MONTE CARLO YÖNTEMİ

Birçok problemde analitik çözüm zor!

Son yıllarda bilgisayar teknolojisinin ilerlemesiyle ön plana çıktı.

- Yüksek enerji fizigi
- Katıhal fiziği
- Biyofizikte
- atmosfer çalışmaları
- nükleer fizik
- trafik akışı

En önemli iki tanesi

- Moleküler Dinamik (MD)
- Monte Carlo (MC)

Monte Carlo metotları, rasgele sayılar kullanarak konformasyon uzayını modellemekte kullanılan sayısal tekniklerdir. “Monte Carlo” ismi şans oyunlarına benzerliği yüzünden konulmuştur.

Monte Carlo metodunda, örnekleme işlemini devam ettirmek için zarı tekrar tekrar atarız. Genel olarak Monte Carlo metodu iki basamaktan oluşur:

1. yeni konfigürasyon üretmek üretmek
2. yeni konfigürasyonun kabul edilebilirliğine karar verilmesi

Verilen herhangi bir konfigürayondan sonra “zar atılır”, yani bilgisayar gelecek konfigürasyona karar vermek için rasgele bir sayı seçer. Bir durumdan diğerine geçişin detayları çalışma konusuna göre farklılık göstermektedir.

Yeni bir konfigürasyon oluşturulduktan sonra bunun kabul edilebilirliğine karar verilir. Yeni konfigürasyon reddedilirse, kabul edilir bir konfigürasyon bulunana kadar yukarıdaki işleme tekrar edilmelidir. Eğer kabul edilirse, bulunan konfigürasyon yeni olarak alınır ve işleme kaldığı yerden devam edilir.

Monte Carlo yönteminde değişik algoritmalarin kullanımı sözkonusudur.

Yerel Güncelleme algoritmaları:

- Metropolis
- Heat bath (ısı banyosu)

Genel Güncelleme Algoritmaları

- Cluster Algoritması
- Swendsen-Wang vs.

- Monte Carlo işlemi rasgele sayılarla yürüdüğü için, rasgele sayı üreticinin kalitesi simülasyonlarda önemli bir olgudur.

- Rasgele sayı üreteçleri, [0,1] aralığında düzgün dağıtılmış rasgele sayılar üretirler.

- sayı üretmek için belirli bir algoritma kullanmaktadır ve bu algoritmanın da sonlu bir periyodikliği vardır.

- Yüksek kalitedeki bir algoritma yeterli bir periyodikliğe sahip olmakta ve dağılım gerçekten de rasgele görünmektedir.

- Günümüzde birçok rasgele sayı üretici algoritma vardır, bunlar kullanılmadan önce test edilmelidir.

- 10,000 veya üzeri sayılı basit bir histogram dağılımın düzgün olup olmadığı hakkında fikir verir.

MONTE CARLO

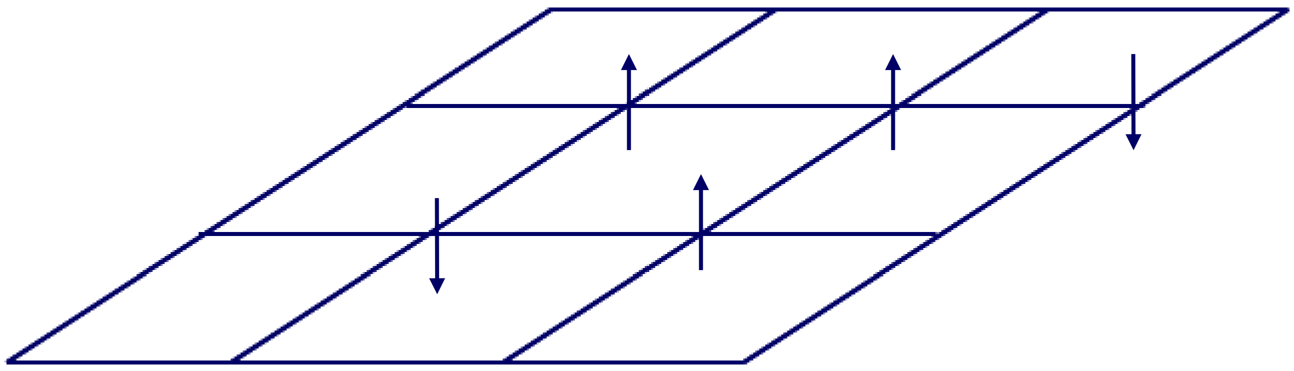
Yöntem bir integrasyon yöntemidir.

Sistemi oluşturan tüm parçacıkların dinamik değişken σ_i 'ler tarafından tanımlandığını düşünelim. $\{\sigma_i\}$ setinin bu sistemdeki dinamik değişkenlerin bir konfigürasyonu olduğu düşünüldüğünde istatistiksel olarak hamiltoniyende $H[\{\sigma_i\}]$ olacaktır. Buna göre herhangi bir A fiziksel niceliğinin beklenen değeri

$$< A >= \frac{\int d\sigma_i \, A\left[\{\sigma_i\}\right] \, \exp\left(-\beta H\left[\{\sigma_i\}\right]\right)}{\int d\sigma_i \, \exp\left(-\beta H\left[\{\sigma_i\}\right]\right)}$$

verilir. Burada $\beta = 1/kT$ ters sıcaklık, T sıcaklık ve k da Boltzmann sabitidir.

Monte Carlo bu çok katlı integrallerin alınmasını sağlayan bir integrasyon yöntemidir. Temel amaç bir fiziksel niceliğin beklenen değerinin basit aritmetik ortalamaya dönüştürülmesidir.



$$\sigma_{\mathrm{i}} = \begin{cases} +1, & \text{spin "up"} \\ -1, & \text{spin "down"} \end{cases}$$

$\{\sigma_i\}$ konfigürasyonu $P[\{\sigma_i\}]$ olasılığı ile alındığında, herhangi bir konfigürasyonun olasılığı

$$P_{eq}\left[\{\sigma_i\}\right] \;\propto\; \frac{\exp\left(\beta H\left[\{\sigma_i\}\right]\right)}{\sum_{\{\sigma_i\}} \exp^{-\beta H[\{\sigma_i\}]}}$$

A niceliğinin beklenen değeri :

$$\begin{aligned} < A > \;&=\; \frac{\sum_{\{\sigma_i\}} A\left[\{\sigma_i\}\right]\,\exp^{-\beta H[\{\sigma_i\}]}\, P_{eq}\left[\{\sigma_i\}\right]}{\sum_{\{\sigma_i\}} \exp^{-\beta H[\{\sigma_i\}]}\, P_{eq}\left[\{\sigma_i\}\right]} \\ &\approx\; \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} A\left[\{\sigma_i\}\right]_j \end{aligned}$$

N: sistemin tüm konfigürasyonları arasından önemli örnekleme ile seçilmiş konfigürasyonların sayısı

Monte Carlo adımı: $\{\sigma_i\}_j$ konfigürasyonundan $\{\sigma_i\}_{j+1}$ konfigürasyonuna geçiş, yani dinamik değişkenlerinin herhangi birinin keyfi değiştirilmesi.

Monte Carlo iterasyonu: Bütün dinamik değişkenlerin değiştirilmesi sonucu oluşturulan konfigürasyon elde edildiğinde bir Monte Carlo iterasyonu tamamlanır.

$P_{eq} \quad [\{\sigma_i\}]$ olasılığına sahip konfigürasyonlar önceden bilinemez. Buna karşın oluşturulacak Markov zinciri W geçiş operatörü olmak üzere

$$\ldots \rightarrow^{W} \ \{\sigma_i\} \rightarrow^{W} \ \{\sigma_i'\} \rightarrow^{W} \ \{\sigma_i''\} \rightarrow^{W} \ \ldots$$

$$\sum_{\{\sigma_i'\}} W\left(\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma_i'\}\right) = 1$$

$$P_{eq}[\{\sigma_i\}]\ W\left(\{\sigma_i\} \rightarrow \{\sigma_i'\}\right) = P_{eq}[\{\sigma_i'\}]\ W\left(\{\sigma_i'\} \rightarrow \{\sigma_i\}\right)$$

Bu bağıntılar bize, herhangi bir konfigürasyondan başlandığında $P_{eq}\ [\{\sigma_i\}]$ olasılığı ile tanımlanan konfigürasyonlara iterasyonlar sonucunda ulaşabileceğimizi göstermektedir. Başlangıç konfigürasyonundan $P_{eq}\ [\{\sigma_i\}]$ olasılıklı konfigürasyonlara gelme süresi, Monte Carlo çalışmalarında “Termalizasyon” olarak bilinir. Termalize olmuş bir sistemde herhangi iki konfigürasyon arasındaki geçiş olasılıkları eşitlenmiştir.

Magnetik Materyallerin Modellenmesi:

- Manyetizma ya da elektromagnetizma temel etkileşmelerden biri.

- 1925 de G. E. Uhlenbeck ve S. Goudsmit elektronun spini olduğunu ortaya attılar ve böylelikle elektron küçük bir bar magnet gibi davrandığı kabul edildi.

- Yani magnetik alan altında paralel veya antiparallel

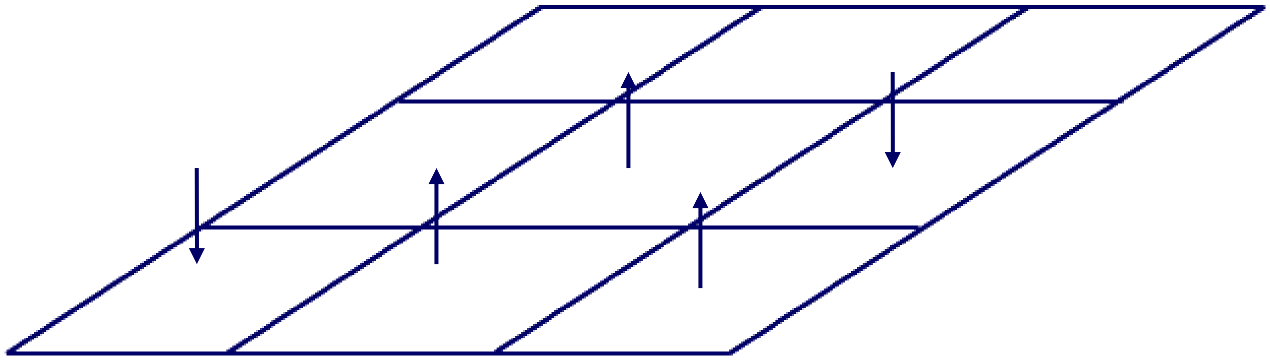
Bu gelişmeler "ISING modeli" ortaya çıkardı.

Spinler “site” dediğimiz örgü noktalarında +1 veya -1 değerlerini alırlar ve etkileşme terimleri $-J\sigma_i\sigma_j$ ile verilir

- Bir S konfigürasyonunun enerjisi

$$H[S] = -J \sum_{<i,j>} \sigma_i \sigma_j$$

J>0 (ferromagnet).



- Aynı değere sahip spinler -J (daha düşük enerji) ile, farklı spinler + J (yüksek enerji) ile etkileşirler.

$\beta = 1/T$ ters sıcaklık ve fiziksel niceliklerin beklenen değerleri

$$\widehat{\mathcal{O}} = \widehat{\mathcal{O}}(\beta) = \langle \mathcal{O} \rangle \quad = \quad Z^{-1} \sum_{k=1}^{K} \mathcal{O}^{(k)} \, e^{-\beta \, E^{(k)}}$$

$$\text{where} \quad Z \; = \; Z(\beta) \quad = \quad \sum_{k=1}^{K} e^{-\beta \, E^{(k)}}$$

Internal energy per site:

$$e = E/V, \quad E = -d \ln Z_I / d\beta \equiv \langle H_I \rangle$$

Specific heat:

$$C/k_B = \frac{\mathrm{d}e}{\mathrm{d}(k_B T)} = \beta^2 \left(\langle H_I^2 \rangle - \langle H_I \rangle^2 \right) / V$$

Magnetization:

$$m = M/V = \langle |\mu| \rangle \ , \qquad \mu = \sum_i \sigma_i / V$$

Susceptibility:

$$\begin{aligned} \chi &= \beta V \left(\langle \mu^2 \rangle - \langle |\mu| \rangle^2 \right) \\ \chi' &= \beta V \langle \mu^2 \rangle \qquad (T \geq T_c) \end{aligned}$$

Correlation function ($\vec{x} = \vec{x}_i - \vec{x}_j$):

$$G(\vec{x}_i - \vec{x}_j) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle \sim \exp(-|\vec{x}|/\xi) \qquad \text{for large } |\vec{x}|$$

Magnetik malzemeler sıcaklıkla değişen özellikler gösterirler. Yüksek sıcaklıkta magnetizasyon ortadan kalkar.

Sıcaklık belli bir değere düşürüldüğünde kendiliğinden magnetizasyon ortaya çıkar. Bu sıcaklık “kritik sıcaklık” veya “Curie Sıcaklığı” olarak bilinir.

2 boyutlu Ising model için

$$\beta_c = \frac{1}{T_c} = \frac{1}{2}\ln(1+\sqrt{2}) = 0.4406867935...$$

$$\begin{aligned} m &\propto L^{-\beta/\nu} + \ldots \ , \\ \chi &\propto L^{+\gamma/\nu} + \ldots \ , \\ C &= C_{\mathrm{reg}} + aL^{+\alpha/\nu} + \ldots \ . \end{aligned}$$

Örgü Geometrileri:

Kare örgü (2 boyutta)

```
 |  |  |  |  |
-O--O--O--O--O-
 |  |  |  |  |
-O--O--O--O--O-
 |  |  |  |  |
-O--O--O--O--O-
 |  |  |  |  |
```

3 boyutta "cubic" lattice, ve 4- ve üzeri boyutlarda "hypercubic" örgü.

"honeycomb" lattice:

```
  -O---O      O---O-
  /     \     /     \
-O       O---O       O-
  \     /     \     /
   O---O       O---O
  /     \     /     \
-O       O---O       O-
```

"triangular" örgü:

```
 -O---O---O---O---O-
 / \ / \ / \ / \ / \
-O---O---O---O---O---O-
 \ / \ / \ / \ / \ /
 -O---O---O---O---O-
 / \ / \ / \ / \ / \

-O---O---O---O---O---O-
```

3-boyutlu örgü "diamond lattice" olarak bilinir.

Farklı örgüler ve boyutlara göre koordinasyon sayıları:

Dimensionality	Name	Coordination number
2	honeycomb	3
2	square	4
2	triangular	6
3	diamond	4
3	cubic	6
3	tetrahedral	12
4	hypercubic	8