

**DOKUZ EYLÜL ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**KATILARIN KUANTUM MONTE CARLO
SİMÜLASYONLARI**

Ümit AKINCI

**Aralık, 2009
İZMİR**

KATILARIN KUANTUM MONTE CARLO SİMÜLASYONLARI

Dokuz Eylül Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Doktora Tezi

Fizik Bölümü, Fizik Anabilim Dalı

Ümit AKINCI

Aralık, 2009

İZMİR

DOKTORA TEZİ SINAV SONUÇ FORMU

ÜMİT AKINCI tarafından **PROF. DR. İSMAİL SÖKMEN** yönetiminde hazırlanan “**KATILARIN KUANTUM MONTE CARLO SİMÜLASYONLARI**” başlıklı tez tarafımızdan okunmuş, kapsamı ve niteliği açısından bir doktora tezi olarak kabul edilmiştir.

.....
Prof. Dr. İsmail SÖKMEN

Danışman

.....
Prof. Dr. Fevzi BÜYÜKKILIÇ

Tez İzleme Komitesi Üyesi

.....
Doç. Dr. C. Cengiz ÇELİKOĞLU

Tez İzleme Komitesi Üyesi

.....
Prof. Dr. Doğan DEMİRHAN

Jüri Üyesi

.....
Yrd. Doç. Dr. Görkem OYLUMLUOĞLU

Jüri Üyesi

.....
Prof. Dr. Cahit HELVACI

Müdür

Fen Bilimleri Enstitüsü

TEŐEKKÜR

Tez kapsamında yürüttüğüm çalışmalar süresince desteğini esirgemeyen,
danışmanım Prof. Dr. İsmail SÖKMEN'e,

Anlayışlarını ve yardımlarını hep yanımda hissettiğim annem Esmâ, babam
Selâmî, kardeşim Figen'e,

Hayat arkadaşım Pelin'e,

teşekkür ederim.

Ümit AKINCI

KATILARIN KUANTUM MONTE CARLO SİMÜLASYONLARI

ÖZ

Bu tez çalışması kapsamında, kuantum genetik algoritmalar (KGA) kullanılarak ekzitonik sistemler incelenmiştir. Kuantum genetik algoritma, genetik algoritma temelli bir algoritma olup kuantum mekaniksel sistemlerin çözümünde genetik algoritmalara göre üstündür. Tez çalışmasında, geleneksel optimizasyon algoritmalarından Varyasyonel Monte Carlo (VMC), Simulated Annealing (SA), Genetik Algoritma (GA) yöntemleri ile de inceleme yapılmış olup, kuantum genetik algoritmaların bu algoritmalara göre üstün ya da zayıf olduğu noktalar belirlenmiştir.

Anahtar sözcükler: Ekziton, Kuantum Genetik Algoritma (KGA), Varyasyonel Monte Carlo (VMC), Genetik Algoritma (GA).

QUANTUM MONTE CARLO SIMULATIONS OF SOLIDS

ABSTRACT

In this thesis, excitonic systems are examined with quantum genetic algorithms. Quantum Genetic Algorithms are based on Genetic algorithms and they are more efficient than Genetic Algorithms for the solutions of the quantum mechanical systems. Also in this thesis, these systems are examined with the conventional optimization algorithms like Variational Monte Carlo (VMC), Simulated Annealing (SA), Genetic Algorithms (GA) for comparison of the efficiency and determination of the weakness/strongness of quantum genetic algorithms.

Keywords: Exciton, Quantum Genetic Algorithms (KGA), Variational Monte Carlo (VMC), Genetic Algorithm (GA).

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
DOKTORA TEZİ SINAV SONUÇ FORMU	ii
TEŞEKKÜR.....	iii
ÖZ	iv
ABSTRACT.....	v
BÖLÜM BİR - GİRİŞ.....	1
BÖLÜM İKİ - YAKLAŞIM YÖNTEMLERİ	3
2.1 Varyasyonel Yöntem.....	3
2.2 Born Oppenheimer Yaklaşımı.....	5
2.3 Hartree ve Hartree-Fock Yaklaşımı	6
2.4 Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (YFT).....	10
2.5 Yaklaşım Yöntemlerinin Karşılaştırılması	13
2.6 Pseudopotansiyel.....	13
2.7 Ekzitonik Sistemler	17
2.8 Heteroyapılar	18
BÖLÜM ÜÇ - MONTE CARLO YÖNTEMİ	20
3.1 Temel Kavramlar.....	20
3.2 Kesikli Rasgele Değişkenler	21
3.3 Sürekli Rasgele Değişkenler ve Olasılık Dağılım Fonksiyonu.....	22
3.3.1 Eksponansiyel Dağılım.....	24
3.3.2 Gaussiyen (Normal) Dağılım.....	25
3.4 Metropolis Algoritması	27
3.5 Monte Carlo Yöntemi ile İntegrasyon.....	30
3.5.1 Geleneksel İntegrasyon Yöntemleri	32
3.5.2 Monte Carlo Yöntemi.....	33
3.5.3 Ortalama Değer ile İntegrasyon.....	35

3.5.4 Önem Örneklenmesi (importance sampling).....	36
3.5.5 Çok Boyutlu İntegrasyon.....	37
3.6 Fonksiyon Optimizasyonu.....	38
3.6.1 Metropolis Algoritması.....	39
3.6.2 Simulated Annealing	43
3.7 Varyasyonel Monte Carlo Algoritması	47
3.7.1 Dalga Fonksiyonu Seçimi	50
BÖLÜM DÖRT - GENETİK ALGORİTMALAR.....	53
4.1 Temel Kavramlar.....	54
4.1.1 Kodlama.....	55
4.1.2 Uygunluk fonksiyonu	56
4.1.3 Seçim Stratejileri	57
4.1.4 İşlemler	58
4.1.5 Sonlanma Kriteri.....	59
4.2 Algoritma.....	59
BÖLÜM BEŞ - KUANTUM GENETİK ALGORİTMALAR.....	64
5.1 Algoritma.....	64
5.2 Bir Boyutlu Sistemlerde KGA	66
5.2.1 Formülasyon	66
5.2.2 SA, GA ve KGA Karşılaştırılması	72
5.2.3 Bir Boyutta Çoklu Potansiyel Kuyusu.....	79
5.2.4 Bir Boyutta İki Parçacık	80
5.3 İki Boyutlu Sistemlerde KGA	84
5.3.1 Formülasyon	84
5.3.2 İki Boyutta Çoklu Potansiyel Kuyusu	85
5.3.2.1 Dikdörtgen Potansiyel Profili.....	86
5.3.2.2 Dairesel Potansiyel Profili.....	87
5.3.2.3 Herhangi bir geometriye sahip potansiyel	87

5.4 Atomsal veya Moleküler Hesaplar	88
5.4.1 Baz Kümeleri	89
5.4.2 Hidrojen Atomu	90
5.4.3 Moleküler Hesaplar	91
5.5 Kuantum Noktada parabolik kuşatma altında Ekziton	93
BÖLÜM ALTI – SONUÇ	104
KAYNAKLAR	108

BÖLÜM BİR

GİRİŞ

Bir fikir olarak nanoteknolojinin oluşumu sıklıkla Richard Feynman'ın 1959 daki "There's Plenty of Room at the Bottom" başlıklı konuşmasına dayandırılır. Nano ölçeğinde, atomlar ya da parçacıklar üzerindeki kontrol ile belirli bir amaca yönelik araçların tasarlanması ve bu alandaki teori ile çözüm yöntemlerinin gelişimindeki hızlanma bu tarihten sonraki döneme rastlar. Nanoteknolojideki araçların yapılabilirliği bu ölçekteki sistemlerin kuantum mekaniksel çözümlerinin yapılabilirliği ile el ele gider.

Ancak bu sistemlerin kesin analitik çözümlerini yapmak çoğu zaman mümkün değildir. Sistemler bazı yaklaşımlar yapılarak, kuantum mekaniği dahilinde kesin çözülebilen sistemlere yaklaştırılır ya da sayısal çözümler yapılır. Bilgisayar teknolojisindeki hızlı gelişme sayısal çözüm ve simülasyon çalışmalarındaki artışa zemin hazırlamıştır. Bunun yanında bu tip sistemlerin çözümü ile de bilgisayar teknolojisinin gelişiminin teorik zemininin hazırlandığı dolayısıyla bu iki sürecin birbirini besleyen süreçler olduğu söylenmelidir.

Ekziton, bağlı durumda olan elektron ve boşluktan oluşan quasi parçacıktır. Yaşam süreleri $100ps$ den ns ye kadar değişebilir, dolayısıyla ekzitonların kararlı yapılar olduğu söylenebilir. Ekziton bağlanma enerjisi, e elektron yükü, ϵ ortamın dielektrik sabiti a da elektron ile boşluk arasındaki mesafe olmak üzere $e/(\epsilon a)$ mertebesindedir. Dielektrik sabitinin 10, elektron boşluk arası uzaklığın da 0,1Å mertebesinde olduğu düşünülürse ekziton bağlanma enerjisinin 0,1eV mertebesinde olduğu görülür. Dielektrik sabitinin büyük olduğu ortamlarda perdeleme etkisi dolayısıyla elektron ile boşluk arasındaki Coulomb etkileşimi azalır bu durumdaki ekzitona Mott-Wannier ekzitonu denir. Öte yandan ortamın dielektrik sabiti düşükse perdeleme etkisi olmayacak, ekziton bağlanma enerjisi daha büyük ve elektron-boşluk arası uzaklık daha küçük olacaktır. Bu tipteki ekzitonlar Frenkel ekzitonu olarak bilinir.

Parabolik kuşatma altındaki Kuantum noktalarında ekziton limit durumlarında analitik olarak çözülmüş (Que, 1992), kuantum kuyularında VMC ile incelenmiştir (Hilton, Hagston ve Nicholls, 1992; Bastard, Mendez, Chang ve Esaki, 1982). İki ekzitondan oluşan sistem de yörünge integrali Monte Carlo ile (Wimmer, Nair ve Shumway, 2006) incelenmiştir. Kuantum kuyularda manyetik alanın ekziton durumlarına etkisi (Spiros, Cen ve Bajaj, 1991) de ele alınmıştır. Periyodik potansiyele sahip yapılarda (Hilton, Godwin, Harrison ve Hagston, 1992) ve süperörgülerde de (Harrison, Godwin ve Hagston, 1992) incelemeler mevcuttur.

Bu tezde KGA yöntemi atom ve molekül sistemleri ile ekzitonik sisteme uygulanarak KGA yönteminin yoğun madde fiziğindeki uygulanabilirliği tartışılacaktır.

BÖLÜM İKİ

YAKLAŞIM YÖNTEMLERİ

Gerçek sistemlerin kuantum mekaniksel çözümleri zordur. Bu zorlukların temelinde -kuantum fiziğinin de en temel problemi olan- çok parçacıklı sistemler için Schrödinger denkleminin çözümü yatar. Denklemin çözümü olan ve sistemi betimleyen dalga fonksiyonu, sistemin tüm serbestlik derecelerinin fonksiyonudur ve Hamiltoniyen de sistemin serbestlik derecesi arttıkça oldukça karmaşık hale gelir.

Tüm bu koşullar altında temel denklem olan Schrödinger denkleminin çok parçacıklı bir sistem için çözümü imkansızdır. Bu nedenle bazı yaklaşımlar yaparak denklemi çözülebilir hale getirmek kaçınılmazdır.

2.1 Varyasyonel Yöntem

Hamiltoniyeni H ile verilen sistemin Schrödinger denklemi

$$H\psi = E\psi \quad (2.1.1)$$

dir. Burada ψ denklemin çözümü olan ve sistemi betimleyen dalga fonksiyonu, E ise sistem enerjisidir. Sistemin enerjisi ψ nin fonksiyoneli olarak

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (2.1.2)$$

ile verilir. Varyasyonel yöntemde, dalga fonksiyonundaki sonsuz küçük değişimin (2.1.2) ile verilen enerjide nasıl bir değişim yarattığına bakılır. Denklemin en iyi çözümü, üzerinde yapılan sonsuz küçük bir değişimin enerji varyasyonunu sıfır yapan ($\delta E = 0$) dalga fonksiyonudur. Varyasyonel yöntemle çözüm, Hilbert uzayının bir alt uzayında arandığından en iyi çözüm kesin çözüm olmayabilecektir. Varyasyonel yöntemde ψ nin olası bir analitik formdaki çözümü deneme dalga

fonksiyonu olarak adlandırılır. Deneme dalga fonksiyonu Hilbert uzayının bu alt uzayını geren baz kümesi ile ifade edilebilir.

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N C_i |\phi_i\rangle \quad (2.1.3)$$

Baz kümesini oluşturan elemanlar ortogondur. (2.1.3) ün (2.1.1) e yazılıp sağdan kompleks eşleniği ile çarpılmasıyla problem çözümü genelleştirilmiş özdeğer problemine dönüştürülmüş olur.

$$\sum_{i=1}^N (H_{ij} - ES_{ij}) C_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (2.1.4)$$

Burada H_{ij} Hamiltoniyen matris elemanı, S_{ij} örtüşme matris elemanı ve E enerjisi aşağıdaki ifadelerle verilecektir.

$$\begin{aligned} H_{ij} &= \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle \\ S_{ij} &= \langle \phi_i | \phi_j \rangle \\ E &= \left(\sum_{i,j} C_i^* C_j H_{ij} \right) / \left(\sum_{i,j} C_i^* C_j S_{ij} \right) \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

(2.1.4) matris formunda

$$\overline{\overline{H}} \cdot \overline{\overline{C}} = E \overline{\overline{S}} \cdot \overline{\overline{C}} \quad (2.1.6)$$

olarak yazılır. (2.1.3) deki baz kümesini oluşturan fonksiyonlar belirli olduğunda, (2.1.4) genelleştirilmiş özdeğer denklemi çözülebilir ve çözüm sonunda (2.1.3) deki açılım katsayıları (C_i) bulunmuş olur. Bu katsayıların (2.1.3) de yazılmasıyla sistemi betimleyen dalga fonksiyonu, (2.1.5) de yazılmasıyla da sistemin enerjisi elde edilmiş olacaktır.

(2.1.3) de kullanılan baz kümesi ortonormal ise

$$S_{ij} = \langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (2.1.7)$$

olacak ve hesap kolaylaşacaktır.

Genelleştirilmiş özdeğer probleminin çözümü matris köşegenleştirme işlemini içerir ve bu işlemin bilgisayarda çözüm zamanı baz kümesi eleman sayısının üçüncü kuvvetiyle ölçeklidir ($O(N^3)$), bu yüzden baz kümesi seçimi önemlidir. Kümedeki eleman sayısı çözüm hassasiyetini artırır ancak hesap zamanını uzatır.

Çok parçacıklı sistem Hamiltoniyenin karmaşıklığı gerek kesin çözüm yöntemlerinin kullanılmasına gerekse yaklaşık yöntemlerin kullanılmasına kısıtlamalar getirir. Bu nedenle çok parçacık Hamiltoniyeninde bazı yaklaşımlarla basitleştirmeler yapmak gerekir.

2.2 Born Oppenheimer Yaklaşımı

Bu yaklaşımlardan ilki adyabatik yaklaşım olarak da bilinen Born Oppenheimer yaklaşımıdır (Born ve Oppenheimer, 1927). Bu yaklaşımdan sonra artık, sistemdeki elektron ve çekirdeklerin kütleleri -ve dolayısıyla etkiye cevap verme zamanları- birbirinden çok farklı olduğundan sistemin dalga fonksiyonu sadece elektronların serbestlik derecelerine bağlıdır. Çekirdekler klasik mekanik yöntemleri ile belirlenmiş olan yerlerinde -elektronlara göre- hareketsiz durmaktadır. Böylece rölativistik olmayan durumda N elektronlu M çekirdekli çok parçacıklı sistem Hamiltoniyeni şu halde olacaktır¹:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^M \frac{Z_\alpha}{|\vec{r}_i - \vec{d}_\alpha|} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i, j=1}^N \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (2.2.1)$$

Burada, \vec{r}_i i .elektronun konum vektörü, \vec{d}_α α . çekirdeğin konum vektörü, Z_α α . çekirdeğin yüküdür. Heitler ve London (Heitler ve London, 1927), 1927 de bu Hamiltoniyen ile H_2 molekülü için, yaklaşık dalga fonksiyonu olarak 2 tane 1s orbitalinin antisimetrik kombinasyonunu alarak, bağ enerjisini ve elektron çekirdek uzaklığını hesaplamıştır. Elektronik yapı hesapları da aynı yıllarda Bloch ile başlamıştır (Bloch, 1928).

¹Tezde atomik birimler kullanılacaktır, $e = m_e = \hbar = 4\pi\epsilon_0 = 1$

(2.2.1) ile verilen çok parçacık Hamiltoniyeni üçüncü terimdeki elektron-elektron etkileşimi teriminden dolayı çok serbestlik derecelidir ve çözümü zordur. Eğer bu terim olmasaydı Hamiltoniyen tek elektron Hamiltoniyenlerinin toplamı olarak yazılabilecekti

$$H = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V_i(\vec{r}) \right] \quad (2.2.2)$$

Buradaki $V_i(\vec{r})$ potansiyeli i . elektron dışındaki tüm parçacıkların katkısını ortalama biçimde içerir. Bu yüzden bu terim yerel değildir, çünkü $V\psi$ teriminin \vec{r} konumundaki değerinin belirlenmesi ψ nin tüm diğer $\vec{r}' \neq \vec{r}$ konumlarındaki değerinin belirlenmiş olmasını gerektirir. Bu zorluğun yanında artık (2.2.1) ile yazılan Schrödinger denklemi N tane birbirinden bağımsız tek parçacık Shrodinger denklemine dönüşmüştür.

Sistem enerjisine iki önemli katkı değiş-tokuş ve korelasyon katkısıdır. Değiş-tokuş etkileşimi, sistemdeki iki aynı spinli elektronun yerdeğiştirmesi sonucu dalga fonksiyonunun işaret değiştirmesini (Pauli Dışlama ilkesi) getirir. Korelasyon ise sistemdeki bir elektronun sistemdeki diğer tüm elektronların hareketinden etkileniyor olmasının sonucudur. Bağımsız parçacık yaklaşımı olarak bilinen (2.2.2), probleme göre değiş-tokuş etkisi ve korelasyon katkısını ortalama bir biçimde içerebilir ya da içermeyebilir.

2.3 Hartree ve Hartree-Fock Yaklaşımı

Hartree yaklaşımı (Hartree, 1928) N elektronlu sistemin dalga fonksiyonunu, tek elektron dalga fonksiyonlarının (orbitalerin) çarpımı olarak yazmaya dayanır.

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \prod_{i=1}^N \psi_i(\vec{r}_i) \quad (2.3.1)$$

i . elektrona etki eden potansiyel,

$$V_i(\vec{r}) = V_{iyon}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) \quad (2.3.2)$$

ile verilebilir. Potansiyel, iyon ve Hartree potansiyelinin toplamıdır. (2.2.1) den

$$V_{iyon}(\vec{r}) = -\sum_{\alpha=1}^M \frac{Z_{\alpha}}{|\vec{r} - \vec{d}_{\alpha}|}, \quad V_H(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (2.3.3)$$

şeklinde elde edilir. i . elektrona etkiyen Hartree potansiyelindeki yoğunluk terimi

$$\rho(\vec{r}') = \sum_{j \neq i, j=1}^N |\psi_j(\vec{r}')|^2 \quad (2.3.4)$$

ile verilir. Sistemin Hamiltoniyeni V_i terimi (2.3.2) ile verilmek üzere (2.2.2) ye dönüşmüştür. Hamiltoniyenin (2.3.1) ile alınan beklenen değerini (toplam enerjii) en küçük yapan tek elektron dalga fonksiyonları Hartree denklemi ile verilir:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{iyon}(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) + \sum_{j \neq i, j=1}^N \int d\vec{r}' \frac{|\psi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (2.3.5)$$

(2.3.5) denklemi orbitaller için öz uyumlu (self consistent) çözüldüğünde (2.3.1) ile sistemin dalga fonksiyonu elde edilmiş olacaktır.

Hartree-Fock yaklaşımında (Fock, 1928) ise sistemin dalga fonksiyonu, antisimetri özelliğini de sağlayacak şekilde seçilir. Elektronlardan oluşan sistemin dalga fonksiyonu, Pauli dışlama ilkesi gereği, sistemdeki iki elektronun yerdeğiştirmesi altında antisimetrik olmalıdır²,

$$\Psi(\dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots) = -\Psi(\dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots) \quad (2.3.6)$$

(2.3.6) yı sağlayan en basit dalga fonksiyonu Slater determinanı (Slater, 1930)

²(2.3.6) daki \vec{r}_i değişkeninin elektronun spin bilgisini de içerdiği düşünülmelidir

ile verilir:

$$D(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_1(\vec{r}_2) & \dots & \psi_1(\vec{r}_N) \\ \psi_2(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_2) & \dots & \psi_2(\vec{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_N(\vec{r}_1) & \psi_N(\vec{r}_2) & \dots & \psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (2.3.7)$$

(2.3.5) denklemine benzer olan Hartree Fock denklemi de enerji beklenen değerini en küçük yapan (2.3.7) deki tek elektron dalga fonksiyonlarını verir:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{iyon}(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) + \sum_j \int d\vec{r}' \frac{|\psi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \psi_i(\vec{r}) - \sum_j \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \int d\vec{r}' \frac{\psi_j^*(\vec{r}') \psi_i(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \psi_j(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (2.3.8)$$

Son terim deđiřtokuř terimidir, σ_i, σ_j spinleri aynı olduđunda sıfırdan farklıdır. Deđiřtokuř terimi yerel olmadıđından Hartree Fock denkleminin çözümü oldukça zordur.

Hartree Fock denklemi çözümü olan (2.3.7) deki bir orbitalin (2.1.3) deki gibi yazılmasıyla (2.1.6) genelleřtirilmiř özdeđer problemine dönüřtürülebilir.

$$\psi_j = \sum_{i=1}^N C_{ij} \phi_i \quad (2.3.9)$$

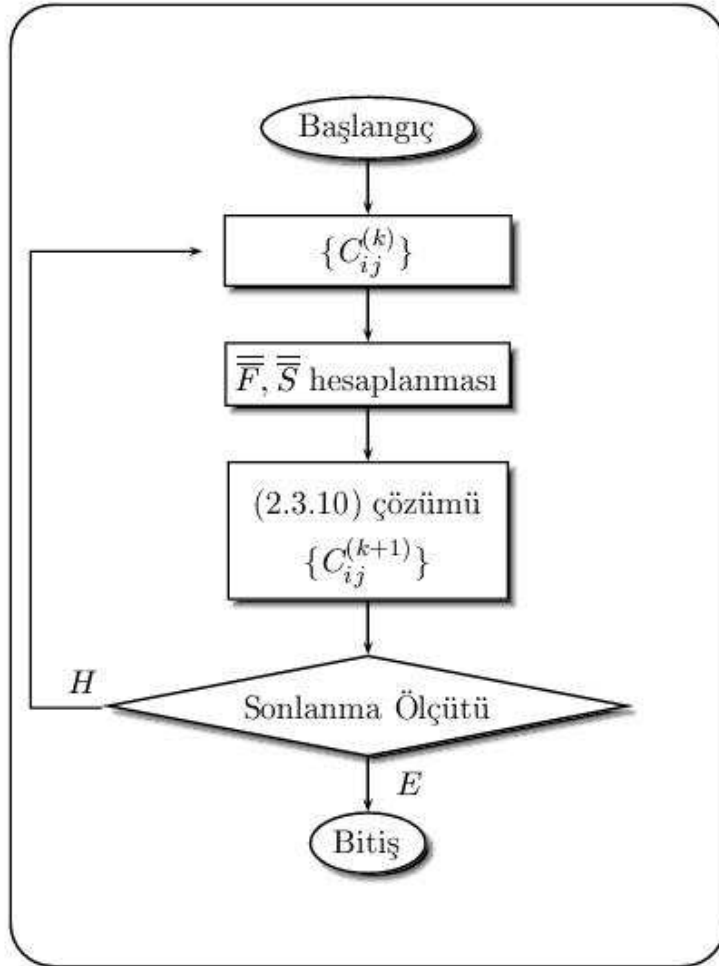
(2.3.9) un (2.3.8) de yazılıp sađdan kompleks eřleniđi ile çarpımıyla Roothan denklemi olarak bilinen

$$\overline{\overline{F}} \cdot \overline{\overline{C}}_j = E \overline{\overline{S}} \cdot \overline{\overline{C}}_j \quad (2.3.10)$$

elde edilir. Buradaki matris elemanları şu şekilde verilir:

$$\begin{aligned}
 F_{ij} &= h_{ij} + \frac{1}{2} \sum_{kl} P_{kl} [2 \langle \phi_i \phi_k | g | \phi_j \phi_l \rangle - \langle \phi_i \phi_k | g | \phi_l \phi_j \rangle] \\
 h_{ij} &= \langle \phi_i | h | \phi_j \rangle \\
 P_{ij} &= 2 \sum_k C_{ik} C_{jk}^* \\
 E &= \sum_{i,j} P_{ij} h_{ij} + 1/2 \sum_{i,j,k,l} P_{ij} P_{kl} [\langle \phi_i \phi_k | g | \phi_j \phi_l \rangle - 1/2 \langle \phi_i \phi_k | g | \phi_l \phi_j \rangle] \\
 h(i) &= -\frac{1}{2} \nabla_i^2 + V_{iyon}(\vec{r}_i) \\
 g(i, j) &= \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}
 \end{aligned}
 \tag{2.3.11}$$

\bar{S} matris elemanları ise (2.1.5) deki ifadesiyle verilir.



Şekil 2.1 Tipik bir Hartree Fock algoritması akış şeması

Programın başlangıcında sistem Hamiltoniyeni ve kullanılacak olan baz kümesi

belirlenmiş olmalıdır. İlk adımda C_{ij} katsayıları rasgele olarak seçilebilir. Programın her adımında bu katsayılar sistem enerjisini minimum yapan değerlerine doğru evrilecektir. Sonlanma ölçütü olarak programın ardışık adımlarında bulunan C_{ij} ile hesaplanan enerji değerleri arasındaki fark alınabilir. Ardışık iki adımda hesaplanan enerji değerleri arasındaki fark belirli bir değerden küçükse program duracaktır.

2.4 Yoğunluk Fonksiyoneli Teorisi (YFT)

Buradaki temel nicelik yoğunluktur. Hamiltoniyeni (2.2.1) ile verilen N elektronlu sistem için yazılan Schrödinger denklemi, (2.2.2) deki gibi birbirinden bağımsız N tek parçacık Hamiltoniyenin toplamı olarak yazılan Hamiltoniyen ile, N tane tek elektron Schrödinger denkleminde indirgenir.

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = \varepsilon \psi_i(\vec{r}) \quad (2.4.1)$$

Buradaki $\psi_i(\vec{r})$ ler tek elektron dalga fonksiyonları ve $V(\vec{r})$ tek elektronun tüm etkileşimlerini içeren potansiyel terimidir,

$$V(\vec{r}) = V_{dis}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{XC}(\vec{r}) \quad (2.4.2)$$

Potansiyeldeki ilk terim iyonlarla olan etkileşimi, ikinci terim diğer elektronlarla olan etkileşimi, üçüncü terim ise deęiřtokuř ve korelasyon etkileşimini anlatır. Formalizm bu hali ile kesindir.

Hohenberg ve Kohn (Hohenberg ve Kohn, 1964) 1964'de, homojen olmayan elektron gazının taban durumunu bulmak için YFT geliřtirmişlerdir. Böyle bir sistem için parçacık yoğunluęu

$$\rho(\vec{r}) = N \int |\Psi_0(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)|^2 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N \quad (2.4.3)$$

ile verilir. Burada Ψ_0 sistemin taban durumu dalga fonksiyonudur. (Hohenberg

ve Kohn, 1964) de, sistemin taban durum enerjisinin yoğunluğun fonksiyoneli olarak verilebileceği ve enerji fonksiyonelinin, iyonlarla etkileşim ile ilgili olan terimi dışındaki kısmının ($F[\rho]$) evrensel olduğu gösterilmiştir. Yine (Hohenberg ve Kohn, 1964) de verilen iki önemli teorem şunlardır :

- Verilen $V_{dis}(\vec{r})$ ile belirlenen yoğunluk sistemi tek olarak betimler.
- $F[\rho]$ minimum değerini ancak ve ancak taban durumu yoğunluğunda alır.

Teoremlerden ilki, yoğunluğun sistemi betimlemek için dalga fonksiyonu yerine kullanılabileceğini anlatır.

Bir sonraki yıl, Kohn ve Sham (Kohn ve Sham, 1965), (Hohenberg ve Kohn, 1964) deki teoremleri kullanarak bugün Kohn-Sham denklemleri olarak bilinen, enerji fonksiyonelinin minimum yapan yoğunluğun bulunabileceği denklemleri vermişlerdir.

$$E[\rho(\vec{r})] = T[\rho(\vec{r})] + \int d\vec{r}' d\vec{r} \frac{\rho(\vec{r}')\rho(\vec{r})}{|\vec{r}' - \vec{r}|} + E_{XC}[\rho(\vec{r})] + \int \rho(\vec{r}) V_{dis}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.4.4)$$

yoğunluk fonksiyoneli

$$V_{eff} = \int d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}' - \vec{r}|} + V_{XC}[\rho(\vec{r})] + V_{dis}(\vec{r}) \quad (2.4.5)$$

tanımlanmasıyla

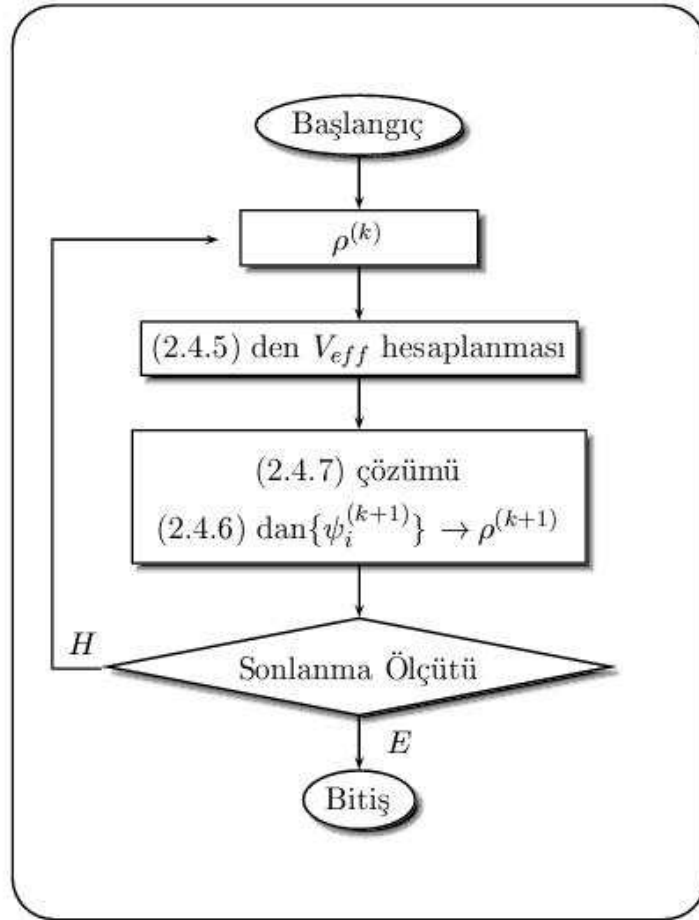
$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(\vec{r})|^2 \quad (2.4.6)$$

ile verilen yoğunluğa göre minimize edilirse³

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_i^2 + V_{eff}(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = \varepsilon\psi_i(\vec{r}) \quad (2.4.7)$$

denklemini elde edilir. Denklem öz uyumlu çözümlenmelidir.

³yoğunluğun tüm uzay üzerinden integrali N yi verir. Belirlenmemiş Lagrange çarpanları yönteminde koşul olarak bu kullanılarak minimize ediliyor



Şekil 2.2 Tipik bir YFT algoritması akış şeması

Hesap bittiğinde elde edilen yoğunluk (2.4.4) de yazılarak sistemin taban durumu enerjisi elde edilmiş olacaktır.

Yöntemin kesinliğini bozan etken (2.4.4) deki E_{XC} terimidir. Bu terimin formu bilinmediğinden, yoğunluğun fonksiyoneli olarak yazmak zordur. Bunun için iki yaklaşım yerel yoğunluk yaklaşımı (local density approximation, LDA) ve genelleştirilmiş gradiyent yaklaşımıdır (generalized gradient approximation, GGA).

2.5 Yaklaşım Yöntemlerinin Karşılaştırılması

- Değiş-tokuş ve korelasyon etkileri hesaba katılmadığı için Hartree yaklaşımı bu gün oldukça kullanışsızdır.
- Hartree-Fock yaklaşımının hesap zamanı, deęiřtokuş etkileşiminin içerdęi yerel olmayan terim nedeniyle, Hartree yaklaşımı ve YFT ne göre daha uzundur.
- YFT, LDA hesap zamanı ve verdięi sonuçlar itibarıyla bu yaklaşımlar arasındaki en iyi yaklaşımdır. Ancak bu yaklaşım da çok yavaş deęiřen yük taşıyıcı yoęuluęuna sahip sistemler dıřında iyi çalıřmaz. Örneęin YFT, LDA antiferromanyetik bir yalıtkan olan La_2CuO_4 için metalik sonucunu verir.

Tüm bu yöntemlerin başarısızlıklarının temelinde çok parçacık problemini tek parçacık problemine indiriyor olmaları yatar.

2.6 Pseudopotansiyel

Çok parçacık Schrödinger denklemi çözümünde bir başka basitleřtirme pseudopotansiyel ile yapılabilir. Kimyasal baęların, sistemin elektronik özelliklerinin belirlenmesinde sistemi oluřturan atomların dıř yörüngelerindeki elektronlar (valans elektronları) doğrudan etkilidir. Çekirdeęe yakın elektronlar ise (kor elektronları) ancak valans elektronlarına etkileri yoluyla bu özelliklerin belirlenmesine dolaylı yoldan katılır. Katıdaki atomlar düşünöldüğünde, iki komřu atom elektronlarından ancak dıř yörüngede olanların dalga fonksiyonlarının örtüşmesi iki atomun dalga fonksiyonu örtüşmesine önemli katkı verir, kor elektronları ilgili atomun çekirdeęi tarafından güçlü bir şekilde çekilmektedir bu da çekirdeęe yakın yerlerdeki elektronların dalga fonksiyonlarının çekirdeęe yakın yerlere lokalize olmuş fonksiyonlar olduęunu söyler. Elbette -az da olsa- kor elektronlarının komřu atom tarafından, ilgili atom çekirdeęinden daha güçlü bir şekilde çekildięi durumlar da söz konusudur, bu

durumlarda pseudopotansiyel yaklaşımı iyi sonuç vermeyecektir.

İlgili sistem için belirlenen kor ve valans elektronları ile bu elektronların birbirine ortogonal dalga fonksiyonları, valans elektronları Hilbert uzayını daraltacak, bu şekilde problem daha az serbestlik dereceli hale gelecektir. Born Oppenheimer Yaklaşımı ile çekirdek serbestlik derecelerinin problemden çıkarılmasına benzer olarak pseudopotansiyel yaklaşımı ile kor elektronlarının serbestlik dereceleri problemden çıkarılmış olur. Sistemi betimlemek için kullanılan baz kümesi eleman sayısı azalır, hesaplar kolaylaşır. Problemden çıkarılan kor elektronları ve çekirdeğin, valans elektronları üzerine etkisi pseudopotansiyel ile anlatılır. Pseudopotansiyel genelde, valans durumlarındaki her açısız momentum için verilen bileşenlerden oluşur.

Literatürde farklı yöntemler mevcut olsa da pseudopotansiyel temelde şu şekilde türetilir:

(2.2.2) tipindeki tek parçacık Hamiltoniyeni kullanılarak izole atomdaki tüm elektronlar için tek parçacık durumları hesaplanır, bu tek parçacık durumları yukarıda anlatıldığı gibi valans ve kor durumları olarak ayrılabilir, bu durumlar tek parçacık Schrödinger denklemini sağlayacaktır:

$$\begin{aligned} H |\psi_v\rangle &= \epsilon_v |\psi_v\rangle \\ H |\psi_k\rangle &= \epsilon_k |\psi_k\rangle \end{aligned} \quad (2.6.1)$$

Valans durumları için $\tilde{\psi}_v$ pseudo dalga fonksiyonu

$$|\psi_v\rangle = |\tilde{\psi}_v\rangle - \sum_k \langle \psi_k | \tilde{\psi}_v \rangle |\psi_k\rangle \quad (2.6.2)$$

ile tanımlanabilir. Hamiltoniyen (2.6.2) ye uygulanır ve (2.6.1) kullanılırsa

$$\left[H + \sum_k (\epsilon_v - \epsilon_k) |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \right] |\tilde{\psi}_v\rangle = \epsilon_v |\tilde{\psi}_v\rangle \quad (2.6.3)$$

elde edilecektir. Yani valans durumları için (2.6.2) ile tanımlanan pseudo dalga

fonksiyonları (2.6.1) deki denklemlerin ayınması, değişmiş bir potansiyelle, aynı enerji değerlerini verecek şekilde sağlarlar. Yeni potansiyel pseudopotansiyeldir (V_{ps}) ve

$$V_{ps} = V + \sum_k (\epsilon_v - \epsilon_k) |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \quad (2.6.4)$$

olarak verilecektir. Ancak pseudopotansiyel yerel ve tek değildir. (2.6.4) ün sağ tarafındaki ikinci terim pseudo valans durumlarına uygulanır,

$$\int V_{ps}(\vec{r}, \vec{r}') \tilde{\psi}_v(\vec{r}') d\vec{r}' = \sum_k (\epsilon_v - \epsilon_k) |\psi_k\rangle \langle \psi_k | \tilde{\psi}_v \rangle \quad (2.6.5)$$

iki taraf $\tilde{\psi}_v(\vec{r})$ ile çarpılıp $d\vec{r}$ üzerinden integre edilirse

$$V_{ps}(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_k (\epsilon_v - \epsilon_k) \psi_k^*(\vec{r}') \psi_k(\vec{r}) \quad (2.6.6)$$

elde edilir. (2.6.6) daki haliyle pseudopotansiyel (2.6.3) ile belirlenecek olan ϵ_v ye bağlıdır, ancak bu denklemin çözülebilmesi için de pseudopotansiyel bilinmelidir. Dolayısıyla pseudopotansiyel elde etmek için denklemler öz uyumlu çözülmelidir. (2.6.2) ye kor durumlarının lineer bileşimi eklendiğinde elde edilen yeni pseudo valans dalga fonksiyonunun da (2.6.3) denklemini sağladığı görülebilir, bu da aynı valans özdeğerini veren birden fazla pseudopotansiyelin olabileceğini gösterir.

Pseudopotansiyelin belirlenmesi için kor bölgesi ile valans bölgesi birbirinden ayrılmalıdır. Belirlenen bir kesme uzaklığı (r_c) ile bu yapılabilir. r atom çekirdeğinden uzaklık olmak üzere $r < r_c$ kor bölgesini, $r > r_c$ ise valans bölgesini tanımlayacaktır. Pseudopotansiyel ve valans pseudo dalga fonksiyonları valans bölgesinde gerçek olanlarla çıkışacaktır. Kor bölgesinde ise valans pseudo dalga fonksiyonları nodsuz (sıfırsız), pseudopotansiyel ise gerçek potansiyel olan Coulomb potansiyelinin aksine $r \rightarrow 0$ da sifıra gidecektir.

Tüm bunlardan sonra pseudopotansiyel şu adımlar izlenerek elde edilebilir:

1. (2.6.1) deki ilk denklem çözülür, ϵ_v ve ψ_v elde edilir.

2. $r > r_c$ için $\tilde{\psi}_v = \psi_v$ seçilir ve $\tilde{\psi}_v$, $0 \leq r < r_c$ için aşağıdaki koşulları sağlayacak şekilde oluşturulur:

- $\tilde{\psi}_v$ düzgün olmalıdır.
- $\tilde{\psi}_v$ nodsuz olmalıdır.
- $\tilde{\psi}_v$ nin ilk ve ikinci uzay türevleri r_c de sürekli olmalıdır.

3. $\tilde{\psi}_v$ tüm uzay için normalize edilir.

4. $\tilde{\psi}_v$ için pseudopotansiyel kullanarak yazılmış Schrödinger deklemini pseudopotansiyel V_{ps} için çözülür.

Pseudo dalga fonksiyonu, kor bölgesi yük yoğunluğunu doğru olarak üretiyorsa,

$$\int_0^{r_c} d\vec{r} |\psi_v| = \int_0^{r_c} d\vec{r} |\tilde{\psi}_v| \quad (2.6.7)$$

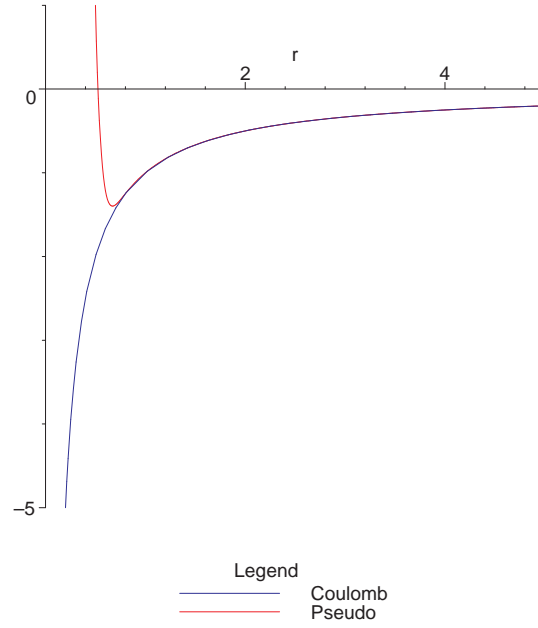
ilgili pseudopotansiyele norm korunumlu pseudopotansiyel denir.

Pseudopotansiyeller ile ilgili istenen bir başka özellik de transfer edilebilirlik olarak adlandırılır, izole atom için türetilmiş olan pseudopotansiyelin, ilgili atom örneğin bir katı içine yerleştirildiğinde de geçerli olması beklenir, bu özelliğe transfer edilebilirlik denir. Norm korunumlu pseudopotansiyeller transfer edilebilirdir.

Pseudopotansiyel yaklaşımının temelleri (Phillips ve Kleinman, 1959) da atılmıştır. İlk norm korunumlu pseudopotansiyeller, (Hamann, Schlüter ve Chang, 1979; Bachelet, Hamann ve Schlüter, 1982; Kerker, 1980; Troullier ve Martins, 1991) de üretilmiştir. Daha sonra (Vanderbilt, 1990) de üretilen pseudopotansiyel de norm korunum şartı kaldırılmış, r_c büyütülerek valans durumları için çok daha az sayıda baz kullanılmasının önü açılmıştır. r_c nin büyük olmasını sağlayan bu pseudopotansiyeller ultrasoft⁴ pseudopotansiyeller olarak adlandırılır.

⁴Pseudopotansiyelin 'soft' olması kullanılan r_c nin büyüklüğü ile ilgilidir. Büyük r_c ye sahip pseudopotansiyeller soft pseudopotansiyeller olarak bilinir

Tipik bir pseudopotansiyel Şekil (2.6) dan görülebilir.



Şekil 2.3 Tipik bir pseudopotansiyel ve Coulomb potansiyeli. Pseudopotansiyel (Bachelet, Hamann ve Schlüter, 1982) den türetilmiştir.

2.7 Ekzitonik Sistemler

Ekzitonlar hacimli (bulk) yapılarda olabileceği gibi heteroyapılarda da oluşturulabilir. Basitçe, iletim bandına uyarılmış bir elektronun valans bandında oluşan boşluğa bağlanmasıyla oluşur.

Ekzitonun toplam enerjisi hacimli yapıda

$$E = E_g + E_X \quad (2.7.1)$$

ile verilirken heteroyapılarda,

$$E = E_e + E_h + E_g + E_X \quad (2.7.2)$$

ile verilir. Burada E_g band aralığı (valans-iletim bandları arası enerji farkı), E_e, E_h elektron ve boşluk enerjileri, E_X ekziton bağlanma enerjisidir.

Varyasyonel yöntemle çözümlerde, band aralığı ve tek parçacık çözümlerinin verili olduğu düşünülürse (2.7.2) ifadesi ile verilen enerjiyi minimum yapan parametreleri bulma problemi, ekziton bağlanma enerjisini (E_X) maksimum yapan parametreleri bulma problemine dönüşmüş olur.

Heteroyapıdaki bir ekziton için Hamiltoniyen basitçe, etkileşen iki parçacık Hamiltoniyenidir ve

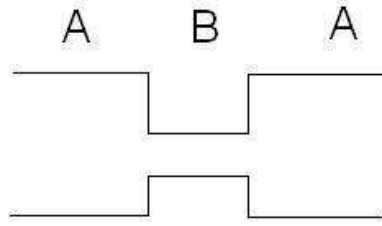
$$H = H_e + H_h + H_{e-h} \quad (2.7.3)$$

şeklinde yazılabilir.

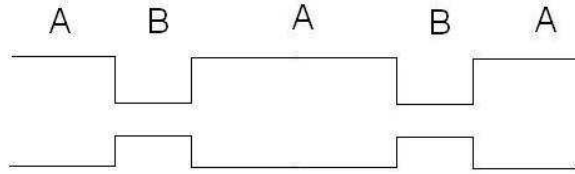
Ekziton tek kuantum kuyusunda ele alınabileceği gibi çoklu kuantum kuyularından oluşmuş heteroyapıda da ele alınabilir. Periyodik çoklu kuantum kuyularından oluşmuş bir sistemde tek parçacık dalga fonksiyonlarının örtüşmesi (overlap) söz konusuysa yapı süper örgü (super lattice) adını alır, kuantum kuyuları arasındaki mesafe tek parçacık dalga fonksiyonlarının örtüşmesini engelleyecek biçimdeyse bu yapı da çoklu kuantum kuyusu olarak bilinir.

2.8 Heteroyapılar

Farklı band aralığı değerlerine sahip malzemelerin kuantum etkilerinin görülebileceği incelikte yanyana getirilmesiyle, parçacıkların değişik miktarlarda serbestlik derecelerine sahip olduğu kuşatılmış sistemler yaratılabilir. Bir boyutlu kuşatmayla kuantum kuyuları, iki boyutlu kuşatmayla kuantum telleri, üç boyutlu kuşatmayla da kuantum noktaları oluşur. Bir boyutta kuşatılmış olduğundan kuantum kuyularındaki sistemler iki boyutlu olacaktır, yani kuantum kuyusundaki tek parçacığın betimlenmesi için iki serbestlik derecesi yeterli olacaktır. Benzer olarak kuantum tellerinde sistemler bir boyutlu, kuantum noktalarında ise sıfır boyutludur. Tipik bir kuantum kuyusu Şekil 2.4 deki gibi küçük band aralıklı B malzemesinin iki yanına daha geniş band aralığına sahip A malzemesinin ince bir tabaka halinde yerleştirilmesiyle oluşur.



Şekil 2.4 Tipik bir kuantum kuyusu.



Şekil 2.5 Tipik bir çoklu kuantum kuyusu.

Tipik bir çoklu kuantum kuyusu da Şekil 2.5 den görülebilir. Yukarıda bahsedildiği gibi kuyular arası mesafeye göre yapı çoklu kuantum kuyusu ya da süperörgü olarak adlandırılır.

Heteroyapılarda sistemin içinde bulunduğu toplam potansiyel kuşatma potansiyeli ve yapının içindeki potansiyel katkılarının toplamı olarak yazılabilir, bu tür sistemlerin kuantum mekaniksel çözümünü de bazı kolaylıklar oluşabilir. Sistem simetrisi de hesaba katıldığından problemin çözümü daha da kolaylaşacaktır.

BÖLÜM ÜÇ

MONTE CARLO YÖNTEMİ

Kuantum mekaniksel problemlerin bir çoğu optimizasyon problemidir ya da optimizasyon problemine dönüştürülebilir. Kesin veya yaklaşık analitik çözüm ya da sayısal çözüm yapılamadığı durumlarda problemi optimizasyon problemi olarak ifade etmek ve çözümde optimizasyon algoritmalarını kullanmak çoğu zaman iyi sonuçlar vermektedir. Monte Carlo Yöntemi bugün fiziğin birçok dalında, rasgele sayılarla sistemin simülasyonu temeliyle kullanılan bir yöntemdir. Kuantum Monte Carlo Simülasyonu ise temelde, çok parçacıklı sistemin çözümü sırasında karşılaşılan çok boyutlu integrallerin Monte Carlo yöntemi ile alınmasına ya da sistem gözlenebilirlerinin hesaplanabilmesi için gerekli olan çok sayıda uygun şekillenim seçimine dayanır.

3.1 Temel Kavramlar

Herhangi bir X_1 başlangıç şekillenimi üzerinde değişiklik yapılarak X_N son şekillenimi elde edilmek isteniyor olsun, $X_1 \rightarrow X_2 \rightarrow \dots \rightarrow X_N$. Bu zincirin oluşma olasılığı

$$P_N(X_1, X_2, \dots, X_N) = P_1(X_1) T(X_1 \rightarrow X_2) T(X_2 \rightarrow X_3) \dots T(X_{N-1} \rightarrow X_N) \quad (3.1.1)$$

ile verilir. Burada T geçiş olasılığı, P ise şekillenimin olasılığıdır. Bu hareket, bir yürüyücünün $P_1(X_1)$ olasılıklı X_1 noktasından harekete başlayıp, komşu noktaya T olasılığıyla geçişi ile temsil edilebilir. Burada geçiş olasılıkları normalizedir.

$$\sum_{X_j} T(X_i \rightarrow X_j) = 1 \quad (3.1.2)$$

Hareketin belirli bir noktasına geçiş sadece bir önceki nokta ile ilişkiliyse zincire Markov zinciri denir.

Ergodiklik koşulu ise şöyle tanımlanır:

1. Hareketin belirli bir noktasına, herhangi diğer noktadan sonlu sayıda adımda ulaşılabilir.
2. Harekette periyodiklik yoktur.

Bu koşulları sağlayan Markov zincirine ergodik denir.

3.2 Kesikli Rasgele Değişkenler

$\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ ortaya çıkma olasılıkları $\{p_1, p_2, \dots, p_N\}$ olan N tane rasgele değişken olsun. Olasılık, herhangi bir i için şu özellikleri sağlar,

$$0 \leq p_i \leq 1, \quad \sum_{i=1}^N p_i = 1 \quad (3.2.1)$$

Bu değişkenin ortalaması,

$$\langle x \rangle = \sum_{i=1}^N p_i x_i \quad (3.2.2)$$

varyansı,

$$\sigma^2(x) = \sum_{i=1}^N p_i (x_i - \langle x \rangle)^2 \quad (3.2.3)$$

ile tanımlıdır. Bu niceliğin karekökü standart sapma olarak adlandırılır.

Varyansın

$$\sigma^2(x) = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (3.2.4)$$

olduğu görülebilir. g gerçel değerli herhangi bir fonksiyon ve x_i rasgele bir değişken olmak üzere, $g(x_i)$ de rasgele bir değişkendir. Dolayısıyla g

fonksiyonunun da ortalaması ve varyansı tanımlanabilir.

$$\langle g \rangle = \sum_{i=1}^N p_i g(x_i) \quad (3.2.5)$$

varyansı,

$$\sigma^2(g) = \sum_{i=1}^N p_i (g(x_i) - \langle g \rangle)^2 \quad (3.2.6)$$

olur.

Lineer kombinasyonun da ortalaması ve varyansı bulunabilir, (3.2.2) ve (3.2.3) den :

$$\langle ax + by \rangle = a \langle x \rangle + b \langle y \rangle \quad (3.2.7)$$

birbirinden bağımsız⁵ x, y rasgele değişkenleri için,

$$\sigma^2(ax + by) = a^2 \sigma^2(x) + b^2 \sigma^2(y) \quad (3.2.8)$$

olarak yazılabilir. Reel değerli g, h fonksiyonları ve rasgele x değişkeni için ise bu bağıntılar şu şekilde olacaktır:

$$\langle ag(x) + bh(y) \rangle = a \langle g \rangle + b \langle h \rangle \quad (3.2.9)$$

$$\sigma^2(ag(x) + bh(y)) = a^2 \sigma^2(g) + b^2 \sigma^2(h) \quad (3.2.10)$$

(3.2.9) ve (3.2.10) un doğruluğu, (3.2.5) ve (3.2.6) tanımlarından hareketle gösterilebilir.

3.3 Sürekli Rasgele Değişkenler ve Olasılık Dağılım Fonksiyonu

x , belli bir aralıktaki her değeri alabilen sürekli bir değişken olsun. Sürekli durumda, yukarıda anlatılan olasılık yerine olasılık dağılım fonksiyonu tanımlanır.

⁵bağımsız iki değişken için $\langle xy \rangle = \langle x \rangle \langle y \rangle$ dir

Olasılık dağılım fonksiyonu $f(x)$ herhangi bir x için şu özellikleri sağlar:

$$f(x) \geq 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = 1 \quad (3.3.1)$$

$f(x)dx$, x' değişkeninin $x \leq x' \leq x + dx$ aralığında olma olasılığıdır. Dolayısıyla x değişkeninin $[a, b]$ aralığında olma olasılığı

$$\int_a^b f(x')dx' \quad (3.3.2)$$

dır.

Sürekli rasgele değişkenler için ortalama değer ve varyans, (3.2.2) ve (3.2.3) e benzer olarak tanımlanır. x sürekli rasgele değişken ve $f(x)$ olasılık dağılım fonksiyonu olmak üzere,

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' x' f(x') \quad (3.3.3)$$

$$\sigma^2(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' f(x') [x' - \langle x \rangle]^2 \quad (3.3.4)$$

(3.2.5) ve (3.2.6) ya benzer olarak, $g(x)$ rasgele sürekli x değişkenini argüman kabul eden reel değerli herhangi bir fonksiyon olmak üzere

$$\langle g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' f(x') g(x') \quad (3.3.5)$$

$$\sigma^2(g) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' f(x') [g(x') - \langle g \rangle]^2 \quad (3.3.6)$$

ile tanımlanacaktır.

3.3.1 Eksponansiyel Dağılım

Olasılık dağılım fonksiyonu,

$$f(x) = \lambda \exp(-\lambda x), \quad x \geq 0, \lambda > 0 \quad (3.3.7)$$

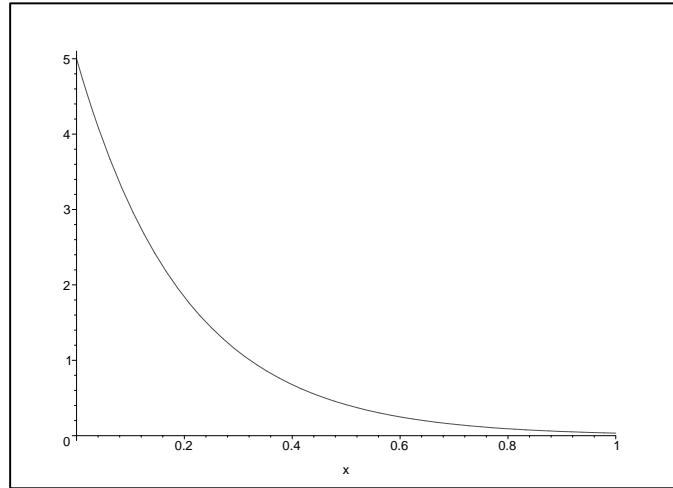
ile verilir. Fonksiyonun (3.3.1) koşulunu sağladığı görülebilir. Dağılımın ortalaması ve varyansı, (3.3.7), (3.3.3) ve (3.3.4) de yazılarak bulunabilir.

$$\langle x \rangle = \frac{1}{\lambda}, \quad \sigma^2 = \left(\frac{1}{\lambda}\right)^2 \Rightarrow \sigma = \frac{1}{\lambda} \quad (3.3.8)$$

Örneğin,

$$\int_{1/2\lambda}^{3/2\lambda} \lambda \exp(-\lambda x) dx$$

integrali hesaplanırsa, sonuç 0,83 bulunur. Bunun anlamı, $0 \leq x < \infty$ aralığında olan ve olasılık dağılımı (3.3.7) ile verilen rasgele x değişkeninin, %83 olasılıkla $\langle x \rangle$ ile $\langle x \rangle + \sigma/2$ arasında olacağıdır⁶.



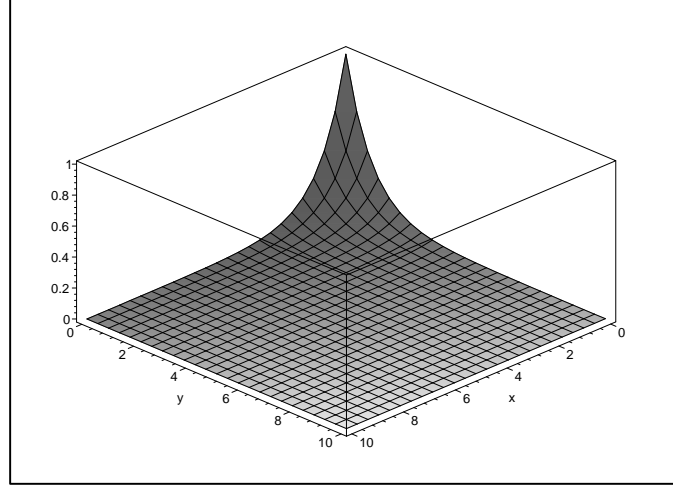
Şekil 3.1 $\lambda = 5$ için (3.3.7) ile verilen olasılık dağılım fonksiyonu.

⁶Başka bir söyleyişle : $0 \leq x < \infty$ aralığında (3.3.7) olasılık dağılım fonksiyonuna göre dağılmış olan rasgele sayıların %83 ü $\langle x \rangle$ ile $\langle x \rangle + \sigma/2$ arasındadır

İki boyutlu uzaydaki koordinatlar x, y ile verilmek üzere aynı dağılım iki boyutta

$$f(x, y) \propto \exp(-\lambda(x + y)) \quad (3.3.9)$$

formundaki olasılık dağılım fonksiyonu ile verilecektir.



Şekil 3.2 $\lambda = 1$ için (3.3.9) ile verilen olasılık dağılım fonksiyonu.

3.3.2 Gaussiyen (Normal) Dağılım

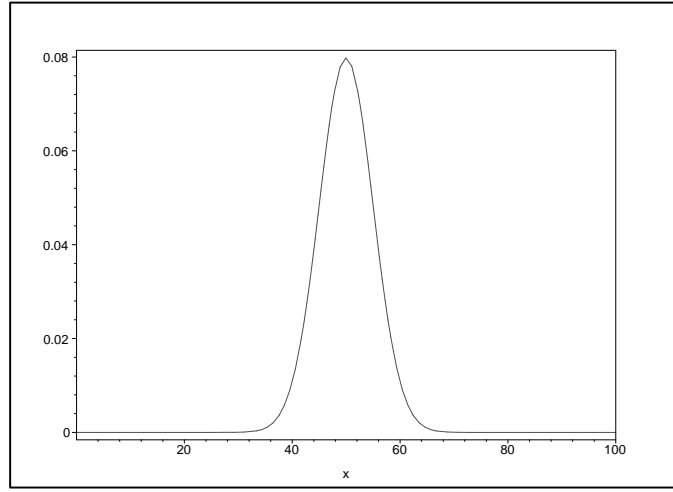
Olasılık dağılım fonksiyonu

$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2} \sigma} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right), \quad -\infty < x < \infty \quad (3.3.10)$$

ile verilir. Fonksiyonun (3.3.1) koşulunu sağladığı görülebilir. Dağılımın ortalaması ve varyansının, μ ve σ^2 olduğu (3.3.10), (3.3.3) ve (3.3.4) de yazılarak görülebilir. Bir önceki dağılımdakine benzer şekilde, örneğin

$$\int_{\mu-2\sigma}^{\mu+2\sigma} \frac{1}{(2\pi)^{1/2} \sigma} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) dx = 0,9544$$

sonucunun anlamı, $-\infty < x < \infty$ aralığında (3.3.10) olasılık dağılım fonksiyonuna göre dağılmış olan rasgele sayıların %95'inin $\mu - 2\sigma$ ile $\mu + 2\sigma$ arasında olduğudur.

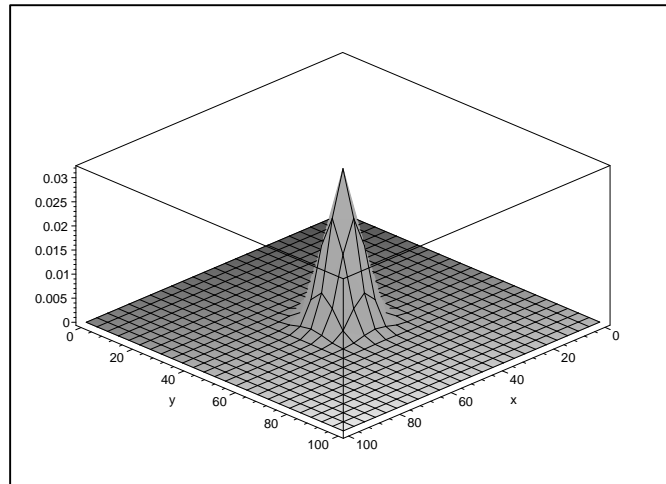


Şekil 3.3 $\mu = 50$ ve $\sigma = 5$ için (3.3.10) ile verilen normal dağılımın olasılık dağılım fonksiyonu.

Dağılımın iki boyuttaki ifadesi ise

$$f(x, y) \propto \exp\left(-\frac{(x - \mu_x)^2 + (y - \mu_y)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (3.3.11)$$

ile verilen olasılık dağılım fonksiyonu olacaktır.



Şekil 3.4 $\mu_x, \mu_y = 50$ ve $\sigma = 5$ için (3.3.11) ile verilen normal dağılımın olasılık dağılım fonksiyonu.

3.4 Metropolis Algoritması

Metropolis Monte Carlo Yöntemi (Metropolis, Rosenbluth, Rosenbluth, Teller ve Teller, 1953) şekillenimler arasında belirli bir $\rho(X)$ olasılık dağılıma uygun olacak şekilde ergodik bir Markov zinciri yaratmaktan ibarettir.

Hareketin her adımında olasılık dağılımı değişecektir. t . adımdaki nokta olan X_i den , $t + 1$. adımdaki nokta X_j ya geçiş göz önüne alınsın ve bu hareket $\rho(X)$ i azaltıyor tersi yöndeki hareket de artırıyor olsun. Ergodiklik özelliği büyük t için olasılık dağılımının t den bağımsız hale geleceğini garantiler. Kararlı $\rho(X)$ dağılımına ulaşmak için kullanılması gereken geçiş olasılıkları bu mantıkla türetilen aşağıda verilen master denklemin çözümüdür.

$$\rho(X_i, t + 1) - \rho(X_i, t) = - \sum_{X_j} T(X_i \rightarrow X_j) \rho(X_i, t) + \sum_{X_j} T(X_j \rightarrow X_i) \rho(X_j, t) \quad (3.4.1)$$

Kararlı durumda $\rho(X_j, t + 1) = \rho(X_i, t)$ olacaktır yani,

$$\sum_{X_j} T(X_i \rightarrow X_j) \rho(X_i, t) = \sum_{X_j} T(X_j \rightarrow X_i) \rho(X_j, t) \quad (3.4.2)$$

Denklemin genel çözümünü yazmak zor olsa da

$$T(X_i \rightarrow X_j) \rho(X_i) = T(X_j \rightarrow X_i) \rho(X_j) \quad (3.4.3)$$

ifadesinin denklemin bir çözümü olduğu görülebilir. (3.4.3) "detailed balance" koşulu olarak bilinir.

Geçiş olasılığı, adım atma olasılığı ω ile adımın kabul edilme olasılığı A nın çarpımı olarak yazılabilir.

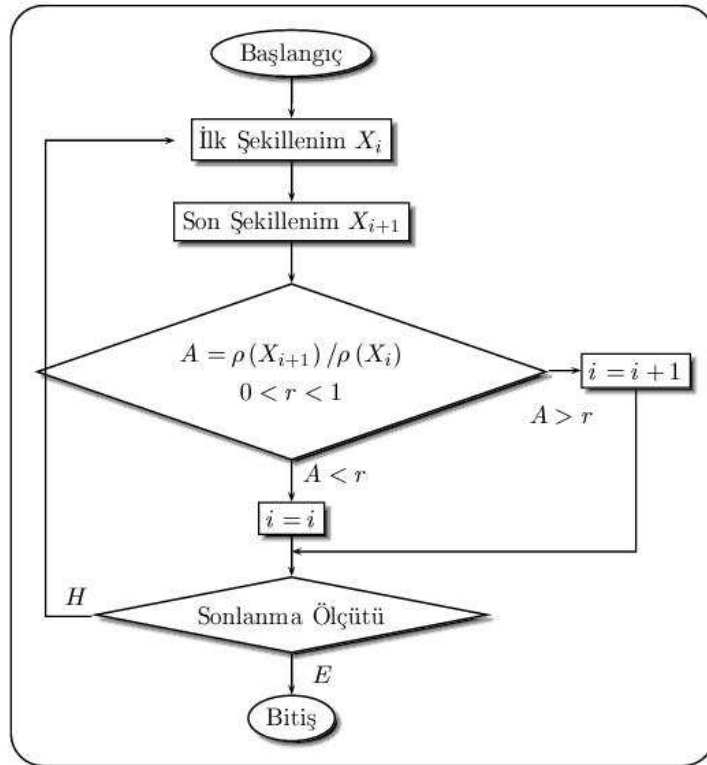
$$T(X_i \rightarrow X_j) = \omega_{ij} A_{ij} \quad (3.4.4)$$

bu durumda her i, j için $\omega_{ij} = \omega_{ji}$, $0 < \omega_{ij} < 1$, $\sum_j \omega_{ij} = 1$ ve $0 < A_{ij} < 1$

koşulları sağlanmalıdır. (3.4.4), (3.4.3) de yazılırsa

$$\frac{A_{ij}}{A_{ji}} = \frac{\rho(X_j)}{\rho(X_i)} \quad (3.4.5)$$

elde edilecektir. İfadenin sağındaki oran 1 den büyük ise $A_{ij} = 1$, değil ise $\rho(X_j)/\rho(X_i)$ olarak seçilir. Yani hareketin kabul edilme olasılığı A_{ij} red edilme olasılığı $1 - A_{ij}$ dir. Bu seçim $0 < r < 1$ olacak şekilde bir rasgele sayı ile geçiş olasılığının kıyaslanması ile yapılabilir. $r < A_{ij}$ olması durumunda hareket kabul edilir, aksi durumda reddedilir. Yöntemde olasılık dağılımı olarak Boltzmann dağılımı kullanılabilir. "Detailed Balance" koşulunu sağlayan tek algoritma Metropolis Algoritması değildir, örneğin Barker Algoritması (Barker, 1965) da bu koşulu sağlar ve Metropolis Algoritması yerine kullanılabilir. Ancak Metropolis Algoritması daha etkindir (Allen ve Tildesley, 1989).

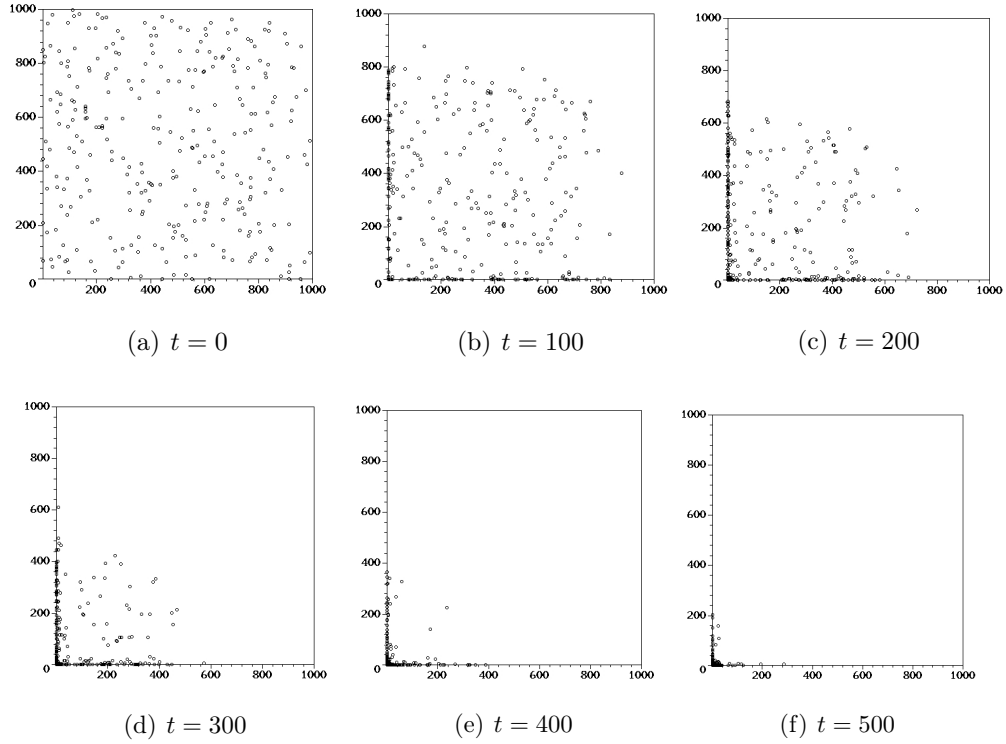


Şekil 3.5 Verilen dağılıma uygun şekillenim elde etmek için kullanılan Metropolis Algoritmasının akış şeması

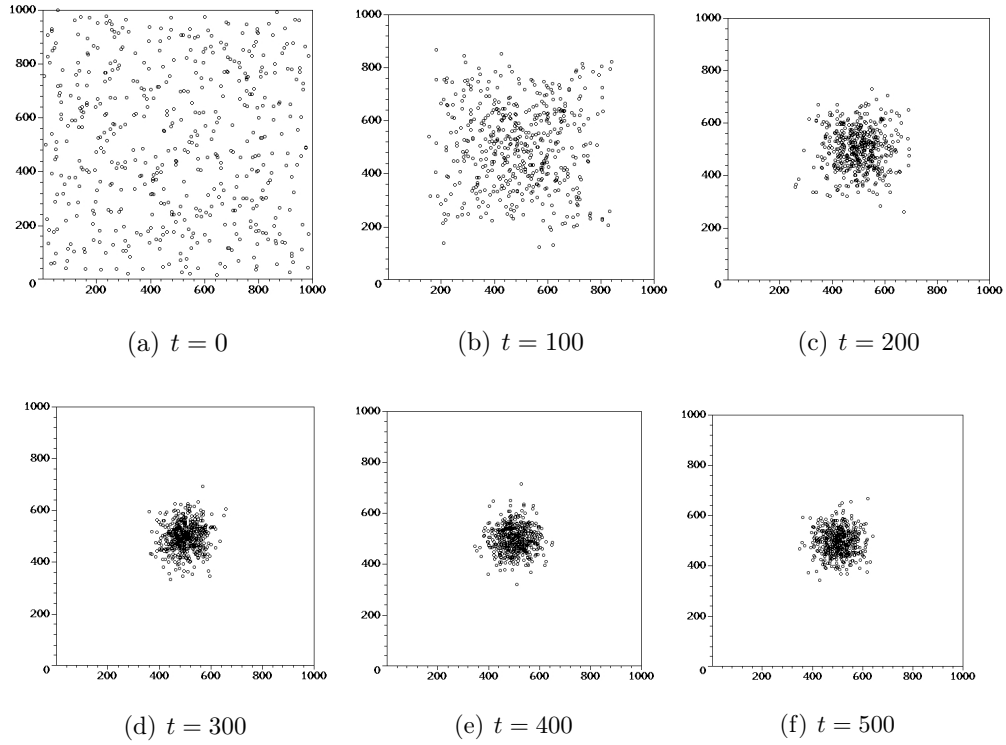
Başlangıçta dağılım fonksiyonu, nokta sayısı, uzayın sınırları gibi parametreler tanımlanmalıdır. Bu koşullar altında rasgele oluşturulan bir

şekillenim ile program başlar. Şekillenim değişiklikleri belirlenen sınırlar dahilinde rasgele oluşturulur, değişimin kabul edilip edilmeyeceğine rasgele üretilen r sayısı ile ardışık iki şekillenim için hesaplanan A niceliğinin kıyaslanmasıyla karar verilir. Sonlanma ölçütü probleme özgü olup, genellikle ardışık iki şekillenim için hesaplanan A nicelikleri farkının belirli bir değerin altına düşmesi şeklinde seçilebilir.

Metropolis Algoritması ile Şekil 3.5 deki gibi bir akış şemasına sahip programla iki boyutlu uzaya rasgele yerleştirilen N tane noktanın oluşturduğu şekillenim kolayca (3.3.9) veya (3.3.11) ile verilen olasılık dağılımına uygun şekillenim haline getirilebilir.



Şekil 3.6 İki boyutlu uzayın $[0, 1000] \times [0, 1000]$ kısmında $N = 500$ nokta ve 500 zaman adımında rasgele dağılımlı şekillenimin, (3.3.9) ile verilen dağılımdaki şekillenime Metropolis Algoritması ile evrilmesi.



Şekil 3.7 İki boyutlu uzayın $[0, 1000] \times [0, 1000]$ kısmında $N = 500$ nokta ve 500 zaman adımında rasgele dağılımlı şekillenimin, (3.3.11) ile verilen dağılımdaki şekillenime Metropolis Algoritması ile evrilmesi. $\mu_x = 500, \mu_y = 500, \sigma = 50$

3.5 Monte Carlo Yöntemi ile İntegrasyon

Kuantum mekaniksel sistemlerin enerji hesaplarında genelde çok boyutlu integraller karşımıza çıkar. Dolayısıyla sistemlerin simülasyonunda en çok zaman harcanan kısımlar bu kısımlardır. Monte Carlo yöntemi ile yüksek boyutlu integraller geleneksel yöntemlere göre çok daha hızlı alınabilmektedir ve Kuantum Monte Carlo yöntemlerinin önemli bir kısmı bu özelliği kullanır.

Monte Carlo Yöntemi ile integrasyon temelde rasgele bazı sayıların üretilmesi ve bu sayılar ile integrasyon sonucunun yaklaşık olarak bulunmasına dayanır. Yöntem ile geleneksel integrasyon yöntemleri arasındaki fark kendini yüksek boyutlu integrallerde gösterir.

Geleneksel yöntemlerin büyük çoğunluğu temelde, integral alınacak bölgede

noktalar seçip, integrantın bu noktalarındaki değerlerini toplamaktan ibarettir⁷. Örneğin 12 elektrona sahip bir sistem (magnezyum) için bazı hesaplamalar yaptığımızı düşünelim. Bu, 3 boyutlu uzayda $12 \times 3 = 36$ boyutlu integral almak demektir. Her integrasyon için 64 nokta kullandığımızı düşünürsek bu integral sonucunu bulmak için bilgisayar $64^{36} \simeq 10^{65}$ tane işlem yapacaktır. Seçilen bir noktada fonksiyonun aldığı değeri bulma işlemini saniyede bir milyon defa yapabilen bir bilgisayar için işlem zamanı 10^{59} saniye olacaktır. Bu ise evrenin yaşından (10^{17} saniye) oldukça büyüktür⁸.

Monte Carlo yönteminin gücü yüksek boyutlu integrasyonlarda ortaya çıkar. N seçilen nokta sayısı ve d integrasyon boyutu olmak üzere, örneğin Simpson yöntemi ile yapılan integral alma işleminde hata $N^{-4/d}$ ile ölçeklidir. İntegrasyon boyutu arttıkça, seçilen nokta sayısı ile hatanın azalış hızı azalmaktadır. Monte Carlo Yöntemiyle alınan integralde ise hata $1/\sqrt{N}$ ile ölçeklidir. İntegrasyon boyutundan bağımsız olan bu değer Monte Carlo yönteminin yüksek boyutlu integrasyonlardaki avantajını ortaya çıkarmaktadır. Hata sadece seçilen nokta sayısı ile ölçeklidir ve nokta sayısının karekökü ile azalır.

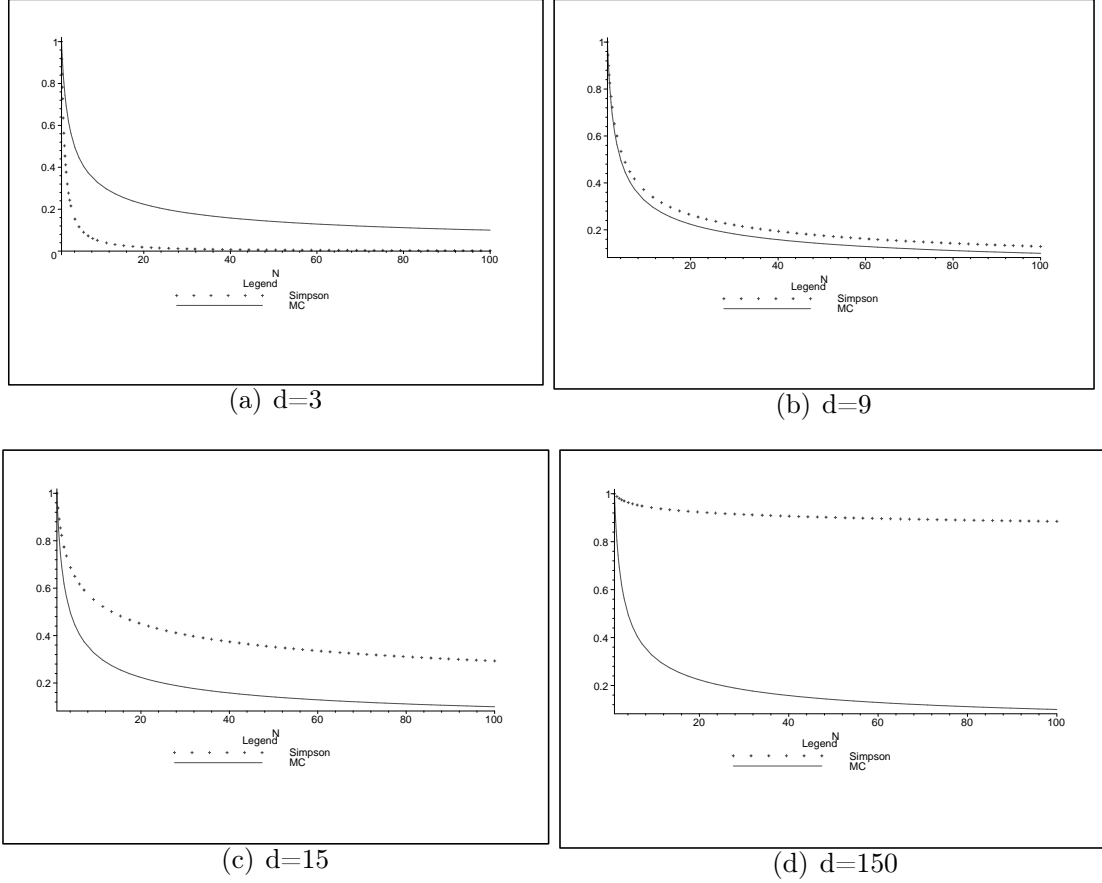
İki yöntemdeki hatanın seçilen nokta sayısı ile değişimi, farklı boyuttaki integrasyonlar için Şekil 3.8 den görülmektedir. Grafiklerde nokta ile verilen grafik Simpson Yöntemi ile alınan integrale, çizgi ile gösterilen grafik ise Monte Carlo Yöntemine aittir.

$$\frac{1}{\sqrt{N}} = N^{-4/d} \Rightarrow d = 8 \quad (3.5.1)$$

olduğundan, 8 den daha büyük boyutlu integraller için Monte Carlo Yönteminin Simpson yöntemine göre çok daha kullanışlı olduğu görülebilir.

⁷integral, toplamın sürekli limitteki halidir, geleneksel yöntemler de integralin kesikli durumdaki hali ile yani toplam ile integrale yaklaşmaya dayanır. Toplam ne kadar çok noktada alınrsa uzay sürekliliğe o kadar yaklaşacak ve dolayısıyla alınan toplam da gerçek integral sonucuna o kadar yaklaşacaktır.

⁸Bu günlerde çok daha hızlı bilgisayarlar geliştirilmiş olmasına rağmen bu sadece hesap zamanını değiştirir, yüksek boyutlu integraller yine de geleneksel yöntemlerle alınmamaktadır



Şekil 3.8 Farklı boyutlardaki integrasyonlarda Simson Yöntemi ve Monte Carlo Yöntemi ile alınan integrallerdeki hatanın, seçilen nokta sayısına göre değişimi.

3.5.1 Geleneksel İntegrasyon Yöntemleri

Verilen bir boyutlu $f(x)$ fonksiyonu için

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad (3.5.2)$$

integralini arıyoruz. Uzayın integral alınan kısmını bölünerek I her zaman

$$I = \sum_{i=1}^{N-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \quad (3.5.3)$$

şeklinde yazılabilir. $f(x)$ Şekil 3.9(a) da verildiği gibi olsun. (3.5.2), fonksiyonun $[a, b]$ aralığında altında kalan alandır. Bu alan şekilde görülen dikdörtgenlerin alanları toplamı olarak yazılabilir. $[a, b]$ aralığı N nokta ile $N+1$ parçaya şekildeki

gibi bölünmüş ise, (3.5.3) yaklaşık olarak

$$I \approx \sum_{i=1}^N f(x_i) \Delta x_i \quad (3.5.4)$$

şeklinde yazılabilir. Buradaki Δx_i , i . aralığın genişliğidir.

Trapezoid yaklaşımı ve Simpson yaklaşımı da aynı temele dayanır. Trapezoid yaklaşımında $f(x)$ in $[x_i, x_{i+1}]$ aralığındaki kısmına birinci derece polinomlar (doğrular) ile, Simpson yaklaşımında ise ikinci dereceden polinomlarla yaklaşılır. Dolayısıyla Şekil 3.9(a) daki dikdörtgenler, trapezoid yaklaşımında trapezoidler olacaktır.

$$I = \int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^{N-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\Delta x_i}{2} [f(x_{i+1}) + f(x_i)] \quad (3.5.5)$$

Simpson yaklaşımında ise,

$$I = \int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^{(N-1)/2} \int_{x_{2i-1}}^{x_{2i+1}} f(x) dx$$

$$= \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\Delta x_i}{3} [f(x_{2i-1}) + 4f(x_{2i}) + f(x_{2i+1})], \quad N, \text{ tek} > 3 \quad (3.5.6)$$

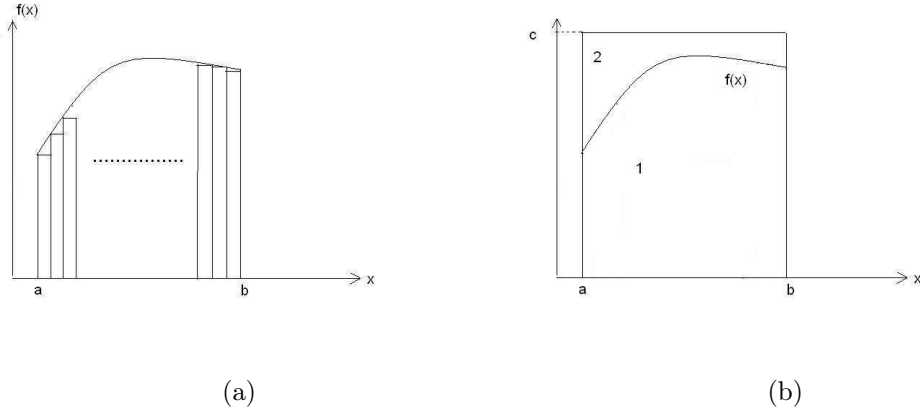
Tüm bu yöntemlerde hata

$$N^{-\alpha/d} \quad (3.5.7)$$

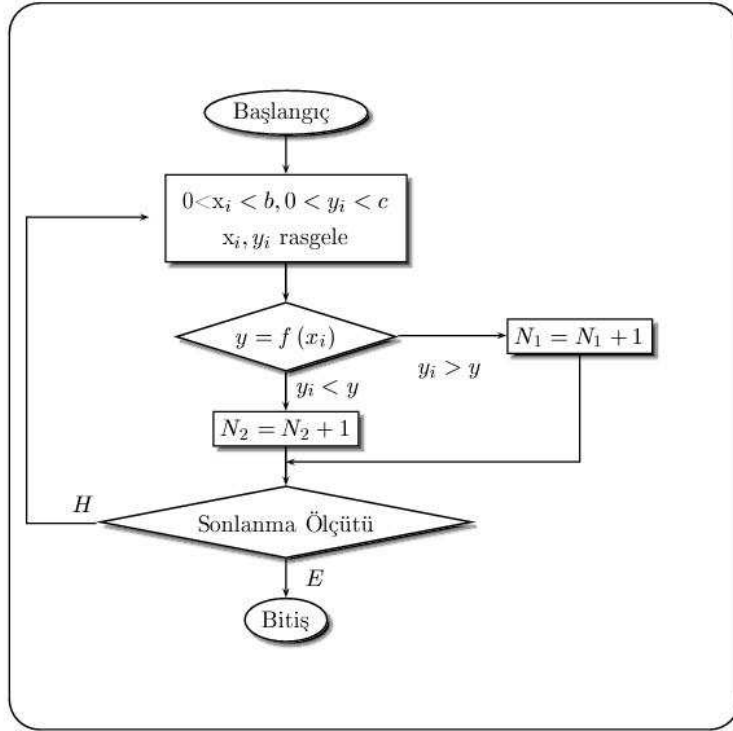
şeklinde ölçeklidir. α , ilk yaklaşım için 1, trapezoid yaklaşımı için 2, Simpson yaklaşımı için 4 dür.

3.5.2 Monte Carlo Yöntemi

(3.5.2), Monte Carlo yönteminin en ilkel hali ile şu şekilde hesaplanır (Şekil 3.9(b)):



Şekil 3.9 integral hesaplanmasında (a) geleneksel bir yöntem (b) Monte Carlo yöntemi.



Şekil 3.10 En ilkel haliyle Monte Carlo yöntemi kullanılarak integrasyon algoritmasının akış şeması

Başlangıçta fonksiyon, integrasyon aralığı, $N = N_1 + N_2$ integrasyon işleminde kullanılacak olan toplam nokta sayısı belirlenmiş olmalıdır. $f(x)$, alanı bilinen bir bölgenin içinde kalacak şekilde $[a, b]$ aralığında Şekil 3.9(b) deki gibi çevrelenir. Bu bilinen alan $c(b - a)$ dır.

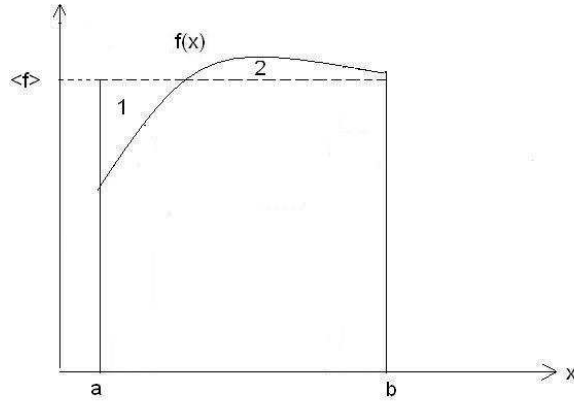
Sayı çiftlerinden N_1 tanesi 1 bölgesinde ve N_2 tanesi 2 bölgesinde ise, 1

bölgesinin alanı yaklaşık olarak

$$I \approx \frac{N_1}{N} c(b-a) \quad (3.5.8)$$

olacaktır.

3.5.3 Ortalama Değer ile İntegrasyon



Şekil 3.11 $f(x)$ fonksiyonu ve ortalaması.

İntegral alınacak aralıkta rasgele seçilen N tane nokta ile f fonksiyonunun bu aralıktaki ortalaması

$$\langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (3.5.9)$$

ile hesaplanabilir. Böylece $f(x)$ ile verilen eğrinin altındaki alanı bulma problemi, $\langle f \rangle$ altındaki alanı bulma problemine indirgenebilir (Şekil 3.11).

$$I \approx (b-a) \langle f \rangle \quad (3.5.10)$$

Seçilen nokta sayısı (N) ne kadar büyükse Şekil 3.11 deki 1 ve 2 bölgelerinin alanları birbirine o kadar yakın olacaktır, bu ise (3.5.10) ve (3.5.2) sonuçlarının birbirine daha da yaklaşması demektir.

Hatanın büyüklüğü için bir kestirim şu bağıntı ile yapılabilir:

$$H \approx (b - a) \sqrt{\frac{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}{N}} \quad (3.5.11)$$

Burada $\langle f^2 \rangle$,

$$\langle f^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [f(x_i)]^2 \quad (3.5.12)$$

ile tanımlıdır.

3.5.4 *Önem Örneklenmesi* (importance sampling)

Yukarıda anlatılmış olan integral hesabında, bazı fonksiyonlarda hesabın büyük kısmı integrale sıfır (ya da sıfıra çok yakın) katkı veren noktalar üzerinden toplam almakla geçer. Bunun yerine integrale ağırlıklı katkıyı büyük katkı veren noktalar üzerinden alıp diğerlerinin katkısını daha az ağırlıkla hesaba dahil etmek zaman kaybını önleyecektir. Bunun için integrantı iyi tanımlayan bir olasılık dağılım fonksiyonundan yararlanır.

Monte Carlo Yönteminin ilkel halinde (3.5.2) integrale (3.5.8) ile yaklaşıyordu veya Monte Carlo Yöntemi ile rasgele sayılar üretilip $\langle f \rangle$ (3.5.9) ile hesaplanıyordu.

Önem örneklenmesinde (3.5.2)

$$I = \int_a^b \frac{f(x)}{g(x)} g(x) dx \quad (3.5.13)$$

biçiminde yazılır. İfadedeki $g(x)$ olasılık dağılım fonksiyonu olarak ele alınabilirse (3.5.13) (3.3.5) ile kıyaslandığında, ifadenin $f(x)/g(x)$ niceliğinin ortalaması olduğu görülecektir. $g(x)$ olasılık dağılım fonksiyonuna göre dağılmış noktalar üzerinden

alınan ortalama integrale iyi bir yaklaşım olacaktır.

$$I \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x_i)}{g(x_i)} \quad (3.5.14)$$

$g(x)$ olasılık dağılım fonksiyonunua göre dağılmış noktalar Şekil 3.5 deki gibi bir akış şemasına sahip program ile oluşturulur. Elde edilen bu noktalar kullanılarak (3.5.14) ile (3.5.2) integraline iyi bir yaklaşım yapılmış olunacaktır.

3.5.5 Çok Boyutlu İntegrasyon

Çok parçacıklı sistemlerde karşımıza çıkan integrasyon işlemleri çok boyutludur.

$$I = \int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} \dots \int_{a_d}^{b_d} f(x_1, x_2, \dots, x_d) dx_1 dx_2 \dots dx_d \quad (3.5.15)$$

(3.5.9) bağıntısını çok boyuta genellenerek (3.5.15) integrali Monte Carlo Yöntemi ile alınabilir. $X_i = (x_1, x_2, \dots, x_d)$, $V = [a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \times \dots [a_d, b_d]$ hacmi içinde kalan bir nokta olmak üzere (3.5.15) deki f fonksiyonunun ortalaması,

$$\langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(X_i) \quad (3.5.16)$$

ile verilir. Bu durumda (bir boyutlu integrasyon için yazılan (3.5.10) a benzer) (3.5.15) integrali yaklaşık olarak

$$I = \int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} \dots \int_{a_d}^{b_d} f(X) dV \approx (b_1 - a_1)(b_2 - a_2) \dots (b_d - a_d) \langle f \rangle \quad (3.5.17)$$

ile hesaplanacaktır. (3.5.11) e benzer olarak da hata,

$$H \approx (b_1 - a_1)(b_2 - a_2) \dots (b_d - a_d) \sqrt{\frac{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}{N}} \quad (3.5.18)$$

ile verilecektir. Burada $\langle f^2 \rangle$,

$$\langle f^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [f(X_i)]^2 \quad (3.5.19)$$

dir.

Çok boyutlu integrasyonda önem örneklenmesi ise, tek boyutlu integrasyondaki gibi çalışır. Tek fark olasılık dağılım fonksiyonunun çok boyutlu olmasıdır. Yine (3.5.15) integrali

$$I = \int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} \dots \int_{a_d}^{b_d} \frac{f(x_1, x_2, \dots, x_d)}{g(x_1, x_2, \dots, x_d)} g(x_1, x_2, \dots, x_d) dx_1 dx_2 \dots dx_d \quad (3.5.20)$$

şeklinde yazılır.

$$I \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(X_i)}{g(X_i)} \quad (3.5.21)$$

Burada $X_i = (x_1, x_2, \dots, x_d)$ bir şekillenimi belirler. $g(X_i)$ olasılık dağılım fonksiyonu da, farklı X_i şekilleniminin oluşma olasılığını verecektir. (3.5.21) deki toplam, olasılıkları $g(X_i)$ ile verilen X_i şekillenimleri üzerindedir.

3.6 Fonksiyon Optimizasyonu

Optimizasyon problemi verilen bir çok minimumlu (maksimumlu) fonksiyonun global minimumunu (global maksimumunu) veren argüman değerini ve bu minimum (maksimum) değeri bulma problemidir. Fonksiyon argümanının olası değerleri arama uzayını oluşturur ve arama uzayının boyutu fonksiyonun argüman sayısı kadardır. Dolayısıyla arama uzayındaki bir nokta fonksiyonun argümanının alabileceği olası bir değeri temsil eder. Monte Carlo Yöntemi ile optimizasyonda, arama uzayında bu noktalar arasında optimum argüman değerini temsil eden noktaya doğru bir hareket gerçekleştirilir.

Bununla birlikte d deęişkenli $f(\vec{x})$ fonksiyonunun sayısal yöntemlerle global minimumunu bulmak, arama uzayı yüksek boyutlu olduęu için oldukça zor bir problemdir.

d boyutlu uzayda fonksiyon minimumunu bulan algoritma , rasgele bir noktadan harekete başlayan ve rasgele yerdeęiştiren bir noktanın arama uzayındaki hareketi ile çalışır. Adımların kabulünün sadece varılan noktadaki fonksiyon deęerinin daha küçük olması ile gerçekleşmesi en kaba yaklaşımdır.

Ancak bu ve benzeri yöntemlerin hepsi birden çok minimumlu fonksiyonlarda çalışmaz. Algoritma bulduęu ilk minimumda takılacak (yerel minimum), büyük ihtimalle global minimumu bulamadan sonlanacaktır. Bununla birlikte hiçbir arama algoritmasının doęru sonucu vereceęinin garanti olmadığı unutulmamalıdır.

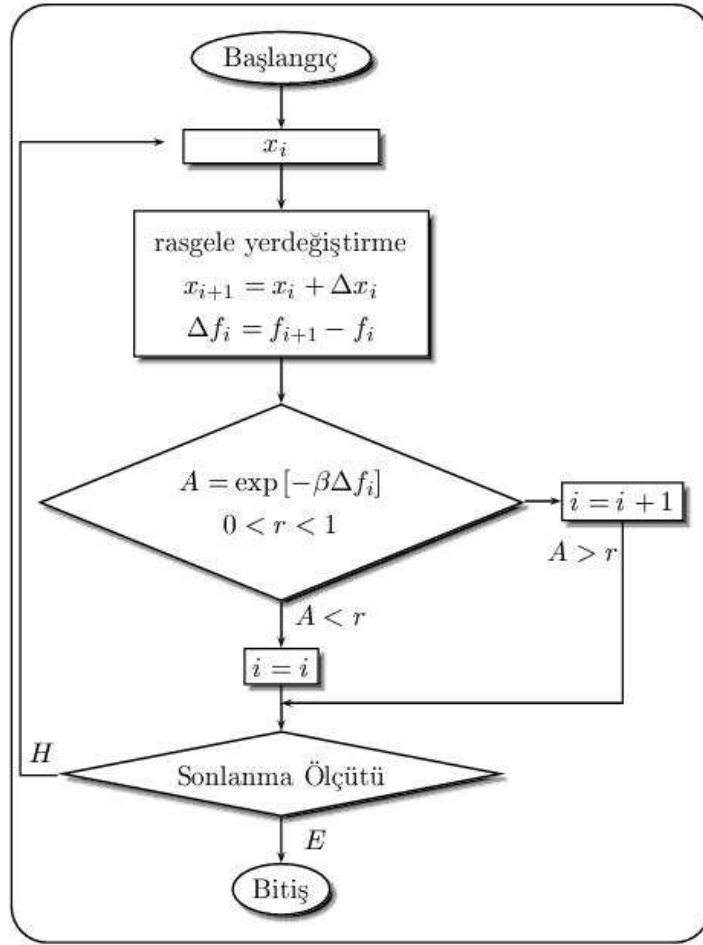
3.6.1 *Metropolis Algoritması*

Metropolis Algoritması, d boyutlu uzaydaki bir noktayı argüman kabul eden fonksiyon minimumu bulma problemi için kullanılabilir. Bir önceki algoritmaya göre üstünlüğü, yerel minimumlarda takılmayıp dięer minimumlara doęru aramaya devam edebilmesidir.

Minimum arama sırasında, fonksiyonun argümanı olan \vec{x} , d boyutlu uzayda hareket ettirilir, $\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_i, \vec{x}_{i+1}, \dots, \vec{x}_s$ noktaları boyunca olan hareket sonunda \vec{x}_s aranan minimum deęerini veren nokta olması beklenir.

Başlangıçta, minimumu bulunacak olan fonksiyon, arama uzayının sınırları, β gibi parametreler belirlenmiş olmalıdır.

Durdurma kriteri olarak, ardarda oluşan belirli bir sayıdaki adımın bir hareket yaratıp yaratmadığı alınabilir. Hareketin durduęu önceden belirlenmiş olan s zaman adımında (yeterince büyük seçilmişse) fonksiyonun bir minimumu



Şekil 3.12 Minimum arama problemi için Metropolis Algoritmasının akış şeması

bulunmuş olacaktır.

Bu tür bir algoritmanın üstünlüğü, $f(\vec{x}_{i+1}) > f(\vec{x}_i)$ olması durumunda da harekete belli bir ölçüde izin vermesi ve böylece olası bir yerel minimumda takılmayı önlemesidir. Ancak böyle bir algorithmada kritik olan şey β parametresinin seçimidir. β seçiminde iki uç durum,

- β çok küçük seçilirse adımların kabul edilme olasılığı yüksek olacağından hareket, arama uzayının geniş bir kısmında gerçekleşir ancak çözüm hassas bir şekilde elde edilemez.
- β çok büyük seçilirse adımların kabul edilme olasılığı düşük olacağından hareket, arama uzayının dar bir kısmında gerçekleşir, çözümün hassas bir

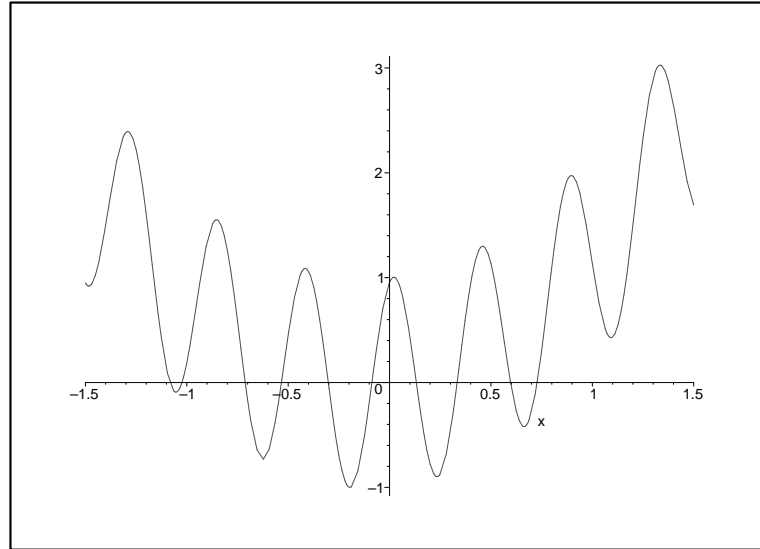
şekilde elde edilmesinin tek yolu hareketin başlangıç noktasının gerçek çözüme yakın bir nokta olmasıdır.

Buradaki β parametresi Boltzmann dağılımındaki ters sıcaklık $\beta = 1/(kT)$ olarak düşünülebilir.

Örneğin

$$f(x) = \cos(14,5x - 0,3) + x^2 + 0,2x \quad (3.6.1)$$

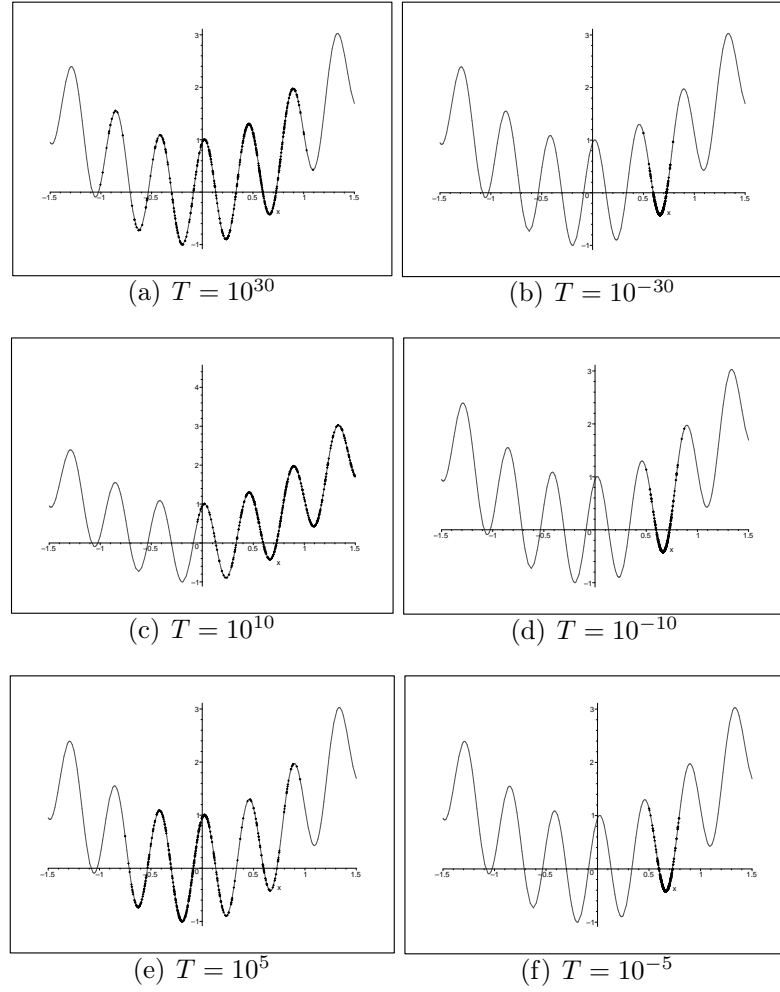
şeklindeki fonksiyona Metropolis Algoritmasını uygulayarak fonksiyonun minimumunu arayalım. Fonksiyon Şekil 3.13 de görüldüğü gibi birden fazla minimuma sahiptir:



Şekil 3.13 $f(x)$ fonksiyonu.

Minimum arama başlangıç noktası $x = 0,5$ olmak üzere farklı T değerleri için Metropolis Algoritmasının verdiği hareket ve bu hareketler sırasındaki en küçük fonksiyon değeri ($f(x')$) ile bu değeri veren x değerleri (x') aşağıdaki şekillerden ve tablodan görülebilir. Şekillerdeki siyah noktalar hareket sırasında ziyaret edilen noktaları göstermektedir.

Şekil 3.14 den görüldüğü gibi büyük sıcaklık değerleri için hareket uzayın geniş bir bölgesinde yer alırken, küçük T değerleri için hareket uzayın dar bir bölgesinde



Şekil 3.14 Farklı T değerleri için Metropolis Algoritmasının verdiği 500 adımlık hareketler. Hareket sırasında ziyaret edilen noktalar küçük siyah noktalarla verilmiştir.

oluşmaktadır.

Şekil 3.14 (b) (d) (f) den görüldüğü gibi küçük T değerleri için hareket $x = 0,5$ başlangıç noktasında başlamış ve bu noktanın hemen yakınındaki minimumda devam ederek burada bitmiştir. Bu yerel minimumda yer alan 500 adımlık hareket ile minimum iyi bir şekilde belirlenmiş ancak hareket yerel minimumun dışına çıkarak bulunmak istenen global minimuma ulaşamamıştır.

Şekil 3.14 (a) (c) (e) de ise büyük T değerleri için hareket $x = 0,5$ başlangıç noktasında başlamış ve birçok yerel minimumdan geçmiştir. 500 adımlık hareket uzayın geniş bir bölgesinde olduğundan bu yerel minimumlardan en düşüğü

Tablo 3.1 Farklı T değerleri için Metropolis Algoritmasının $f(x)$ için verdiği fonksiyon minimumları.

T	x'	$f(x')$
10^{30}	-0,1948420000	-1,000870786
10^{10}	0,2417261000	-0,8912118971
10^5	-0,1940888000	-1,000774538
10^{-5}	0,6627267000	-0,4216151044
10^{-10}	0,6634904000	-0,4216619145
10^{-30}	0,6637583000	-0,4216491707

hassas bir şekilde belirlenememiştir. Hareketler rastlantısal olduğundan (a) ve (e) de hareket fonksiyonun global minimumunu ziyaret etmiş (c) de ise etmemiştir. Hareket global minimuma ulaşsa dahi, tüm hareket uzayın geniş bir bölgesinde olduğundan global minimumu hassas bir şekilde belirleyememiştir.

Fonksiyon minimumu bulma probleminde kullanılan Metropolis Algoritmasında bir kaç kritik nokta vardır.

- T değerinin seçimi.
- Rasgele oluşturulan hareketlerdeki adım büyüklüğünün seçimi.

Tüm bu değişkenler hakkında birkaç deneme sonunda sağlıklı bir seçim yapılabilir. Sağlıklı bir seçim yapılamaması durumunda program çalışma zamanının uzunca bir kısmını uzayın aranan çözümden çok uzaktaki bir bölgesinde geçirecektir.

3.6.2 *Simulated Annealing*

Metropolis Algoritmasında, program boyunca T parametresinin sabit kalmasının sakıncalarından bir boyutlu probleme uygulama kısmında bahsedilmişti. T nin küçük seçilmesi, hareketin yerel bir minimumdan kurtulamamasını, büyük seçilmesi ise hareket global minimumdan geçse dahi global minimumu veren noktayı hassas bir biçimde bulamamasını getiriyordu.

Simulated Annealing⁹ ile bu sorunlar giderilir. Program, uzayda belli bir \vec{x} başlangıç vektöründen ikinci kısımda anlatıldığı gibi yüksek bir T parametresi için hareket başlatır. Hareket sırasında ziyaret edilen noktalardan en küçük $f(\vec{x})$ değerini veren nokta bir sonraki hareketin başlangıç noktası olur. Bir sonraki harekette T değeri belli bir miktar azaltılır. T nin belli bir değerine varıldığında program sonlanır.

Başlangıçta, minimumu bulunacak olan fonksiyon, arama uzayının sınırları, hareketin başlangıç noktası, hareketteki adım uzunluğu, başlangıç β değeri ile $\Delta\beta_i$ değişim parametresi belirlenmiş olmalıdır.

Bu algoritmanın Metropolis Algoritmasına göre üstünlüğü şuradadır: T nin çok büyük değeri için başlayan hareket uzaydaki bir çok noktayı gezer. Bir sonraki harekette T belli bir miktar azaltıldığında hareket yine uzayın büyük -ama bir önceki harekete göre daha küçük- bir bölümünde ve bir önceki harekette bulunan minimum noktasından başlayarak gerçekleşir. Eğer bu başlangıç noktası global minimum değilse program hareketi sırasında bir önceki harekette biraz düşük olan T sayesinde bir çok yerel minimumu aşacak ve global minimumu bulacaktır. Belli bir T den daha düşük değerdeki T ler için ise hareket artık uzayın küçük bir kısmında ve hep global minimum civarında olacak böylece program sonlandığında global minimumu veren \vec{x} iyi bir hassasiyet ile belirlenmiş olacaktır.

(3.6.1) ile verilen fonksiyona Simulated Annealing Algoritmasını uygulayarak fonksiyonun minimumunu arayalım.

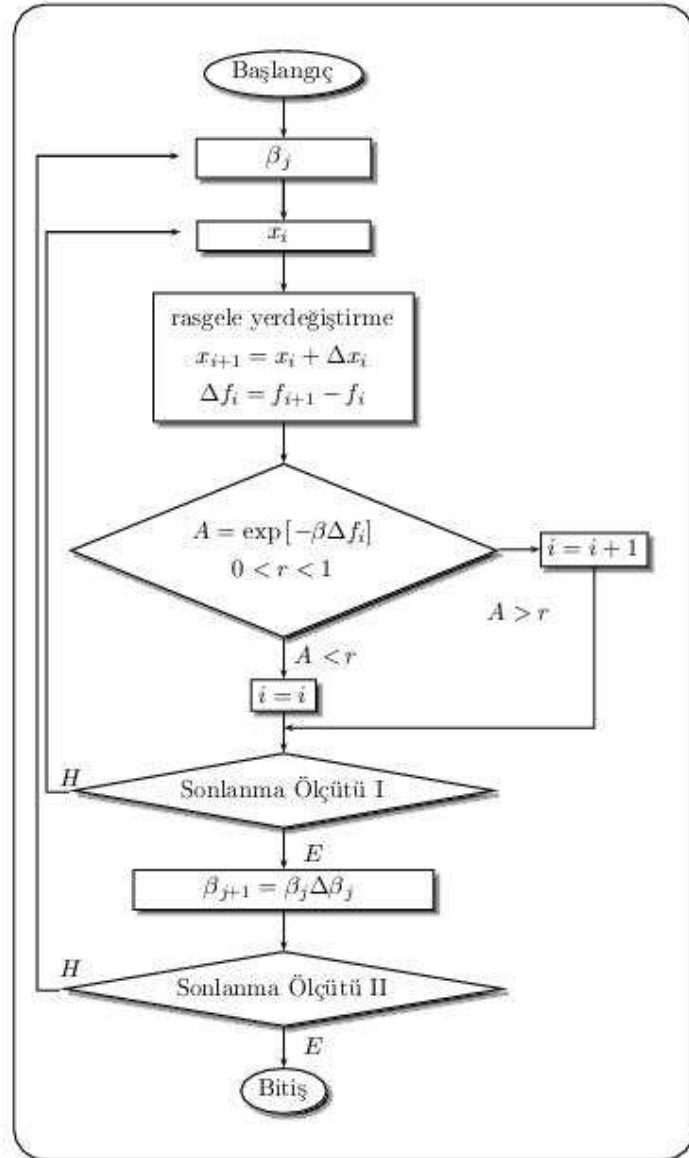
Program boyunca hareketlerin verdiği minimum değerler aşağıdaki tabloda görülebilir.

Tablo 3.2 ve Şekil 3.16 dan görüldüğü gibi algoritma T parametresinin değeri

⁹Fiziksel sistemin hızlı soğutulması sonucu sistem her zaman en düşük enerjili duruma gelmeyebilir. Örneğin su hızlı bir biçimde soğutulursa uzayda mükemmel bir düzene sahip kristallerden oluşan duruma erişemeyebilir. Fakat soğutma işlemi yavaş yavaş yapılırsa sistem en düşük enerjili taban durumuna erişecektir. Annealing anlamı budur, simulated annealing yöntemi ise bu mantıkla çalışır

Tablo 3.2 Simulated Annealing algoritması ile çalışan program boyunca farklı T değerleri için bulunan minimum değerler ve bu değerleri veren noktalar.

T	x'	$f(x')$
10^9	0,2258727	-0,8899880407
10^8	0,2258727	-0,8899880407
10^7	0,2341941	-0,8972666645
10^6	-0,1980648	-0,9999228618
10^5	-0,1931554	-1,000488261
10^4	-0,1945245	-1,000844891
10^3	-0,1945245	-1,000844891
10^2	-0,1945245	-1,000844891
10^1	-0,1945245	-1,000844891
10^0	-0,1946674	-1,000859193
10^{-1}	-0,1946674	-1,000859193
10^{-2}	-0,194686	-1,000860736
10^{-3}	-0,1949158	-1,000873741
10^{-4}	-0,1949365	-1,000874362
10^{-5}	-0,1949365	-1,000874362
10^{-6}	-0,1949365	-1,000874362
10^{-7}	-0,1949365	-1,000874362
10^{-8}	-0,1949365	-1,000874362
10^{-9}	-0,1950726	-1,000876182
10^{-10}	-0,1950726	-1,000876182

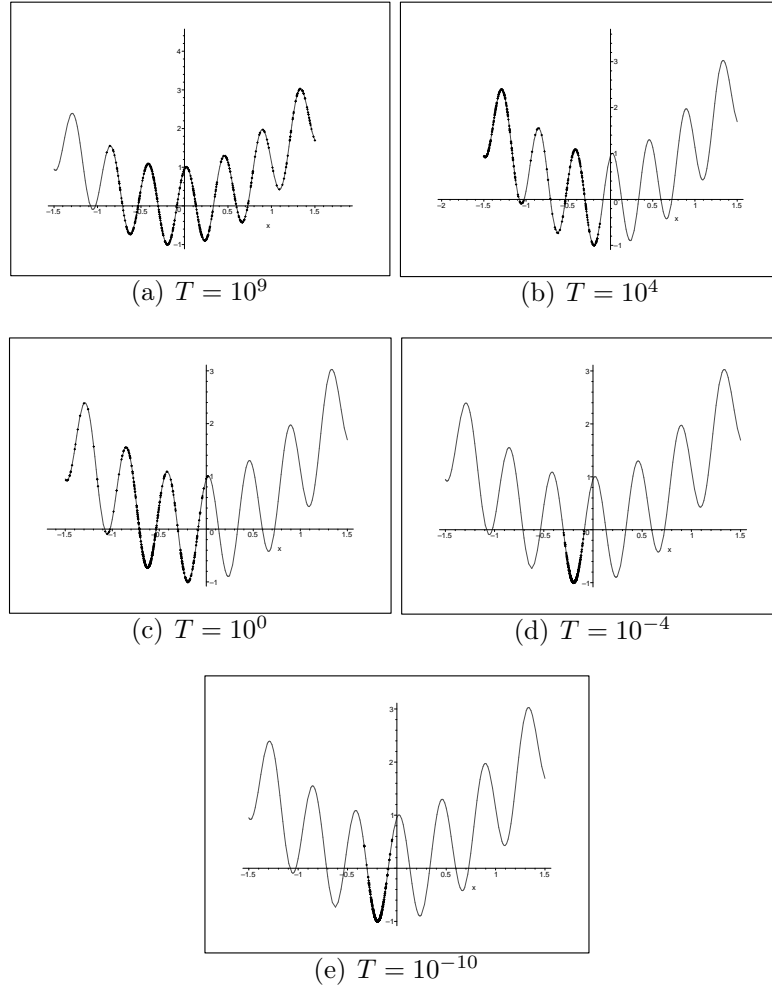


Şekil 3.15 Minimum arama problemi için Simulated Annealing Algoritmasının akış şeması

azaldıkça fonksiyonun global minimumunu veren x değerine doğru yaklaşmaktadır. Fonksiyonun gerçek global minimumu $x = -0,1950675525$ dadır. Program ile bulunan değer gerçek değerden sapması 10^{-5} mertebesindedir.

Simulated Annealing Algoritmasındaki bir kaç kritik nokta şunlardır:

- T başlangıç değerinin ve azalma hızının seçimi
- Hareket sırasındaki rasgele adım büyüklük aralığının seçimi



Şekil 3.16 Simulated Annealing algoritması ile çalışan program boyunca farklı T değerleri için 500 adımlık hareketler. Hareket sırasında ziyaret edilen noktalar küçük siyah noktalarla verilmiştir.

Monte Carlo algoritmasındaki benzer olarak bu değerlerin seçimi için de bazı testlerin yapılması gerekir.

3.7 Varyasyonel Monte Carlo Algoritması

Kuantum mekaniksel problemlerin arama algoritmaları ile çözümü, dalga fonksiyonun parametrik yazılarak enerjiyi minimum yapan parametre değerlerini ve bu değerlerdeki enerji değerini bulmaktan ibarettir. Parametrik formdaki dalga fonksiyonu sistemin sınır koşullarını ve "cusp" koşullarını sağlamalıdır. Dalga

fonksiyonun sahip olduğu parametre sayısı çözümü hassaslaştıracak ancak arama uzayının boyutu büyüdüğünden bu çözümün bulunması zorlaşacaktır.

Problemin Monte Carlo yöntemi ile çözümünde, H sistemin Hamiltoniyeni olmak üzere $\exp(-\beta H)$ olasılık dağılım fonksiyonu kullanılır, Metropolis Algoritması ile arama uzayında oluşturulan hareket ile minimum enerjiyi veren parametreler aranırken, genellikle çok boyutlu olan enerji integralleri de Monte Carlo yöntemi ile alınır. Bu yöntem Varyasyonel Monte Carlo yöntemi olarak bilinir.

Çok parçacıklı sistemlerin kuantum mekaniği ile çözümünde karşımıza sıkça çıkan beklenen değer integralleri

$$\langle A \rangle = \frac{\int d\vec{R} \Psi_0^* (\vec{R}) \hat{A} \Psi_0 (\vec{R})}{\int d\vec{R} \Psi_0^* (\vec{R}) \Psi_0 (\vec{R})} \quad (3.7.1)$$

formundadır. Burada \vec{R} , N parçacıklı bir sistemin belli bir şekillenimindeki tüm parçacıkların yervektörlerini temsil etmektedir, $\vec{R} \rightarrow \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N$. İyi bir yaklaşımla (tight binding, düzlem dalga yöntemi vb.) elde edilen yaklaşık dalga fonksiyonu $\Psi_y (\vec{R})$ kullanılarak yaklaşık beklenen değer $\langle A \rangle_y$ elde edilebilir.

$$\langle A \rangle_y = \frac{\int d\vec{R} \Psi_y^* (\vec{R}) \hat{A} \Psi_y (\vec{R})}{\int d\vec{R} \Psi_y^* (\vec{R}) \Psi_y (\vec{R})} \quad (3.7.2)$$

Formu bilinen Ψ_y ile (3.7.2) nin paydası hesaplanabilir, payı da küçük bir değişikliklerle,

$$\int d\vec{R} \Psi_y^* (\vec{R}) \Psi_y (\vec{R}) \Psi_y^{-1} (\vec{R}) \hat{A} \Psi_y (\vec{R}) = \int d\vec{R} |\Psi_y (\vec{R})|^2 \Psi_y^{-1} (\vec{R}) \hat{A} \Psi_y (\vec{R}) \quad (3.7.3)$$

olarak yazılabilir. Böylece (3.7.3) integrali de

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N \left| \Psi_y(\vec{R}_i) \right|^2 \frac{\hat{A} \Psi_y(\vec{R}_i)}{\Psi_y(\vec{R}_i)} \quad (3.7.4)$$

olarak yazılabilecektir.

Bu toplam, dalga fonksiyonu karesi ile verilen bir dağılıma göre ortalama almaktan başka bir şey değildir, dolayısıyla

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\hat{A} \Psi_y(\vec{R}_i)}{\Psi_y(\vec{R}_i)} \quad (3.7.5)$$

şeklinde yazılabilir. Toplamdaki noktalar Metropolis Algoritması ile seçilecek olan $\left| \Psi_y(\vec{R}_i) \right|^2$ olasılık dağılımının verdiği noktalardır. Hamiltoniyeni belli olan çok parçacıklı sistem için, algoritma iki aşamadan oluşur.

1. Sistemdeki parçacık dağılımının istenilen dağılım fonksiyonuna uygun hale getirilmesi
 - (a) Sistemdeki her parçacık uzayda rasgele konumlara yerleştirilir.
 - (b) Sistemdeki i . parçacığın yeri belli bir miktarda değiştirilir. Oluşan yeni şekillenim \vec{R}_j' , eski şekillenim \vec{R}_j olsun.

$$A = \frac{\left| \Psi_y(\vec{R}_j') \right|^2}{\left| \Psi_y(\vec{R}_j) \right|^2} \quad (3.7.6)$$

hesaplanır ve $0 < r < 1$ olmak üzere rasgele bir sayı üretilir.

- $A > r$ ise yeni i . parçacığın yerdeğiştirmesi kabul edilir, sistemin yeni şekillenimi \vec{R}_j' olur.
 - $A < r$ ise yeni i . parçacığın yerdeğiştirmesi reddedilir, sistemin yeni şekillenimi \vec{R}_j dir.
- (c) (b) işlemi sistemdeki diğer parçacıklar için de yapılır. Her parçacık için bu işlem bir çok defa yapıldığında elektron dağılımı (3.7.4) deki

$|\Psi(\vec{R}_i)|^2$ olasılık dağılım fonksiyonuna uygun hale gelecektir.

2. Sistemdeki dağılım, istenilen dağılım fonksiyonuna uygun hale geldikten sonra (3.7.5) toplamının alınması

(a) Elde edilen şekillenimden başlayarak ilk kısımdaki (b) işlemi yapılır, hareketin kabul edilip edilmediğine göre şekillenim değiştirilir ya da değiştirilmez. Elde edilen şekillenim için (3.7.4) deki

$$\frac{\hat{A}\Psi_y(\vec{R}_i)}{\Psi_y(\vec{R}_i)} \quad (3.7.7)$$

terimi hesaplanır.

(b) (a) işlemi sistemdeki diğer parçacıklar için de yapılarak, her farklı şekillenim için hesaplanan (3.7.7) niceliği kaydedilir.

(c) N tane farklı şekillenim için elde edilip kaydedilmiş olan (3.7.7) nicelikleri (3.7.5) de yazılıp sonuç bulunur.

3.7.1 Dalga Fonksiyonu Seçimi

Dalga fonksiyonu seçimindeki iki önemli nokta hassasiyet ve hesaplanabilirliktir. Parametrik formda yazılan deneme dalga fonksiyonu problemin sınır koşullarını sağlayan, sayısal türevlenebilen ve çözümü hassas bir şekilde verebilen türden olmalıdır.

Bir kaç parçacıktan ya da bir kaç atomdan oluşan katı sistemlerin Varyasyonel Monte Carlo yöntemiyle simülasyonlarında genellikle Slater determinantları ya da Jastrow (Jastrow, 1955) faktörüyle çarpılmış Slater determinantları kullanılır.

$$\Psi(\vec{r}) = \exp(J(\vec{r}))D(\vec{r}) \quad (3.7.8)$$

Tablo 3.3 He atomu için Varyasyonel Monte Carlo algoritmasının değişik deneme dalga fonksiyonları için ürettiği taban durumu enerjileri.

Deneme Dalga Fonksiyonu	E (Hartree)
Slater	-2,8617
Slater-Jastrow (tek terim)	-2,9018
Slater-Jastrow (iki terim)	-2,9026

Burada D Slater determinanı, J Jastrow faktörüdür. Jastrow faktörü

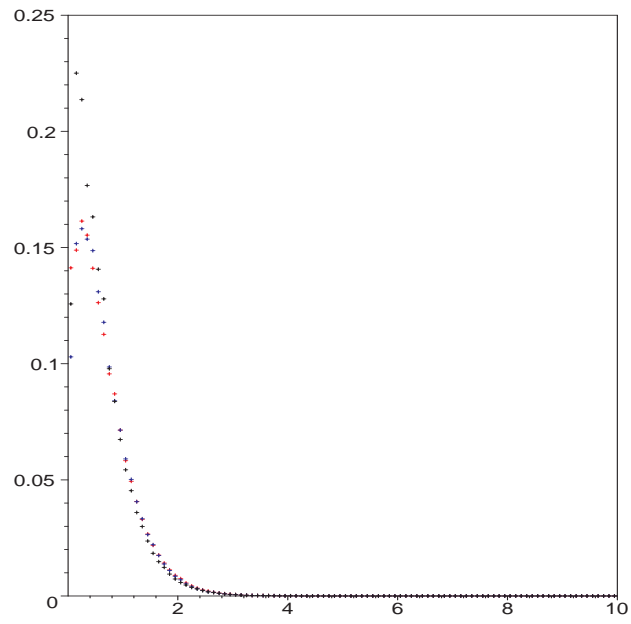
$$J(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \chi(\vec{r}_i) - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N u(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \quad (3.7.9)$$

ile verilebilir. Çok parçacıklı sistemler için Jastrow faktöründe üç ve daha fazla parçacık terimlerinin alınması sonucu daha da iyileştirecektir. Deneme dalga fonksiyonu seçimleri (Harju, Sverdlov ve Nieminen, 1998; Harju, Sverdlov, Barbiellini ve Nieminen, 1998; Harju, Sverdlov, Nieminen ve Halonen, 1999; Cancio ve Chang, 1995) de bulunabilir.

Hartree-Fock yaklaşımı ile hassas bir şekilde elde edilebilen Slater determinantları kullanılarak, Jastrow faktörünün parametrik formda yazılmasıyla sistemin Varyasyonel Monte Carlo simülasyonu yapılabilir.

Dalga fonksiyonu seçiminde kullanılan Jastrow faktöründeki terimlerin yarattığı fark basit bir örnek üzerinde görülebilir. He atomu için uygulanan Varyasyonel Monte Carlo yöntemi sonuçları Tablo 3.3 dedir. Programda, dalga fonksiyonu 10.000 şekillenim üzerinden örneklenmiştir. Deneme dalga fonksiyonlarındaki Jastrow faktörleri (Harju, Sverdlov ve Nieminen, 1998) den alınmıştır.

Sonuçlardan görüldüğü gibi He atomu çözümüm için, Jastrow faktörünün deneme dalga fonksiyonuna eklenmesi sonuçları gözle görülür biçimde iyileştirmekte ancak Jastrow faktöründe kullanılan terim sayısı sonuçlarda önemli bir değişiklik yaratmamaktadır.



Şekil 3.17 He atomu, değişik deneme dalga fonksiyonları için çift korelasyon fonksiyonları. Yatay eksen atomik birim cinsinden uzaklıktır ve siyah Slater, kırmızı tek terimli Slater-Jastrow mavi ise çift terimli Slater-Jastrow deneme dalga fonksiyon çözümlerini göstermektedir.

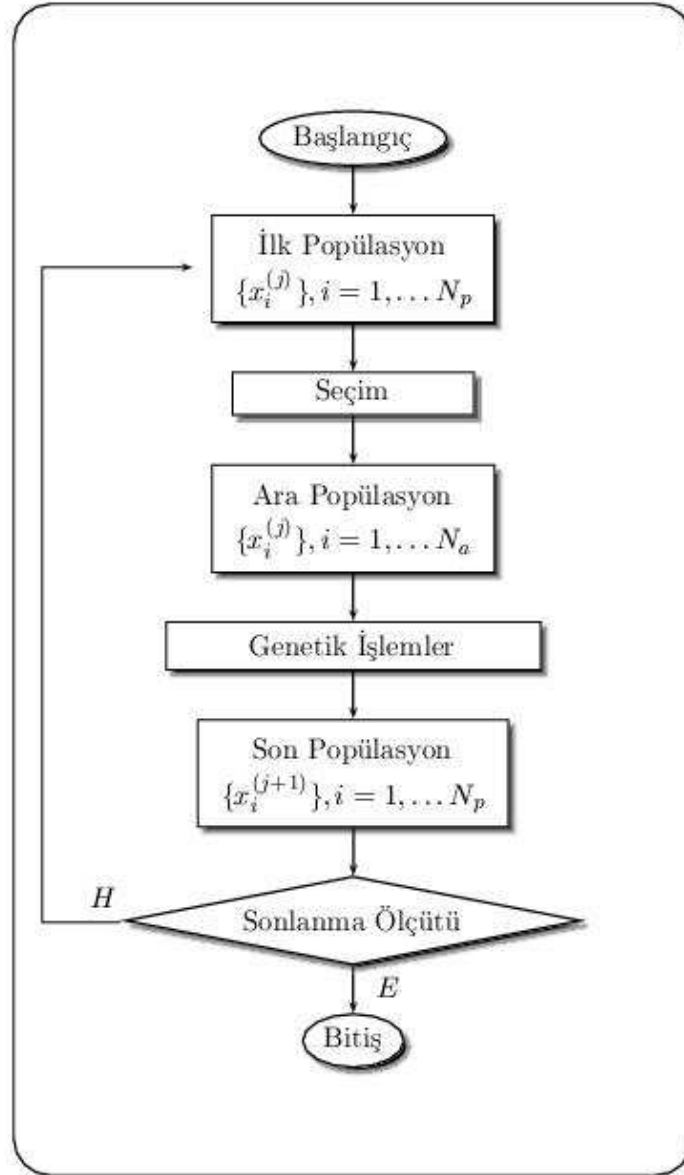
BÖLÜM DÖRT

GENETİK ALGORİTMALAR

Genetik Algoritma 1975 de (Holland, 1975) ortaya atılmış ve 90'ların ortasından itibaren çeşitli problemlerde ve disiplinlerde yaygın olarak kullanılmaya başlanmıştır. Temelde doğadaki evrim ile birebir benzerdir, temelini canlıların evrim mekanizmasından almıştır. Optimizasyon problemlerinde oldukça başarılıdır.

Optimizasyon problemleri de fizikte yaygın bir problem sınıfını teşkil ettiğinden genetik algoritmalar fizikte yaygın bir kullanım alanına sahip olmalıdır. Genetik algoritmaların kullanımı son zamanlarda fiziğin çeşitli dallarında yaygınlaşmaktadır. Örneğin istatistik fizikteki Ising ve benzeri modellerde (Prtigel-Bennett ve Shapiro, 1997; Hartmann, 1999; Blum, Hart, Walorski ve Zunger, 2005), atom, izotop molekül gibi yapıların belirlenmesinde (Winkler ve Hofmann, 1997; Deaven ve Ho, 1995; Wurzer ve Hofmann, 1997), az sayıda atomdan oluşmuş kümelerin geometri optimizasyonunda (Zeiri, 1995; Garzón, Michaelian, Beltrán, Posada-Amarillas, Ordejón, Artacho, Sánchez-Portal ve Soler, 1998; Bazterra, Oña, Caputo, Ferraro, Fuentealba ve Facelli, 2004; Oña, Bazterra, Caputo, Facelli, Fuentealba ve Ferraro, 2006; Joswig ve Springborg, 2003; Tang, Wang, Lu ve Ho, 2006; Michaelian, 1998), "tight binding" gibi yöntemlerle birlikte band yapısı vb. özelliklerin belirlenmesinde (Starrost, Bornholdt, Solterbeck ve Schattke, 1996; Dong, Ming Wang ve Blaisten-Barojas, 2004; Chuang, Wang ve Ho, 2006) genetik algoritmalar ilk halleriyle kullanılmıştır.

Algoritma, çözümü aranan problemin olası çözümlerini içeren elemanlardan oluşmuş popülasyonun doğadaki evrim benzeri bir mekanizma ile evrilmesiyle işler. Başlangıçta problemin sınır koşullarını sağlayan rasgele oluşturulmuş elemanlardan oluşan popülasyon, evrim sonucu sadece problemin aranan çözümlerini içeren elemanlara sahip popülasyon haline gelir.



Şekil 4.1 Genetik Algoritma akış şeması

4.1 Temel Kavramlar

Genetik algorithmada arama uzayının elemanları (olası çözümler) ikilik (binary) ya da başka bir sistemde (Gray vb.) yazılmış kromozom benzeri dizilerle temsil edilir. Problem çözümlerinin temsili problem bağımlıdır. Bu olası çözümlerin oluşturduğu topluluk popülasyondur. Algoritma ile popülasyon evrim geçirir ve ve her evrim basamağında popülasyon elemanları olan çözümler aranan çözüme biraz daha yaklaşır.

Algoritmada iki şey belirlenmiş olmalıdır

1. Problem çözümlerinin kodlanış biçimi
2. Problem çözümlerinin aranan çözüme yakınlığının ölçüsü olan uygunluk fonksiyonu (fitness function)

Algoritmadaki işlemler, kodlama ve uygunluk fonksiyonu seçimi problem bağımlıdır, problemin yapısına göre seçilmelidir.

4.1.1 Kodlama

Çözümü sayılar olan problemlerin olası çözümleri gen benzeri yapılar (örneğin ikilik tabandaki sayı dizileri) şeklinde kodlanır. Başlangıçta olası çözümlerden oluşan başlangıç popülasyonu rasgele oluşturulur. Popülasyon elemanları problemin kodlanmış olası çözümlerdir.

İkilik sistemdeki kodlama kullanılan kodlama yöntemlerinden biridir. Onluk sistem günlük hayatta genelde kullanılan sistemdir

$$abcd = a10^3 + b10^2 + c10^1 + d10^0 \quad (4.1.1)$$

Burada a, b, c, d , $[0, 9]$ aralığındaki tamsayılar yani rakamlardır. Benzer olarak ikilik sistemde yazılmış bir dizinin onluk sistemdeki değeri

$$xyzt = x2^3 + y2^2 + z2^1 + t2^0 \quad (4.1.2)$$

dir ve burada x, y, z, t , $[0, 1]$ aralığında rakamlardır.

Genelde kullanılan onluk sistemdeki sayılar ikilik sisteme çevrilerek elde edilen

diziler genetik algoritma ile çözümde kullanılır. Örneğin,

$$13 = 1 * 2^3 + 1 * 2^2 + 0 * 2^1 + 1 * 2^0, \quad 13 \equiv 1101. \quad (4.1.3)$$

Bunun dışında probleme özgü kodlama biçimleri de mevcuttur. Örneğin örgü noktaları tamsayılarla indislenmiş bir örgü üzerinde hareket ile çözülen problem için kodlama olası bir yörüngeyi temsil eden tamsayılar dizisi şeklinde olacaktır. Çözümü reel sayılarla verilen problemlerde ise doğrudan reel sayılar kullanılabilir. Ancak aşağıda anlatılacak olan işlemlerin değişik kodlamalara göre yeniden tanımlanması gerekebilir. Bununla birlikte Şema Teoremi (Goldberg, 2005) gereği ikili kodlama en uygun kodlama olacaktır. Reel sayıların ikilik sistemde kodlanması onları tamsayılarla temsil etmekle mümkün olur. İstenilen hassasiyet 10^{-m} ise (virgülden sonra m basamak) reel sayı 10^m ile çarpılır ve elde edilen sayının tamsayı kısmı alınarak kodlanır. Bu aşamada popülasyon elemanları olan ikilik sistemde kodlanmış sayıların uzunluğu çözüm aralığı ve çözüm hassasiyeti tarafından belirlenecektir. n bitlik bir dizi $[0, 2^n - 1]$ aralığındaki tamsayıları temsil edebilir. Dolayısıyla istenen yüksek hassasiyete ancak büyük genler kullanılarak erişilebilir.

4.1.2 Uygunluk fonksiyonu

Popülasyondaki hangi elemanların devam edip hangisinin devam etmeyeceğini (doğal seçim) belirleyen fonksiyondur. Popülasyondaki bir elemanın (olası bir çözümün) aranan elemana (gerçek çözüme) yakınlığının ölçüsünü verecek şekilde seçilmiş fonksiyondur. Optimizasyon problemlerinde bu fonksiyon, optimumu aranan fonksiyon olarak seçilebilir.

$f(\vec{x})$ fonksiyonunun maksimum değeri aranıyor olsun. Başlangıç popülasyonunda -çözüm aralığında rasgele seçilmiş- bulunan N tane eleman $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N \equiv$

$\{\vec{x}_i\}, i = 1 \dots N$ bulunsun. $f_i \equiv f(\vec{x}_i)$ olmak üzere, i . elemanın uygunluğu,

$$\bar{f} = \sum_{i=1}^N f_i \quad (4.1.4)$$

olmak üzere

$$\frac{f_i}{\bar{f}} \quad (4.1.5)$$

ile verilebilir. Bu durumda \bar{f} popülasyonun uygunluğunun bir ölçüsü olacaktır.

4.1.3 Seçim Stratejileri

Bir popülasyondaki elemanlardan hangilerinin bir sonraki popülasyona alınacağını belirleyen aşamadır. Belirleme, elemanların uygunluk fonksiyonu değerlerine göre olur. Maksimizasyon probleminde uygunluğu büyük olan elemanlar devam edecek, uygunluğu küçük olan elemanlar ise devam edemeyecektir (doğal seçim).

Birden fazla seçim stratejisi mevcuttur, bunlardan en çok kullanılan ikisi Rulet seçimi ve turnuva seçimidir (Holland, 1975). En basit seçim stratejisi, (x, y 0 – 9 arası rakamlar olmak üzere) uygunluğu $x.y$ olan elemandan 1.0 olasılığıyla x tane, $0.y$ olasılığıyla fazladan 1 tane eleman daha seçimi şeklinde olabilir. Yani

- Bu elemandan ara popülasyona x tane alınır, bir tane daha alınma olasılığı $0.y$ dir. $r, [0, 1]$ arası üretilen rasgele sayı olmak üzere $r < 0.y$ ise alınır.
- Uygunluğu $0.y$ olan elemanda ara popülasyona $0.y$ olasılığıyla alınır.

Rulet seçiminde her bir elemanın, bir rulet tekerleği üzerinde uygunlukları ile orantılı olacak şekilde alanlarla temsil edildiği düşünülür. Ruletin her çevrilişinde durduğu dilimin temsil ettiği eleman seçilecektir. Rulet, ara popülasyondaki eleman sayısı kadar çevrilecektir. Uygunluğu büyük olan

elemanlar rulet tekerleđi üzerinde daha büyük alana sahip olduğundan bu elemanlar ara popülasyona daha fazla sayıda seçilecektir.

4.1.4 İşlemler

Her eleman uygunluğu ile orantılı sayıda ara popülasyona alınır. Bu ara popülasyondaki elemanlar arasında aşağıdaki işlemler gerçekleştirilerek sonraki popülasyon oluşturulur.

- Kopyalama: Popülasyonda uygunluk fonksiyonu büyük olan elemanlar uygunluk fonksiyonunun büyüklüğü ile orantılı sayıda olacak şekilde kopyalanarak ara popülasyon oluşturulur.
- Çiftlenme : Ara popülasyondaki herhangi iki elemanın belirli bir olasılıkla (P_c) çiftlenmesiyle yeni eleman oluşturulur. Bu yeni elemanlar sonraki popülasyonda yer alacaktır.

Kodlama türüne göre deđişse de ikili kodlama da bu işlem şöyle olur: A, B iki eleman olmak üzere, her ikisinde rasgele bir yerden bölünür. A dan, A_1, A_2 ve B den, B_1, B_2 olmak üzere iki parça oluşur. A_1 ile B_1, A_2 ile B_2 aynı uzunluktadır. Yeni iki eleman A_1 ile B_2 nin ve B_1 ile A_2 nin birleşiminden oluşacaktır. Örneğın 00111 ve 11000 şeklindeki iki eleman 3. noktalarından birleştirilerek 00100 ve 11011 şeklinde iki yeni eleman oluşturur.

Çiftlenme işlemi bir noktadan olabileceğı gibi (one point crossover) iki (two point crossover) veya daha fazla noktadan da yapılabilir.

- Mutasyon : Oluşturulmuş olan sonraki popülasyondaki herhangi bir elemanın belirli bir olasılıkla (P_m) deđiştirilmesidir. Bu adım algoritmanın yerel optimumda takılmasını önler.

Bu işlem de kodlama türüne göre deđişen tanımlardadır, ikili kodlama kullanılırsa şöyle oluşur: mutasyon sonucu bir elemandaki bir bit ters çevrilir. Örneğın 000111 şeklindeki bir eleman mutasyon sonucu 001111 şeklinde

dönüşebilir. Burada 3. bit ters çevrilmiştir. Bu işlem çözümün yerel optimum değerinde takılmasını engeller.

P_c ve P_m olasılıkları program boyunca sabit olabileceği gibi değişen değerlerde de olabilir. Tipik değerler sırasıyla $0,7 - 0,8$, $0,05 - 0,1$ civarındadır.

4.1.5 Sonlanma Kriteri

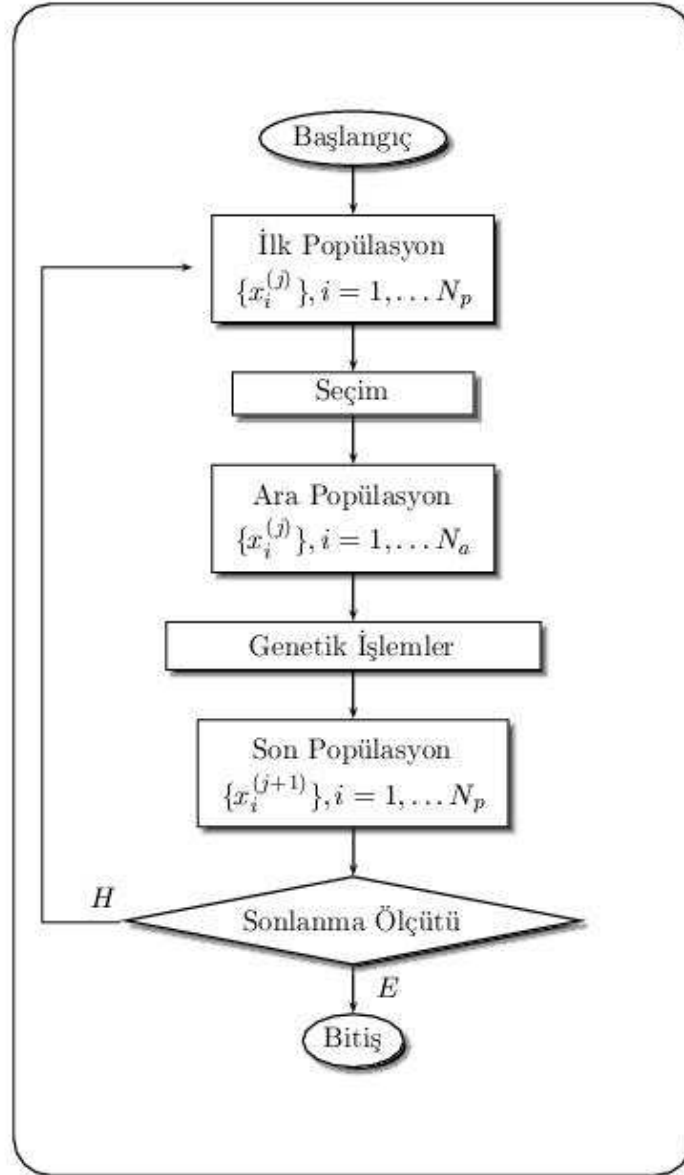
Probleme özgü olarak oluşturulan programın sonlanma kriteri aşağıdakilerden biri ya da bir kaç birden olabilir:

- Önceden belirlenmiş sayıda evrim basamağını gerçekleştirmiş olması.
- Herhangi iki popülasyon elemanı uygunluk değeri arasındaki fark belirli bir nicelikten düşük olması.
- Ardışık iki popülasyon uygunluk değeri arasındaki fark belirli bir nicelikten düşük olması.

4.2 Algoritma

Algoritma, var olan bir popülasyonu (olası çözümleri) aşağıdaki adımlarla uygunluğu daha yüksek olan bir popülasyona (gerçeğe daha yakın olası çözümlere) evirir. Burada özel olarak genetik algoritmanın fonksiyon optimizasyonunda kullanımı verilecektir. $f(\vec{x})$ fonksiyonunun $[a, b]$ aralığında maksimumu aranıyor olsun.

Seçilen durma kriteri gerçekleştiğinde elde edilen popülasyon elemanları aranan çözümü temsil eden elemanlar olacaktır.

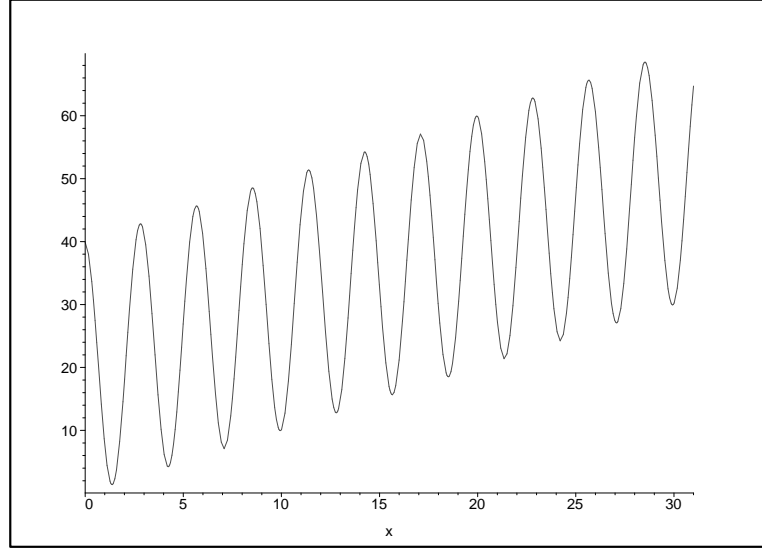


Şekil 4.2 Optimizasyon problemi için Genetik Algoritmanın akış şeması

Genetik Algoritmaların uygulaması basit olmasına rağmen nasıl çözüme ulaştığı konusundaki tek yanıt doğadaki evrime benzer oluşu değildir. Holland'ın Şema teoremi Genetik Algoritmaların nasıl çalıştığını açıklar (Goldberg, 2005)

Algoritmayı bir değişkenli optimizasyon problemine uygulayalım.

$f = 20 + 20\cos(2, 2x + 0, 1) + x$ fonksiyonunun $(0, 31)$ aralığında tamsayı maksimumunu arayalım. Gerçek çözüm $x = 31$ dir.



Şekil 4.3 $f = 20 + 20\cos(2,2x + 0,1) + x$ fonksiyonunun $(0, 31)$ aralığındaki davranışı.

Tablo 4.1 Örnek problem için başlangıç popülasyonu ve elemanların uygunluk değerleri, popülasyonun uygunluk değeri 30,55.

x	kodlama	f_i/f
7	00111	0,24
29	11101	1,92
1	00001	0,25
19	10011	0,96
10	01010	0,33
19	10011	0,96
13	01101	0,48
29	11101	1,92
26	11010	1,98
19	10011	1,96

Programda $P_c = 0,7$; $P_m = 0,1$; $N = 10$ elemanlı popülasyonlar ve 100 evrim basamağı kullanılmıştır. Çözüm uzayı 32 elemanlıdır ve 0 – 31 arası tamsayıları içerir. Kodlama ikilik tabanda yapılmıştır ve 5 bitlik diziler kullanılmıştır. Uygunluk fonksiyonu olarak maksimumu aranan f fonksiyonu kullanılmıştır.

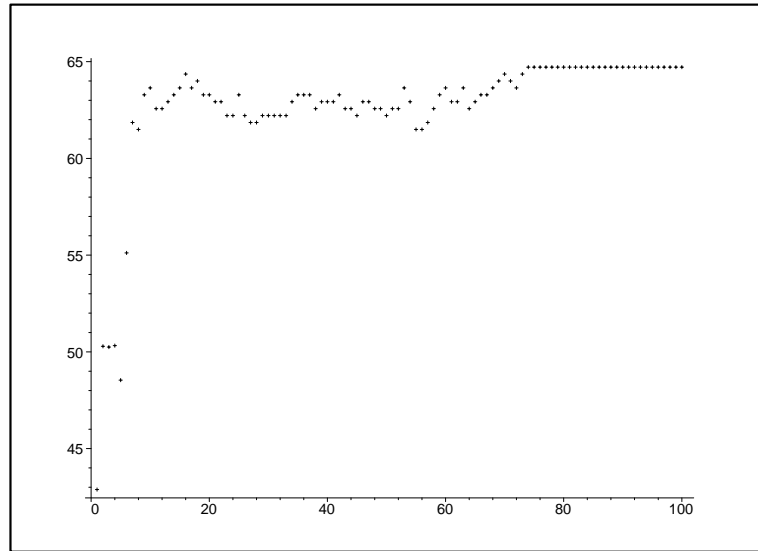
Programda üretilen başlangıç popülasyonu ve uygunluk değerleri tablodadır.

İlk adımda uygunluk değeri yüksek olan 29(4), 26(2), 19(3), 13(1), 10(1) elemanlarından parantez içinde belirtilen sayılarda ara popülasyona seçilmiş ve

bunlardan rasgele seçilen elemanların P_c olasılığıyla birleşmesi ve oluşan elemanların P_m olasılığıyla mutasyon geçirmesi sonucu bir sonraki popülasyon elemanları 31(1), 29(1), 27(2), 25(3), 21(1), 18(1), 14(1) yine parantez içinde belirtilen sayılarda oluşturulmuştur. İlk adım sonrasında popülasyonun uygunluk değeri 42, 88 e yükselmiştir.

İlk popülasyonda olmayan 31, 27, 25, 21, 18, 14 olası çözümlerinin ortaya çıkması birleşme ve mutasyon sonucudur, 1, 7 gibi ilk popülasyonda olan ve uygunluğu düşük olan çözümlerin de elenmiş olması yine algoritmadaki seçim ile olmuştur ve doğadaki "doğal seçim" ile birebir benzerdir.

Program boyunca popülasyonun uygunluk değerinin evrim basamak sayısına göre değişimi aşağıdaki grafikte görülebilir.

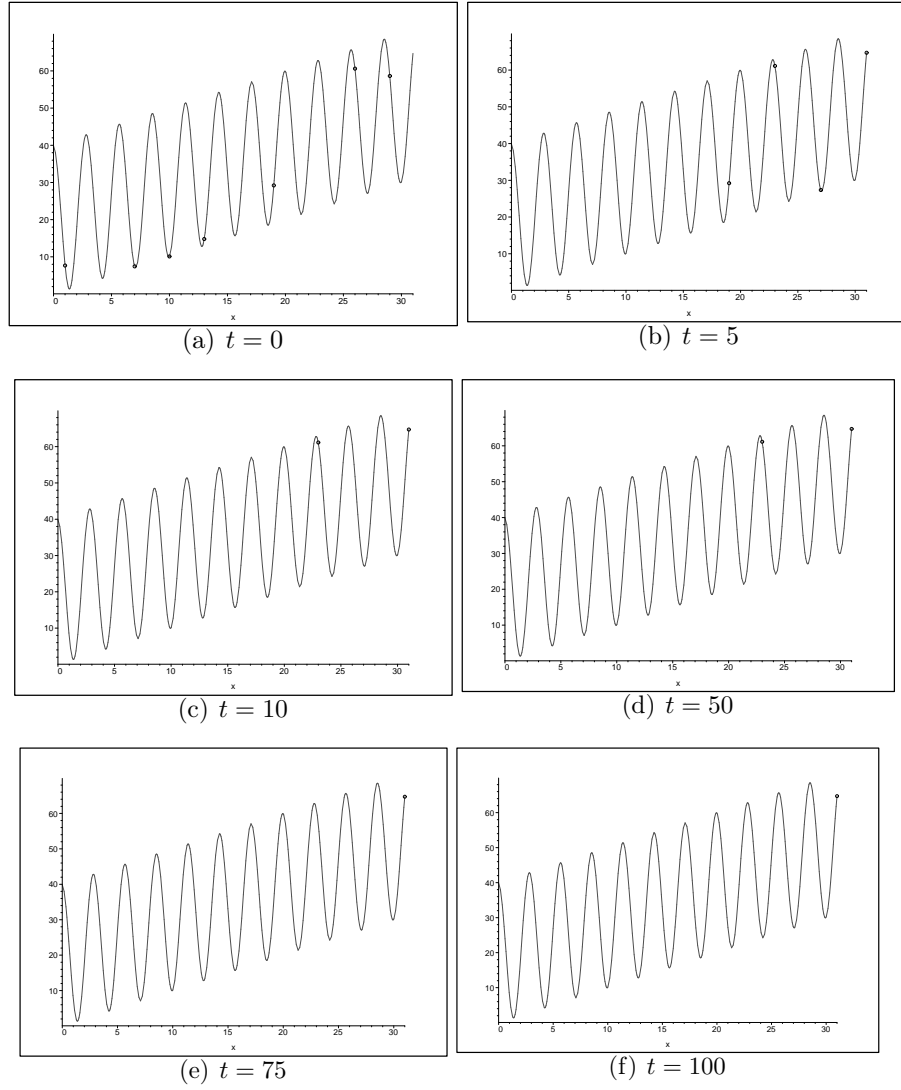


Şekil 4.4 100 adımlık evrim boyunca popülasyonların uygunluk değerlerinin zamanla değişimi.

Evrin sürecinde zaman ilerledikçe popülasyondaki elemanların temsil ettiği çözümler de gerçek (aranan) çözüme yaklaşmaktadır. Popülasyonun içerdiği elemanların gerçek (aranan) çözüme yakınlığının ölçüsü olan popülasyonun uygunluk değerinin zamanla değişiminden (Şekil 4.2) bu görülebilir.

Şekil 4.5 den de ilerleyen evrim basamaklarında, popülasyon elemanı olan olası

çözümlerin (şekildeki siyah noktalar), gerçek çözüme yaklaştığı görülebilir.



Şekil 4.5 Evrim boyunca farklı zaman adımlarında popülasyondaki elemanların temsil ettiği çözümler.

BÖLÜM BEŞ

KUANTUM GENETİK ALGORİTMALAR

5.1 Algoritma

Genetik algoritmanın ilk hali üzerinde bazı değişiklikler yapılarak 2000 yılında önerilen kuantum genetik algoritma (Grigorenko ve Garcia, 2000) ile kuantum mekaniksel sistemlerin incelenmesinde genetik algoritmalar daha kullanışlı hale gelmiştir. Sonrasında bu yöntemle basit bazı kuantum mekaniksel sistemler çözülmüştür (Grigorenko ve Garcia, 2001; 2002; Stoico, Renzi ve Vericat, 2008; Şahin, Atav ve Tomak, 2006).

Algoritmanın klasik genetik algoritmadan farkı bazı işlemlerin fonksiyonlara daha uygun olacak biçimde gerçekleştirilmesindedir.

Klasik genetik algoritma ile örneğin çok minimumlu bir fonksiyonun global minimum aramırken, olası minimumlardan oluşan popülasyon elemanları (sayılar) ikilik düzende kodlanır ve çiftlenme, mutasyon gibi işlemler bu dizilerde yapılır. Örneğin mutasyon işlemi diziden rasgele seçilen bir bitin (0 ya da 1) ters çevrilmesinden ibarettir. Ancak kuantum mekaniğinde çözümü aranan denklem olan Schrödinger denkleminin çözümü bir sayı değil dalga fonksiyonudur. Bu dalga fonksiyonu enerjiyi minimum yapan dalga fonksiyonudur. Problemden genetik algoritmanın kullanılabilmesi iki yoldan olabilir:

- Dalga fonksiyonunun parametrik yazımı ve sistem enerjisini minimum yapan parametre değerlerinin genetik algoritma ile bulunması.
- Doğrudan dalga fonksiyonunun uygun genetik işlemler tanımlanarak evrime tabi tutulması.

İkincisi, kuantum genetik algoritmadır.

Hamiltoniyeni verilen bir sistem için enerji, dalga fonsiyonunun fonksiyoneli olarak (2.1.2) şeklinde veriliyordu. Varyasyonel algoritmalarla bu sistemin çözümü enerji fonksiyoneli minimum yapan dalga fonsiyonunu bulmak olduğuna göre, genetik (ya da kuantum genetik) algoritmalar kullanılarak çözüm aranması sürecinde de enerji uygunluk fonksiyonu olarak kullanılacaktır.

Kuantum genetik algoritma şu adımlardan oluşur:

1. Başlangıç popülasyonu problemin sınır koşullarını sağlayan rasgele N_p tane dalga fonsiyonundan oluşturulur, $\{\psi_i^{(0)}(\vec{r})\}$.
Belli bir adımdaki (k) popülasyonda problemin sınır koşullarını sağlayan N_p tane ψ dalga fonsiyonu olacaktır, $\{\psi_i^{(k)}(\vec{r})\}$.
2. Popülasyonundaki elemanların uygunlukları (uygunluk fonksiyonu değerleri) (2.1.2) den hesaplanır, $\{E[\psi_i^{(k)}(\vec{r})]\} \equiv \{E_i^{(k)}\}$. Popülasyonun uygunluğu elemanlarının uygunlukları toplamıdır, $E^{(k)} = \sum_{i=1}^{N_p} E_i^{(k)}$
3. $E_i^{(k)}$ değerine göre popülasyonun ψ_i elemanından -uygunluğu ile orantılı- belirli bir sayıda eleman kopyalanarak ara popülasyon oluşturulur. Ara popülasyonda $\{N_i^{(k')}\}$ sayıda $\{\psi_i^{(k')}(\vec{r})\}$ elemanları vardır. Uygunluğu düşük olan elemanlar için $N_i^{(k')} = 0$ olacaktır. Bu yolla bir sonraki popülasyonu oluşturacak elemanlar arasında uygunluğu düşük olan elemanlar olmayacaktır. Bu ise bir sonraki popülasyonun uygunluğunun daha büyük olmasını sağlayacaktır.
4. Ara popülasyon elemanları arasından rasgele seçilen ikililer arasında çiftlenme işlemi yapılarak bir sonraki popülasyonun elemanları oluşturulur, $\{\psi_i^{(k+1)}(\vec{r})\}$.
5. $(k + 1)$. popülasyondan rasgele seçilen elemanlar belirli olasılıkla (P_m) mutasyona uğratılır.
6. 1-5 arası işlemler $(k + 1)$. popülasyon için yapılır.
7. Popülasyon uygunluğu belirli bir değere ulaşığında ya da iki ardışık popülasyon arasındaki uygunluk farkı belirli bir değerden düşük olduğunda program

sonlandırılır.

Program sonlandığında oluşmuş olan son popülasyonun elemanları birbirinin aynısı olacaktır ve bu elemanlar problemin aranan çözümü olacaktır.

5.2 Bir Boyutlu Sistemlerde KGA

5.2.1 Formülasyon

Bir boyutlu basit sistemlerde KGA formülasyonu literatürde mevcuttur (Grigorenko ve Garcia, 2000).

$[0, 1]$ aralığında potansiyel sıfır ve bu aralık dışında sonsuz potansiyele sahip kuyudaki tek parçacık için genetik algoritma ile çözüm arayalım.

Çözümün sınır koşulu dalga fonksiyonunun $[0, 1]$ aralığı dışında 0 olmasıdır. Popülasyon elemanları bu sınır koşulunu sağlayan

$$\psi_i(x) = A \exp\left(-\frac{(x - x_i)^2}{\sigma_i^2}\right) (x - a) (b - x) \quad (5.2.1)$$

formundaki fonksiyonlar olarak seçilebilir. Burada $x_i \in [0, 1]$, $\sigma_i \in (0, b - a]$ olmak üzere rasgele değerlerdir. A normalizasyon katsayısı

$$A = \frac{1}{\sqrt{\langle \psi_i(x) | \psi_i(x) \rangle}} \quad (5.2.2)$$

ile verilecektir. Popülasyon elemanları olan dalga fonksiyonları 1 e normalize olmalıdır.

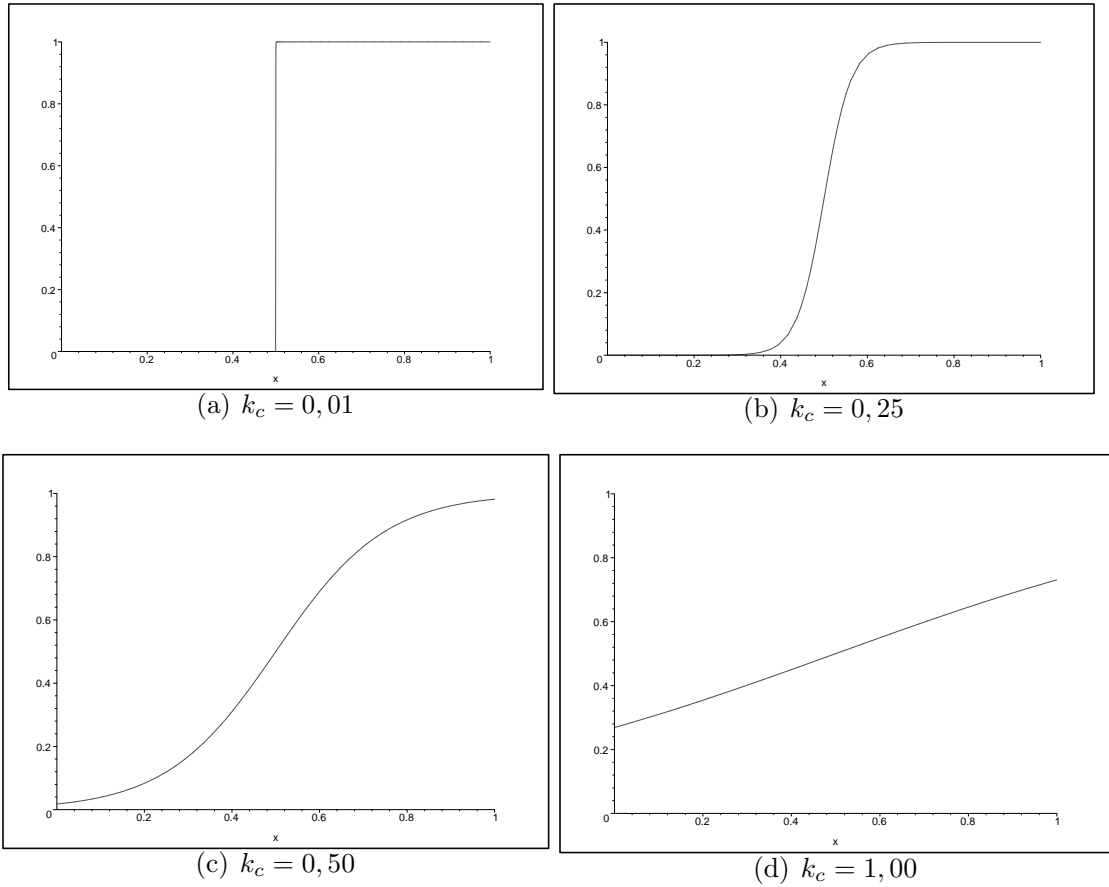
Çiftlenme işlemi

$$St(x) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh\left(\frac{x - x_0}{k_c^2}\right) \right) \quad (5.2.3)$$

olmak üzere

$$\begin{aligned}\psi_i^{(k+1)}(x) &= \psi_i^{(k)}(x)St(x) + \psi_j^{(k)}(x)(1 - St(x)) \\ \psi_j^{(k+1)}(x) &= \psi_j^{(k)}(x)St(x) + \psi_i^{(k)}(x)(1 - St(x))\end{aligned}\quad (5.2.4)$$

şeklinde tanımlanabilir. Burada $x_0 \in (0, 1)$ olacak şekilde rasgele değişken ve k_c çiftlenmenin keskinliğini veren bir parametredir. (5.2.3) ile tanımlı fonksiyon keskinliği k_c parametresinin aldığı değere göre değişen bir basamak fonksiyonudur, iki fonksiyonu birleştirirken -tıpkı klasik genetik algorithmada olduğu gibi- fonksiyonları rasgele belirlenmiş olan x_0 dan keser ve iki fonksiyonun kesilmiş kısımlarından k_c parametresine göre değişen oranlarda katkı alarak yeni fonksiyon oluşturur. $x_0 = 0,5$ için fonksiyonun farklı k_c ler için davranışı Şekil 5.1 den görülebilir.



Şekil 5.1 (5.2.3) ile verilen çiftlenme fonksiyonunun $x_0 = 0,5$ ve farklı k_c değerleri için x e göre davranışı.

Mutasyon işlemi de

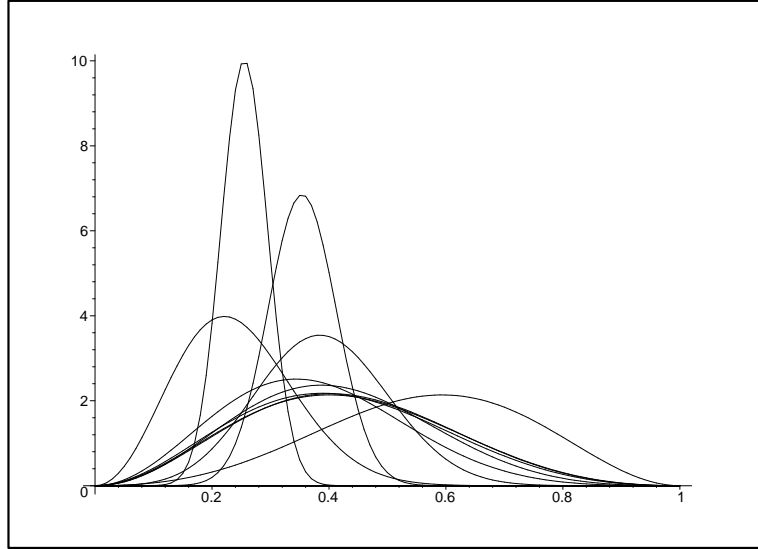
$$\psi_r(x) = B \exp\left(-\frac{(x_r - x)^2}{R^2}\right) \quad (5.2.5)$$

olmak üzere $(x_r \in (0, 1), R \in (0, b - a]$ ve B rasgele sayılar)

$$\psi^{(k+1)}(x) \rightarrow \psi^{(k+1)}(x) + \psi_r(x) \quad (5.2.6)$$

olarak tanımlanabilir.

Simülasyon başlangıcında (5.2.1) den rasgele oluşturulan popülasyon elemanları Şekil 5.2 de görülebilir.

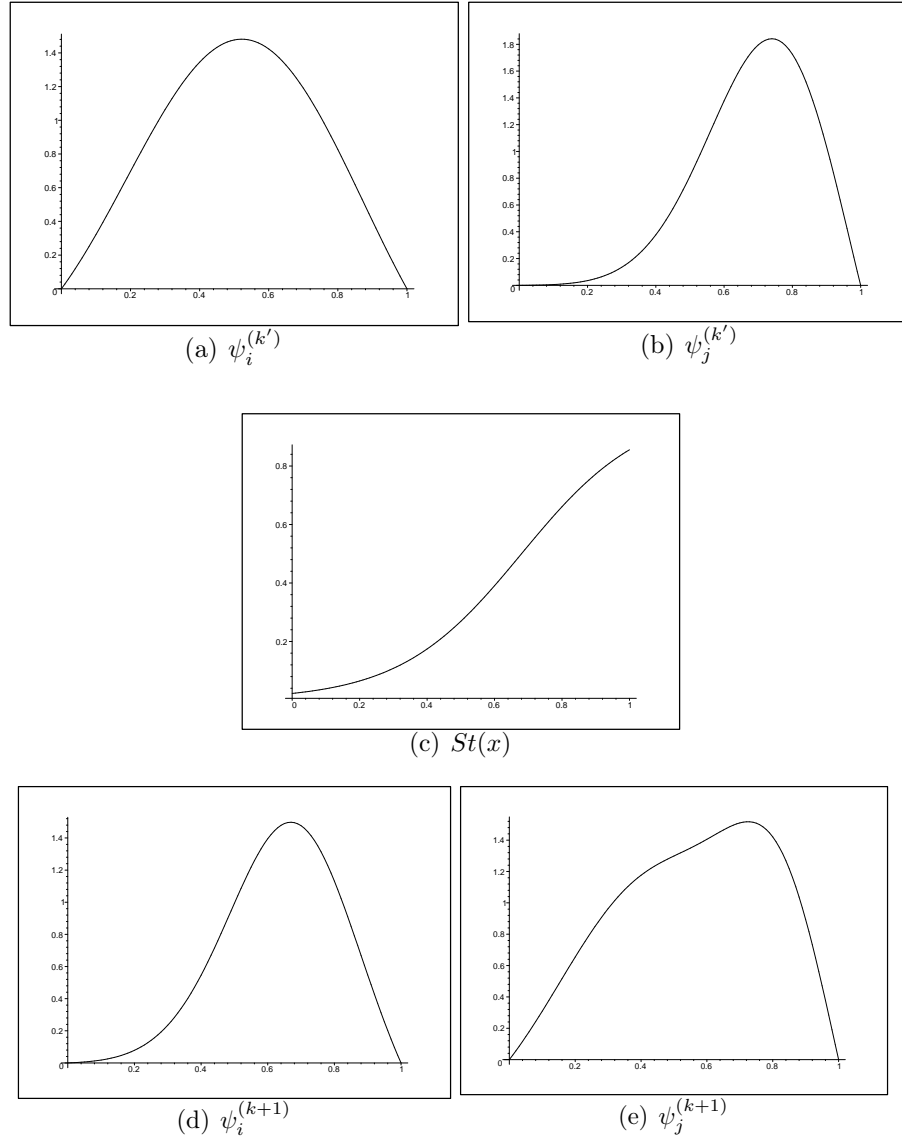


Şekil 5.2 (5.2.1) den rasgele oluşturulan $N_p = 10$ tane normalize dalga fonksiyonu.

Simülasyon sırasında (5.2.3) ve (5.2.4) ile tanımlanan çiftlenim işlemi de Şekil 5.3 den görülebilir.

Simülasyonda önemli bir başka işlem olan, (5.2.5) ve (5.2.6) ile tanımlı mutasyon işleminin de tipik bir örneği Şekil 5.4 den görülebilir.

Tipik bir simülasyonda popülasyonlar evrildikçe elemanların değişimi Şekil 5.5

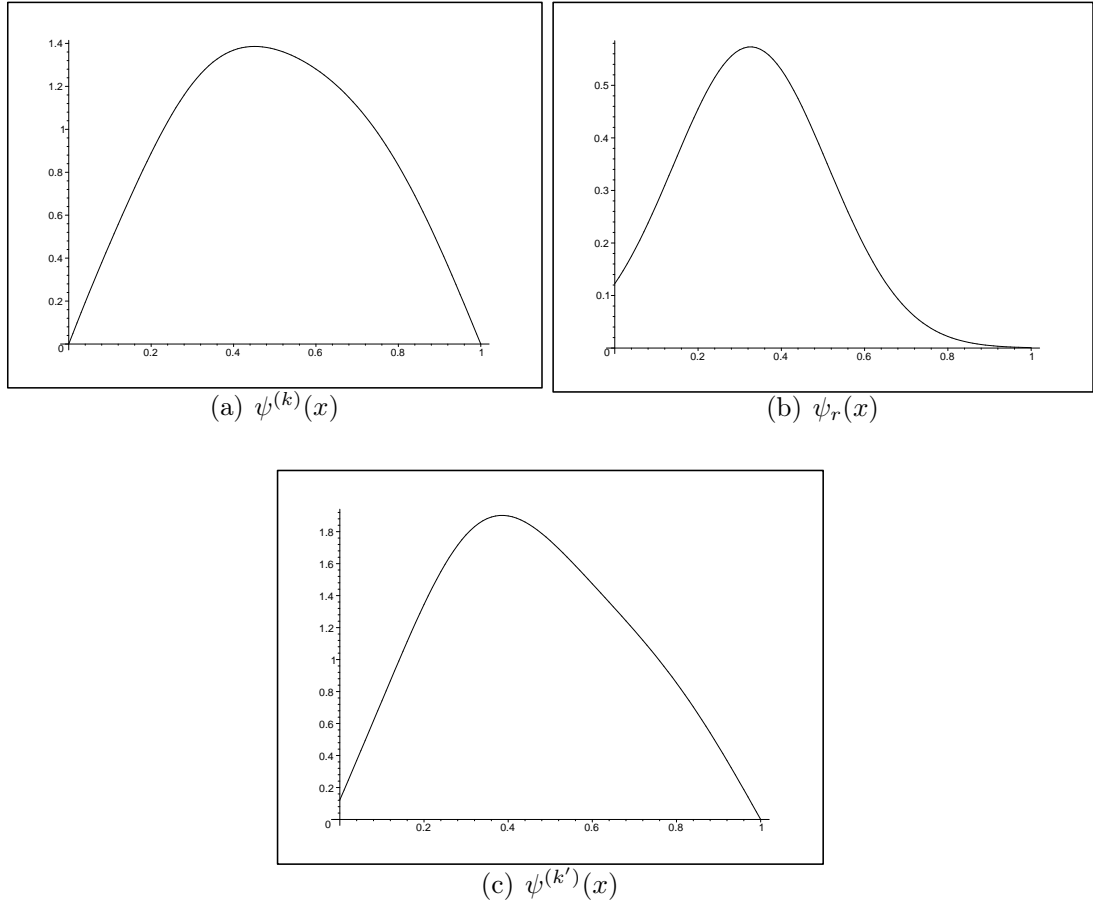


Şekil 5.3 (5.2.3) ve (5.2.4) ile tanımlanan tipik bir çiftlenim işlemi.

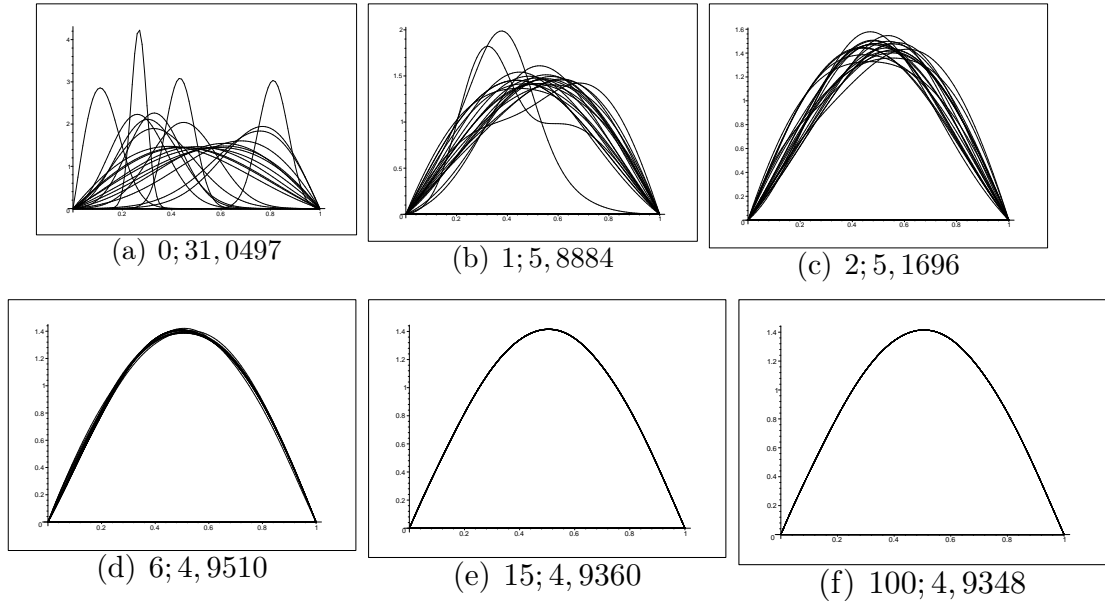
de görülmektedir.

Evrım boyunca popülasyonların ortalama uygunluklarının değişimi de Şekil 5.6 da görülebilir. 100 adımlık simülasyon sonundaki ($k_c = 0,5$, $P_c = 0,95$, $P_m = 0,03$) popülasyonun ortalama uygunluk değeri 4,9348 dir ki enerjinin kesin değeri olan $\pi^2/2 = 4,9348$ ile aynıdır.

KGA yönteminde, GA ve SA yöntemlerinden farklı olarak parametrik verilen bir fonksiyonun parametrelerinin optimizasyonu yerine doğrudan

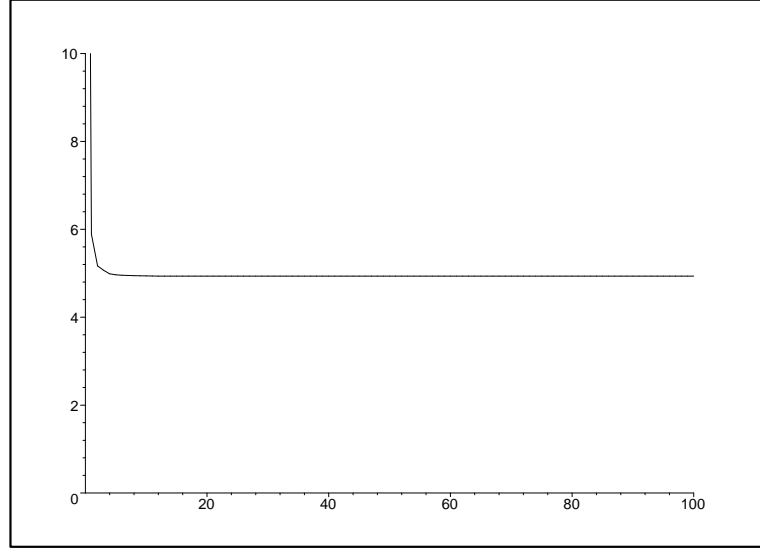


Şekil 5.4 (5.2.5) ve (5.2.6) ile tanımlı tipik bir mutasyon işlemi.



Şekil 5.5 $N_p = 20$ elemanlı popülasyonun tipik evrimi, şekillerin altında popülasyon sıra numarası ve ortalama uygunluk (enerji) değeri verilmiştir.

fonksiyonun kendisinin optimizasyonu KGA ile yapılır. Çözümün bu şekilde yapılıyor oluşu bazı avantajlar sağlar,



Şekil 5.6 $N_p = 20$ elemanlı popülasyonların tipik evrimi sırasında ardarda gelen popülasyonların ortalama uygunluk (enerji) değerlerinin değişimi.

- Çözüm uzayı dalga fonksiyonlarından oluşmaktadır, çözüm uzayındaki en iyi çözüm arayışının parametreler üzerinden yapılması yerine fonksiyonlar üzerinden yapılması daha hızlı sonuç verir.
- Bazı çözümler parametrik tek bir fonksiyonla verilemez, bu durumda parametre üzerinden optimizasyon yapılacaksa çözüm birden fazla parametrik fonksiyonun doğrusal birleşimi şeklinde yazılır. Parametre uzayı genişler, tek bir fonksiyonun parametrelerine ek olarak şimdi açılım katsayıları da bulunmalıdır. Bu yüzden doğrudan fonksiyon üzerinden yapılacak optimizasyon (KGA ile) daha etkili olacaktır.
- Bazı sistemlerde parametreler üzerindeki küçük bir değişim sistem enerjisinde büyük bir değişim yaratabilir, bu da SA ya da GA ile yapılan parametre optimizasyonunun doğru sonuca yakınsamama tehlikesini doğurur. Dolayısıyla KGA parametre üzerinden optimizasyon yapmadığından kullanışlı olacaktır.

KGA yönteminde tek parçacık çözümlerinde Gaussian tipi fonksiyonlar kullanılır, çok parçacık çözümlerinde ise bu Gaussiyen fonksiyonlarla oluşturulan Slater tipi çözümler kullanılabileceği gibi tek Gaussiyenler de

kullanılabilir. Gaussiyen tipindeki fonksiyonlar uzayın sonlu bir bölgesinde var olduğundan integral alma işlerinde kolaylık sağlar. Henüz literatürde olmasa da başka tip fonksiyonların da kullanılması olasıdır. Örneğin FEM bazlarıyla oluşturulan çözümler bu KGA yönteminde kullanılabilir. Bununla birlikte atomların ya da moleküllerin dalga fonksiyonları olarak kullanılan Slater tipi orbitaller (STO) Gaussian tipi orbitallerin (GTO) doğrusal birleşimi olarak yazılabildiğinden KGA yönteminde GTO kullanılıyor olması anlamlıdır.

Yöntem ne olursa olsun her sistemde optimizasyon, sistemin toplam enerjisine göre yapılabilir. Dolayısıyla, olası çözümün parametrik optimizasyonda kullanılan SA ve GA yöntemlerinde her sistem için dikkat edilmesi gereken noktalar vardır. Bu algoritmalar ile yazılan programlarda, programa özgü bazı parametre değerleri her sistem için ayrı ayrı testlerle belirlenmelidir.

5.2.2 SA, GA ve KGA Karşılaştırılması

Hamiltoniyeni

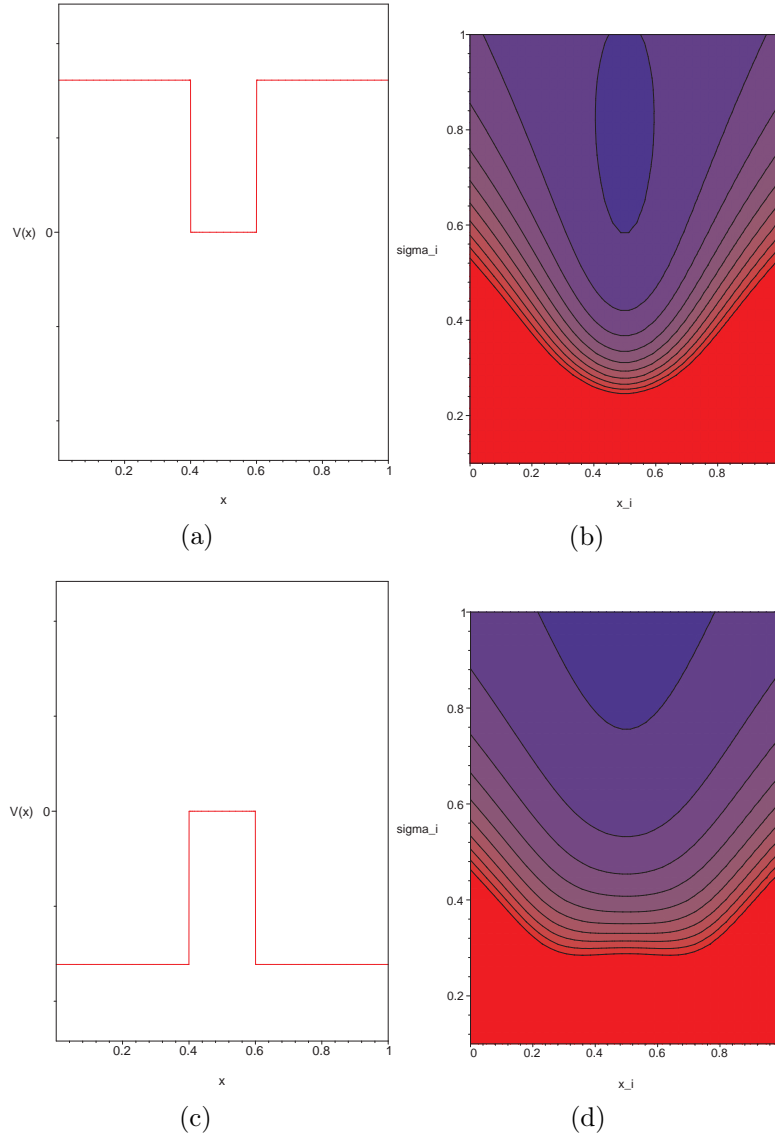
$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (5.2.7)$$

ile verilen $[a, b]$ arasında hapsolmuş bir boyutlu ve tek parçacıklı sistem çözümünde SA GA ve KGA çözümlerini kıyaslayalım. Olası çözümler (5.2.1) ile verilebilir.

Sağlıklı bir çözüme ulaşabilmek için gerek SA yönteminde gerekse GA yönteminde farklı potansiyel profilleri için bazı farklı stratejiler izlenmelidir. Farklı potansiyel profillerine karşılık gelen enerji profilleri Şekil 5.7 ve Şekil 5.8 den görülebilir.

Model sistem olarak Hamiltoniyeni (5.2.7) ile ve olası çözümleri parametrik olarak (5.2.1) verilen sistemi alalım. Sistemin potansiyel ve enerji profili Şekil 5.9 da görülebilir.

Bir önceki bölümdeki sistem için GA ile çözüm adımları Şekil 5.10 dan görülebilir.

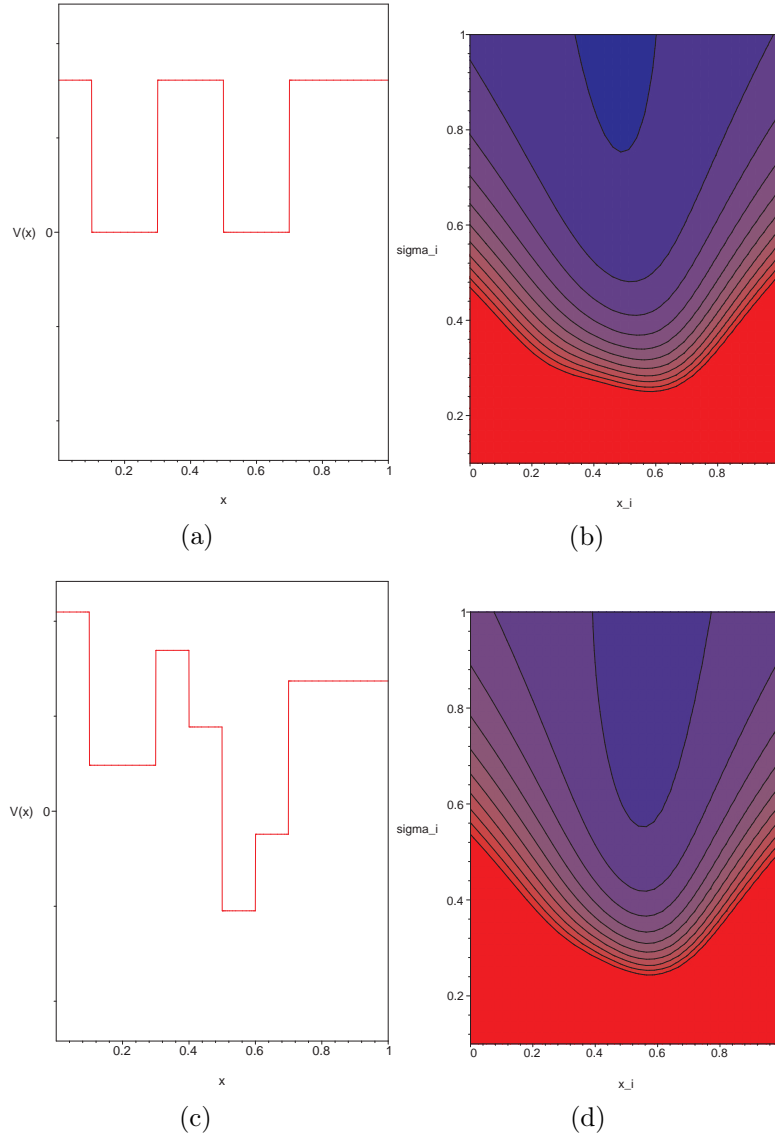


Şekil 5.7 $a = 0,0; b = 1,0$ arasındaki bir boyutlu tek parçacıklı sistemin farklı potansiyel profillerine göre enerji profilleri (sistem enerjisinin olası çözüm fonksiyonu parametrelerine göre değişimi). Enerji kırmızı bölgelerde yüksek, mavi bölgelerde düşüktür.

Sistemin potansiyel profili Şekil 5.10(a) daki gibidir.

KGA ile yapılan çözümde, evrim boyunca davranış Şekil 5.10 ve 5.11 e benzer olacaktır. Ancak bu sefer yakınsama 20 adımda olacak ve yakınsanan değer ise daha iyi olacaktır. Yakınsanan değer $E = 15,823700$ olarak elde edilir.

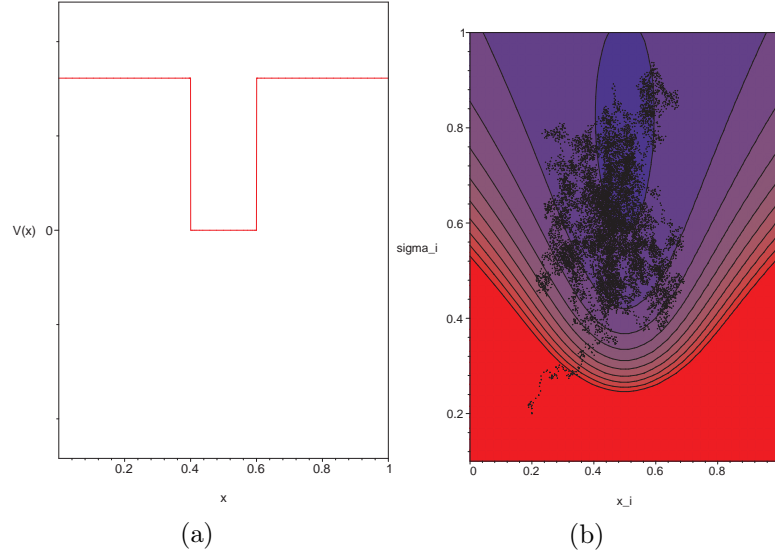
Yukarıdaki yöntemlerle yapılan çözümlerin doğruluğu, sonuçlar FEM (Finite



Şekil 5.8 $a = 0,0; b = 1,0$ arasındaki bir boyutlu tek parçacıklı sistemin farklı potansiyel profillerine göre enerji profilleri (sistem enerjisinin olası çözüm fonksiyonu parametrelerine göre değişimi). Enerji kırmızı bölgelerde yüksek, mavi bölgelerde düşüktür.

Element Method - sonlu elemanlar yöntemi) ile bulunan çözümlerle kıyaslanarak belirlenecektir.

FEM, FEM bazlarıyla oluşturulan çözümlerin deterministik yöntem ile gerçek çözüme yaklaşım bir diferansiyel denklem çözme yöntemidir. Yöntemin ayrıntıları tezin konusu dışında olduğundan burada değinilmeyecektir. FEM ile çözüm yapan kod yazılabileceği gibi yazılmış olan (serbest ya da ticari) kodlardan



Şekil 5.9 $a = 0, 0; b = 1, 0$ arasındaki bir boyutlu tek parçacıklı sistemin SA ile çözümü. $[0, 4; 0, 6]$ arasında yer alan kuyu yüksekliği $V = 10, 0$ (boyutsuz) dur. Enerji kırmızı bölgelerde yüksek, mavi bölgelerde düşüktür. Noktalar SA programı sırasında ziyaret edilen noktaları göstermektedir. $E = 16, 206690$ ve optimum parametre değerleri $x_i = 0, 5000972; \sigma_i = 0, 7348500$ dir.

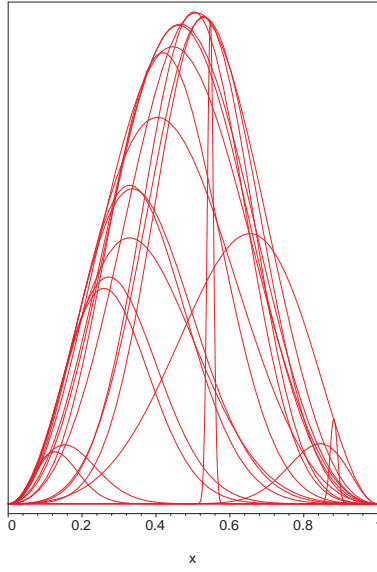
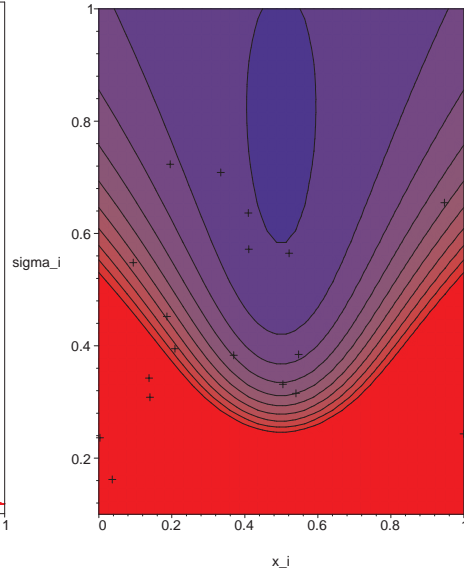
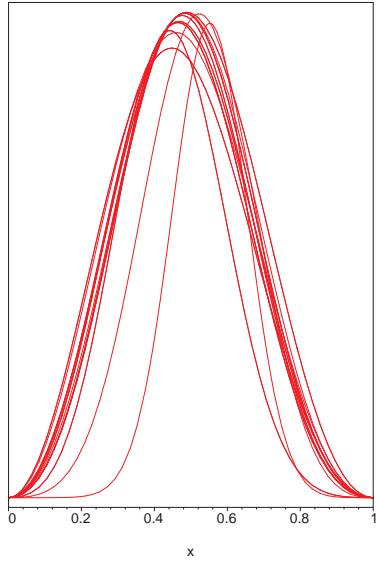
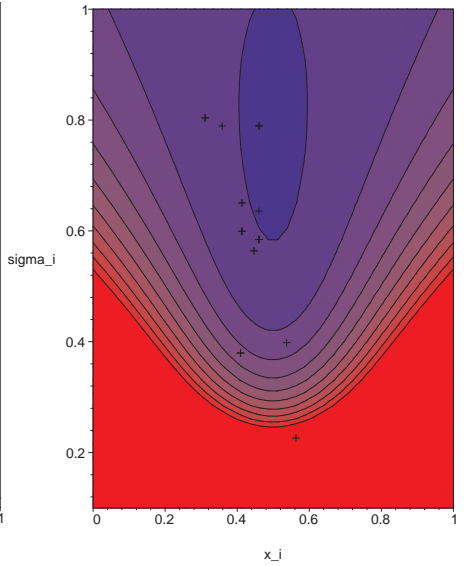
da yararlanılabilir.

Buradaki çözümlerin FEM çözümleriyle kıyaslaması yapılırken yazılmış olan programlardan biri olan FlexPde (PDE Solutions Inc., 2009) kullanılacaktır.

FEM deterministik bir optimizasyon yöntemi olduğundan belirli problemlerin sonuçları büyük bir hassasiyetle -uyarılmış durumlarla birlikte- hesaplanabilir. Model probleme uygulanan SA ve GA sonuçları ile FEM sonucunun karşılaştırılması Şekil 5.12 de görülebilir.

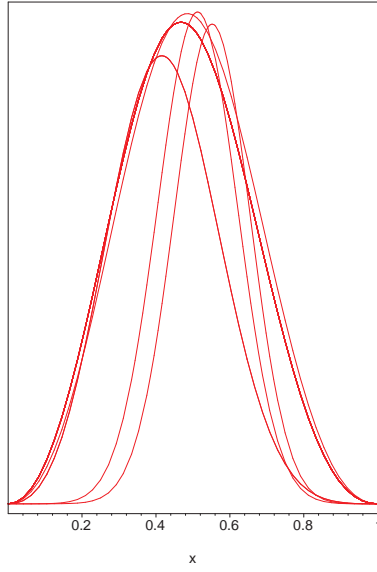
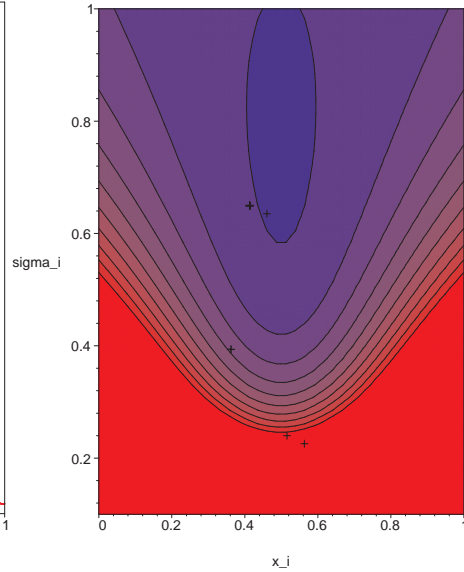
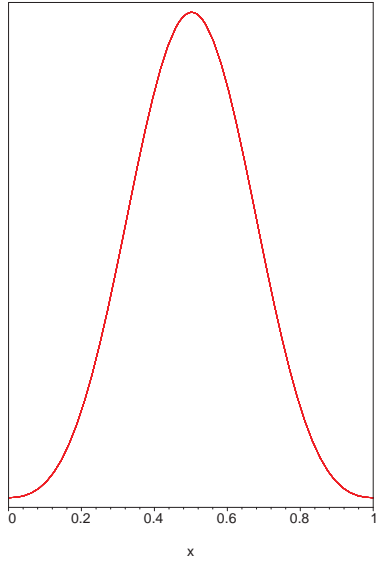
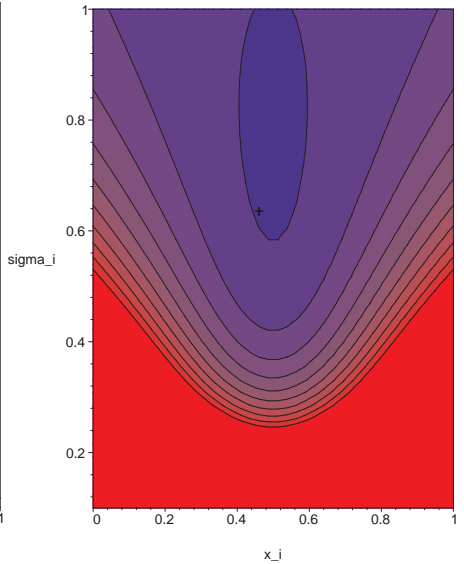
Uyuşmazlıkların sebebi SA ve GA yöntemlerinin daha doğrusu parametrik optimizasyonun yetersizlikleridir. Model sistem için tam çözüm (5.2.1) deki gibi yazılan parametrik Gaussiyen ile verilemediğinden bulunan yaklaşık çözüm FEM çözümü ile küçük uyumsuzluklar göstermektedir.

KGA yöntemiyle yapılan çözümün daha iyi olacağı görülecektir. Bunun sebebi

(a) $n = 1$ (b) $n = 1, E = 25, 328950$ (c) $n = 10$ (d) $n = 10, E = 17, 047720$

Şekil 5.10 $a = 0, 0; b = 1, 0$ arasındaki bir boyutlu tek parçacıklı sistemin GA ile çözümü. $[0, 4; 0, 6]$ arasında yer alan kuyu yüksekliği $V = 10, 0$ (boyutsuz) dur. Enerji kırmızı bölgelerde yüksek, mavi bölgelerde düşüktür. Sol taraftaki şekiller n . evrim basamağındaki popülasyon elemanlarını (normalize olmamış dalga fonksiyonları kareleri), sağ taraftaki şekillerdeki noktalar GA programı sırasında n . evrim basamağındaki popülasyon elemanlarının enerjilerini göstermektedir. Yakınsanan değer $E = 16, 208530$ ve optimum parametre değerleri $x_i = 0, 5010245; \sigma_i = 0, 735170$ dir.

KGA nm, GA ya da SA gibi parametre üzerinden değil de doğrudan fonksiyon

(a) $n = 100$ (b) $n = 100, E = 17.322500$ (c) $n = 200$ (d) $n = 200, E = 16.208530$

Şekil 5.11 $a = 0,0; b = 1,0$ arasındaki bir boyutlu tek parçacıklı sistemin GA ile çözümü. $[0, 4; 0, 6]$ arasında yer alan kuyu yüksekliği $V = 10,0$ (boyutsuz) dur. Enerji kırmızı bölgelerde yüksek, mavi bölgelerde düşüktür. Sol taraftaki şekiller n . evrim basamağındaki popülasyon elemanlarını (normalize olmamış dalga fonksiyonları kareleri), sağ taraftaki şekillerdeki noktalar GA programı sırasında n . evrim basamağındaki popülasyon elemanlarının enerjilerini göstermektedir. Yakınsanan değer $E = 16,208530$ ve optimum parametre değerleri $x_i = 0,5010245; \sigma_i = 0,735170$ dir.

üzerinden optimizasyon yapıyor olmasıdır. Bu, bulunan çözümün (5.2.1) deki gibi

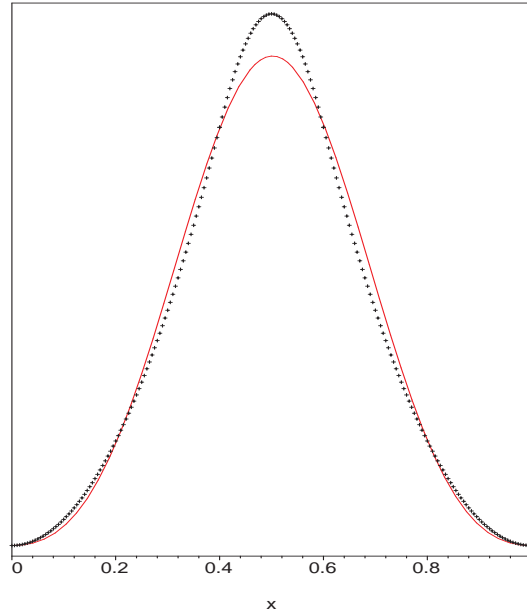
Tablo 5.1 Hamiltoniyeni (5.2.7) ve potansiyeli Şekil 5.7 (a) da verilen sistem için SA, GA, KGA, FEM enerji değerleri.

Yöntem	Enerji (QGA)
FEM	15,822800
KGA	15,823700
SA	16,206690
GA	16,208530

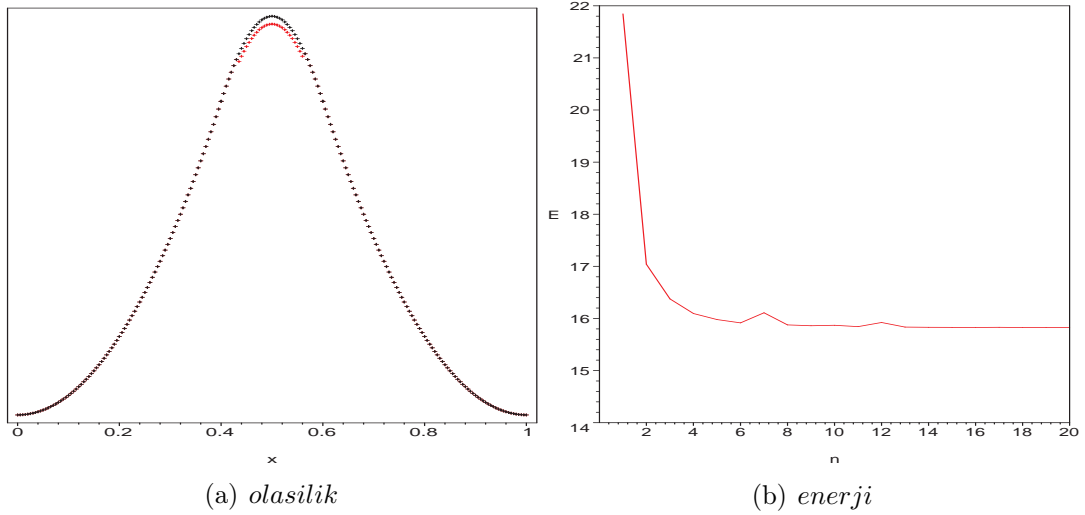
parametrik bir formda veriliyor olması koşulunu ortadan kaldırarak bir esneklik sağlar.

Dolayısıyla Şekil 5.8 (a) ve (c) deki gibi potansiyel profillerinde SA ya da GA (5.2.1) deki gibi tek bir Gaussiyen kullanarak doğru çözüme ulaşamayacaktır. Bunun için ya birden fazla Gaussiyen kullanılmalı ya da KGA kullanılmalıdır.

KGA sonuçları ile FEM sonucunun karşılaştırılması Şekil 5.13 de görülebilir.



Şekil 5.12 Bölüm 2 de tanımlanan model problemin SA (ve GA) çözümleri ile FEM çözümünün kıyaslanması. Grafikte olasılığın x e göre değişimi görülmektedir. Kırmızı grafik SA (ve GA) çözümleridir.



Şekil 5.13 Tanımlanan model problemin KGA çözümleri ile FEM çözümünün kıyaslanması. (a) da olasılığın x e göre değişimi görülmektedir. Kırmızı noktalar KGA çözümleridir. (b) de popülasyonun evrimi boyunca her basamaktaki enerji değerleri görülmektedir.

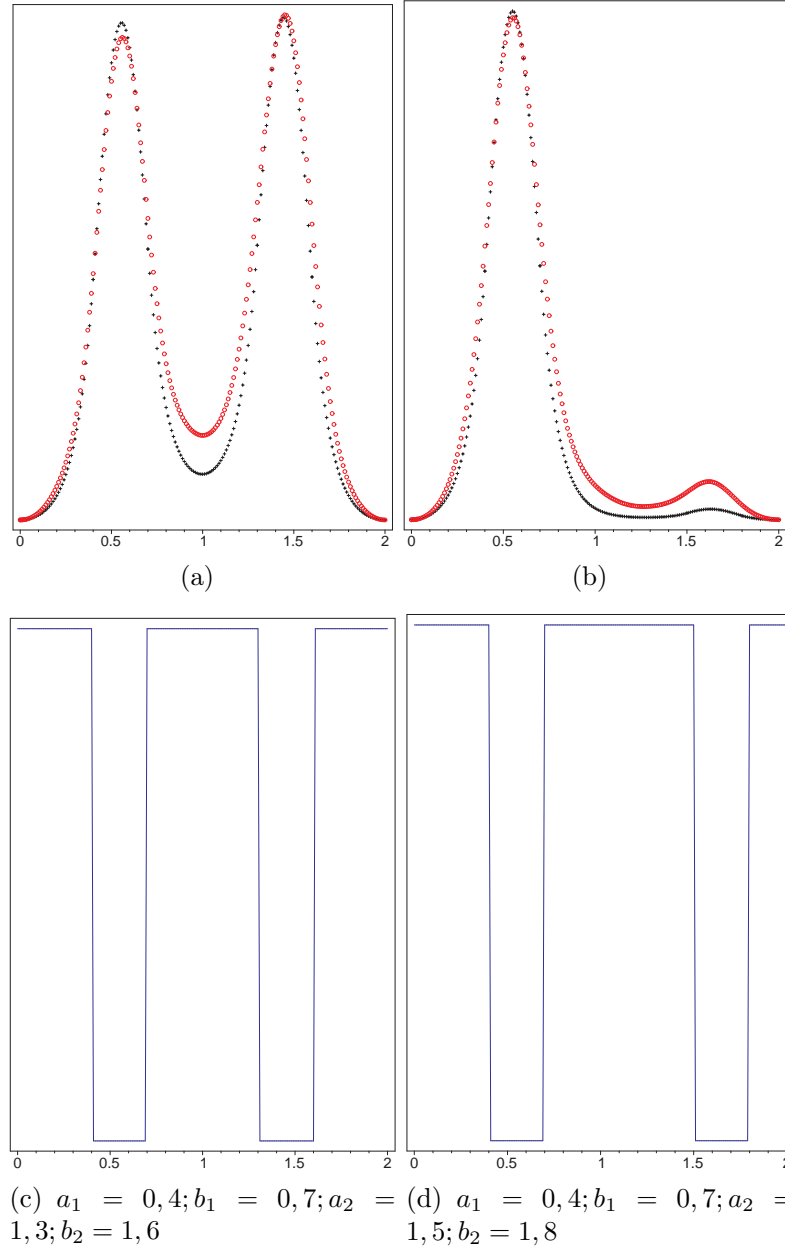
5.2.3 Bir Boyutta Çoklu Potansiyel Kuyusu

Bir boyutta tek parçacıklı sistem (5.2.7) ile verilen Hamiltoniyen ile tanımlanıyor olsun. Hamiltoniyendeki potansiyel terimi de

$$V(x) = \sum_{i=1}^N V_i [\Theta(x - b_i) + \Theta(a_i - x)] \quad (5.2.8)$$

şeklinde veriliyor olsun. (5.2.8) potansiyel profili $[a, b]$ arasındaki sistem için, ardışık $b_i - a_i$ genişliğinde V_i yüksekliğinde potansiyel kuyuları tanımlar. Çözüm için KGA da, (5.2.1) ile tanımlı fonksiyonları kullanalım.

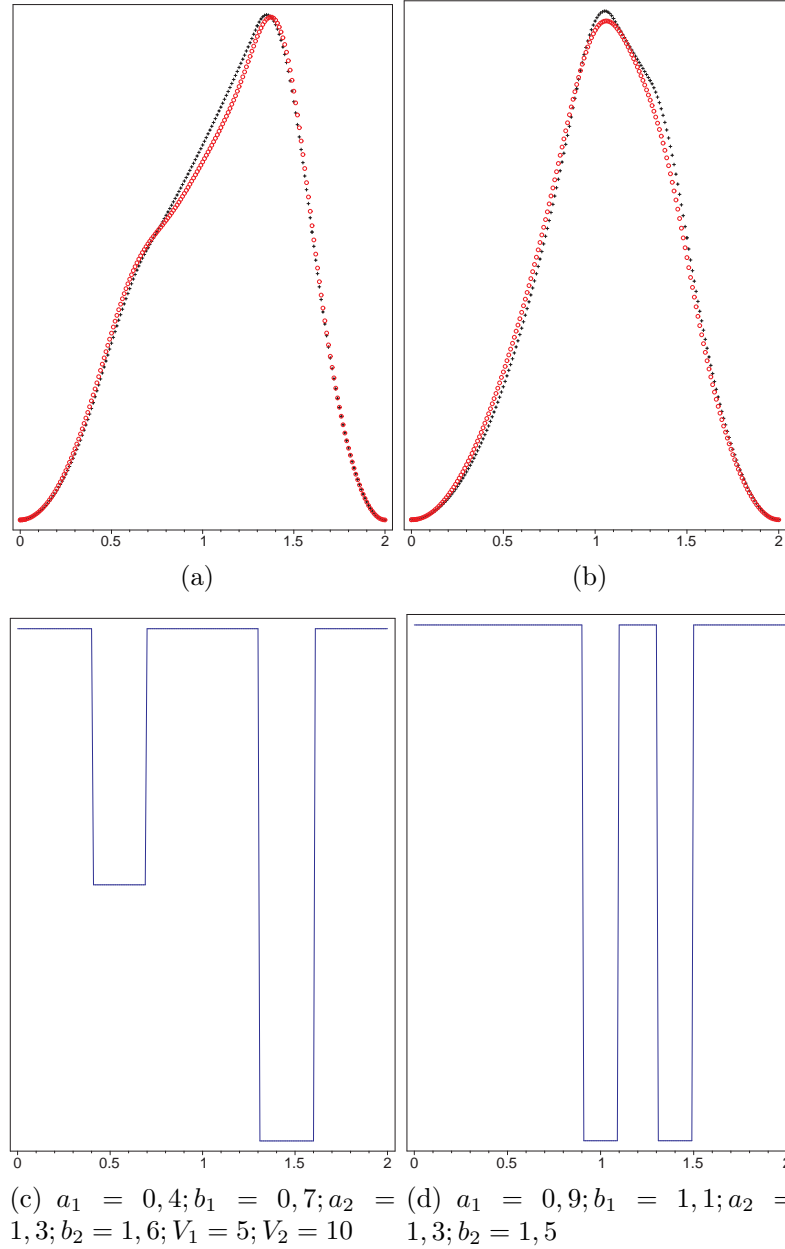
Farklı potansiyeler için elde edilen sonuçların FEM ile kıyaslanması Şekil 5.14 ve Şekil 5.15 de görülebilir.



Şekil 5.14 Tanımlanan problemin çözümü. $a = 0, 0; b = 2, 0$ arasındaki tek parçalıklı sisteme etki eden (5.2.8) ile verilen potansiyel profilleri altındaki yoğunluklar. (c),(d) de potansiyel profilleri; (a),(b) de ise yoğunluklar görülmektedir. Siyah noktalar FEM çözümünü, kırmızı noktalar ise KGA çözümünü göstermektedir. $V_1 = 40, V_2 = 40$ dır.

5.2.4 Bir Boyutta İki Parçalık

Bir boyutta $[a, b]$ arasına hapsolmuş herhangi bir potansiyel etkisi altında olmayan ve Coulomb benzeri etkileşimle etkileşen iki parçalıktan oluşan sistemin



Şekil 5.15 Bölüm 3.1 deki problemin çözümü. $a = 0, 0; b = 2, 0$ arasındaki tek parçalıklı sisteme etki eden (5.2.8) ile verilen potansiyel profilleri altındaki yoğunluklar. (c),(d) de potansiyel profilleri; (a),(b) de ise yoğunluklar görülmektedir. Siyah noktalar FEM çözümünü, kırmızı noktalar ise KGA çözümünü göstermektedir. Farklı belirtilmediyse $V_1 = 40, V_2 = 40$ dır.

Hamiltoniyeni

$$H = -\frac{d^2}{dx_1^2} - \frac{d^2}{dx_2^2} + \frac{Q}{\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + \varepsilon}} \quad (5.2.9)$$

ile veriliyor olsun. KGA ile Hartree Fock (HF) hassasiyetinde çözüm arayalım. Burada ε potansiyeldeki tekilliği ortadan kaldırmak için eklenmiş bir parametredir.

HF yaklaşıklığındaki çözümler

$$\psi(x_1, x_2) = \phi_1(x_1)\phi_2(x_2) - \phi_2(x_1)\phi_1(x_2) \quad (5.2.10)$$

ile verilecektir. Buradaki ϕ ler serbest parçacık çözümleridir ve (5.2.1) ile verilebilir.

Bu yolla oluşturulmuş olan çözümler problemin sınır koşullarını sağlayacaktır. Problem, 4 parametrelili bir optimizasyon problemidir. Eğer parametre optimizasyonu ile çalışan yöntemlerden biri kullanılacak olsaydı, yöntemle enerjisi minimum yapan $x_1, x_2, \sigma_1, \sigma_2$ aranacaktı.

Sistemin enerjisi olan nicelik, dalga fonksiyonu (ψ) (5.2.1) ve Hamiltoniyen (H) (5.2.9) ile verilmek üzere (5.2.9) dan hesaplanırsa şu elde edilecektir:

$$E = -2E_k + E_p \quad (5.2.11)$$

(5.2.11)deki terimler aşağıda verilmiştir.

$$E_k = K_1 + K_2 - J(K_3 + K_4)$$

$$E_p = 2(P_1 - P_2)$$

$$K_1 = \left\langle \phi_1(x_1) \left| \frac{d^2}{dx_1^2} \right| \phi_1(x_1) \right\rangle$$

$$K_2 = \left\langle \phi_2(x_1) \left| \frac{d^2}{dx_1^2} \right| \phi_2(x_1) \right\rangle$$

$$K_3 = \left\langle \phi_1(x_1) \left| \frac{d^2}{dx_1^2} \right| \phi_2(x_1) \right\rangle$$

$$K_4 = \left\langle \phi_2(x_1) \left| \frac{d^2}{dx_1^2} \right| \phi_1(x_1) \right\rangle$$

$$J = \langle \phi_1(x_1) | \phi_2(x_1) \rangle$$

$$P_1 = \left\langle \phi_1(x_1) \phi_2(x_2) \left| \frac{Q}{\sqrt{(x_1-x_2)^2+\varepsilon}} \right| \phi_1(x_1) \phi_2(x_2) \right\rangle$$

$$P_2 = \left\langle \phi_1(x_1) \phi_2(x_2) \left| \frac{Q}{\sqrt{(x_1-x_2)^2+\varepsilon}} \right| \phi_1(x_2) \phi_2(x_1) \right\rangle$$

KGA ile (5.2.11) enerjisini en küçük yapan (5.2.1) dalga fonksiyonları bulunur ve bunların (5.2.10) da yazılmasıyla elde edilen HF tipi dalga fonksiyonu kullanılarak

$$\rho(x) = \int dx_1 |\psi(x, x_1)|^2 \quad (5.2.12)$$

ile verilen parçacık yoğunluğu elde edilebilir.

(5.2.9) ile verilen Hamiltoniyedeki $Q = 0$ sistemin enerji profili serbest iki parçacığın enerji profilidir ve Q nun küçük değerleri için serbest iki parçacığın enerji profiline yakındır. Ancak Q nun büyük değerleri için sistemin enerji profili değişecektir.

Sistemin toplam enerji ifadesinden ve HF tipi çözüm ifadesinden görülebilir ki, enerji profili $(x_1, \sigma_1) \rightarrow (x_2, \sigma_2)$ dönüşümü altında değişmez kalır. Dolayısıyla ¹⁰ sistemin enerji profilini çıkartmak için (x_1, σ_1) yi sabitleyip enerjinin (x_2, σ_2) ye göre değişimine bakmak yeterli olacaktır.

Sistemin enerji profili Şekil 5.16 dan görülebilir¹¹.

Programdaki parametreler şunlardır:

- Her popülasyondaki eleman sayısı : 200
- Sayısal işlemler nokta sayısı : 100
- Sistem sınırları: $a = 0, 0; b = 1, 0$

¹⁰4 boyutlu parametre uzayında toplam enerjinin bu parametrelere göre değişimi bir grafikte gösterilemez

¹¹enerji profili çıkarılırken enerjinin kinetik kısmındaki integraller analitik olarak alınmış olup potansiyel kısmındaki integraller için Simpson yöntemi kullanılmıştır.

- Mutasyon olasılığı : %1

Programla elde edilen farklı Q değerleri için yoğunluklar Şekil 5.17 den görülebilir.

5.3 İki Boyutlu Sistemlerde KGA

İki boyuttaki belirli bir potansiyel etkisi altındaki tek parçacık problemi tüm optimizasyon algoritmaları ile çözülebilir. Ancak potansiyel profili karmaşıktıkça çözüme ulaşma daha uzun zaman alır. KGA için bu zaman farkı diğer algoritmalarındaki kadar büyük değildir.

5.3.1 Formülasyon

Sistem, uzayın $\Omega = [0, d_x] \times [0, d_y]$ bölgesinde yer alan $V(x, y)$ potansiyeli etkisi altındaki tek parçacıklı sistemdir. Sistemin boyutsuz Hamiltoniyeni

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 + V(x, y) \quad (5.3.1)$$

Ara popülasyondan bir sonraki popülasyona hangi elemandan kaç tane seçileceğine karar veren uygunluk fonksiyonu, enerji değeridir ve (2.1.2) ile verilir.

Popülasyon elemanları sistemin sınır koşullarını sağlayan Gaussiyenlerdir.

$$\psi_i(x, y) = A_i \exp\left(-\frac{(x - x_i)^2}{\sigma_{x,i}^2} - \frac{(y - y_i)^2}{\sigma_{y,i}^2}\right) x (d_x - x) y (d_y - y) \quad (5.3.2)$$

burada A_i popülasyondaki i . elemanın normalizasyon katsayısıdır ve

$$A_i = \frac{1}{\sqrt{\langle \psi_i(x, y) | \psi_i(x, y) \rangle}} \quad (5.3.3)$$

ile verilir.

Popülasyondaki i . ve j . elemanın birleşmesi ile yeni elemanlar oluşur.

$$\begin{aligned}\psi_i^{(k+1)}(x, y) &= \psi_i^{(k)}(x, y)St(x, y) + \psi_j^{(k)}(x, y)(1 - St(x, y)) \\ \psi_j^{(k+1)}(x, y) &= \psi_j^{(k)}(x, y)St(x, y) + \psi_i^{(k)}(x, y)(1 - St(x, y))\end{aligned}\quad (5.3.4)$$

burada $St(x, y)$ fonksiyonu

$$St(x, y) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{ax + by + c}{k_c} \right) \right) \quad (5.3.5)$$

ile verilir. $ax + by + c$ birleşme düzlemini tanımlar ve k_c birleşme işleminin keskinliğini verir.

Benzer olarak mutasyon işlemi

$$\psi^{(k+1)}(x, y) = \psi^{(k)}(x, y) + \psi_r(x, y) \quad (5.3.6)$$

ile verilir ve burada da

$$\psi_r(x, y) = B_r \exp \left(-\frac{(x_r - x)^2}{R_x^2} - \frac{(y_r - y)^2}{R_y^2} \right) x (d_x - x) y (d_y - y) \quad (5.3.7)$$

ile tanımlanır.

5.3.2 İki Boyutta Çoklu Potansiyel Kuyusu

Tüm KGA hesaplamaları $[0, 2] \times [0, 2]$ bölgesinde $N_{pop} = 200$ elemanlı popülasyon kullanılarak yapılmıştır. Birleşme ve mutasyon olasılıkları $P_c = 0,70$ ve $P_m = 0,01$ olarak seçilmiştir. Uzay ızgarası 100×100 olarak seçilmiş ve nümerik türev için "five point stencil" yöntemi kullanılmıştır.

Sonuçların kıyaslanacağı FEM de ise üçgen FEM elemanları Lagrange interpolasyon polinomları, p-adaptive yaklaşım kullanılmıştır ve nod sayısı \sim

Tablo 5.2 Model sistem 1 için KGA ve FEM enerji değerleri.

Sistem	Enerji (QGA)	Enerji(FEM)
1(a)	6,4357	6,4338
1(b)	8,2596	8,2578
1(c)	9,1742	9,1700

Tablo 5.3 Model sistem 2 için KGA ve FEM enerji değerleri.

Sistem	Enerji(QGA)	Enerji (FEM)
2(a)	12,6917	12,6903
2(b)	35,9072	35,9053
2(c)	51,2386	51,2362

1000 – 2500 alınmıştır.

5.3.2.1 Dikdörtgen Potansiyel Profili

Birinci model sistem için potansiyel

$$V(x, y) = \sum_{i=1}^M V_i(x, y) \quad (5.3.8)$$

ile tanımlansın, burada

$$V_i(x, y) = \begin{cases} V_i & , \quad x_i^{(i)} < x < x_i^{(f)} \quad \text{ve} \quad y_i^{(i)} < y < y_i^{(f)} \\ V_{ext} & , \quad \text{diğer} \end{cases} \quad (5.3.9)$$

Bu yolla iki ve üç kare kuyu içeren ikinci ve üçüncü model sistemler de oluşturulabilir.

Dalga fonksiyonu karesi ve enerji değerleri Şekil 5.18, 5.19 ve 5.20 ,ile tablo 5.2, 5.3 ve 5.4 den görülebilir.

Tablo 5.4 Model sistem 3 için KGA ve FEM enerji değerleri.

Sistem	Enerji(QGA)	Enerji(FEM)
3(a)	12,6552	12,6547
3(b)	36,1238	36,1223
3(c)	51,4152	51,4143

Tablo 5.5 Model sistem 4 için KGA ve FEM enerji değerleri.

Sistem	Enerji (QGA)	Enerji (FEM)
4(a)	6,4782	6,4765
4(b)	9,5391	9,5377
4(c)	7,6987	7,6972

5.3.2.2 Dairesel Potansiyel Profili

Dördüncü model sistem için (x_i, y_i) merkezli ve r_i yarıçaplı dairesele potansiyel bölgeleri:

$$V_i(x, y) = \begin{cases} V_i & , r < r_i \\ V_{ext} & , \text{diğer} \end{cases} \quad (5.3.10)$$

ile oluşturulabilir. Burada $r = \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2}$, i . dairesele bölgenin merkezinden olan uzaklıktır.

Sonuçlar Şekil 5.21 ve tablo 5.5 den görülebilir.

5.3.2.3 Herhangi bir geometriye sahip potansiyel

Beşinci model sistemdeki potansiyel, köşeleri $(0, 0; 0, 0), (0, 0; 2, 0), (1, 0; 1, 0)$ da olan ve içindeki potansiyel $V_1 = 100, 0$ olan üçgen, köşeleri $(0, 8; 0, 4), (0, 8; 0, 8), (1, 2; 0, 4), (1, 2; 0, 8)$ de olan değişken V_2 potansiyelli kare ve potansiyeli $V_{ext} = 50, 0$ olan geri kalan bölgeden oluşmuştur. Sonuçlar Şekil 5.22 ve tablo 5.6 dan görülebilir.

Tablo 5.6 Model sistem 5 için KGA ve FEM enerji deęerleri.

Sistem	Enerji (QGA)	Enerji (FEM)
5(a)	57,5083	57,5069
5(b)	56,9765	56,9746
5(c)	53,5277	53,5242

5.4 Atomsal veya Moleküler Hesaplar

Orbital, atom çekirdeęi etrafındaki belirli bir enerjiye ve uzaysal daęılıma sahip elektronu tanımlayan fonksiyondur. Spin de düşünöldüęünde bir orbital ile, biri ařaęı biri yukarı spinli olmak üzere iki elektron betimlenebilir. Yani belirli bir atoma ait orbitaller verildięinde atom çekirdeęi etrafındaki tüm elektronlar betimlenmiř olur. Atomlara dair hesaplarda, ilgili atom için yazılan Schrödinger denklemi her elektronun kinetik enerji terimlerini, her elektronun çekirdekle etkileřim terimlerini ve her elektronun kendi aralarındaki etkileřim terimlerini içerir. Bu yüzden çok elektronlu atomlar için analitik hesap yapmak imkansızdır. Atomik orbitaller Slater orbitalleri ile verilebilir.

Moleküler orbitaller, molekölü oluřturan atomik orbitallerden oluřturulur¹². Moleküler orbitaller atomlar arası etkileřimden dolayı atomik orbitallerden farklı olacaktır. Molekölü oluřturan atomların dıř yörüngelerindeki elektronları betimleyen orbitallerin örtüřmesi elektronların uzaysal daęılımını ve enerjisini tek tek atomlarınkinden farklılařtıracaktır. Molekölü oluřturan atomlar arası baęlar bu řekilde betimlenir.

Hidrojen atomu atomik orbitallerin formu

$$\phi = f_{n-1}(r)r^{-l}P_l(x, y, z) \exp(-r/n) \quad (5.4.1)$$

řeklinindedir, burada n, l, m kuantum sayıları, f, r nin $(n-1)$. mertebeden polinomu ve P de (x, y, z) nin l . mertebe polinomudur.

¹²Linear Combination of Atomic Orbitals - LCAO

5.4.1 Baz Kümeleri

(5.4.1) formundaki orbitaller Hidrojen atomu için geçerli iken aşağıdaki baz fonksiyonları ile yazıldıklarında herhangi bir atomun orbitallerini iyi bir biçimde tanımlayabilir.

$$\phi_{\zeta}(\vec{r}) = r^m P_l(x, y, z) \exp \left[-\zeta \left(\vec{r} - \vec{R}_A \right) \right] \quad (5.4.2)$$

Burada \vec{R}_A ilgili atomun çekirdeğinin konum vektörü, \vec{r} ilgili orbitaldeki elektronun konum vektörü, P ise Hidrojen atomu orbitali için tanımlanan fonksiyondur. Bir atom için STO elde edilmesinin farklı yöntemleri vardır. Bu yöntemlerden biri atom enerjisinin minimumunu veren ζ yı optimizasyon algoritmaları ile bulmak, yani ζ ya göre tek parametrelili bir optimizasyon yapmaktır.

STO, atom için HF yaklaşıklığında çözüm verebilir. Ancak STO, çözüm sırasında karşımıza çıkan çok merkezli çok elektron integrallerinin alınması için hesap zamanını uzatır. Bunun için STO temsil etmek üzere çok merkezli integrallerin daha kısa zamanda alınabileceği başka fonksiyonlar kullanılır. En yaygın kullanılan fonksiyonlar Gaussiyen fonksiyonlardır, yani Gaussiyen tipteki orbitaller (GTO)

$$\phi_{\alpha}(\vec{r}) = P_M(x, y, z) \exp \left[-\alpha \left(\vec{r} - \vec{R}_A \right)^2 \right] \quad (5.4.3)$$

ile verilir. Buradaki P_M fonksiyonu küresel harmoniklerdir. Görülebilir ki iki GTO çarpımı yine bir GTO dur, bu da iki merkezli integralin bir merkezli integrale indirgenmesi yani hesap zamanının kısılması anlamına gelir.

Bu yüzden genellikle atomu tanımlayan dalga fonksiyonuna iyi bir yaklaşım olan STO, GTO kullanılarak temsil edilir. Ancak iki orbitalin davranışlarının birbirinden farklı olması dolayısıyla bir STO bir GTO ile temsil edildiğinde genelde iyi sonuç vermez. Bu yüzden STO birden fazla GTO ile temsil edilir. Bu

temsiliyet basitçe

$$\phi^{(STO)} = \sum_{i=1}^N A_i \exp(-\alpha_i r^2) \quad (5.4.4)$$

şeklinde yazılabilir. Belli bir STO için (5.4.4) deki A_i, α_i bulunması en küçük kareler yöntemiyle olabilir.

STO temsili için (5.4.4) de olduğu gibi N tane GTO kullanılıyorsa bu baz kümesine $STO - NG$ denir. Hidrojen atomu için için STO, STO-1G ve STO-3G fonksiyonları Şekil 5.23 den görülebilir.

Moleküler orbital oluşturulurken her moleküler orbital atomik orbitallerin lineer birleşimi olarak yazılır. $2n$ elektronlu bir molekülde n tane moleküler orbital olacaktır. Örneğin CH_4 molekülüne ait moleküler orbitaller için 5 i C atomunun orbitalleri, 4 ü de 4 H atomunun birer atomik orbitali olmak üzere toplam 9 baz fonkiyonu ile yazılacaktır. C atomunun orbitalleri $1s, 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$ ve H atomunun tek orbitali $1s$ dir. Böylece CH_4 için 18 elektronu betimleyen 9 tane moleküler orbital yazılabilir. Böylece, 6 sı C atomundan 4 ü H atomundan olmak üzere toplam 10 elektronu olan molekül için dolu ve boş olan tüm orbitaller tanımlanmış olacaktır.

Moleküler yapı çözümlemesinde kullanılan programlar oldukça gelişmiştir ve bunlardan biri olan Spartan (Wavefunction Inc., 2002) dan $H - I$ arasındaki 53 atoma ait (5.4.4) deki A_i, α_i katsayıları bulunabilir.

5.4.2 Hidrojen Atomu

En basit atom olan tek elektronlu Hidrojen atomu için Hamiltoniyen

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r} \quad (5.4.5)$$

ile verilir. Hamiltoniyen analitik çözümü olan bir Hamiltoniyendir.

Tablo 5.7 Hidrojene ait (5.4.4) katsayıları (Wavefunction Inc., 2002).

α_i	A_i
3,42525091	$0,15432897(2\alpha_1/\pi)^{(3/4)}$
0,62391373	$0,53532814(2\alpha_2/\pi)^{(3/4)}$
0,16885540	$0,44463454(2\alpha_3/\pi)^{(3/4)}$

Hidrojen atomu KGA çözümünde STO ya da GTO ile oluşturulan popülasyon elemanları kullanılabilir. Popülasyon elemanlarının bu şekildeki seçimi hesap zamanında önemli bir fark yaratmaz. Programdaki parametreler şunlardır:

- Her popülasyondaki eleman sayısı : 200
- Sayısal işlemlerdeki nokta sayısı : 200
- Sistem $a = 0,0; b = 4,0$
- Olasılıklar $P_c = \%70, P_m = \%1$

KGA programının belirli adımlarında rasgele rasgele seçilen 3 eleman ve Hidrojen için kesin çözüm Şekil 5.24 den görülebilir.

5.4.3 Moleküler Hesaplar

Prensipite, uygun pseudopotansiyel oluşturulduktan sonra KGA herhangi bir molekül sistemine uygulanabilir.

Pseudopotansiyel oluşturmak için (Bachelet, Hamann ve Schlüter, 1982) den faydalanılabilir. Bu çalışmada Hidrojenden Plutonyuma kadar olan atomların pseudopotansiyellerini oluşturmak için formülasyon geliştirilmiş ve formülasyondaki parametreler ilgili atomlar için tablanmıştır. Ayrıntılar konu dışı olmakla birlikte formülasyon özetle şöyledir:

$$V_{core}(r) = -\frac{Z_v}{r} \left[\sum_{i=1}^2 c_i^{core} erf \left[(\alpha_i^{core})^{1/2} r \right] \right] \quad (5.4.6)$$

$$\Delta V_l^{ion}(r) = \sum_{i=1}^3 (A_i + r^2 A_{i+3}) \exp(-\alpha_i r^2) \quad (5.4.7)$$

ΔV_l^{so} da (5.4.7) ile aynı ifadeyle elde edilir, yalnızca ifadedeki katsayılar farklıdır. İlgili atomun pseudopotansiyeli

$$V_{pseudo}(r) = V_{core}(r) + \Delta V_l^{ion} + \Delta V_l^{so} \quad (5.4.8)$$

dan bulunur. Formülasyondaki c_i, α_i katsayıları makalede tablolanmış ve A_i katsayıları bunlar yardımıyla elde edilir¹³.

Tüm bunlardan sonra Hidrojenden Plutonyuma kadar herhangi bir atomun pseudopotansiyeli tablolar ve formülasyon yoluyla elde edilebilir.

Lineer bir molekül olan H_2 molekülü çekirdekleri \vec{R}_A ve \vec{R}_B de bulunan iki Hidrojen atomundan oluşur. Her bir atom için birer atomik orbital ile iki moleküler orbital elde edilir. Bu orbitallerden düşük enerjili olanda iki elektron bulunacak diğer orbitalde ise elektron bulunmayacaktır. Molekülün toplam enerjisi, bağ uzunluğu gibi nicelikleri KGA ile kolayca elde edilebilir. Hesapta moleküler orbitaller Gaussiyen fonksiyonlarla oluşturulacak ve bir çekirdeğin konumu (\vec{R}_A) sabitlenerek diğer çekirdeğin konumu olan \vec{R}_B değiştirilerek en küçük enerjiyi veren bağ uzunluğu aranacaktır.

Yapı KGA-MC (SA) gibi karışım algoritmalarıyla çözülebileceği gibi KGA-GA karışım algoritma ile de çözülebilir.

KGA-MC karışım algoritmada, \vec{R}_B ye bir değer atanıp KGA ile minimum enerjiyi veren moleküler orbital bulunur ve \vec{R}_B rasgele değiştirilerek yine minimum enerjiyi veren orbital bulunur. Bu iki değer kıyaslanmasıyla \vec{R}_B deki değişim kabul edilir ya da reddedilir. Bu şekilde en düşük enerjiyi veren \vec{R}_B ve bu değerdeki enerji elde edilebilir.

KGA-GA karışım algoritması ile ise olası \vec{R}_B ler kodlanır ve her bir \vec{R}_B ye

¹³(5.4.4) deki A_i, α_i katsayılarıyla karıştırılmamalıdır

Tablo 5.8 KGA-GA karışım algoritma ile H_2 molekülü iyonizasyon enerjisi değeri. (a)HF yaklaşımı (b)Kesin sonuç (Szabo ve Ostlund, 1982)

Molekül	$E (H)$	$E (H)^{(a)}$	$E (H)^{(b)}$
H_2	0,591	0,595	0,584

Tablo 5.9 KGA-GA karışım algoritma ile H_2 molekülü bağ uzunluğu değeri. (a)HF yaklaşımı (b)CI yaklaşımı (Szabo ve Ostlund, 1982) (c)Kesin Sonuç (Kolos ve Wolniewicz, 1968)

Molekül	$L (a_0)$	$L (a_0)^{(a)}$	$L (a_0)^{(b)}$	$L (a_0)^{(c)}$
H_2	1,397	1,385	1,396	1,401

karşılık gelen uygunluk değeri KGA ile ilgili \vec{R}_B için elde edilen minimum enerji olarak alınır. Olası \vec{R}_B lere sahip moleküllerden oluşan popülasyon için standart GA uygulanır. Evrim süreci sonundaki popülasyon içinde en küçük enerjili \vec{R}_B ye sahip moleküller bulunacaktır.

Programda KGA-GA karışım algoritması ile Hidrojen atomu için KGA çözümündeki parametreler kullanılmıştır, programın GA kısmında ise $[0, 2]$ aralığında bağ uzunluğuna sahip moleküllerden oluşan 100 elemanlı popülasyon kullanılmıştır. Elemanlar 11 bit uzunluğundaki genlerdir, dolayısıyla bağ uzunluğu hassasiyeti 10^{-3} dür. Sonuçlar aşağıdaki tablolardan görülebilir.

Bu yöntemle prensipte daha karmaşık yapıların da optimizasyonu yapılabilir.

5.5 Kuantum Noktada parabolik kuşatma altında Ekziton

Kuantum noktalarda ekziton probleminde, kuşatma potansiyelini modellemek için kare kuyu potansiyeli sıkça kullanılmıştır. Ancak gösterilmiştir ki kuantum noktadaki ekzitonun kuşatma potansiyelini harmonik potansiyel daha iyi modellemektedir (Kumar, Laux ve Stern, 1990).

Parabolik kuantum noktadaki ekziton için etkin Hamiltoniyen

$$H = -\frac{1}{2m_h}\nabla_h^2 - \frac{1}{2m_e}\nabla_e^2 + \frac{1}{2}m_h\omega^2r_h^2 + \frac{1}{2}m_e\omega^2r_e^2 - \frac{1}{\epsilon r_{eh}} \quad (5.5.1)$$

ile verilir. Buradaki terimler atomik birimlerdedir ve m_e, m_h elektron ve boşluk etkin kütlesi, r_e, r_h elektron ve boşluk yer vektörü boyu, r_{eh} elektron boşluk arası uzaklık, ϵ dielektrik sabitidir. Hamiltoniyen kütle merkezi ve bağıl koordinatlar cinsinden yazıldığında, kütle merkezi ve bağıl koordinatlara bağıl kısımlar ayrılabilir, dolayısıyla çözüm bu iki koordinatla ilgili fonksiyonların çarpımı şeklinde yazılabilir.

$$H = -\frac{1}{2M}\nabla_R^2 + \frac{1}{2}M\omega^2R^2 - \frac{1}{2\mu}\nabla_r^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2r^2 - \frac{1}{\epsilon r} \quad (5.5.2)$$

Burada,

$$M = m_e + m_h, \quad \mu = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h} \quad (5.5.3)$$

$$\vec{R} = \frac{m_e \vec{r}_e + m_h \vec{r}_h}{M}, \quad \vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_h \quad (5.5.4)$$

ile verilir. (5.5.2) deki ilk iki terim kütle merkezi ile ilgili, diğer üç terim ise sadece sadece bağıl koordinatlarla ilgilidir.

$$\begin{aligned} H_R &= -\frac{1}{2M}\nabla_R^2 + \frac{1}{2}M\omega^2R^2 \\ H_r &= -\frac{1}{2\mu}\nabla_r^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2r^2 - \frac{1}{\epsilon r} \end{aligned} \quad (5.5.5)$$

Dolayısıyla $H = H_R + H_r$ şeklinde yazılabilen (5.5.2) Hamiltoniyeni ile yazılan Schrödinger denklemi çözümü olan $\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h)$ fonksiyonu

$$\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \chi(\vec{R}) \phi(\vec{r}) \quad (5.5.6)$$

şeklinde yazılabilir. Burada χ , (5.5.5) deki ilk Hamiltoniyen ile yazılan Schrödinger denkleminin çözümü, ϕ ise (5.5.5) deki ikinci Hamiltoniyen ile yazılan Schrödinger denkleminin çözümü olan fonksiyonlardır.

Problem,

$$L = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}} \quad (5.5.7)$$

şeklinde tanımlanan kuantum nokta büyüklüğü ile

$$a_B^* = \frac{\epsilon\hbar^2}{\mu e^2} \quad (5.5.8)$$

şeklinde verilen etkin Bohr yarıçapı kıyaslanarak iki limit durumunda incelenebilir. $L \ll a_B^*$ güçlü kuşatma limiti, $L \gg a_B^*$ ise zayıf kuşatma limitidir.

Problem, (5.5.6) daki dalga fonksiyonunu oluşturan iki dalga fonksiyonunun bulunmasıyla çözülür. (5.5.5) deki Hamiltoniyenler göz önüne alındığında χ nin 2 boyutlu harmonik salıncı çözümlerine denk geldiği görülebilir. ϕ ise ilgili Hamiltoniyendeki harmonik potansiyel terimi Coulomb teriminden baskın olduğunda (güçlü kuşatma limiti) 2 boyutlu harmonik salıncı çözümleri cinsinden, ilgili Hamiltoniyendeki Coulomb terimi harmonik potansiyel teriminden baskın olduğunda (zayıf kuşatma limiti) 2 boyutlu hidrojenik çözümler cinsinden yazılabilir.

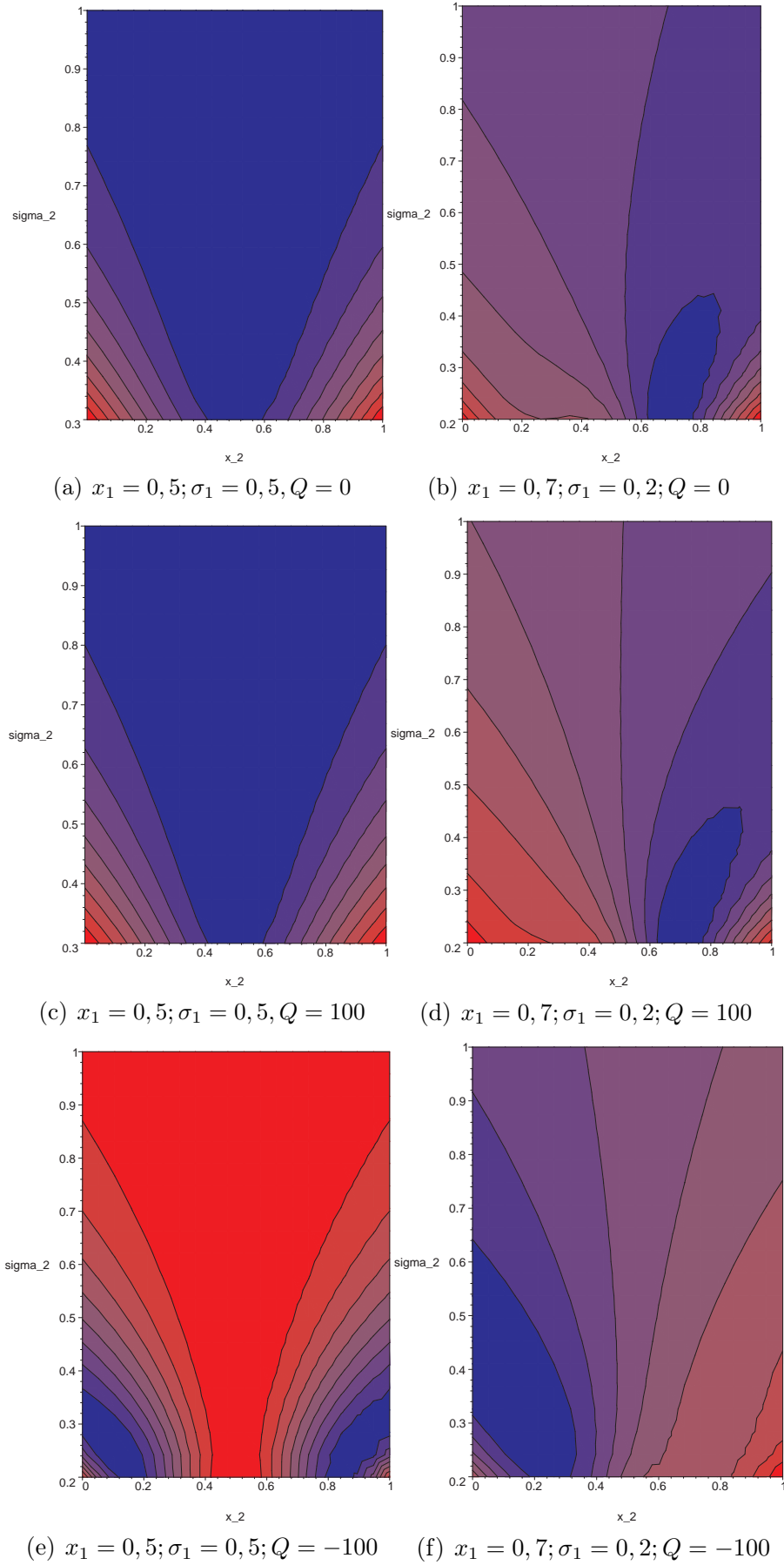
Problem bu haliyle, moleküler sistemlerde olduğu gibi KGA ile çözülebilir. Sistem ve program parametreleri aşağıdaki gibidir:

- Popülasyon eleman sayısı: 200
- Sayısal işlemler nokta sayısı: 200
- Olasılıklar: $P_c = \%70, P_m = \%1$
- Sistem: *GaAs* kuantum nokta
- $m_e = 0.067, m_h = 0.09 \Rightarrow \mu = 0.0384, M = 0.157$
- $\epsilon = 13.1$
- (5.5.8) dan $a_B^* = 18,05nm$
- $E_g = 1.51eV$

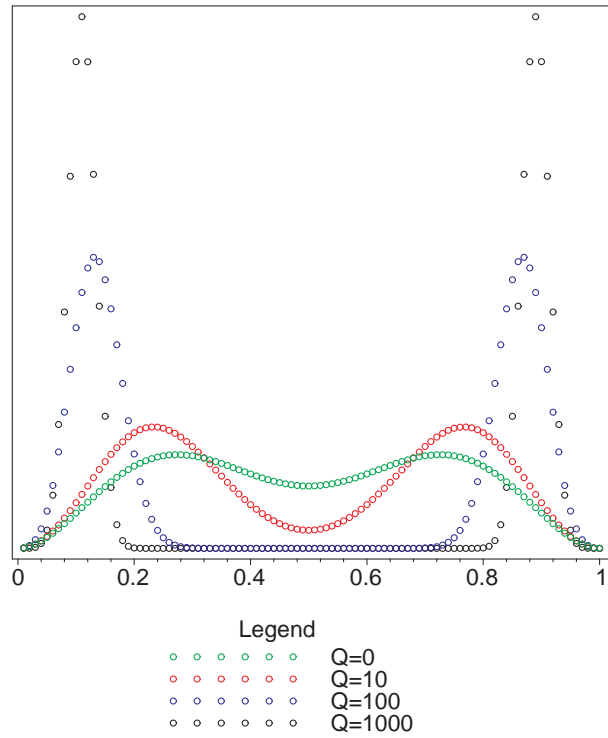
Tablo 5.10 KGA ile *GaAs* kuantum nokta sistemi için taban durumu toplam enerji değerleri

L (nm)	E (meV)	E (meV) ^(a)	E (meV) ^(b)
104,22	-11,99	-11,9961	-11,9961
90,25	-11,93	-11,9340	-11,9364
73,68	-11,80	-11,8092	-11,8085
54,42	-11,49	-11,4922	-11,4918
37,63	-10,70	-10,7061	-10,7184
24,80	-8,62	-8,6012	-8,6417
17,78	-4,80	-4,6818	-4,8476
12,67	3,62	3,7021	3,5626
11,35	8,05	8,1837	8,0327
9,60	17,36	17,4874	17,3321
8,99	22,16	22,2778	22,1128
8,48	27,02	27,1352	26,9604
8,05	31,90	32,0517	31,8690
7,67	36,90	37,0174	36,8384

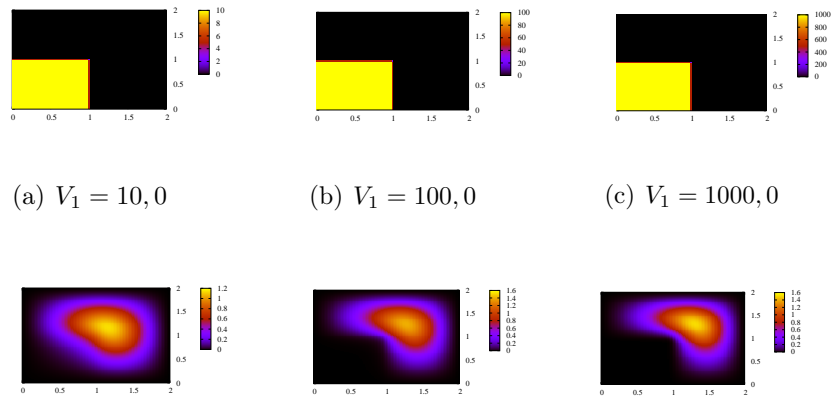
Bu parametreler kullanılarak hesaplanan sistemin toplam enerjisi ile (2.7.2) kullanılarak ekziton bağlanma enerjisi bulunabilir.



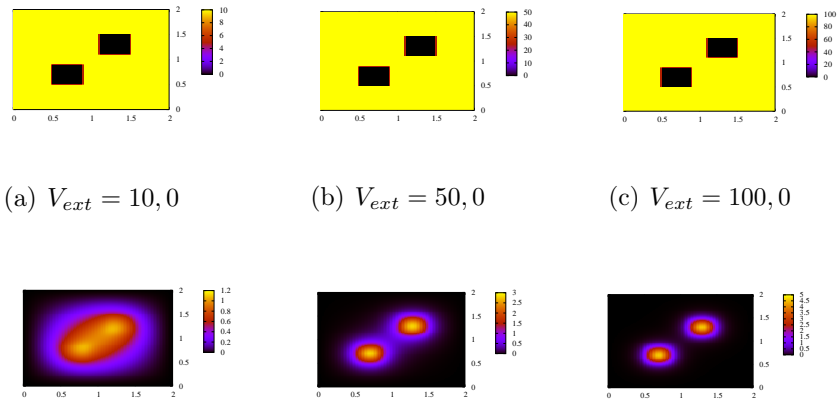
Şekil 5.16 Bölüm 5.2.4 de tanımlanmış olan bir boyutta iki parçacıktan oluşan sistem için enerji profili. $\varepsilon = \sqrt{3}, a = 0, b = 1$ alınmıştır.



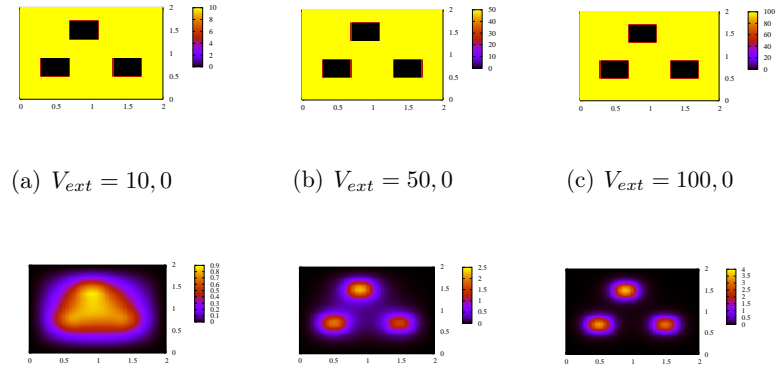
Şekil 5.17 Bölüm 5.2.4 deki sistem için KGA ile elde edilen yoğunluklar.



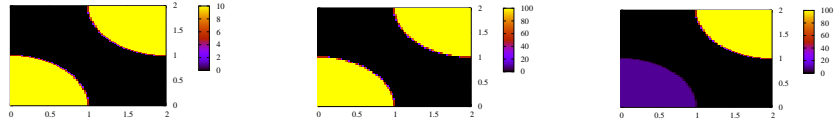
Şekil 5.18 Potansiyeli (5.3.8),(5.3.9) ile verilen sistem için farklı V_i değerleri için dalga fonksiyonu karesi. $M = 1$
 $x_1^{(i)} = 0, 0; x_1^{(f)} = 1, 0; y_1^{(i)} = 0, 0; y_1^{(f)} = 1, 0; V_{ext} = 0, 0$ seçilmiştir.



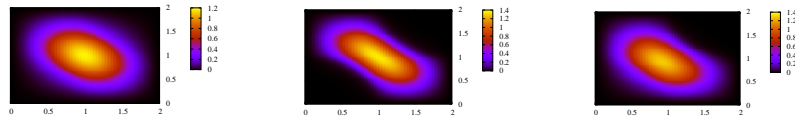
Şekil 5.19 Potansiyeli (5.3.8),(5.3.9) ile verilen sistem için farklı V_{ext} değerleri için dalga fonksiyonu karesi. $M = 2, x_1^{(i)} = 0, 5; x_1^{(f)} = 0, 9; y_1^{(i)} = 0, 5; y_1^{(f)} = 0, 9; x_2^{(i)} = 1, 1; x_2^{(f)} = 1, 5; y_2^{(i)} = 1, 1; y_2^{(f)} = 1, 5; V_1 = V_2 = 0, 0$ seçilmiştir.



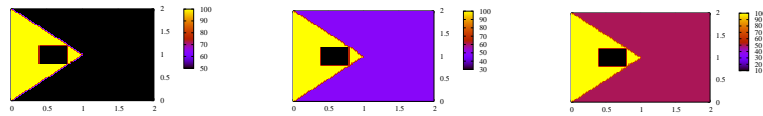
Şekil 5.20 Potansiyeli (5.3.8),(5.3.9) ile verilen sistem için farklı V_{ext} değerleri için dalga fonksiyonu karesi. $M = 3, x_1^{(i)} = 0, 5; x_1^{(f)} = 0, 9; y_1^{(i)} = 0, 3; y_1^{(f)} = 0, 7; x_2^{(i)} = 1, 3; x_2^{(f)} = 1, 7; y_2^{(i)} = 0, 7; y_2^{(f)} = 1, 1; x_2^{(i)} = 0, 5; x_2^{(f)} = 0, 9; y_2^{(i)} = 1, 3; y_2^{(f)} = 1, 7; V_1 = V_2 = V_3 = 0, 0$ seçilmiştir.



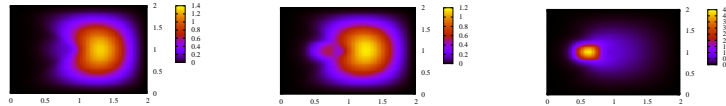
(a) $V_1 = 10, 0; V_2 = 10, 0$ (b) $V_1 = 100, 0; V_2 = 100, 0$ (c) $V_1 = 10, 0; V_2 = 100, 0$



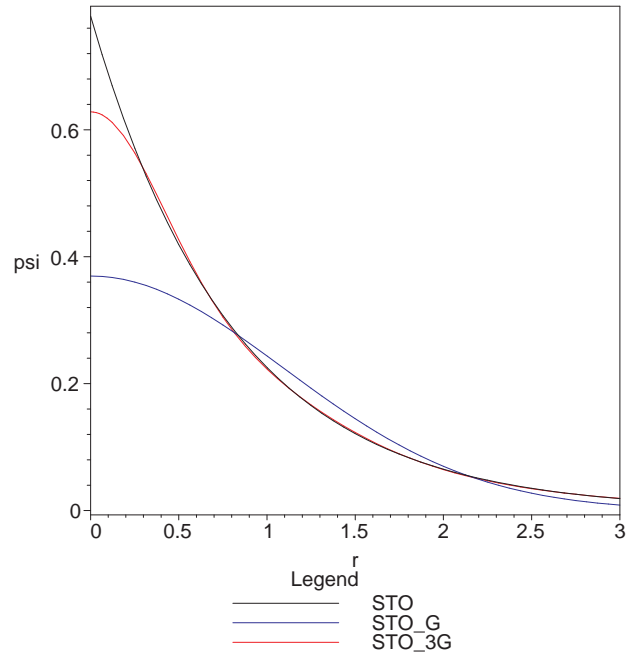
Şekil 5.21 Potansiyeli (5.3.10) ile verilen sistem için farklı V_1, V_2 değerleri için dalga fonksiyonu karesi. $M = 2$ $x_1 = 0, 0; y_1 = 0, 0; x_2 = 2, 0; y_2 = 0, 0$ ve $r_1 = r_2 = 1, 0; V_{ext} = 0, 0$ seçilmiştir.



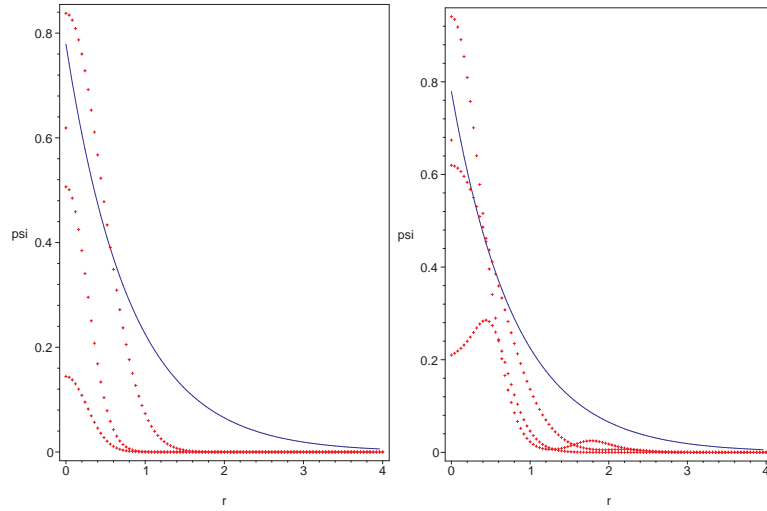
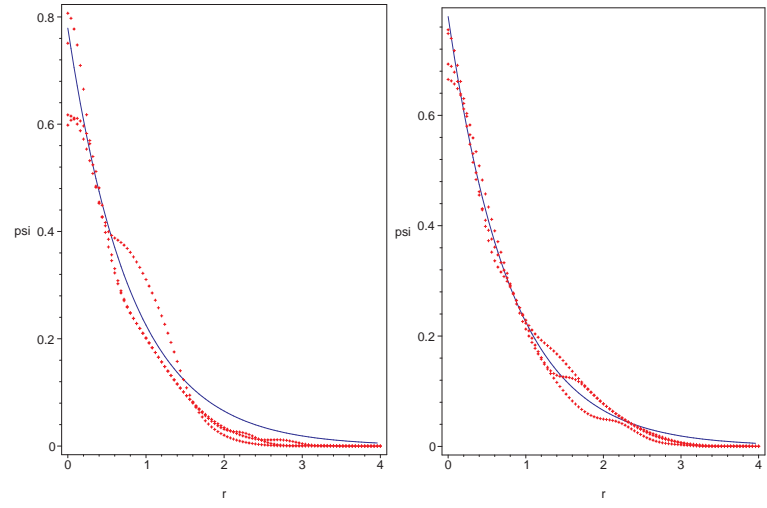
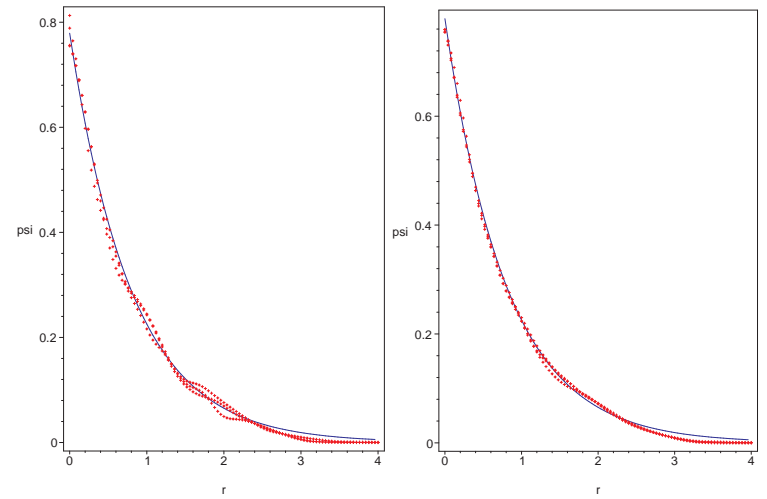
(a) $V_2 = 50, 0$ (b) $V_2 = 30, 0$ (c) $V_2 = 10, 0$



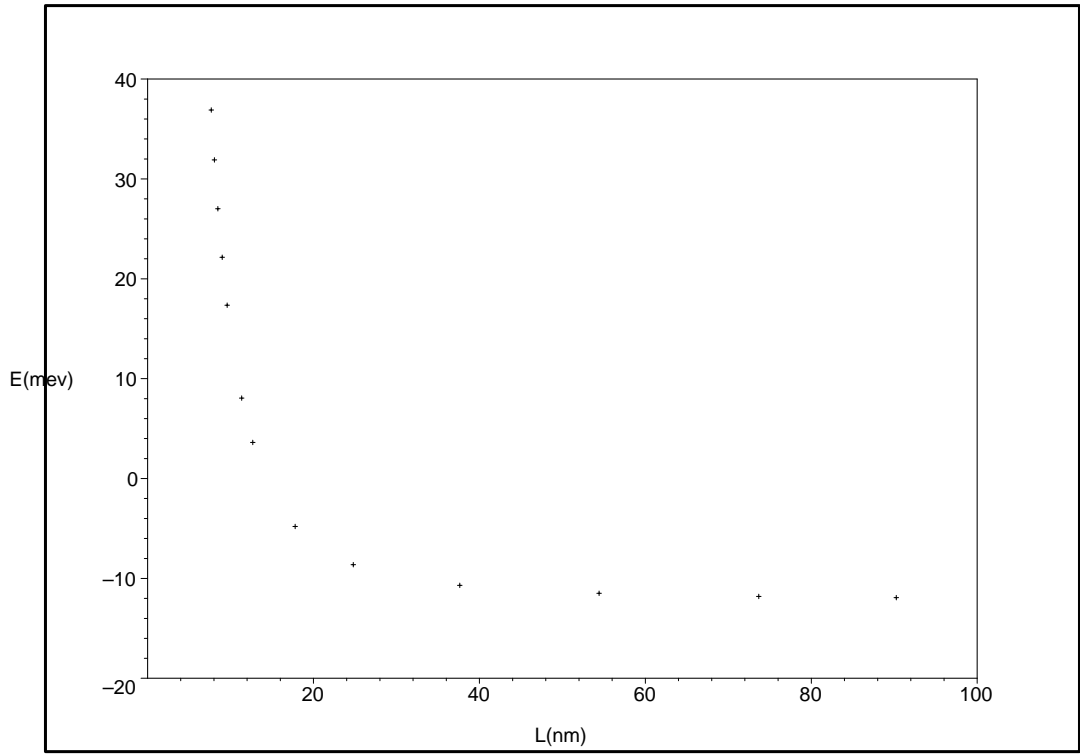
Şekil 5.22 Model sistem 5 için farklı V_2 değerleri için dalga fonksiyonu karesi.



Şekil 5.23 Hidrojen atomu için için STO, STO-1G ve STO-3G dalga fonksiyonları. Hidrojen atomu için (5.4.4) deki katsayılar (Wavefunction Inc., 2002) den alınmıştır.

(a) $N = 0$ (b) $N = 30$ (c) $N = 50$ (d) $N = 100$ (e) $N = 150$ (f) $N = 250$

Şekil 5.24 Hidrojen atomu için kesin çözüm ve N . adımdaki KGA çözümleri.

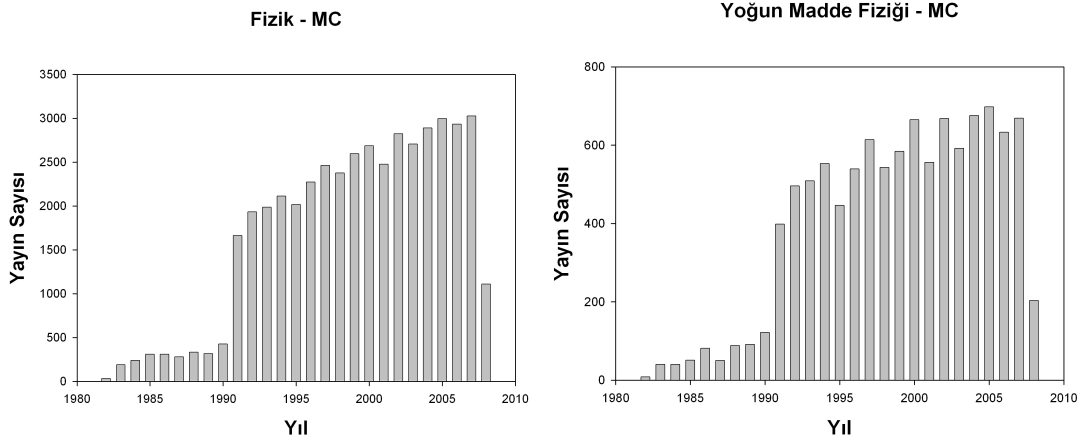


Şekil 5.25 GaAs kuantum noktada parabolik kuşatma altındaki ekzitonun toplam enerjisinin nokta büyüklüğüne göre değişimi

BÖLÜM ALTI

SONUÇ

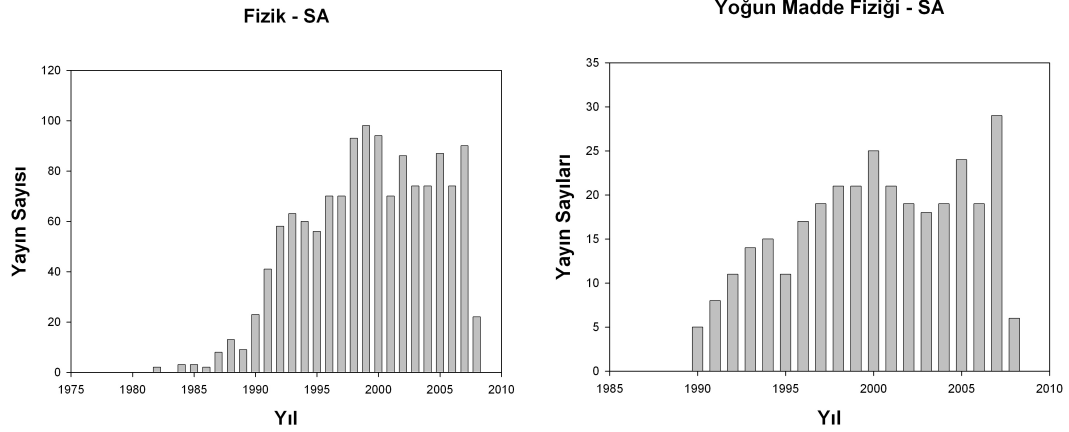
MC, SA ve GA oldukça güçlü optimizasyon yöntemleridir ve bu araçlar gün geçtikçe daha da gelişmekte ve temel bilimlerin çeşitli alanlarında gittikçe artan kullanım alanlarına sahip olmaktadır. 2008 yılı ortaları için "science citation index" den alınan veriler bu gerçeği daha da iyi gözler önüne sermektedir.



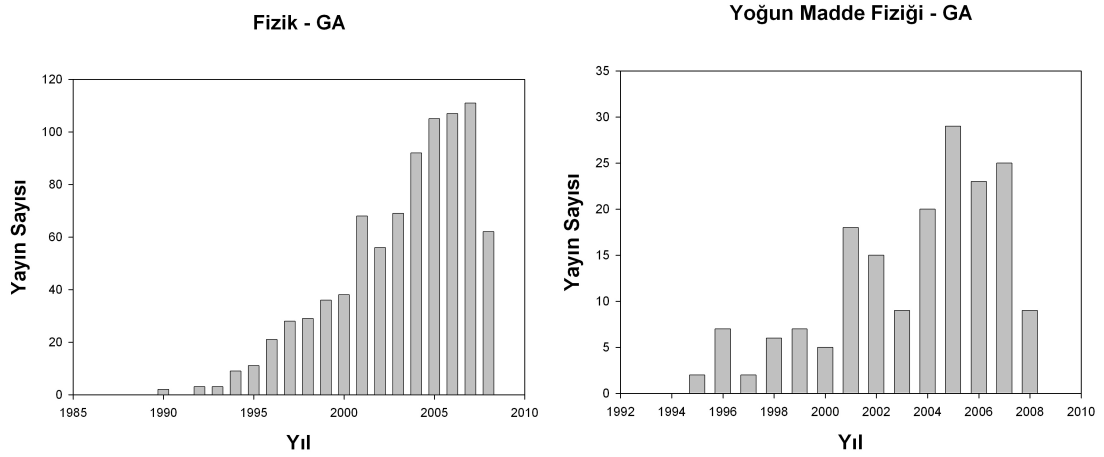
Şekil 6.1 2008 yılı ortalarına kadar fizik ve özelde yoğun madde fiziğinde MC yöntemi içeren yayın sayılarının yıllara göre değişimi

Şekil (6.1) den görüldüğü gibi MC fizik ve yoğun madde fiziğinde oldukça yaygın bir biçime kullanılmaktadır. Şüphesiz bilgisayar teknolojisindeki değişimle ilgili olarak sayılar, 1990 larda birden artmaya başlamıştır. Bununla birlikte son yıllarda yöntemin kullanılış artış hızında azalma görünmektedir. Benzer durumun SA algoritmalarının kullanımı için de geçerli olduğu Şekil (6.2) den görülebilir.

Ancak durum GA için farklıdır. GA yönteminin fizikteki kullanımı özellikle 2000 sonrası daha hızlı artmaya başlamıştır. Yöntemin tüm temel bilimlerdeki kullanımının ise üstel biçimde arttığı Şekil (6.4) den görülebilir. Dolayısıyla denilebilirki GA ve GA temelli algoritmaların fizikte ve özelde yoğun madde fiziğindeki kullanımı önümüzdeki dönemde bugüne kadar olduğundan daha da hızlı artacaktır. Bu yüzden, bir yandan bu araçların kullanılabilirliğini gösterirken diğer yandan da bu araçların geliştirilmesi gereklidir.



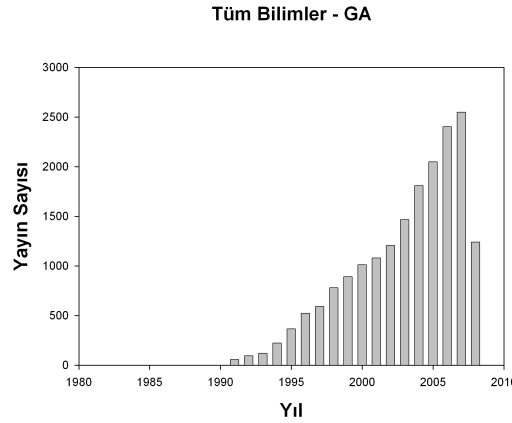
Şekil 6.2 2008 yılı ortalarına kadar fizik ve özalde yoğun madde fiziğinde SA yöntemi içeren yayın sayılarının yıllara göre değişimi



Şekil 6.3 2008 yılı ortalarına kadar fizik ve özalde yoğun madde fiziğinde GA yöntemi içeren yayın sayılarının yıllara göre değişimi

Tez çalışmasının ilk üç bölümünde geleneksel optimizasyon algoritmalarından MC ve SA tanıtılmış bu algoritmaların yoğun madde fiziğindeki sistemlere uygulaması verilmiştir. Dördüncü bölümde GA tanıtılmış ve yine fizikteki uygulamalarına değinilmiştir. Bölüm beşte ise GA yönteminin, sistemlerin kuantum mekaniksel çözümlerine uyarlanmış hali olan KGA tanıtılarak bu güne kadar yapılmış olunan çalışmalara değinilmiş ve yöntem daha önce uygulanmamış olunan yeni bazı problemlere uygulanmıştır.

Bölüm 5.2 de SA, GA ve KGA yöntemlerinin karmaşık potansiyel profillerindeki tek parçacıklı sistemlere uygulanmasından görülmektedir ki, KGA bu problemler için geleneksel optimizasyon algoritmalarına göre üstündür. Enerji değerleri ve olasılık profilleri FEM ile elde edilenlere oldukça yakındır. Yani



Şekil 6.4 2008 yılı ortalarına kadar bilgisayar bilimleri hariç olmak üzere tüm temel bilimlerde GA yöntemi içeren yayın sayılarının yıllara göre değişimi

KGA sistemin niceliksel ve niteliksel betimlemesini iyi bir şekilde yapabilmektedir. Bununla birlikte genetik algoritmanın çalışıyor olmasının altında yatan geometrik yorum olan Schemata Teoremi'nin (Holland, 1975) KGA için geliştirilmesi oldukça faydalı olacaktır.

Yöntemin kuantum mekaniksel problemlerdeki kullanışlılığı, optimizasyondaki parametre bağımlılığını esnetmesindedir. Geleneksel algoritmalarda optimizasyon, bazı parametreler ile formu belli olan fonksiyonlar için bu parametreler üzerinden yapılmaktadır. Oysa KGA da optimizasyonun doğrudan fonksiyon üzerinden yapılıyor oluşu, parametrik formda verilemeyen bazı fonksiyonların betimlediği davranışları elde etmeye yarar. Sonuçta elde edilecek olan fonksiyon parametrik formda verilebiliyor olsa bile, bu problemlerde de KGA geleneksel optimizasyon algoritmalarına göre daha hızlı çalışır.

Bölüm 5.2.4 de bir boyutta iki parçacıktan oluşan sistem için de KGA'nın çalıştığı yapılan incelemede yeniden görülmüştür. Bu durum (Grigorenko ve Garcia, 2001) de de rapor edilmiştir.

KGA'nın literatürde henüz olmayan uygulamaları iki ve üç uzay boyutlu sistemler ile moleküler uygulamalardır. Bölüm 5.3 de yöntem iki boyutlu

sistemlereki karmaşık potansiyel profillerinde tek parçacıklı sisteme uygulanmış ve iyi bir şekilde çalıştığı, sonuçlar FEM sonuçlarıyla kıyaslanarak gösterilmiştir. Yöntem, karmaşık potansiyel profillerinde sistemin betimlemesini niteliksel ve niceliksel yönden iyi bir şekilde yapabilmektedir.

Yöntemin atom ya da moleküler hesaplarda da kullanılabilirliği basit yapılar için gösterilmiştir. Prensip, uygun pseudopotansiyel kullanılarak karmaşık yapıdaki örgü yapıları bu yöntemle incelenebilir, örgü optimizasyonu problemleri KGA ile, diğer optimizasyon yöntemlerine göre daha etkin bir biçimde yapılabilir. Son olarak yöntem ile ekziton problemi ele alınmış ve literatürdeki en iyi sonuçlarla örtüşen sonuçlar verdiği görülmüştür.

KAYNAKLAR

- Allen, M.P. ve Tildesley, D.J. (1989). *Computer Simulation of Liquids*. Oxford: Oxford University Press.
- Bachelet, G. Hamann, D.R. ve Schlüter, M. (1982). Pseudopotentials that work: From H to Pu. *Physical Review B*, 26 (8), 4199-4228.
- Bastard, G., Mendez, E.E., Chang, L.L. ve Esaki, L. (1982). Exciton binding energy in quantum wells. *Physical Review B*, 26 (4), 1974-1979.
- Bazterra, V. E., Oña, O., Caputo, M. C., Ferraro, M. B., Fuentealba, P. ve Facelli, J. C. (2004). Modified genetic algorithms to model cluster structures in medium-size silicon clusters, *Physical Review A*, 69, 053202-053208.
- Blum, V., Hart, G. L. W., Walorski, M. J. ve Zunger, A. (2005). Using genetic algorithms to map first-principles results to model Hamiltonians: Application to the generalized Ising model for alloys, *Physical Review B*, 72, 165113-165125.
- Born, M. ve Oppenheimer, R. (1927). Zur quantentheorie der molekeln. *Annalen der Physik (Leipzig)*, 389 (20), 457-484.
- Branis, S.V., Cen, J. ve Bajaj, K.K. (1991). Effect of magnetic fields on exciton binding energies in type-II GaAs-AlAs quantum-well structures. *Physical Review B*, 44 (20), 11196-11202.
- Cancio, A. ve Chang, Y. (1995). Polyexcitons and Bound Multiple Excitons in Semiconductors Studied by Quantum Monte Carlo Methods. *Chinese Journal of Physics*, 33 (4), 335-361.
- Ceperley, D.M. ve Pollock, E.L. (1992). *Monte Carlo Methods in Theoretical Physics*. ETS Editrice, Pisa.

- Cen, J., Branis, S.V. ve Bajaj, K.K. (1991). Exciton binding energies in finite-barrier type-II quantum-well structures in a magnetic field. *Physical Review B*, 44 (23), 12848-12856.
- Chuang, F.-C., Wang, C. Z. ve Ho, K. H. (2006). Structure of neutral aluminum clusters Al_n ($2 \leq n \leq 23$) Genetic algorithm tight-binding calculations, *Physical Review B*, 73, 125431-125437.
- Deaven, D. M. ve Ho, K. M. (1995). Molecular Geometry Optimization with a Genetic Algorithm, *Physical Review Letters*, 75, 288-291.
- Dong, X., MingWang, G. ve Blaisten-Barojas, E. (2004). Tight-binding model for calcium nanoclusters: Structural, electronic, ve dynamical properties, *Physical Review B*, 70, 205409-205418.
- Feng, Y.P., Tan, H.S. ve Spector, H.N. (1995). Quantum well excitons in an electric field: two versus three dimensional behavior. *Superlattices and Microstructures*, 17 (3), 267-272.
- Fock, V. (1930). Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 61 (1-2), 126-148.
- Garzón, I. L., Michaelian, K., Beltrán, M. R., Posada-Amarillas, A., Ordejón, P., Artacho, E., Sánchez-Portal, D. ve Soler, J. M. (1998). Lowest Energy Structures of Gold Nanoclusters, *Physical Review Letters*, 81, 1600-1603.
- Goldberg, D.E. (2005). *Genetic Algorithms in Search, Optimization, & Machine Learning*. Addison-Wesley.

- Grigorenko, I. ve Garcia, M.E. (2000). An evolutionary algorithm to calculate the ground state of a quantum system. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications: Statistical Mechanics and its Applications*, 284 (1-4), 131-139.
- Grigorenko, I. ve Garcia, M.E. (2001). Ground-state wave functions of two-particle systems determined using quantum genetic algorithms. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 291 (1-4), 439-448.
- Grigorenko, I. ve Garcia, M.E. (2002). Calculation of the partition function using quantum genetic algorithms. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 313 (3-4), 463-470.
- Hamann, D.R., Schlüter, M. ve Chiang, C. (1979). Norm-Conserving Pseudopotentials. *Physical Review Letters*, , 43 (20), 1494-1497.
- Harju, A., Sverdlov, V. A. ve Nieminen, R. M. (1998). Variational wave function for a quantum dot in a magnetic field: A quantum Monte Carlo study. *Europhysics Letters*, 41 (4), 407-412.
- Harju, A., Sverdlov, V. A., Barbiellini, B. ve Nieminen, R. M. (1998). Variational wave function for a two-electron quantum dot. *Physica B: Condensed Matter* (1-4), 255, 145-149.
- Harju, A., Sverdlov, V. A., Nieminen, R. M. ve Halonen, V. (1999). Many-body wave function for a quantum dot in a weak magnetic field. *Physical Review B*, 59 (8), 5622-5626.
- Harrison, P., Goodwin, J.P. ve Hagston, W.E. (1992). Exciton energies and band-offset determination in magnetic superlattices. *Physical Review B*, 46 (19), 12377-12383.

- Harrison, P., Piorek, T., Hagston, W.E. ve Stirner, T. (1996). The symmetry of the relative motion of excitons in semiconductor heterostructures. *Superlattices and Microstructures*, 20 (1), 45-57.
- Harrison, P., Hagston, W.E. ve Stirner, T. (1993). Excitons in diffused quantum wells. *Physical Review B*, 47 (24), 16404-16409.
- Hartmann, A. K. (1999). Ground-state behavior of the three-dimensional $\pm J$ random-bond Ising model, *Physical Review B*, 59 (5), 3617-3623.
- Hartree, D. R. (1928). The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part I. Theory and Methods. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 24 (1), 89-110.
- Heitler, W. ve London, F. (1927). Wechselwirkung neutraler Atome und homöopolare Bindung nach der Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* 44 (6-7), 455-472.
- Hilton, C.P., Hagston, W.E. ve Nicholls, J.E. (1992). Variational methods for calculating exciton binding energies in quantum well structures. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 25 (8), 2395-2401.
- Hilton, P., Goodwin, J.P., Harrison, P. ve Hagston, W.E. (1992). Theory of exciton energy levels in multiply periodic systems. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 25 (20), 5365-5372.
- Hohenberg, P. ve Kohn, W. (1964). Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 136 (3B), B864-B871.
- Holland, J. (1975) *Adaptation in natural and artificial systems*. Cambridge: The MIT Press.

- Jastrow, R. J. (1955). Many-Body Problem with Strong Forces. *Physical Review*, 98 (5), 1479-1484.
- Joswig, J.-O. ve Springborg, M. (2003). Genetic-algorithms search for global minima of aluminum clusters using a Sutton-Chen potential, *Physical Review B*, 68, 085408-085416.
- Kerker, G.P. (1980). Non-singular atomic pseudopotentials for solid state applications. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 13 (9), L189-L194.
- Kohn, W. ve Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140 (4A), A1133-A1138.
- Kolos, W. ve Wolniewicz, L. (1968). A comparison of the efficiency of Fourier and discrete time-path integral Monte Carlo. *Journal of Chemical Physics*, 49, 404-408.
- Kumar, A., Laux, S. H. ve Stern, F. (1990). Electron states in a GaAs quantum dot in a magnetic field, *Physical Review B*, 42, 5166-5175.
- Lewars, E.G. (2003). *Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*. Kluwer Academic Publishers.
- Metropolis, N., Rosenbluth, A.W., Rosenbluth, M.N., Teller, A.H. ve Teller, E. (1953). Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. *Journal of Chemical Physics*, 21, 1087-1092.
- Michaelian, K. (1998). A symbiotic algorithm for finding the lowest energy isomers of large clusters ve molecules, *Chemical Physics Letters*, 293 202-208.

- Oña, O., Bazterra, V. E., Caputo, M. C., Facelli, J. C., Fuentealba, P. ve Ferraro, M. B. (2006). Modified genetic algorithms to model cluster structures in medium-sized silicon clusters: Si₁₈ - Si₆₀, *Physical Review A*, 73, 053203-053213.
- Phillips, J.C. ve Kleinman, L. (1959). New Method for Calculating Wave Functions in Crystals and Molecules. *Physical Review*, 116 (2), 287-294.
- Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T. ve Flannery, B.P. (1992). *Numerical Recipes in Fortran 77*. Cambridge: Cambridge University Press.
- PDE Solutions Inc., FlexPde. (2009). WA, USA.
- Prtigel-Bennett, A. ve Shapiro, J. L. (1997). The dynamics of a Genetic Algorithm for simple random Ising systems. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 104, 75-114.
- Shinozuka, Y. ve Matsuura, M. (1983). Wannier exciton in quantum wells. *Physical Review B*, 28 (8), 4878-4881.
- Slater, J. C. (1930). Note on Hartree's Method. *Physical Review*, 35 (2), 210-211.
- Spiros, V.B., Cen, J. ve Bajaj, K.K. (1991). Effect of magnetic fields on exciton binding energies in type-II GaAs-AlAs quantum-well structures. *Physical Review B*, 44 (20), 11196-11202.
- Starrost, F., Bornholdt, S., Solterbeck, C. ve Schattke, W. (1996). Band-structure parameters by genetic algorithm, *Physical Review B*, 53, 12549-12552.
- Stoico, C. O., Renzi, D. G. ve Vericat, F. (2008). A genetic algorithm for the 1D electron gas. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 387 (1), 159-166.

- Szabo, A. ve Ostlund, N.S. (1982). *Modern Quantum Chemistry*. London: Macmillan.
- Şahin, M., Atav, Ü. ve Tomak, M. (2006). Applications of Genetic Algorithm to Quantum Mechanical Systems. *Turkish Journal of Physics*, 30 (4), 253-275.
- Tang, M., Wang, C. Z., Lu, W. C. ve Ho, K. M. (2006). Structures of Si_7H_{2m} $m = 1-7$ clusters by global optimization, *Physical Review B*, 74, 195413-195421.
- Troullier, N. ve Martins, J.L. (1991). Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations. II. Operators for fast iterative diagonalization. *Physical Review B*, 43 (11), 8861-8869.
- Vanderbilt, D. (1990). Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. *Physical Review B*, 41 (11), 7892-7895.
- Warnock, J., Jonker, B.T., Petrou, A., Chou, W.C. ve Liu, X. (1993). Exciton energies in shallow quantum wells and spin superlattices. *Physical Review B*, 48 (23), 17321-17330.
- Wavefunction Inc., Spartan'02. (2002). Irvine, CA.
- Wimmer, M., Nair, S.V. ve Shumway, J. (2006). Biexciton recombination rates in self-assembled quantum dots. *Physical Review B*, 73 (16), 165305(1)-165305(10).
- Winkler, C. ve Hofmann, H. M. (1997). Determination of bound-state wave functions by a genetic algorithm, *Physical Review C*, 55, 684-687.
- Wurzer, J. ve Hofmann, H. M. (1997). Structure of the helium isotopes He^4 - He^8 , *Physical Review C*, 55, 688-698.