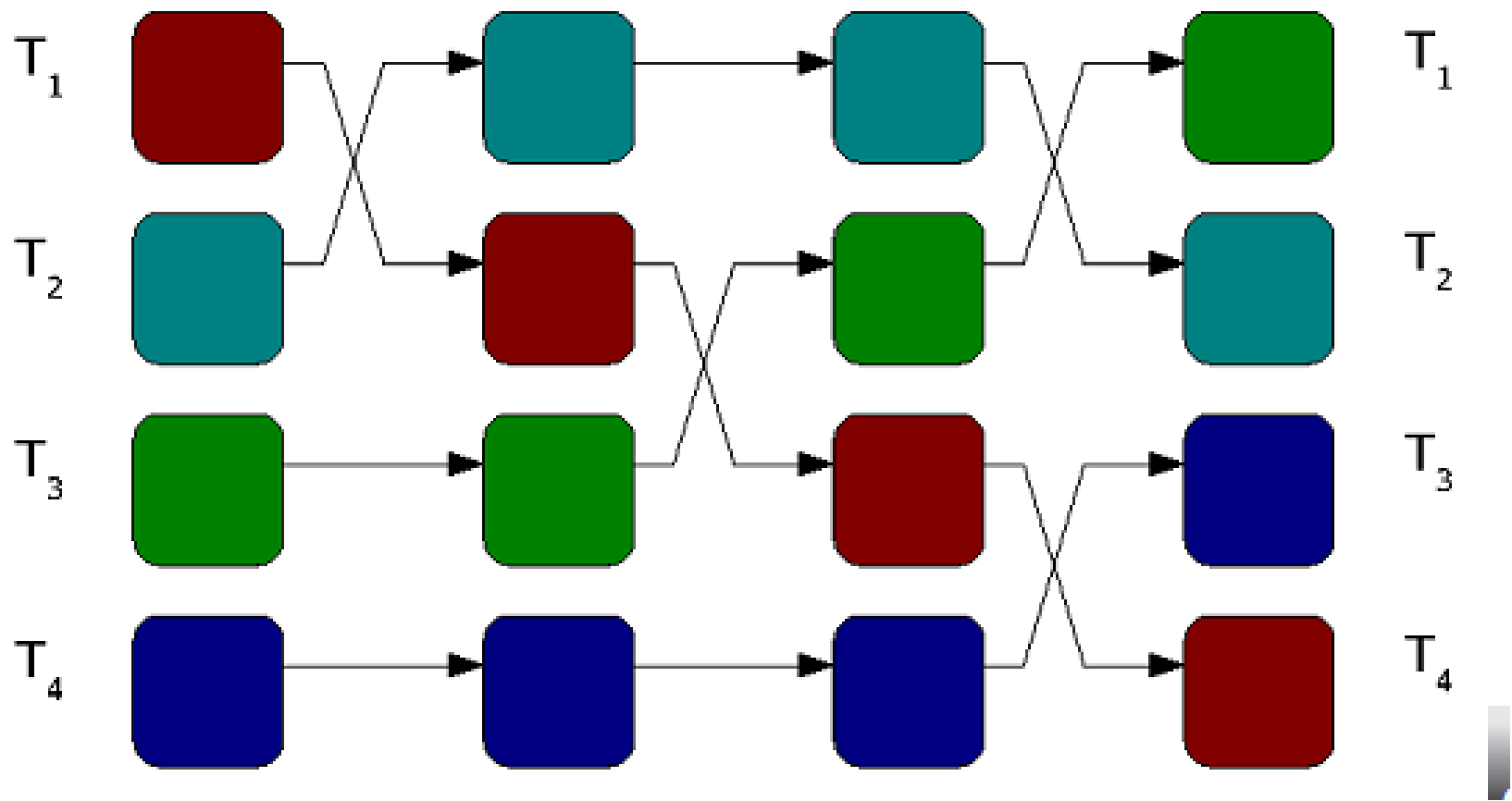
T_2

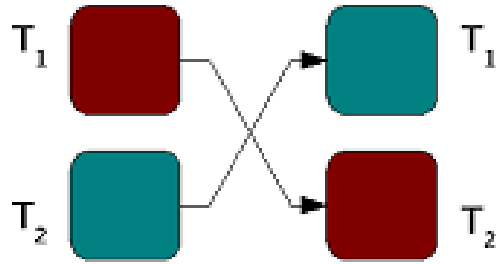
T_3

T_4





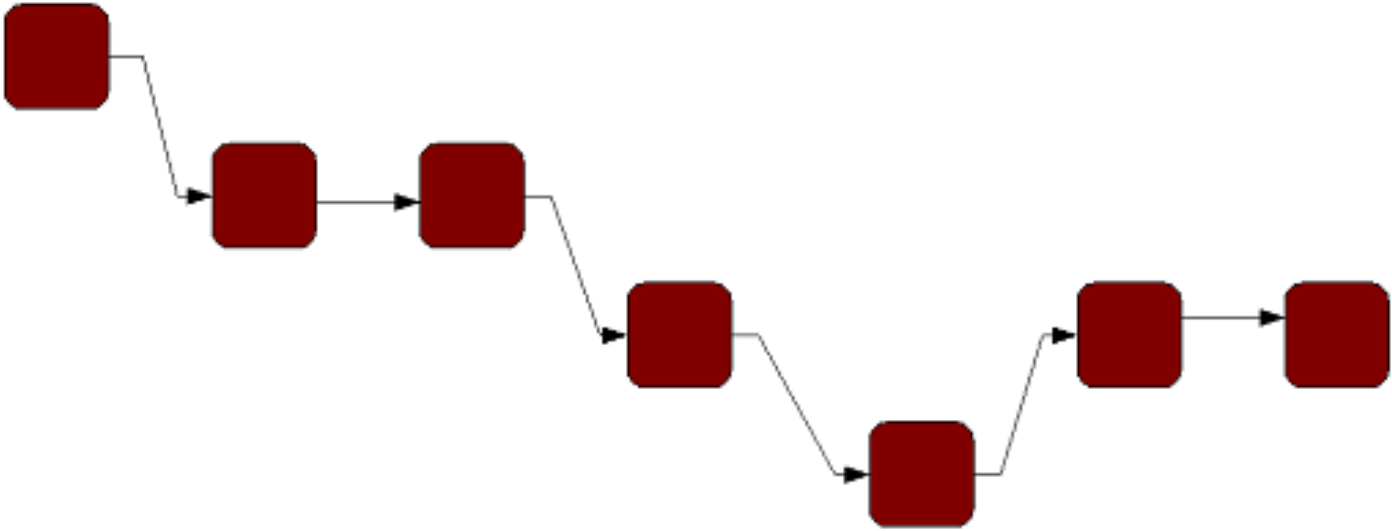




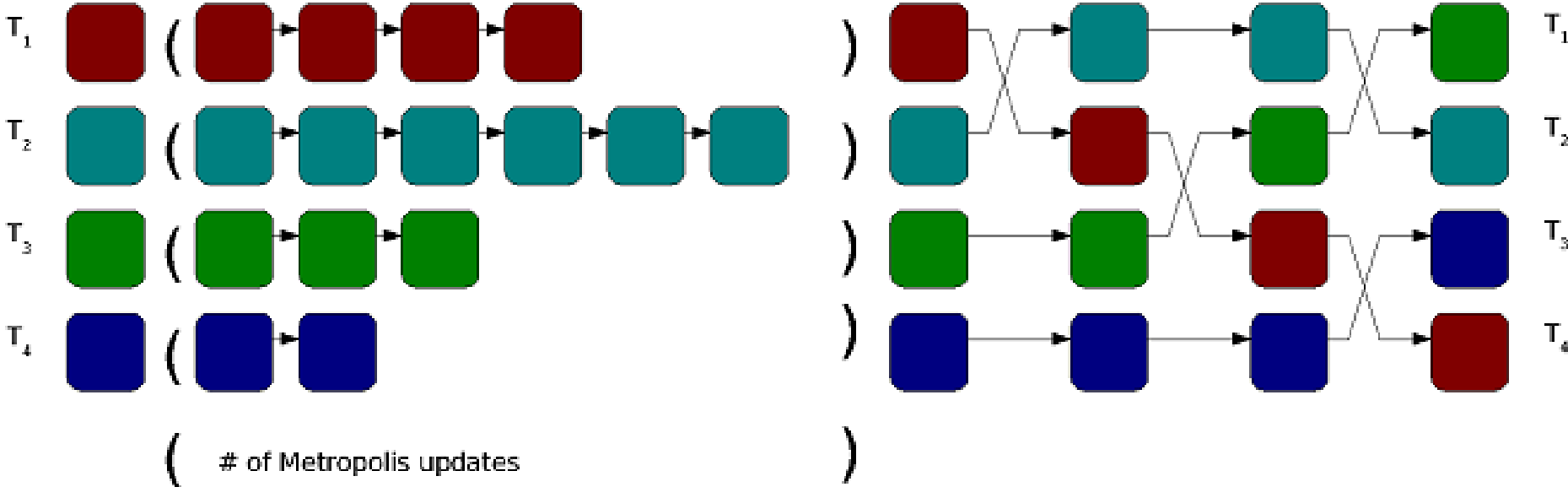
$$P_{\text{PT}}(E_1, \beta_1 \rightarrow E_2, \beta_2) = \min[1, \exp(\Delta\beta\Delta E)]$$

$$w(C \rightarrow C') = \min \left(1, \exp \left\{ -\frac{E(C_j)}{k_B T_i} - \frac{E(C_i)}{k_B T_j} + \frac{E(C_i)}{k_B T_i} + \frac{E(C_j)}{k_B T_j} \right\} \right)$$

Bir kopyanın simülasyon boyunca izlediği yola bakacak olursak



Metropolis ile karşılaştıracak olursak,



Bu algoritmayı kullanmak için nedenler:

- Çok efektif
- İmplementasyonu kolay
- Çok az parametre var
- Çok pratik (aynı anda yine farklı T ler için simülasyonu tek seferde yapıyoruz)
- Küçük numerik gider (small computational cost)
- Paralel çalıştırmaya müsait
- Çok geniş uygulama alanı (farklı disiplinlerde)

Enerji Yüzeyinin Döşenmesi (Enerji Landscape Paving)

Bu algoritma fikir olarak yasak enerji tarama (**tabu search**) ve enerji yüzeyi deformasyonu (energy landscape deformation) yaklaşımlarını içerir.

- Konfigürasyonlar zaman-bağımlı ağırlık faktörleri ile taranır.

$$w(E, q, t) = \exp(- (E + f(H(q, t))) / k_B T)$$

- Düşük sıcaklık, simülasyonun düşük enerji bölgesinde olmasını sağlar.

$f(H(q, t))$ fonksiyonu yerel minimumlardan kurtulmayı sağlar.

Genellikle, simülasyonlarda $f(H(q, t)) = H(q, t)$ ya da $f(H(q, t)) = H(E, t)$ seçilir.

Temel prensip:

$$w(E, q, t) = \exp(- (E + f(H(q, t))) / k_B T)$$

Enerji yüzeyinin döşenmesi algoritması için zaman serisi

