

DİFÜZYONUN İKİ BOYUTLU UZAYDA
CELLULAR AUTOMATON İLE İNCELENMESİ

ŞEREF TURHAN

DOKTORA TEZİ
(FİZİK)



GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

(Temmuz 1997)
ANKARA

Şeref TURHAN tarafından hazırlanan DİFÜZYONUN İKİ BOYUTLU
UZAYDA CELLULAR AUTOMATON İLE İNCELENMESİ adlı bu tezin
Doktora tezi olarak uygun olduğunu onaylarım

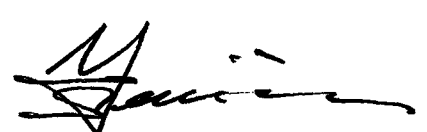

Prof. Dr. Nevzat Aktekin
Tez Yöneticisi

Bu çalışma, jürimiz tarafından FİZİK Anabilim Dalında
..... DOKTORA tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan : Prof. Dr. H. Önder Pamuk 

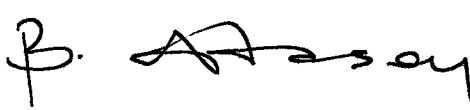
Üye : Prof. Dr. Nevzat Aktekin 

Üye : Prof. Dr. ALİ GÖKMEN Ali Gökmön

Üye : Prof. Dr. Yigit GÜNDÜŞ 

Üye : Prof. Dr. Ramazan Seve R. Seve

Bu tez, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü tez yazım kurallarına
uygundur.



İÇİNDEKİLER

	<i>Sayfa</i>
ÖZET.....	i
ABSTRACT.....	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ.....	iv
ŞEKİLLERİN LİSTESİ.....	v
1. GİRİŞ.....	1
2. DİFÜZYON TEORİSİ	
2.1. Difüzyon İçin Diferansiyel Denklemin Çıkarılması.....	3
2.2. Difüzyon Denkleminin Analitik Çözümü.....	5
2.2.1. Sonsuz Zaman Limitinde Genel Çözüm.....	8
2.2.2. Tuzanın Sonsuzda Olduğu Durumda veya Küçük Zaman Adımlarında Genel Çözüm.....	8
2.2.3. Difüzyon Dinamiği.....	10
2.3. Difüzyon Cephesi	11
2.3.1. Difüzyon Cephesinin Fraktal Boyutu D_f	14
2.3.2. Difüzyon Cephesi ile İlgili Üsler, α_N ve α_σ	15
2.3.3. Cephe Yakınındaki Yoğunluk Verilerinden Perkolasyon Kritik Üsleri ν ve β nın Hesaplanması.....	17

3.	PERKOLASYON TEORİSİ	
3.1.	Perkolasyon İçin Kritik Üsler.....	22
3. 2.	Sonsuz Kümenin ve Çevresinin Fraktal Boyutu.....	24
4.	CELLULAR AUTOMATON VE MATEMATİK YAPISI	
4.1.	Bir Boyutlu Uzayda Cellular Automaton.....	27
4.2.	İki Boyutlu Uzayda Cellular Automaton.....	31
5.	DİFÜZYON MODELLERİ	
5.1.	Bu Çalışma İçin Difüzyon Modeli: Chopard-Droz-Kolb Cellular Automatonı-I.....	34
5.2.	Diğer Difüzyon Modelleri.....	42
5.2.1.	Rasgele Yürüyüş.....	42
5.2.2	Örgü Gazı.....	43
5.2.3.	Chopard-Droz-Kolb Cellular Automatonı-II.....	44
6.	BULGULAR VE TARTIŞMA	
6.1.	Kararlı Durumda Yoğunluk Fonksiyonu.....	48
6.2.	Tuzağın Sonsuzda Olduğu Durumda veya Küçük Zaman Adımlarında Yoğunluk Fonksiyonu.....	51
6.3.	Difüzyon Cephesinin Fraktal Boyutunun Hesaplanması.....	54
6.4.	Sonsuz Kümenin Fraktal Boyutunun Hesaplanması.....	56
6.5.	Difüzyon Cephesi ile İlgili α_N ve α_σ Üslerinin Hesaplanması.....	57
6.6.	Perkolasyon Kritik Üsleri ν ve β nın Hesaplanması.....	58
6.7.	Difüzyon Sabiti D nin Hesaplanması.....	60
7.	SONUÇLAR.....	62

KAYNAKLAR.....	63
EK1	67
EK2	68
ÖZGEÇMİŞ	88



DİFÜZYONUN İKİ BOYUTLU UZAYDA CELLULAR AUTOMATON İLE İNCELENMESİ

(Doktora Tezi)

Şeref TURHAN
GAZİ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
Temmuz 1997

ÖZET

Chopard-Droz-Kolb cellular automatonı diğer simülasyon yöntemlerine karşı hız üstünlüğüne sahiptir. Ancak, bu cellular automatonunda iki boyutlu uzay için sadece birkaç nicelik, sonsuz örgüyü temsil etmek üzere bir tane örgü üzerinde, hesaplanmaktadır. Diğer simülasyon yöntemlerinin yerine kullanılıp kullanılamayacağına karar verilebilmesi için, değerleri iyi bilinen niceliklerin tümüne karşı denenmesi gerekmektedir. Çünkü bu cellular automatonın dayandığı kuraldan yola çıkılarak ulaşılan diferansiyel denklem, difüzyon denklemine ek bir terim içermekte, ve bu terimin hangi niceliğin değerine ne kadar katkı getireceği önceden bilinmemektedir. Simülasyonlar, cephe oluşturan difüzyon için, iki boyutlu uzayda ve kare gözlü örgüde, difüzyon doğrultusuna dik örgü kenarı ve kaynak ile tuzak arasındaki uzaklık sistemli biçimde değiştirilerek, yapılmaktadır. Simülasyon sonucunda hesaplanan nicelikler şunlardır: Perkolasyon eşiği, dinamik üs, “sonsuz” küme ve difüzyon cephesinin fraktal boyutları, difüzyon cephesi ile ilgili α_N ve α_σ üsleri, perkolasyon teorisindeki ν ve β kritik üsleri ve difüzyon sabiti. Bu değerlerin tümü, mevcut simülasyon, perkolasyon teorisi ve analitik çözüm sonuçları ile uyum içindedir. Buna göre Chopard-Droz-Kolb cellular automatonı diğer difüzyon simülasyon yöntemleri yerine kullanılabilir.

Bilim Kodu : 404.01.01
Anahtar Kelimeler : cellular automaton, perkolasyon teorisi, difüzyon
cephesi, fraktal boyut, sonsuz küme, kritik üs
Sayfa Adedi : 88
Tez Yöneticisi : Prof. Dr. Nevzat Aktekin

STUDY OF DIFFUSION ON A CELLULAR AUTOMATON IN TWO DIMENSIONAL SPACE

(Ph. D. Thesis)

Şeref TURHAN
GAZİ UNIVERSITY
INSTITUTE OF SCIENCE AND TECHNOLOGY
July 1997

ABSTRACT

The cellular automaton developed by Chopard, Droz, and Kolb is faster than the conventional diffusion models. However the simulations with this cellular automaton in the two dimensional space are limited to the computation of a few quantities on a finite-size lattice which approximates the infinite lattice. In order to decide if this cellular automaton can be used as an alternative method in the simulation of diffusion, it must be tested against all the quantities the values of which are well-known. This is necessary because the rule of this cellular automaton leads to a differential equation that includes an extra term in the diffusion equation, the effect of which on various quantities can not be known a priori. Simulations are carried out for non-equilibrium diffusion on two dimensional square lattices, by varying the sides of the lattice systematically. The quantities computed and tested for their well-known values are the following: percolation threshold, dynamical exponent, fractal dimensions for the “infinite” lattice and the diffusion front, the exponents α_N and α_σ related to diffusion front, the critical exponents ν and β in the percolation theory, and diffusion constant. All these values are in agreement with those given by the other simulation methods, the percolation theory and the analytical solution. This implies that the Chopard-Droz-Kolb cellular automaton can be used as an alternative to the conventional simulation methods for diffusion.

Science Code : 404.01.01

Key Words : cellular automaton, percolation theory, diffusion front,
fractal dimension, infinite cluster, critical exponents

Number of pages : 88

Supervisor : Prof. Dr. Nevzat Aktekin

TEŞEKKÜR

Bu çalışmayı yürütebilmem için değerli yardımlarını esirgemeyen tez yöneticim Sayın Prof. Dr. Nevzat Aktekin 'e ve araştırma gurubumuzdan Mahmut Eken 'e teşekkür ederim. Eleştiri ve önerileri ile tezin olgunlaşmasına katkılarından dolayı Sayın Jüri Üyelerine, bilgisayar imkanlarından yararlandırıdıklarından dolayı Ortadoğu Teknik Üniversitesi Bilgi İşlem Merkezi'ne , Türkiye Atom Enerjisi Kurumu bilgisayar imkanlarından yararlanabilmemi sağladığından dolayı Sayın Dr. Ediz Tanker'e teşekkür ederim. Ayrıca, çalışmalarım süresince gösterdiği sabır ve yardımlarından dolayı da eşim Zehra ve oğlum Ahmet Kemal 'e teşekkür ederim.



ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	Sayfa
Çizelge 3.1. İki ve üç boyutlu uzayda değişik örgü tipleri için perkolasyon eşik değerleri (z , Cayley Ağacının bir noktasından çıkan dal sayısı).....	22
Çizelge 3.2. Perkolasyon ve kendiliğinden mıknatıslanmanın iki ve daha yüksek boyutlu uzaylardaki kritik üs değerleri	25
Çizelge 6.1 Farklı büyüklükteki örgüler için perkolasyon eşiği, p_c , ve dinamik üs için $1/\zeta$ değerleri.....	46
Çizelge 6.2. Farklı büyüklükteki örgüler için difüzyon sabiti, D , değerleri.....	61

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil	Sayfa
Şekil 1.1. Difüzyon için diferansiyel denklemi elde etmede kullanılan hacim elemanı.....	3
Şekil 2.1. Üçgen örgüde iki metal atomunun birbirine difüzyonu. Dolu daireler A atomlarını, boş daireler B atomlarını göstermektedir.....	12
Şekil 2.2. Kare örgüde birbiri ile etkileşmeyen taneciklerin difüzyonu. Dolu daireler iletken atomlarını (A), boş daireler yalıtkan atomlarını (B) göstermektedir.....	13
Şekil 3.1. Kare örgüde hücre perkolasyonu. a) $p = 0.5$, b) $p = 0.6$, c) $p=0.8$	21
Şekil 3.2. a) Hücre perkolasyonu ve en yakın dolu hücrelerden oluşan kümeler, b) Bağ perkolasyonu ve bağ kümeleri.....	23
Şekil 3.3. a) Kare örgüde boş hücreler, b)Kare örgüde dolu ve boş hücreler, c) En yakın dolu hücrelerden oluşan kümeler.....	23
Şekil 3.4. Bir örgü gözünün “sonsuz” kümeye ait olma ihtimaliyeti P_{∞} ve sonlu küme hücrelerinin ortalama sayısı (“kütlesi”) S nin kendiliğinden mıknatıslanmadaki , mıknatıslanma m ve mıknatıslanma alıganlığı χ ile karşılaştırılması.....	26
Şekil 4.1. Bir boyutlu cellular automaton için örgü.....	28
Şekil 4.2. Bir basit cellular automatonunda en yakın komşuların alması mümkün olan değerler.....	28
Şekil 4.3. Kural 150 ye uyan bir cellular automatonın zaman ile gelişimi.	

Başlangıçta tüm örgüde sıfırdan farklı a) tek bir hücre var ; b) iki veya daha fazla hücre var.....	30
Şekil 4.4. İki boyutlu uzayda ve bir kare örgüde bir gözün, kendisi dahil, en yakın beş komşusu.....	31
Şekil 4.5. Eşitlik 4.7 de verilen kurala göre gelişen cellular automatonun $n=0,1,2,...,9$ adımlarındaki halleri.(Başlangıç hali : $x_{0,j}^0 = -1$ ($0 \leq j < \infty$), $x_{1,j}^0 = +1$ ($0 \leq j < \infty$), ve $x_{i,j}^0 = 0$ (diğer durumlar)).....	33
Şekil 5.1. Difüzyon cephesi. $z=0$ da yoğunluk $P=1$ (kaynak) ve $z=L_z$ de yoğunluk $P=0$ (tuzak).....	34
Şekil 5.2. Örgünün 2×2 lik Margolus bloklarına ayrılması.....	35
Şekil 5.3. Margolus bloklarının saat yönünde $\pi/2$ radyan döndürülmesi.....	37
Şekil 5.4. Margolus bloklarının saat yönünün tersine $\pi/2$ radyan döndürülmesi.....	38
Şekil 5.5. Rasgele sayı üretici olarak kullanılan HPP (Hardy-Pazzis- Pomeau) modelinde taneciklerin bir Margolus bloğundaki hareketleri.....	39
Şekil 5.6. Bir Margolus bloğunda taneciklerin ve örgü yönlerinin işaretlenmesi.....	40
Şekil 6.1. $L_y \times L_z = 256 \times 512$ örgüsü için $P(z)$, $P_\infty(z)$ ve $P_f(z)$ nin indirgenmiş konum z/L_y ile değişimi. Analitik sonuç (düz çizgi), $P_\infty(z)$ (*), $P_f(z)$ (+) ve $P(z)$ (noktalı çizgi).....	47
Şekil 6.2 $L_y \times L_z = 64 \times 64$ örgüsü için kararlı yoğunluk fonksiyonunun örnek sayısına göre davranışı.....	48

- Şekil 6.3. Farklı büyüklükte örgüler için kararlı yoğunluk fonksiyonu. a) 16x16, b) 32x32, c) 64x64, d) 128x128 , e) 256x256. Düz çizgi analitik sonucu göstermektedir.....51
- Şekil 6.4. Farklı büyüklükte örgüler için küçük zaman adımlarında yoğunluk fonksiyonu. a) 16x16, b) 32x32, c) 64x64, d) 128x128 , e) 256x256. Düz çizgi analitik sonucu göstermektedir.....54
- Şekil 6.5. $L_y \times L_z = 256 \times 512$ örgüsü için N_f nin σ_f ye karşı log-log grafiği. Grafiğe uydurulan doğrunun eğiminden difüzyon cephesinin fraktal boyutu elde edilmektedir.....55
- Şekil 6.6. Difüzyonda oluşan sonsuz kümeye ait nokta sayısı M_∞ un örgünün doğrusal boyutu L_y ye karşı log-log grafiği. Fraktal boyut için $D=1.92 \pm 0.02$ değeri elde edilmiştir.....56
- Şekil 6.7. $L_y \times L_z = 256 \times 512$ örgüsü için difüzyon cephesi uzunluğu N_f nin difüzyon uzunluğu ℓ_d ye göre log-log grafiği. Grafiğe uydurulan doğrunun eğimi α_N yi vermektedir.....57
- Şekil 6.8. $L_y \times L_z = 256 \times 512$ örgüsü için difüzyon cephesi σ_f nin difüzyon uzunluğu ℓ_d ye göre log-log grafiği. Grafiğe uydurulan doğrunun eğimi α_σ yi vermektedir.....58
- Şekil 6.9. $L_y \times L_z = 256 \times 512$ örgüsü için $P_\infty(z)$ nun $(P(z) - p_c)$ ye göre log-log grafiği. Grafiğe uydurulan doğrunun eğimi kritik üs β yi vermektedir.....59
- Şekil 6.10. Ortalama mesafenin zaman adımına göre log-log grafiği. Grafiğe uydurulan doğrunun eğimi dinamik üs için $1/\zeta$ değerini, doğrunun $\bar{z}$ eksenini kestiği noktanın anti logaritması difüzyon sabitini vermektedir.....60

BÖLÜM I

GİRİŞ

Pekçok fiziksel ve kimyasal olayda rol oynayan difüzyon, genel olarak, sistemi oluşturan taneciklerin rasgele hareketler yaparak sistemin bir bölgesinden başka bir bölgesine taşınması olarak tanımlanabilir. Bu tanecikler, atom, iyon, molekül, elektron, "hole", kolloid, vb. olabilirler ve taşınmaları sırasında birbirlerini çeker veya itebilirler, ya da aynı noktada bulunmamak şartı ile etkileşmeyebilirler. Bu taneciklerarası etkileşmelerin ortalaması çoğunlukla bir difüzyon cephesi oluşumuna yol açar. Bazı örnekler şunlardır: Belousov-Zhabotinsky sıvısı [1], betona CO₂ girip karbonatlaşmaya yol açması [2], bir tanecikler sisteminin dengeye ulaşmamış difüzyonu[3-11], temas halinde iki katı arasında arayüzey oluşumu[12]. Bu olayların görünür boyuttaki özellikleri ya genel bir tepkime-difüzyon denklemi, ya da genel bir difüzyon denklemi ile incelenebilir.

Difüzyon denklemlerinin analitik çözümleri ancak bazı sınır şartları için mümkün olabildiğinden[13], difüzyon problemlerinin uygun modeller ile simülasyonunu yaparak incelemek daha elverişlidir. Difüzyon için uygulanan bütün simülasyon yöntemlerinde[3-11,14] taneciklerin düzgün bir örgüde hareket ettikleri kabul edilmektedir. Yöntemler arasındaki temel farklılıkları, taneciklerin hareketleri için konulan kurallar oluşturmaktadır. Yaygın olarak kullanılan simülasyon yöntemlerinden bazıları şunlardır: Rasgele yürüyüş[14], Örgü gazı[3-7] ve Cellular automatonlar[8-10].

Ancak simülasyon yöntemlerinin geçerliliğinin denenmesi için, difüzyon denklemlerinin analitik çözümlerinin var olduğu problemler önem taşımaktadır. Dengeye ulaşmamış difüzyon için Fick'in ikinci kanununun, difüzyon doğrultusunda bir kaynak, bir de tuzak sınır şartları için analitik çözümleri mevcuttur ve simülasyon yöntemlerinin denenmesine imkân vermektedir.

Bundan dolayı simülasyon yöntemleri çoğunlukla dengeye ulaşmamış difüzyon problemi için geliştirilmekte olup, bu tür difüzyon sonucunda cephe oluştuğundan, incelenmesi, cephe özelliklerinin aydınlatılmasını da mümkün kılmaktadır.

Sapoval ve arkadaşları kare, üçgen, ve küp gözlü örgülerde cephe kavramını tanımlayarak [3,4,6] cephenin pekçok özelliklerini ortaya çıkarmışlardır (fraktal cisim, fraktal boyut, perkolasyondaki sonsuz kümenin çevresi ile aynı özellikleri taşıması, vb.). Buna göre, simülasyon yöntemlerinin denenmesi için difüzyon cephesinin bilinen özellikleri de bağımsız ölçüler oluşturur. Difüzyonun, cellular automatonlar dışında kalan yöntemler[3,4,6,14] ile simülasyonu, aşırı ölçüde bilgisayar zamanı gerektirdiğinden dolayı, daha hızlı algoritmalar araştırılmakta ve geliştirilmektedir[8-11]. Cellular automatonlar ile simülasyon diğer simülasyon yöntemlerinden daha hızlıdır. Ancak, cellular automaton kuralları difüzyon denklemlerinde ilave terimler vermektedir. Bu terimlerin simülasyon sonuçlarına etkilerinin önceden bilinmesi mümkün olmayıp, ancak "bilgisayar deneyleri" ile farklı niceliklere ne ölçüde etki yaptığı anlaşılabilir.

Bu çalışmada Chopard-Droz-Kolb tarafından ortaya konulan cellular automaton[8] ile iki boyutlu uzayda dengeye ulaşmamış difüzyonun simülasyonu yapılmakta ve önceden hesaplanmış niceliklerin[8] hassasiyeti arttırıldığı gibi, bunlara ilave olarak, kıyaslamak için sayısal değeri bulunan başka niceliklerin [3] hesabı da yapılmaktadır.

Bölüm 2 de Difüzyon teorisi, Bölüm 3 de Perkolasyon Teorisi, Bölüm 4 de Cellular Automaton ve Matematik Yapısı açıklanmakta, Bölüm 5 de Difüzyon Modelleri, Bölüm 6 da Bulgular ve Tartışma, Bölüm 7 de Sonuçlar verilmektedir.

BÖLÜM 2

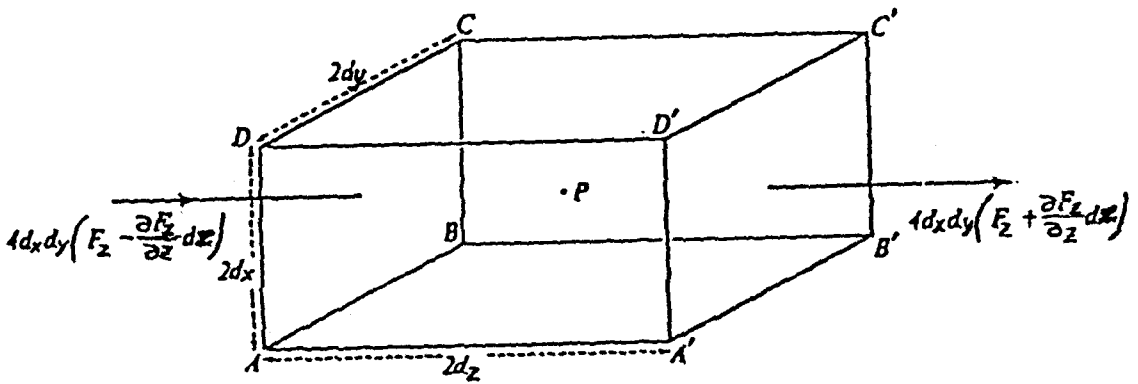
DİFÜZYON TEORİSİ

2.1 Difüzyon İçin Diferansiyel Denklemin Çıkarılması

İzotropik maddede difüzyon için diferansiyel denklem, ilerleme doğrultusuna (z) dik olarak birim alandan geçen maddenin taşınma hızı (F_z) ile, ilerleme doğrultusundaki yoğunluk değişimi ($\partial C / \partial z$) arasında

$$F_z = -D \frac{\partial C}{\partial z} \quad (1.1)$$

bağıntısının bulunduğu varsayımına dayanmaktadır. Burada D difüzyon parametresi olup, bu eşitlik Fick'in I. kanunu olarak bilinmektedir. Kenarları $2dx$, $2dy$, $2dz$ uzunluğunda olan dikdörtgenler prizması şeklinde bir hacim elemanı gözönüne alalım (Şekil 1.1). Hacim elemanının merkezi $P(x,y,z)$,



Şekil 1.1 Difüzyon için diferansiyel denklemi elde etmede kullanılan hacim elemanı[13]

buraya taşınan maddenin yoğunluğu ise C olsun. ABCD ve A'B'C'D' dikdörtgenlerini z -eksenine dik yüzeyler olarak alalım. ABCD yüzeyine dik olarak taşınan maddenin taşınma miktarı,

$$4dx dy \left(F_z - \frac{\partial F_z}{\partial z} dz \right) \quad (2.2)$$

olur. Burada F_z birim alana dik olan taşınma hızıdır. Benzer şekilde A'B'C'D' yüzeyine dik olarak taşınan maddenin kayıp miktarı,

$$4dx dy \left(F_z + \frac{\partial F_z}{\partial z} dz \right) \quad (2.3)$$

olur. Bu iki yüzeyden dolayı hacim elemanındaki madde miktarının artışına gelen katkı,

$$-8dx dy dz \frac{\partial F_z}{\partial z} \quad (2.4)$$

olur. Benzer şekilde diğer yüzeylerden gelen katkılar,

$$-8dx dy dz \frac{\partial F_y}{\partial y} \quad (2.5)$$

ve

$$-8dx dy dz \frac{\partial F_x}{\partial x} \quad (2.6)$$

olarak elde edilir. Diğer taraftan hacim elemanındaki madde miktarının zaman, t , ile artışı,

$$-8dx dy dz \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.7)$$

olur. Eşitlik (2.4), (2.5) , (2.6) ve (2.7) birleştirildiğinde,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} = 0 \quad (2.8)$$

elde edilir. F_x , F_y , F_z terimlerinin yerine Eşitlik (2.1) deki ifade kullanılırsa,

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (2.9)$$

veya

$$\frac{\partial C(\vec{r}, t)}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot [D(\vec{r}, C) \vec{\nabla} C(\vec{r}, t)] \quad (2.10)$$

bulunur. Bu diferansiyel eşitlik Fick'in II. kanunu olarak bilinmektedir. Genel halde difüzyon parametresi D , difüzyon uzayında bir noktanın konum vektörü $\vec{r}$ ye ve taşınan maddenin yoğunluğu C ye bağlı olabilir.

2.2 Difüzyon Denkleminin Analitik Çözümü

Difüzyon parametresi D nin sabit olduğu durumda Eşitlik 2.10,

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C \quad (2.11)$$

şekline indirgenir. Bu eşitliğin bir yönde difüzyon için analitik çözümleri elde edilebilmektedir. Tanecikler sistemi y yönünde homojen ise ve tanecikler z

yönünde ilerliyor iseler, $P(\vec{r}, t)$ ($P \equiv C$) sadece z ve t nin fonksiyonu olur ve Eşitlik 2.11,

$$\frac{\partial P(z, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P(z, t)}{\partial z^2} \quad (2.12)$$

şeklinde yazılabilir. Difüzyon parametresi D , konumdan ve yoğunluktan bağımsız kabul edildiği için, bu denklem doğrusal ve homojendir. Bu kısmi diferansiyel denklem, değişkenlerine ayırma yöntemi ile çözülebilir ve herhangi bir çözüm, $P(z, t)$,

$$P_m(z, t) = Z_m(z)T_m(t) \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (2.13)$$

tipindeki bütün çözümlerin doğrusal bileşimi olarak elde edilebilir. Bu tip çözüm Eşitlik 2.12 de yerine yazılır, ve her iki taraf $Z(z)T(t)$ ile bölünürse

$$\frac{1}{D} \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} = \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} \quad (2.14)$$

eşitliği elde edilir. Bu eşitlik z ve t nin bütün değerleri için geçerli olduğundan eşitliğin her iki tarafı aynı sabite eşit olur. Bu durumda

$$\frac{1}{D} \frac{1}{T} \frac{dT}{dt} = -\lambda^2 \quad (2.15)$$

ve

$$\frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -\lambda^2 \quad (2.16)$$

adi diferansiyel denklemleri elde edilir; $-\lambda^2$ deęişken ayırma sabitidir. Eşitlik 2.15 in çözümü,

$$T_m(t) = e^{-\lambda_m^2 Dt} \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (2.17)$$

Eşitlik 2.16 nın çözümü ise

$$Z_m(t) = A_m \sin \lambda_m z + B_m \cos \lambda_m z \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (2.18)$$

dir. Eşitlik 2.12 nin genel çözümü de

$$P(z, t) = \sum_{m=1}^{\infty} (A_m \sin \lambda_m z + B_m \cos \lambda_m z) e^{-\lambda_m^2 Dt} \quad (2.19)$$

olur. A_m , B_m ve λ_m bilinmeyen sabitler olup problemin sınır şartları kullanılarak belirlenir. Eğer sınır şartları aşağıdaki gibi alınır ise,

$$\begin{array}{lll} P = 1 & z = 0 & t = 0 \\ P = 0 & z > 0 & t = 0 \\ P \neq 0 & z > 0 & t > 0 \end{array} \quad (2.20)$$

genel çözüm için

$$P(z, t) = \frac{L_z - z}{z} - \frac{2}{\pi} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m} \sin\left(m\pi \frac{z}{L_z}\right) \exp\left(-m^2 \pi^2 \frac{tD}{L_z^2}\right) \quad (2.21)$$

ifadesi elde edilir.

2.2.1 Sonsuz Zaman Limitinde Genel Çözüm

Eşitlik 2.21 ile verilen genel çözüm zamanın sonsuza gittiği ($t \rightarrow \infty$) durumda,

$$P(z) = \frac{L_z - z}{z} \quad (2.22)$$

ile ifade edilen doğrusal eşitlik haline gelir. Bu çözüm sistemin kararlı yoğunluk durumuna (stationary density profile) karşılık gelir. Kaynak ($z = 0$) ile tuzak ($z = L_z$) arasında taşınan tanecikler belli bir zaman adımından sonra kararlı duruma ulaşırlar ve taneciklerin yoğunluğu sabitleşir. Bu zaman adımı yaklaşık olarak $t \rightarrow \infty$ limitine karşılık gelir ve bu zaman adımından sonra her bir z konumundaki tanecik yoğunluğu,

$$P(z) = \frac{1}{L_y} \langle \sum n(y, z) \rangle \quad (2.23)$$

küçük dalgalanmalar ihmal edilirse, sabit kalır. Burada L_y örgünün difüzyon doğrultusuna dik kenarının uzunluğudur. n ise (y, z) noktasındaki taneciğin var olduğunu ($n=1$) veya olmadığını ($n=0$) belirler.

2.2.2 Tuzağın sonsuzda olduğu durumda veya küçük zaman adımlarında genel çözüm

Küçük zaman adımlarında, kaynaktan sisteme pompalanan tanecikler tuzağa ulaşamadıkları için, $z = L_z$ deki tuzak sonsuzda imiş gibi kabul edilebilir ve bu durumda Eşitlik 2.21

$$P(z, t) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{z/\sqrt{2Dt}} \exp(-u^2) du \quad (2.24)$$

haline gelir. Çözümün integral kısmı Gauss hata fonksiyonu olup

$$\operatorname{erf}\left(\frac{z}{\sqrt{2Dt}}\right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{z/\sqrt{2Dt}} \exp(-u^2) du \quad (2.25)$$

eşitliği ile, tamamlayıcı Gauss hata fonksiyonu da

$$\operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z) \quad (2.26)$$

eşitliği ile verilmektedir. Çözüm, ortalama konum, $\bar{z}(t)$,

$$\bar{z}(t) = \frac{\int_0^\infty zP(z, t) dz}{\int_0^\infty P(z, t) dz} \quad (2.27)$$

cinsinden,

$$P(z, t) = \operatorname{erfc}\left(\frac{\sqrt{\pi} z}{4\bar{z}(t)}\right) \quad (2.28)$$

olarak ifade edilebilir.

2.2.3 Difüzyon Dinamiği

Difüzyon uzunluğu ,

$$\ell_d = 2\sqrt{Dt} = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \bar{z} \quad (2.29)$$

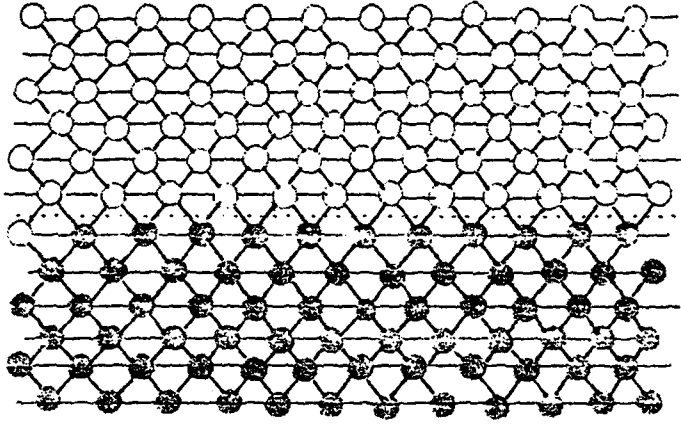
eşitliği ile tanımlanmaktadır. Taneciğin t zaman sonra kaynağa göre aldığı ortalama mesafenin, $\bar{z}$, veya difüzyon uzunluğunun, ℓ_d , zamana bağımlılığı genel bir kuvvet kanunu şeklinde ifade edilebilir[15].

$$\bar{z} = \frac{\sqrt{D\pi}}{2} t^{\frac{1}{\zeta}} \quad \text{veya} \quad \ell_d = 2\sqrt{Dt}^{\frac{1}{\zeta}} \quad (2.30)$$

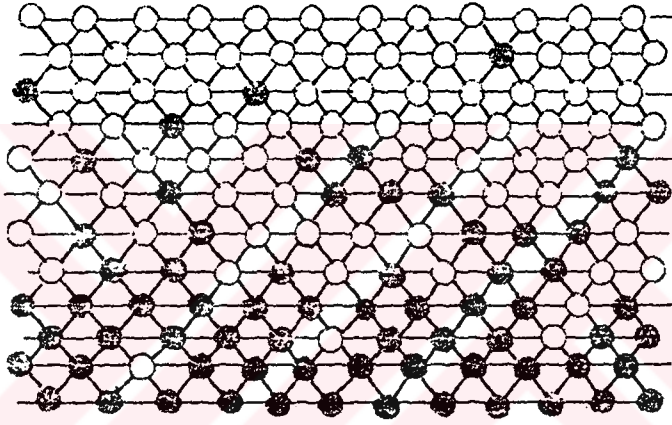
ζ ya dinamik üs denir ve bu çalışmadaki difüzyon tipi için analitik değeri $\zeta = 2$ dir[5]. Bu nicelik, difüzyon modellerinin geçerliliğini denemek için bir ölçü oluşturmaktadır.

2.3 Difüzyon Cephesi

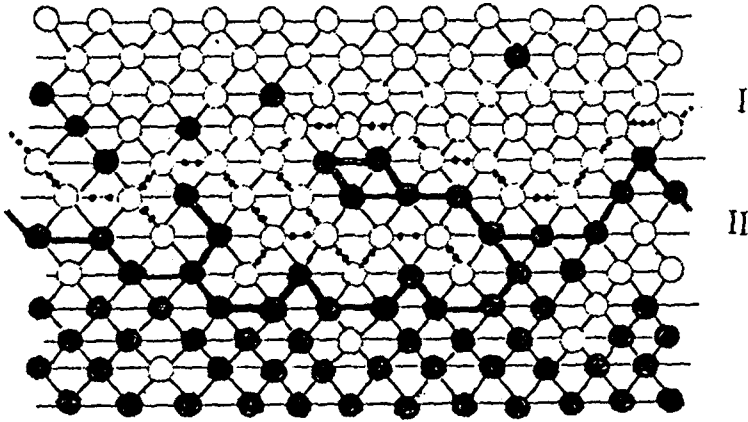
Öneminden dolayı ve özelliklerinin incelenebilmesi için, difüzyon cephesinin geometrik tanımına gerek vardır. Böyle bir tanım ilk defa Sapoval ve arkadaşları [3] tarafından yapılmış, daha sonra cephelerin farklı geometrik tanımları ve özellikleri üzerinde çalışılmıştır[16]. Sapoval ve arkadaşlarının tanımına göre bir cephenin geometrisi, yapısı bilinen iki metalin lehimlenme bölgesi örnek alınarak aşağıda açıklanmaktadır: İki metalden, A yı dolu, B yi ise boş hücreler temsil etsin(Şekil 2.1). Lehimlenmeden önce, arayüzey belirli olup iki metali ayıran düzlemdir. Sıcaklık arttırıldıkça atomların hareketliliği artar ve A atomları B ye, B atomları da A ya rasgele tarzda taşınırlar. Bir süre sonra arayüzeyin yapısı Şekil 2.1b deki hali alır. Sistem soğutulduğunda, arayüzeyin yapısı olduğu gibi kalır. Bu şekilden artık arayüzeyin neresi olduğunu anlamak mümkün değildir. Bu belirsizliği ortadan kaldırmak için difüzyon cephesi kavramını tanımlamak gereklidir. Şekil 2.1c deki örnekte arayüzey, birbirlerine en yakın komşuları ile bağlanmış A atomları kümesini, yine birbirlerine en yakın komşuları ile bağlanmış B atomları kümesinden ayıran bölgedir. A atomları kümesinin dış sınırı I.çizgi, B atomları kümesinin dış sınırı ise II.çizgidir. I. çizgi veya II.çizgi difüzyon cephesi olarak alınabilir. Difüzyon cephesi kavramının daha kolay anlaşılabilmesi açısından A atomları, en yakın birinci komşuları ile birleştirildiğinde elektriği ileten metal atomlarını, B atomları da yalıtkan atomlarını temsil etsinler. Eğer V_1 ve V_2 noktaları arasına potansiyel farkı uygulanırsa, bütün A atomları, en yakın birinci komşuları ile birbirlerine bağlı oldukları için aynı potansiyelde bulunurlar. Bu eşpotansiyelli bölgenin sınırı difüzyon cephesini oluşturur, ve Şekil 2.2 de kalın çizgi ile gösterilmiştir.



(a)

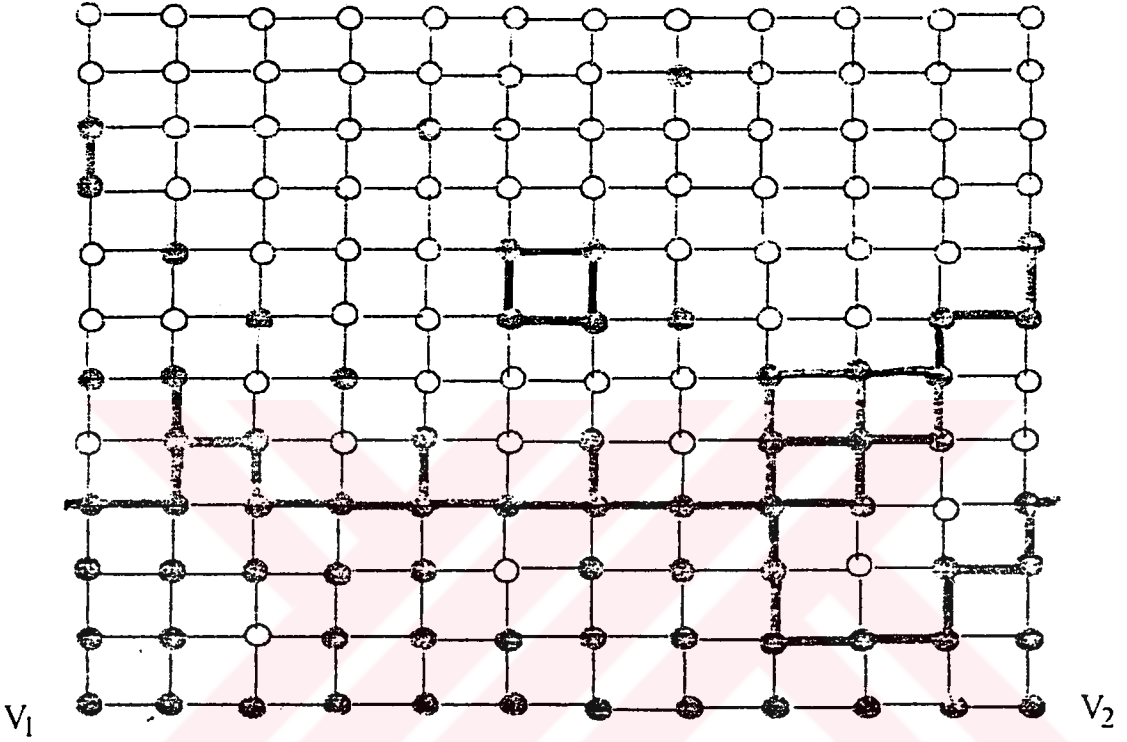


(b)



(c)

Şekil 2.1. Üçgen örgüde iki metal atomunun birbirine difüzyonu. Dolu daireler A atomlarını, boş daireler B atomlarını göstermektedir



Şekil 2.2. Kare örgüde birbiri ile etkileşmeyen taneciklerin difüzyonu. Dolu daireler iletken atomlarını (A), boş daireler yalıtkan atomlarını (B) göstermektedir

Difüzyon cephesinin özelliklerini incelemeye kullanılan bazı önemli kavramlar aşağıda tanımlanmaktadır:

Cephe üzerindeki taneciklerin toplamı (difüzyon cephesinin uzunluğu) N_f ,

$$N_f(t) = \int_0^{\infty} P_f(z, t) dz \quad (2.31)$$

burada $P_f(z, t)$, bir taneciğin difüzyon cephesine ait olma ihtimaliyetini göstermektedir. Ortalama cephe konumu $\bar{z}_f$,

$$\bar{z}_f(t) = \frac{\int_0^{\infty} z P_f(z, t) dz}{\int_0^{\infty} P_f(z, t) dz} \quad (2.32)$$

Cephenin genişliği σ_f ise

$$\sigma_f^2 = \frac{\int_0^{\infty} (z - \bar{z}_f)^2 P_f(z, t) dz}{\int_0^{\infty} P_f(z, t) dz} \quad (2.33)$$

ile verilir.

2.3.1 Difüzyon Cephesinin Fraktal Boyutu D_f

Difüzyon cephesinden uzakta dolu ve boş hücreler en yakın komşuları ile küçük kümeler oluştururlar. Cephe yakınında bu kümelerin doğrusal büyüklükleri ξ , cephenin genişliği σ_f ile kıyaslanabilir[4].

$$\sigma_f \propto (\bar{z}_f \pm \sigma_f) \quad (2.34)$$

Ortalama cephe konumunun, $\bar{z}_f$, çok yakınlarında bulunan ve doğrusal büyüklüğü σ_f olan bir kümenin dolu hücrelerinin sayısı $M(\sigma_f)$,

$$M(\sigma_f) = N_f \frac{\sigma_f}{L_y} \quad (2.35)$$

bağıntısı ile verilmektedir. Bir cismin fraktal boyutu,

$$M(r) \propto r^D \quad (2.36)$$

ile tanımlanmaktadır[17]. Burada r cismin karakteristik uzunluğu (doğrusal büyüklüğü), D fraktal boyutu, $M(r)$ ise “kütlesidir”. Bu ifadede r yerine σ_f kullanılırsa,

$$M(\sigma_f) \propto \sigma_f^{D_f} \quad (2.37)$$

olur; bu ifade Eşitlik 2.35 te kullanılırsa, difüzyon cephesinin fraktal boyutu D_f yi veren

$$N_f \frac{\sigma_f}{L_y} \propto \sigma_f^{D_f} \quad (2.38)$$

ifadesi elde edilir.

2.3.2 Difüzyon Cephesi ile İlgili Üsler, α_N ve α_σ

α_N ve α_σ difüzyon cephesi ile ilgili kritik olmayan üslerdir. α_N , difüzyon cephesinin uzunluğu N_f ile, α_σ ise cephenin genişliği σ_f ile ilgilidir. N_f ve σ_f , yoğunluk değişiminin $\bar{V}P$ ortalama cephe konumundaki değerine basit kuvvet kanunları ile bağlıdır.

$$N_f \propto |\bar{V}P|^{-\alpha_N} \quad (2.39)$$

$$\sigma_f \propto |\bar{\nabla}P|^{-\alpha_\sigma} \quad (2.40)$$

İki boyutlu uzayda z yönünde difüzyon için $\bar{\nabla}P = \frac{dP}{dz}$ olup, $z = 0$ da kaynak $z = L_z$ de tuzak olması durumunda $\frac{dP}{dz} = 0.977 \frac{1}{\ell_d}$ olduğu aşağıda gösterilmektedir:

Tanecik yoğunluğunun, $P(z,t)$,

$$P(z,t) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-u^2) du$$

z ye göre türevi alınır ve türevin $z = \bar{z}_f$ deki değeri hesaplanırsa

$$\left. \frac{dP(z,t)}{dz} \right|_{z=\bar{z}_f} = -\frac{2}{\sqrt{\pi}\ell_d} e^{-\frac{\bar{z}_f^2}{\ell_d^2}} \quad (2.41)$$

ifadesi elde edilir. Bu eşitlikte $\bar{z}_f \cong 0.38\ell_d$ bağıntısı kullanılırsa,

$$\frac{dP}{dz} = 0.977 \frac{1}{\ell_d} \quad (2.42)$$

bulunur. İki boyutlu uzayda difüzyon cephesinin fraktal boyutu ile α_N ve α arasında bir bağıntı mevcut olup aşağıda elde edilmektedir[3]:

$\frac{dP}{dz}$ için Eşitlik 2.42 deki ifade, Eşitlik 2.39 ve 2.40 ta yerine konulursa,

$$N_f \propto (\ell_d)^{\alpha_N} \quad (2.43)$$

$$\sigma_f \propto (\ell_d)^{\alpha_\sigma} \quad (2.44)$$

olur. Eşitlik 2.38, 2.43 ve 2.44 birleştirilirse,

$$\frac{N_f \sigma_f}{L} \propto \ell_d^{\alpha_N + \alpha_\sigma} \propto \sigma_f^{D_f} \propto \ell_d^{\alpha_\sigma D_f} \quad (2.45)$$

elde edilir . Bu orantılardan,

$$D_f = 1 + \frac{\alpha_N}{\alpha_\sigma} \quad (2.46)$$

bağıntısı bulunur. Sapoval ve arkadaşlarının simülasyon sonucunda [3] elde ettikleri

$$\alpha_N + \alpha_\sigma \approx 1 \quad (2.47)$$

bağıntısı Eşitlik 2.46 da kullanılırsa, D_f için daha sade bir bağıntı elde edilir.

$$D_f = \frac{1}{\alpha_\sigma} \quad (2.48)$$

2.3.3 Cephre Yakınındaki Yoğunluk Verilerinden Perkolasyon Kritik Üsleri

v ve β nın Hesaplanması

Difüzyon probleminin, perkolasyon problemi[18] ile yakın ilişkisi vardır. İki boyutlu uzayda difüzyon cephesi ile perkolasyondaki sonsuz kümenin çevresinin aynı geometrik özelliğe sahip oldukları, ilk defa Sapoval ve arkadaşları tarafından difüzyonun simulasyonu yapılmak suretiyle

gösterilmiştir[3]. Taneciklerin konumu z , $\bar{z}_f$ den küçük ya da büyük olduğunda taneciklerin yoğunluğu p , kritik yoğunluk p_c den sapar. $p < p_c$ olan bölgelerde küçük kümeler oluşur. Bu kümelerin karakteristik uzunlukları ξ ,

$$\xi(z) \propto |P(z) - p_c|^{-\nu} \quad (2.49)$$

kuvvet ifadesi ile verilmektedir. Burada ν kritik üstür. $\bar{z}_f$ konumunda küçük kümelerin doğrusal büyüklükleri σ_f mertebesinde, $\sigma_f \propto \xi$. Eşitlik 2.49, Eşitlik 2.34 de yerine konulduğunda,

$$\sigma_f \propto |P(\bar{z}_f \pm \sigma_f) - p_c|^{-\nu} \quad (2.50)$$

elde edilir. $P(\bar{z}_f \pm \sigma_f)$ $\bar{z}_f$ civarında Taylor serisine açılır ve üslü terimler ihmal edilirse,

$$P(\bar{z}_f \pm \sigma_f) = P(\bar{z}_f) + \sigma_f \left(\frac{\partial P(z)}{\partial z} \right)_{z=\bar{z}_f} \quad (2.51)$$

olur. Bu ifade Eşitlik 2.50 ye yerleştirilirse,

$$\sigma_f = \xi_0 \left| P(\bar{z}_f) + \sigma_f \left(\frac{\partial P}{\partial z} \right)_{z=\bar{z}_f} - p_c \right|^{-\nu} \quad (2.52)$$

bulunur. Buradaki ξ_0 örgü parametresidir ($\xi_0 \propto$ bir örgü gözü kenarı). Ortalama cephe konumunda yoğunluk,

$$P(\bar{z}_f) = p_c \quad (2.53)$$

olduğundan Eşitlik 2.52 den,

$$\sigma_f = \xi_0 \left| \sigma_f \left(\frac{dP}{dz} \right)_{z=\bar{z}_f} \right|^{-\nu} = \xi_0 \left| 0.977 \frac{\sigma_f}{\ell_d} \right|^{-\nu} \quad (2.54)$$

elde edilir ve bu ifade, Eşitlik 2.44 ile birleştirildiğinde,

$$\alpha_\sigma = \frac{\nu}{1+\nu} \quad (2.55)$$

bağıntısı elde edilir. α_σ nın bu değeri Eşitlik 2.48 de yerine konulursa fraktal boyut ile kritik üs ν arasında

$$D_f = \frac{\nu}{1+\nu} \quad (2.56)$$

bağıntısı bulunur.

Herhangi bir gözün taşınan taneciklerin oluşturduğu sonsuz kümeye ait olma ihtimali P_∞ , perkolasyondaki P_∞ ile benzerlik göstermektedir. Buna göre perkolasyondaki , $P_\infty \propto (p - p_c)^\beta$, bağıntısı difüzyonda

$$P_\infty(z) \propto (P(z) - p_c)^\beta \quad (2.57)$$

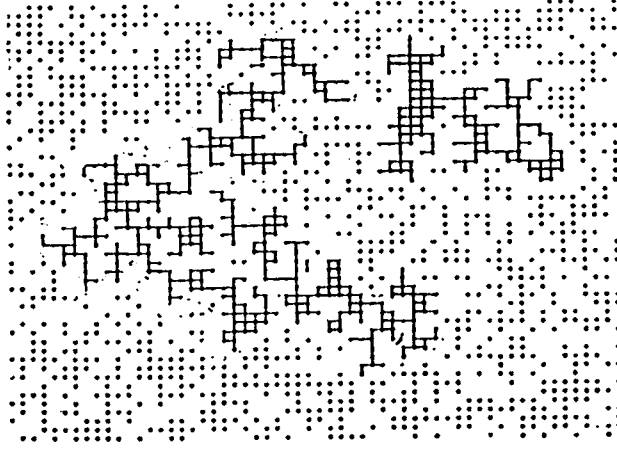
bağıntısı haline dönüşür.

BÖLÜM 3

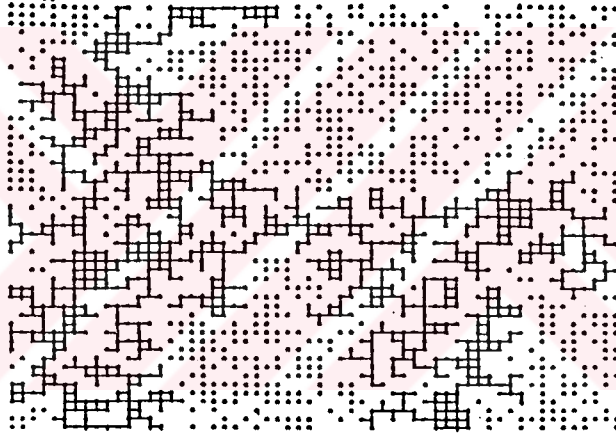
PERKOLASYON TEORİSİ

Perkolasyon kavramı ilk olarak Broadbent ve Hammersley tarafından 1957 de bir akışkanın bir ortamda rastgele yayılmasını incelemek üzere önerilmiştir [18]. Faz geçiş teorisindeki gelişmeler ile Wilson, Fisher ve Kadanoff' un renormalizasyon grup teori çalışmaları, perkolasyon ile ilgili çalışmalara önemli ölçüde ivme kazandırmıştır[19].

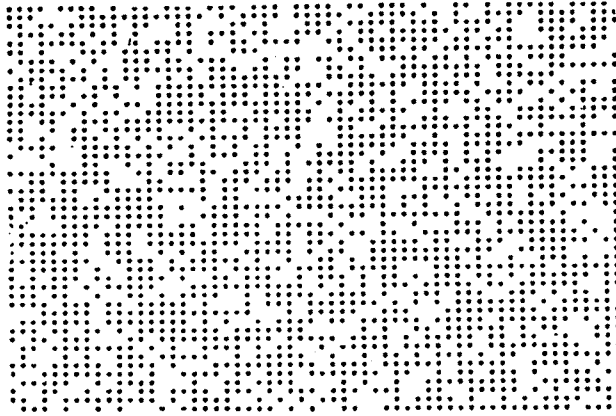
Düzgün bir örgünün her bir gözü rastgele olarak p ihtimali ile doldurulur veya $1-p$ ihtimali ile boş bırakılırsa bu örgüde dolu ve boş hücrelerin düzensiz bir dağılımı elde edilir (Şekil 3.1). Bir örgünün hücreleri rastgele doldurulur ise hücre perkolasyonu, bağları rastgele doldurulur ise bağ perkolasyonu elde edilir (Şekil 3.2). Bir örgüde dolu hücrelerin iletken, boş hücrelerin ise yalıtkan olduğunu ve elektrik akımının sadece iletken en yakın komşular arasında iletildiğini kabul edelim. Düşük p değerlerinde, iletken hücreler ya tek başlarına, ya da küçük kümeler halinde bulunurlar (Şekil 3.3); bu durumda örgü yalıtandır. p değeri arttıkça iletken hücrelerden oluşan kümeler büyümeye başlar, ve p nin kritik bir değerinden, p_c , sonra da örgüyü bir uçtan bir uca kapsar. Bu kümeye “sonsuz” küme veya kapsayan küme denir. Bu durumda örgü iletken olur (Şekil 3.1). p nin bu kritik değeri, p_c , perkolasyon eşiği veya kritik yoğunluk olarak adlandırılır. Perkolasyon eşik değerleri çeşitli örgüler için Çizelge 3.1de verilmektedir.



(a)



(b)



(c)

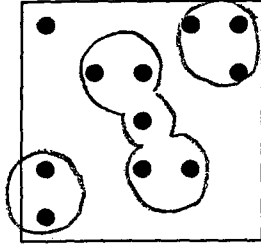
Şekil 3.1. Kare örgüde hücre perkolasyonu. a) $p=0.5$, b) $p=0.6$, c) $p=0.8$ [20]

Çizelge 3.1 İki ve üç boyutlu uzayda değişik örgü tipleri için perkolasyon eşik değerleri (z , Cayley Ağacının bir noktasından çıkan dal sayısı)[20]

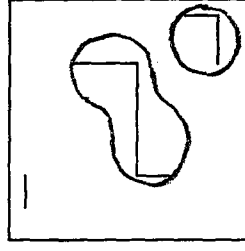
Örgü	hücre perkolasyonu	bağ perkolasyonu
Üçgen	$1/2$	$2\sin(\pi/18)$
Kare	0.5927460	$1/2$
Balpeteği	0.6962	$1-2\sin(\pi/18)$
Yüzey Merkezli Küp	0.198	0.119
Cayley Ağacı	$1/(z-1)$	$1/(z-1)$
Hacım Merkezli Küp	0.245	0.1803
Basit Küp	0.31161	0.2488

3.1 Perkolasyon İçin Kritik Üsler

Perkolasyon kritik yoğunluğu p_c de geometrik faz geçişi meydana gelir ve sonsuz küme fazı ($p > p_c$) sonlu küme fazından ($p < p_c$) ayrılır. Faz geçişlerinin diğer bazı örnekleri katı/sıvı ve magnetik faz geçişleridir. Katı/sıvı faz geçişinde, kritik sıcaklıkta düzenli faz(katı) düzensiz faza(sıvı) değişir[21]. Bazı maddeler düşük sıcaklıkta dış magnetik alan olmaksızın kendiliğinden mıknatıslanırlar. Sıcaklık arttırıldığında mıknatıslanma (m) sürekli olarak azalır ve kritik sıcaklık T_c de sıfır olur[22]. Perkolasyondaki dolu hücre yoğunluğu p , kendiliğinden mıknatıslanmadaki sıcaklık (T) ile aynı rolü oynar. p_c civarında bir hücrenin sonsuz kümeye ait olma ihtimali, P_∞ , önemli bir nicelik olup mıknatıslanmaya (düzen parametresi, m ,) karşılık gelir. $p < p_c$ durumunda sadece sonlu kümeler mevcut olduğu için $P_\infty = 0$ dir. $p > p_c$ için ise P_∞ , T_c nin

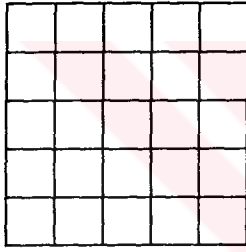


(a)

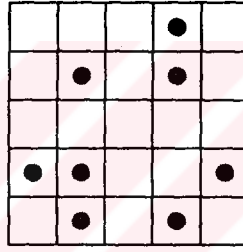


(b)

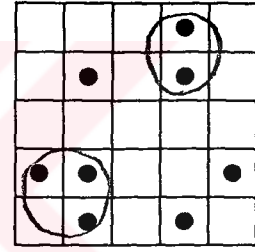
Şekil 3.2. a) Hücre perkolasyonu ve en yakın dolu hücrelerden oluşan kümeler. b) Bağ perkolasyonu ve bağ kümeleri



(a)



(b)



(c)

Şekil 3.3. a) Kare örgüde boş hücreler. b) Kare örgüde dolu ve boş hücreler. c) En yakın dolu hücrelerden oluşan kümeler

altında mıknatıslanmaya benzer davranış gösterir, ve p ile basit kuvvet kanununa uygun şekilde artar.

$$P_{\infty} \propto (p - p_c)^{\beta}, \quad p \rightarrow p_c \quad (3.1)$$

Sonlu kümelerin doğrusal büyüklüğü, p_c nin altında ve üstünde korelasyon uzunluğu ξ ile orantılıdır. Bir sonlu küme için korelasyon uzunluğu, aynı sonlu

küme üzerinde, hücreler arasındaki mesafelerin ortalamasıdır. p , p_c ye yaklaştığında ξ ,

$$\xi \propto |p - p_c|^{-\nu} \quad , \quad p \rightarrow p_c \quad (3.2)$$

şeklinde kuvvet kanununa uyarak sonsuza gider. Burada ν kritik üs olup p_c nin altında ve üstünde aynı değere sahiptir. Sonlu küme hücrelerinin ortalama sayısı (“kütlesi”) S ,

$$S \propto |p - p_c|^{-\gamma} \quad , \quad p \rightarrow p_c \quad (3.3)$$

kuvvet kanununa uyar. Burada $S(p) \equiv \sum_s s n_s(p)$ dir ve $n_s(p)$, örgüye ait bir gözüün s tane hücreye sahip kümede bulunma ihtimaliyetidir. γ kritik üs olup p_c nin altında ve üstünde aynı değerdedir. P_∞ ve S nicelikleri kendiliğinden mıknatıslanmadaki, mıknatıslanma m ve mıknatıslanma alınganlığı χ ile benzerlik gösterirler. Bu benzerlik Şekil 3.4 de verilmektedir. Çizelge 3.2 de perkolasyon ve kendiliğinden mıknatıslanmanın iki ve daha yüksek boyutlu uzaylardaki kritik üs değerleri verilmektedir.

3.2 Sonsuz Kümenin ve Çevresinin Fraktal Boyutu

Karakteristik uzunluğu, $r(r = a\xi, a > 0)$ olan küçük bir kümenin içindeki herhangi bir hücrenin sonsuz kümeye ait olma ihtimaliyeti,

$$P_\infty \propto \frac{r^D}{r^d} \quad (3.4)$$

ile verilir. Bu ifade ξ cinsinden

$$P_\infty \propto \frac{\xi^D}{\xi^d} \quad (3.5)$$

haline gelir. Burada d , öklit uzayının boyutu, D ise fraktal boyuttur. Bu eşitlikte, P_{∞} için Eşitlik 3.1 de, ξ için de Eşitlik 3.2 de verilen ifadeler kullanılırsa,

$$D = d - \frac{\beta}{\nu} \quad (3.6)$$

sonucu elde edilir. İki boyutlu uzayda $D = 91 / 48$ değerine sahiptir[18].

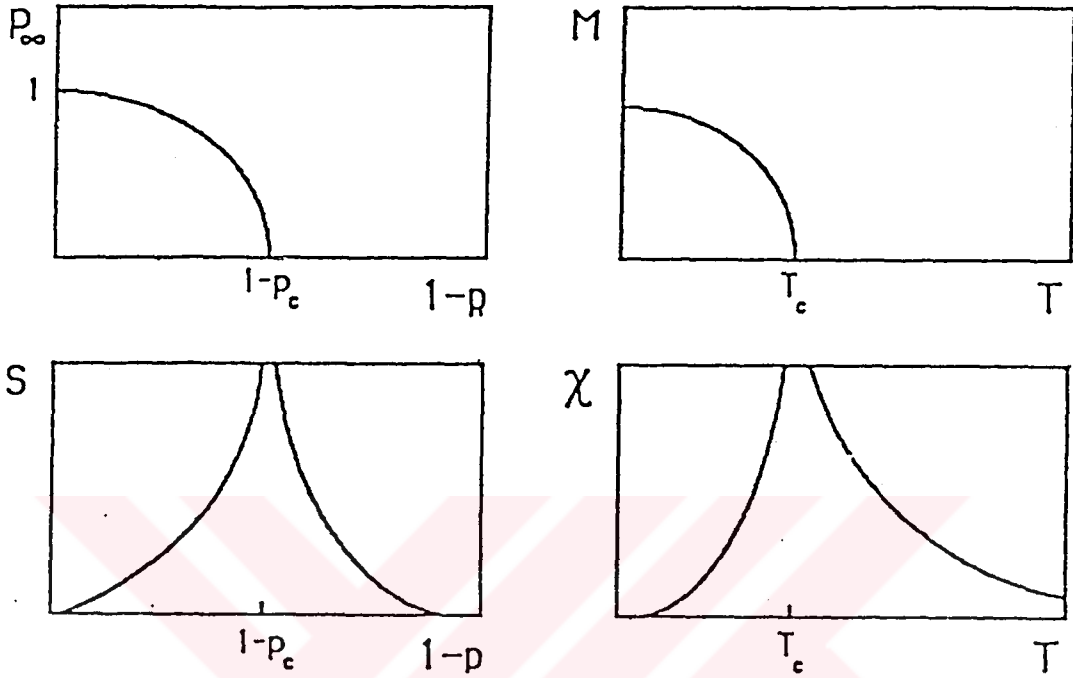
Sonsuz kümenin çevresi ile difüzyon cephesi aynı fraktal cisimdir[3]. Bundan dolayı difüzyon cephesinin fraktal boyutu için mevcut olan bağıntı sonsuz kümenin çevresinin fraktal boyutu için de geçerlidir ve

$$D_h = \frac{1 + \nu}{\nu} \quad (3.7)$$

olur.

Çizelge 3.2. Perkolasyon ve kendiliğinden mıknatıslanmanın iki ve daha yüksek boyutlu uzaylardaki kritik üs değerleri[20]

Perkolasyon	$d = 2$	$d = 3$	$d \geq 6$
Düzen parametresi P_{∞}, β	5/36	0.417±0.003	1
Korelasyon uzunluğu ξ, ν	4/3	0.875±0.008	1/2
Sonlu kümelerin "kütlesi" S, γ	43/18	1.795±0.005	1
Kendiliğinden Mıknatıslanma			
Düzen parametresi m, β	1/8	0.32	1/2
Korelasyon uzunluğu ξ, ν	1	0.63	1/2
Alınganlık χ, γ	7/4	1.24	1



Şekil 3.4. Bir örgü gözünün “sonsuz” kümeye ait olma ihtimaliyeti P_∞ ve sonlu küme hücrelerinin ortalama sayısı (“kütlesi”) S nin kendiliğinden mıknatıslanmadaki , mıknatıslanma m ve mıknatıslanma alınganlığı χ ile karşılaştırılması.

BÖLÜM 4

CELLULAR AUTOMATON VE MATEMATİK YAPISI

Cellular automatonlar, dinamik sistemlere model teşkil ederler. Zaman, uzay ve uzayın her bir gözü ile alakalı niceliklerin alabileceği değerler kesiklidir. Cellular automatonun t adımındaki hali, her bir hücrendeki değişken değerleri verilerek belirlenir. Bir cellular automatonun t adımındaki halini, bir önceki adım, en yakın komşu gözlerin etkileşimleri yolu ile (cellular automaton kuralı) belirler. Komşular birbirleriyle eş zamanlı olarak etkileşirler. Bir cellular automatonu diğerinden ayıran özellikler şunlardır: Örgünün tipi, sınır şartları ve hücrelerarası etkileşme kuralları.

Cellular automatonlar ile modelleme yöntemi, ilk olarak 1963 yılında Neuman ve Ulam tarafından "cellular spaces" ismi ile biyolojide dinamik sistemlerin simülasyonu için ortaya konulmuştur[23]. 1983 yılına kadar değişik amaçlar için farklı isimlerle ("tessellation automata", "homogeneous structure", "cellular structure", "tessellation structure", ve "iterative arrays") kullanılmıştır. 1983 yılında Wolfram, cellular automatonların matematik yapısını ortaya koymuştur [24]. Celular automatonlar, fizik, kimya ve biyolojide bir çok dinamik sisteme model oluşturmak üzere kullanılmaktadır[25,26]. Bu sistemlerden bazıları şunlardır: türbülans akışı[27], difüzyon[8-11], tepkime - difüzyon[1,28], ve kendiliğinden mıknatıslanma[29]. Aşağıda cellular automatonun matematik yapısı kısaca verilmektedir.

4.1 Bir Boyutlu Uzayda Cellular Automaton

Bir boyutlu örgünün her bir i hücresi bir x_i değişken niceliğine sahip olsun, ve bu niceliklerden her birinin alabileceği değerler, $S=\{0,1,...,k-1\}$ kümesini oluştursun (Şekil 4.1). Bir genel cellular automaton kuralı,

$$x_i^{t+1} = G(x_{i-r}^t, x_{i-r+1}^t, \dots, x_i^t, \dots, x_{i+r}^t) \quad (4.1)$$

ile tanımlanır. Burada G cellular automaton kuralını ifade eden fonksiyon, r komşu sayısını belirleyen parametredir. Herhangi bir i hücresinin komşuları ile etkileşme menzili ise $2r+1$ ile verilir. Mesela, bir basit($r=1$) cellular automatonda $k = 2$ için her bir x_i değişkeni 0 veya 1 değerlerini alabilir ve Eşitlik 4.1

$$x_i^{t+1} = G(x_{i-1}^t, x_i^t, x_{i+1}^t) \quad (4.2)$$

haline gelir. $r=1$ olduğu için x_i nin etkileşme menzili içine en yakın üç komşu girer. Bu durumda, $2^3=8$ tane üçlü konfigürasyon mümkündür. Bu konfigürasyonlar, Şekil 4.2 de verilmekte ve adlandırılmaktadır.



Şekil 4.1 Bir boyutlu cellular automaton için örgü

0 0 0	0 0 1	0 1 0	0 1 1	1 0 0	1 0 1	1 1 0	1 1 1
↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓	↓
a ₀	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅	a ₆	a ₇

Şekil 4.2. Bir basit cellular automatonda en yakın komşuların alması mümkün olan değerler.

Bir basit cellular automaton için ($r=1$), $2^{2^3} = 256$ tane kural bulmak mümkündür. Bu kurallar

$$R = \sum_{j=0}^7 a_j 2^j \quad (4.3)$$

ifadesine uyularak numaralandırılır. Burada a_j , Şekil 4.2 deki üçlü konfigürasyonları temsil etmektedir. Mesela,

$$x_i^{t+1} = (x_{i-1}^t + x_i^t + x_{i+1}^t) \bmod 2 \quad (4.4)$$

basit cellular automaton kuralının numarası 4.3 eşitliğinden,

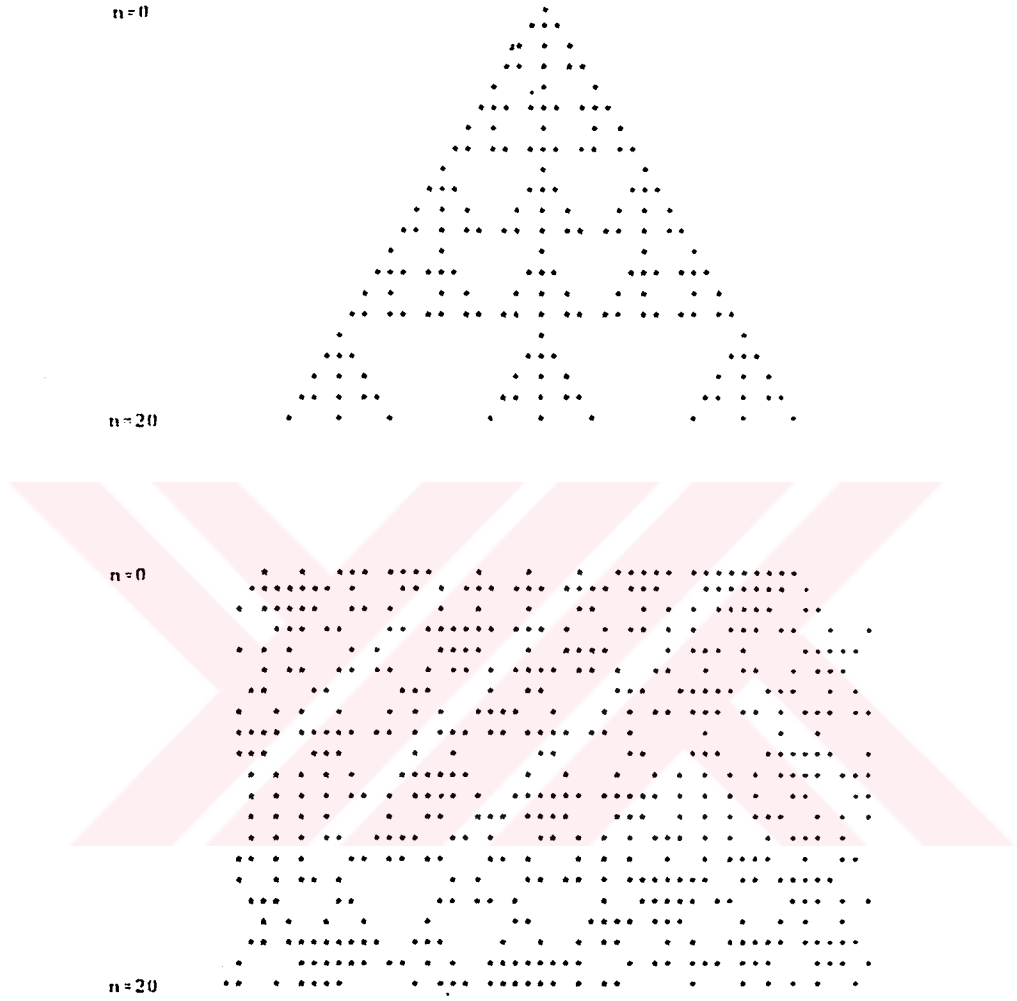
$$R = 0 \cdot 2^0 + 1 \cdot 2^1 + 1 \cdot 2^2 + 0 \cdot 2^3 + 1 \cdot 2^4 + 0 \cdot 2^5 + 0 \cdot 2^6 + 1 \cdot 2^7 \quad (4.5)$$

$R=150$ olarak elde edilir. Kural 150 ye uyan bir cellular automatonın zaman ile gelişimi Şekil 4.3 de gösterilmektedir.

Bu 256 tane cellular automaton kuralını dört sınıfta toplamak mümkündür:

1. Cellular automaton, gelişiminin sonunda homojen duruma ulaşır. Yani örgünün bütün hücrelerinde sıfır bulunur.
2. Cellular automaton, gelişiminin sonunda kararlı veya periyodik bir yapıya ulaşır.
3. Cellular automaton, gelişiminin sonunda düzensiz (disordered) bir yapıya ulaşır.
4. Cellular automaton, gelişiminin sonunda karmaşık (complex) bir yapıya ulaşır.

Bu kurallardan yansıma simetrisine sahip olmayanlara “İllegal”dir denir, ve bu kurallar hariç tutulursa, sadece 32 tane “legal” kural kalır.



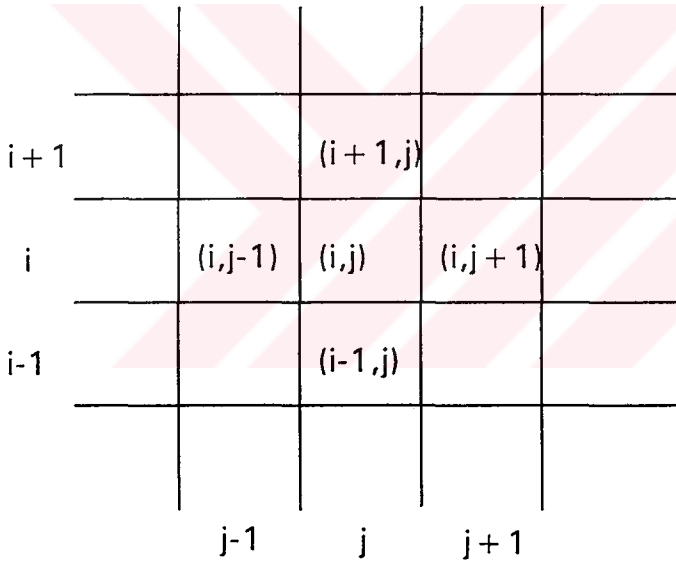
Şekil 4.3. Kural 150 ye uyan bir cellular automatonın zaman ile gelişimi. Başlangıçta tüm örgüde sıfırdan farklı a) tek bir hücre var; b) iki veya daha fazla hücre var .

4.2 İki boyutlu Uzayda Cellular Automaton

İki boyutlu uzayda ve bir kare örgüde çalışan cellular automaton için bir gözün en yakın beş komşusu ($r = 2$) Şekil 4.4 de, beş komşulu genel bir cellular automaton kuralı ise aşağıda

$$x_{i,j}^{t+1} = G(x_{i,j}^t, x_{i,j+1}^t, x_{i+1,j}^t, x_{i,j-1}^t, x_{i-1,j}^t) \quad (4.6)$$

verilmektedir.



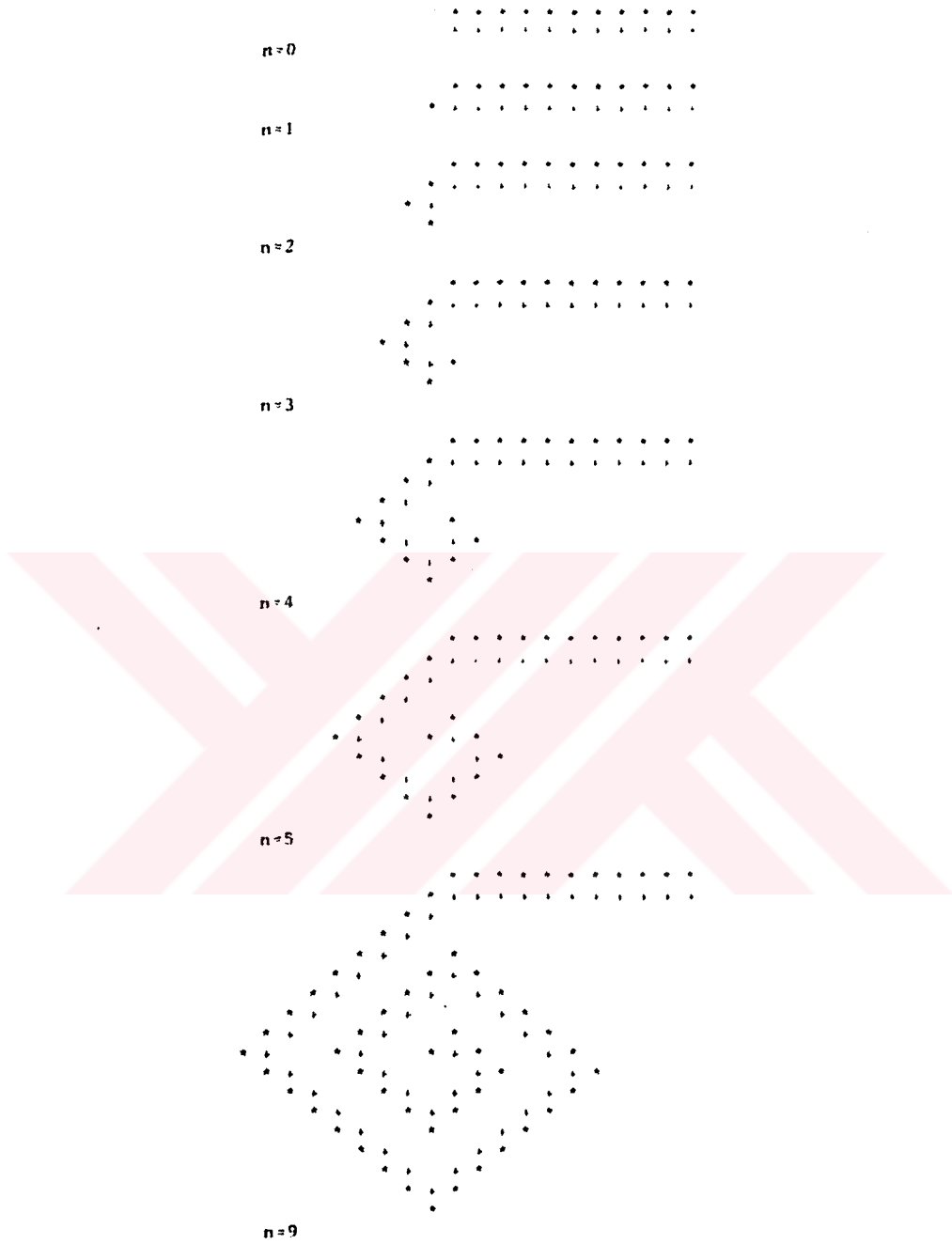
Şekil 4.4. İki boyutlu uzayda ve bir kare örgüde bir gözün, kendisi dahil, en yakın beş komşusu.

İki boyutlu uzayda da bir boyutlu uzayda olduğu gibi $k = 2$ alındığında, her bir x_i değişkeni 0 veya 1 değerlerini alabilir. İki boyutlu uzayda $k = 2$ ve $r = 2$ olmak üzere, örnek olarak, uyarılabilir ortamda tepkime-difüzyon modeli aşağıda verilmektedir: Cellular automaton kuralı

$$x_{i,j}^{n+1} = E(x_{i,j}^n) + D(x_{i,j}^n, x_{i-1,j}^n, x_{i,j-1}^n, x_{i+1,j}^n, x_{i,j+1}^n) \quad (4.7)$$

olup[1] cellular automatonun çeşitli adımlardaki halleri Şekil 4.5 de gösterilmiştir.





Şekil 4.5. Eşitlik 4.7 de verilen kurala göre gelişen cellular automatonun $n=0,1,2,\dots,9$ adımlarındaki halleri. (Başlangıç hali: $x_{0,j}^0 = -1$ ($0 \leq j < \infty$), $x_{1,j}^0 = 1$ ($0 \leq j < \infty$), ve $x_{i,j}^0 = 0$ (diğer durumlar))

BÖLÜM 5

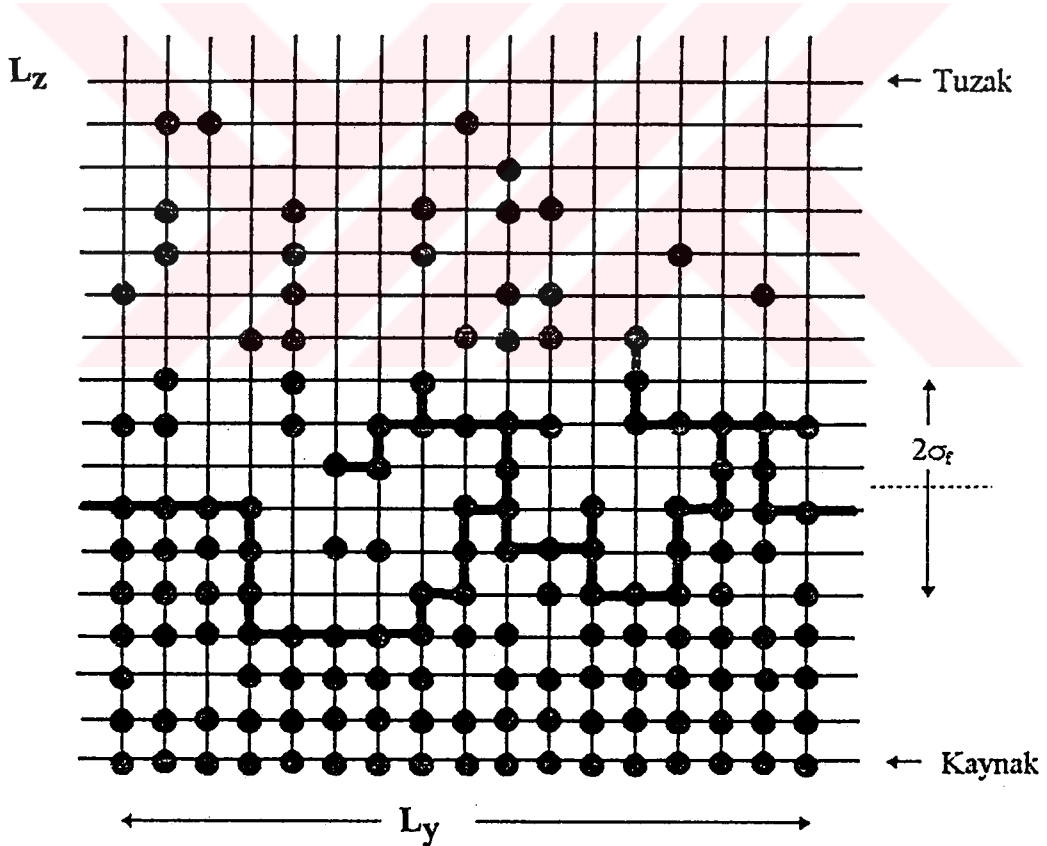
DİFÜZYON MODELLERİ

Difüzyon modelleri arasındaki farklılıklar, taneciklerin taşınmaları için konulan kurallardan kaynaklanmaktadır. Bu modellerden en yaygın şekilde kullanılanlar aşağıda kısaca özetlenmektedir.

5.1 Bu Çalışma İçin Difüzyon Modeli : Chopard-Droz-Kolb Cellular

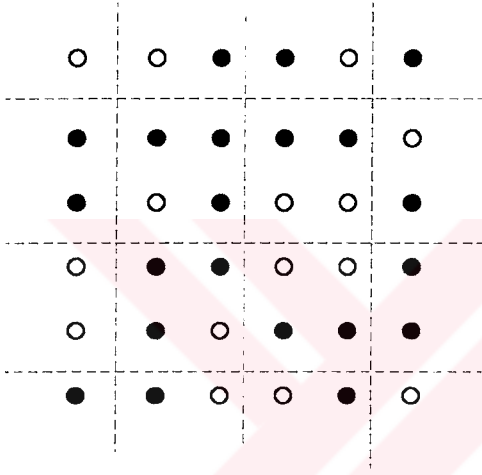
Automatonı - I [8]

Bu çalışma, kaynak ile tuzak arasında dengede olmayan difüzyon(Şekil 5.1) için Chopard- Droz-Kolb cellular automatonına dayanmaktadır.



Şekil 5.1. Difüzyon cephesi. $z=0$ da yoğunluk $P=1$ (kaynak) ve $z=L_z$ de yoğunluk $P=0$ (tuzak)

Bu modele göre iki tanecik aynı gözde bulunmamak şartı ile tanecikler arasında itme ve çekme etkileşimleri ihmal edilmektedir. Tanecikler kare örgüde hareket etmektedir ve periyodik sınır şartı kullanılmaktadır. Taneciklerin hareket etme kuralı(cellular automaton kuralı) şöyledir: Örgü 2x2 lik Margolus bloklarına ayrılır (Şekil 5.2).



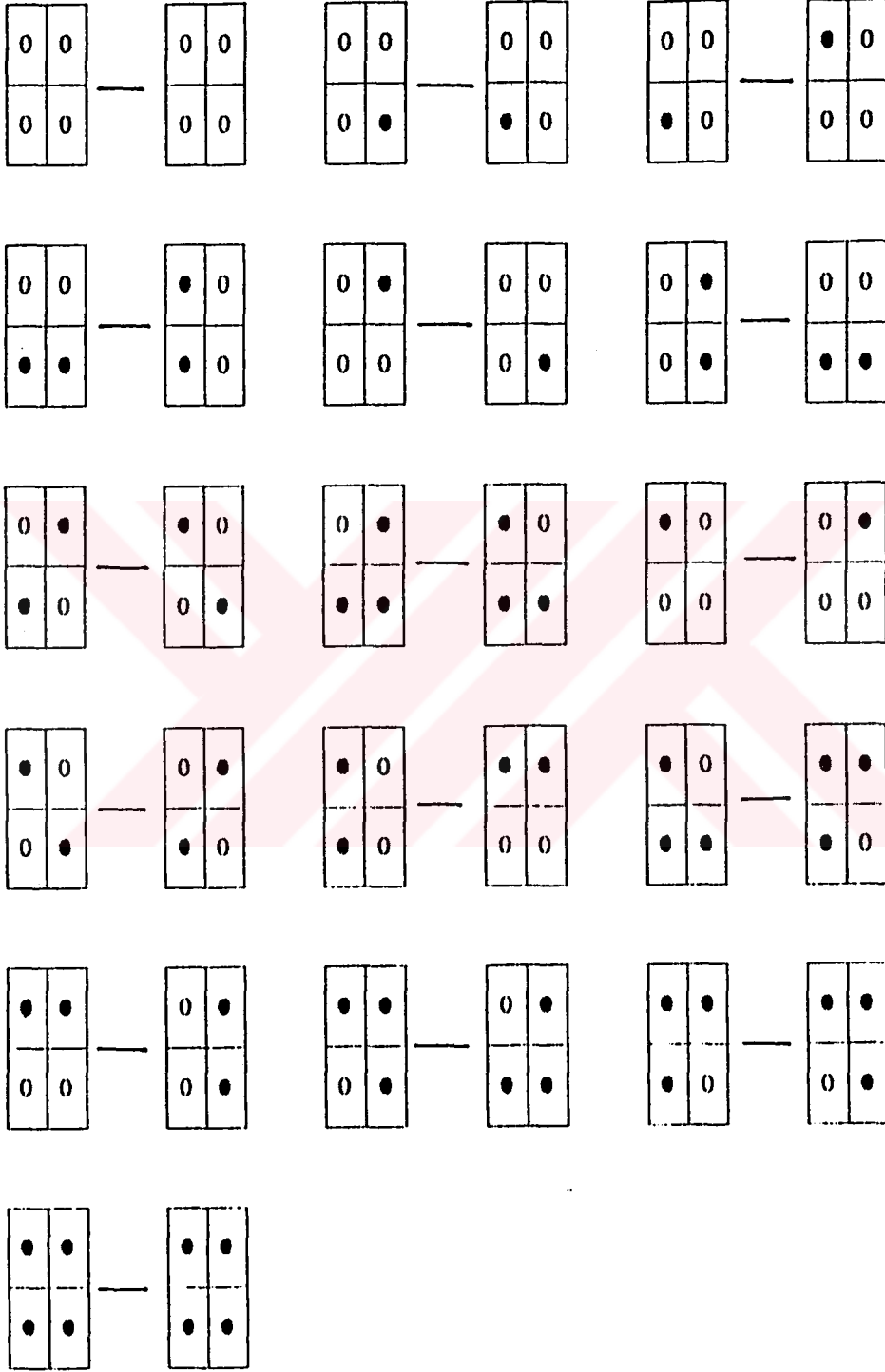
Şekil 5.2 Örgünün 2x2 lik Margolus bloklarına ayrılması

Her bir Margolus bloğuna, kendisi için üretilen bir rasgele sayının değerine göre, üç dönme işleminden biri uygulanır: p_1 ihtimaliyeti ile $+\pi/2$ (saat yönünde), p_2 ihtimaliyeti ile $-\pi/2$ (saat yönünün tersine) ve p_0 ihtimaliyeti ile 0 radyan döndürülür (Şekil 5.3 ve 5.4). Daha sonra bu Margolus blokları köşegen doğrultusunda bir köşegen uzunluğu kadar kaydırılır. Bu işlemler simülasyonun tekrarlanan adımını oluşturmaktadır.

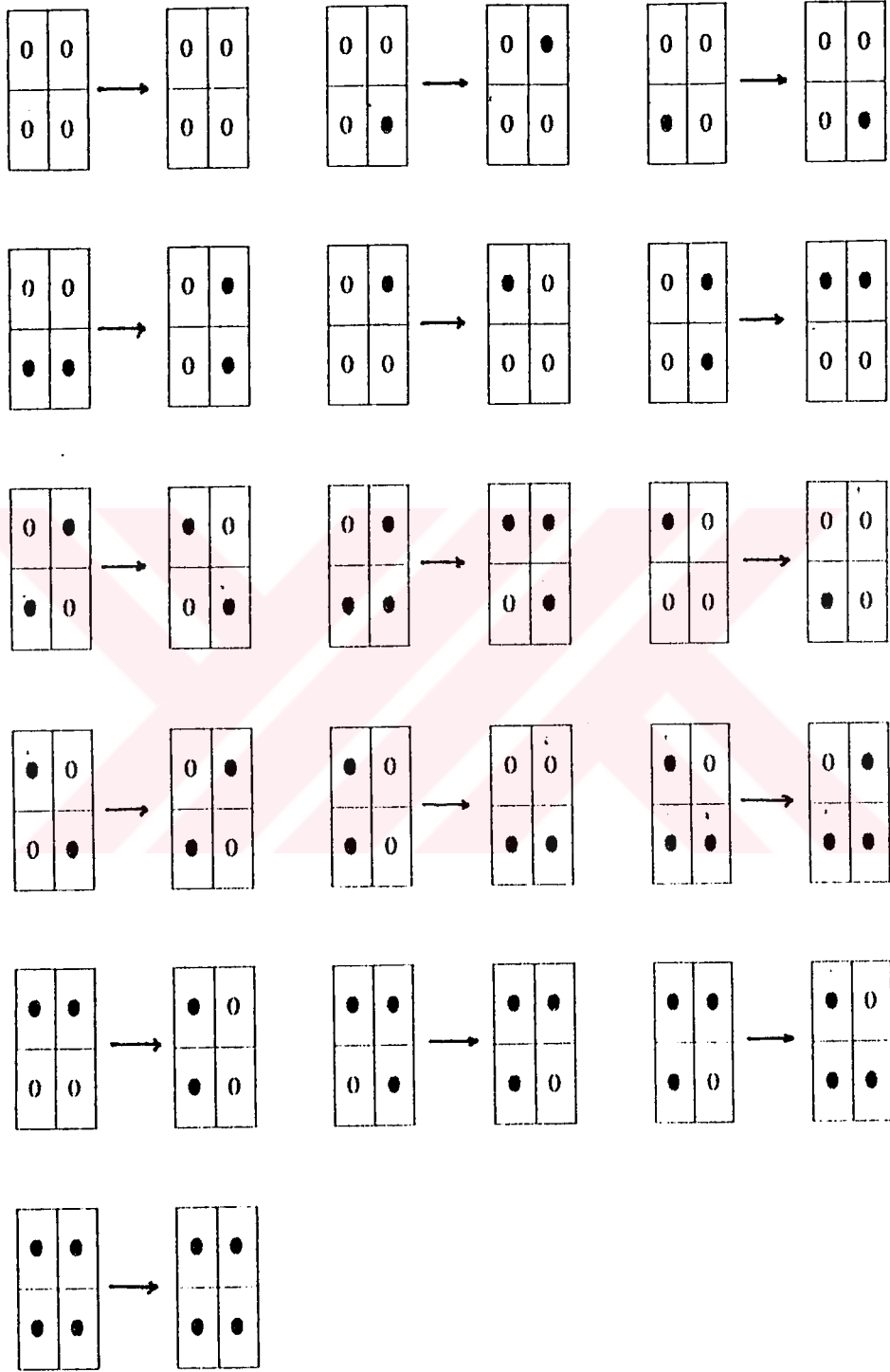
Rasgele sayı üretici olarak başka bir cellular automaton kullanılmaktadır. Algoritmalar özel amaçlı Cellular Automaton Makinesinde (CAM-6)[30] çalıştırılmaktadır. Rasgele sayı üretici olarak kullanılan HPP (Hardy-Pazzis-Pomeau)[31] gazının tanecikleri blokların köşegenleri doğrultusunda hareket ederler. HPP taneciklerinin hareket yönleri Margolus bloğu içindeki konumlarına

bağlıdır. Örnek olarak tanecik Margolus bloğunun sol üst köşesinde ise güney-doğu yönünde, sağ alt köşesinde ise kuzey-batı yönünde hareket eder. Aynı tarzda sağ üst köşede ise güney-batıya, sol alt köşesinde ise kuzey-doğu yönünde hareket eder. Tanecikler birbirleri ile çarpıştıktan sonra geliş doğrultuları ile dik açı yaparak saçılırlar. HPP taneciklerinin mümkün olan hareketleri Şekil 5.5 de verilmektedir. Margolus bloklarının içinde en fazla 4 tanecik bulunabildiği için mümkün 16 tane konfigürasyon vardır, ve bunlar 0 ile 15 arasındaki sayılar ile temsil edilirler. 1, 4, 3, 6, 10, 11 ve 14 sayıları ile temsil edilen konfigürasyonlar saat yönünde; 2, 8, 5, 9, 12, 7 ve 13 sayıları ile temsil edilenler saat yönünün tersine döndürülürler; 0 ve 15 ile temsil edilenler ise döndürülmezler.

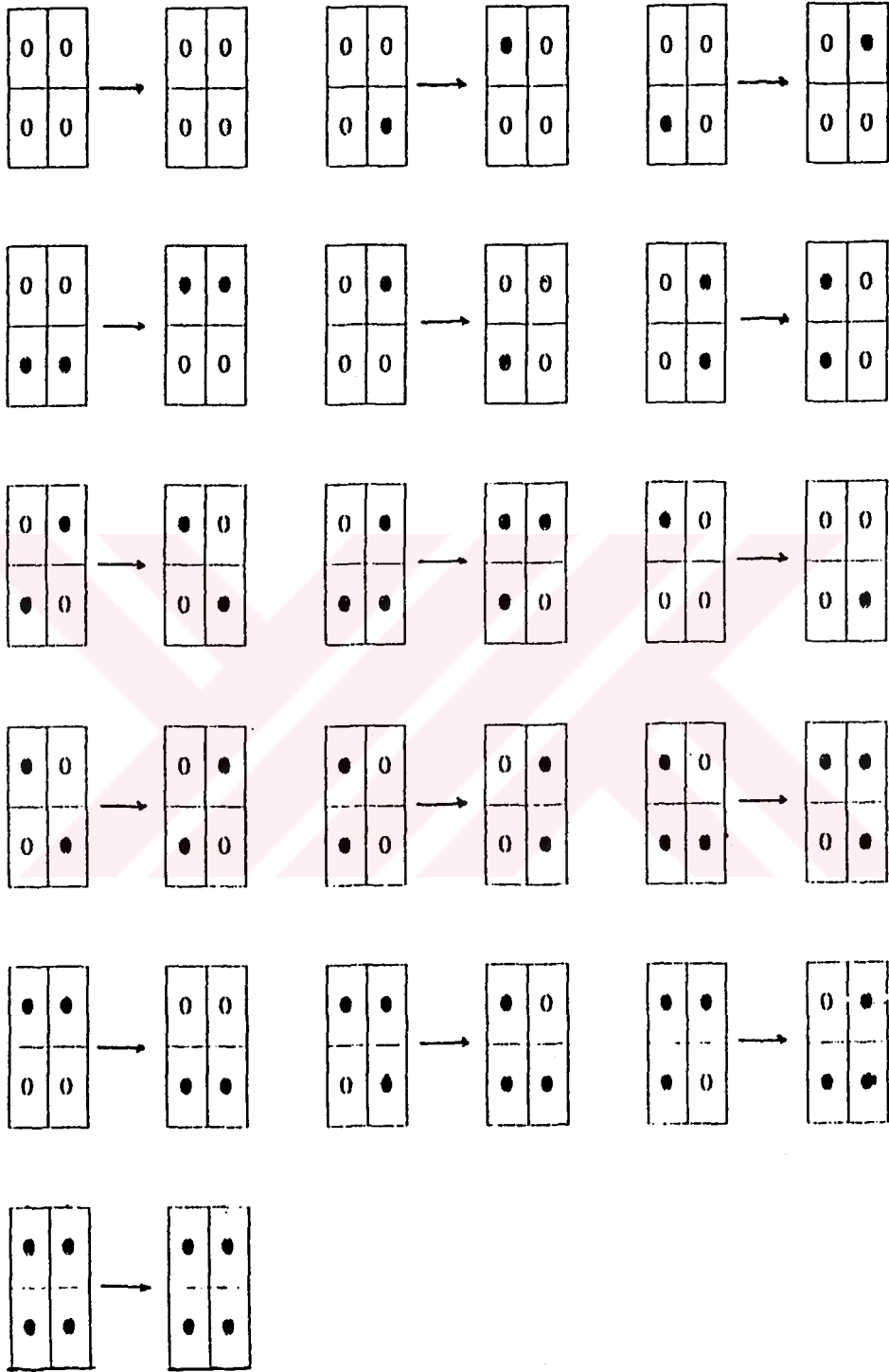




Şekil 5.3. Margolus bloklarının saat yönünde $\pi/2$ radyan döndürülmesi

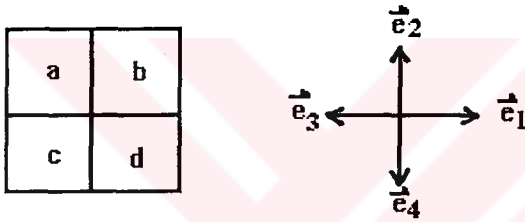


Şekil 5.4. Margolus bloklarının saat yönünün tersine $\frac{\pi}{2}$ radyan döndürülmesi



Şekil 5.5. Rasgele sayı üretici olarak kullanılan HPP(Hardy-Pazzis-Pomeau) modelinde taneciklerin bir Margolus bloğu içinde hareketleri

Bu cellular automatonu dayanan ve görünür boyut özelliklerini verecek olan diferansiyel denklem aşağıda türetilmektedir: Margolus bloğunun merkezi $\vec{r}$ ile ve blok içindeki hücrenin sol üst, sağ üst, sol alt, sağ alt, konumu sırasıyla $a(\vec{r})$, $b(\vec{r})$, $c(\vec{r})$ ve $d(\vec{r})$ ile işaretlensin (Şekil 5.6). Cellular automaton kurallarını takip ederek $x_\alpha(\vec{r}, t+1)$ için (burada x_α ; a, b, c veya d yi temsil eder) $\vec{r}_j$, $\vec{r}$ nin en yakın komşusu olmak üzere $x_\beta(\vec{r}_j, t)$ cinsinden ilerleme denklemi yazılmakta ve daha sonra da ortalama alınmaktadır.



Şekil 5.6. Bir Margolus bloğunda taneciklerin ve örgü yönlerinin işaretlenmesi

Yukarıdaki şekilde tanımlanan gösterim kullanılarak, Margolus bloğunda a ile gösterilen bir taneciğin ilerleme denklemi,

$$\langle a(\vec{r}, t+1) \rangle = p_0^2 \langle a(\vec{r}, t) \rangle + p_0 p_1 \left[\langle b(\vec{r}, t) \rangle + \langle c(\vec{r}, t) \rangle + \langle b(\vec{r} + \vec{e}_3, t) \rangle + \langle c(\vec{r} + \vec{e}_2, t) \rangle \right] + p_1^2 \left[\langle a(\vec{r} + \vec{e}_2, t) \rangle + \langle a(\vec{r} + \vec{e}_3, t) \rangle + \langle d(\vec{r} + \vec{e}_2, t) \rangle + \langle d(\vec{r} + \vec{e}_3, t) \rangle \right] \quad (5.1)$$

olarak elde edilir. Benzer denklem b, c ve d için de geçerlidir. Margolus bloğundaki tanecik yoğunluğu ise

$$P(\vec{r}, t) = \langle a(\vec{r}, t) \rangle + \langle b(\vec{r}, t) \rangle + \langle c(\vec{r}, t) \rangle + \langle d(\vec{r}, t) \rangle \quad (5.2)$$

olarak tanımlanır . Taylor açılımı yapılarak sürekli limitde ve eğer α , örgü aralığı ve τ automatonun bir iterasyon adımına karşılık gelen zaman aralığı ise

$$\langle x(\vec{r} + \vec{e}_i, t) \rangle = \langle x(\vec{r}, t) \rangle + \alpha(\vec{e}_i \cdot \nabla) \langle x(\vec{r}, t) \rangle + \frac{1}{2} \alpha^2 (\vec{e}_i \cdot \nabla)^2 \langle x(\vec{r}, t) \rangle + \dots \quad (5.3)$$

ve

$$\langle x(\vec{r}, t + 1) \rangle = \langle x(\vec{r}, t) \rangle + \tau \partial_t \langle x(\vec{r}, t) \rangle + \frac{1}{2} \tau^2 \partial_t^2 \langle x(\vec{r}, t) \rangle + \dots \quad (5.4)$$

olur , τ nun ikinci veya daha yüksek kuvvetini içeren terimler ihmal edildiğinde,

$$\frac{\partial P(\vec{r}, t)}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot [D \vec{\nabla} P(\vec{r}, t) + A \vec{J}(\vec{r}, t)] \quad (5.5)$$

taneciklerin genel ilerleme denklemi elde edilir; burada $D = \frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{\tau} p_1$ ve

$A = \frac{\alpha}{\tau} p_0 p_1$ dir. Eşitlik 5.5, daha önce Eşitlik 2.10 ile verilen difüzyon denklemi ile aynı değildir; ilave terim $A \vec{J}$ mevcuttur ve $\vec{J}$, Margolus bloğu içindeki taneciklerin akısını ifade etmektedir. Bu akıyı analitik olarak hesaplamak zordur ve sayısal sonuçlara nasıl etki edeceği ancak simülasyon sonucunda açıklığa kavuşabilir.

Bu çalışmanın dayandığı algoritma ve bilgisayar programının yukarıdaki çalışmadan farklılıkları şunlardır: Bir Margolus bloğu için mümkün olan üç dönme işlemine de $(+\pi/2)$ (saat yönünde) , $(-\pi/2)$ (saat yönüne tersine) ve 0 radyan) eşit şans verilmektedir. Difüzyon algoritması ve rasgele sayı üretici Fortran 77 diliyle programlanmıştır.

5.2 Diğer Difüzyon Modelleri

5.2.1 Rasgele Yürüyüş [14]

Bu modelde d-boyutlu uzaydaki herhangi bir örgüde bir taneciğin hareketi şöyle sağlanır: Tanecik bir zaman adımı, bir önceki zaman adımından bağımsız olmak üzere, rasgele olarak seçilen en yakın komşusuna sıçratılır. Taneciğin t adım sonra taşındığı ortalama uzaklık aşağıda çıkarılmaktadır:

Tanecik $t = 0$ anında örgünün herhangi bir noktasından harekete başlasın. t adım sonra $\vec{r}$ konum vektörü ile gösterilen bir noktaya ulaşır:

$$\vec{r}(t) = a \sum_{\tau=1}^t \vec{e}_{\tau} \quad (5.6)$$

burada τ , taneciğin örgü üzerinde örgü sabiti a , kadar sıçraması için gerekli zaman, $\vec{e}_{\tau}$ ise τ uncu adımda hareket yönünü belirleyen birim vektördür. t adım (örgü üzerindeki τ ların toplamı) sonra taneciğin aldığı ortalama mesafe Eşitlik 5.6 dan

$$\langle r^2(t) \rangle = a^2 \sum_{\tau, \tau'=1}^t \langle \vec{e}_{\tau} \cdot \vec{e}_{\tau'} \rangle = a^2 t + \sum_{\tau \neq \tau'} \langle \vec{e}_{\tau} \cdot \vec{e}_{\tau'} \rangle \quad (5.7)$$

olur. Farklı adımlarda τ ve τ' birbirlerinden bağımsız olduklarından $\langle \vec{e}_{\tau} \cdot \vec{e}_{\tau'} \rangle = \delta_{\tau\tau'}$, sağlanır ve

$$\langle r^2(t) \rangle = a^2 t \quad (5.8)$$

elde edilir. Bu eşitlik, D difüzyon katsayısı, d ise örgünün bulunduğu uzay boyutu olmak üzere

$$\langle r^2(t) \rangle \approx 2dDt \quad (5.9)$$

şeklinde de ifade edilebilir.

5.2.2 Örgü Gazı [3]

$z = 0$ daki kaynaktan örgüye taşınan taneciklerin difüzyonu, bir önceki adımdan bağımsız olarak, her bir taneciğin $1/k$ ihtimaliyeti ile rasgele seçilen en yakın bir komşusuna atlatılması ile sağlanır[4]. Burada k komşu sayısı olup kare örgü için $k = 4$ tür. Bu modelde her bir göz için bir rasgele sayı üretildiğinden dolayı, aşırı ölçüde bilgisayar zamanı gerekmektedir. Bundan dolayı Kaynak 3 te yukarıdaki model yerine , Fick'in II. kanununun, taneciğin bir t anında kaynaktan z uzaklığında bulunma ihtimaliyetini veren çözümünden

$$P(z, t) = \operatorname{erfc}\left(\frac{z}{\ell_d}\right) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{z/\ell_d} \exp(-u^2) du$$

faydanılarak, bir t anında örgüdeki tanecik dağılımı elde edilmektedir: Bir t anında z satırındaki her bir hücre için 0 ile 1 arasında bir rasgele sayı üretilir. Eğer bu sayı $P(z,t)$ den küçük ise o göze tanecik yerleştirilir, değil ise o göz boş bırakılır, ve böylece taşınan taneciklerin bu t anındaki konumları elde edilir.

Her iki modelde de iki tanecik aynı gözde bulunmamak şartı ile tanecikler arasında itme ve çekme etkileşimleri ihmal edilerek, veya etkileşmeye izin verilerek simülasyon yapılabilir [5] .

5.2.3 Chopard - Droz - Kolb Cellular Automatonı - II [10]

Bu modeldeki kurala göre, bir örgü noktasına gelen bir tanecik aynı yönde yoluna devam edebilir (0 radyanlık örgü dönüşü), ya da geliş doğrultusu ile $\pi/2$ radyan ($\pi/2$ radyanlık örgü dönüşü), $3\pi/2$ radyan ($3\pi/2$ radyanlık örgü dönüşü), ve π radyan (π radyanlık örgü dönüşü) açı yaparak, sırasıyla, p_0, p_1, p_2 ve p_3 ihtimaliyeti ile saçılabilir. Bu kurala dayanılarak elde edilen diferansiyel denklemde, Fick'in ikinci kanununa ilave olarak, tanecik yoğunluğunun zamana göre ikinci türevi ortaya çıkmaktadır. Küçük difüzyon parametreleri için bu ek terimin Fick' in II. kanununa katkısı ihmal edilebilecek kadar küçük olmakta, ve simulasyon sonuçları Fick' in II. kanununa uymaktadır. Bu modelde de iki tanecik aynı gözde bulunmamak şartı ile tanecikler arasında itme ve çekme etkileşimleri ihmal edilmektedir.

BÖLÜM 6

BULGULAR VE TARTIŞMA

Algoritmanın denenmesi ve sonsuz örgüye ne kadar yaklaşıldığının tesbit edilebilmesi için temel alınabilecek iki nicelik, perkolasyon eşiği p_c ve dinamik üs ζ olup sonsuz kare örgüleri için $p_c = 0.59275 \pm 0.00003$ [32] ve $\zeta = 2$ [5] dir. Algoritma aynı olmakla beraber simülasyonda kullanılan bilgisayar programı, Cellular Automaton Makinesinden (CAM-6) farklı olduğu için, Chopard ve arkadaşlarının hesaplamaları[8] yinelenmektedir; hesaplama sonuçları bilgisayar programının doğruluğunu göstermektedir.

Sonsuz örgüyü temsil edebilecek, ve mümkün olduğunca diğer çalışma hassasiyetlerine yakın sonuçlar verebilecek sonlu örgüyü tesbit edebilmek için, simülasyonlar, örgünün difüzyon yönüne dik kenarı (L_y) ve tuzanın kaynağa uzaklığı (L_z) sistemli biçimde değiştirilerek tekrarlanmaktadır. Bu simülasyonlar sonunda elde edilen perkolasyon eşiği p_c ve dinamik üs ζ için değerler Çizelge 3 te verilmektedir. Hesaplamalardan, $L_y \times L_z = 256 \times 512$ örgüsünün, sonsuz örgüyü yeterli ölçüde temsil edebileceği sonucuna varılmıştır. Bu örgüde elde edilen değerler, Chopard ve arkadaşlarının aynı algoritma ile (256x256 örgüsü için) hesapladıkları değerlerden daha hassas olup, değerleri iyi bilinen daha başka niceliklere, α_σ , α_N , β , ν , sonsuz kümenin fraktal boyutu, difüzyon cephesinin fraktal boyutu D_f ve difüzyon parametresi D , karşı da denenmektedir. Bu denemeler, diferansiyel denkleme gelen ilave terimin farklı niceliklere getirebileceği katkıdaki belirsizlikten dolayı, gereklidir.

Çizelge 6.1 Farklı büyüklükteki örgüler için perkolasyon eşiği, p_c , ve dinamik üs için $1/\zeta$ değerleri

$L_y = 16$

L_z	p_c	$1/\zeta$
16	0.636 ± 0.037	0.5548 ± 0.0105
32	0.636 ± 0.033	0.5097 ± 0.0030
64	0.619 ± 0.023	0.5082 ± 0.0012
128	0.606 ± 0.037	0.5011 ± 0.0012
256	0.604 ± 0.042	0.5059 ± 0.0005
512	0.596 ± 0.039	0.5011 ± 0.0004

$L_y = 32$

L_z	p_c	$1/\zeta$
16	0.638 ± 0.025	0.5146 ± 0.0087
32	0.624 ± 0.028	0.5064 ± 0.0042
64	0.613 ± 0.026	0.5073 ± 0.0010
128	0.606 ± 0.026	0.5064 ± 0.0008
256	0.607 ± 0.025	0.5072 ± 0.0005
512	0.594 ± 0.027	0.5007 ± 0.0003

$L_y = 64$

L_z	p_c	$1/\zeta$
32	0.613 ± 0.020	0.5004 ± 0.0029
64	0.599 ± 0.019	0.5082 ± 0.0010
128	0.596 ± 0.021	0.5012 ± 0.0010
256	0.599 ± 0.019	0.5043 ± 0.0005
512	0.593 ± 0.019	0.5001 ± 0.0003

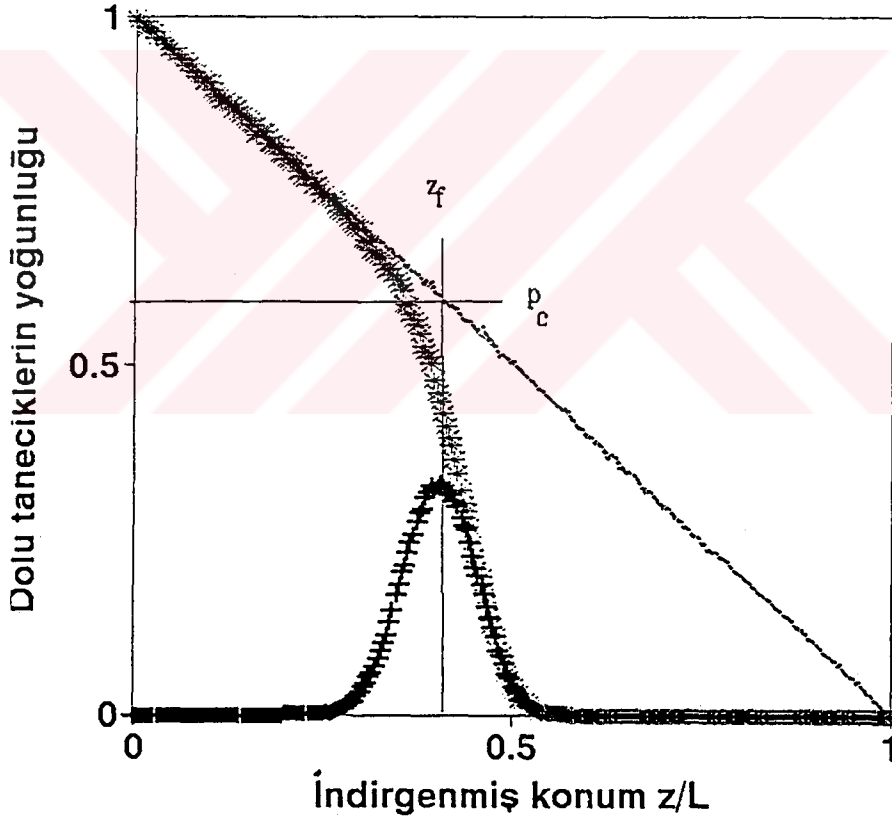
$L_y = 128$

L_z	p_c	$1/\zeta$
64	0.613 ± 0.012	0.5061 ± 0.0010
128	0.593 ± 0.014	0.5046 ± 0.0010
256	0.598 ± 0.014	0.5024 ± 0.0031
512	0.594 ± 0.014	0.5004 ± 0.0003

$L_y = 256$

L_z	p_c	$1/\zeta$
128	0.600 ± 0.010	0.5063 ± 0.0010
256	0.595 ± 0.010	0.5039 ± 0.0004
512	0.593 ± 0.010	0.5002 ± 0.0003

Herbir satırda verilen değerler on tane farklı başlangıç şartı ile elde edilen sonuçların ortalamaları olup yanlarındaki değerler ise standart sapmalarıdır[33]. Bir örnek için p_c nin değeri şöyle elde edilmektedir: Tanecikler sistemi kararlı hale geldikten sonra her bin simülasyon adımında bir defa, ortalama cephe konumundaki yoğunluktan (Şekil 6.1) p_c ölçümü yapılmakta ve bunların ortalaması o örnek için p_c değerini oluşturmaktadır.

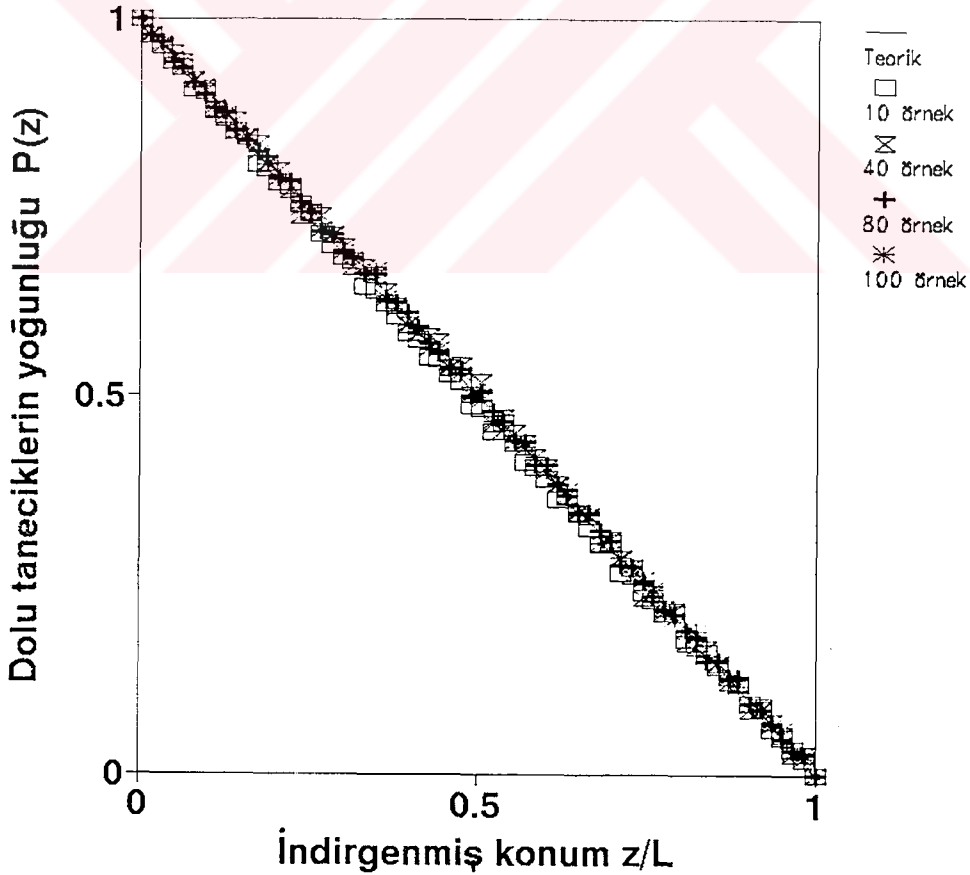


Şekil 6.1. $L_y \times L_z = 256 \times 512$ örgüsü için $P(z)$, $P_\infty(z)$ ve $P_f(z)$ nin indirgenmiş konum z/L_y ile değişimi. Analitik sonuç (düz çizgi), $P_\infty(z)$ (*), $P_f(z)$ (+) ve $P(z)$ (noktalı çizgi).

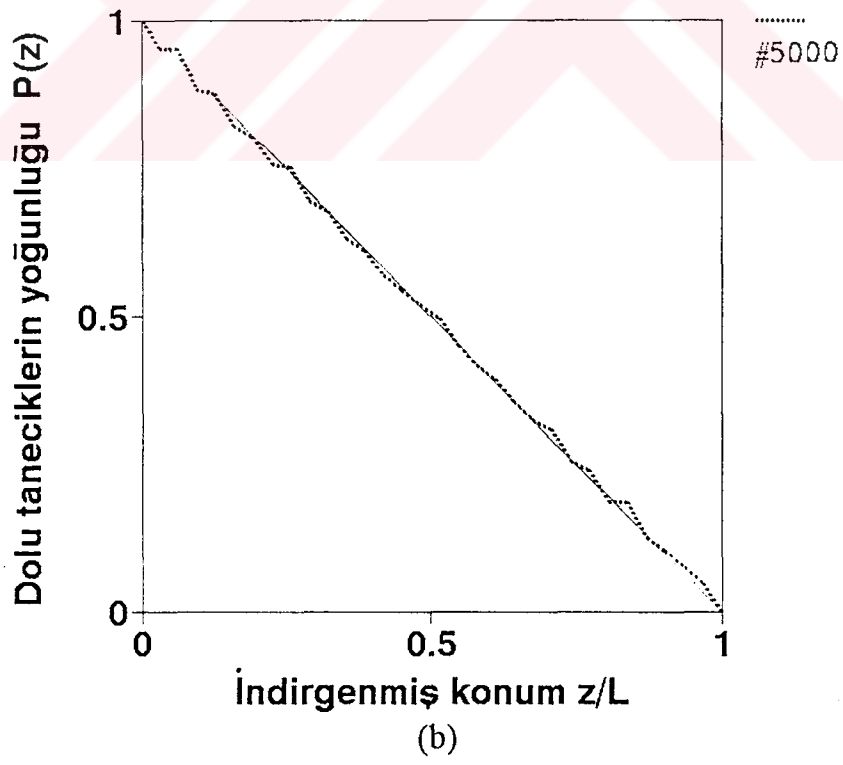
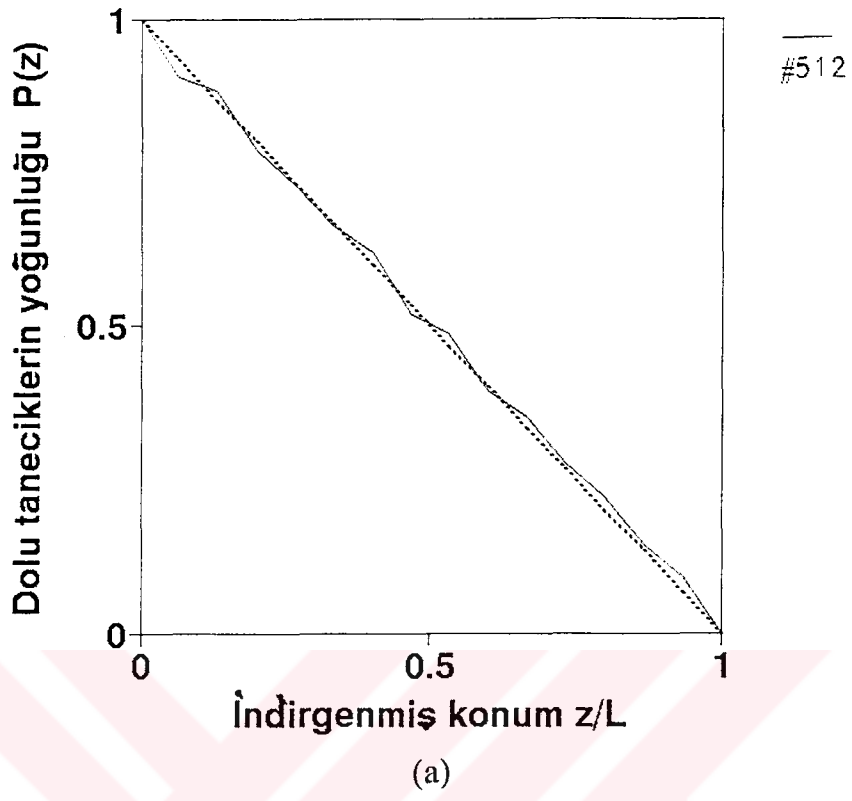
Bir tane örnek için $\frac{1}{\zeta}$ nın değeri ise Eşitlik 2.30 ile verilen denklemin log-log grafiğinin eğiminden elde edilmektedir (Şekil 6.10).

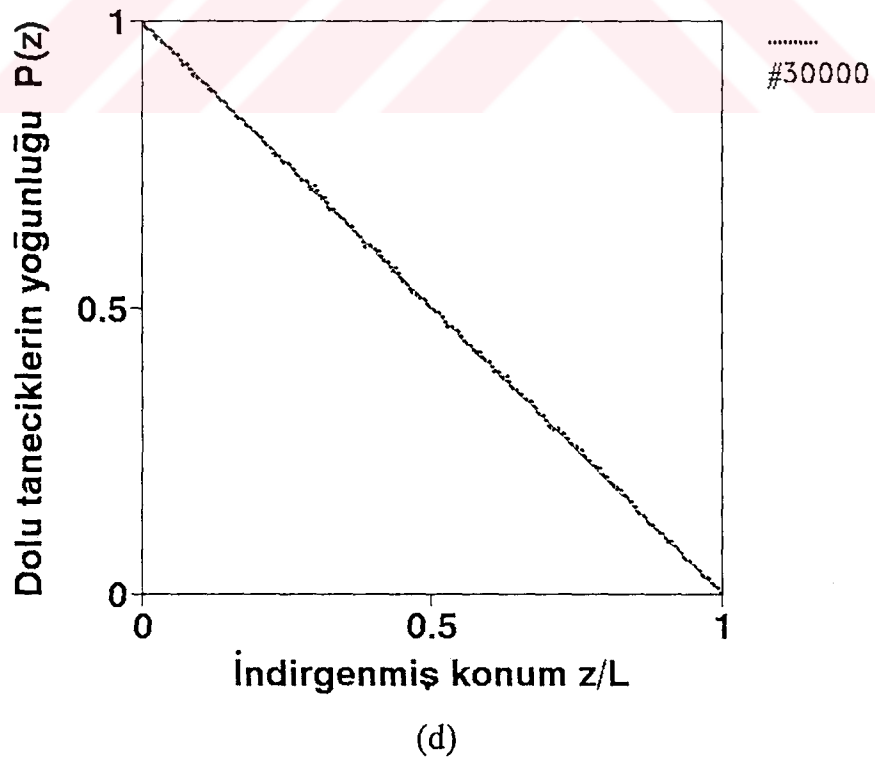
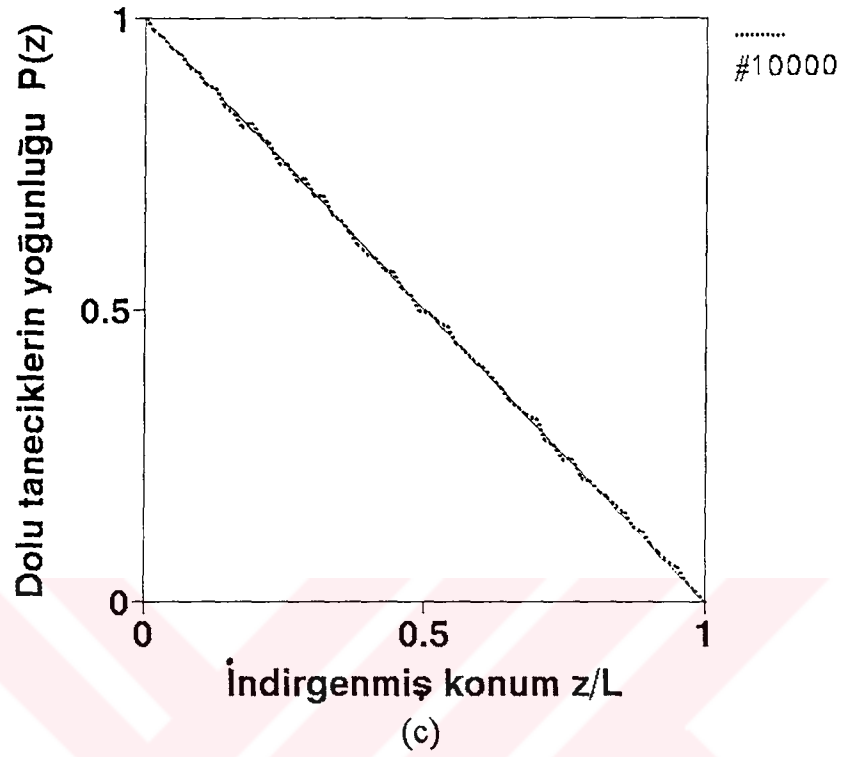
6.1 Kararlı Durumda Yoğunluk Fonksiyonu

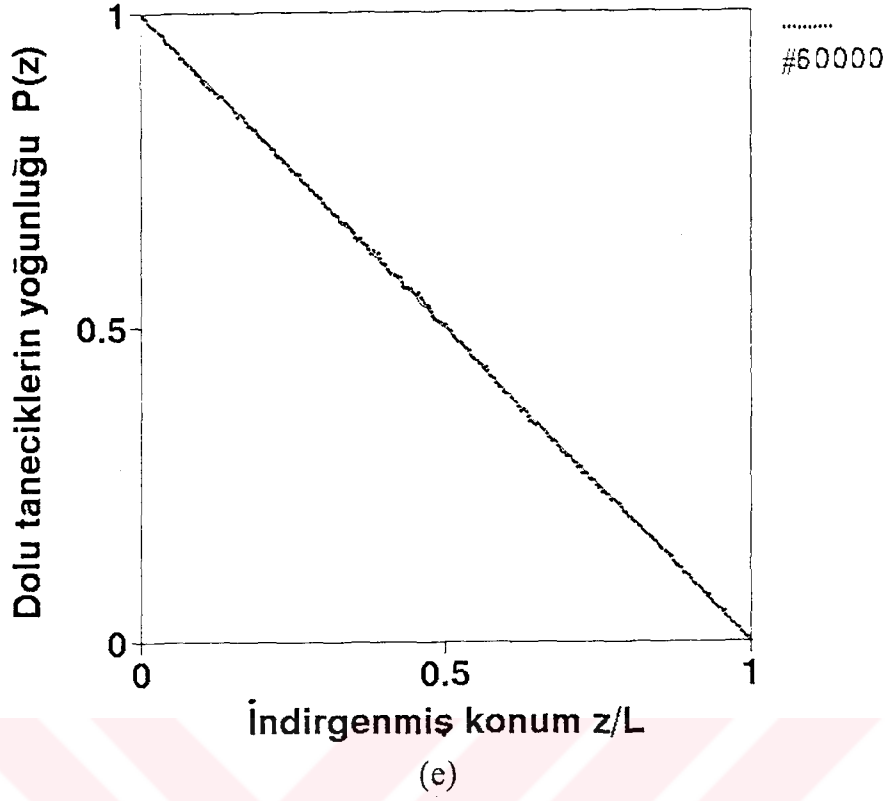
Kararlı yoğunluk durumunda, örnek sayısının sonuç üzerine etkisi $L_y \times L_z = 64 \times 64$ örgüsü için Şekil 6.2 de gösterilmektedir. Kararlı yoğunluk durumunda yoğunluk Eşitlik 2.22 ile hesaplanmaktadır. Kararlı yoğunluk fonksiyonunun örgü büyüklüğüne göre davranışı Şekil 6.3 de $L_y \times L_z = 16 \times 16$, 32×32 , 64×64 , 128×128 , 256×256 örgüleri için verilmektedir. Herbir örgü için 100 örnek kullanılmıştır.



Şekil 6.2. $L_y \times L_z = 64 \times 64$ örgüsü için kararlı yoğunluk fonksiyonunun örnek sayısına göre davranışı.



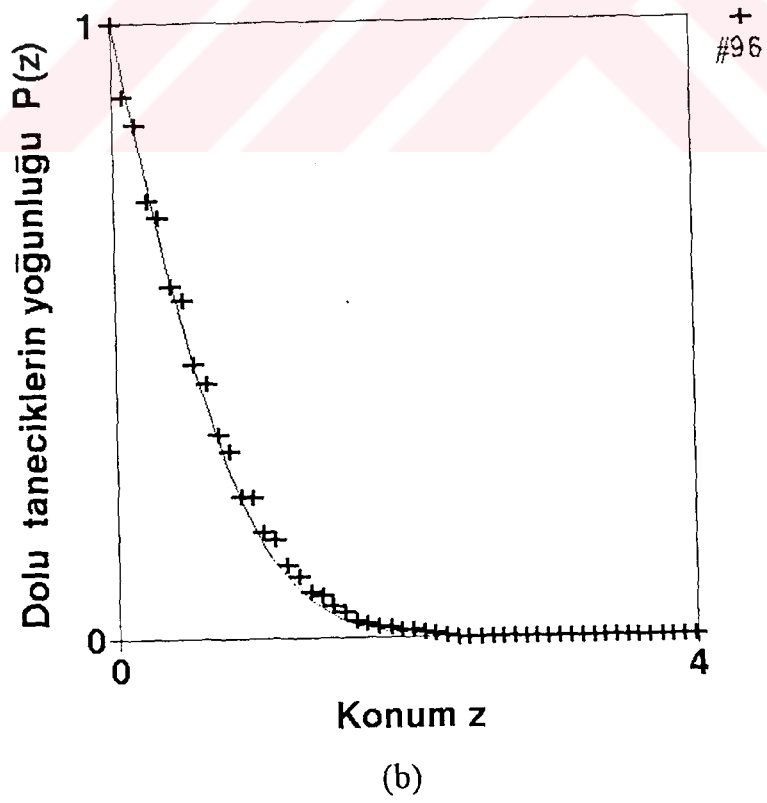
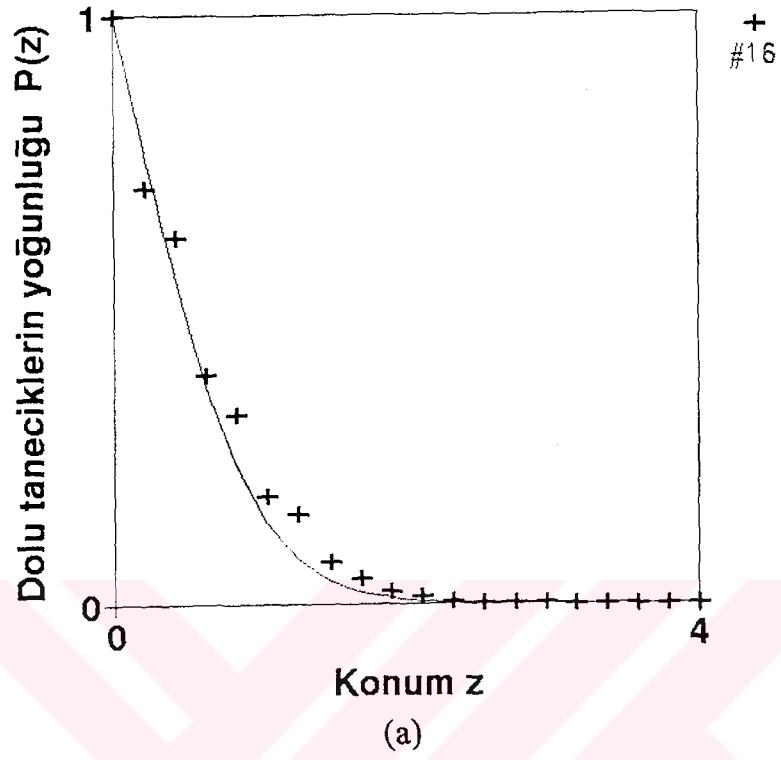


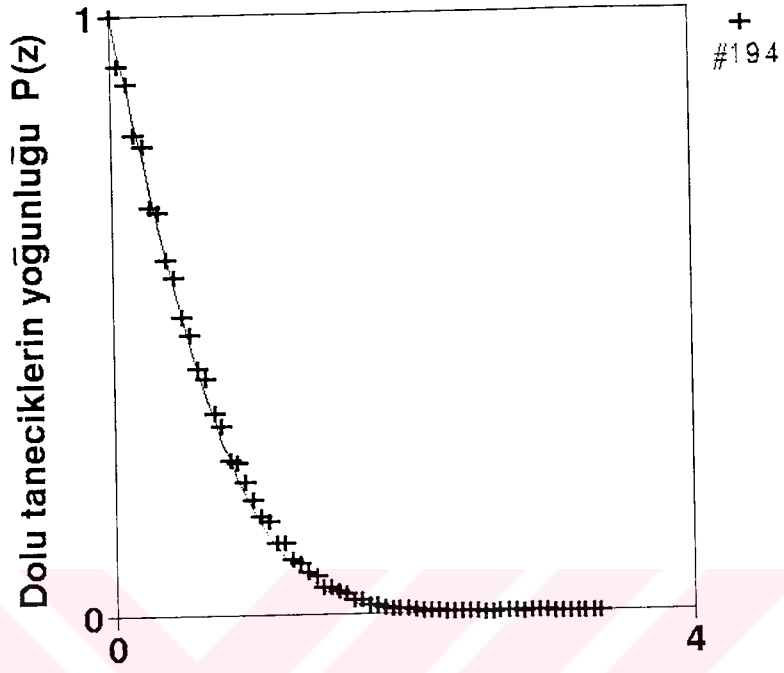


Şekil 6.3. Farklı büyüklükte örgüler için kararlı yoğunluk fonksiyonu. a) $L_y \times L_z = 16 \times 16$, b) $L_y \times L_z = 32 \times 32$, c) $L_y \times L_z = 64 \times 64$, d) $L_y \times L_z = 128 \times 128$, e) $L_y \times L_z = 256 \times 256$. Düz çizgi analitik sonucu göstermektedir

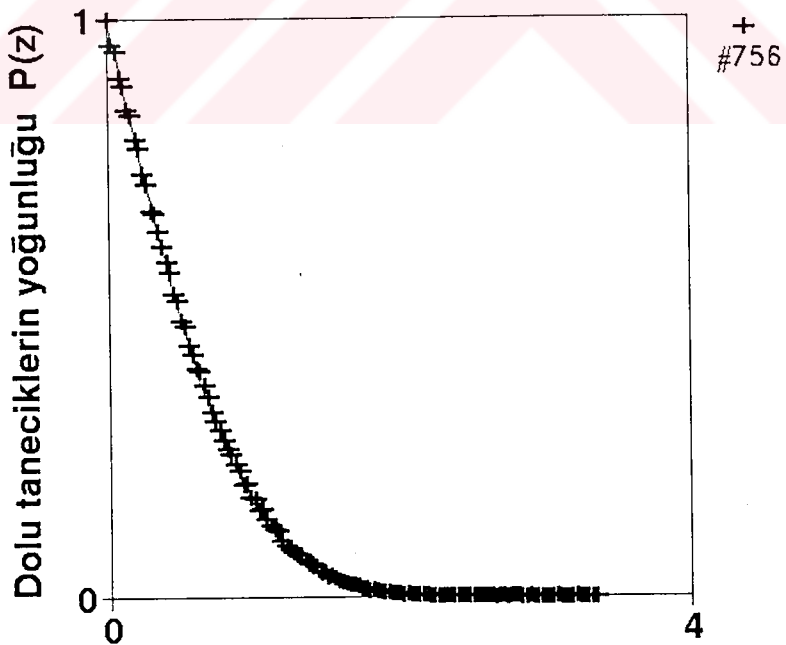
6.2 Tuzağın Sonsuzda Olduğu Durumda veya Küçük Zaman Adımlarında Yoğunluk Fonksiyonu

Taneciklerin tuzağa ulaşamadığı küçük zaman adımlarında yoğunluk, Eşitlik 2.28 ile hesaplanmaktadır. Yoğunluk fonksiyonunun örgü büyüklüğüne göre davranışı Şekil 6.4 de $L_y \times L_z = 16 \times 16$, 32×32 , 64×64 , 128×128 , 256×256 örgüleri için verilmektedir. Herbir örgü için 100 örnek kullanılmıştır.

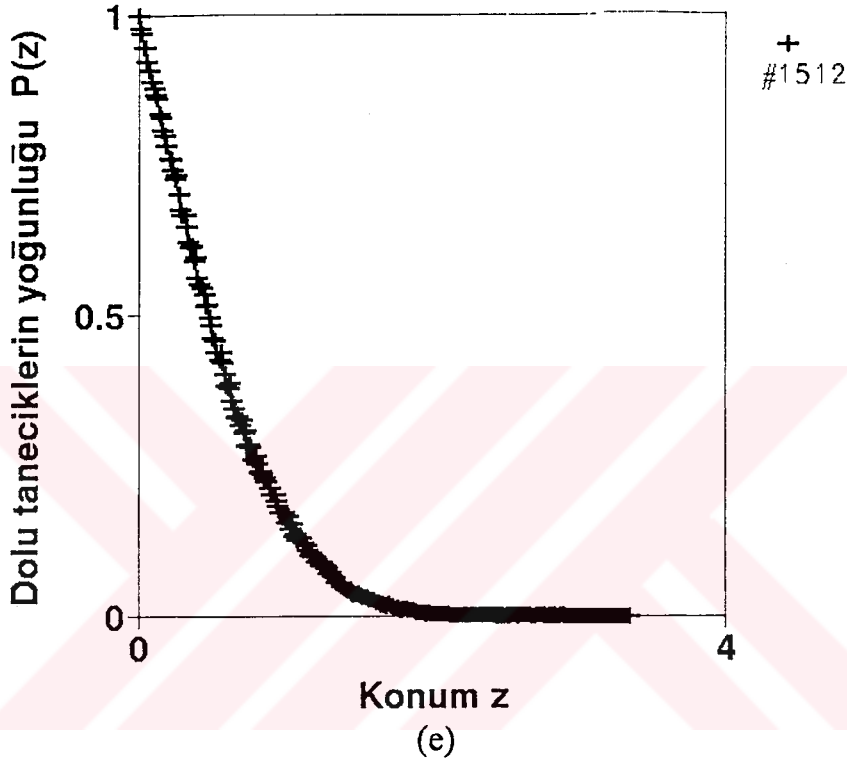




(c)



(d)

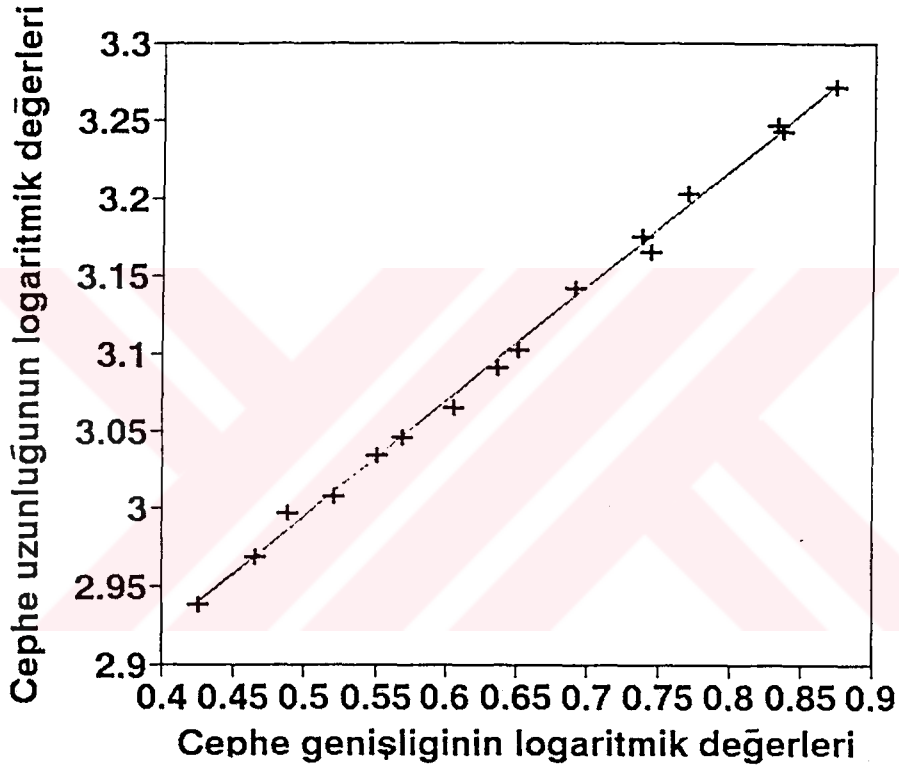


Şekil 6.4. Farklı büyüklükte örgüler için küçük zaman adımlarında yoğunluk fonksiyonu. a) $L_y \times L_z = 16 \times 16$, b) $L_y \times L_z = 32 \times 32$, c) $L_y \times L_z = 64 \times 64$, d) $L_y \times L_z = 128 \times 128$, e) $L_y \times L_z = 256 \times 256$. Düz çizgi analitik sonucu göstermektedir

6.3 Difüzyon Cephesinin Fraktal Boyutunun Hesaplanması

Eşitlik 2.38 in log-log grafiğinin eğiminden (Şekil 6.5) difüzyon cephesinin fraktal boyutu için $D_f = 1.744 \pm 0.003$ değeri elde edilmiştir ($L_y \times L_z = 256 \times 512$

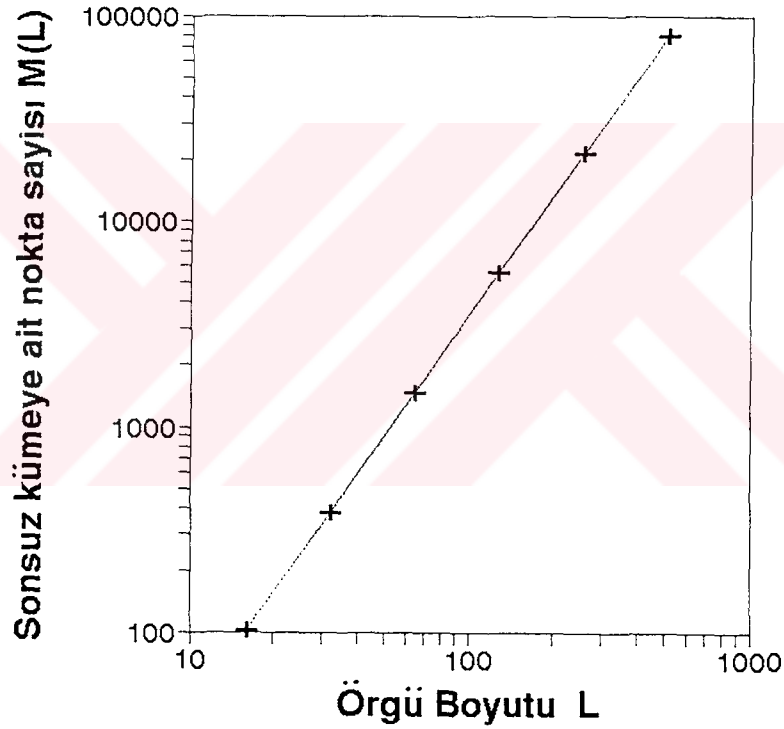
örgüsü için). Chopard ve arkadaşları[8] aynı algoritma ile $L_y \times L_z = 256 \times 256$ örgüsü için $D_f = 1.743 \pm 0.012$, Sapoval ve arkadaşları[3] ise örgü gazı yöntemi ile $L_y \times L_z = 512 \times 512$ örgüsü için $D_f = 1.76 \pm 0.02$ elde etmişlerdir.



Şekil 6.5. $L_y \times L_z = 256 \times 512$ örgüsü için N_f nin σ_f ye karşı log-log grafiği. Grafiğe uydurulan doğrunun eğiminden difüzyon cephesinin fraktal boyutu elde edilmektedir

6.4 Sonsuz Kümenin Fraktal Boyutunun Hesaplanması

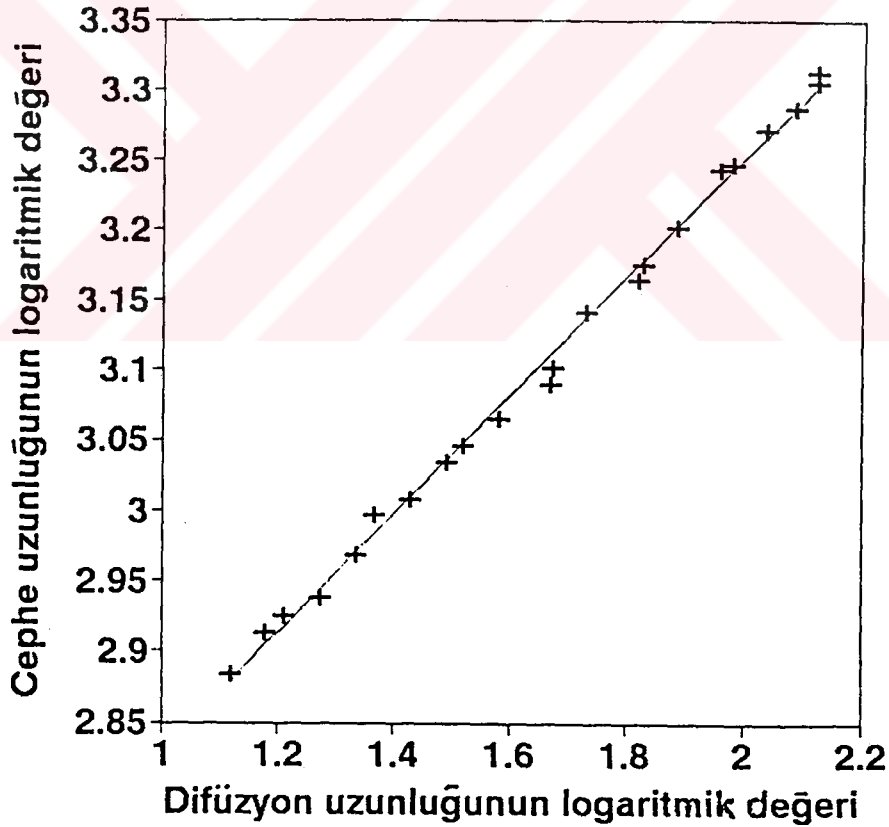
“Sonsuz ” (veya kapsayan) küme için, $M_{\infty}(L_y) \propto L_y^D$ ifadesine göre M_{∞} un L_y ye göre log-log grafiğinin (Şekil 6.6) eğiminden sonsuz kümenin fraktal boyutu için $D = 1.92 \pm 0.02$ değeri elde edilmiştir.



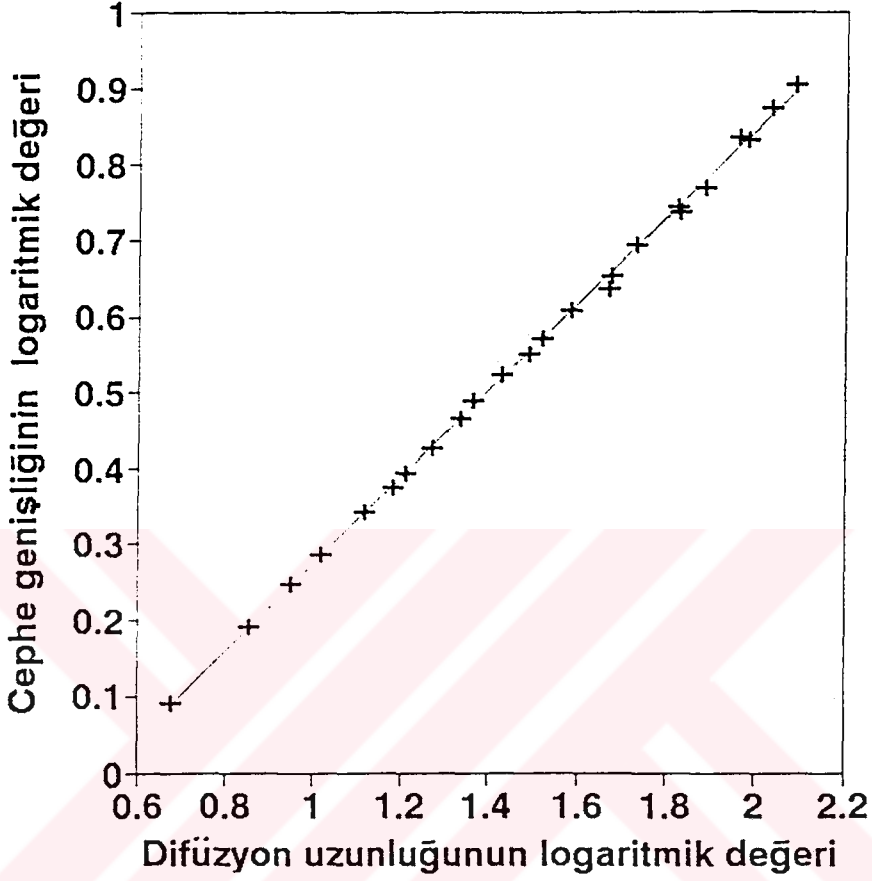
Şekil 6.6. Difüzyonda oluşan sonsuz kümeye ait nokta sayısı M_{∞} un örgünün doğrusal boyutu L_y ye karşı log-log grafiği. Fraktal boyut için $D = 1.92 \pm 0.02$ değeri elde edilmiştir

6.5 Difüzyon Cephesi ile İlgili α_N ve α_σ Üslerinin Hesaplanması

α_N ve α_σ difüzyon cephesi ile ilgili kritik olmayan üslerdir. $L_y \times L_z = 256 \times 512$ örgüsü için α_N üssü Eşitlik 2.43 ün ve α_σ üssü ise Eşitlik 2.44 ün log-log grafiklerinin eğimlerinden hesaplanmaktadır (Şekil 6.7 ve 6.8). Bu örgü için $\alpha_N = 0.423 \pm 0.002$ ve $\alpha_\sigma = 0.574 \pm 0.002$ değerleri hesaplanmıştır. Bu değerler, örgü gazı yöntemi sonuçları $\alpha_N = 0.425 \pm 0.005$ ve $\alpha_\sigma = 0.57 \pm 0.01$ ile uyum içindedir[3].



Şekil 6.7. $L_y \times L_z = 256 \times 512$ örgüsü için difüzyon cephesi uzunluğu N_f nin difüzyon uzunluğu ℓ_d ye göre log-log grafiği. Grafiğe uydurulan doğrunun eğimi α_N yi vermektedir.

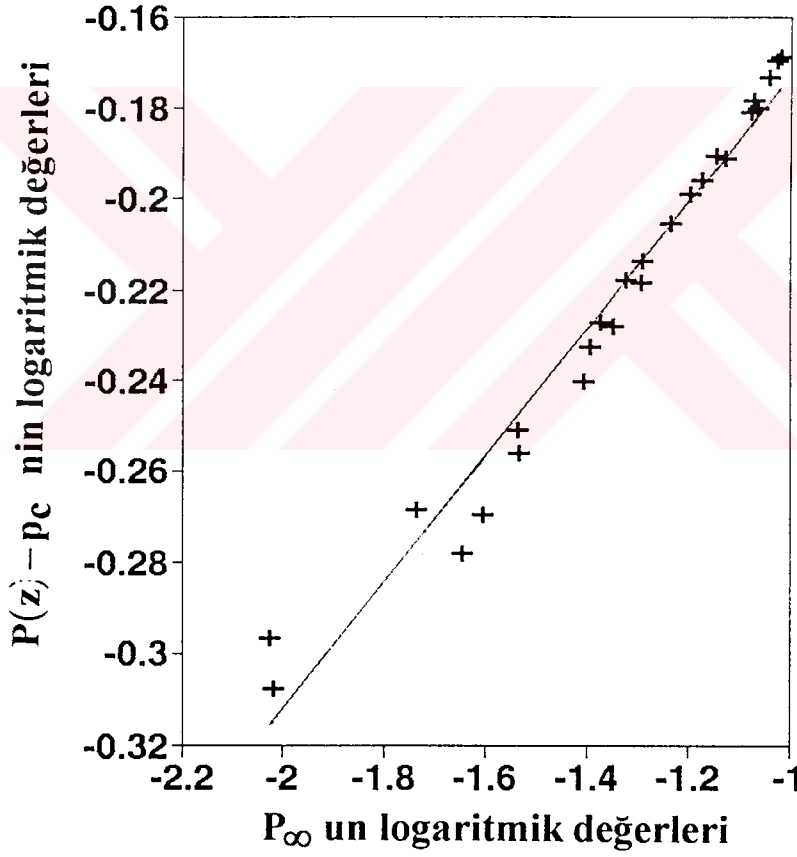


Şekil 6.8. $L_y \times L_z = 256 \times 512$ örgüsü için difüzyon cephesi σ_f nin difüzyon uzunluğu ℓ_d ye göre log-log grafiği. Grafiğe uydurulan doğrunun eğimi α_σ yı vermektedir.

6.6 Perkolasyon Kritik Üsleri ν ve β nin Hesaplanması

α_σ için hesaplanan $\alpha_\sigma = 0.574 \pm 0.002$ değeri Eşitlik 2.55 te kullanılarak $\nu = 1.347 \pm 0.002$ değeri elde edilmiştir. Bu değer perkolasyon teorisindeki $4/3$ değeri ile uyum içindedir[18].

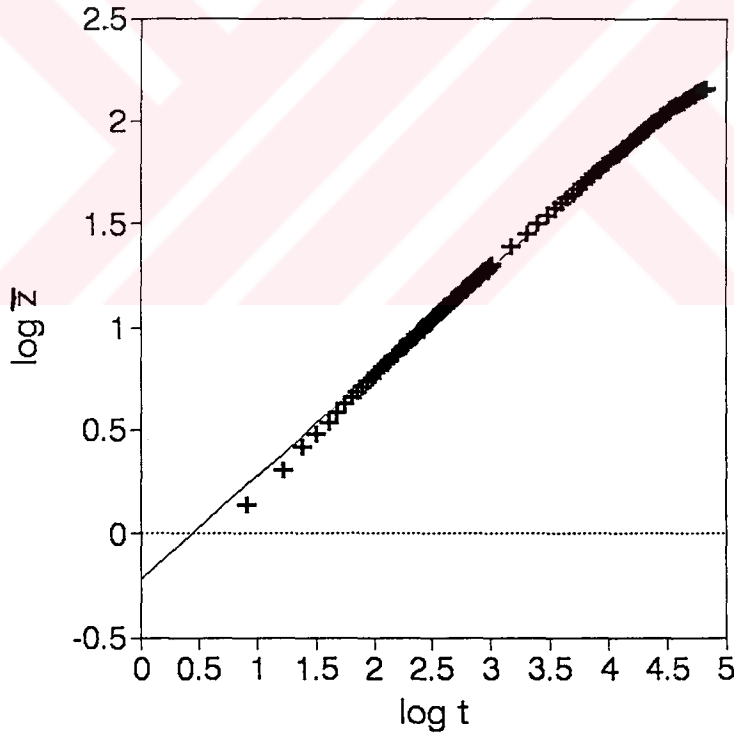
$P(z) \geq p_c$ bölgesinde $P_\infty \propto (P(z) - p_c)^\beta$ dur. P_∞ un $(P(z) - p_c)$ ye göre log-log grafiğinin (Şekil 6.9) eğiminden $\beta = 0.138 \pm 0.002$ olarak hesaplanmıştır ve perkolasyon teorisindeki $5/36$ değeri ile uyumludur [18].



Şekil 6.9. $L_y \times L_z = 256 \times 512$ örgüsü için $P_\infty(z)$ nun $(P(z) - p_c)$ ye göre log-log grafiği. Grafiğe uydurulan doğrunun eğimi kritik üs β yı vermektedir.

6.7 Difüzyon Sabiti D nin Hesaplanması

Difüzyon parametresi , $\bar{z} = \frac{\sqrt{D\pi}}{2} t^{1/\zeta}$ ifadesinin iki tarafının logaritması grafiğe geçirilip, $\bar{z}$ eksenini kestiği noktanın anti-logaritması alınarak elde edilmektedir (Şekil 6.10). Simülasyon yapılan örgüler için sonuçlar Çizelge 6.2 de verilmektedir. Tablodaki sonuçlardan D nin, bütün L_y ler için, L_z arttıkça sabitleştiği görülmektedir. Ancak ulaşacağı son değerin daha fazla kesinleştirilebilmesi için $L_z > 512$ ile simülasyonlara gerek vardır.



Şekil 6.10. Ortalama mesafenin zaman adımına göre log-log grafiği. Grafiğe uydurulan doğrunun eğimi dinamik üs için $1/\zeta$ değerini, doğrunun $\bar{z}$ eksenini kestiği noktanın anti logaritması difüzyon sabitini vermektedir.

Çizelge 6.2. Farklı büyüklükteki örgüler için difüzyon sabiti, D , değerleri.

$L_y=16$

L_z	D
16	0.255 ± 0.008
32	0.368 ± 0.006
64	0.403 ± 0.005
128	0.450 ± 0.007
256	0.421 ± 0.006
512	0.449 ± 0.006

$L_y=32$

L_z	D
16	0.321 ± 0.008
32	0.380 ± 0.007
64	0.404 ± 0.005
128	0.426 ± 0.005
256	0.426 ± 0.004
512	0.455 ± 0.005

$L_y=64$

L_z	D
32	0.395 ± 0.007
64	0.400 ± 0.004
128	0.453 ± 0.005
256	0.448 ± 0.005
512	0.462 ± 0.005

$L_y=128$

L_z	D
64	0.396 ± 0.005
128	0.432 ± 0.005
256	0.443 ± 0.005
512	0.452 ± 0.005

$L_y=256$

L_z	D
128	0.419 ± 0.005
256	0.430 ± 0.005
512	0.465 ± 0.003

BÖLÜM 7

SONUÇLAR

Chopard-Droz-Kolb cellular automatonu ile yapılan simülasyonlarda elde edilen bulguların analizi şu sonuçları vermiştir:

Hesaplanan bütün nicelikler, başka yöntemler ile elde edilen sonuçlar ile hata sınırları içinde uyumlu olduğundan, bu cellular automaton kuralı ile ulaşılan diferansiyel denklemdeki ek terimin, hesaplanan niceliklerin bu aşamadaki hassasiyeti göz önüne alınırsa, simülasyon sonuçlarına etkisi ihmal edilebilir. Buna göre bu cellular automaton diğer difüzyon yöntemlerinin yerine difüzyon cephesi araştırmalarında, dolaylı olarak da perkolasyon araştırmalarında kullanılabilir.

Perkolasyon teorisindeki sonlu örgü ölçekleme bağıntılarının, veya bunların değişikliğe uğratılmışlarının denenebilmesi için, simülasyonu yapılan örgülerde, tuzak kaynaktan daha uzakta ($L_z > 512$) alınarak, hesaplamalardaki hassasiyetin artırılması gerekli görülmektedir.

Hızındaki üstünlüğünden dolayı, bu cellular automaton ile üç[34] ve daha yüksek boyutlu uzaylarda difüzyonun simülasyonunu yapmak ve difüzyon cephesinin özelliklerini açığa çıkarmak mümkün görünmektedir. Ayrıca, başka tip örgülerde simülasyon yapılarak, bu cellular automaton örgü tipi bakımından da denenebilir. İncelenebilecek güncel bir konu olan küme çevrelerinin parçalanması olayının[35] simülasyonu için, mevcut bilgisayar programında, simülasyonun bir adımında kaynaktan örgüye tanecik taşınmasını durdurmak gibi, basit düzenlemeler yapmak yeterli görünmektedir.

KAYNAKLAR

1. Greenberg, J. M. and Hastings, S. P., 1978, Spatial Patterns for Discrete Models of Diffusion in Excitable Media, *SIAM J. Appl. Math.*, 34, 515.
2. Bonomi, E. and Brieger, L. M., 1991, A Stochastic Cellular Automaton Simulation of the Non-linear Diffusion and Diffusion with Reaction, *J. Comput. Phys.* 96,467.
3. Sapoval, B., Rosso, M. and Gouyet, J.F., 1985, The Fractal Nature of a Diffusion Front and the Relation to Percolation, *J. Physique Lett.*, 46,149.
4. Gouyet, J. F., Rosso, M. and Sapoval, B., 1991, Percolation I, *Fractals and Disordered Systems*, Springer - Verlag, Germany.
5. Kolb, M., Gouyet, J. F. and Sapoval, B., 1987, Diffusion of Interacting Particles in a Concentration Gradient: Scaling, Critical Slowing Down and Phase Separation, *Europhys. Lett.*, 3, 33.
6. Gouyet, J.F., Rosso, M. and Sapoval B., 1988, Fractal Structure of Diffusion and Invasion Fronts in Three - dimensional Lattices through the Gradient Percolation Approach, *Phys. Rev. B.*, 37 , 1832.
7. Rosso, M., Gouyet, J.F. and Sapoval, B., 1985, Determination of Percolation Probability from the Use of a Concentration Gradient, *Phys. Rev. B.*, 32 , 6053; Sapoval, B, Rosso, M., Gouyet, J. F. and Colonna, J. F., 1986, Dynamics of the Creation of Fractal Objects by Diffusion and 1/f Noise, *Solid State Ionics*, 18-19, 21
8. Chopard, B., Droz, M. and Kolb, M., 1989, Cellular Automata Approach to Non-equilibrium Diffusion and Gradient Percolation, *J. Phys. A: Math. Gen.* 22, 1609; Chopard, B. and Droz, M., 1990, Cellular Automata Approach to Diffusion Problems, *Cellular Automata and Modeling of Complex Physical Systems*, Editors: Manneville, P, Boccara, N., Vichniac, G.Y. and Bidaux, R, 130, Springer - Verlag, Berlin, Heidelberg.
9. Chopard, B. and Droz, M., 1991, Cellular Automata Model for the Diffusion Equation, *J. Stat. Phys.*, 64, 859.

10. Chopard, B. and Droz, M., 1991, Microscopic Study of the Properties of the Reaction Front in an $A + B \rightarrow C$ Reaction - Diffusion Process, *Europhys. Lett.*, 15,4.
11. Brieger, L.M. and Bonomi, E., 1991, A Stochastic Cellular Automaton Simulation of the Non-linear Diffusion Equation, *Physica D*, 47, 159.
12. Feder, J., 1988, *Fractals*, Plenum Press, New York.
13. Crank, J., 1973, *The Mathematics of Diffusion*, Clarendon Press, Oxford.
14. Bunde, A. and Havlin, S., 1991, Percolation I, *Fractals and Disordered System*, 52, Springer - Verlag, Germany.
15. Poole, O. J. and Salt, D. W., 1996, Monte Carlo Simulation of Long-time Percolation diffusion on $d=2$ Lattices above the Threshold, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 29, 7959.
16. Grossman, T. and Aharony, A., 1986, Structure and Perimeters of Percolation Clusters, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 19, L745; Grossman, T. and Aharony, A., 1987, Accessible external Perimeters of Percolation Clusters, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 20, L1193.
17. Mandelbrot, B. B., 1982, *The Fractal Geometry of Nature*, San Francisco.
18. Stauffer, D., 1985, *Introduction to Percolation Theory*, Taylor and Francis, London.
19. Ma, S. K., 1976, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Benjamin Reading.
20. Bunde, A. and Havlin, S., 1991, Percolation II, *Fractals and Disordered System*, 192, Springer - Verlag, Germany.
21. Stanley, H. E., 1972, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Academic Press, New York.
22. Domb, C. and Lebowitz, J. L., 1972, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Academic Press, New York.

23. Cited in Wolfram, S., 1983, Statistical Mechanics of Cellular Automata, *Rev. Mod. Phys.*, 55,601.
24. Wolfram, S., 1983, Statistical Mechanics of Cellular Automata, *Rev. Mod. Phys.*, 55,601.
25. Ermentrout, G. B. and Edelstein-Keshet, L., 1993, Cellular Automata Approaches to Biological Modeling, *J. Theor. Biol.* 160, 97.
26. Cellular Automata, Proceeding of an Interdisciplinary Workshop, 1984, *Physica 10 D*, 1.
27. Oono, Y. and Kohmoto, M., 1985, Discrete Model of Chemical Turbulence, *Phys. Rev. Lett.*, 55, 2927.
28. Droz, M., Frachebourg, L. and Marques, M., 1991, Critical Phenomena at Surface in a Model of Non-equilibrium Phase transitions, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 24, 2869; Canning, A. and Droz, M., 1990, A Comprasion of Spin Exchange and Cellular Automaton Models for Diffusion - controlled Reactions, *Physica D*, 45, 265; Beney, P., Droz, M. and Frachebourg, L., 1989, On the Critical Behavior of cellular Automata Models of Non-equilibrium Phase Transition, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 23, 3553.
29. Creutz, M., 1986, Deterministic Ising Dynamics, *Ann. Phys.*, 167, 62; Domany, E. and Kinzel, W., 1984, Equivalence of Cellular Automata to Ising Models and Directed Percolation, *Phys. Rev. Lett.*, 53 311; Grinstein, G. and Jayaprakash, C. and Yu He, 1985, Statistical Mechanics of Probabilistic Cellular Automata, *Phys. Rev. Lett.*, 55 2527.
30. Toffoli, T. and Margolus, N., 1987, *Cellular Automata Machine: A New Environment for Modeling*, MIT Press, Cambridge.
31. Hardy, J., de Pazzis, O. and Pomeau, Y., 1976, Molecular Dynamics of a Classical Lattice Gas: Transport Properties and Time Correlation Functions , *Phys. Rev. A.*, 13 , 1949.
32. Ziff, R. M. and Sapoval, B., 1986, The Efficient Determination of the Percolation Threshold by a Frontier - generating Walk in a Gradient,

- J. Phys. A: Math. Gen.*, 19, L1169.
33. Skoog, D. A. and West, D. M., 1982, *Fundamentals of Analytical Chemistry*, Holt - Saunders International Ed., Japan.
34. Eken, M., Turhan, Ş., ve Aktekin, N., 1996, Simulation of Diffusion on a Cellular Automaton in Three Dimensional Space, *3. İstatistik Fizik günleri*, Istanbul; Turhan, Ş., Eken, M. and Aktekin, N., 1996, İki ve Üç Boyutlu Uzayda Difüzyonun Simülasyonu, *VII. Ulusal Nükleer Bilimler ve Teknoloji Kongresi*, Istanbul; Eken, M., Turhan, Ş. ve Aktekin, N., 1997, Effect of Varying the Rules for the Cellular Automaton of Chopard - Droz - Kolb for Diffusion, *4. İstatistik Fizik günleri*, Istanbul, sunulacak.
35. Debierre, J. M. and Bradley, R. M., 1996, Fragmentation of Percolation Cluster Perimeters, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 29, 2337; Gyure, M. F. and Edwards, B. F., 1992, Fragmentation of Percolation Clusters at the Percolation Threshold, *Phys. Rev. Lett.*, 68 , 2692; Edwards, B. F., Gyure, M. F. and Ferer, M., 1992, Exact Enumeration and Scaling for Fragmentation of Percolation Clusters, *Phys. Rev. A* ,46 , 6252.

EK1

SÖZLÜK

Percolation: Perkolasyon

Bond percolation: Bağ perkolasyonu

Site percolation: Hücre perkolasyonu

Spontaneous magnetization : Kendiliğinden mıknatıslanma

Percolation threshold: Perkolasyon eşiği

Infinite cluster, spanning cluster: Sonsuz küme, kapsayan küme

Fractal dimension: Fraktal boyut

Perimeter, hull: Çevre

Diffusion front: Difüzyon cephesi

Random number genarator: Rastgele sayı üretici

Reaction-diffusion: Tepkime – difüzyon

Makroskopik boyut: Görünür boyut

Hard-core exclusion: Aynı noktada bulunmama şartı

Colloid: Kolloid

Stationary density: Kararlı yoğunluk

Error function: Hata fonksiyonu

Complementary function: Tamamlayıcı fonksiyon

Dimensionality: Uzay boyutu

Linear dimension: Örgü boyutu

Node: Örgü noktası

Cell, site: Örgü gözü, örgü hücresi

Configuration: Konfigürasyon

Disordered: Düzensiz

Complex: Karmaşık

Magnetic susceptibility: Mıknatıslanma alınganlığı

EK2

```

C*****
C***** CA İLE DİFÜZYON SİMULASYONU *****
C** BU PROGRAMDA MARGOLUS KOMŞULUĞUNA ****
C** DAYALI CELLULAR AUTOMATON YÖNTEMİ*****
C**          KULLANILDI          *****
C*****
  IMPLICIT INTEGER (A-X)
  PARAMETER (DM=256,CM=256,NUM=100,TAH=1,ITER=30000)
  DIMENSION AM(DM,CM),BM(DM,CM),LADS(0:DM-1),LADS3(DM)
  DIMENSION PM1(DM),SSAY(TAH)
  DIMENSION LADEN(NUM,TAH,0:DM-1)
  DIMENSION HULDEN(NUM,TAH,0:DM-1)
  DIMENSION LADEN1(NUM,TAH,DM),HULDEN1(NUM,TAH,DM)
  REAL SIGF(NUM,TAH),PC(NUM,TAH)
  REAL LAORT(TAH,0:DM-1),ZORTF(NUM,TAH)
  REAL NF(NUM,TAH),HUORT(TAH,0:DM-1)
  REAL ZOFT(TAH),SIGFT(TAH),PM(0:DM-1)
  REAL HUTOP(TAH,0:DM-1),LATOP(TAH,0:DM-1)
  REAL PCR(TAH),PCT(TAH),LDF(NUM,TAH)
  REAL ZOFR(TAH),SIGFR(TAH)
  REAL LDFT(TAH),LDFR(TAH),NFT(TAH)
  DIMENSION PSON(DM),SONDEN1(NUM,TAH,DM)
  DIMENSION SONDEN(NUM,TAH,0:DM-1)
  REAL SONORT(TAH,0:DM-1),SONTOP(TAH,0:DM-1)
  INTEGER ZH1(0:DM-1)
  COMMON NM,TM,MM,FM,DM,CM,TAH,NOKTA,NUM
  OPEN(72,FILE='ORGU.DAT')
  OPEN(88,FILE='CEPHE.DAT')
  HM=DM-1
  DO I=0,HM
    ZH1(I)=I
  ENDDO
  ISAYI=0
C
  DO 3 BUM=1,NUM
    DO K=0,HM
      LADS(K)=0
      PM(K)=0
    ENDDO
    NOKTA=0
C

```

C BAŞLANGIÇTA (T=0), Z=0 KAYNAK

C

```
DO 15 I=1,DM
DO 15 J=1,CM
AM(I,J)=0
LADS3(I)=0
PSON(I)=0
IF (I.EQ.DM) AM(DM,J)=1
BM(I,J)=0
```

1 CONTINUE

C

```
DO 18 SAY=1,ITER
CALL BLOK(AM)
CALL KAYDIRMA(BM,AM)
CALL BLOK(BM)
CALL IDURUM(BM,AM)
DO 116 K=0,HM
LADS(K)=0
```

116 PM(K)=0

C

C HER ZAMAN ADIMINDAN SONRA TUZAK İLE KAYNAK

C OLUŞTURULDU

C

```
DO 125 I=1,DM
DO 125 J=1,CM
LADS3(I)=0
PSON(I)=0
IF (I.EQ.1) AM(I,J)=0
IF (I.EQ.DM) AM(I,J)=1
```

125 CONTINUE

C

```
IF (SAY.EQ.30) GOTO 40
GOTO 18
```

40 CALL YOGUN(AM,LADS3,LADS)

CALL PSONSUZ(AM,PSON)

CALL CEPHE(AM,PM1)

DO K=DM,1,-1

PM(DM-K)=PM1(K)

ENDDO

ISAYI=ISAYI+1

NOKTA=NOKTA+1

SSAY(NOKTA)=SAY

DO I=1,DM

LADEN1(BUM,NOKTA,I)=LADS3(I)

```

    SONDEN1(BUM,NOKTA,I)=PSON(I)
    HULDEN1(BUM,NOKTA,I)=PM1(I)
    ENDDO
    CALL HES(ZH1,PM,ZORTF,NF,PC,SIGF,BUM,LDF)
    PC(BUM,NOKTA)=PC(BUM,NOKTA)/CM
18 CONTINUE
3 CONTINUE
C
    DO I=1,NUM
    DO J=1,NOKTA
    DO K=DM,1,-1
    LADEN(I,J,DM-K)=LADEN1(I,J,K)
    SONDEN(I,J,DM-K)=SONDEN1(I,J,K)
    HULDEN(I,J,DM-K)=HULDEN1(I,J,K)
    ENDDO
    ENDDO
    ENDDO
C
    DO I=1,NOKTA
    DO J=1,NUM
    DO K=0,HM
    LATOP(I,K)=LATOP(I,K)+LADEN(J,I,K)
    SONTOP(I,K)=SONTOP(I,K)+SONDEN(J,I,K)
    HUTOP(I,K)=HUTOP(I,K)+HULDEN(J,I,K)
    ENDDO
    ENDDO
    ENDDO
    DO I=1,NOKTA
    DO J=1,NUM
    ZOFT(I)=ZOFT(I)+ZORTF(J,I)
    SIGFT(I)=SIGFT(I)+SIGF(J,I)
    NFT(I)=NFT(I)+NF(J,I)
    PCT(I)=PCT(I)+PC(J,I)
    LDFT(I)=LDFT(I)+LDF(J,I)
    ENDDO
    ENDDO
C
C ORTALAMALAR
C
    DO I=1,NOKTA
    DO K=0,HM
    LAORT(I,K)=LATOP(I,K)/NUM
    SONORT(I,K)=SONTOP(I,K)/NUM
    HUORT(I,K)=HUTOP(I,K)/NUM

```

```

LAORT(I,K)=LAORT(I,K)/CM
SONORT(I,K)=SONORT(I,K)/CM
HUORT(I,K)=HUORT(I,K)/CM
ENDDO
ENDDO
DO I=1,NOKTA
ZOFR(I)=ZOFT(I)/NUM
SIGFR(I)=SIGFT(I)/NUM
NFR(I)=NFT(I)/NUM
PCR(I)=PCT(I)/NUM
LDFR(I)=LDFT(I)/NUM
ENDDO

```

```

C
C CEPHE İLE İLGİLİ HESAPLARIN KÜTÜĞE YAZDIRILMASI
C
WRITE(88,95)DM,CM,NUM
WRITE(88,74)
DO I=1,NOKTA
WRITE(88,73)SSAY(I),ZOFR(I),SIGFR(I),PCR(I),NFR(I),LDFR(I)
ENDDO
C
C ÖRGÜ İLE İLGİLİ HESAPLARIN KÜTÜĞE YAZDIRILMASI
C
WRITE(72,95)DM,CM,NUM
DO I=1,NOKTA
WRITE(72,49)SSAY(I)
WRITE(72,99)
DO J=0,HM
WRITE(72,87)J,LAORT(I,J),HUORT(I,J),SONORT(I,J)
ENDDO
ENDDO
99 FORMAT(1X,'KONUM',3X,'ORGU
YOGUNLUGU',3X,'CEPHEYOGUNLUGU
+',3X,'S.KUME YOGUNLUGU')
95 FORMAT(/,1X,I4,' X',I4,' AND ORTALAMA ',I3,' ORNEK')
87 FORMAT(1X,I4,10X,F7.5,7X,F7.5,7X,F7.5)
49 FORMAT(1X,'E.STEPS= ',I6)
73 FORMAT(1X,I6,1X,F10.4,1X,F10.4,1X,F10.4,1X,F10.4,1X,F10.4)
74 FORMAT(4X,'E.S',4X,'ZFORT',4X,'SFORT'
+',4X,'PCORT',3X,'NFORT',4X,'LDFORT')
C
STOP

```

```

END
C
C RASTGELE SAYI ÜRETECİ
C SUBROUTINE RANDOM(RADNO)
  INTEGER ISEED,IX,IX1
  INTEGER *2 INP(2),ISP(2),IMP(2)
  EQUIVALENCE (ISEED,ISP),(IX1,IMP),(IX,INP)
  IRGE=2**31-1
  MULT=167807
  ANM=1.0/FLOAT(IRGE)
  IX1=IX1*MULT+1
  ISP(1)=IEOR(INP(2),IMP(1))
  ISP(2)=IEOR(INP(1),IMP(2))
  IX=IAND(IRGE,ISEED)
  RADNO=FLOAT(IX)*ANM
  RETURN
END
C
C2X2 'LİK MARGOLUS BLOKLARINA AYIRMA
C
  SUBROUTINE BLOK(A1)
  IMPLICIT INTEGER (A-X)
  DIMENSION A1(DM,CM)
  COMMON NM,TM,MM,FM,DM,CM,BUM
  NM=2
  FM=1
  S=2
  MM=NM
  TM=1
80 G=A1(NM,MM)+(A1(NM,MM-1))*2+(A1(NM-1,MM))*2**2+
  +(A1(NM-1,MM-1))*2**3
C
  CALL DONME(G,A1)
C
  MM=MM+S
  FM=FM+S
  IF (MM.GT.C1) GO TO 60
  GO TO 80
60TM=1
  MM=2
  FM=1
  TM=TM+NM
  NM=NM+2
  IF (NM.GT.DEH) RETURN

```

```

GO TO 80
END
C
C BLOKLARIN DÖNDÜRÜLMESİ
C
SUBROUTINE DONME(GEM,A2)
IMPLICIT INTEGER (A-X)
INTEGER ZEHRA
REAL Y1,F1,F2,F3,F4
DIMENSION A2(DM,CM),CW(0:15),CCW(0:15)
DIMENSION IM(0:15)
COMMON NM,TM,MM,FM,DM,CM,BUM
DATA CW/0,2,8,10,1,3,9,11,4,6,12,14,5,7,13,15/
DATA CCW/0,4,1,5,8,12,9,13,2,6,3,7,10,14,11,15/
DATA IM/0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15/
F1=0.0/1.0
F2=1.0/3.0
F3=F2+1.0/3.0
F4=F3+1.0/3.0
C
CALL RANDOM(Y1)
DO 135 TUR=0,15
C
IF (Y1.GE.F1.AND.Y1.LT.F2.AND.BUM.GE.1.AND.BUM.LT.25.AND.
+GEM.EQ.TUR) GOTO 181
IF (Y1.GE.F2.AND.Y1.LT.F3.AND.BUM.GE.1.AND.BUM.LT.25.AND.
+GEM.EQ.TUR) GOTO 182
IF (Y1.GE.F3.AND.Y1.LT.F4.AND.BUM.GE.1.AND.BUM.LT.25.AND.
+GEM.EQ.TUR) GOTO 183
C
IF (Y1.GE.F1.AND.Y1.LT.F2.AND.BUM.GE.25.AND.BUM.LT.50.AND.
+GEM.EQ.TUR) GOTO 182
IF (Y1.GE.F2.AND.Y1.LT.F3.AND.BUM.GE.25.AND.BUM.LT.50.AND.
+GEM.EQ.TUR) GOTO 181
IF (Y1.GE.F3.AND.Y1.LT.F4.AND.BUM.GE.25.AND.BUM.LT.50.AND.
+GEM.EQ.TUR) GOTO 183
C
IF (Y1.GE.F1.AND.Y1.LT.F2.AND.BUM.GE.50.AND.BUM.LT.75.AND.
+GEM.EQ.TUR) GOTO 183
IF (Y1.GE.F2.AND.Y1.LT.F3.AND.BUM.GE.50.AND.BUM.LT.75.AND.
+GEM.EQ.TUR) GOTO 181
IF (Y1.GE.F3.AND.Y1.LT.F4.AND.BUM.GE.50.AND.BUM.LT.75.AND.
+GEM.EQ.TUR) GOTO 182
C

```

```

      IF
      (Y1.GE.F1.AND.Y1.LT.F2.AND.BUM.GE.75.AND.BUM.LE.100.AND.
      +GEM.EQ.TUR) GOTO 182
      IF
      (Y1.GE.F2.AND.Y1.LT.F3.AND.BUM.GE.75.AND.BUM.LE.100.AND.
      +GEM.EQ.TUR) GOTO 183
      IF
      (Y1.GE.F3.AND.Y1.LT.F4.AND.BUM.GE.75.AND.BUM.LE.100.AND.
      +GEM.EQ.TUR) GOTO 181
C
      GOTO 135
181ZEHRA=CW(TUR)
      GOTO 135
182ZEHRA=CCW(TUR)
      GOTO 135
183ZEHRA=IM(TUR)
      IDON5=IDON5+1
135CONTINUE
      DO 145 I=NM, TM, -1
      DO 145 J=MM, FM, -1
      BIN=MOD(ZEHRA,2)
      A2(I,J)=BIN
      ZEHRA=ZEHRA/2
145CONTINUE
      RETURN
      END
C
C YOĞUNLUK HESABI
C
      SUBROUTINE YOGUN(A10,LADS1,LADS2)
      IMPLICIT INTEGER (A-X)
      COMMON DM,CM,HM
      DIMENSION LADS1(DM),LADS2(0:HM),A10(DM,CM)
      DO I=1,DM
      DO J=1,CM
      LADS1(I)=LADS1(I)+A10(I,J)
      ENDDO
      ENDDO
      DO I=DM,1,-1
      LADS2(DM-I)=LADS1(I)
      ENDDO
      RETURN
      END
C

```

C LATİS SABİTİ KADAR DIAGONAL KAYDIRMA
C

```
SUBROUTINE KAYDIRMA(B1,A5)
  IMPLICIT INTEGER (A-X)
  COMMON DM,CM
  DIMENSION B1(DM,CM),A5(DM,CM)
  DO 25 J=1,CM-1
    DO 25 I=1,DM
25  B1(I,J)=A5(I,J+1)
    DO 35 I=DM,2,-1
      DO 35 J=1,CM
35  B1(I,J)=B1(I-1,J)
      DO 45 I=1,H1
45  B1(I+1,CM)=A5(I,1)
      DO 55 J=1,CM
55  B1(1,J)=A5(DM,J)
  RETURN
  END
```

C
C ÖRGÜNÜN İLK DURUMU
C

```
SUBROUTINE IDURUM(B2,A6)
  IMPLICIT INTEGER (A-X)
  COMMON DM,CM,HM
  DIMENSION B2(DM,CM),A6(DM,CM)
  DO 65 I=1,DM
    DO 65 J=1,CM
65  A6(I,J)=0
    DO 75 I=2,CM
      DO 75 J=1,DM
75  A6(J,I)=B2(J,I-1)
      DO 86 I=1,HM
        DO 86 J=1,CM
86  A6(I,J)=A6(I+1,J)
        DO 105 J=1,CM
105  A6(D2,J)=B2(1,J)
        DO 115 I=1,H2
115  A6(I,1)=B2(I+1,CM)
  RETURN
  END
```

C
C DİFÜZYON CEPHESİNİN OLUŞTURULMASI
C
SUBROUTINE CEPHE(D,P1)

```

      IMPLICIT INTEGER(A-Z)
      COMMON DM,CM,HM,N,Z,ZR
      DIMENSION D(DM,CM),P1(DM)
      N=DM-1
      Z=CM-1
      DO 52 IK=1,M
      DO 52 JK=1,X
      P1(IK)=0
52  CH(IK,JK)=0
      ZR=0
      DO 23 K=1,M
      IF (D(K,1).EQ.1.AND.D(K,X).EQ.1) GOTO 3000
56 IF (ZR.EQ.1) GOTO 360
      GOTO 23
3000 CALL CEPHE2(D,P1)
      GOTO 56
23 CONTINUE
360 RETURN
      END

```

C
C DİFÜZYON CEPHESİNİN OLUŞTURULMASI
C

```

      SUBROUTINE CEPHE2(HT,P)
      IMPLICIT INTEGER(A-Z)
      COMMON DM,CM,HM,N,Z,ZR
      DIMENSION A(DM,CM),B(DM,CM),E(DM,CM),P(DM)
      DIMENSION HT(DM,CM),EF(DM,CM),HC(DM,CM)
      IS=0
      INK=0
      NY5=0
      NER=0
      I=L
      J=1
      P(I)=P(I)+B(I,J)
      B(I,J)=0
      HC(I,J)=1
12 IF(J.EQ.1.OR.L.EQ.DM.OR.I.EQ.DM) GOTO 4
      IF(B(L-1,CM).EQ.1.AND.B(L,CM).EQ.0) GOTO 14
      IF(B(L,CM-1).EQ.1.AND.B(L,CM).EQ.0.AND.A(I,J).EQ.1) GOTO 38
      IF(B(L,1).EQ.0.AND.B(L,CM).EQ.0.AND.I.EQ.L.AND.B(I-1,J).EQ.0
      +.AND.HT(I-1,J).EQ.1) GOTO 2000
      IF(J.EQ.CM.AND.I.NE.L.AND.B(I,CM).EQ.0.AND.HT(I-1,CM).EQ.0
      +.AND.B(L,CM).EQ.1.AND.I+1.GT.L.AND.B(I,J-1).EQ.0)GOTO 500
      IF(J.EQ.CM.AND.I.NE.L.AND.B(I,CM).EQ.0.AND.B(I-1,CM).EQ.1

```

```

+.AND.B(L,CM).EQ.1.AND.I+1.GT.L.AND.B(I,J-1).EQ.0)GOTO 580
4 IF(J.EQ.1) GOTO 104
  IF(J.EQ.CM.AND.I.NE.L.AND.B(I,CM).EQ.0.AND.B(I-1,CM).EQ.0
  +.AND.B(L,CM).EQ.1.AND.I.EQ.DM.AND.B(I,J-1).EQ.0)GOTO 500
104 IF(B(L-1,CM).EQ.1.AND.B(L,CM).EQ.0) GOTO 14
  IF(B(L,1).EQ.0.AND.B(L,CM).EQ.0.AND.INK.EQ.0) GOTO 2000
  IF(B(L,1).EQ.0.AND.B(L,CM).EQ.0) GOTO 2000
14 IF (J.EQ.CM) GOTO 17
  IF (I.EQ.DM) GOTO 32
  IF(J.GT.2.AND.J.LT.Z) GOTO 28
  GOTO 17
28 IF (I.EQ.DM) GOTO 32
  IF(A(I,J).EQ.0.AND.HT(I,J+1).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.
  +HT(I,J).EQ.1.AND.I.LT.L.AND.A(I-1,J).EQ.0.AND.EF(I-1,J)
  +.EQ.1.AND.B(I,J-2).EQ.0.AND.HT(I,J-2).EQ.1.AND.B(I+1,J-1)
  +.EQ.0.AND.HT(I+1,J-1).EQ.1.AND.HT(I-1,J-1).EQ.0) GOTO 250
  IF(B(I,J).EQ.0.AND.A(I,J).EQ.0.AND.B(I,J+1).EQ.1.AND.
  +B(I,J-1).EQ.1.AND.B(I,J+2).EQ.0.AND.A(I-1,J+1).EQ.0.AND.
  +A(I+1,J+1).EQ.0.AND.I.LT.L) GOTO 127
  IF(A(I,J).EQ.0.AND.B(I-1,J).EQ.0.AND.E(I-1,J+1).EQ.0.AND.
  +B(I,J-1).EQ.1.AND.B(I,J+1).EQ.1.AND.I.LT.L) GOTO 127
  IF(A(I,J).EQ.0.AND.B(I-1,J).EQ.0.AND.A(I-1,J+1).EQ.0.AND.
  +B(I,J-1).EQ.1.AND.HT(I,J+1).EQ.0.AND.I.LT.L) GOTO 127
  IF (B(I,J).EQ.0.AND.A(I,J).EQ.0.AND.HT(I,J).EQ.1.AND.
  +B(I,J-2).EQ.1.AND.A(I,J-2).EQ.1.AND.HT(I,J-2).EQ.1.AND.
  +HT(I,J+1).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1) GOTO 127
  IF((E(I,J).EQ.0.OR.A(I,J).EQ.0).AND.HT(I,J).EQ.1.AND.
  +HT(I,J-2).EQ.0.AND.HT(I,J+1).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1
  +.AND.I.LT.L) GOTO 127
  IF(B(I,J).EQ.0.AND.A(I,J).EQ.0.AND.HT(I,J).EQ.1.AND.
  +B(I,J-2).EQ.0.AND.EF(I,J-2).EQ.1.AND.HT(I,J-2).EQ.1.AND.
  +HT(I,J+1).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.I.LT.L.AND.J.GT.3)
  +GOTO 127
  IF(I.LT.L.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.E(I,J).EQ.0.AND.B(I-1,J)
  +.EQ.0.AND.A(I,J+1).EQ.0.AND.B(I+1,J).EQ.1) GOTO 127
  IF(I.LT.L.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.E(I,J).EQ.0.AND.
  +A(I-1,J).EQ.0.AND.E(I,J+1).EQ.0.AND.B(I+1,J).EQ.1.AND.
  +E(I+1,J+1).EQ.0) GOTO 127
  IF(I.LT.L.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.E(I,J).EQ.0.AND.
  +B(I-1,J).EQ.0.AND.E(I,J+1).EQ.0.AND.B(I+1,J).EQ.1.AND.
  +B(I,J-2).EQ.0.AND.HT(I,J-2).EQ.1) GOTO 127
  IF(I.LT.L.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.E(I,J).EQ.0.AND.
  +B(I-1,J).EQ.1.AND.A(I,J+1).EQ.0.AND.B(I+1,J).EQ.1) GOTO 214
  IF (B(I,J).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.I.LT.L.AND.

```

```

+ (A(I,J).EQ.1.OR.A(I-1,J).EQ.1)) GOTO 250
  IF (B(I,J).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.I.LT.L.AND.
+ (A(I,J).EQ.1.OR.(A(I-1,J).EQ.0.AND.EF(I-1,J).EQ.0.AND.
+ HT(I-1,J).EQ.1))) GOTO 250
  IF(I.GE.L.AND.B(I,J).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.E(I,J)
+ .EQ.0.AND.A(I-1,J).EQ.0.AND.HT(I+1,J).EQ.1) GOTO 127
  IF(I.GE.L.AND.B(I,J).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.A(I,J).EQ.1
+ .AND.E(I,J).EQ.1) GOTO 250
  IF(I.GE.L.AND.E(I,J).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.
+ A(I,J).EQ.1)GOTO 250
  IF(B(I,J).EQ.0.AND.HT(I,J+1).EQ.0.AND.HT(I-1,J).EQ.0
+ .AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.B(I+1,J).EQ.0) GOTO 250
  IF(B(I,J).EQ.0.AND.A(I,J).EQ.0.AND.E(I,J).EQ.0.AND.
+ E(I+1,J).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.
+ A(I,J+1).EQ.0.AND.EF(I,J).EQ.0) GOTO 250
  IF(B(I,J).EQ.0.AND.A(I,J).EQ.0.AND.E(I,J).EQ.0.AND.
+ E(I+1,J).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.
+ E(I,J+1).EQ.0.AND.EF(I,J).EQ.1.AND.NY5.EQ.1) GOTO 250
  IF(B(I,J).EQ.0.AND.A(I,J).EQ.0.AND.E(I,J).EQ.0.AND.
+ E(I+1,J).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.
+ A(I,J+1).EQ.0.AND.EF(I,J).EQ.1.AND.NY5.EQ.1) GOTO 250
  IF(B(I,J).EQ.0.AND.A(I,J).EQ.1.AND.E(I,J).EQ.1.AND.
+ B(I+1,J).EQ.0.AND.A(I-1,J).EQ.1.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.
+ A(I,J+1).EQ.1) GOTO 250
  IF(B(I,J).EQ.0.AND.A(I,J).EQ.0.AND.E(I,J).EQ.1.AND.
+ E(I,J+1).EQ.0.AND.E(I+1,J).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.
+ A(I+1,J).EQ.0) GOTO 250
  GOTO 127
17 IF(J.EQ.Z) GOTO 127
  IF (J.EQ.1) GOTO 607
  IF (I.EQ.DM) GOTO 32
38 IF (J.EQ.CM)GOTO 127
  IF(B(I,J).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.J.EQ.2.AND.
+ I.LT.L) GOTO 250
  IF(B(I,J).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.J.EQ.2.AND.I.GT.L.AND.
+ E(I,J).EQ.0.AND.A(I,J).EQ.1.AND.B(I,J+1).EQ.0) GOTO 250
  IF(B(I,J).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.J.EQ.CM.AND.
+ I.LE.L.AND.A(I,J).EQ.1) GOTO 250
  IF(B(I,J).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.J.EQ.CM.AND.
+ I.LT.L.AND.B(I+1,J).EQ.0) GOTO 350
  IF(J.EQ.CM)GOTO 127
607IF(L.EQ.DM.OR.I.EQ.DM) GOTO 32
127IF (J.EQ.1) GOTO 32
  IF(B(I,J).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.

```

```

+A(I,J).EQ.1.AND.J.EQ.Z.AND.I.NE.DM) GOTO 250
31 IF (J.EQ.CM.OR.I.EQ.DM) GOTO 32
  IF(E(I,J).EQ.0.AND.A(I,J+1).EQ.0.AND.B(I-1,J).EQ.1.AND.
  + I.GT.L.AND.B(I+1,J).EQ.1) GOTO 400
32 IF (J.EQ.1) GOTO 33
  IF(B(I,J).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.J.EQ.CM.AND.
  + A(I,J).EQ.1) GOTO 250
33 IF (B(I-1,J).EQ.1) GOTO 200
  IF(J.EQ.CM) GOTO 151
  IF (B(I,J+1).EQ.1) GOTO 300
151 IF(J.EQ.1) GOTO 1400
  IF(B(I,J).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.A(I,J).EQ.0.AND.
  + B(I+1,J).EQ.0) GOTO 250
  IF(B(I,J).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.I.LT.L.AND.
  + B(I+1,J).EQ.0.AND.HT(I+1,J).EQ.1) GOTO 250
  IF(B(I,J).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.1.AND.I.LT.L.AND.
  + B(L,J).EQ.1.AND.INK.NE.0) GOTO 250
  IF(J.EQ.CM) GOTO 1600
  IF(J.EQ.1) GOTO 1400
  IF(B(I,J).EQ.0.AND.B(I+1,J).EQ.0.AND.B(I-1,J).EQ.0.AND.
  +B(I,J+1).EQ.0.AND.B(I,J-1).EQ.0)GOTO 1500
  GOTO 214
1400 IF(B(I,J).EQ.0.AND.B(I,J+1).EQ.0.AND.B(I-1,J).EQ.0.AND.
  +B(I+1,J).EQ.0.AND.J.EQ.1) GOTO 1500
  IF(J.EQ.1) GOTO 214
1600 IF(B(I,J).EQ.0.AND.B(I-1,J).EQ.0.AND.B(I+1,J).EQ.0.AND.
  +B(I,J-1).EQ.0.AND.J.EQ.CM) GOTO 1500
214 IF(J.EQ.CM) GOTO 241
  IF ((A(I+1,J).EQ.1.OR.B(I+1,J).EQ.1).AND.
  +B(I-1,J+1).EQ.0) GOTO 400
  IF(A(I+1,J).EQ.1.AND.A(I,J+1).EQ.0) GOTO 400
51 IF(A(I+1,J).EQ.1.AND.B(I,J+1).EQ.0.AND.B(I-1,J).EQ.0
  +.AND.A(I-1,J+1).EQ.0) GOTO 400
  IF(A(I+1,J).EQ.1.AND.B(I,J+1).EQ.0.AND.B(I-1,J).EQ.0)
  +GOTO 400
241 IF(B(I+1,J).EQ.1) GOTO 400
580 NER=NER+1
  GOTO 200
250 J=J-1
  IF (L.EQ.DM) GOTO 505
  IF(B(L,CM).EQ.0.AND.B(L,Z).EQ.1.AND.(B(L+1,Z).EQ.1.OR.
  + B(L-1,Z).EQ.1.OR.B(L,Z-1).EQ.1)) GOTO 504
505 P(I)=P(I)+B(I,J)
  B(I,J)=0

```

```

E(I,J)=0
HC(I,J)=HC(I,J+1)+1
IF(B(I,J).EQ.0.AND.E(I,J).EQ.0.AND.B(I+1,J).EQ.1)GOTO 400
IF(B(I,J).EQ.0.AND.E(I,J).EQ.0.AND.B(I+1,J).EQ.1.AND.
+B(I-1,J).EQ.1) GOTO 400
GOTO 12
504 INK=INK+1
B(L,CM)=1
GOTO 505
350 J=J-1
P(I)=P(I)+B(I,J)
B(I,J)=0
E(I,J)=0
HC(I,J)=HC(I,J+1)+1
IF(E(I,J).EQ.0.AND.B(I-1,J).EQ.1.AND.B(I+1,J).EQ.1.AND.
+I.LT.L)GOTO 241
GOTO 12
200 I=I-1
IF(B(L,CM).EQ.0.AND.B(I,CM).EQ.1.AND.(B(I-1,CM).EQ.1.OR.
+B(I,Z).EQ.1)) GOTO 506
507 P(I)=P(I)+B(I,J)
B(I,J)=0
HC(I,J)=HC(I+1,J)+1
GOTO 12
506 INK=INK+1
B(L,CM)=1
GOTO 507
300 J=J+1
IF(INK.NE.0.AND.B(L,CM).EQ.1.AND.J.EQ.CM.AND.I.EQ.L)
P(L)=P(L)-1
P(I)=P(I)+B(I,J)
B(I,J)=0
HC(I,J)=HC(I,J-1)+1
GOTO 12
400 I=I+1
IF(INK.NE.0.AND.B(L,CM).EQ.1.AND.I.EQ.L.AND.J.EQ.CM)
P(L)=P(L)-1
P(I)=P(I)+B(I,J)
B(I,J)=0
A(I,J)=0
HC(I,J)=HC(I-1,J)+1
GOTO 12
1500 IF (J.EQ.1) GOTO 162
IF (I.EQ.DM) GOTO 163

```

```

IF (J.EQ.CM) GOTO 164
IF(EF(I,J).EQ.0.AND.EF(I-1,J).EQ.0.AND.EF(I,J-1).EQ.0.AND.
+EF(I+1,J).EQ.0.AND.EF(I,J+1).EQ.0) GOTO 500
GOTO 165
162 IF((EF(I,J).EQ.0.OR.EF(I,J).EQ.1).AND.EF(I-1,J).EQ.0.AND.
+EF(I+1,J).EQ.0.AND.EF(I,J+1).EQ.0) GOTO 500
GOTO 165
163 IF(EF(I,J).EQ.0.AND.EF(I-1,J).EQ.0.AND.
+EF(I,J-1).EQ.0.AND.EF(I,J+1).EQ.0) GOTO 500
GOTO 165
164 IF(EF(I,J).EQ.0.AND.EF(I-1,J).EQ.0.AND.
+EF(I+1,J).EQ.0.AND.EF(I,J-1).EQ.0) GOTO 500
165 IF(J.EQ.CM.AND.I.NE.L.AND.B(I,CM).EQ.0.AND.B(I-1,CM).EQ.0
+ .AND.NER.NE.0.AND.INK.EQ.0) GOTO 500
IF (I.EQ.N) GOTO 214
IF(J.EQ.CM) GOTO 1450
923 IF (HC(I,J+1).NE.0) IS=HC(I,J+1)-HC(I,J)
IF((A(I,J+1).EQ.1.OR.E(I,J+1).EQ.1.OR.EF(I,J+1).EQ.1).AND.
+B(I,J+1).EQ.0.AND.(IS.EQ.1.OR.IS.EQ.-1)) GOTO 1520
1450 IF (HC(I+1,J).NE.0) IS=HC(I+1,J)-HC(I,J)
IF((A(I+1,J).EQ.1.OR.E(I+1,J).EQ.1.OR.EF(I+1,J).EQ.1).AND.
+B(I+1,J).EQ.0.AND.(IS.EQ.1.OR.IS.EQ.-1)) GOTO 1510
IF(J.EQ.1) GOTO 1539
921 IF (HC(I,J-1).NE.0) IS=HC(I,J-1)-HC(I,J)
IF((A(I,J-1).EQ.1.OR.E(I,J-1).EQ.1.OR.EF(I,J-1).EQ.1).AND.
+B(I,J-1).EQ.0.AND.(IS.EQ.1.OR.IS.EQ.-1)) GOTO 1530
1539 IF (HC(I-1,J).NE.0) IS=HC(I,J)-HC(I-1,J)
IF((A(I-1,J).EQ.1.OR.E(I-1,J).EQ.1.OR.EF(I-1,J).EQ.1).AND.
+B(I-1,J).EQ.0.AND.(IS.EQ.1.OR.IS.EQ.-1)) GOTO 1540
1510 A(I,J)=0
E(I,J)=0
EF(I,J)=0
I=I+1
A(I,J)=0
E(I,J)=0
EF(I,J)=0
IF (I.EQ.DM) GOTO 12
IF(J.EQ.1) GOTO 1511
IF (J.EQ.CM) GOTO 1551
IF(B(I,J+1).EQ.1.OR.B(I,J-1).EQ.1.OR.B(I+1,J).EQ.1.OR.
+B(I-1,J).EQ.1) GOTO 122
GOTO 1500
1511 IF(B(I,J+1).EQ.1.OR.B(I+1,J).EQ.1.OR.B(I-1,J).EQ.1)GOTO 122
GOTO 1500

```

```

1551 IF(B(I+1,J).EQ.1.OR.B(I-1,J).EQ.1.OR.B(I,J-1).EQ.1)GOTO 122
    GOTO 1500
1520 A(I,J)=0
    E(I,J)=0
    EF(I,J)=0
    J=J+1
    A(I,J)=0
    E(I,J)=0
    EF(I,J)=0
    IF (I.EQ.DM) GOTO 12
    IF (J.EQ.1) GOTO 1521
    IF (J.EQ.CM) GOTO 1551
    IF (J.EQ.CM.OR.I.EQ.DM.OR.I.EQ.N) GOTO 43
    IF(EF(I,J).EQ.0.AND.EF(I-1,J).EQ.1.AND.EF(I+1,J).EQ.1.AND.
+HT(I+2,J).EQ.0.AND.HT(I+1,J+1).EQ.0.AND.B(I-1,J).EQ.0)
+GOTO 1539
43 IF(B(I,J+1).EQ.1.OR.B(I,J-1).EQ.1.OR.B(I+1,J).EQ.1.OR.
+B(I-1,J).EQ.1) GOTO 122
    GOTO 1500
1521 IF(B(I,J+1).EQ.1.OR.B(I+1,J).EQ.1.OR.B(I-1,J).EQ.1)
+GOTO 122
1530 A(I,J)=0
    E(I,J)=0
    EF(I,J)=0
    J=J-1
    A(I,J)=0
    E(I,J)=0
    EF(I,J)=0
    IF(I.EQ.DM) GOTO 12
    IF(J.EQ.1) GOTO 1531
    IF(J.EQ.CM) GOTO 1552
    IF(B(I,J+1).EQ.1.OR.B(I,J-1).EQ.1.OR.B(I+1,J).EQ.1.OR.
+B(I-1,J).EQ.1) GOTO 122
    GOTO 1500
1531 IF(B(I,J+1).EQ.1.OR.B(I+1,J).EQ.1.OR.B(I-1,J).EQ.1)
+GOTO 122
    GOTO 1500
1552 IF(B(I+1,J).EQ.1.OR.B(I-1,J).EQ.1.OR.B(I,J-1).EQ.1)
+GOTO 122
    GOTO 1500
1540 A(I,J)=0
    E(I,J)=0
    EF(I,J)=0
    I=I-1

```

```

A(I,J)=0
E(I,J)=0
EF(I,J)=0
IF(I.EQ.DM) GOTO 12
IF(J.EQ.1) GOTO 1541
IF (J.EQ.CM) GOTO 1553
IF(B(I,J+1).EQ.1.OR.B(I,J-1).EQ.1.OR.B(I+1,J).EQ.1.OR.
+B(I-1,J).EQ.1) GOTO 122
GOTO 1500
1541 IF(B(I,J+1).EQ.1.OR.B(I+1,J).EQ.1.OR.B(I-1,J).EQ.1)
+GOTO 122
GOTO 1500
1553 IF(B(I,J-1).EQ.1.OR.B(I+1,J).EQ.1.OR.B(I-1,J).EQ.1)
+GOTO 122
GOTO 1500
122 EF(I,J)=1
IF (J.EQ.1) GOTO 12
IF(B(I,J-1).EQ.1) NY5=1
GOTO 12
2000 ZR=1
RETURN
500 DO 53 IK=1,DM
DO 53 JK=1,CM
53 HC(IK,JK)=0
DO I=1,DM
P(I)=0
ENDDO
DO 85 I=1,DM
DO 85 J=1,CM
B(I,J)=HT(I,J)
E(I,J)=HT(I,J)
A(I,J)=HT(I,J)
85 EF(I,J)=HT(I,J)
RETURN
END
C
C CEPHE İLE İLGİLİ HESAPLAR
C
SUBROUTINE HES(Z9,P9,YOGF,NF1,PC2
+ ,SIGF1,B3,LDF1)
IMPLICIT INTEGER (A-X)
COMMON DM,CM,HM,TAH,NOKTA,NUM
REAL YOGF(NUM,TAH),SIGF1(NUM,TAH)
REAL P9(0:HM),SFTOP,PC2(NUM,TAH)

```

```

REAL NF1(NUM,TAH),LDF1(NUM,TAH)
INTEGER Z9(0:HM),L9(0:HM)
NFTOP=0
ZFTOP=0
SFTOP=0
DO I=0,HM
NFTOP=NFTOP+P9(I)
ZFTOP=ZFTOP+P9(I)*Z9(I)
ENDDO
YOGF(B3,NOKTA)=ZFTOP/NFTOP
LDF1(B3,NOKTA)=2.257*YOGF(B3,NOKTA)
NF1(B3,NOKTA)=NFTOP
PC1=NINT(YOGF(B3,NOKTA))
DO I=0,HM
SFTOP=SFTOP+((Z9(I)-YOGF(B3,NOKTA))**2)*P9(I)
IF (PC1.EQ.I) PC2(B3,NOKTA)=L9(I)
ENDDO
SIGF1(B3,NOKTA)=SQRT(SFTOP/NFTOP)
RETURN
END

```

C

C SONSUZ KÜMENİN OLUŞTURULMASI

C

```

SUBROUTINE PSONSUZ(AS1,PS)
IMPLICIT INTEGER (A-X)
COMMON DM,CM,HM
DIMENSION AS1(DM,CM),BS(DM,CM),PS(DM),AS(DM,CM)
DO I=1,DM
DO J=1,CM
AS(I,J)=AS1(I,J)
BS(I,J)=AS(I,J)
ENDDO
ENDDO
I=DM
J=1
SEREF=0
20IF (AS(I-1,J).EQ.1) GOTO 10
IF (J.EQ.DM) GOTO 100
IF (AS(I,J).EQ.0.AND.BS(I,J).EQ.1.AND.BS(I-1,J).EQ.0) GOTO 30
GOTO 30
10PS(I)=PS(I)+AS(I,J)
AS(I,J)=0
IF (AS(I,J).EQ.0.AND.BS(I,J).EQ.1.AND.BS(I-1,J).EQ.0) GOTO 30
I=I-1

```

```

    PS(I)=PS(I)+AS(I,J)
    AS(I,J)=0
    GOTO 20
30 IF(AS(I,J).EQ.1.AND.BS(I-1,J).EQ.0) PS(I)=PS(I)+AS(I,J)
    AS(I,J)=0
    IF (SEREF.EQ.0) I=DM
    IF (SEREF.EQ.1) GOTO 121
    J=J+1
    GOTO 20
12I=ORHAN
    GOTO 70
100 IF(AS(I,J).EQ.1.AND.J.EQ.DM) PS(I)=PS(I)+AS(I,J)
    AS(I,J)=0
    IF (SEREF.EQ.1) GOTO 121
    I=DM-1
    J=1
    IF(AS(I,J).EQ.1) PS(I)=PS(I)+AS(I,J)
    AS(I,J)=0
70 IF(AS(I,J).EQ.0.AND.BS(I,J).EQ.1.AND.AS(I-1,J).EQ.1)
    +GOTO 120
    IF (PS(I).EQ.0) GOTO 300
    IF (AS(I,J).EQ.0.AND.BS(I,J).EQ.1.AND.AS(I+1,J).EQ.1) GOTO 106
    IF (J.EQ.1) GOTO 35
    IF (J.EQ.DM) GOTO 95
    IF (AS(I,J).EQ.1.AND.AS(I,J+1).EQ.1) GOTO 200
    IF (AS(I,J).EQ.0.AND.BS(I,J).EQ.1.AND.AS(I,J+1).EQ.1) GOTO 60
    IF (AS(I,J).EQ.1.AND.AS(I,J+1).EQ.0.AND.BS(I,J+1).EQ.1.AND.
    +BS(I,J-1).EQ.0) GOTO 85
    IF (AS(I,J).EQ.1.AND.AS(I+1,J).EQ.0.AND.BS(I+1,J).EQ.1) GOTO 75
    GOTO 90
35 IF (AS(I,J).EQ.1.AND.AS(I+1,J).EQ.0.AND.BS(I+1,J).EQ.1) GOTO 105
    IF (AS(I,J).EQ.1.AND.AS(I,J+1).EQ.0.AND.BS(I,J+1).EQ.1) GOTO 85
    IF (AS(I,J).EQ.0.AND.BS(I,J).EQ.1.AND.AS(I,J+1).EQ.1) GOTO 60
    IF (AS(I,J).EQ.1.AND.AS(I,J+1).EQ.1) GOTO 200
    GOTO 90
60J=J+1
    PS(I)=PS(I)+AS(I,J)
    AS(I,J)=0
    GOTO 70
90 J=J+1
    GOTO 70
95J=1
    I=I-1
    GOTO 70

```

```

85 PS(I)=PS(I)+AS(I,J)
   AS(I,J)=0
   GOTO 70
75 PS(I)=PS(I)+AS(I,J)
   AS(I,J)=0
   GOTO 70
105 PS(I)=PS(I)+AS(I,J)
   AS(I,J)=0
   GOTO 70
106 I=I+1
   PS(I)=PS(I)+AS(I,J)
   AS(I,J)=0
   IF(AS(I+1,J).EQ.0) J=1
   GOTO 70
200 K=J
202 IF(BS(I,K).EQ.0) GOTO 71
   IF (K.EQ.DM) GOTO 76
   IF(AS(I,K).EQ.1.AND.AS(I,K+1).EQ.0.AND.BS(I,K+1).EQ.1) GOTO 65
   IF(AS(I,K).EQ.1.AND.BS(I,K+1).EQ.0.AND.AS(I+1,K).EQ.0.AND.
   BS(I+1,K).EQ.1) GOTO 65
   IF(AS(I,K).EQ.1.AND.AS(I,K+1).EQ.1.AND.BS(I+1,K).EQ.0.AND.
   +AS(I+1,K+1).EQ.0.AND.BS(I+1,K+1).EQ.1) GOTO 65
   GOTO 210
65 PS(I)=PS(I)+AS(I,J)
   AS(I,J)=0
   GOTO 70
71 J=K+1
   IF(J.GT.DM) J=DM
   GOTO 70
211 K=K+1
   GOTO 202
76 J=K
   GOTO 70
120 SEREF=1
   ORHAN=I
   GOTO 20
300 RETURN
   END

```

Bu programda kullanılan deęişkenler,

DM ve CM : Örgü boyutu.

NUM : Örnek sayısı.

ITER : Zaman adımı.

TAH : Deęerlendirilecek nokta sayısı.

AM : Örgü.

ZOFR : Ortalama cephe konumu.

SIGFR : Ortalama cephe genişlięi.

PCR : Ortalama perkolasyon eęięi.

NFR : Ortalama cephe uzunluęu.

LDFR : Ortalama difüzyon uzunluęu.

HUORT : Ortalama cephe yoğunluęu.

SONORT : Ortalama sonsuz küme yoğunluęu.

Alt programlar,

RANDOM : Rastgele sayı üretici.

BLOK : 2x2 'lik Margolus bloklarına ayırma.

DONME : Margolus bloklarının dönderilmesi.

KAYDIRMA : Blokların kaydırılması.

IDURUM : Örgünün ilk duruma getirilmesi.

YOGUN : Yoęunluk hesabı.

PSONSUZ : Sonsuz kümenin oluřturulması.

CEPHE : Difüzyon cephenin oluřturulması.

CEPHE2 : Difüzyon cephenin oluřturulması.

HES : Cephe ile ilgili hesaplar.

ÖZGEÇMİŞ

Şeref Turhan 14 Nisan 1964 yılında Kahramanmaraş 'ın Göksun ilçesinde doğdu. İlk, orta ve Lise öğrenimini aynı ilçede tamamladı. 1980 yılında Fırat Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümüne girdi ve 1984 yılında mezun oldu. 1984-1985 akademik yılı Bahar döneminde Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında Yüksek Lisans programına girdi ve 1987 yılında mezun oldu. 1985-1988 yılları arasında Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalında Araştırma görevlisi olarak çalıştı. 1988 yılında Türkiye Atom Enerjisi Kurumunda araştırmacı olarak göreve başladı. Halen Ankara Nükleer Araştırma ve Eğitim Merkezi Malzeme Bölümünde araştırmacı olarak çalışmaktadır. Askerlik görevini 1994 yılında tamamlamış olup, evli ve bir çocuk babasıdır.