

T.C
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

İSTATİSTİK MEKANİKSEL
MODEL SİSTEMLERDE FAZ GEÇİŞLERİ VE
SİMÜLASYONLAR

Mustafa AKGÜL

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
Konya, 2007

T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

İSTATİSTİK MEKANİKSEL MODEL SİSTEMLERDE
FAZ GEÇİŞLERİ VE SİMÜLASYONLAR

MUSTAFA AKGÜL

YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI

Bu tez 26.09.2007 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği
ile kabul edilmiştir.

Yrd. Doç. Dr. Atilla GÜLEÇ
(Danışman)

Yrd. Doç. Dr. Erhan AKIN
(Üye)

Yrd. Doç. Dr. Ö. Faruk YÜKSEL
(Üye)

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

İSTATİSTİK MEKANİKSEL MODEL SİSTEMLERDE FAZ GEÇİŞLERİ VE SİMÜLASYONLAR

Mustafa AKGÜL

Selçuk Üniversitesi

Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Ana Bilim Dalı

Danışman: Yrd. Doç. Dr. Atilla GÜLEÇ

2007, 73 Sayfa

Jüri:

Yrd. Doç. Dr. Atilla GÜLEÇ

Yrd. Doç. Dr. Erhan AKIN

Yrd. Doç. Dr. Ö. Faruk YÜKSEL

Faz geçişlerinin analizinde önemli matematiksel güçlükler ortaya çıkmaktadır. Bu nedenle, problemin sayısal analizini göz önüne almak uygun bir yaklaşım olmaktadır.

Bu çalışmada, Monte Carlo simülasyonu kullanılarak sıfır dış alanda tam çözümü bilinen Ising modelinin bazı termodinamik parametreleri incelenmiştir. Sıfır dış alanda iki boyutlu izotrop sistemler için faz geçişi, Boltzmann sabiti ve iç etkileşim parametresi birim alındığında, literatürde $\beta = 0,440$ (veya $T = 2,269$) noktasında belirlenmiştir. Bu çalışmada ise olası kritik noktanın küçük örgüler için $T \cong 3,000$ civarında olduğu tahmin edilmiştir.

Anahtar Kelimeler: Denge İstatistik Mekaniği, Faz Geçişleri, Ising Modeli, Kritik Üsteller, Monte Carlo simülasyonu.

ABSTRACT

Master Thesis

PHASE TRANSITIONS AND SIMULATIONS IN STATISTICAL MECHANICAL MODEL SYSTEMS

Mustafa AKGÜL

Selçuk University

Graduate School of Naturel and Applied Sciences

Department of Physics

Supervisor: Assist. Prof. Dr. Atilla GÜLEÇ

2007, 73 pages

Jurry:

Assist. Prof. Dr. Atilla GÜLEÇ

Assist. Prof. Dr. Erhan AKIN

Assist. Prof. Dr. Ö. Faruk YÜKSEL

In the analysis of the phase transitions, formidable mathematical difficulties appear. Therefore, it is a convenient approach to consider numerical analysis of the problem.

In this study, some thermodynamical parameters of the Ising model knowing exact solution in zero external field are investigated by using Monte Carlo simulation. In the literature, the phase transitions for isotropic systems in zero field, where Boltzmann constant and internal field parameter are unit, has been determined at $\beta = 0,440$ ($T = 2,269$) value. Here it has been guessed that possible critical point for the small grid becomes in the vicinity of $T \cong 3,000$.

Key Words: Equilibrium Statistical Mechanics, Phase Transitions, Ising Model, Critical Exponents, Monte Carlo simulation.

İÇİNDEKİLER

ÖZET	iii
ABSTRACT	iv
ÖNSÖZ	vii
1. GİRİŞ	1
2. FAZ GEÇİŞLERİ	4
2.1. Faz Geçiş Isısı.....	4
2.2. Clausius-Clapeyron Denklemi.....	4
2.3. Faz Geçiş ve Faz Geçiş Mertebesi.....	7
3. SAYISAL TEKNİKLER	9
3.1. Trapez Yöntemi.....	9
3.2. Simpson Yöntemi.....	12
4. RASGELELİK VE RASGELE SAYILAR	16
4.1. Rasgelelik.....	16
4.2. Rasgele Sayıların Üretilmesi.....	20
4.2.1. Lineer congruental algoritma.....	21
4.2.2. Orta kare algoritması.....	21
4.2.3. Shift-Register algoritmaları.....	22
4.3. Rasgeleliğin Test Edilmesi.....	23
4.4. Rastlantısal Değişken ve Rastlantısal Olay.....	23
4.5. Rastlantısal Değişkenlerin Dağılımları.....	24
4.6. Sürekli Rasgele Değişkenler.....	25
4.7. Dağılım Parametreleri.....	27
4.8. Merkezi Limit Teoremi.....	27
4.9. Ortalama.....	30
4.10. Varyans.....	31

5. MONTE CARLO SİMÜLASYONU	32
5.1. Simülasyon.....	32
5.2. Monte Carlo Simülasyonu.....	32
5.3. Monte Carlo Yönteminin Sayısal İntegrallere Uygulanması.....	33
5.4. Hata Değerlendirmesi.....	37
6. MANYETİK MADDELER, ISING MODELİ ve MONTE CARLO SİMÜLASYONU	40
6.1. Ferromanyetik, Paramanyetik ve Diyamanyetik maddeler.....	40
6.1.1. Ferromanyetik maddeler.....	41
6.1.2. Paramanyetik maddeler.....	42
6.1.3. Diyamanyetik maddeler.....	43
6.2. İki Boyutlu Ising Modeli ve Monte Carlo Simülasyonu.....	44
7. SONUÇLAR	54
KAYNAKLAR	59
EK-A	60
EK-B	61
EK-C	65

ÖNSÖZ

Bu çalışma Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsüne Yüksek Lisans Tezi olarak sunulmuştur.

Tez çalışmam süresince bilgi, deneyim ve özveriyle bana her konuda destek olan danışmanım sayın Yrd.Doç.Dr. Atilla GÜLEÇ'e sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

1. GİRİŞ

Geçmişten günümüze bilim ve teknolojideki gelişmeler fizik alanında da kendini göstermiş, makro düzeydeki çalışmalardan mikro düzeydeki çalışmalara doğru gözle görülür bir artış olmuştur. Mikro düzeydeki çalışmalar pek çok güçlüğü de beraberinde getirmiştir. Mikro düzeydeki çalışmalarda çok parçacıklı ve çok serbestlik dereceli sistemlerle çalışılmaktadır. Bu karmaşık sistemlerle çalışılırken bir çok matematiksel güçlükle karşılaşılır. İstatistik fizik, davranışı birkaç makroskopik niceliğin değişimi cinsinden tanımlanabilen çok serbestlik dereceli sistemleri incelemektedir. Böyle bir sistemin davranışını belirlemek için makroskopik niceliklerden üçü sabit seçilerek sistemin diğer özelliklerinin nasıl davrandığı hesaplanabilir. Her bir sabit makroskopik nicelik kümesi bir topluluğu oluşturur. Örneğin, parçacık sayısı (N), sistemin hacmi (V) ve sistemin enerjisi (E) sabit tutulursa, yalıtılmış bir sisteme karşılık gelen mikrokanonik topluluk tanımlanır. Termodinamik limitte (yani, $N \rightarrow \infty$) toplulukların tümü eşdeğer olacağından topluluğun seçimi, problemin çözümünü mümkün olduğu kadar kolaylaştıracak şekilde yapılmalıdır. Ayrıca sözü edilen bu güçlükleri aşmak amacıyla matematiksel açıdan analitik yaklaşımların yanında mümkün olduğu kadar bilgisayarlardan da faydalanılmaktadır. Günümüzde matematiksel tekniklerin yanında bilgisayar programları ve simülasyonları, bir çok alanda ve fizik araştırmalarında da yoğun olarak kullanılmaktadır. Fiziğin çok parçacıklı sistemlerle uğraşan bir kolu olan istatistik mekanikte de, bu yaklaşım ve metotlardan yararlanılmaktadır. Bu matematiksel teknik ve simülasyonlar, istatistik mekaniğin yaygın çalışma alanlarından biri olan *faz geçişleri* konusunda da önemli bir yere sahiptir.

İstatistik mekanik formalizminin uygulandığı çeşitli fiziksel olaylar, başlıca iki sınıfa ayrılabilir. Birincisinde, verilen sistemi oluşturan mikroskopik bileşenler yaklaşık olarak etkileşmezler veya etkileşmedikleri düşünülebilir. Sonuç olarak sistemin termodinamik fonksiyonları, tek tek bileşenlerin enerji seviyeleri bilindiğinde doğrudan elde edilebilir. Bu sınıftaki olayların dikkate değer örnekleri;

gazların özgül ısıları, katıların özgül ısıları, kimyasal tepkimeler ve denge sabitleri, ideal bose gazının yoğunlaşması, siyah cisim ışımalarının spektral dağılımı, metallerin temel elektron teorisi, paramanyetizma olayı şeklinde sıralanabilir. Gerçekte, katılarda atomlar arasındaki etkileşme önemli fiziksel rol oynar. Bununla birlikte atomların gerçek konumları, önemli sıcaklık değişim aralığında ortalama değerlerinden önemli ölçüde uzaklaşmadıkları için, problem normal koordinatlarda yeniden yazılabilir ve verilen katı yaklaşık olarak etkileşmeyen osilatörler topluluğu olarak ele alınabilir. Birinci sınıfa giren olayların en önemli özelliği, Bose-Einstein yoğunlaşması hariç tutulursa, ilgili sistemlerin termodinamik fonksiyonlarının yumuşak ve sürekli olmasıdır.

Bununla birlikte, ikinci sınıfa giren olaylar tamamen farklıdır. Genellikle verilen sistemin termodinamik fonksiyonlarında analitik süreksizlikler ve tekillikler, dolayısıyla çeşitli türden faz geçişleri ortaya çıkmaktadır. Bu sınıfa giren olayların dikkate değer örnekleri; gazların yoğunlaşması, katıların erimesi, fazların bir arada bulunması ile ilgili olaylar (özellikle kritik nokta civarında), karışımlar ve çözeltilerin davranışı, ferromanyetizma ve antiferromanyetizma olayları, alaşımlardaki düzensizlik geçişleri, normal halden süper iletken malzemeye geçiş şeklinde sıralanabilir. Faz geçişi, sistemin bir fazdan diğer bir faza geçmesi olayıdır. Katıdan sıvıya, sıvıdan buhara, mıknatıssızlıktan mıknatıslılığa veya iletkenden süperiletkene v.s. geçişler, faz geçişleri olarak bilinen olguyla ilgilidir (Pathria 1996).

Faz geçişi, diğer termodinamik değişkenler sabit tutulduğunda, belli bir sıcaklıkta oluşur ve bu sıcaklığa *kritik sıcaklık* denir. Kritik sıcaklık ve civarında sistemin ve sistemi oluşturan parçacıkların davranışlarını incelemek, faz geçişini anlamak adına önemlidir. Kritik üsteller kavramı tam da bu noktada ortaya çıkar. Sistemin termodinamik fonksiyonlarının, kritik sıcaklık civarındaki davranışı bu üsteller ile anlatılır. Bir termodinamik fonksiyona ait kritik üstel, o termodinamik fonksiyonun, sıcaklık kritik sıcaklığa gittiğinde gösterdiği davranışı (örneğin, iraksıyorsa iraksama hızını) anlatır. Bir sisteme ait kritik üsteller arasında eşitsizlikler ve bazı eşitlikler yazılabilir.

Faz geişleri, makro düzeyde öyle birtakım davranış biçimleri içerir ki, mikro düzeydeki ayrıntılara bakarak bunları öngörmek pek kolay olmaz. Katı bir cisim ısıtıldığında eklenen enerjinin etkisiyle molekülleri titreşir. Moleküller aralarındaki bağlara rağmen dışarıya doğru itişirler ve maddeyi genişlemek zorunda bırakırlar. Isı arttıkça genişleme de artar. Ancak, belirli bir sıcaklık ve basınca erişince, deęişme birdenbire ve süreksiz hale döner. İp önceleri uzamaktayken şimdi kopar. Kristal şekil erir ve moleküller birbirinden uzaęa kayar. Bunlar, katı cisimlerin hiçbir niteliğinden çıkarılması mümkün olmayan yasalara, akışkan cisimlerin yasalarına uyarlar. Atomun ortalama enerjisi hemen hemen deęişmemiş, fakat malzeme şimdi bir sıvı, bir mıknaıtıs ya da bir süperiletken haline gelmiş, yepyeni bir âleme dahil olmuştur.

Faz geişleri genel hatları ile Bölüm 2’de ele alındıktan sonra Bölüm 3’de sayısal teknikler hakkında kısaca bilgi verilerek, rasgelelik ve rasgele sayıların özellikleri Bölüm 4’de incelenmiştir. Bölüm 5’de ise Monte Carlo simülasyonları kısaca göz önüne alınarak manyetik maddeler, Ising modeli ve Monte Carlo simülasyonu Bölüm 6’da deęerlendirilmiş ve elde edilen sonuçlar Bölüm 7’de sunulmuştur.

2. FAZ GEÇİŞLERİ

2.1. Faz Geçiş Isısı

Herhangi bir maddenin iki faz durumunu göz önüne alalım ve bunları 1 ve 2 ile gösterelim. Sistem faz 1'den faz 2'ye yavaşça geçsin ve Q kadar bir ısı almış olsun. Olay, sabit basınç ($\Delta P = P_2 - P_1 = 0$) ve sabit sıcaklıkta ($\Delta T = T_2 - T_1 = 0$) gerçekleşirse, $Q = T\Delta S$ olacak şekilde tersinirdir. Termodinamiğin birinci yasası,

$$\Delta E = \Delta Q + \Delta W \quad (1)$$

ile ifade edilmek üzere,

$$\Delta E = T\Delta S + P\Delta V \quad (2)$$

şeklinde yazılarak,

$$Q = T\Delta S = \Delta(E - PV) = \Delta H \quad (3)$$

ifadesi elde edilebilir. Yani faz geçiş ısısı, entalpi değişimine eşittir (Veytsman, Kotelyanskii 1997).

2.2. Clausius-Clapeyron Denklemi

Bu formül, dengede iki farklı fazda bulunan bir sistem için basıncın sıcaklıkla nasıl değiştiğini açıklayan önemli bir bağıntıdır. Şekil 2.1'den görüleceği gibi faz geçişi, $P(T)$ eğrisi boyunca oluşur. Bu eğriye teğeti yani dP/dT 'yi hesaplayalım.

Faz geiş noktasında iki ayrı fazın kimyasal potansiyelleri $\mu_1 [P(T), T^-]$ ve $\mu_2 [P(T), T^-]$ olmak üzere denge noktasında kimyasal potansiyel eřitlięi,

$$\mu_1 [P(T), T^-] = \mu_2 [P(T), T^-] \quad (4)$$

řeklinde yazılabilir. Bu denklemin sıcaklıęa gre turevi alınarak,

$$\left[\left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{P,N} + \left(\frac{\partial \mu}{\partial P} \right)_{T,N} \frac{dP}{dT} \right]_1 = \left[\left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{P,N} + \left(\frac{\partial \mu}{\partial P} \right)_{T,N} \frac{dP}{dT} \right]_2 \quad (5)$$

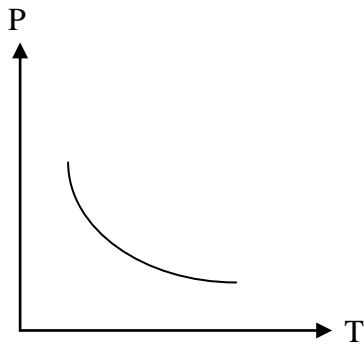
sonucu bulunur. $G = \mu N$ olup,

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial T} \right)_{P,N} = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{P,N} = \frac{S}{N} = s \quad (6)$$

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial P} \right)_{T,N} = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial G}{\partial P} \right)_{T,N} = -\frac{V}{N} = -v \quad (7)$$

denklemleri yazılabilir. Burada s ve v , molekl bařına entropi ve hacimdir; N paracık sayısı ve G Gibbs serbest enerjisidir. Dolayısıyla,

$$s_2 - s_1 = (v_2 - v_1) \frac{dP}{dT} \quad (8)$$



řekil 2.1 (P-T) dzleminde gsterilmiř bir eř hacim eęrisi (izokor).

olduğundan,

$$\frac{dP}{dT} = \frac{s_2 - s_1}{v_2 - v_1} \quad (9)$$

ve

$$s_2 - v_1 \frac{dP}{dT} = s_2 - v_2 \frac{dP}{dT} \quad (10)$$

ifadeleri elde edilir. İki faz için parçacık başına entropi ve hacim, sırasıyla,

$$s_{1,2} = \frac{S_{1,2}}{N_{1,2}}, \quad v_{1,2} = \frac{V_{1,2}}{N_{1,2}} \quad (11)$$

olup eşit değildir. Bununla birlikte $q = \epsilon_1 - s_2 T$ ifadesi parçacık başına *gizli ısı* olmak üzere, P sabitken her parçacığa q kadar gizli ısı eklenirse sistem bir fazdan diğerine geçer. T sıcaklığında faz geçişi $q = \epsilon_1 - s_2 T$ şeklinde tanımlanır. Entalpideki değişim $\Delta H = \epsilon_1 - S_2 T$ ile ifade edilirse, bir fazdan diğer faza geçen madde miktarı verilen ısı miktarı ile orantılıdır. Burada,

$$s_2 - s_1 = \frac{1}{N} (\epsilon_2 - S_1 T) = \frac{\Delta Q}{TN} = \frac{q}{T} \quad (12)$$

ifadesi yazılabilir ve Clausius-Clapeyron denklemi,

$$\frac{dP}{dT} = \frac{q}{T(v_2 - v_1)} \quad (13)$$

şeklinde elde edilir. Sonuçlar aşağıdaki şekilde özetlenebilir:

1. $v_2 > v_1$, $\frac{dT}{dP} = \left(\frac{dP}{dT}\right)^{-1} > 0$ olduğundan $q > 0$ için, sıvı-gaz faz geçişi olur ve kaynama noktası sıcaklığı basınçla birlikte artar.
2. He³ dışında, $q > 0$ için katı-sıvı faz geçişi olur. $v_2 > v_1$ olduğunda erime noktası sabit basınçla artarken, su için ($v_2 < v_1$) azalır (Veytsman, Kotelyanskii 1997).

2.3. Faz Geçişi ve Faz Geçiş Mertebesi

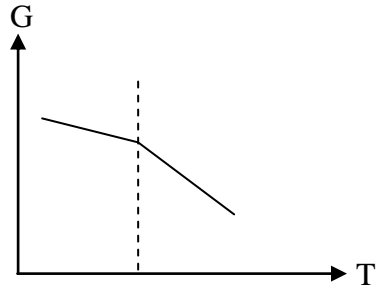
Herhangi bir maddenin iki faz durumunu göz önüne alalım. Denge noktasında iki fazın kimyasal potansiyeli $\mu_1(P,T)$ ve $\mu_2(P,T)$ olsun. Eğer madde faz 1'den faz 2'ye geçerse kimyasal potansiyel süreklidir, fakat kimyasal potansiyelin türevi süreksizdir. *Birinci türevdeki bu süreksizlik birinci mertebeli faz geçişini ifade eder.* Faz geçişi Gibbs serbest enerjisi (G) için de tanımlanabilir. *Gibbs serbest enerjisinin n. türevi süreksiz olmakla birlikte tüm daha düşük mertebeli türevleri sürekli ise, faz geçişi n. mertebededir* denir. Birinci mertebeli faz geçişinde, parçalı bir fonksiyon olarak tanımlanan G süreklidir, fakat G'nin birinci türevi süreksizdir (Şekil 2.2.a,b). İkinci mertebeli faz geçişinde ise G'nin kendisi ve birinci türevi sürekli iken G'nin ikinci türevi süreksizdir (Şekil 2.2.c,d). G'nin tam diferansiyeli,

$$dG = -SdT + VdP + \mu dN \quad (14)$$

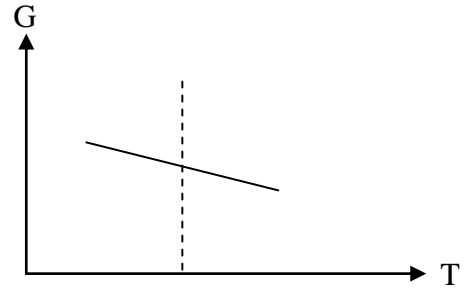
şeklinde tanımlanırsa, entropi, hacim ve kimyasal potansiyel,

$$S = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{P,N}, \quad V = \left(\frac{\partial G}{\partial P} \right)_{T,N}, \quad \mu = \left(\frac{\partial G}{\partial N} \right)_{P,T} \quad (15)$$

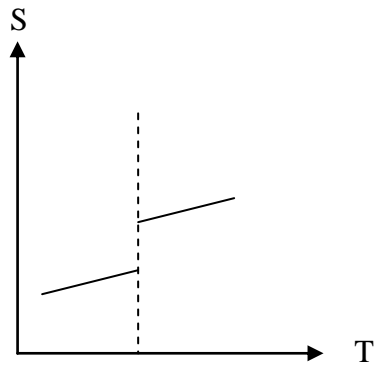
biçiminde elde edilebilir. L, sistemin T sıcaklığında tamamen sıvı halden gaz hale geçmesi için gerekli ısı olmak üzere, sistemin entropi değişimi $\Delta S = L/T$ formülü ile ifade edilir. Burada L' ye buharlaşma ısısı (gizli ısı) denir (Veytsman, Kotelyanskii 1997, Edward 2005).



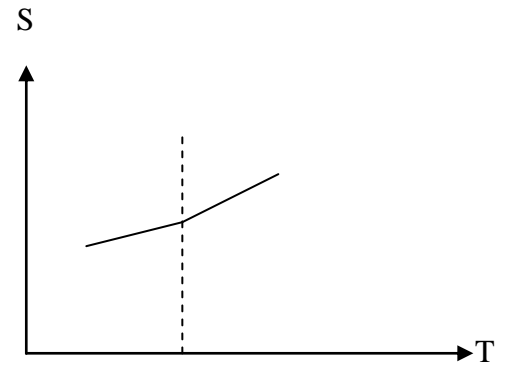
a



b



c



d

Şekil 2.2 a ve b'de birinci mertbe faz geçişleri, c ve d'de ikinci mertbe faz geçişleri gösterilmiştir.

3. SAYISAL TEKNİKLER

Günümüzde fizikle ilgili problemlerin çözümünde kullanılan birçok matematiksel yöntem vardır. Diferansiyel denklemler, türev ve integral örnek olarak sayılabilir. Ancak, bu yöntemlerin uygulanması her zaman kolay olmayabilir. Bu yöntemlerin uygulanmasında karşılaşılan güçlükleri aşmak için çeşitli yaklaşımlar ve metotlar geliştirilmiştir. Örnek olarak, diferansiyel denklemler için Euler yöntemi, integral hesabı için Simpson ve Trapez yöntemi sayılabilir. Bunlardan Simpson ve Trapez yöntemini kısaca ele alalım.

3.1. Trapez Yöntemi

Bir $f(x)$ fonksiyonunun, tanımlı olduğu $[a, b]$ kapalı aralığındaki belirli integrali,

$$S = \int_a^b f(x) dx \quad (16)$$

ifadesiyle tanımlanır. Geometrik yoruma göre bu integral, $[a, b]$ aralığında $f(x)$ eğrisi ile x eksenini arasında kalan yüzeyin alanı olur (Şekil 3.1). İntegralin analitik çözümü elde edilemediğinde veya çok karmaşık olduğu durumlarda sayısal integral alma yoluna gidilir. $[a, b]$ aralığında eşit aralıklarla sıralanmış N sayıda nokta göz önüne alınırsa h adım uzunluğu,

$$h = \frac{b - a}{N} \quad (17)$$

olur ve uç noktalarda hesaba katılırsa bu noktalar,

$$x_0 = a, \quad x_i = a + ih, \quad x_N = b \quad (i = 1, 2, \dots, N-1) \quad (18)$$

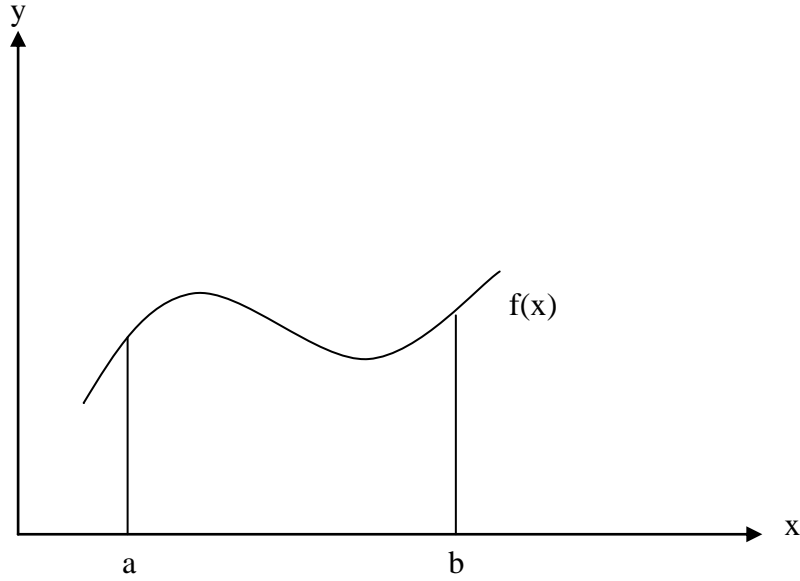
ile tanımlanır. İntegral değeri, her bir $[x_i, x_{i+1}]$ alt aralıklarındaki integral değerlerinin toplanmasıyla,

$$S = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx + \dots + \int_{x_{N-1}}^N f(x)dx \quad (19)$$

$$S = s_1 + s_2 + \dots + s_N \quad (20)$$

şeklinde elde edilir. Eğer h adımı çok küçükse, en basit yaklaşıklıkta, her bir aralıkta fonksiyon bir doğru parçası olarak alınır (Şekil 3.2). Bu durumda, $[x_i, x_{i+1}]$ aralığında oluşan yamuğun alanı,

$$s_i = \frac{(\text{sol kenar} + \text{sağ kenar})}{2} \times \text{genişlik} = \frac{f_i + f_{i+1}}{2} h \quad (21)$$



Şekil 3.1. Bir $f(x)$ fonksiyonunun integrali, fonksiyonun altında kalan alana eşittir.

şeklinde hesaplanabilir. N sayıda yamuk alanı toplanırsa, sayısal integral için trapez formülü,

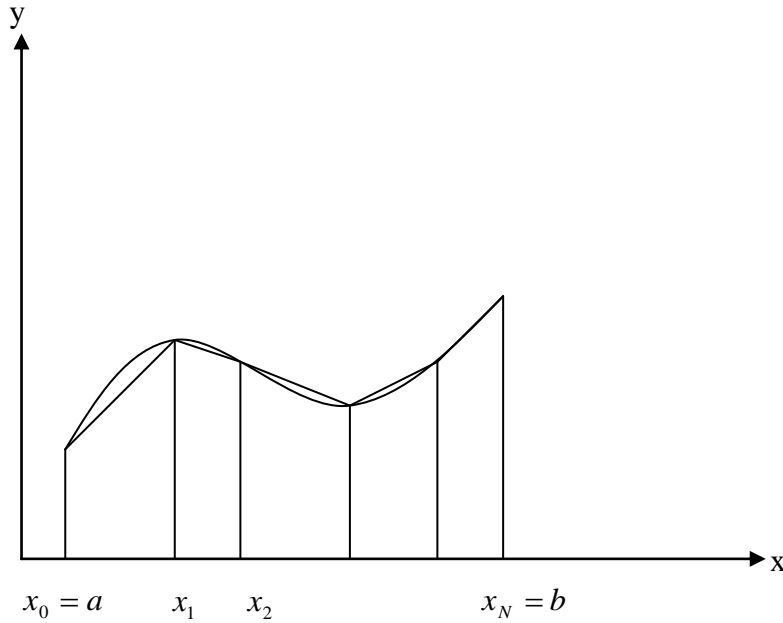
$$S = \frac{f_0 + f_1}{2}h + \frac{f_1 + f_2}{2}h + \dots + \frac{f_{N-1} + f_N}{2}h \quad (22)$$

veya,

$$\int_a^b f(x)dx = h \left[\frac{1}{2} f_0 + f_1 + \dots + f_{N-1} + \frac{1}{2} f_N \right] + O(h^2) \quad (23)$$

şeklinde yazılabilir. Trapez formülünde iki nokta arasını bir doğruyla birleştirmekten kaynaklanan hata payının $O(h^2)$ ile orantılı olduğu bilinmektedir (Karaoğlu, 2004). Dikkat edilirse, iki uç noktanın katsayısı $h/2$, içerdeki noktaların katsayısı h olmaktadır. Burada Trapez yönteminin basit bir uygulaması olarak aşağıdaki örnek

verilebilir: $\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}$ integralini $N = 5$ için Trapez yöntemi ile hesaplayalım. Burada her bir terimin hesabında virgülden sonra beşinci basamaktan sonrası hesaba katılmamıştır.



Şekil 3.2. Trapez metodunda eğri altındaki yamukların alanları toplanır.

yani kesme hatası söz konusudur. Denk.(23)'de tanımlanan Trapez formülünde $N = 5$ yazılırsa,

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} = h \left(\frac{1}{2} f_0 + f_1 + f_2 + f_3 + f_4 + \frac{1}{2} f_5 \right) \quad (24)$$

ifadesi elde edilir. Denk.(17) kullanılarak, $h = 0,2$ olarak bulunur ve Denk.(24)'deki her bir terim $1/2 f_0 = 0,50000$, $f_1 = 0,96153$, $f_2 = 0,86206$, $f_3 = 0,73528$, $f_4 = 0,60975$, $1/2 f_5 = 0,25000$ olarak hesaplanır. Bu değerler Denk.(24)'de yerine konulursa,

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} \cong 0,78372 \quad (25)$$

olarak integralin yaklaşık değeri bulunur.

3.2. Simpson Yöntemi

Daha iyi bir yaklaşıklık için N sayısı çift ve ardışık iki alt aralık birlikte ele alınırsa,

$$S = \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)dx + \dots + \int_{x_{N-2}}^{x_N} f(x)dx \quad (26)$$

$$S = s_1 + s_3 + \dots + s_{N-1} \quad (27)$$

ifadeleri yazılabilir. Herhangi bir s_i integrali, x_i noktası etrafındaki $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ çift aralığının katkısını verir. Bu s_i aralığını oluşturan üç noktayı, doğru parçalarıyla birleştirmek yerine bir parabolle temsil edersek yapılan hata daha az olacaktır. Şekil

3.3'den görüldüğü üzere, $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ aralığında her üç noktayı sağlayan parabolün denklemi,

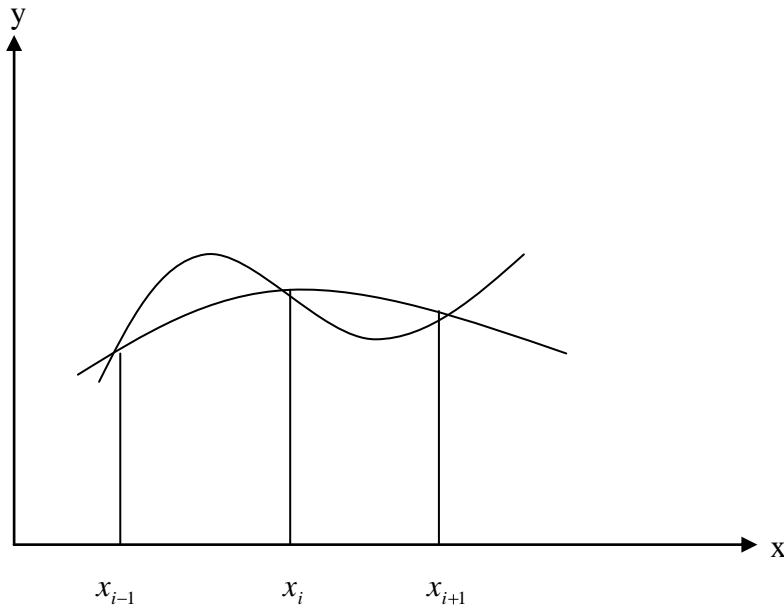
$$f(x) = \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{(x_{i-1} - x_i)(x_{i-1} - x_{i+1})} f_{i-1} + \frac{(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})}{(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})} f_i + \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)} f_{i+1} \quad (28)$$

şeklinde yazılabilir. Bu ifade Denk.(26)'da yerine konur ve s_i integrali analitik olarak alınır,

$$s_i = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x) dx = \frac{h}{3} [f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1}] \quad (29)$$

sonucu bulunur. Bu s_i ifadeleri Denk.(27)'de yerine konur ve düzenleme yapılırsa, Simpson formülü,

$$S = \frac{h}{3} [f_0 + 4f_1 + f_2] + \frac{h}{3} [f_2 + 4f_3 + f_4] + \dots + \frac{h}{3} [f_{N-2} + 4f_{N-1} + f_N] \quad (30)$$



Şekil 3.3. Simpson metodunda ardışık üç noktadan geçen parabolün altında kalan alan hesaplanır.

veya,

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3} [f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \dots + 4f_{N-1} + f_N] + O(h^4) \quad (31)$$

şeklinde ifade edilebilir. Simpson formülünde üç noktayı bir eğriyle birleştirmekten kaynaklanan hata payının $O(h^4)$ ile orantılı olduğu bilinmektedir. Yani, Trapez formülüne göre iki mertebe daha doğru sonuç verir. Dikkat edilirse iki uç noktanın katsayısı $h/3$ olup, içerdeki noktaların katsayıları 4, 2, 4, 2, ... şeklinde gitmektedir. Simpson yönteminin basit uygulaması olarak aşağıdaki örneği verebiliriz. Simpson yönteminde N 'nin bir çift sayı olması gerektiği unutulmamalıdır. Yukarıda Trapez yöntemi için kullandığımız $\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}$ integralini bu sefer $N = 4$ olarak Simpson yöntemiyle hesaplayalım. Burada her bir terimin hesabında virgülden sonra 5. basamaktan sonrası hesaba katılmamıştır. Denk.(31)'de $N = 4$ yazılırsa,

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} = \frac{h}{3} [f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + f_4] \quad (32)$$

şeklinde olur. Denk.(17) kullanılarak $h = 0,25$ ve $f_0 = 1,00000$, $4f_1 = 3,76468$, $2f_2 = 1,60000$, $4f_3 = 2,56000$ ve $f_4 = 0,50000$ sonuçları bulunur. Bu sonuçlar Denk.(32)'de yerine konulursa,

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} \cong 0,78535 \quad (33)$$

yaklaşık sonucu elde edilir. Her iki örnekte ele aldığımız integralin gerçek değeri hesaplanırsa,

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} = \frac{\pi}{4} \quad (34)$$

veya yaklaşık olarak 0,78539 sonucu bulunur. Yukarıdaki örnekte ifade etmeye çalıştığımız gibi, $N = 5$ için Trapez ve $N = 4$ için Simpson yöntemi ile integral değeri yaklaşık olarak hesaplanmıştır. Bunlara ek olarak N 'nin çeşitli değerleri için hem Simpson hem de Trapez yöntemiyle hesaplanan sonuçlar Tablo 3.1'de verilmiştir. Ancak, Tablo 3.1'de N çift sayı olmak zorunda olduğundan $N = 5$ için Simpson yöntemiyle integral değeri hesaplanmamıştır. Bulunan sonuçlarla integralin gerçek değeri karşılaştırıldığında, Simpson yönteminde bulunan yaklaşık sonuçların, Trapez yöntemindeki sonuçlara göre daha iyi olduğu görülmektedir. N sayısı arttıkça hem gerçek integral değerine yaklaşılmakta hem de hesaplamadaki hata azalmaktadır. Ayrıca aynı N değeri için ($N = 4$) Simpson formülüyle bulunan sonuçlar, Trapez formülüyle bulunan sonuçlara göre gerçek değere daha yakındır. Hesaplamalardaki hata payı Trapez ve Simpson yöntemlerinde sırasıyla $O(h^2)$ ve $O(h^4)$ ile değişiyordu. Burada N sayısının seçimi önemlidir, çünkü $h = (b-a)/N$ veya $N = (b-a)/h$ ifadelerinden görüldüğü gibi N arttıkça hata payı çok hızlı değişmektedir. Eğer N sayısı çok büyük seçilirse hesaplamalarda yuvarlama hatası artar, buna karşın çok küçük seçilirse kötü bir yaklaşıklık yapılmış olur. N sayısının seçimi için pratik olarak *sınama-yanılma* yöntemi kullanılmalıdır. N her defasında iki katına çıkarılarak integral sonuçlarının belli bir değere yakınsaması beklenir. Belli bir değerden sonra, sonuçların ıraksaması görülünce artırma sona erdirilir (Karaoğlu 2004).

Tablo 3.1. Tam değeri yaklaşık olarak 0,78539 olan Denk.(34)'deki integralin Trapez ve Simpson yöntemi ile bulunan yaklaşık değerleri.

N	Trapez Yöntemi için sonuçlar	Simpson Yöntemi için sonuçlar
4	0,78279	0,78535
5	0,78372	–
8	0,78474	0,78539

4. RASGELELİK VE RASGELE SAYILAR

4.1. Rasgelelik

Bir olay, eğer varolan koşullar çerçevesinde bir sürecin özünden zorunlu olarak doğmuyorsa, yani başka türlü de gerçekleşmesi olanaklıysa ve oluşmasına hiç gerek yoksa, rasgeledir. Zorunluluk ile rasgelelik arasındaki karşıtlık mutlak değil görecelidir, yani böyle bir karşıtlıktan ancak belirli koşullar çerçevesinde söz edilebilir. Meydana gelmesi belli koşullar altında zorunlu olan bir olay, başka koşullar altında rasgele olabileceği gibi, bunun tersi de olanaklıdır. Rasgele bir olay, süreç içinde zorunluluklara dönüşebilir. Zorunluluğun daima rasgelelik ile ortaya çıkması açısından rasgelelik, zorunluluğun tamamlayıcısıdır, yani zorunlu bir olay daima rasgele öğelerle tamamlanır. Rasgelelik nedenleri bilinmeyen zorunluluk değildir, rasgeleliğin nedenlerinin bilinmesi onun rasgelelik niteliğini değiştirmez. Evrende her olgu ve olay, iç nedenlerinin etkisiyle zorunlu olarak oluşur. Fakat evrendeki her olgu ve olay, aynı zamanda dış nedenlerden de etkilenir. Dış nedenler, iç nedenler gibi temel ve belirleyici değildir.

Doğada ve toplumda var olan her şey, şu ya da bu biçimde birbirine bağlıdır ve her şey birbirini etkileme durumundadır. Bir insan için nerede doğduğu, yaşamak için hangi çevreyi bulduğu tamamen rasgele, yaşamını sürdürebilmesi için yemesi ve içmesinin gerektiği ise zorunluluktur. Herhangi bir olgu ya da olayın rasgelelik veya zorunluluk olup olmadığını anlamak için onun bir iç nedenin mi yoksa bir dış nedenin mi ürünü olduğunu saptamak gerekir. Gerekli önlemler alınarak rasgelelik içeren olaylar ortadan kaldırılabilir. Bir piyangoda ikramiye çıkması şans sayılır, ama böylesine bir şansa ulaşmak için piyango bileti almak zorunludur. Bir kişinin trafik kazası yapması rasgeledir, ancak toplumun tümü trafik kurallarına uyduğu, yaya ve taşıt yollarının düzenli ve kullanışlı olduğu, toplu taşıma araçlarının kullanıldığı bir toplumda kaza yapma olasılığı azalacaktır.

Rasgelelik nesnedir, yani insan düşüncesinden ve iradesinden bağımsızdır. Rasgelelik bazen zorunluluğun işleyişini kısmen engelleyebilir. Zorunluluk, çeşitli rasgelelikler arasından kendi yolunu açar ve görevini yerine getirir. Doğada ve toplumda zorunluluk, yasaların bir sonucudur. Her olay ve olgu, bir başka olay ve olguyla ya temel ve içsel ya da temel olmayan ve dışsal bir bağlantı içindedir. Rasgelelik, her zaman bir nesnel zorunluluğu yani bir yasayı gizler. Bir olayın gerçekleşmesinin zorunlu olduğunu söylemek, onun bağıntılarının tamamlanmış olduğunu artık dıştan gelecek etkilere karşı direnç kazandığını, böylece değiştirilemeyeceğini, karşıt eğilime çevrilemeyeceğini söylemek demektir. Genel sonucu bir yasa olan çok büyük sayıdaki olayların her biri, yasadan şu ya da bu yönde, ya da şu veya bu ölçüde bir sapma meydana getirir ve bu anlamda da bir rasgelelik içerir. Burada yasa başarısızlık göstermez, tersine gözlemlenir. Yasa bir anlamda tamamlanmamış, dar, yaklaşıktır. Bütün bilimler istatistiksel modellemenin uygulamasından başka bir şey değildir. Gazların kinetik teorisinde, her gaz molekülünün son derece karmaşık bir yörünge çizdiği, fakat büyük sayılar yasası sonucu, gözlenmesi mümkün olan ortalama olayların Maryot ve Gay-Lussac gibi basit yasalara uyduğu kabul edilir. Kapalı bir kap içindeki gaz molekülleri, birbirlerine ve kabın duvarlarına rasgele olarak çarparlar, ancak kabın her duvarındaki gaz basıncı zorunlu olarak aynıdır. Gaz moleküllerinin rasgele hareketlerinin altında fiziksel ve kimyasal zorunluluk görülür.

Bilim, rasgelelik olgusunu her zaman göz önünde tutar ve onları en aza indirgemeye çalışır. Evrensel karşılıklı ilişki düşüncesi altında hiç bir olay ve olgunun mutlak olmadığı, sürekli oluş ve yok oluş içinde ilerlediği, birinden diğerine geçişi ve dönüşümü göz önüne almak gerekir. Birbirinden kopuk olarak gelişen bir çok tekil olayın, bu arada belirli bir düzenlilik ve genel ilişki içinde bütünleşebildikleri durumlar ortaya çıkabilir. Bu ilişkiler tekrarlanabilir, genel ve sürekli bir duruma geldiğinde rasgelelik son bulur. Rasgele olay belirli koşullarda ortaya çıkabilen ya da ortaya çıkması mümkün olmayan olaydır.

Bizi çevreleyen dünyada, zorunluluk ile rasgelelik arasındaki iç bağıntı nedir? Bu sorunun yanıtlarından biri şu olabilir: Zorunlu olarak olması gereken ve olmayabilecek olan hiç bir şey yoktur. Her şey, her olay, ne denli inanılmaz olursa olsun, şu ya da bu yolla olabilir. Bu görüş açısından, olanaksız olan bir şey olmadığı gibi zorunluluk olarak da bir şey yoktur. Dolayısıyla dünyadaki her şey rasgeleliğin sonucudur. Bu nedenle zorunluluğu görmezden gelip, her şeyin olabilirliğine inanan gruba felsefede *belirlenmezci*ler denir. Bilim, her şeyin, doğanın yasalarına boyun eğdiğini ve aman bilmez zorunluluk tarafından yönetildiğini göstermektedir. Hiç bir şey gerçekte olduğundan başka bir yolla olamaz. Bir olayın kesin olan doğa yasasına karşıt olarak gerçekleşebileceğini yani, olmasına gerek olmayan bir olayı, rasgele bir olay olarak varsayınca, bu, nedensiz bir olay yani mucize olur. Oysa mucizeler gerçekleşemezler. Bazı filozoflar, doğada hiç bir şeyin rasgele olarak olmadığı ve her şeyin önceden belirlendiği yargısına ulaşmışlardır. Bu düşünceyi benimseyenler Newton'un determinist klasik mekaniğinin yasalarında doğru yargıya ulaştıklarını düşünmüşler ve mekanikçi *belirlenimcilik* uzun yıllar insanlığı egemenliği altına almıştır. Ancak, bilim tek tek cisimlerin yörüngelerinden daha karmaşık şeylerle yüz yüze geldiğinde mekanikçi belirlenimciliğin temelini çöktürmüştür.

Her olayın önüne geçilmez bir biçimde belirlendiği ve kaçınılmaz olduğunu kabul ederek *yazgıcılığa* varmış oluruz. Her şeyin değiştirilemez bir biçimde önceden belirlenmiş olduğunu kabul etmek zorunlu olarak mekanikçi belirlenimciliğin sonucudur. Doğa yasaları gereği bitkiler ve hayvanlar dünyasında, hiç bir bitki ya da hayvanın sonsuza dek yaşamadığını görüyoruz. Büyümekte olan bir ağacın tam olarak ölüm gününü ve saatini saptayan bir yasa yoktur. Bu, bütün canlılar için de geçerlidir. Evrenin yüce bir kuramı yoktur, yalnızca evreni gittikçe daha doğru betimleyen sonsuz bir kuramlar dizisi vardır. *Olaylar belli bir yere kadar kestirilebilir, bundan ötesi gelişigüzel ve keyfidir.* Çağımızda doğa bilimlerinin amacı, olayları yalnızca *belirsizlik ilkesinin* saptadığı sınırlara kadar kestirebilecek bir yasalar takımını ortaya koymaktır.

Gerek doğada, gerek toplumda, hiç bir süreç özdeş biçimde yinelenemez. Yine de mutlak olmayan ama yaklaşık olan bazı bağıntıların yinelenmesi zorunlu olarak

gerçekleşir. *Tek tek olaylar yasadan belli sınırlar içinde sapabilir, ama hiç bir olay yasa ile çelişmez.* Klasik mekaniğin yasaları altında bulunan tek bir nesne durumunda, salt zorunluluk, rasgeleliğe yer bırakmayarak ağır basar. Bu durumda yasalar, makroskopik her tek nesne açısından mutlak olarak kesindir. Kuantum fiziğinde, üzerinde ölçüm yapılan bir sistem hakkında sorulan her soruya yanıt bulunamaz. Her istenen gözlem sonucu, istenilen kesinlikte belirlenemez. Kuantum fiziğinde ölçüm süreci için kullanılan ölçüm aygıtları sistemi değiştirir. Atom altı dünyada klasik mekaniğin yasaları yerlerini kuantum mekaniğinin yasalarına bırakır. Bir elektronun t anında x noktasında bulunmasını bir olasılık belirler.

Newton mekaniğindeki determinizm kavramı Laplace tarafından ortaya konulmuştur. 18. yüzyıla egemen olan deterministik dünya görüşü saat gibi kurgulu bir evren modelidir. Bir sistemin parçacıklarının konum ve momentumlarını bilirsek, sistemin zaman içerisindeki evrimini hareket denklemlerinden belirleriz. Laplace determinizmi denen şey en kaba anlamıyla budur. Günlük yaşamda, klasik fiziğin yasalarının geçerli olduğu dünyada Laplace anlamında determinizm geçerlidir. Kuantum mekaniğinde ise olasılıklar söz konusudur. Reaktörler veya atomların ışıması için olasılık hesapları yapılır ve gözlemlerle uyuşan sonuçlar bulunur. Yani, *öngörülen olasılıklar gözlemlerle doğrulanır. Bu anlamda determinizm, kuantum mekaniğinde vardır fakat Laplace anlamında determinist değildir.* Doğada ve toplumda, bilmediğimiz veya hesaba katmadığımız nedenlerle değişen sonuçlar veren olaylarla çoğu zaman karşılaşılır. Gerçekliği ifade eden matematiksel fonksiyonlar değildir. Gerçekliği ifade eden, büyüklüklerin deneyle belirlendiği dağılım fonksiyonlarıdır. Bilim giderek katı belirlenimcilik anlayışını terk etmekte ve günlük yaşam ölçeğiyle belirlenmiş yasaları değiştirmeden olguların temelinde yatan daha esnek bir *istatistik belirlenimcilik* anlayışına yaklaşmaktadır.

Rasgeleliğin, olmazsa olmaz iki özelliği vardır: Birincisi, fenomenin bir kez oluşundan dolayı sonucun tahmin edilememesi; ikincisi, fenomenin birçok tekrarı sonucunda ortaya bir motifin çıkması. Örneğin, yüzleri 1'den 6'ya kadar işaretli bir zarı atarken, bir sonraki atışta tek işaretli yüzeyin üste geleceği tahmin edilemez.

Ancak, zarı birçok kez attıktan sonra tek işaretli yüzeyin 600 atışın yaklaşık 100'ünde geleceği görülür.

4.2. Rasgele Sayıların Üretilmesi

Sayılar tek başlarına rasgele değildir, sadece uzun sayı dizileri rasgelelik açısından değerlendirilebilir. Rasgele bir sayı, her basamağın aynı oluş olasılığına sahip olduğu ve ardışık basamakların birbirinden tamamen bağımsız oldukları bir basamaklar serisi olarak tanımlanır. Rasgele sayılar simülasyon yoluyla zor problemlerin çözümünde kullanılabilir. Bir çok kez tekrarlanan bir deneyin sonucunda, ona ilişkin sabit bir değerle ilgili, gözlemlenen olaya dair göreceli bir frekansın olduğu gözlenir. Olasılık kavramlarının araştırılmasında zar atılması standart bir tekniktir. Ancak, simülasyonlar uzun zaman alır ve yorucu olabilir. Tek işaretli yüzeyin gelme sıklığı için 600 kez zar atmayı düşünün. Birçok matematiksel modele zıt olarak, rasgelelik anlaşılması zor bir konudur. Birçok matematiksel model determinist, yani geleceğe dair tahminlerde kullanılacak kesin bilgi temin ettikleri kabul edilir. Modelden elde edilen öngörülerini gerçek olgularla kıyaslayarak o modelin tutarlılığını, yani gerçeği ne derece yansıtabildiğini ortaya koyabiliriz. İstatistiki veriler kesin bilgi sağlamazlar, dolayısıyla geleceğe ilişkin tahminlerden emin olunamaz. Fakat tahmin şekillerine uyan olasılık modelleri kullanılabilir. Rasgele sayı üretmek için bir algoritma kullandığında, zar atılmasında olandan farklı bir yol kullanılır. Zar atılmasından farklı olarak, ilk sayı seçildikten sonra, diğerleri algoritmayla belirlenir. Bu sayılara yalancı rasgele sayılar adı verilir. Gerçek rasgele sayılarla ilgili bir sorun da, onları üreten mekanizma tarafından bir daha üretilmemeleridir. Bilim adamları, elde ettikleri sonuçların diğerlerince kontrolü için, simülasyonlarda kullandıkları rasgele dizileri tekrar üretebilme ihtiyacını sıkça duyarlar. Bilgisayarda rasgele sayı üretebilmek için rasgele sayı üreteçlerine ihtiyaç duyulur. Matematikte rasgele sayı üretmek için geliştirilen teknikler vardır. Örneğin, iki büyük sayı birbiriyle çarpılıp, diğer bir büyük sayı ile bölümün kalanı alınır. Bu işlem defalarca tekrarlandığında, birbiriyle ilgisi olmayan sayılar üretilir .

4.2.1. Linear congruential algoritma

$[0,1,0^-]$ aralığında, her biri eşit olasılıkla dağılmış x_1, x_2, \dots, x_n sayılarını üretmek isteyelim. Bunun için herhangi bir x_0 başlatıcı değerinden başlayarak, çarpma ve toplamlarla bir x_1 sayısı üretip bunu $[0,1,0^-]$ aralığına getiririz. Bu x_1 sayısına aynı kuralı uygulayıp x_2 sayısını buluruz, ... vb. Buna göre n. sayımız x_n ise, $x_{n+1} = (ax_n + b) \text{ mod } c$ bağıntısıyla bulunan x_{n+1} sayısı giderek rasgele bir karakter alır. Örneğin, $a = 7$, $b = 11$, $c = 10$ olsun ve $x_0 = 12$ sayısıyla başlanırsa, $x_1 = (7 \times 12 + 11) \text{ mod } 10 \rightarrow x_1 = 0.5$, $x_2 = (7 \times 0.5 + 11) \text{ mod } 10 \rightarrow x_2 = 0.6$, $x_3 = (7 \times 0.6 + 11) \text{ mod } 10 \rightarrow x_3 = 0.3$, . . . şeklinde sayılar üretilebilir. Böyle bir programı oluşturmak için uygun a, b, c sabitleri ve programı başlatacak bir x_0 değeri olmak üzere iki temel parametre vardır. Buradaki (a, b, c) üçlüsü rasgele seçilmeyip literatürde belirtilen sayılardır (Press ve ark., 1992). Literatürde verilen sayılar $a = 211$, $b = 1663$, $c = 7875$ 'dir. Bu sayıları kullanarak fortran dilinde rasgele sayı üreten bir fonksiyon alt programı Ek-A'da sunulmuştur. Bu program aldığı JBASLA başlatıcı sayısı ile çalışmaya başlayıp $[0,1,0^-]$ aralığında düzgün dağılmış reel bir rasgele sayı üretir. İkinci kez çalıştırıldığında, ilk sayı kullanılarak, ikinci bir rasgele sayı üretip gönderir ve bu şekilde devam eder. Burada dikkat edilmesi gereken nokta, *rasgele sayı üreten JBASLA başlatıcı değeri, bir kez verildikten sonra, bir daha kullanıcı tarafından değiştirilmemelidir* (Karaoğlu 2004).

4.2.2. Orta kare algoritması

Metropolis ve ark. (Metropolis 1953) tarafından rasgele sayı üretimi için bir rulet çarkını simüle eden orta kare algoritması önerilmiştir. Bu algorithmada 0000'dan 9999'a kadar rasgele sayılar üretmek için aşağıdaki basamaklar kullanılmıştır:

1. Herhangi bir dört basamaklı sayıyı seç (örneğin, 3214),
2. Bu sayının karesini al (10329799),

3. Bu sayının ortasındaki 4 basamağı al (3297),
4. İlk basamak (3) tek basamaklı rasgele bir sayıdır; 32 iki basamaklı rasgele bir sayıdır.
5. 2, 3 ve 4. basamakları yeni sayı, 3297 ile tekrar et.
6. İstenildiği kadar rasgele sayı elde edilene kadar algoritma tekrarlanır.

Orta kare algoritması zamanında kabul edilebilirdi. Ancak, rakamların kaçınılmaz olarak kendilerini tekrar etmeleri önemli bir sorundu. Bu sayı dizisine çember veya periyot denir. Bir periyot başladığında onu takip eden sayılar tekrarlanacaktır. Er ya da geç sayılar kendi kendilerini tekrar edecektir çünkü, sonlu sayıda olasılık mevcuttur.

4.2.3. Shift-Register algoritmaları

1950'lerden beri bilinen diğer tekniklere shift-register algoritmaları denir. Bu tip algoritmada, yeni üretilen her sayı listede daha önce belirlenmiş birçok sayıya ve seçilmiş bir m modülüne bağlıdır. Bu metodun basitleştirilmiş bir örneği bir Fibonacci dizisine dayanır. Bir Fibonacci dizisinde önceki iki sayı, bir sonrakini oluşturmak için toplanır (yani $X_n = X_{n-1} + X_{n-2}$). Dizi iki adet 1'le başlar: 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89,... Shift-register algoritmasında, önceki iki sayı mod7 de toplanır ve 1, 1, 2, 3, 5, 1, 6, 0, 6, 6, 5, ... şeklinde bir dizi elde edilir. Toplanacak sayılar listedeki bir veya daha fazla sayıyla da ayrılabilir. mod7 deki bir başka dizi de $X_n = X_{n-1} + X_{n-3}$ şeklinde üç adet 1 ile başlayabilir (Robinson ve ark. 1998). Bu örnekte oluşacak dizi 1, 1, 1, 2, 3, 4, 6, 2, 6, 5,... şeklinde olur. Yeni girişi oluşturan sayıların, her seferinde yeni sayıyı ekleyip diğerini çıkararak sürekli değişmesinden dolayı algoritmaya *shift-register* denilmektedir. Üretilmesi göreceli olarak daha basit olmasına rağmen, Fibonacci tipi bir algoritmaya dayanan bir sayı serisi rasgeleliği çok iyi test etmez. Değişik modüllerin ve toplanan değişik sayıların kullanıldığı diğer shift-register algoritmaları, rasgeleliği iyi test edebilen rasgele rakamlar tablolarına götürür. Dizideki ilk sayıların ve modülün seçimi iyi işleyen bir rasgele rakamlar tablosu oluşturmak için zorunludur.

4.3. Rasgeleliğin Test Edilmesi

Üretilen rasgele sayılar kümesinin gerçekten rasgele olduğunu ispat edebilecek hiç bir yöntem yoktur. Sadece rasgelelik test edilebilir. Rasgelelik testleri, rasgele sayıların kabul edilmiş özelliklerine dayanır. İlk özellik tekdüze dağılım, yani, basamakların dizide eşit temsilidir. Tekdüze dağılım bir frekans testiyle kontrol edilebilir. Tek basamaklar için, her basamağa zamanın %10'u düşer. Dizileri ikili veya üçlü gruplara ayırarak da dağılım kontrolü yapabiliriz. 00'dan 99'a kadarki çiftler eşit sayıda, veya her çift için %1'lik zaman söz konusu olmalıdır. Rasgelelik testinde gözetilen başlıca ikinci özellik basamakların bağımsızlığı, yani bir sonraki basamağın, bir önceki basamağa dayanılarak tahmin edilememesidir. Bir sayıyı onu takip eden sayıyla karşılaştıran yüksek-alçak veya yukarı-aşağı testi bağımsızlık özelliği için kullanılabilir. Bu nedenle rasgele sayılar, zamanın %10'u civarında aynı kalırlar, % 45'inde artarlar ve % 45'inde azalırlar (Robinson *ve ark.* 1998).

4.4. Rastlantısal Değişken ve Rastlantısal Olay

Rastlantısal değişken, gelecekteki bir gözlemden alacağı değeri önceden kesinlikle bilinmeyen bir değişkendir. Bir zarın atılışında gelecek sayı önceden bilinmeyeceğinden, bu sayıyı temsil eden değişken bir rastlantısal değişkendir. Rastlantısal değişkenlerdeki belirsizlik, bu değişkenlerin alacağı değerlerin önceden tahmin edilemeyen çok sayıda etkene bağlı olmasından ileri gelir. Bu durum doğal olaylardaki değişmelerden kaynaklanabileceği gibi, olay hakkındaki bilgilerimizin yetersizliğinden de ileri gelebilir. Böyle belirsizlikleri *deterministik* bir yaklaşımla incelemek mümkün değildir. Yani değişkenin alacağı değeri önceden kesinlikle belirleyebilen yasalar elde edilemez. Bunun yerine olasılıksal bir yaklaşım gerekir. Bir rastlantı değişkenin gelecekteki alacağı değer kesin olarak bilinmeyeceğine göre, ancak değişkenin bir gözlem sırasında belli bir değer almasına bir *rastlantısal olay* denilir. Buna göre hangi rastlantısal olayın görüleceği önceden kesinlikle bilinmemekle birlikte, herhangi bir rastlantısal olayın görülme olasılığını belirlemek mümkündür. Örneğin, zar atılışında seçilen bir sayının görülmesi bir rastlantısal olay

olup bu rastlantısal olaylardan herhangi birinin görülme olasılığı belirlenebilir. Olasılık teorisinde bir rastlantısal olayın meydana gelmesi şansı olasılık adı verilen bir büyüklükle ifade edilmektedir. Olasılık teorisine göre her rastlantısal olayın, değeri 0 ile 1 arasında değişen bir olasılığı vardır. Rastlantısal değişkeni büyük harfle (X), rastlantısal değişkenin bir gözlem sırasında aldığı değeri bu harfe karşı gelen küçük harfle (x) gösterirsek, $X = x_i$ rastlantısal olayın olasılığı,

$$P(X = x_i) = p_i \quad (35)$$

şeklinde dir. p_i 'nin 0 ile 1 arasında değişen olasılık değerinin 0 olması, söz konusu olayın hiçbir zaman meydana gelmeyeceğini 1 olması ise kesinlikle (her gözlemden) meydana geleceğini gösterir. Olasılık 0'dan 1'e doğru arttıkça gözlemler sırasında olayın görülme şansı artar, yani olayla daha sık karşılaşılır.

4.5. Rastlantısal Değişkenlerin Dağılımları

Bir rastlantısal değişkene ve bu değişkenin içinde bulunduğu topluluğa ait çeşitli rasgele olayların olasılıklarını toplu bir şekilde bir dağılım fonksiyonu ile ifade edebiliriz. Rastlantısal değişkenin değişme bölgesi genellikle alt ve üstten sonlu olduğu gibi, ölçümleri de belirli bir duyarlılıkla yapılabildiği için değişkeni sonlu sayıda değerden birini alabilen bir değişken gibi düşünmek daha anlamlı olur. Böyle bir değişkene ait çeşitli basit olayların olasılıkları,

$$p(x_i) = P(X = x_i) \quad (36)$$

şeklinde gösterilebilir. Olasılıklar toplamı,

$$\sum_{x_i} P(x_i) = 1 \quad (37)$$

olacak şekilde daima 1'e eşittir (normalizasyon koşulu). Buradan olasılık dağılım fonksiyonu,

$$F(x_i) = P(X \leq x_i) \quad (38)$$

şeklinde tanımlanır. Fonksiyonun tanımından hemen görülebileceği gibi,

$$F(x_i) = \sum_{(x_j \leq x_i)} P(x_j) \quad (39)$$

ifadesi yazılabilir. $F(x)$ fonksiyonu, 0'dan 1'e doğru gidildikçe artan basamaklı bir fonksiyondur. Olasılık yoğunluk fonksiyonu ile olasılık dağılım fonksiyonunun aynı bilgileri içerdiği ve ikisinden biri bilindiğinde diğeri kolayca elde edilebilir.

4.6. Sürekli Rasgele Değişkenler

Sürekli bir rastlantısal değişkenin alabileceği değerlerin sayısı sonsuzdur. Başka bir deyişle, böyle bir değişken bütün gerçek sayı değerlerini alabilir. Bir çok olayda sürekli değişkenlerle karşılaşabiliriz. Örnek olarak bir elemanın üzerinden akan akım verilebilir. Sürekli bir rastlantısal değişkenin alabileceği değerlerin sayısı sonsuz, bu değerleri alan olasılıklarının toplamı 1'e eşit olacağından $X = x$ şeklindeki basit olayların olasılıkları sıfıra gidecektir. Bu nedenle sürekli rastlantısal değişkenlerde basit olayların olasılıklarından söz etmek yerine değişkenin x ile $x + dx$ arasındaki bir aralıkta kalması şeklinde bir bileşik olayın olasılığını tanımlamak yoluna gidilir. Bunun için olasılık yoğunluk fonksiyonu $p(x)$,

$$p(x)dx = P(x \leq X \leq x + dx) \quad (40)$$

olarak tanımlanır. Yani $p(x)$ eğrisi ile x -ekseni ve x ile $x + dx$ noktalarında çizilen düşey çizgiler arasında kalan değişkenin x ile $x + dx$ aralığında bir değer alma olasılığını göstermektedir. Değişkenin sonlu bir aralıkta bulunması olasılığı bu aralığı

küçük parçalara ayırıp, bu parçalarda bulunma olasılıklarını toplayarak hesaplanabilir ve sonuç olarak,

$$P(x_1 < X < x_2) = \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx \quad (41)$$

ifadesine ulaşılır. Değişkenin $(-\infty, +\infty)$ aralığında bir değer alması kesin bir olay olduğuna göre $p(x)$ daima,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx = 1 \quad (42)$$

normalizasyon koşuluna uyar. Sürekli değişken halinde olasılık dağılım fonksiyonunun tanımı,

$$F(x) = P(X \leq x) \quad (43)$$

şeklinde olur ve değişmez. $F(x)$ ile $p(x)$ arasındaki ilişkinin,

$$F(x) = p(-\infty < x < +\infty) = \int_{-\infty}^x p(u) du \quad (44)$$

ve

$$p(x) = \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^x p(u) du = \frac{dF(x)}{dx} \quad (45)$$

şeklinde olacağı görülebilir.

4.7. Dağılım Parametreleri

Bir rasgele değişkenin herhangi bir gözlem sırasında alacağı değer önceden bilinemez. Fakat, bu değişkenin içinde bulunduğu toplulukla ilgili dağılım fonksiyonu bu değişkenin ve içinde bulunduğu topluluğun davranışı ile ilgili bilgileri kapsar. Bazı durumlarda dağılım fonksiyonunun vereceği bilgilerin tümünün bilinmesi gerekmez ya da bu bilgileri elde etmek mümkün olmayabilir. Bu durumda topluluğun rastlantısal değişkeninin ve davranışının başlıca özellikleri birkaç parametre yardımıyla özetlenebilir. Değişkenin dağılım fonksiyonunun belli özelliklerini yansıtan bu sayılara *dağılım parametreleri* denir. Parametrelerin eldeki verilerden tahmin edilmesi dağılım fonksiyonunun tahmin edilip kullanılmasına göre çok kolay olur. Bu nedenle yaklaşıktaysa çabuk cevapların elde edilmesi gereken problemlerde bu parametreleri kullanmak gerekir. En çok kullanılan parametreler istatistik moment tipinde olan *ortalama* ve *varyans*'dır. Bu değerler bir işlem yapılmak istenip topluluktan rasgele elemanlar seçilerek, yeni oluşturulan ve üzerinde işlem yapılması daha kolay olan alt grup ile, topluluğun tümü hakkında bilgi alınmaya çalışıldığında grup parametreleri olarak da oldukça önemlidir.

4.8. Merkezi Limit Teoremi

Olasılık temelli çalışmaların en önemli amacı, ilgilenilen topluluğun istatistiksel özelliklerini çıkarmaktır. Böylelikle topluluğun elemanları ve dağılımları hakkında bilgi sahibi olunur. *Merkezi limit teoremi*, olasılık alanındaki en önemli teoremlerden biridir. Bu teorem sayesinde çok geniş bir olasılıksal olayı, normal dağılımı kullanarak hem pratik hem de teorik anlamda yorumlayabilmemizi sağlar. Böylelikle standart normal dağılım tablosunu ve örneklerin ortalamalarını da kullanarak çözüme ulaşılabilir. *Genellikle topluluğun elemanlarının tümü, işlemin çok pahalı ve uzun olmasından bu istatistiksel incelemede yer alamazlar.* Bu nedenle, topluluk içinden seçilen belirli sayıdaki örnek grubu ile topluluğun tamamının özellikleri belirlenmeye çalışılır. Topluluktan alınan bu örnek grubunun istatistiksel özellikleri, grubun tamamının istatistiksel özellikleri ile benzerdir. Topluluğun tümüne ilişkin olan

ortalama ve varyans değerlerine *parametre*, topluluktan seçilen örnek grubundan elde edilen ortalama ve varyans değerlerine de *istatistik* denir. Genel olarak literatürde parametreler Yunan harfleri ile istatistikler ise Latin harfleri ile gösterilir. Bu tablodaki \hat{x} değeri,

$$\hat{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (46)$$

denklemleri ile hesaplanır. Bir topluluğun parametrelerini belirlemek için, topluluk içinden örnekler alıp ortalama ve varyanslarını hesaplarız. Bu işlemde elde edilen \hat{x} ve $\hat{\sigma}(x)$ değerleri, \bar{x} ve $\sigma(x)$ gerçek ortalama ve varyans değerlerinden sapma gösterirler. Bu sapma ise bir nevi hataya sebep olur. Çünkü elde edilen istatistikler seçilen örneklerin ortalama ve varyansı olmakla beraber, topluluğun tamamı ele alınmadığından dolayı gerçek değerlerden farklılık gösterir. Topluluğun parametreleri ve topluluktan alınan örneklerin istatistikleri arasındaki ilişki, topluluktan alınan örnek sayısı ile ilgilidir ve merkezi limit teoremine göre bu ilişki şu şekildedir:

1. Örneklerin ortalaması, normal dağılım şeklinde dağılır.

2. Bu örneklerin ortalamalarının dağılımının ortalaması topluluğun gerçek ortalama değeri olan \bar{x} parametresine eşit olur ve ortalamaların standart sapmasının dağılımını $\hat{\sigma}(x)$ olarak gösterilirse, topluluğun standart sapması arasındaki ilişki,

$$\hat{\sigma}(x) = \frac{\sigma(x)}{\sqrt{N}} \quad (47)$$

denklemleri ile ifade edilebilir.

Bu formülden de görüleceği gibi tam doğru sonuca ancak $N \rightarrow \infty$ durumunda ulaşılabilir. Bu ise, kümenin tamamının incelenmesi ile mümkündür. Merkezi limit teoremine göre, ortaya çıkan sapma gerçek topluluğun dağılımına bağlı değildir ve topluluktan aldığımız örneklerin ortalamasının dağılımı, daima *normal dağılım* şeklindedir. Ayrıca bir çok dağılım için normal dağılım N (her

ortalamanın hesaplanmasında kullanılan örnek sayısı) arttıkça oldukça hızlı bir yakınsama gösterir. Burada N değeri, her ortalama değeri için ele alınan örnek sayısıdır, toplam örnek sayısı değildir. Bu değişkenin normal dağılım özelliklerini gösterebilmesi için eleman sayısının, $N > 30$ şartını sağlaması gereklidir. Eğer eleman değerleri çok ayırık ve birbirinden oldukça farklılık gösteriyorsa, $N > 30$ eleman sayısı değeri bize normal dağılımı garantileyemeyebilir. Böyle bir durumda 50 ve daha fazla örnek alınması gereklidir. Çok karmaşık dağılımlı fonksiyonların incelenmesi oldukça risklidir ve hesaplamalarda dikkatli olunması gereklidir, ama böyle bir dağılıma da çok fazla rastlanmaz. Yinede sonuçlara daha iyi bir yaklaşım yapabilmek ve güvenilirliği kontrol etmek için, 50'den fazla örnek almak yerinde bir karar olacaktır. Merkezi limit teoremine ulaşmak için olasılık teorisinin temeli olan binom denklemini ele alalım. Bu denklem,

$$B(M) = \frac{N!}{M!(N-M)!} p^M \cdot q^{N-M} \quad (48)$$

olarak yazılır. Bu denklemde N bağımsız deneme sonucunda elde edilen M başarı olasılığı ifade edilmektedir. Eşitlikteki p değeri, deneme sonucundaki başarı olasılığını; q (= 1 - p) değeri denemenin başarısızlıkla sonuçlanması olasılığını göstermektedir. Bu denkleme gerekli yaklaşımlar ve işlemler yapıldığında,

$$f(\hat{x}) = \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \frac{1}{\sigma(x)} \exp\left[-\frac{N(\hat{x} - \bar{x})^2}{2\sigma^2(x)}\right] \quad (49)$$

şeklinde *Gauss dağılımı* elde edilir. Normal (Gauss) dağılımı bir çok farklı fizik, istatistik ve mühendislik problemlerinin çözümünde yaygın olarak kullanılır. Gauss

Tablo 4.1 Ortalama ve standart sapmanın simgeleri.

	Parametre	İstatistik
Ortalama	\bar{x}	\hat{x}
Standart sapma	$\sigma(x)$	$\hat{\sigma}(x)$

modeli'nin en dikkat çekici yönü merkezi limit teoremine dayanmasıdır. Bu nedenle Gauss modeli genellikle eldeki verilerin belirli bir kurala uymadan oldukça değişken dalgalanmalar gösterdiği durumlarda kullanılır. N örnek sayısı sonlu olduğu müddetçe, örneğin Monte Carlo hesaplamaların da, tam bir sonuç elde etmek mümkün değildir. Bu yüzden \bar{x} civarında, \hat{x} 'in belli bir olasılıkla içinde bulunacağı bir limit değer veya bir aralık tahmin edilmeye çalışılır. Monte Carlo yönteminde amaç, büyük elemanlar topluluğunun özelliklerinin, rasgele olarak seçilmiş bir alt kümesi aracılığı ile çıkartılmasıdır. Örneğin, herhangi bir $f(x)$ fonksiyonun (a, b) aralığındaki beklenen değeri bu fonksiyonun bu aralıkta rasgele seçilen sonlu sayıdaki noktaların beklenen değerinden çıkarılabilir.

4.9. Ortalama

Bir rastlantı değişkeninin dağılımının en önemli değeri dağılımın merkezi değeridir. Çeşitli gözlemler sırasında değişkenin alacağı değerle çevresinde kümelenildiği merkez için farklı tanımlar kullanılabilir. Ancak bunların içinde en çok kullanılan *ortalama* ya da *beklenen değer* olarak adlandırılan ve aşağıdaki şekilde tanımlanan değerdir. Bu değişkenin ortalaması, $p(x)$ olasılık yoğunluk fonksiyonu ile x 'in çarpımının $(-\infty, +\infty)$ aralığında integre edilerek,

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} xp(x)dx \quad (50)$$

şeklinde bulunur. Rastlantısal değişkenlerle ilgili problemlerde değişkenin ortalama değeri en anlamlı parametredir. Zira değişkenin dağılımının merkezini, yani çeşitli gözlemlerde gözlenecek değerlerin çevresinde dağılacığı değeri gösterir. Bir çok problemde, rastlantı değişkeni deterministik bir gözle ele alınmak istenirse, bu değişkenin daima ortalama değerine eşit olduğu kabul edilir.

4.10. Varyans

Ortalama değer bir rastlantı değişkeninin merkezsiz değerini göstermekle birlikte, bu değer çevresindeki yayılımın büyüklüğü hakkında bilgi vermez. Bu yayılmayı ölçmek için çok kullanılan parametre ise *varyans*'dir. Varyans,

$$Var(x) = \sigma(x)^2 = \overline{(x - \bar{x})^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \bar{x})^2 p(x) dx \quad (51)$$

şeklinde tanımlanır. Yukarıdaki ifadeye göre varyans, rastlantısal değişkenlerin ortalamasından farkının karesinin beklenen değeridir. Varyansın büyük olması değişkenin ortalama çevresindeki yayılmasının büyük olduğunu gösterir. Varyansın boyutu rastlantısal değişkenin boyutunun karesi şeklindedir. Bu çoğu zaman fiziksel açıdan anlamlı olmadığından varyans yerine, varyansın karekökü olan *standart sapmayı* kullanma yoluna gidilir. Bunu,

$$\sigma(x) = \sqrt{Var(x)} = \sqrt{\overline{(x - \bar{x})^2}} \quad (52)$$

şeklinde ifade edebiliriz. Standart sapma rastlantısal değişkenle aynı boyutta olduğu için daha anlamlıdır. Bir çok durumda ortalama ve standart sapmayı bilmek rastlantısal değişkenin dağılımı hakkında hüküm vermek için yeterli olur. Standart sapmanın göz önüne alınması ile değişkenin rastlantısal karakteri de ana hatlarıyla göz önüne alınmış olur (Tavukçu 2000).

5. MONTE CARLO SİMÜLASYONU

5.1. Simülasyon

Simülasyon, dinamik bir sistemin özelliklerini ve davranışlarını bilgisayar aracılığıyla taklit eden ve sonuçlarını sayısal olarak değerlendiren bir tekniktir. Başka bir tanımla, gerçek bir problemin bilgisayarla yapılan modelidir. Doğada karşılaşılan bu tür problemler, rasgele ve karmaşık olmaları dolayısıyla çok sayıda değişken içerir. Çözüm için, Monte Carlo gibi simülasyon teknikleri kullanılabilir. Simülasyon önemlidir çünkü, bazı çalışmaların pahalı ve dikkat isteyen gerçek deneylerle yapılması zordur. Ayrıca simülasyonlar, sistem parametrelerini değiştirerek, sistemin davranışlarını gözlemlememize imkan sağladığı gibi gerçekte meydana gelebilecek durumları önceden oluşturarak ve bu olayların sonucunu görerek çalışmamıza imkan verir. Simülasyon modellerinin en önemli özelliklerinden biri, zamanın en temel elemanlardan biri olmasıdır. Yani, simülasyon tekniği ile bir sistemin çözümü demek, sistemin zaman içinde davranışının belirlenmesi demektir. Sonuçta elde edilenler, istenen model karakteristiklerine ait birer tahmindir. Herhangi bir amaç için geliştirilen ve çalıştırılan bir simülasyon modeli, kontrol edilebilir koşullar altında sistemin dinamik davranışlarının kontrol altına alınmasına imkan sağlar. Basitçe *simülasyon teknikleri, ilgili problemlerin analizinde bir laboratuvar görevi üstlenir.*

5.2. Monte Carlo Simülasyonu

Monte Carlo yöntemi ismini, Monaco'nun kumarhaneleri ile ünlü şehri Monte Carlo'dan almıştır. Monte Carlo yöntemi temelde rasgele sayı üretimine dayalı bir tekniktir. Bu yöntem olasılığa dayalı bir oyun olan rulet oyunu ile benzerlik göstermektedir. Rulet oyunu, üzerinde değişik renkler ve sayılar bulunan bir diskten oluşur. Disk, bir yönde hızla döndürülürken küçük bir metal top aksi yönde disk üzerinde döndürülür. Bir süre sonra top, bir renk ve sayı üzerinde durur. Matematiksel olarak

rulet diski, mekanik bir rasgele sayı üreticiden başka bir şey değildir. Monte Carlo tekniği de temelde rasgele sayı üretimine dayandığından bu isim verilmiştir. Monte Carlo simülasyonu, özel bir denemede ya da bir simülasyon çalışmasında bir ya da daha çok olasılık dağılımından rasgele sayılar seçme tekniğidir. Yöntemin bugünkü kullanımı, genellikle olasılık dağılımlarından rasgele değerlerin seçimi şeklindedir. Bu yöntemde, hem sayısal integrasyonların ve çok serbestlik dereceli sistemlerin bilgisayar simülasyonlarını yapmak, hem de istatistik çalkantıları simüle etmek için rasgele sayılar kullanılır. Monte Carlo tekniği olasılıksal temelli bir yöntem olduğundan, çok fazla hesaba ve rasgele ortamları modelleyebilecek rasgele sayıya ihtiyaç duymaktadır. Bu sebeple güçlü bilgisayarlar ve rasgele sayı üreticileri gereklidir. Monte Carlo tekniği, basit rasgele işlemlere ve çok boyutlu integrallere uygulanırken, beklenen değerlerin tahmin edilmesinde de etkili ve gerekli bir tekniktir. Bu teknik, çok boyutlu integraller için analitik formüllerden daha verimlidir. Ayrıca, özel problemlere olasılıksal olarak rahatlıkla uyarlanabilirler ve belirli integrasyon formüllerinin olmadığı, standart analitik tekniklerle çözülmesi verimsiz olacak çok karmaşık problemlere rahatlıkla uygulanabilir. Monte Carlo tekniği sayısal bir teknik olmakla birlikte, deterministik bir ifadenin sayısal çözümü ile karıştırılmamalıdır. Çünkü, Monte Carlo deterministik bir teknik değildir. Örneğin, trigonometrik bir fonksiyonun $[-\pi, \pi]$ aralığında yamuk kuralına göre sayısal integralinin hesaplanması, deterministik bir hesaplamadır. Monte Carlo yöntemi deterministik bir teknik olmamasına karşın, deterministik ve stokastik problemlere de uygulanabilir. Monte Carlo tekniği matematiksel formüllerden ziyade, karmaşık modellerin canlandırılması yoluyla modelleme yapan bir tekniktir.

5.3. Monte Carlo Yönteminin Sayısal İntegrallere Uygulanması

Monte Carlo yöntemi ile integrasyon temelde rasgele bazı sayıların üretilmesi ve bu sayılar ile integrasyon sonucunun yaklaşık olarak bulunmasına dayanır. Monte Carlo yöntemi ile geleneksel integrasyon yöntemleri arasındaki fark kendini yüksek boyutlu integrallerde gösterir. Geleneksel yöntemlerin büyük çoğunluğu temelde, integral alınacak bölgede noktalar seçip integrantın bu noktalardaki değerlerini

toplamaktan ibarettir. Monte Carlo yönteminin gücü, yüksek boyutlu integrasyonlarda ortaya çıkar. N seçilen nokta sayısı ve d integrasyon boyutu olmak üzere, Simpson yöntemi ile yapılan integral alma işleminde hatanın $N^{-4/d}$ ile orantılı olduğu bilinmektedir. İntegrasyon boyutu arttıkça, hatanın azalış hızı seçilen nokta sayısıyla azalmaktadır. Monte Carlo yöntemiyle alınan integralde ise hata $N^{-1/2}$ ile orantılıdır. İntegrasyon boyutundan bağımsız olan bu değer Monte Carlo yönteminin yüksek boyutlu integrasyonlardaki avantajını ortaya çıkarmaktadır. Hata, sadece seçilen nokta sayısı ile orantılıdır ve nokta sayısının karekökü ile azalır. Bir $f(x)$ fonksiyonunun, $[a, b]$ aralığındaki integralini göz önüne alalım. Bu durumda integral,

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad (53)$$

olur. Matematikten bilinen ortalama değer teoremine göre bir $f(x)$ fonksiyonunun $[a, b]$ aralığındaki integrali, fonksiyonun ortalama değerinden çizilen dikdörtgenin alanına eşittir (Şekil 5.1). O halde fonksiyonun $\langle f \rangle$ ortalama değerini bilirsek, (b-a) ile çarpıp integrali yaklaşık olarak hesaplamış oluruz. $[a, b]$ aralığında x_1, x_2, \dots, x_N gibi rasgele seçilmiş N tane nokta alalım. Fonksiyonun bu noktalardaki aritmetik ortalaması hesaplanırsa,

$$\langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (54)$$

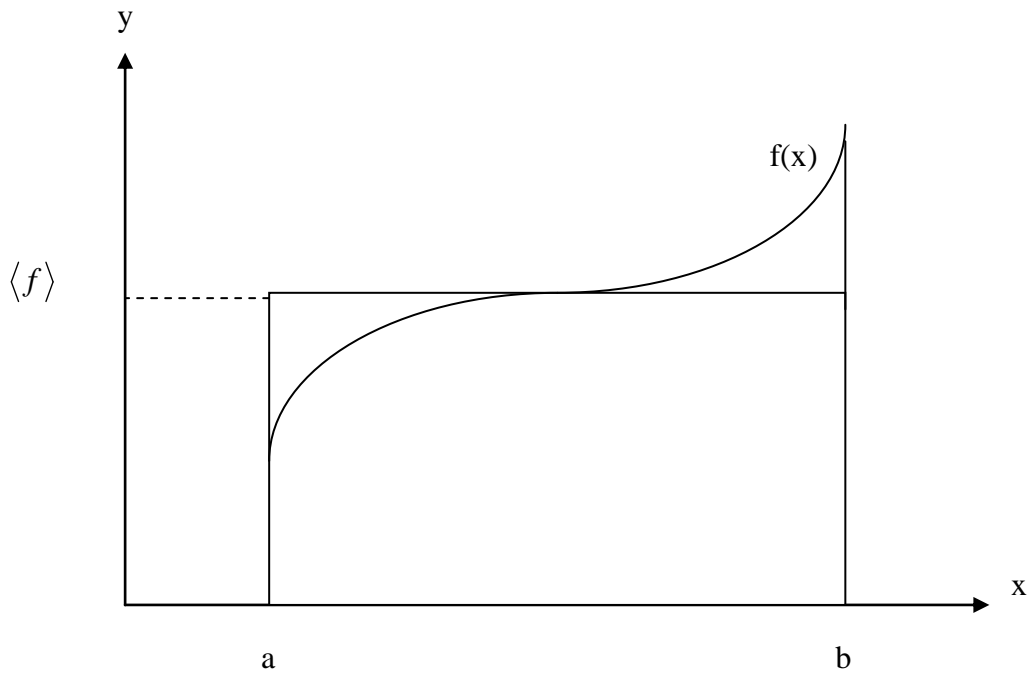
olur. Bu değer kullanıldığında Monte Carlo integrasyon formülü,

$$I = \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (55)$$

olarak elde edilir. Buradaki x_1, x_2, \dots, x_N noktaları eşit aralıklarla sıralanmış olmayıp, tamamen rasgele seçilmiş noktalardır. Monte Carlo tekniğinde kullanılan yöntemler aşağıdaki gibi sıralanabilir:

1. Reddetme (rejection veya hit & miss) yöntemi.
2. Ortalama (averaging) yöntemi.
3. Kontrol değişkeni (control variates) yöntemi.
4. Önem örnekleme (importance sampling) yöntemi.

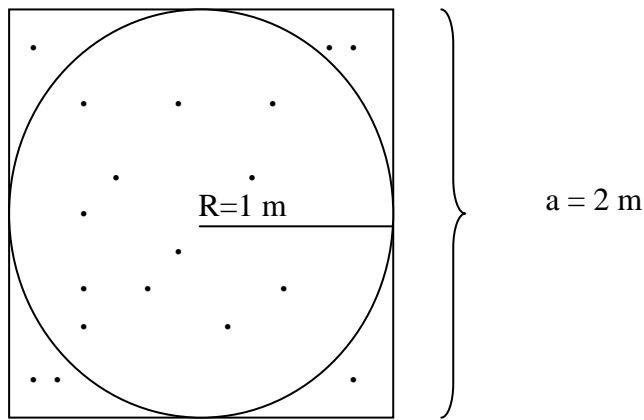
Burada reddetme yöntemini kısaca açıklayalım. Reddetme yönteminde amaç, sayısal bir değer bulmaktan çok integre edilmek istenen eğri alanının rasgele üretilen sayılardan elde edilen noktalarla taranarak, integrali alınmak istenen bölgedeki noktalarla, toplam nokta sayısı arasında bir oran bulmaktır. Üretilen bu rasgele sayıların kaçının eğrinin altında kaçının eğrinin üstünde kaldığının oranı, bu integralin değerini verecektir. Eğrinin altında kalan noktalar integral değerine eklenecek yani kabul edilecek, eğrinin üstünde kalan noktalar ise bulunmak istenen eğrinin integraline herhangi bir etkide bulunmayarak reddedilecektir. Böylelikle toplam nokta sayısı ile eğri altında kalan nokta sayısı arasındaki oran, taranan toplam



Şekil 5.1. Ortalama $\langle f \rangle$ değerinden çizilen dikdörtgenin alanı, eğri altında kalan toplam alana eşit olur.

alan ile integrali bulunmak istenen alanın oranına eşit olacaktır. Reddedilen noktaların hesaplama için herhangi bir önemi yoktur. Sadece meydana getirdikleri zaman kaybı ile işlem zamanının uzamasına neden olurlar. Bu nedenle, reddedilen nokta sayısının minimuma indirilmesi amaçlanır ve nokta atışının yapılacağı bölgenin en iyi bir şekilde belirlenmesine çalışılır. Eğer gerektiğinden geniş bir alan taranır, reddedilecek nokta sayısı çok fazla artarak büyük bir vakit kaybına neden olur. Alan gerektiğinden küçük tutulduğu takdirde ise integrali alınacak olan bölgenin bir kısmı dışarıda kalacağından dolayı yanlış bir sonuç elde edilir. Bu yöntemin dezavantajı, belirlenen bölgenin tamamının taranmasının gerekmesi ve reddedilen noktaların integrale herhangi bir katkısı olmamasından dolayı vakit kaybına sebep olmasıdır. Burada, rasgele sayı üreticinin önemi büyüktür. Eğer ideale yakın bir sayı üretici kullanmazsak, örneklerimiz üreticinin ideal olmamasından dolayı bir bölgeye yoğunlaşacağından o bölgenin karakterini gösterecek ve istediğimiz değere tam olarak yaklaşmamıza engel olacaktır. Monte Carlo yönteminin basit bir uygulaması olarak reddetme yöntemi ile π sayısının hesaplanmasını verebiliriz. Şekilde 5.2’de görülen bir kenar uzunluğu $a = 2$ m olan kare levha ve bunun içine çizilmiş $R = 1$ m yarıçaplı daireyi göz önüne alalım. Bir ok, bu levha üzerine birçok kez atılırsa dairenin içine düşen okların oranı,

$$P \{ \bullet < R \} = \frac{\text{daire alanı}}{\text{toplam alan}} = \frac{\pi R^2}{a^2} = \frac{\pi}{4} \quad (56)$$



Şekil 5.2. Birim daireye yapılan rasgele atışlar.

olarak bulunur. Bu oran, çeyrek daire için hesap yapılırsa da değişmez. O halde, çeyrek bir levha üzerine düşen okun düştüğü yerin x ve y koordinatlarını $[0,1]$ aralığında rasgele atışla tespit edebiliriz. Eğer $r^2 = x^2 + y^2 \leq 1$ oluyorsa, daire içine bir atış, değilse daire dışına bir atış yapmış sayarız. Çok sayıda atış sonucu daire içine düşen okların oranını 4 ile çarparsak π sayısını yaklaşık olarak hesaplamış oluruz. Burada ok atışlarını 10^N ($N = 1,2,3,\dots,7$) kez yaparak, π sayısını hesaplayan bir fortran programının çıktısı Tablo 5.1'de verilmiştir. Tabloya göre N sayısı arttıkça, teorik $\pi = 3.14159\dots$ değerine giderek yaklaşılmaktadır (Karaoğlu 2004).

5.4. Hata Değerlendirmesi

Monte Carlo yöntemi, hesaplamada kullanılan programın bir çok kez çalıştırılması sonucunda ortalama çözümler verir. Bu nedenle, çözümler beklenen değer hakkında yapılan tahminlerin dalgalanmalarını ve yükselip alçalmalarını da içerir. Olasılıksal bir yaklaşım yapıldığından tam olarak kesin bir sonuç elde edilmesi imkansızdır. Monte Carlo yönteminin uygulanmasında oluşan bu olasılıksal belirsizliği değerlendirmek için rasgele değişkenlerle ilişkili çeşitli olasılıksal tekniklere başvurulmuştur. Monte Carlo yönteminde hata olarak incelenen yukarıda bahsedilen beklenen değer ve bu değerın varyansdır. Bu değerler merkezi limit teoremi ile incelenir. $p(x)$, x-rasgele değişkeninin olasılık yoğunluk fonksiyonu olmak üzere bu değişkenin beklenen değeri Denk.(50) ile verildiğinden, Monte Carlo yönteminde kullanılan x_i rasgele değişkenlerinin beklenen değeri Denk.(46) ile

N	π
10	2.80000000
100	3.20000000
1000	3.10400000
10000	3.14100000
100000	3.14500000
1000000	3.14462800
10000000	3.14463640

Tablo 5.1. π için bulunan değerler.

verilecektir. \hat{x} değeri, tam olarak \bar{x} gerçek beklenen değerine eşit olmayabileceğinden, bu iki değer arasındaki sapmalar bize bir hata saçılımı verecektir. Bu hata saçılımını bulmak için, öncelikle, x 'in gerçek beklenen değerinden saçılımının karesinin beklenen değerini aşağıdaki şekilde elde edebiliriz:

$$\overline{(x - \bar{x})^2} = x^2 - 2x\bar{x} + \bar{x}^2 \quad (57)$$

olduğundan Denk.(51)'i,

$$\sigma^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 p(x) dx - 2\bar{x} \int_{-\infty}^{+\infty} x p(x) dx + \bar{x}^2 \int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx \quad (58)$$

şeklinde yazabiliriz. Burada da,

$$\sigma^2(x) = \overline{(x - \bar{x})^2} \quad (59)$$

denklemini elde edebiliriz. Varyansın karekökü, x 'in beklenen değeri \bar{x} etrafında ne kadar bir saçılım gösterdiğinin bir ifadesi olup standart sapmadır ve Denk.(52) ile verilir. Bu standart sapma değeri, aynı zamanda meydana gelen hatanın büyüklüğü bakımından bilgi verir. Beklenen değeri \bar{x} olan, x değerimiz ile Monte Carlo yönteminde kullandığımız beklenen değeri \hat{x} olan bağımsız ve rasgele seçilen x_i örneklerinin standart sapması arasında Denk.(47) ile verilen ilişki vardır. Dolayısıyla, N örnek sayısı ne kadar büyük ise Monte Carlo yönteminde hesaplanan \hat{x} değeri, \bar{x} değerine o kadar yakın olacaktır. Monte Carlo yönteminde hata, boyuttan bağımsız olup Denk.(47)'den görüleceği gibi $1/\sqrt{N}$ ile orantılıdır. Örneğin, hatayı $1/10$ azaltabilmek için örnek sayısı $\bar{N} = 100 * N$ yani 100 kat artırılmalıdır. Diğer integrasyon metotlarında hata, $1/N^{2/d}$ ile orantılıdır. Bu durumda da Monte Carlo integral yönteminin 1 boyut için diğer yöntemler kadar verimli olmayacağı çok açıktır. Ancak standart sapma, integrasyon boyutundan bağımsız olduğundan yöntem,

boyut $d > 4$ olduđu durumlar için daha hızlı ve daha az hatalı sonuçlar verecektir. Buradan da anlaşılabilirceği gibi, yüksek boyutlu integral alma işlemlerinde Monte Carlo yöntemi daha avantajlı bir yöntemdir (Tavukçu, 2000).

6. MANYETİK MADDELER, İSİNG MODELİ VE MONTE CARLO SİMÜLASYONU

6.1. Ferromanyetik, Paramanyetik ve Diyamanyetik Maddeler

Hareketli yükler ve akım şekilleri, boşlukta değil de bazı maddelerden meydana gelen ortamda bulunurlarsa, bunların oluşturdukları manyetik alan boşluğa göre çok az farklı olacaktır. Bununla birlikte *ferromanyetikler* diye isimlendirilen bazı maddelerin oluşturduğu ortamda hareketli yükler ve akım şekillerinin oluşturduğu manyetik alan değeri, boşluğa göre çok farklı olacaktır. Güncel olarak kullanılan, elektrik jeneratörleri, motorlar, transformatörler ve ev aletlerinde akımca oluşturulan manyetik alanlardan daha iyi yararlanmak için bunların yapısal parçası olan çatılarında demir, çelik veya demir alaşımları kullanılır. Bu çatılar, hem meydana gelen manyetik akıyı arttıırırlar hem de bu akıyı istenilen bölgeye yönlendirirler. Genelde herhangi bir akım ilmeği, manyetik alana ve buna karşılık gelen manyetik momente sahiptir. Benzer şekilde bir maddedeki manyetik momentler, iç atomik akımlardan kaynaklanırlar. Bu akımların, elektronların çekirdek etrafında ve çekirdekdeki protonların birbirleri etrafında dolanımlarından ileri geldikleri bilinmektedir. Elektronlardan kaynaklanan manyetik momentler, daha açık olarak elektronun net manyetik momenti, elektronun yörüngesel hareketi ile spin adı verilen iç özelliğinin birleşiminden meydana gelir. Bu manyetik dipol momentlerin aralarındaki karşılıklı etkileşim kuvvetleri ve dış manyetik alan ile etkileşimleri, manyetik maddeyi anlayabilmek bakımından önemlidir.

Maddeler manyetik alandaki mıknatıslanmalarına göre *paramanyetik*, *ferromanyetik* ve *diyamanyetik* olmak üzere üç kısımda toplanırlar. Paramanyetik ve ferromanyetik maddeler sürekli dipol momentli atomlara sahiptir. Diyamanyetik maddelerin atomları ise sürekli dipol momente sahip değildir. Daha açık olarak

cisimler az veya çok şiddetli olmak üzere manyetik özellikler gösterirler. Elektriksel açıdan birbirine yakın iki eşit zıt yük, bir dipol momenti oluşturur. Manyetizmada ise bir tek manyetik yükten söz edilemez çünkü, böyle bir şeye şimdiye kadar rastlanmamıştır. N ve S kutbu olan bir çubuk mıknatısı, ne kadar küçük parçalara bölersek bölelim sonunda elde edilecek elemanter parçada iki kutuplu olmayı muhafaza edecektir. Böyle bir yapıya, manyetik dipol momenti adı verilir ve μ ile gösterilir. Halka şeklindeki elektrik devreleri (halka şeklindeki akım şekilleri), kısa solenoidler, çubuk şeklindeki mıknatıslar, kendilerinden belli bir uzaklıkta bir manyetik dipole özdeş etki göstermektedirler ve bunlara manyetik dipol denilmektedir. Bir dipolün kutuplarının yerini bir manyetik alan içinde tayin edebiliriz. Manyetik dipolün değerini de, yine dipolün bir manyetik alanda dönmesinde oluşan momentten yararlanarak tayin edebiliriz. Buna göre,

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B} \quad (60)$$

bağıntısından μ tayin edilir. Bir manyetik dipolün oluşturduğu manyetik alan,

$$B = \frac{\mu_0}{2\pi} \frac{\mu}{r^3} \quad (61)$$

bağıntısıyla verilir.

6.1.1. Ferromanyetik maddeler

Demir, kobalt, nikel, godyum ve dispozyum oldukça manyetik maddelerdir ve bunlara ferromanyetik madde denir. Ferromanyetik maddeler daimi mıknatısların yapımında kullanılırlar. Bunlar zayıf bir manyetik alan içinde bile birbirlerine paralel olarak yönelmeye çalışan atomik manyetik dipollere sahiptirler. Bu manyetik dipoller, bir kere paralel hale getirildikten sonra dış alan ortamdaki kaldırılırsa bile madde mıknatıslanmış olarak kalır. Bu sürekli yönelme, komşu manyetik momentler arasındaki kuvvetli etkileşimlerden kaynaklanır. Bu etkileşimler, kuantum mekaniksel

tarzda incelenebilir. Bu tür maddeler, bir manyetik alan içinde alan yönünde ve çok şiddetli olarak mıknatıslanırlar. Ferromanyetik maddeler bir mıknatısça kuvvetli olarak çekilirler ve çubuk şeklinde olanlar asıldıklarında, çubuğun uzun eksenini alan doğrultusuna paralel oluncaya kadar bir moment etkisinde kalırlar. Bu maddelerin manyetik momentleri, termik etkilere rağmen, dış manyetik alanla üst üste gelirler. Eğer maddenin sıcaklığı, Curie sıcaklığı adı verilen değerden daha yukarıya çıkarılırsa bu üst üste gelme bozulur ve madde ferromanyetik halden diyamanyetik hale gelir (Kesim 6.1.3). Demir için Curie sıcaklığı 1043°K (= 770°C) dir. Ferromanyetizma, atom ve iyonların kendine özgü bir özelliği olmayıp komşu atom ve iyonların yapısal kurgu içinde etkileşim biçimlerinden kaynaklanır.

6.1.2. Paramanyetik maddeler

Paramanyetik maddelerin mıknatıslanmaları çok zayıf ve bu mıknatıslanması da mıknatıslayıcı alan yönündedir. Örneğin, sıvı oksijen, azot oksit, ozon, platin, palladyum, alüminyum, krom, manganez, v.b. gibi maddeler kuvvetli bir mıknatıs tarafından hafifçe çekilirler. Bu tür maddeleri oluşturan maddelerin atom ve iyonlarının büyük bir kısmında, elektronların spin ve açısal momentumundan kaynaklanan manyetik etkiler birbirlerini yok ederler. N atomdan oluşan bir maddenin μ manyetik momentleri, onları etkileyen dış alan doğrultusuna göre yönelmeye çalışacaktır ancak, tüm atomların toplam manyetik momentleri ($N\mu$) bu alanla tam çakışmayacaktır. Çünkü, dış ortamın termik etkisiyle atomların hareketlenmesi sonucu olası böyle bir çakışma bozulur. Paramanyetik bir madde bir dış alana konduğunda onun sahip olacağı toplam manyetik momentin değeri, bu momentin mümkün olan maksimum ($N\mu$) değerinden oldukça küçük olacaktır. Çubuk halinde paramanyetik bir madde manyetik alan içine asılırsa, çubuk, uzun eksenini manyetik alan doğrultusunda oluncaya kadar bir moment etkisinde kalır. Bazı koşullar altında paramanyetik maddelerin mıknatıslanmasının alanla doğru, mutlak sıcaklıkla ters orantılı olduğu Pierre Curie tarafından bulunmuştur. Bu bağıntı,

$$M = C \frac{B}{T} \quad (62)$$

şeklinde olup mıknatıslanmanın artan alanla ve azalan sıcaklıkta arttığını göstermektedir. $B = 0$ 'da mıknatıslanma sıfırdır ve bu durumda dipol momentler rasgele yönelmişlerdir. Çok yüksek dış alanlar ve düşük sıcaklıklarda mıknatıslanma maksimum değerine ulaşır. Bu durumda, bütün manyetik dipoller dış alan yönünde dizilmiş olurlar ve $\mu = \left(\frac{e}{2m}\right)\ell$ bağıntısı geçerliliğini yitirir. Ferromanyetik bir maddenin sıcaklığı, Curie Sıcaklığına (T_c) ulaşınca bu maddenin kendiliğinden mıknatıslanması kaybolur ve madde paramanyetik duruma geçer. Curie Sıcaklığının altında, manyetik momentler paralel dizildiklerinden madde ferromanyetiktir. Curie sıcaklığının üstünde ise dipoller gelişigüzel yönelmekte ve madde paramanyetik olmaktadır.

6.1.3. Diyamanyetik maddeler

Atomları sürekli manyetik dipol momente sahip olmayan maddelere diyamanyetik maddeler denir. Gümüş, bizmut gibi paramanyetik maddelere bir dış alan uygulanınca madde tarafından bu alana zıt yönde zayıf bir manyetik dipol moment oluşur. Her madde böyle davranmakla birlikte bu etki onlarda önemsenecek kadar küçüktür. Diyamanyetik maddelerde, normal konumda çekirdek etrafında zıt yönde ve aynı hızla dönen elektronlar birbirlerinin manyetik momentlerini yok ederler. Bir dış alan uygulanınca elektronlar, fazladan $q\vec{V} \times \vec{B}$ gibi ek bir manyetik kuvvet altında kalırlar. Ek kuvvet nedeniyle, elektronların gördüğü merkezci kuvvet artık aynı olamaz ve manyetik momenti alana antiparalel elektronun hızı artarken paralel olanınki azalır. Sonuçta, elektronların manyetik momentleri birbirlerini yok edemez ve madde manyetik alana zıt yönde bir dipol moment gösterir. Süperiletkenler, belirli bir kritik sıcaklığın altında sıfır elektriksel direnç gösterirler. Süperiletkenlerin bazıları, süperiletken konuma geçtiklerinde diyamanyetik özellik gösterirler. Bu konumdaki süperiletken kendine uygulanan dış alan içindeki manyetik akı sıfır oluncaya kadar akıyı dışarı atar. Akıyı dışarı atma olayına Meissner olayı adı verilir. Diyamanyetik maddelerin mıknatıslanmaları çok zayıf ve mıknatıslanmasında mıknatıslayıcı alanla zıt yönlüdür. Bu maddeler kuvvetli bir mıknatıs tarafından hafifçe itilirler. Bakır, gümüş, kurşun, antimon, bizmut v.b.

gibi metaller, bütün yarımetaller ve organik maddelerin çoğu diyamanyetikler. Çubuk halinde böyle bir madde manyetik alan içine asılırsa, çubuk, büyük eksen manyetik alana dik oluncaya kadar bir moment etkisinde kalır. Böyle bir maddenin atomlarının daimi bir manyetik momenti yoktur fakat, bunların atomlarında dış bir manyetik alan etkisi manyetik bir dipol momenti oluşturabilir.

İstatistik mekanikte spin etkileşimlerinin açıklanması için bir çok model kullanılmaktadır. Ising modeli, Potts modeli, XY modeli, Heisenberg modeli, n-vektör modeli örnek olarak sayılabilir. Bunlardan Ising modeli Kesim 6.2'de ele alınmıştır.

6.2. İki Boyutlu Ising Modeli ve Monte Carlo Simülasyonu

Demir, nikel gibi bazı katıların kalıcı mıknatıslanma özelliğine ferromanyetizma adı verildiğinden daha önce söz edilmişti (Kesim 6.1.1). Ferromanyetizma, önceki bölümde belirtildiği gibi, elektronların spin manyetik momentlerinden kaynaklanır. Ising modeli, ferromanyetik-paramanyetik ya da antiferromanyetik-paramanyetik faz geçişini açıklamaya yönelik bir modeldir. Basitleştirilmiş hali ile Ising modeli, birbiriyle özdeş en yakın komşu spinlerin etkileşimlerini içeren bir spin örgü modelidir.

Sıcaklık değişimi, bir ortamdaki ferromanyetik düzeni etkilediğinden dolayı, bu düzen sıcaklık arttıkça bozulur ve Curie sıcaklığının üzerinde sıfır olur. Bu durum, ikinci dereceden bir faz geçişidir. İki boyutlu uzayda N tane spinin oluşturduğu örgü modelini göz önüne alalım. Burada spinler $\pm z$ yönünde olabilirler, yani i . spinin değeri $s_i = \pm 1$ olur. Dış manyetik alan yokken sistemin enerjisi,

$$E = -J_x \sum_i \sum_j S_{i,j} S_{i,j+1} - J_y \sum_i \sum_j S_{i,j} S_{i+1,j} \quad (63)$$

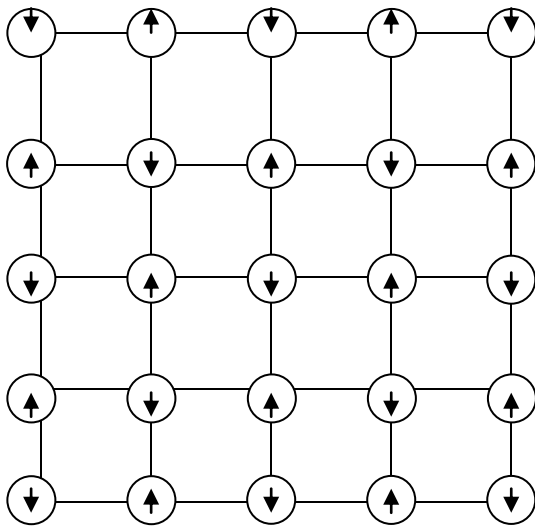
şeklinde verilir. En genel durumda bu spinler, hem birbirleriyle hem de bir B dış manyetik alanıyla etkileşirler. Böyle bir sistemin toplam enerjisi ise,

$$E = -J_x \sum_i \sum_j S_{i,j} S_{i,j+1} - J_y \sum_i \sum_j S_{i,j} S_{i+1,j} - \mu B \sum_{i,j} S_{i,j} \quad (64)$$

şeklinde ifade edilir. Bu şekilde tanımlanan modele Ising modeli adı verilir. Burada (i, j) üzerinden yapılan toplamlarda, her spinin en yakın komşusuyla etkileşmesi ve $S_{i,N_x+1} = S_{i,1}$ ve $S_{N_y+1,j} = S_{1,j}$ periyodiklik koşulu göz önüne alınmıştır. Örneğin, iki boyutlu modelde her spinin en yakın komşu spin sayısı dördür ve her spinin bu dört spinle etkileşimi göz önüne alınır (Şekil 6.1). Pozitif J katsayısı, spin-spin etkileşmesinin şiddetini belirleyen bir sabittir ve μ , elektronun manyetik momentini temsil etmektedir. Her bir spinin ortalama değerine $\langle s_i \rangle$ dersek, N sayıda spinin manyetizasyonu, spinler özdeş olduğu için,

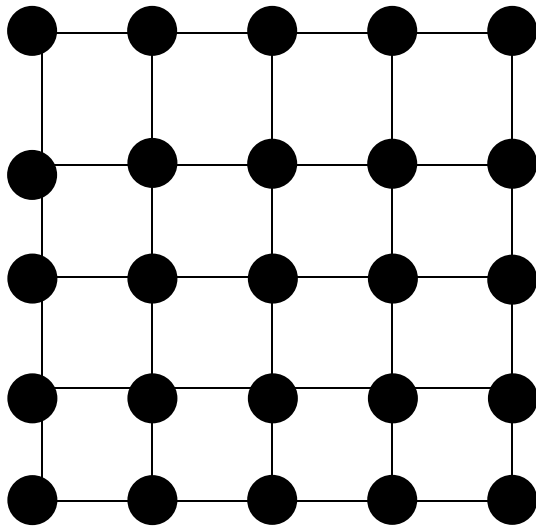
$$M = \sum_i \langle s_i \rangle = N \langle s_i \rangle \quad (65)$$

şeklinde olur. O halde bu sistemdeki bir spinin ortalama değerini bilirsek, manyetizasyonu da hesaplayabiliriz. $M > 0$ olduğu zaman ferromanyetik düzen oluşur. Dış manyetik alan olmasa da spinler arasındaki etkileşmeler, ferromanyetik düzeni sağlamaya yeter. Herhangi bir noktadaki spinin en yakın dört komşusuyla

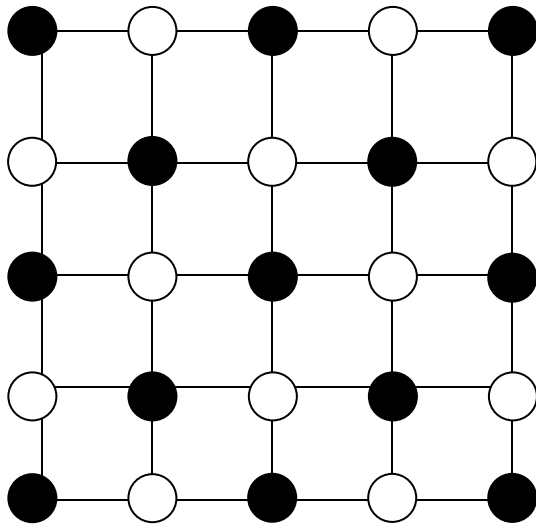


Şekil 6.1. İki boyutlu Ising Modeli. Oklar, spin yöneliminin doğrultusunu göstermektedir.

etkileşmesi, komşu spinlerin paralel veya anti paralel olmasına göre toplam enerjiye değişik katkılarda bulunacaktır. Paralel spinler için etkileşme kuvvetinin ölçüsü olan J sabiti negatif, antiparalel spinler için ise pozitiftir. O halde spinler enerjiyi minimum yapacak şekilde, paralel konumları tercih ederler ve $J < 0$ için ferromanyetik düzen gerçekleşir (Şekil 6.2.a). $J > 0$ için ise eğilim antiparalel çiftlere olur (Şekil 6.2.b). Tüm örgü noktalarındaki s_1, s_2, \dots, s_N spinlerin her birinin belli değerler aldığı bir



(a)



(b)

Şekil. 6.2.(a) $J < 0$ (paralel spinler) için ferromanyetik, **(b)** $J > 0$ (antiparalel spinler) için antiferromanyetik düzen.

konfigürasyonu r ile ve enerjisini E_r ile gösterirsek sistemin bu konfigürasyonda bulunma olasılığı,

$$p_r = \frac{e^{-E_r/k_B T}}{\sum_r e^{-E_r/k_B T}} \quad (66)$$

Boltzman dağılımı ile verilir. Sistemin özgül ısısı enerjinin türevi olarak,

$$C = \frac{d\langle E \rangle}{dT} \quad (67)$$

şeklinde ifade edilir. Buradan enerjinin ortalamasını,

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_r E_r e^{-E_r/k_B T}}{\sum_r e^{-E_r/k_B T}} = \frac{\sum_r E_r e^{-\beta E_r}}{\sum_r e^{-\beta E_r}} \quad (68)$$

olarak ifade eder ve $\beta = \frac{1}{k_B T}$ alırsak,

$$\begin{aligned} \frac{d\langle E \rangle}{dT} &= \frac{d\langle E \rangle}{d\beta} \frac{d\beta}{dT} = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{d\langle E \rangle}{d\beta} \\ &= -\frac{1}{k_B T^2} \left[\frac{\sum_r E_r^2 e^{-\beta E_r}}{\sum_r e^{-\beta E_r}} - \frac{\sum_r E_r e^{-\beta E_r}}{\sum_r e^{-\beta E_r}} \frac{d \sum_r e^{-\beta E_r}}{d\beta} \right] \\ &= -\frac{1}{k_B T^2} \left[\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right] = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2} \quad (69) \end{aligned}$$

elde edilir. Bu ifadedeki $\sigma_E^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$ ifadesi varyans olmak üzere C ,

$$C = \frac{\sigma_E^2}{k_\beta T^2} \quad (70)$$

ile tanımlanır. N parçacıklı sistem için ise yukarıdaki ifade parçacık başına,

$$c = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{Nk_\beta T^2} \quad (71)$$

şeklinde yazılabilir. Buna göre sistem, genelde, toplam enerjisi minimum yapacak bir denge konumuna gelmek isteyecektir. Ancak sistem, enerjisi artıracak bazı spin konfigürasyonlarına da geçebilir ve bunların gerçekleşme olasılıkları da Boltzman dağılımıyla verilir (Karaoğlu 2004).

İki boyutlu Ising modelinin Monte Carlo Simülasyonunda, spinlerden biri rasgele seçilerek alt-üst (spin-flip) edilir. Bu yeni durumun toplam enerjisine bakılır. Eğer enerji daha düşük oluyorsa, bu konfigürasyon kabul edilir, eğer enerji artıyorsa Boltzman formülündeki olasılıkla hesaba katılarak devam edilir. Bu işlem binlerce kez tekrar edilerek sistemin dengeye ulaşması sağlanır. Denge durumunda M manyetizasyonu hesaplanır. Özellikle bu niceliklerin sıcaklıkla değişimleri ile ilgilenilir. Çünkü sistem, T'nin özel bir değerinde ($\beta_c = 0.440686$ değerine karşılık gelen T_c (Onsager 1944)) makroskopik özelliklerinde süreksizlikler meydana gelecek ve bir faz değişimine maruz kalacaktır. Yukarıda ifade edildiği gibi, sistemin taban durumu için mikrohallerin sayısı, en düşük enerji konfigürasyonu ya spinlerin hepsi yukarı ya da hepsi aşağı olduğu için bilinmektedir (yani, $g(E_{gs}) = 2$). Bu şekilde herhangi bir durumun mutlak serbest enerjisi bulunabilir. Mevcut ısısal enerji (kT) ile J etkileşim değiş-tokuş enerjisi arasındaki denge, Ising modelinin davranışını tanımlar ve sistem davranışının genel tasviri sadece bu bilgiden hesaplanabilir. Isısal enerjinin, iç enerjiden çok daha büyük olduğu yüksek sıcaklıklarda (yani, β 'nin düşük değerlerinde) etkileşimler, ısı banyosunun rasgele etkileri nedeniyle etkisiz hale getirilecek ve dolayısıyla örgü üzerindeki spin deseni rasgele olacak ve

mıknatıslanma söz konusu olmayacaktır. Bununla birlikte sıcaklık azaldıkça, spinler arasındaki korelasyonlar etkin olmaya başlayacaktır. Düşük sıcaklıklar, büyüklüğü sistemin korelasyon uzunluğunu (ξ) tanımlayan spin benzeri klastırların oluşmasına izin verecektir. Korelasyon uzunluğu, kritik sıcaklıkta sonsuz olana kadar T azalırken artar ve spinler, bir çok spin yukarı olduğu kadar aşağı da olacak şekilde fraktal bir desen oluşturur. ξ ıraksarken, ergodik zaman (t_e) ve özgül ısı da ıraksar. Bu kritik noktadan sonra sistem, $T = 0$ 'da tüm spinler ya yukarı ya da aşağı doğrultuda olana kadar hangi spin doğrultusunun uygun olacağı kararını verecektir. Her iki seçim enerji açısından eş değerdir ve sistemin hangisini seçeceğini önceden tahmin etmenin hiç bir yolu yoktur. Spinler için uygun doğrultunun seçilmesi gibi simetri kırılması ve ξ , t_e ve C gibi sistem parametrelerinin ıraksaması, genelde faz değişimlerinin karakteristik özellikleridir.

Karşılaşılan problem, Denk.(68)'de açıkça ifade edilen toplamın gerçek çözümünün, en basit sistemlerin incelenmesi dışında, muazzam sayıda olası mikrohal nedeniyle önemli ölçüde sorun oluşturmasıdır. Örneğin, Ising modeli simülasyonu için görece olarak az sayıda spin, örneğin 10×10 'luk bir örgü göz önüne alınırsa, serbestlik derecesi 100 olur ve dolayısıyla olası mikrohallerin sayısı 2^{100} ($\approx 1.3 \times 10^{30}$ kombinasyon) dır. Bu kombinasyonların tümünün hesaba katılması çok uzun zaman alacaktır (saniyede bir milyar kombinasyonun enerjisi hesaplanabilse bile integrasyonun tamamlanması 4×10^{13} yıl alacaktır). İkinci bir seçenek, konfigürasyon uzayında bir örgü noktasından örneklenerek verilerin alındığı bir çeşit kuadratür integrasyon prosedürü yapmak olacaktır. Dolayısıyla problem, Boltzmann çarpanı sadece faz uzayının küçük bir kısmında önemli olacak şekildedir ve bu prosedür çoğunlukla ilgili alanları vurmaz. Ayrıca, kuadratür örgüsü (grid) makul bir integrasyona izin verecek şekilde oldukça ince (veya dar) ise hesaplama için gerekli zaman çok uzun olacaktır. Dolayısıyla, farklı bir yaklaşımın gerekli olduğu açıktır.

Monte Carlo tekniği, faz uzayından rasgele örnek noktalar alarak ve daha sonra verileri sistemin genel davranışını bulmak için kullanarak çalışır. Bu olay, seçim düşüncesine benzer. Özel bir konu üzerine halkın genel fikri araştırılmak

istenirse konu ile ilgili bir referandum yapılması yüksek maliyetli ve çok zaman gerektiren bir durumdur. Bunun yerine, nüfusun rasgele seçilen bir bölümüne sorular sorulabilir ve onların düşüncelerinin ortalaması tüm ülkenin düşüncesinin temsili olarak kullanılabilir. Bu, herkese soru sormaktan daha kolaydır ancak güvenilir değildir. Soru sorulan insanların gerçekten rasgele seçildiğinden (fikirler arasındaki korelasyonlardan kaçınmak amacıyla) emin olunmalıdır ve sadece görel olarak az sayıda insana soru sorulduğunu verecek şekilde beklenen sonuçların ne kadar doğru olduğu öğrenilmelidir. En temel örnekleme tekniği, sistemin konfigürasyon uzayı içerisinde herhangi bir yerde tamamen rasgele noktalar seçilmesinden oluşur ve basit örnekleme adı verilir. Çok sayıda spin deseni (tüm örgü için) rasgele üretilir ve bu verilerden ortalama enerji ve mıknatıslanma hesaplanır. Bununla birlikte bu teknik, kuadratür yaklaşımı ile tam olarak aynı sorunlarla karşılaşacaktır (çoğunlukla faz uzayının önemsiz bölgelerinden alınan örnekler gibi).

Hepsi yukarı/hepsi aşağı spin deseni üreten rasgele oluşturulmuş spin dizilerinin olasılıkları düşüktür ($\approx 2^{-N}$) ve yüksek sıcaklık rasgele spin dizilimi çok daha olasıdır. Bu problemten kaçınmanın en yaygın yolu, mikrohalleri ağırlıklandırarak çalışan önem örnekleme (importance sampling) kullanmaktır. Denk.(68), bu ağırlıkları içerecek şekilde değiştirilerek,

$$\bar{E} = \frac{1}{N} \sum_i E_i \quad (72)$$

şeklinde ifade edilebilir. Ising modelinin dinamik davranışı incelenirse de Monte Carlo “zaman” adımı [Monte Carlo “time” steps (MCS)] birimi kullanılabilir. Monte Carlo simülasyonlarında sistemin başlangıç hali ve sınır koşulları dikkate alınmalıdır. Ising modeli problemini tanımlayan temel parametre, N spin sayısıdır. Kare bir örgü kullanılırsa, bu örgünün kenar uzunlukları $L = 10 - 20$ (yani, $N = 100 - 400$) olması halinde makul Markov zinciri adımlarını hesaplamak için çok uzun zaman gerektirmeyen makul sonuçlar elde edilir. Bununla birlikte, sonsuz örgünün davranışının simüle edilmesi gerektiğinden periyodik sınır koşulları kullanılmalıdır. Simülasyona başlamak için gerek duyulan son koşul, örgüdeki spinlerin başlangıç

koşuludur. *Soğuk (cold)* başlangıç ve *sıcak (hot)* başlangıç olmak üzere iki temel olasılık vardır. Soğuk başlangıçla, basitçe, bütün spinlerin aynı yönde olduğu taban durumundan simülasyona başlanacağı buna karşılık, sıcak başlangıçla bütün spinlerin rasgele düzenlendiği diğer uç durumda simülasyona başlanacağı kastedilmektedir.

Sisteme, dengeye gelmek için yeterli zaman verilirse başlangıç koşullarının özel seçimi nihai sonuçları etkilemez. Temelde Monte Carlo simülasyonları makroskopik sistemleri incelemek amacıyla kullanılır. Ancak, çok serbestlik dereceli sistemler için işlemci zamanı ve bellek sorunları nedeniyle, sonlu sistemler kullanılmalıdır. Bu durumda, sonlu büyüklük etkileri ortaya çıkar ve hesaplarda dikkate alınmalıdır. Simülasyonlardaki problem, $\xi \rightarrow \infty$ olmasının aksine, ξ korelasyon uzunluğu L kenar uzunluğu mertebesinde olduğunda spinler düzenli hale geleceğinden sonlu bir örgü, sonsuz örgüye nazaran daha sıkça düzenli hale gelmesidir. Dolayısıyla enerji pikinin konumu, sistem büyüklüğüne bağlı olarak değişecektir (kuşkusuz, toplam enerji sistem büyüklüğü ile lineer olarak ölçeklendirilir ancak spin başına ortalama enerji dağılımının formu da değişir).

Modelin sonlu büyüklüğünden kaynaklanan bir diğer beklenen etki, enerji pikinin genişliğindeki değişimdir. Kritik noktanın uzağında, pikin varyansı $1/L^2$ şeklinde dolayısıyla standart sapması $1/L$ şeklinde değişecektir. Bu, çok küçük örgü büyüklükleri için pik genişliğinin çok büyük olması sonucuna götürür ve dolayısıyla özgül ısı, küçük N değerli sistemler için olduğundan fazla tahmin edilir. Bununla birlikte, kritik sıcaklıkta, spin başına ortalama enerji $L^{-\alpha/\nu}$ ve varyans $L^{-\alpha/\nu}$ biçiminde değişir. Burada α ve ν , kritik üstellerdir. Bu etkilerin simülasyon sonuçlarını değiştirme biçimi, termodinamik limitte ($L \rightarrow \infty$) sistemin analitik sonuçları ile simülasyon verilerinin doğru şekilde karşılaştırmasını yapmaya izin verecek şekilde, anlaşılmalıdır. Etkiler, sistemin ilgili parametrelerinin (bu durumda, kritik noktada sistemin enerjisi E_c ve σ_E^2 ile orantılı olan kritik özgül ısı) L'nin değişim aralığında $1/L$ 'ye karşı grafikler çizilerek incelenebilir. Bu şekilde, sistem parametrelerinin değeri, sonsuz sisteme karşılık gelen $1/L = 0$ 'a geriye doğru ekstrapole edilebilir.

Sonlu büyüklük etkilerinden genellikle daha ciddi olan önem örnekleme Monte Carlo tekniğinin bir diğer sorunu, simülasyonların kolayca non-ergodik olabilmesidir. Ising modeli için, kritik sıcaklıktan küçük veya eşit olan sıcaklıklarda ergodik zaman, tüm konfigürasyon uzayı örneklenmeyecek şekilde simülasyon için yeteri kadar büyüktür. Miknatislanma genellikle yukarı doğru veya genellikle aşağı doğru olabilir ve çoğunlukla yukarı durumdan çoğunlukla aşağı duruma geçme olasılığı çok küçük olduğu için sistem, simülasyonun çoğunda bir konfigürasyon uzayına veya diğer konfigürasyon uzayına saplanıp kalmış olabilir. Bu, her biri eşit olasılıklı olması gerekirken iki durumdan birinin gerçekçi olmayacak şekilde daha yüksek olasılıklı olması sonucuna götürür. Aynı zamanda, kritik noktada sistem taban durumunda bulunamayacağından bu bölge iyi örneklenmelidir. Multi-kanonik Monte Carlo tekniğinde, önem örneklemede mikrohallerin ağırlıklandırılması gibi sistemin makrohalleri ağırlıklandırılarak bu problemten kaçınılmaya çalışılır. Bu, makroskopik değişkenin dağılımını $r = 1 \dots N_m$ bölmeden oluşan bir histograma ayrılması ile gerçekleştirilir. Özel bir mikrohalde olma olasılığı,

$$P_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \quad (73)$$

ifadesi değiştirilerek,

$$P_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i + \eta_r}, \quad i \in r \quad (74)$$

şeklinde yazılabilir. Bu durumda sonuç dağılımı, önem örnekleme simülasyonundan elde edilen sonuçlarla aynı şekilde analiz edilebilir.

Monte Carlo simülasyonunda topluluk ortalamalarını elde etmek kolay olduğu halde, simülasyonun ne kadar güvenilir olduğunu belirlemek amacıyla sonuçlardaki hataları tahmin etmek gerekir. Topluluk ortalamalarındaki varyans, gerçek fiziksel bir niceliğe karşılık geleceği için (örneğin, Denk.(70)'e göre Ising modelinde enerji varyansı sistemin ısı kapasitesine karşılık gelir) uygun bir hata göstergesi değildir. Bu

durumda, farklı bir hata tahmin tekniđi kullanılmalıdır. Basit ve güvenilir olması bakımından blok hata tekniđini (block error technique) kullanmak uygundur. Sistemin yaklaşık korelasyon zamanı bilirse uzun run verileri (bilgisayar programının çalıştırılması sonucu elde edilen veriler), her biri korelasyon zamanından daha uzun olan N_b tane eşit kısma ayrılabilir. Bu durumda bu veri blokları, N_b tane bağımsız deneysel sonuç kümesi olarak ele alınabilir ve her bloktaki özel herhangi bir makroskopik niceliđin topluluk ortalaması (A_b), her bloktan ortalama olarak ve blok deđerlerinin (Gaussyen dađılım oluřturacakları için) varyansını bularak ilgili nicelikteki hatayı tahmin etmek için kullanılabilir (Jackson 1997).

Modelin bir boyutta ve dıř alan yokken iki boyutta tam çözümlü yapılmıřtır. Buna karřılık, iki boyutta dıř alan varken ve üç boyutta dıř alan yokken bile modelin çözümlü yapılamamıřtır. Ancak bilinen bir çözümlü olmaması, üç boyuttaki faz geçiřleri hakkında bir řey bilinmediđi anlamına gelmez. Çeřitli yaklaşık çözümler ile ya da bilgisayar simülasyonları ile üç boyutta faz geçiřleri hakkında bugün bir çok řey söylenebilmektedir (Karaođlu 2004).

7. SONUÇLAR

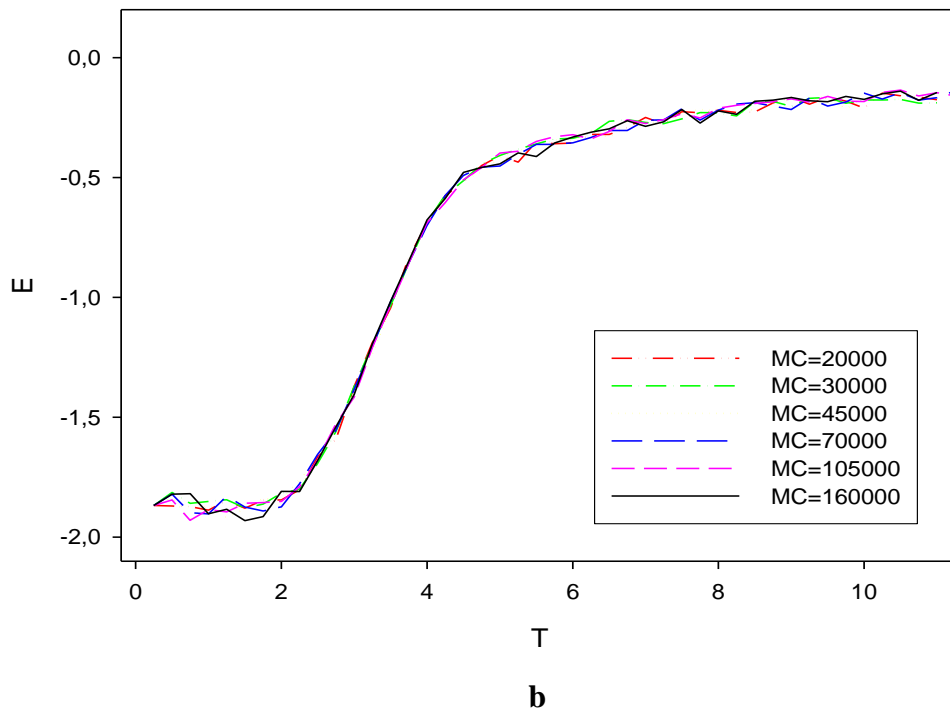
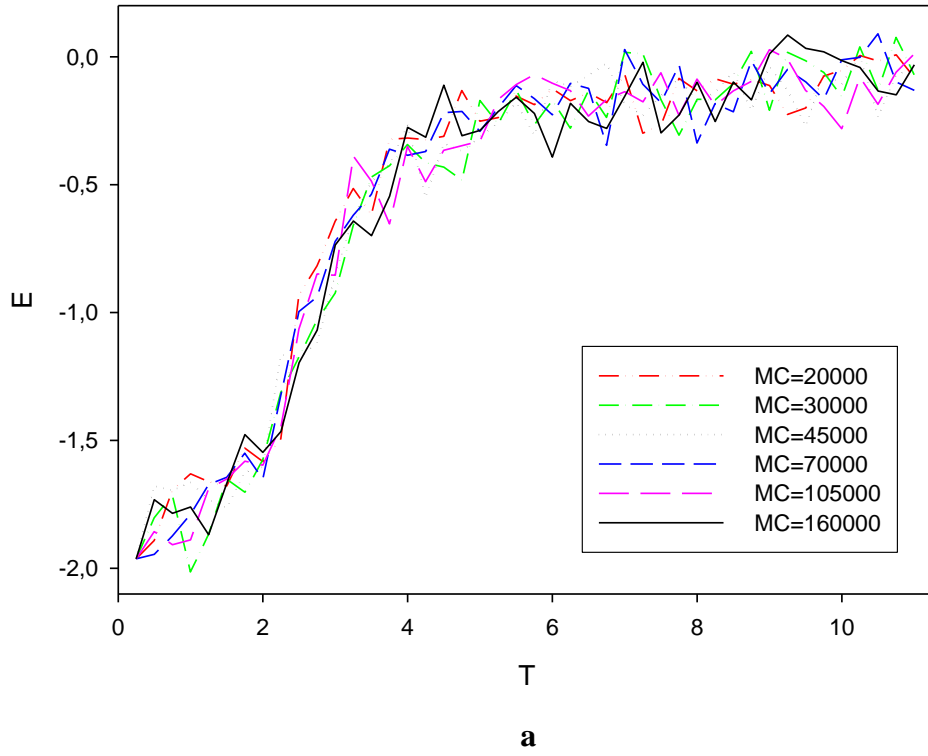
Doğadaki sistemlerin tamamı, en genel hali ile, iki ya da daha çok parçacıktan oluşan çok parçacıklı sistemlerdir ve (klasik veya kuantum) istatistik mekanik formalizminin uygulanması zorunludur. Ancak, çok parçacıklı sistemler için ortaya önemli matematiksel sorunlar ve güçlükler çıkmaktadır. Bu güçlüklerin başında da, özellikle özdeğer problemlerinde karşılaşılan ve

$$f(x) = x^n + a_1x^{n-1} + a_2x^{n-2} + \dots + a_{n-1}x + a_n \quad (75)$$

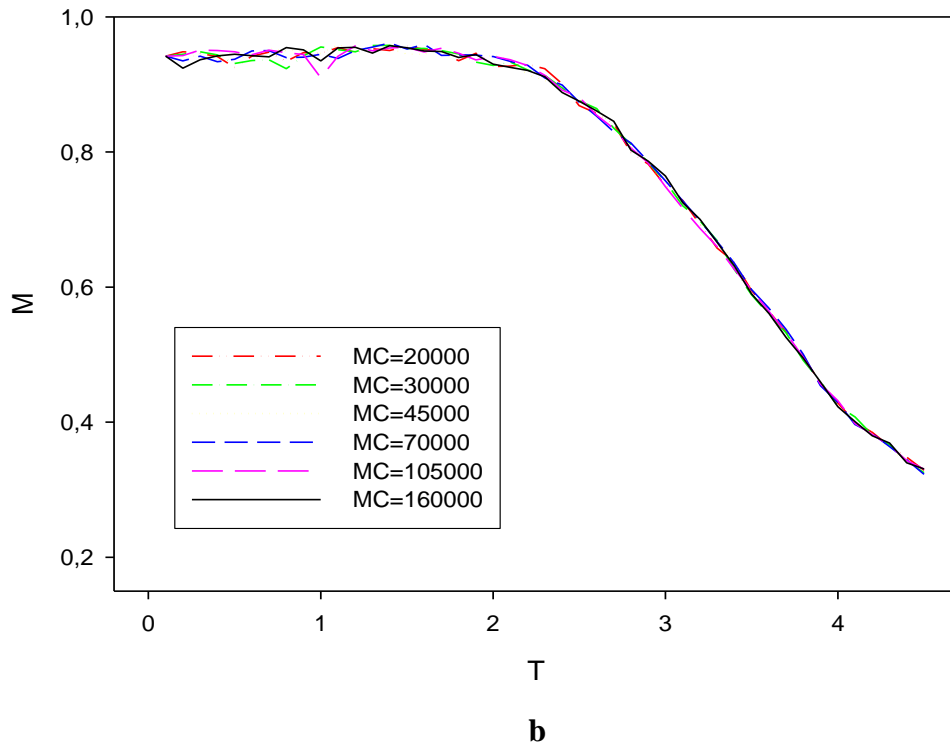
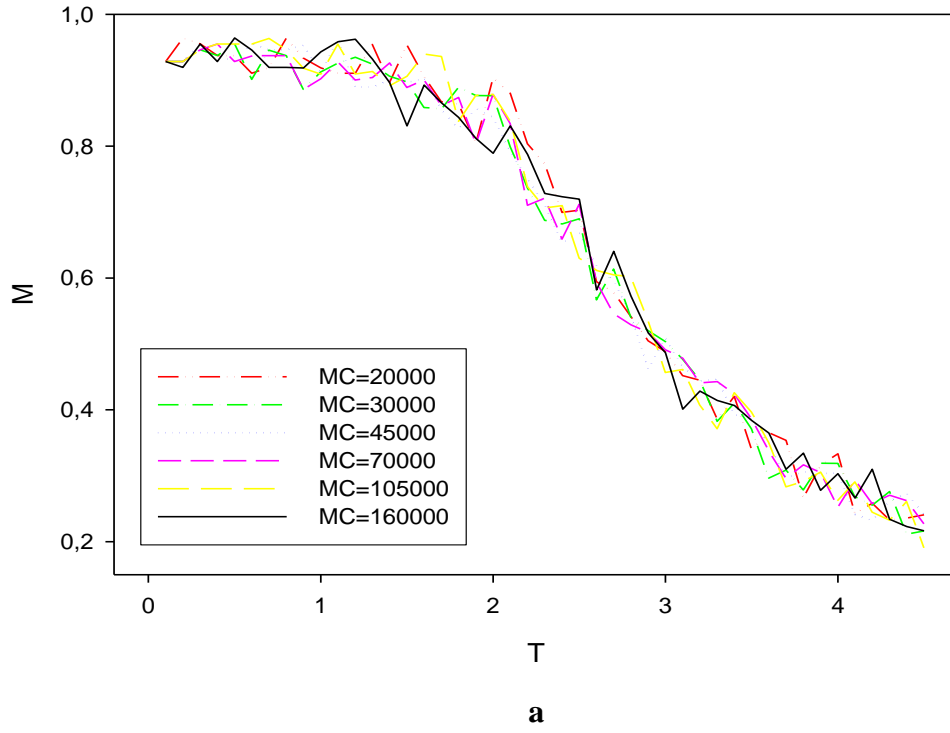
biçiminde ifade edilen n. mertebeden denklemlerin $n \geq 5$ için analitik çözümlerinin mevcut olmaması gelmektedir. Bu nedenle, n. mertebeden denklemlerin çözümleri daha çok sayısal tekniklerle analiz edilmekte ve dolayısıyla ya yapılan yaklaşımdan kaynaklanan veya sayısal çözümler için gerekli grafiklerin oluşturulması sırasında çok sayıda verinin hesaplanması gerektiğinden çok uzun süren bilgisayar hesaplamaları gerekmektedir. Eğer bir sistemi oluşturan parçacık sayısı (N) sonlu değer alırsa makroskopik sistemlerin özelliklerinin belirlenmesi mümkün olmamakta, $N \rightarrow \infty$ (termodinamik limit) durumunda ise sayısal hesaplamaların yapılması imkansız hale gelmektedir. Bu nedenle, $N \in \mathbb{N}$ parçacık sayısı sayısal hesaplamaların yapılabilmesine izin verecek ölçüde küçük ancak makroskopik sistemlerin özelliklerini yaklaşık da olsa yansıtabilecek kadar büyük sonlu bir değer seçilmelidir. Bu durumda ise sonlu büyüklük etkileri ortaya çıkmaktadır.

Bu çalışmada Monte Carlo simülasyonu kullanılarak sıfır dış alanda tam çözümü bilinen (Onsager, 1944) iki boyutlu Ising Modeli'nin bazı termodinamik parametreleri (E enerjisi, M mıknatıslanması ve sabit hacimde C_v özgül ısı) incelenmiştir. Enerji grafiklerine göre elde edilen eğriler Monte Carlo adımının artışına göre yöntemin yapısında mevcut olan rasgelelik dolayısıyla mevcut olan dalgalanmaları içermekte ancak davranış genelde aynı biçimde kalmaktadır. Önemli

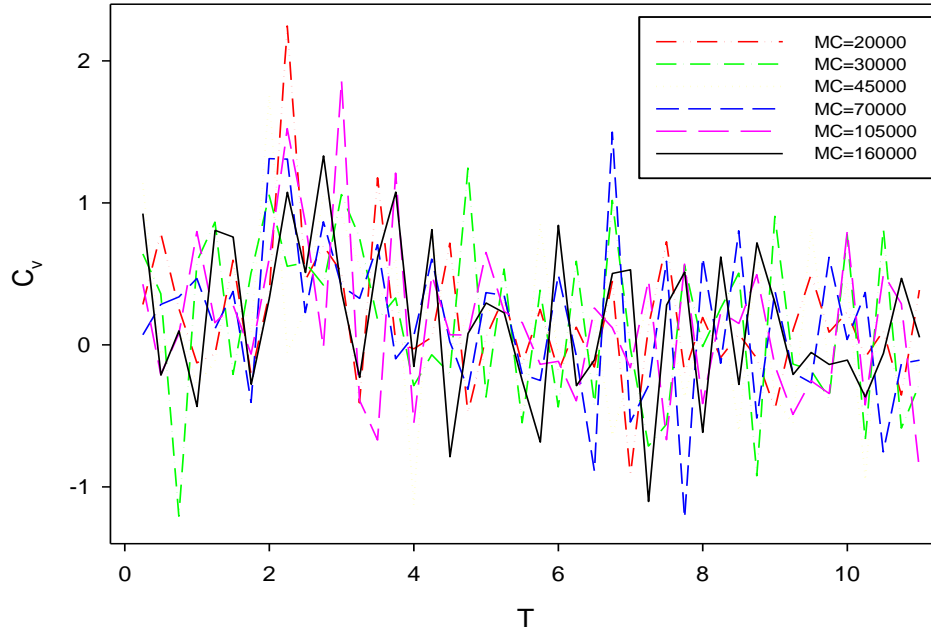
sayılabilecek farka yol açan şey daha çok örgü büyüklüğünün artışından ileri gelmektedir. Örgü büyüklüğü arttıkça eğrilerin davranışı daha düzgün bir hale gelirken hesaplama için gereken süreler hızlı bir artışla dakikalar mertebesinde saatler mertebesine çıkmaktadır. Bu durum mıknatıslanma eğrileri için de benzerlik göstermektedir. Ancak özgül ısı eğrilerinde rasgelelik dolayısıyla hem negatif değerler hem pozitif değerler ortaya çıkmakta ancak özgül ısı eğrilerinin genel yapısına uygun düşmektedir. Monte Carlo zaman adımına göre dalgalanmalar benzerlik göstermekte ancak örgü büyüklüğü eğrilerin biçimini önemli ölçüde etkilemektedir. Küçük örgü durumunda özgül ısı eğrileri keskin değişimler gösterirken büyük örgü durumunda eğrinin davranışı netleşmektedir.



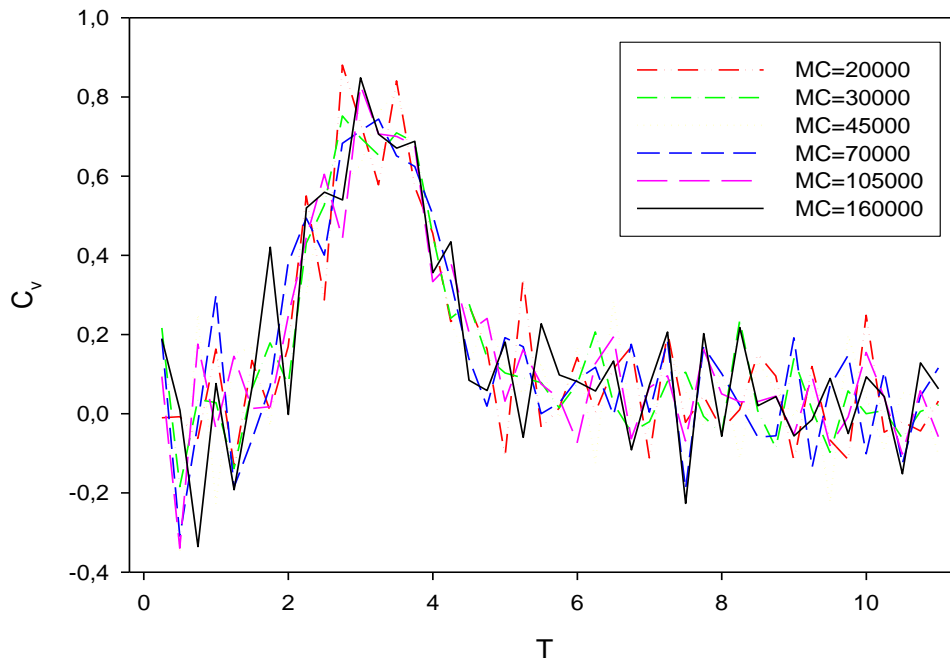
Şekil 7.1. Sistem büyüklüğü a) $L=15$ ve b) $L=60$ için çeşitli MC değerlerinde iki boyutlu Ising modelinin enerji eğrileri.



Şekil 7.2. Sistem büyüklüğü a) $L=15$ ve b) $L=60$ için çeşitli MC değerlerinde iki boyutlu Ising modelinin mıknatıslanma eğrileri.



a



b

Şekil 7.3. Sistem büyüklüğü a) $L=15$ ve b) $L=60$ için çeşitli MC değerlerinde İki boyutlu Ising modelinin sabit hacimde özgül ısı eğrileri.

KAYNAKLAR

- Edward, J.G. 2005. Thermal Physics, Princeton Universty Physics Department
www.grothserver.princeton.edu/~groth/phy301f05/lect22.pdf.
- Ising, E. 1925. Beitrage Zur Theorie Des Ferromagnetismus. Z. Phys.31(235-258).
- Jackson, A. 1997. An Introduction to Monte Carlo Statistical Mechanics,
<http://anjackson.net/taxonomy/term/18?page=1>.
- Karaođlu, B. 2004. Sayısal Fizik, Seyir Yayıncılık, İstanbul.
- Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H. and Teller E., 1953.
 Equation of State Calculations by Fast Computing Machines, The Journal of
 Chemical Physics, Volume 21, Number 6, 1087-1092.
- Onsager, L. 1944. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-
 Disorder Transition, Phys.Rev. 65: 117-149.
- Pathria, R.K. 1996. Statistical Mechanics, Sec. Ed Butterworth-Heinemann, Oxford.
- Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T. and Flannery, B.P. 1992. Numerical
 Recipies in FORTRAN 77, Sec. Ed., Cambridge Universty Pres.
- Robinson, S.O., Dessart, D.J. 1998. Random Number Generation, v. 1999, p. 243-50
www.science.ankara.edu.tr/~ozbek/.
- Tavukçu, D. 2000. Monte Carlo Yönteminin Sayısal İntegrallere ve Elektromannetik
 Denklem İntegrallerine Uygulanması, [www3.dogus.edu.tr/Isevgi/L
 S_PROF/TEZ/Di_tez.pdf](http://www3.dogus.edu.tr/Isevgi/L_S_PROF/TEZ/Di_tez.pdf).
- Veytsman, B. and Kotelyanskii, M. 1997. Thermodynamics of Phase Transition,
www.plmsc.psu.edu/~www/matsc597c-1997/phases/Lecture2/node2.html.

EK-A

Rasgele sayı üreten bir alt program.

```
FUNCTION RASGELE(JBASLA)
DATA IA,IB,IC/211,1663,7875/
JBASLA=MOD(JBASLA*IA+IB,IC)
RASGELE=FLOAT(JBASLA)/FLOAT(IC)
RETURN
END
```

EK-B

Sıfır dış alanda iki boyutlu Ising modeli için enerji (E), mıknatıslanma (M) ve sabit hacimde özgül ısı (C_v) termodinamik parametrelerini hesaplayan Monte Carlo programı.

```

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
PARAMETER(L=10,MCARLO=10000)
INTEGER*4 SPIN(L,L),ENERJIE,E_KUMULA
REAL*8 ENE(1000),TENE(1000),TS(1000)
REAL*8 M_ORTA, C(-4:4)
JBASLA=345
L2=L*L
OPEN(3,FILE='TUREV.TXT')
OPEN(4,FILE='IS2.TXT')
C .....
C...SICAKLIK DONGUSU. ENERJI SABITLERI HESAPLANIP SAKLANIR.
C .....
DO 50 IT=1,45
    T=DFLOAT(IT)/4
    E4=DEXP(-4.D0/T)
    E8=E4**2
    C(4)=E8
    C(-4)=1/E8
    C(2)=E4
    C(-2)=1/E4
C .....
C BASLANGICTA RASGELE BIR KONFIGURASYON OLUSTUR. E VE M YI
HESAPLA.

```

```

C .....
  M=0
  DO 10 I=1,L
  DO 10 J=1,L
    IF(RASGELE(JBASLA).LT.0.5D0) THEN
      SPIN(I,J)=1
    ELSE
      SPIN(I,J)=-1
    ENDIF
    M=M+SPIN(I,J)
10  CONTINUE
  ENERJI=0
  DO 20 J=1,L
    IF(J.EQ.L) THEN
      IUST=1
    ELSE
      IUST=J+1
    ENDIF
  DO 20 I=1,L
    IF(I.EQ.L) THEN
      ISAG=1
    ELSE
      ISAG=I+1
    ENDIF
    ENERJI=ENERJI-SPIN(I,J)*(SPIN(I,IUST)+SPIN(ISAG,J))
20  CONTINUE
C .....
C MONTE-CARLO DONGUSU... SPINLERI ALT-UST ET. ENERJISINI
KIASLA.
C .....
  M_KUMULA=0
  E_KUMULA=0

```

```

DO 40 IMC=1, MCARLO
  DO 30 K=1, L2
    I=L*RASGELE(JBASLA)+1
    J=L*RASGELE(JBASLA)+1
    IF(I.EQ.1) THEN
      ISOL=SPIN(L,J)
    ELSE
      ISOL=SPIN(I-1,J)
    ENDIF
    IF(I.EQ.L) THEN
      ISAG=SPIN(1,J)
    ELSE
      ISAG=SPIN(I+1,J)
    ENDIF
    IF(J.EQ.1) THEN
      IALT=SPIN(I,L)
    ELSE
      IALT=SPIN(I,J-1)
    ENDIF
    IF(J.EQ.L) THEN
      IUST=SPIN(I,1)
    ELSE
      IUST=SPIN(I,J+1)
    ENDIF
    KOMSU=ISOL+ISAG+IUST+IALT
    DELTA_E=SPIN(I,J)*KOMSU
    IF(DELTA_E.LE.0) THEN
      SPIN(I,J)=-SPIN(I,J)
      M=M+2*SPIN(I,J)
      ENERJI=ENERJI-2*DELTA_E
    ELSEIF(RASGELE(JBASLA).LT.C(KOMSU)) THEN
      SPIN(I,J)=-SPIN(I,J)
      M=M+2*SPIN(I,J)

```

```

ENERJI=ENERJI-2*DELTA_E
ENDIF
ENDIF
30    CONTINUE
      E_KUMULA=E_KUMULA+ENERJI
      M_KUMULA=M_KUMULA+M
40    CONTINUE
      SABIT=1.D0/DFLOAT(L2*MCARLO)
      E_ORTA=-E_KUMULA*SABIT
      M_ORTA=M_KUMULA*SABIT
      Ene(IT)=E_ORTA
      TS(IT)=T
      WRITE(4,*) T, E_ORTA, M_ORTA
50    CONTINUE
      CALL TUREV(TS,ENE,TENE)
      DO 60 K=1,45
        WRITE(3,*)TS(K),ENE(K),TENE(K)
60    CONTINUE
      END
      FUNCTION RASGELE(JBASLA)
      DATA IA,IB,IC/211,1663,7875/
      JBASLA=MOD(JBASLA*IA+IB,IC)
      RASGELE=FLOAT(JBASLA)/FLOAT(IC)
      RETURN
      END
      SUBROUTINE TUREV(TS,ENE,TENE)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      DIMENSION ENE(1000),TENE(1000),TS(1000)
      ADIM=0.25
      DO 70 KJ=1,44
        TENE(KJ)=(ENE(KJ+1)-ENE(KJ))/ADIM
70    CONTINUE

```

RETURB

END

EK-C

Algoritma

Monte Carlo algoritması şu adımlarla yapılır:

1. Bir kenarında L sayıda spin olan ve toplam L^2 spinden oluşan bir kare örgü alınır. Önce, T sıcaklığında rasgele bir başlangıç konfigürasyonu oluşturulur. Yazı-tura atılarak tüm spinlere $\{-1, 1\}$ değerlerinden biri verilir. Bu işlem Ek(B)'de verilen fortran programında, 18-43 adımları arasında yapılmaktadır. Bu basamaklar arasında hesaplanan E enerjisi ve M mıknatıslanması fortran programındaki bir dosyaya kaydedilmektedir.
2. Monte Carlo döngüsü: Örgüdeki spinlerden biri rasgele seçilip alt-üst edilir. Bu spinin x ve y yönündeki indisleri (i,j) olsun. Bu yeni durumda, o spinin komşularıyla olan ΔE enerji artışı hesaplanır. İki durum olabilir:
 - a) $\Delta E \leq 0$ ise, yani konfigürasyon doğrudan kabul edilir, enerjisi ve magnetizasyonu hesaplanır. Burada dikkat edilecek nokta bir spin alt-üst olduğunda magnetizasyondaki değişim ± 1 değil ± 2 olacaktır. Enerjideki değişimde böyledir.
 - b) $\Delta E > 0$ ise, Boltzmann formülüyle, bu duruma geçiş olasılığı p hesaplanır. Bu durumu kabul edip etmemek üzere, zar atılıp $[0, 1]$ aralığında rasgele bir q sayısı üretilir. Yine iki durum olabilir:
 - b1) $q \leq p$ ise, pozitif enerjili bu yeni konfigürasyon kabul edilir, enerji ve magnetizasyon hesaplanır.
 - b2) $q > p$ ise, bu yeni konfigürasyon reddedilir, eskisiyle devam edilir.

Monte Carlo döngüsü, EK-B'deki programda 45-86 adımları arasındaki işlemlerle gerçekleştirilmektedir.

3. Monte Carlo döngüsü binlerce kez tekrarlanır. Her dönüşte hesaplanan M magnetizasyon değerleri kümülatif olarak toplanır.
4. Döngü bittiğinde, kümülatif değerler döngü sayısına ve toplam N spin sayısına bölünerek, spin başına M magnetizasyonu bulunur.
5. Yeni bir T sıcaklığında 1-4 adımları tekrarlanır.
6. Ek(B)'de verilen fortran programında 93-98 adımları arasında, rasgele sayı üreten alt program yer almaktadır.