FZM 422

FİZİKTE BİLGİSAYAR UYGULAMALARI II

Prof. Dr. Handan OLĞAR

Fizik Mühendisliği Bölümü

Uygulamalı bilimde yüksek performans bilgisayar simülasyonlarının öne çıkması istatistik fizik numerik yöntemlerinin önem kazanmasına sebep olmuştur.

Ders boyunca

- İstatistik fizikte örnekleme, olasılık dağılımları, rasgele sayılar ve farklı sayı üreteçleri

- Monte-Carlo Simülasyonları

- İstatistiksel Analiz

Konuları üzerinde durulacaktır.

Olasılık Dağılımları ve Örnekleme

Makroskopik bir sistemde, incelenmek istenen bir fiziksel nicelik, ortalama bir davranışa sahip ve sürekli değişme eğilimi içindedir. O halde böyle bir özelliğe sahip bir fiziksel nicelik için yapılan gözlem sonunda, nelerin olduğunu ya da nelerin olabileceğini anlamak bir olasılık sorunudur.

Olasılık $\Leftrightarrow$ örnekleme $\Leftrightarrow$ Şans !!!!!

Örnekler:

1. Zar: durumlar { 1,2,3,4,5,6}

   Zar atıldığında gelişen olay !!

2. [a,b] $0 \le a \le b \le 1$

   $x \in (a,b)$

   $x \in (-\infty,+\infty)$ aralığında reel bir sayı

Bir sistemde, ardışık zamanlarda N tane gözlem yapılmış olsun ve bunlardan n tanesinde A olayı gerçekleşsin ya da başka deyişle sistem A durumunda bulunsun.

Bu durumda sistemin olasılığı

$$P(A) = \lim_{N\to\infty}\frac{n}{N}$$

İle verilir.

A sistemin durumlarından biridir. A olayının olasılığı P(a),
$0 \leq P(a) \leq 1$ arasındadır.

P(A) = 0 olay hiçbir zaman gerçekleşmez.

P(A) = 1 olay kesin gerçekleşir.

Örnek: i) hilesiz zar için P(i) = 1/6

$i \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$

ii) $x^r \in [a,b]$ x^r $(-\infty, +\infty)$ rasgele değişken

olasılık yoğunluğu f(x) > 0 olmak üzere
(normalizasyon koşuluğu da sağlar)

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx$$

Olasılık P(a,b)

$$P(a,b) = \int_a^b f(x)dx$$ ile verilir.

Tersi de dogrudur. P(a,b) olasılığının bilinmesi de f(x) olasılık yoğunluğuna bizi götürecektir. x > y için

$$f(x) = \lim_{y \to x} \frac{P(y,x)}{x-y} \geq 0$$

Dağılım fonksiyonu da bu durumda

$$F(x) = P(x^r \leq x) = \int_{-\infty}^{x} f(x)dx$$ olacaktır.

Bir örnek: kesikli olasılık durumu!! Dirac Delta Fonksiyonu

$$f(x) = \sum_i P_i \delta(x - x_i)$$

$$\delta(x - x_i) = 0 \qquad x \neq x_i$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x - x_i) = 1$$

Biz asıl sürekli dağılımlara bakalım.

- Düzgün Dağılım fonksiyonu (0,1) aralığında

(rasgele sayı üreteçlerinin mantığı böyle çalışıyor)

Olasılık yoğunluğu f(x) = u(x)

$$u(x) = \begin{cases} 1 & 0 \le x < 1 \\ 0 & diğer \end{cases}$$

Dağılım fonksiyonu

$$U(x) = \int_{-\infty}^{x} u(x)dx = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ x & 0 \le x \le 1 \\ & \end{cases}$$

Dikkat!! Diğer dağılım fonksiyonlarının temelini bu dağılım oluşturur.

Düzgün dağılım fonksiyonundan diğer dağılım fonksiyonlarına geçebiliriz.

$$y = F(x) = \int_{-\infty}^{x} f(x')dx'$$

y^r bir düzgün dağılım fonksiyonuna uyan sayı olmak üzere

$$x^r = F^{-1}(y^r)$$

Bize istediğimiz bir diğer dağılım fonksiyonuna uyan sayıya götürecektir.

- **Cauchy dağılımı**

$$f_c(x) = \frac{\alpha}{\pi(\alpha^2 + x^2)}$$

$$F_c(x) = \int_{-\infty}^{x} f_c(x)dx = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi}\tan^{-1}(\frac{x}{\alpha}) \qquad \alpha > 0$$

$$Cauchy \qquad x^r, \quad uniform \qquad y^r \in [0,1]$$

$$x^r = \alpha\tan(\pi y^r - \frac{\pi}{2}) \rightarrow \quad x^r = \alpha\tan(2\pi y^r)$$

Gaussiyen Dağılım:

Olasılık yoğunluğu f(x) = g(x) olmak üzere

$$g(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp(-x^2/(2\sigma^2))$$

σ^2 **: varyans**

σ **: Standart sapma**

Gaussiyen dağılım fonksiyonu

$$G(x) = \int_{-\infty}^{x} g(x')dx' = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{x/\sigma} \exp-((x'')^2/2)dx''$$

$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} erf(\frac{x}{\sigma\sqrt{2}})$$

Burada $erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp - (x^{'})^2 dx^{'}$ **(hata fonksiyonu)dur.**

EK DERS:

Linux de temel komutlar:

cd change directory
cd ../ move a level up.
cp file1 file2 copies file1 to file2.
Be careful: overwrites file2
ls lists all the files in the directory.
ls -Fal lists with a number of attributes.
rm file1 removes file1

vi editor temel komutlar:

i insert, I insert at end of line.
o,O open a new line for writing in the insert mode
escape key: to get out of insert mode.

:q quit.
:w write without quitting.
:wq write quit.
:q! quit without saving anything.

x,X deletes character.
dd deletes one line, 12 dd deletes 12 lines, etc.
yy yanks one line, 12 yy yanks 12 lines, etc.
p,P paste the line(s) behind, before where you are.

D delets end of line.

gfortran program.f compiles the program.f, cerates a.out file
./a.out > out .txt re-direct output to out.txt.
./a.out > out.txt & run in background