

T.C.
BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI



BÜYÜME MODELLERİNDE ENTROPİNİN
ÖLÇEKLEME YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ

FETİ GÜLCÜ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Jüri Üyeleri : Prof. Dr. Mehmet BAYIRLI (Tez Danışmanı)
Prof. Dr. Hamza Yaşar OCAK
Dr. Öğr. Üyesi Gülay İNLEK

BALIKESİR, OCAK - 2022

ETİK BEYAN

Balıkesir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Tez Yazım Kurallarına uygun olarak tarafımda hazırlanan “**Büyüme Modellerinde Entropinin Ölçekleme Yöntemi ile İncelenmesi**” başlıklı tezde;

- Tüm bilgi ve belgeleri akademik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi,
- Kullanılan veriler ve sonuçlarda herhangi bir değişiklik yapmadığımı,
- Tüm bilgi ve sonuçları bilimsel araştırma ve etik ilkelere uygun şekilde sunduğumu,
- Yararlandığım eserlere atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi,

beyan eder, aksinin ortaya çıkması durumunda her türlü yasal sonucu kabul ederim.

Feti GÜLCÜ

ÖZET

**BÜYÜME MODELLERİNDE ENTROPİNİN ÖLÇEKLEME YÖNTEMİ İLE
İNCELENMESİ
YÜKSEK LİSANS TEZİ
FETİ GÜLCÜ
BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI
(TEZ DANIŞMANI: PROF.DR. MEHMET BAYIRLI
BALIKESİR, OCAK - 2022**

Doğadaki bütün yapılar parçacık kümesi olarak tanımlanabilir. Kümelerin tanımlanması ve küme istatistiklerinin belirlenmesi amacı ile büyüme modelleri geliştirilmiştir. Bunlardan ikisi Difüzyonla Sınırlı Kümelenme modeli ve Eden modelidir. Bu çalışmada Monte Carlo tekniği ve difüzyonla sınırlı kümelenme algoritmasında yapışma olasılık parametresi kullanılarak küme temsilleri üretilmiştir. Yapışma olasılık parametresi azalırken küme temsillerinin Eden modeli kümelere dönüştüğü belirlenmiştir. Ölçekleme yöntemiyle radyal parçacık dağılımı, fraktal boyut ve entropi değerleri hesaplanmıştır. Fraktal boyut ile yapışma olasılık parametresi arasındaki ilişki nümerik bir model ile tanımlanmıştır. Kümelerde radyal yarıçapa göre entropi önce artmakta ve küme çevresine doğru azalmaktadır. Ayrıca fraktal boyut değeri artarken entropi değeri azalmaktadır. Sonuçlar literatürdeki değerlerle karşılaştırılmıştır. Bu çalışma yüzey tanımlama konularında çalışan bilim insanlarına metot açısından yararlı olabilir.

ANAHTAR KELİMELELER: Monte Carlo Metodu, DLA modeli, Fraktal Boyut, Entropi

Bilim Kod / Kodları : 20208, 20211

Sayfa Sayısı : 36

ABSTRACT

**INVESTIGATION OF ENTROPY BY SCALING METHOD IN GROWTH
MODELS
MSC THESIS
FETİ GÜLCÜ
BALIKESİR UNIVERSITY INSTITUTE OF SCIENCE
PHYSICS
(SUPERVISOR: PROF.DR. MEHMET BAYIRLI)**

BALIKESİR, JANUARY - 2022

All structures in nature can be defined as a set of particles. Growth models have been developed to define clusters and determine cluster statistics. Two of these are the diffusion-limited aggregation model and the Eden model. In this study, cluster representations were produced using the Monte Carlo technique and the adhesion probability parameter in the diffusion-limited clustering algorithm. It was determined that the cluster representations turned into Eden model clusters while the adhesion probability parameter decreased. The radial particle distribution, fractal size and entropy values were calculated using the scaling method. The relationship between the fractal dimension and the adhesion probability parameter was defined with a numerical model. In clusters, entropy first increases according to the radial radius and decreases towards the cluster periphery. In addition, as the fractal dimension value increases, the entropy value decreases. The results were compared with the values in the literature. This study may be methodologically useful to scientists working on surface identification issues.

KEYWORDS: Monte Carlo Method, DLA model, Fractal Dimension, Entropy

Science Code / Codes : 20208, 20211

Page Number : 36

İÇİNDEKİLER

Sayfa

| | |
|--|------------|
| ÖZET | i |
| ABSTRACT | ii |
| İÇİNDEKİLER | iii |
| ŞEKİL LİSTESİ | iv |
| TABLO LİSTESİ | v |
| SEMBOL LİSTESİ | vi |
| ÖNSÖZ | vii |
| 1. GİRİŞ | 1 |
| 2. TEORİK BİLGİLER | 4 |
| 2.1 Büyüme Modelleri | 4 |
| 2.1.1 Serbest Sınır Modeli Sınır Şartları | 4 |
| 2.1.2 Katılma Esnasında Yüzey Gerilimi ve Yüzey Kinetiği | 5 |
| 2.1.3 Kristal Eşyönlülük | 8 |
| 2.1.4 Yayılma-Faz Geçiş Modeli | 8 |
| 2.2 Kümelenme Modelleri | 10 |
| 2.2.1 Eden Modeli | 10 |
| 2.2.2 Süzülme (Perkolasyon) Kümeleri | 10 |
| 2.2.3 DLA Modeli | 11 |
| 2.3 Büyüme Modellerinde Katılma Desenlerinin Oluşumu | 12 |
| 2.4 Büyüme Modelinde Hücrel Oluşum | 13 |
| 2.5 Topolojik Fraktal Boyut..... | 13 |
| 2.6 Entropi..... | 14 |
| 2.7 İstatistik Fizikte Ölçekleme Teorisi | 14 |
| 3. MATERYAL VE METOT | 16 |
| 4. BULGULAR | 17 |
| 5. SONUÇ VE ÖNERİLER | 32 |
| 6. KAYNAKLAR | 33 |
| ÖZGEÇMİŞ | 37 |

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

- Şekil 2.1:** DLA modeli birikinti temsili. 12
- Şekil 4.1:** Çekirdek parçacıktan çevreye doğru parçacık dağılımının yerleşkesi..... 18
- Şekil 4.2:** Kapalı kare örgü lineer boyutu $L = 10^2$ piksel, yapışma olasılığı $t = 1$ (a), $t = 0,8$ (b), $t = 0,6$ (c), $t = 0,4$ (d), $t = 0,2$ (e), $t = 0,1$ (f), $t = 0,09$ (g), $t = 0,07$ (h), $t = 0,05$ (i), $t = 0,03$ (j), $t = 0,01$ (k), $t = 0,009$ (l), $t = 0,007$ (m), $t = 0,005$ (n), $t = 0,003$ (o), $t = 0,001$ (p) değerli ve $N = 10^3$ tanecikli 16 farklı DLA modeli birikinti temsili. Üretim süreçleri birbirinden bağımsızdır. Ancak küme parametre değerleri birbirine yakındır. Bazı kümelerin büyüme oranları birbirinden farklıdır. 19
- Şekil 4.3:** DLA küme temsillerinde yapışma olasılık parametresi $t = 1$, $t = 0,5$ ve $t = 0,001$ değerlerine göre radyal yarıçapın parçacık dağılımına göre değişim grafiği diyagramı. 21
- Şekil 4.4:** (a) Parçacık sayısının parçacık boyutuna göre değişimi, (b) parçacık sayısının ve parçacık boyutu logaritmaları ve en küçük kareler yöntemi ile hesaplanan eğilim doğruları. 23
- Şekil 4.5:** DLA algoritması ve yapışma olasılık parametresine göre üretilen birikinti temsillerinin fraktal boyut değerine göre değişimi. 24
- Şekil 4.6:** DLA algoritması ve yapışma olasılık parametresine göre üretilen küme temsillerinin entropi değerinin radyal yarıçapa bağlı değişimi. 28
- Şekil 4.7:** DLA algoritması ve yapışma olasılık parametresine göre üretilen küme temsillerinin entropi değerinin simülasyon yapışma olasılığı t ye göre değişimi.29

TABLO LİSTESİ

Sayfa

| | |
|--|----|
| Tablo 4.1: t parametresine göre dağılım genişliği (σ), jirasyon yarıçapı (r_G), fraktal boyut (D_f), Boltzmann entropisi (S) ve Shannon entropisi (H) değerleri..... | 30 |
| Tablo 4.2: Literatürdeki büyüme modelleri ve DLA modeli yapışma olasılık parametresi t = 1 için küme temsillerinin fraktal boyut ve entropi değerlerinin karşılaştırılması..... | 30 |



SEMBOL LİSTESİ

| | |
|---------------|---|
| $N(t)$ | : Dinamik küme boyutu-dağılım fonksiyonu |
| κ | : Isıl difüzyon sabiti |
| c_p | : Özgül ısı |
| L | : Erime/donma ısısı |
| ϑ_k | : Katılma hızı |
| T | : Sıcaklık |
| T_e | : Erime sıcaklığı |
| δ | : Aşırı soğuma seviyesi |
| T_f | : Ara kesitten çok uzaklarda sıcaklık |
| T_i | : Ara kesit sıcaklığı |
| D | : Difüzyon sabiti |
| c | : Konsantrasyon |
| c_f | : Ara kesitten çok uzaklarda konsantrasyon |
| c_i | : Ara kesitte konsantrasyon |
| c_k | : Katı konsantrasyonu |
| c_{ks} | : Katı-sıvı birlikte bulunuş konsantrasyonu |
| T_{ks} | : Katı ile eriyiğin denge sıcaklığı |
| d_0 | : Kılcal damar uzunluğu |
| ρ | : Yoğunluk |
| γ | : Yüzey gerilimi |
| η | : Yerel eğrilik |
| β_0 | : Kinetik katsayı |
| U_s | : Sıvı kimyasal potansiyeli |
| U_k | : Katı kimyasal potansiyeli |
| ω_0 | : Karakteristik frekans/faz geçiş hızı |
| ΔS | : Entropi değişimi |
| dn | : n-katlı eşyönsüzlük büyüklüğü |
| θ | : Yüzey normal ile yapılan açı |
| P_Ω | : Mikrodurumda bulunma olasılığı |
| ϑ_e | : Erime hızı |
| E_B | : Bağ enerjisi |
| P_e | : Perkolasyon eşiği |
| P_∞ | : Süzülme ihtimali |
| α | : Kritik üs |
| X_{ij} | : Konum sayısı |
| $u(x, t)$ | : Yayılma alanı |
| D_f | : Fraktal boyut |
| t | : Yapışma olasılık parametresi |
| $f(r, n)$ | : İstatistiksel dağılım fonksiyonu |
| σ | : Aktif dağılım genişliği |
| r_G | : Jirasyon yarıçapı |
| S_1 | : Boltzmann entropisi |
| S_2, H | : Shannon entropisi |
| ε | : Parçacık boyutu |
| ΔA | : Yerleşim gözü sayısı |

ÖNSÖZ

Yüksek lisans eğitim sürecimde her aşamada desteğini, bu çalışmanın gerçekleşmesinde de bilgi ve tecrübelerini benden esirgemeyen, her durumda yardımcı olana saygıdeğer hocam Prof.Dr. Mehmet BAYIRLI'ya en derin sevgi ve saygılarımı sunarım.

Yüksek lisans eğitimine başlama konusunda beni yüreklendirerek bu çalışmanın ortaya çıkmasında ilk adımı atmama vesile olan sevgili annem Safınaz GÜLCÜ ve rahmetli babam Mustafa GÜLCÜ'ye, eğitimimin başından itibaren yaşadığım sıkıntılarda hep yanımda ve destek olan, yaşamakta olduğumuz salgın sürecinde yaşadığım ve yaşamakta olduğum bütün sıkıntıları göğüslememde en büyük destekçim olan eşim Aynur GÜLCÜ'ye, kendilerine ayırmam gereken zamandan feragat ederek sevgi ve saygılarımı hiç esirgemeyen, bu süreçte en büyük motivasyon kaynağım olan sevgili kızım Damla GÜLCÜ ve oğlum Mustafa GÜLCÜ'ye sonsuz sevgi, saygı ve teşekkürlerimi sunarım.

Balıkesir, 2022

Feti GÜLCÜ

1. GİRİŞ

Doğadaki tüm yapılar bir parçacık kümesidir. Bunların temel özelliklerinin belirlenmesi için bir çok büyüme modeli geliştirilmiştir. Büyüyen parçacık kümelerinin incelenmesi, son zamanlarda kümelenme, pıhtılaşma, desen oluşumu veya polimerize olma gibi çeşitli dengede olmayan olayların araştırılmasında önemli fiziksel, kimyasal ve biyolojik sistemlerde bir araç haline gelmiştir [1-3]. Bu kümeler, jeolojik koşullar, yeni tür malzeme üretimi için deneysel çalışma ve üretim esnasında gözlenmektedir. Bunlar faz uzayında morfolojik bir desen meydana getirir. Yüzeyde gözlenen yapının özelliklerinin tanımlanması, içyapı ile ilgili bilgi verebilir. Bu yüzeysel ikincil oluşumların morfoloji ve desen oluşturması sistemin fiziksel özelliklerini (elektriksel iletkenlik, çatlak yapısı, dayanıklılık, vs.) belirlemektedir. Ana yapı yüzeyindeki gözenek ya da çatlak yapısı içerisine biriken ana yapıdan farklı maddeler yüzeyde geometrik olarak değişik desen de oluşturabilir. Bunlar birincil, ikincil veya üçüncül yapılar olarak tanımlanır. Bu tür yapılar birikinti (depozit) ya da quazi kristal olarak isimlendirilir [4-6].

Kümelerin makroskobik bakış açısı ile temel yapısı ve küme istatistiklerinin farklı bilimsel teknik kullanarak araştırılması son zamanlarda bilim insanları için dikkat çekici bir konudur. Gerek foto metrik yöntemler (ölçekleme yöntemi ile) gerekse bilgisayar kullanarak temsillerini üretme ve sistemi tanımlayan parametreleri hesaplama çalışmaları yapılmaktadır [7,8]. Herhangi bir büyüme modelinde oluşturulan kümelerin ya da kümeyi oluşturan parçacıkların dağılımını belirleme diğer önemli bir sorundur. Büyüme modellerinin çoğu fraktal özellikli kümeler üretmekte [6,9] ve kümelere ait ilgili parçacık dağılımının tanımlanması ve fraktal boyut değerlerini belirlemek için önemli miktarda çalışma yapılmıştır [10,11].

Kümeler topluluğunun küme istatistiklerinin belirlenmesi, istatistiksel fiziğin standart yaklaşımlarına aittir ve bu amaçla bir dizi büyüme modelinin tanımlanması ve uygulama ile karşılaştırma çalışmaları gerçekleştirilmektedir [12,13]. Bilgisayar algoritması ile Monte Carlo simülasyon tekniği kullanılarak birçok model geliştirilmiştir. Eden Modeli, Difüzyonla Sınırlı Kümelenme (DLA) Modeli bunlardan en dikkat çekicileridir. DLA modeli ile ilgili birçok araştırma yapılmıştır [9,12,14]. Bu çalışmalar ağırlıklı olarak yeni simülasyon parametresi tanımlama yöntemi kullanarak küme temsilleri ile reel sistemleri karşılaştırma şeklindedir [2,3,5]. Algoritma ile yaklaşım, fiziksel olgular ile ilgili

hipotezleri karşılaştırma şeklindedir [8]. Simülasyon sonuçlarına göre, kümeyi oluşturan parçacıkların dağılımı, difüzyon ve çökme kontrollü birikimdeki nicel büyüklüklerinin bir fonksiyonu olarak bir güç-yasası davranış ilişkisi göstermektedir [5,6]. Küme-küme kümelenmesinde [9,15] dinamik küme boyutu-dağılım fonksiyonu $N(t)$, hem zaman içinde hem de kümelerin boyutuyla ölçeklendiği belirlenmiştir [3,5,6,10,16]. Parçacık dağılımı $N(t)$ fonksiyonunun hesaplanmasıyla ilgili yaklaşım iki yönlüdür; i) parçacık dağılım fonksiyonu karakteristik ölçekleme gösterir, ii) makroskobik fiziksel büyüklükler yalnızca kümelerin dağılımının ortalaması olarak elde edilebilir. Bununla birlikte, belirli bir büyüklükteki kümelerin uygun değer davranışı beklenemez [16]. Bu nedenle, aynı sayıda parçacığı içeren kümelerin dağılımı da temel ilgi konusu olarak ortaya çıkar. Bu dağılımlar incelenen modellere bağlıdır ve eşit büyüklükteki kümelerin dağılımına dayanan yeni termodinamiğin ikinci yasası bilimin gelişimine büyük bir katkı sağlar ve pek çok açıdan yaygın olarak uygulanır [17]. Bir alt sistemin durumu, diğer alt sistemlerin çeşitli durumlarının olasılıklarını etkilemez, çünkü farklı alt sistemler zayıf etkileşimli olarak kabul edilebilir. Bu, alt sistemler arasındaki çeşitli etkileşimlerin dikkate alınmadığını göstermektedir. Fonksiyonel bir sistemde entropi artar. Bir sistemde entropi artışını belirlemede ön koşullar şunlardır; a) yalnızca yaklaşılan sistem, yalıtılmış sistem olmalıdır, b) sistemdeki çeşitli iç etkileşimler ihmal edilmelidir, c) termal denge süreçleri olmalı, dolayısıyla faz geçişi olmamalıdır. Bununla birlikte, bu öncül önkoşullarına rağmen, tüm sürecin bağımsız ve sınırsız diğer uzantıları ise gerçeklikten uzak ve bilimi ihlal eden yaklaşıma götürebilir [16,18-21].

Küme temsilinin termodinamik parametresi olan entropi herhangi bir sistem için önemli bir niceliktir. Entropi, pratik yaklaşımla bir sistemdeki düzensizliğin bir ölçüsü ve termodinamik bir sistemin kapsamlı bir özelliğidir. Bir sistem için entropi değeri sistemi oluşturan madde miktarı ve herhangi bir kümenin alt kümelerinin (parçacıkların) kombinasyonuna bağlı olarak değişir. Bir sistem için entropi yaygın türden bir değişkendir. Bu tür değişkenin temel özelliği; incelenen sistemi oluşturan alt sistemlerin entropi değerlerinin toplamının sistemin entropi değerine eşit olmasıdır [17,18-21, 22].

Doğadaki izole veya izole olmayan herhangi bir sistemin entropi değerinin bilinmesi, sistemin fonksiyonel denge ve faz geçişleri için işlevliğinin bir ölçüsüdür. Farklı fiziksel sistemler için entropi ile ilgili çalışmalar yapılmıştır [17]. Vicsek arkadaşları, büyüme modellerinde kümelerin dağılımı ve entropisi üzerinde bir çalışma gerçekleştirmişlerdir.

Bu çalışma, küme istatistiği için yaygın olarak kullanılan fraktal boyut değerine ek olarak büyüme işlevinin yeni karakteristik değeri olarak entropinin kullanılabilceğini önermiştir. Ancak bilim insanları tarafından pek tercih edilmemiştir [16]. Chang, izole edilmiş sistemlerde çeşitli iç etkileşmesi ihmal edilmiş sistemlerde ve termal işlemlerinde ön koşul olarak entropi değerinin arttığını vurgulamıştır. Ancak izole edilmiş sistemlerde iç etkileşmelerin ve niceliklerin dalgalanması ve faz geçişini de içine alan fiziksel sistemlerde entropi azaldığını vurguladı [21]. Chen, entropi yaklaşımını şehir dağılım yoğunluğunda parçacık dağılımını referans alarak uygulamıştır ve büyüme modelini şehir oluşumunda, entropi, fraktal ve uzaysal yerleşimi referans alarak analogik olarak belirlemektedir [22]. Honjo ve Sanx yaptıkları çalışmada (1995) kendine benzer fraktal desenlerin entropi spektrumunu incelemişler ve bütün desenin benzerlik boyutunu temsil eden maksimum değeri için farklı benzerlik boyutlarının birçok fraktal alt kümelerden oluştuğunu ortaya koymuşlardır [23]. Sato ve Hayakawa (1997), büyüme modellerinde büyüme sürecindeki kümelenme olasılıklarının dağılımı için entropinin bir spektrum oluşturduğunu gösterdiler ve birçok fraktal nümerik yaklaşım ve formülleri temel alarak, büyüme oluşumu esnasındaki olasılık dağılımını referans alarak entropi spektrumunu balistik ve Eden büyüme modelleri ile belirlediler. Bu entropi spektrumunun bazı adımlarında faz geçişinin olduğunu gösterdiler. Ancak bilgisayar kullanılarak Monte Carlo simülasyon tekniği ve DLA algoritması ile üretilen birikintilerin yapışma olasılığına göre radyal parçacık dağılımı, fraktal boyut ve entropi yaklaşımı ile ilgili nerede ise hiç çalışma yapılmamıştır [24].

Bu amaçla, bu tez çalışmasında Monte Carlo simülasyon tekniği ve DLA algoritması ile üretilen küme temsillerinin küme tanımlama parametrelerinin hesaplanması ve bazı yeni küme oluşumu ile ilgili hipotezler önerilmektedir. Algoritmada yapışma olasılığı parametresi kullanılarak radyal parçacık dağılımı, fraktal boyut ve entropi değerleri hesaplanmakta ve literatüre daha önce sunulan çalışmalar ile karşılaştırılmaktadır. Bu çalışma diğer fiziksel, kimyasal ve biyolojik farklı tabanlı küme topluluklarının tanımlanmasında hem metot hem de analogik olarak yararlı olabilir.

2. TEORİK BİLGİLER

2.1 Büyüme Modelleri

2.1.1 Serbest Sınır Modeli Sınır Şartları

Ara kesit desen oluşumları aşırı soğumuş eriyiğin katılaşması sonucu olabildiği gibi doymuş çözeltilerin katılaşması sonucu da oluşabilmektedir. Desen oluşumu sırasında ısı difüzyonunun sadece sıvıda olduğu kabul edilerek; κ ısı difüzyon sabiti, c_p sıvı özgül ısı ve L erime/donma ısı olmak üzere aşırı soğumuş eriyiğin katılaşma hızı;

$$\vartheta_k = -\left(\frac{\kappa c_p}{L}\right) \nabla_k T \quad (2.1)$$

bağıntısı ile belirlenir. Ara kesitin şeklinin tahmin edilebilmesi ve katılaşma hızının hesaplanabilmesi için tüm eriyiğin süreç boyunca sıcaklığının bilinmesi gerekmektedir.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T \quad (2.2)$$

Difüzyon denkleminin ara kesitten çok uzaklarda çözümü için; T_e düz bir ara kesitin erime sıcaklığı, δ aşırı soğuma seviyesi olmak üzere $T_f = T_e - \delta$ sınır şartı kullanılmalıdır. δ aşırı soğuma seviyesi genellikle;

$$\delta = \frac{(T_e - T_f) c_p}{L} \quad (2.3)$$

şeklinde tanımlanır.

Difüzyon denkleminin çözümü için kullanılması gereken diğer bir sınır şartı ise; T_i ara kesit sıcaklığıdır. Bu durumda mikro etkiler ihmal edilerek $T_i = T_e$ alınabilir.

Aşırı doymuş çözeltiler için difüzyon denklemi; D madde için difüzyon sabiti, c konsantrasyon olmak üzere;

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 c \quad (2.4)$$

şeklinde olur ve ara kesitten uzaklarda $c = c_f$, ara kesitte $c_i = c_{ks}$ 'dir. c_k katı konsantrasyonu, c_{ks} katı-sıvı birlikte bulunuş konsantrasyonu olmak üzere δ aşırı doyma seviyesi;

$$\delta = \frac{c_f - c_i}{c_k - c_{ks}} \quad (2.5)$$

şeklinde tanımlanır. Katılaşma hızı da;

$$\vartheta_k = \frac{D\nabla_k c}{c_k - c_i} \quad (2.6)$$

bağıntısı ile belirlenir. Bu bağıntı maddenin ara kesitte korunduğunu gösterir. Aşırı soğumuş eriyiğin katılaşmasında ısı korunmadığından düzen parametresi korunmazken, aşırı doymuş çözeltilinin katılaşmasında madde korunduğu için düzen parametresi korunmaktadır [25-30].

2.1.2 Katılaşma Esnasında Yüzey Gerilimi ve Yüzey Kinetiği

Yüzey gerilimi ve yüzey kinetiği ara kesit sınır şartlarını belirleyen iki mikro etkidir. Erime sıcaklığında dengede olan iki faz içeren kesit alanının şeklini değiştirebilmek için yüzey alanı artışıyla orantılı bir enerjiye ihtiyaç bulunmaktadır. Katı ve sıvı fazı ayıran ara kesit bulunması halinde bu ara kesitte yüzey gerilimi de bulunur ve ara kesiti eski haline döndürme eğiliminde olur.

r yarıçaplı küresel katı ile eriyiğin erime sıcaklığının altında dengede bulunacağı sıcaklık T_{ks} için;

$$T_{ks} = -T_e \frac{d_0}{r} \quad (2.7)$$

bağıntısı yazılabilir. Burada d_0 nanometre seviyesinde kılcal damar uzunluğu olup, ρ yoğunluk ve γ yüzey gerilimi ile orantılı olmak üzere;

$$d_0 = \frac{c_p \gamma T_e}{L^2 \rho} \quad (2.8)$$

şeklinde ifade edilir.

Belirli bir şekle sahip ve yerel eğriliği η olan bir ara kesitin sıcaklığı,

$$T_i = T_{ks} = T_e(1 - d_{0\eta}) \quad (2.9)$$

olur. Burada eğriliği fazla olan kısımların sıcaklığı düşük olur ve bu kısımlara doğru ısı akışı olur. Böylece sıcaklığı yükselen kısımlar yüzey geriliminin eski haline döndürme etkisi ile düzleşir.

Katı ve eriyiğin sıcaklığının dengede olması halinde eriyik ve katı serbest enerjileri eşit olur ve bu durumda eriyikten katıya ve katıdan eriyiğe atom/molekül geçiş hızı aynı olur, dolayısıyla ara kesit ilerlemez. Ara kesitin ilerlemesi için eriyiğin serbest enerjisinin katının serbest enerjisinden büyük olması gerekir. Bu da eriyikten katıya dönüşüm (faz geçiş) hızının serbest enerji farkının bir fonksiyonu olduğu anlamına gelir. Ara kesitin katılaşıma hızı ϑ_k da faz geçiş hızı ile orantılı olup, β_0 kinetik katsayı olmak üzere yüzey sıcaklığı sınır şartları;

$$T_i = T_e(1 - d_{0\eta} - \beta_0\vartheta_k) \quad (2.10)$$

olur. Buradan, yüzey gerilimi ara kesitin eğri kısımlarının düzleşmesine sebep olarak büyümenin yavaşlamasına neden olurken, yüzey kinetiği ara kesitin hızlı hareket eden kısımlarının soğumasına sebep olarak büyümenin yavaşlamasına neden olduğu anlaşılmaktadır.

Aşırı doymuş çözeltinin katılaşması süreci incelendiğinde, ara kesitteki konsantrasyon için sınır şartları;

$$c_i = c_{ks}(1 + d_{0\eta} + \beta_0\vartheta_k) \quad (2.11)$$

olur. Kimyasal potansiyeli U_s olan sıvı tarafından sarılmış U_k kimyasal potansiyeline sahip küresel katıdan oluşan izotermal sistem için denge şartı;

$$(U_k - U_s)dN + \gamma dA = 0 \quad (2.12)$$

dır. Burada dA yüzey alanı değişimi olmak üzere ilk terim yığın enerjisindeki değişim, ikinci terim ara kesitin enerji değişimine katkısıdır. Eş yönlü sistemler için sıvı tarafından

çevrelenmiş katı bölge için tanecik sayısı ve ara kesit uzunluğundaki çok küçük değişmeler dikkate alınarak denge şartı;

$$U_s = U_k + \frac{\gamma\eta}{\rho} \quad (2.13)$$

şeklinde yazılır. Burada ρ katı halde birim alana düşen mikro tanecik sayısı olup, $U_s = kT \ln \rho$ ideal çözelti yaklaşımı kullanılarak;

$$c_i = c_{ks}(1 + d_{0\eta}) \quad (2.14)$$

difüzyon denklemini sınır şartları elde edilir. Bu denkleminde d_0 kılcal damar uzunluğu;

$$d_0 = \frac{\gamma}{k_B T \rho} \quad (2.15)$$

olarak tanımlanmaktadır.

Aktivasyon hız yaklaşımını kullanarak, ω_0 karakteristik frekans olmak üzere, büyüme hızı, katılma ile erime hızları arasındaki fark ve difüzyon sürecinde kat edilen r mesafesinin çarpımı şeklinde yazılabilir.

$$\vartheta = r\omega_0 \left[\left(\frac{1}{1 + e^{-\frac{\Delta S}{k_B}}} \right) - \left(\frac{1}{1 + e^{\frac{\Delta S}{k_B}}} \right) \right] \quad (2.16)$$

Burada;

$$\Delta S = \frac{(U_k - U_s)dN + \gamma dA}{T} \quad (2.17)$$

olup kinetik katsayı;

$$\beta_0 = \frac{2}{r\omega_0} \quad (2.18)$$

olarak bulunur [31,32].

2.1.3 Kristal Eşyönsüzlük

Eşyönsüzlük, fiziki olayların gerçekleşmesi sırasında bazı yönlerin diğerlerine yeğlenmesiyle maddenin fiziksel ya da mekanik özelliklerinin değişiminin yöne bağlı olmasıdır. Desen oluşumunda önemli bir etmendir. Yüzey gerilimi ve yüzey kinetiği yüzey yönelimine göre farklılık göstereceğinden farklı yönlere yönelmiş ara kesitli eğmek için farklı enerjilere ihtiyaç vardır. Bu durum kılcal damar uzunluğunun belirlenen bir yön ile arakesitin yüzey normali ile yapmış olduğu θ açısına bağlı olarak değiştiğini gösterir. Bu bağlılık; d_n n-katlı eşyönsüzlük büyüklüğü olmak üzere;

$$\beta_0 \rightarrow d_0(1 - d_n \cos n\theta) \quad (2.19)$$

bağıntısı ile gösterilebilir. Atomlar ara kesit yönelimine bağlı olarak farklı hızlarda yüzeye bağlanacaklarından yüzey kinetiği de θ açısına bağlı olarak değişecektir. Bu da;

$$\beta_0 \rightarrow \beta_0(1 - \beta_n \cos n\theta) \quad (2.20)$$

β_0 'ın da θ 'ya bağlı olarak değişeceği sonucunu doğuracaktır [33].

2.1.4 Yayılma-Faz Geçiş Modeli

Aşırı doymuş ideal bir çözeltinin kimyasal potansiyeli;

$$U_s = k_B T \ln c \quad (2.21)$$

olmak üzere konsantrasyon alanının zamanla değişimi;

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \nabla^2 c \quad (2.22)$$

bağıntısı ile tespit edilmekte olup, aşırı doyum seviyesi;

$$\delta = \frac{c_f - c_{ks}}{1 - c_{ks}} \quad (2.23)$$

dir. Ara kesit katı-sıvı denge konsantrasyonu;

$$c_{ks} = e^{-\frac{U_k}{T}} \quad (2.24)$$

bağıntısı ile tanımlanmaktadır.

Faz geiş esnasında ara kesit evresindeki gzlerdeki konsantrasyon deėişim gsterir. Hcrelerin faz geiş hızları, yerel denge durumunun varlığı kabul edilerek hesaplandığında, sisteme ait bir mikrodurumun entropisi;

$$S(\Omega) = -k_B \ln P_\Omega \quad (2.25)$$

olacaktır. P_Ω , Ω mikro durumunda bulunma olasılığıdır. Mikro durumlar arası geiş hızları için;

$$\begin{aligned} \vartheta_e &= \omega_0 P(\Delta S_e) && \text{Erime hızı} \\ \vartheta_k &= \omega_0 P(\Delta S_k) && \text{Katılma hızı} \end{aligned} \quad (2.26)$$

bağıntıları yazılabilir. Burada ω_0 karakteristik faz geiş hızı olup,

$$\frac{P(\Delta S_e)}{P(\Delta S_k)} = e^{-\frac{(\Delta S_e - \Delta S_k)}{k_B}} \quad (2.27)$$

dir. Erime ve katılma süreçlerindeki entropi deėişimi;

$$\Delta S = \frac{\Delta E}{T} = \frac{U_k - U_s}{T} \Delta N \quad (2.28)$$

olur. Katılma sırasında oluşan yeni hücrenin konsantrasyonu ve paracık sayısı deėeri 1'dir. Erime sırasında oluşan yeni hücrenin de konsantrasyon deėerinin 1 olması gerekir ancak simetri dolayısıyla konsantrasyon sıvı hücrenin kendisi ve evresindeki en yakın komşulukları üzerine dağılır.

Yayıma-faz geişi modeli kare hücreli yapısı nedeniyle yüzey enerjisi eşyönsüzdür. Sıvı konsantrasyonundaki deėişimler ve ara kesit entropisi, yalnız bir hücrenin faz geişi sırasındaki entropi hesabında ihmal edilmektedir. (2.27) denklemindeki olasılık fonksiyonunu belirleyebilmek için;

$$P = \frac{1}{1 + e^{\frac{\Delta S}{k_B}}} \quad (2.29)$$

şeklinde bir fonksiyon seçilerek, model parametreleri sürekli ortam modeli ile ilişkilendirildiğinde ortalama kılcıl damar uzunluğu;

$$d_0 = \frac{\gamma}{k_B T \rho} = \frac{E_B}{k_B T \rho r} \quad (2.30)$$

olarak hesaplanır. Bu bağıntıda, γ yüzey enerjisi, E_B bağ enerjisi, ρ katı fazdaki birim yüzey başına mikro tanecik sayısı ve r hücre büyüklüğüdür [34].

2.2 Kümelenme Modelleri

2.2.1 Eden Modeli

İlk kez 1961'de hücre, virüs ve bakteri gibi biyolojik sistemlerde oluşan büyümeyi (ki genellikle geometriktir) incelemek için Murray Eden tarafından tanımlanan bu model ile 32×10^3 değerli hücre temsilleri ve görüntüleri bilgisayarda üretilmiştir. Bu model, genelde biyolojik temelli kolonileri ve fizikte bazı depozit türlerinin büyümesini tanımlamaktadır. Bu kümeler kare, üçgen ve altıgen kapalı kare örgü üzerinde başlangıç koşullarına uygun şekilde, merkezi çekirdek çevresinde rastgele madde tanecik birikimi ile büyürler. Yüzeysel geometrik deseni bir fraktal örneği olmakla birlikte, yüzeysel parçacık yoğunluğu oldukça büyük değerdedir [35,36].

2.2.2 Süzülme (Perkolasyon) Kümeleri

Örgü, örgü gözü ve örgü bağından oluşan süzülme kümelerinin bir bağının dolu olma ihtimali P ise boş olma ihtimali de $1 - P$ ile gösterilir. Her bağın dolu ya da boş olma ihtimalinin birbirinden bağımsız olması durumunda dolu olma ihtimalinin bir P_e özel durumunda örgünün bir ucundan diğerlerine uzanan ve bir adet bulunan bir küme oluşur. Bu kümeye sonsuz küme denir. P_e özel olasılık değerine de perkolasyon eşiği adı verilir. Dolu olma ihtimalinin eşik değerinden küçük olması durumunda süzülme oluşmaz. Dolu olma ihtimalinin eşik değerinden büyük ya da o değere eşit olması halinde tek bir küme oluşur. Böylece perkolasyon, dolu göz olma ihtimalinin perkolasyon eşiğine eşit olması halinde oluşan bir faz geçişi olarak tanımlanabilir. P_∞ süzülme ihtimalini belirtmek üzere bir örgü gözü; $(1 - P)$ olasılıkla boş, $P \cdot P_\infty$ olasılıkla sonsuz kümeye ait, $P \cdot (1 - P_\infty)$ olasılıkla başka kümeye ait olma durumlarından yalnızca birinde bulunabilir. Örgü gözünün dolu olma ihtimali ile perkolasyon eşiği arasındaki farkın çok küçük olması halinde süzülme ihtimali;

$$P_\infty \propto (P - P_e)^\alpha \quad (2.31)$$

olacak şekilde α kritik üs değerine sahip olacaktır. i gözlü küme sayısının toplam göz sayısına oranı n_i olmak üzere bir gözün i elemanlı bir kümeye ait olma olasılığı P_i ,

$$P_i = i \cdot n_i \quad (2.32)$$

dir ve bütün olasılıkların toplamı 1 olur.

$$(1 - P) + P \cdot P_\infty + \sum_i i \cdot n_i = 1 \quad (2.33)$$

Dolu gözlere en yakın boş gözlerin sayısı olarak da ifade edilebilecek küme çevresi j olan i gözlü kümenin geometrileri farklı konum sayısı X_{ij} olmak üzere, P olasılığıyla doldurulmuş i elemanlı küme sayısı;

$$n_i(P) = \sum_j X_{ij} P^i (1 - P)^j \quad (2.34)$$

bağıntısı ile bulunur [13,37].

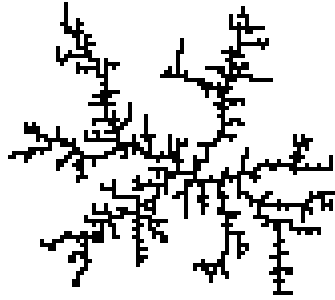
2.2.3 DLA Modeli

İlk kez 1981 yılında Witten ve Sander tarafından önerilen bu büyüme modeli, birincil fiziksel etki, taşıyıcının difüzyon olduğu herhangi bir sistemdeki kümelenmesine uygulanabilmektedir. Elektrodpozisyon, mineral birikintileri, dielektrik kısa devre gibi birçok fiziksel sistemde gözlenen durumların açıklanmasında kullanılabilir. Bu süreçte oluşan ve fraktal yapının bir örneği olan kümelere Brownian ağaçları denir [3,6,9].

Difüzyonla sınırlı kümelenme, Brownian hareket (rastgele yürüme) kümesine bağlı olarak rastgele yayılan parçacıkların bir araya gelmesiyle oluşmaktadır. DLA büyüme modeli kümelerinin yapısını belirleyen, birikintisi oluşan sıvı konsantrasyonu ve ısıl koşullardır. Sistemin sadece dağınık ya da yoğun desenli yapılı olabilmesi için, kritik öneme sahip olan belirleyici özellik, Brownian hareketine maruz kalan parçacık sayısının çok düşük olmasıdır. Yani konsantrasyon değerinin küçük olmasıdır [10,12,14,32].

DLA modeli kullanılarak çok boyutlu uzayda kare gözlü örgülerde ayrıca 2 ve 3 boyutlu uzayda örgüsüz küme simülasyonları yapılmaktadır. Yapışma ihtimalinin küçük

değerlerinde daha yoğun kümeler oluşmakla birlikte, 0,1 ile 1 arasındaki değerlerde fraktal boyutun değişmediği gözlenmektedir.



Şekil 2.1: DLA modeli birikinti temsili.

2.3 Büyüme Modellerinde Katılma Desenlerinin Oluşumu

Katılma sürecinde tek çekirdekten başlangıçta daireler şeklinde, sonrasında dallanarak büyüyen desenler elde edilmektedir. Bunun için genelleştirilmiş DLA modeli kullanılmaktadır. Taneciklerin yapışma olasılıklarının ara kesit yerel yönelimine göre değiştiği kabulüyle eşyönsüz yüzey gerilimi etkisi incelenmektedir. Yönlü olarak rastgele yürüyen taneciklerin birikimiyle oluşan katılma simüle edilmektedir. Deneylerde elde edilen desenler ile simülasyon sonucu elde edilen doğrusal kararlı desenler benzer olmaktadır.

Katılma yüzeyinin hareketi yayılma alanı $u(x, t)$ 'ye bağlı olup, ara kesitin ilerleyişi yavaş olursa,

$$\nabla^2 u(x, t) = 0 \quad (2.35)$$

denklemini sağlar. Bu denklem, ara kesit sıcaklığı ve erime sıcaklığı arasındaki,

$$T_i = T_e \left(1 - \frac{\gamma\eta}{L}\right) \quad (2.36)$$

Gibbs-Thomson bağıntısı kullanılarak çözümlenmelidir. γ 'nın yüzey gerilimini, η 'nın ara kesitin yerel eğriliğini, L 'nin erime ısısını belirttiği bu bağıntıya göre parçacığın küme yüzeyine yapışma olasılığı ara kesitin yerel eğriliğine bağlıdır. Eğriliğin sıfırdan büyük olduğu kısımlarda yapışma olasılığı daha düşüktür. Dolayısıyla küme büyümesi yavaşlar.

Taneciğin ara kesitte bulunan boş bir göze yerleşme olasılığı, göze en yakın dolu komşu göz sayısı ile orantılıdır [20].

2.4 Büyüme Modelinde Hücresel Oluşum

Doğadaki birçok karmaşık sistemin anlaşılabilmesi için model olarak kullanılan hücresel yapılanmaların kesikli değer alan konum, zaman ve hal değişkenleri, kendiliğinden düzene girdiğinden karmaşık desenler oluşturmaktadırlar. Hücresel yapılanmanın herhangi bir t anında bulunduğu hal t – 1 anındaki haline bağlıdır. Oluşum ise i inci örgü gözü için;

$$X_i^{(t+1)} = f(X_{i-1}^t, X_i^t, X_{i+1}^t) \quad (2.37)$$

fonksiyonunu sağlar. Hücresel yapılanma yöntemiyle aynı fraktal boyutta DLA kümeleri elde edilebilmektedir [20].

2.5 Topolojik Fraktal Boyut

Doğal yüzeyler ve ikincil yapıların çoğu, farklı ölçeklerde kendine benzerdir (self-affine). Fraktal geometride ölçeklemeye (scaling) karşı kendine benzerlik önemsiz bir kavramdır. Öklid geometrisi referans alınarak n-boyutlu uzayda sınırlandırılmış A kümesinde en küçük kare boyutu r, parçacık sayısı N olmak üzere, N ve r arasındaki ilişki,

$$N \propto r^{-D_f} \quad (2.38)$$

bağıntısıyla tanımlanabilir.

Bu bağıntıdaki D_f değeri ölçekleme teorisine göre bir kritik üs olarak birikintilerin bulunduğu yüzeydeki pürüzlülüğü ve düzensizliği karakterize eden fraktal boyut değeridir. Fraktal boyut değeri;

$$D_f = \frac{\log N (1/r)}{\log \left(\frac{1}{r}\right)} \quad (2.39)$$

bağıntısıyla hesaplanır. Sonuç olarak büyük fraktal boyut daha pürüzlü dokuya işaret eder [7,8,10-12,38,39].

2.6 Entropi

Entropi termodinamiğin 2. yasasının bir sonucudur. Pratik bir yaklaşımla, bir sistemin düzensizliği ve o sistemdeki rastgele davranışının bir ölçüsü olarak tanımlanan entropi, bir sistemin termodinamik parametresi olması dolayısıyla önemli bir niceliktir. Sistemi oluşturan alt sistemlerin entropi değerlerinin toplamı, sistemin toplam entropi değerine eşit olduğu için yaygın türden bir değişkendir. Sistemin entropi değerini hesaplamak için sistemi oluşturan alt sistemlerin farklı mikro durumlarında bulunma olasılığının aynı olduğu varsayımında bulunulur. İstatistiksel açıdan toplam mikro durum sayısına bağlı olarak bir sistemin entropisi,

$$S = k_B \ln \Omega \quad (2.40)$$

şeklinde tanımlanır. Burada k_B Boltzman sabiti, Ω olası tüm mikro durum sayısıdır. Mikro durum sayısının belirlenmesi, sistemi oluşturan alt sistemlerin permütasyonu ya da kombinasyonu olarak hesaplanabilir. Mikro durum sayısı sisteme ait sınır şartlarına göre değişim gösterir [17,21-24].

İlk kez 1948 yılında Claude Shannon tarafından önerilen Shannon entropisi rastgele dağılıma sahip veri için belirsizliği ölçmek için kullanılmaktadır. Bilgi teorisine göre ayrık rastgele bir değişken için Shannon entropisi,

$$H(x) = - \sum_{i=1}^n P(x_i) \log P(x_i) \quad (2.41)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $H(x)$ ve $P(x_i)$ sırasıyla x rassal değişkeninin entropisi ve i nci durumda bulunma olasılığıdır [25].

2.7 İstatistik Fizikte Ölçekleme Teorisi

İstatistik fizikte, bir sisteme ait herhangi bir nicelik değeri için, belli ölçütlerde parçacıklar arası ilişki kurma yani küçük çapta tasarlardan büyük çapta yapıları tasarlama olarak tanımlanan ölçekleme (scaling) ve kendine benzerlik (self-affine) olgusu, özellikle maddenin morfolojisi, birinci ve ikinci dereceden faz geçişleri için tanımlanmaktadır. Ölçekleme kendine özgü deneysel sistemler ve deneysel detaylara ait parametrelerden bağımsızdır. Fizikte bağımsız değişken ile bağımlı değişken arası ilişkiler genellikle

bağımsız değişkenle orantılı basit üs değerleri içeren fonksiyonlar (power-law) ile tanımlanabilir. Bu nicelikler arası ilişkileri belirleyen bağıntılardaki üs değerleri istatistik fizikte “kritik üs” olarak tanımlanır. Bu değerlerin çoğunun “evrensellik” özelliği vardır [8].

Fiziksel ve kimyasal sistemlerde parçacık difüzyonu, birikme ve çökme sonucu oluşan birikintiler kendine benzer özellik göstermektedir. Kesin bir tanımı olmamakla birlikte, ölçekleme yasası, bir fiziksel büyüklüğün değerinin bir ya da daha fazla parametreyle orantılı olması şeklinde tanımlanabilir [13,41]. Söz konusu parametreler arası ilişkiler, sistemin faz uzayında bazen polinom, bazen logaritmik, bazen trigonometrik ve bazen de ters orantılı olarak tanımlanabilmektedir.

En bilinen örneklerden birisi olarak Coulomb Yasası verilebilir. F yüklerin birbirlerine uygulamış oldukları elektriksel kuvvet, q_1 ve q_2 elektrik yükleri ve r de yükler arasındaki uzaklık olmak üzere;

$$F_{12} = k \frac{q_1 q_2}{r^\alpha} \quad F \propto r^{-\alpha} \quad (2.42)$$

denklemini yazılabilir [13,18,41,42]. Buradaki $\alpha = 2$ olarak kritik bir üs tanımlanır.

3. MATERYAL VE METOT

Bu tez çalışmasında Monte Carlo Metodu kullanılarak geliştirilmiş DLA algoritması ile küme temsilleri üretilmektedir. Lineer boyutu L ve sabit kümedeki parçacık sayısı N olan kapalı kare örgü kullanılması tercih edilmiştir. Standart çekirdek parçacık kapalı kare örgünün köşegenlerinin kesim noktası olan (L/2 piksel, L/2 piksel) koordinatına yerleştirilmiştir. Hazırlanan yazılım çalıştırılarak küme temsilleri üretilmiş ve görsel bitmap (BMP) formatında bilgisayara kaydedilmiştir [8,12].

Kümelere farklı morfolojik fazını görsel olarak belirlemek için, simülasyonda yapışma olasılığı ve yapışma olasılığını belirleyen parametresi kullanılmaktadır. Özellikle yapışma olasılığı P, kimyasal olarak reel bir sistem için ortamda geri dönüşümsüz katyonların indirgenerek azalmasını gerektiren kimyasal aktivasyon enerjisi ile orantılı bir parametreyi göstermektedir. Fiziksel olarak elektriksel potansiyel ve kimyasal olarak konsantrasyon gradiyentini temsil etmektedir. Geliştirilmiş DLA modeli algoritmasında küme temsillerinin oluşumu, kapalı kare örgünün kenarından gönderilen ve rasgele hareket ile kümenin her hangi dolu gözünün komşu boş göze gelmesi süreci içerisinde parçacıkların kümenin çevresindeki boş gözleri doldurması yapışma olasılık ile gerçekleşir. Yapışma olasılığı,

$$P = t^{3-B} \quad (3.1)$$

denklemleri ile tanımlanır. Burada t, algoritmaya uygun yapışma olasılığı parametresi olup değeri $0 < t \leq 1$ arasında değişen algoritmik keyfi bir değerdir [14].

Saçaklı yapıdan yoğun yapıya doğru değişen farklı morfolojik görünüme sahip bu küme temsillerinin üretimi, Samsung NP-R525-JV01TR marka bilgisayarda; parçacık sayısı bu çalışma için hazırlanan yazılım, hesaplamalar Microsoft Excel ve grafik çizimi Origin Pro 7.0 programıyla dağılım genişlikleri ile jirasyon yarıçap değerleri hesaplanmıştır. Her bir temsil için ImageJ programı ile kutu sayma metodu kullanılarak fraktal boyut değerleri hesaplanmıştır [43-45].

4. BULGULAR

Bilgisayar ile Monte Carlo tekniğiyle, geliştirilmiş DLA algoritmasında keyfi yapışma olasılık parametresi kullanılarak küme temsilleri üretilmektedir. Yapışma olasılık parametresi $0 < t \leq 1$ değerli, lineer boyutu $L = 10^2$ piksel kapalı kare örgü üzerinde $N = 10^3$ tanecikli DLA modeli küme temsilleri üzerinde radyal parçacık dağılımı, entropi ile ilgili hesaplamalar yapılmaktadır. Buna göre sırası ile, olasılık parametresi 1, 0,8, 0,6, 0,4, 0,2, 0,1, 0,09, 0,07, 0,05, 0,03, 0,01, 0,009, 0,007, 0,005, 0,003 ve 0,001 değerleri keyfi olarak seçilip her birinden onar tane küme temsili üretilerek hesaplamalar gerçekleştirilmiştir. Olasılık parametresinin kullanılması ile farklı türde morfolojiye sahip temsiller üretilmektedir. Buna göre morfolojik desen, saçaklı yapıdan yoğun yapıya doğru değişim göstermektedir. Parçacıkların çekirdekten çevreye göre dağılımında, $t = 1$ değerinde dallar ve alt dallar arası uzaklık artmaktadır. t değeri küçüldükçe küme yoğun bir yapıya dönüşmektedir. Özellikle $t \leq 0,01$ değerinde tamamen yoğun bir yapıda olduğu ve Eden Modeli kümelerine benzeştiği gözlenmiştir.

Bu çalışmanın olası istatistiksel hatalarını azaltmak için yaklaşık 160 küme üzerinde grup ortalamaları alınarak hesaplamalar yapılmıştır. İlk adım olarak birikinti temsiline radyal parçacık dağılımını belirlemek için örgü gözlerindeki parçacık yoğunluğu belirlenmektedir. Bu birikinti temsiline görüntüsü, bitmap bilgisayar görüntü formatında, yani siyah-beyazdır. Siyah gözler birikintinin bir parçası, beyaz gözler ise birikintinin oluşturduğu alt tabakadır. Genel ölçekleme yaklaşımıyla her bir örgü gözü için parçacık yoğunluğu,

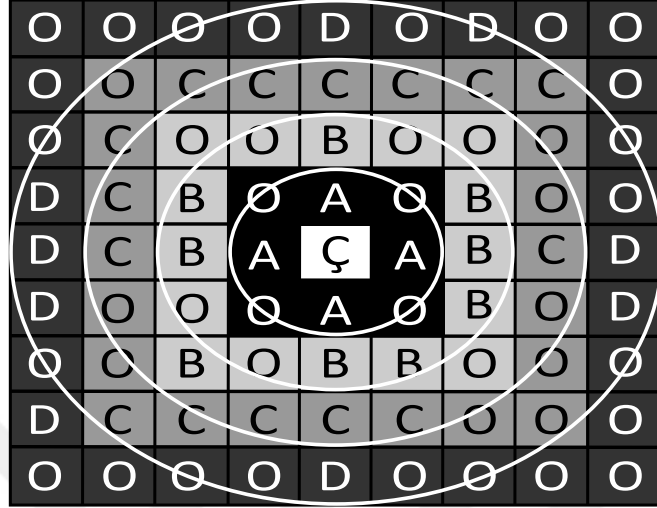
$$\rho_{(i,j)} = \begin{cases} 1 & \text{siyah gözler için} \\ 0 & \text{beyaz gözler için} \end{cases} \quad (4.1)$$

olarak tanımlanabilir [11]. Böylece çekirdek parçacıktan çevreye doğru çembersel parçacık yerleşke yarıçapı adımları için $1 \text{ piksel} = \Delta r_{ij} = r_j - r_i$ arasında radyal parçacık sayısının toplamı küme görüntüsündeki değerleri,

$$N = 1 + n_1 + n_2 + \dots + n_n = 1 + \sum_{i=1}^N \rho_i \sum_{r=10}^{r_{max}} (r_j - r_i) \quad (4.2)$$

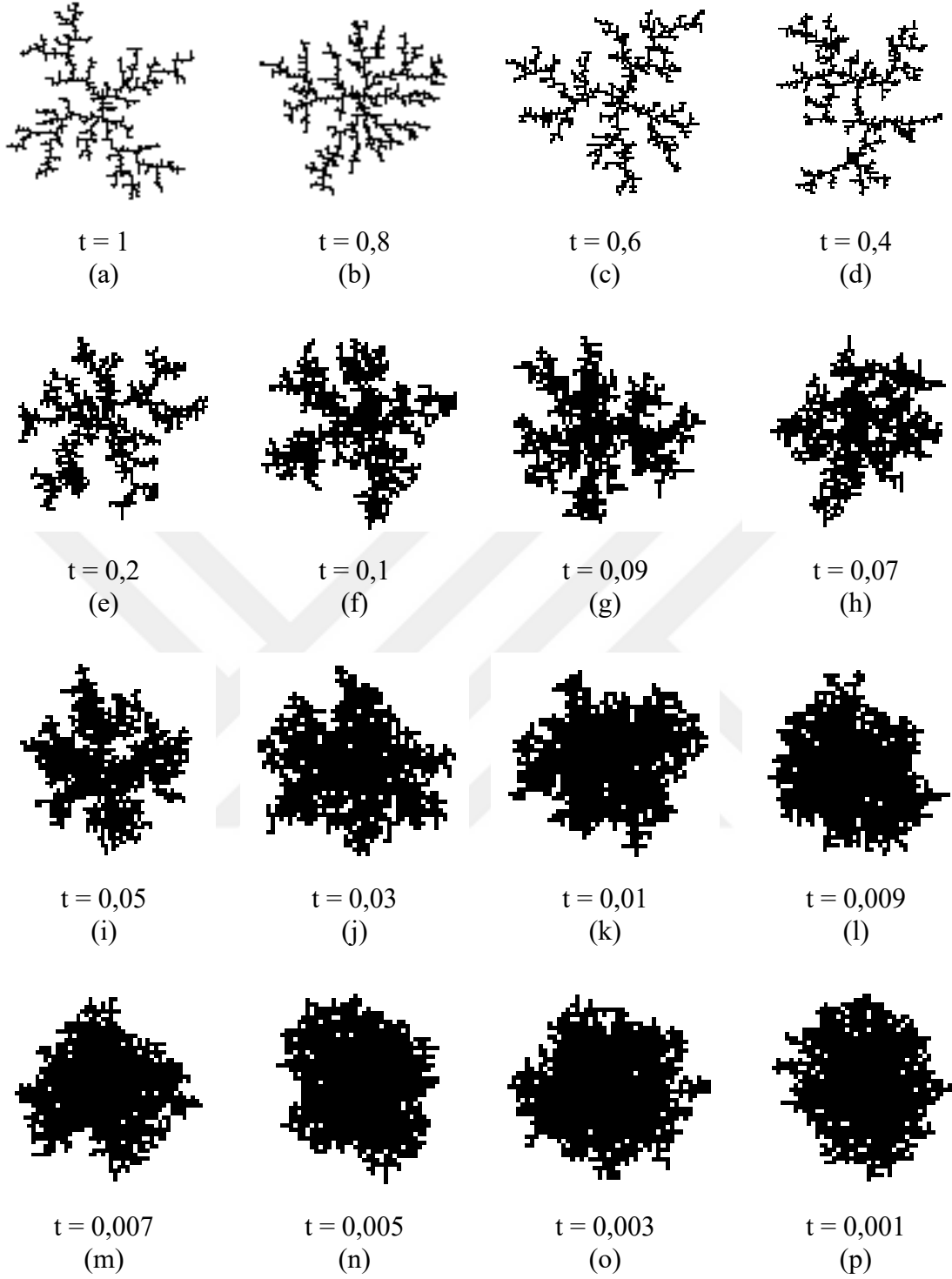
bağıntısı kullanılarak toplam parçacık sayısı hesaplanır. Buna göre çekirdek parçacıktan küme çevresine göre ilk dört parçacık konumu ve dağılımının değişimi Şekil 4.1'de

gösterilmektedir. Ç, çekirdek parçacık, A, B, C ve D sırası ile radyal parçacıkların konumunu belirtmektedir. Her bir parçacık komşu parçacıkla komşu ve eklemlidir. Ayrıca O ise kümenin bulunduğu alt yapı gözlerini temsil etmektedir.



Şekil 4.1: Çekirdek parçacıktan çevreye doğru parçacık dağılımının yerleşkesi.

Yapışma olasılık parametresine göre üretilen küme temsilleri Şekil 4.2’de gösterilmektedir. 1 ile 0,001 değerleri arasında seçilen 16 adet keyfi yapışma olasılık parametresi ile üretilen desenler; yapışma olasılık parametresinin en büyük değerinde dağılım genişliği maksimum değerini aldığından saçaklı yapıya sahip olmaktadır. Yapışma olasılık parametresi küçüldükçe dağılım genişliği azalmakta ve saçaklı yapıdan yoğun yapıya dönüşüm gerçekleşmektedir. $t = 0,01$ değerinden itibaren saçaklı görünüm tamamen yok olup Eden modeli kümeleriyle özdeş yoğun bir yapıya sahip olmaktadır. Dağılım genişliği giderek küçüldüğünden eş büyüklükte görünüm elde edilebilmesi için farklı büyütme oranları kullanılmaktadır.



Şekil 4.2: Kapalı kare örgü lineer boyutu $L = 10^2$ piksel, yapışma olasılığı $t = 1$ (a), $t = 0,8$ (b), $t = 0,6$ (c), $t = 0,4$ (d), $t = 0,2$ (e), $t = 0,1$ (f), $t = 0,09$ (g), $t = 0,07$ (h), $t = 0,05$ (i), $t = 0,03$ (j), $t = 0,01$ (k), $t = 0,009$ (l), $t = 0,007$ (m), $t = 0,005$ (n), $t = 0,003$ (o), $t = 0,001$ (p) değerli ve $N = 10^3$ tanecikli 16 farklı DLA modeli birikinti temsili. Üretim süreçleri birbirinden bağımsızdır. Ancak küme parametre değerleri birbirine yakındır. Bazı kümelerin büyütme oranları birbirinden farklıdır.

Küme temsilinin toplam parçacık sayısı,

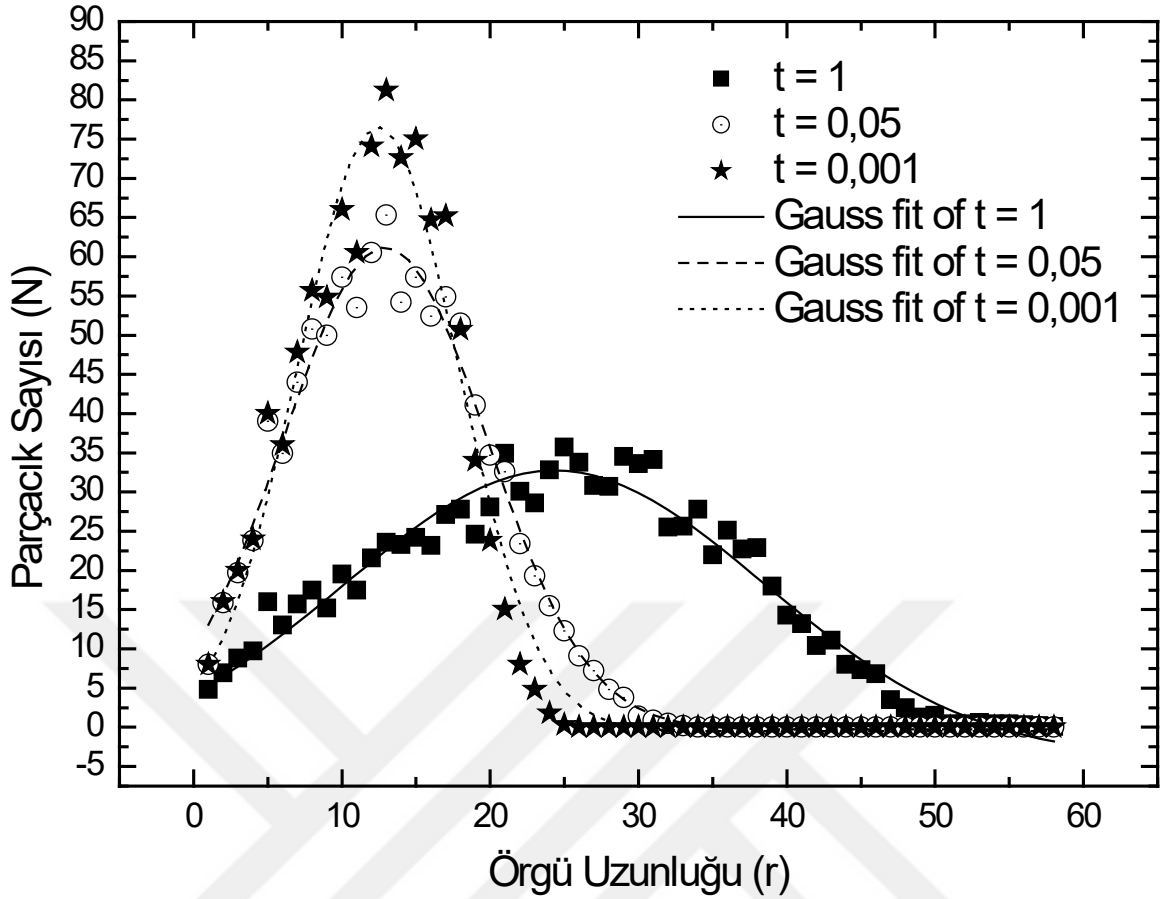
$$N = 1 + \sum_{r=1}^{r=r+1} \left(\sum_{i=1}^n \rho_i(x_i, y_i) \right) \quad (4.3)$$

bağıntısı ile tanımlanabilir. Burada 1 (bir) değeri çekirdek parçacığı göstermektedir.

Küme temsillerindeki radyal parçacık dağılımı, merkezi çekirdekten küme çevresine doğru Gauss dağılımı göstermektedir. $r = 1$ 'den $r \leq R_{\max}$ için istatistiksel dağılım fonksiyonu,

$$f(r, n) = f(r_0, n_0) + \frac{a}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ -b \left[\frac{r - r_G}{\sigma} \right]^2 \right\} \quad (4.4)$$

bağıntısı ile hesaplanır [39]. Bu denklemde; $f(r_0, n_0)$ değeri çekirdek parçacığın katkısı, σ aktif dağılım genişliği ve r_G jirasyon yarıçapını yani parçacıkların en fazla olduğu çembersel yerleşim konumunu göstermektedir. Yapışma olasılık parametresi $t = 1$, $t = 0,005$ ve $t = 0,001$ değerlerine göre dağılım diyagramı Şekil 4.3'te gösterilmektedir. Diyagram üzerindeki dağılım çizgisi, Gauss Dağılım Fonksiyonuna göre lineer olmayan regresyon (en küçük kareler) yöntemi kullanılarak belirlenmektedir. Ayrıca t parametresine göre dağılım genişliği, jirasyon yarıçapı değerleri özetlenerek Tablo 4.1'de gösterilmektedir.



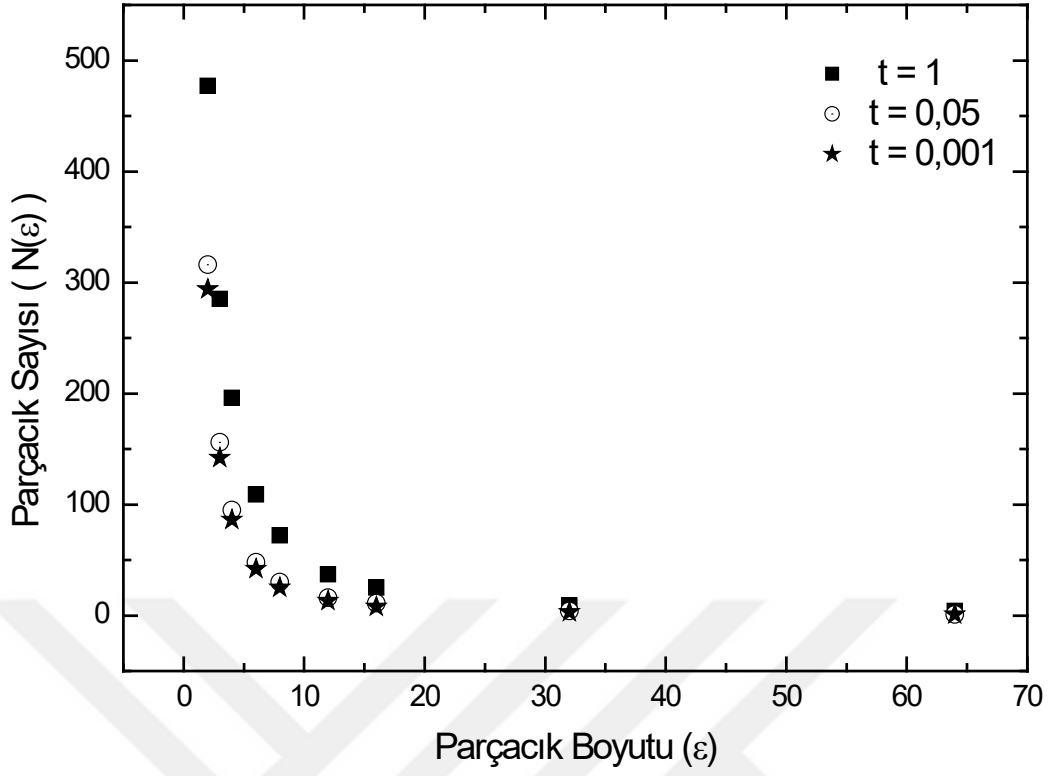
Şekil 4.3: DLA küme temsillerinde yapışma olasılık parametresi $t = 1$, $t = 0,5$ ve $t = 0,001$ değerlerine göre radyal yarıçapın parçacık dağılımına göre değişim grafiği diyagramı.

Kümede parçacık dağılımı ayrıca fraktal boyut hesaplaması ile belirlenebilir. Farklı algoritmalar fraktal boyut hesaplaması için geliştirilmiştir. Bunlar genelde foto metrik yöntemlerdir. Küme temsillerinin fraktal boyut değerini belirlemek için bu çalışmada, kutu-sayma (box-counting) yöntemi tercih edilmektedir. Bu yöntemde simülasyon sonucu üretilen bilgisayar atmosferinde bitmap formatındaki küme temsil görüntüleri bilgisayar ekranının çalışma sistemine uygun olarak karelenir. Kümeyi oluşturan her bir parça siyah piksellerle küme dışı diğer parçalar beyaz piksellerle gösterilir. Yani küme parçalarının bulunduğu gözler ve boş gözler belirlenir. Küme temsilleri bilgisayar ekran yapısı referans alınarak, pikselde siyah görüntü varsa yani o kutu dolu ise 1, kutu boş ise 0 olarak belirlenerek parçacıklar gruplanarak sayma işlemi uygulanır. Küme görüntüsünde piksel boyutundaki siyah kutular toplam parçacık sayısı $N(\epsilon)$ olmak üzere, her bir işlem adımı için ($\epsilon=1, 2, 4, 16, 32, \dots, \text{piksel}$) 2^i 'nin üs değeri olarak değişimi belirlenir. Buradaki, $i = 0, 1, 2, \dots, n$ değerlerini gösterir. Burada ϵ her bir piksel için boyut değeri artarken, bu değere göre gruplanan parçacıkların toplam sayısı $N(\epsilon)$ değeri hesaplanmaktadır. Parçacık

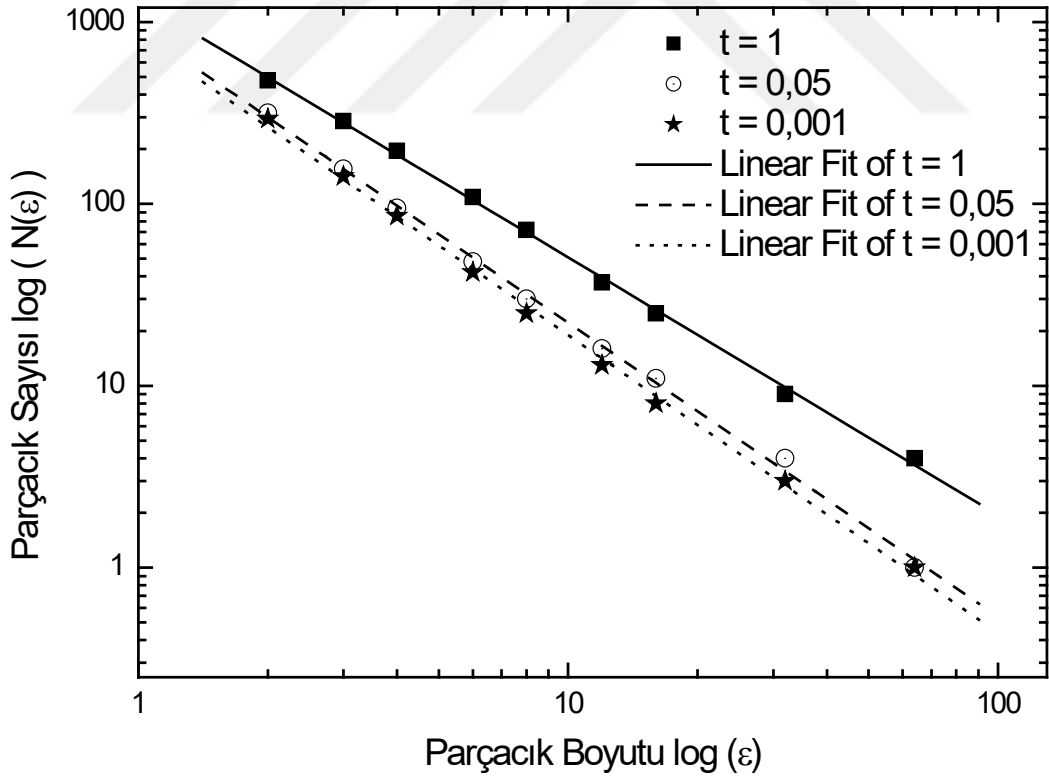
sayısının $N(\varepsilon)$ deęerinin piksel boyut deęerinin tersi ε grafięi çizilir. Her iki eksenin logaritması alınarak, grafięin eęim deęeri, en küçük kareler yöntemi kullanılarak fraktal boyut deęeri hesaplanmaktadır. Buna göre fraktal boyut deęeri,

$$D_f = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\log N(\varepsilon)}{-\log(\varepsilon)} \quad (4.5)$$

baęıntısı ile hesaplanabilir [1,3,4,7,8,10-12,39,40,46]. İstatistiksel olarak uyum regresyon katsayısı ile kontrol edilmektedir. Şekil 4.4 (a)'da $t = 1$, $t = 0,05$ ve $t = 0,001$ parametresine göre parçacık dağılımının parçacık boyutuna göre grafięi ve Şekil 4.4 (b)'de logaritmaları alınarak eęilim doęruları gösterilmektedir. Şekil 4.4 (b)'de sırası ile fraktal boyut, standart sapma ve regresyon katsayısı $t = 1$ için $D_f = 1,49964 \pm 0,02348$, $R = 0,99914$, $t = 0,05$ için $D_f = 1,64602 \pm 0,0232$, $R = 0,99931$ ve $t = 0,001$ için $D_f = 1,5933 \pm 0,04216$, $R = 0,99756$ en küçük kareler yöntemine göre deęerleri hesaplanmıştır. Dięer deęerler ise on farklı küme ortalaması olarak Tablo 4.1'de özetlenerek sunulmaktadır.



(a)



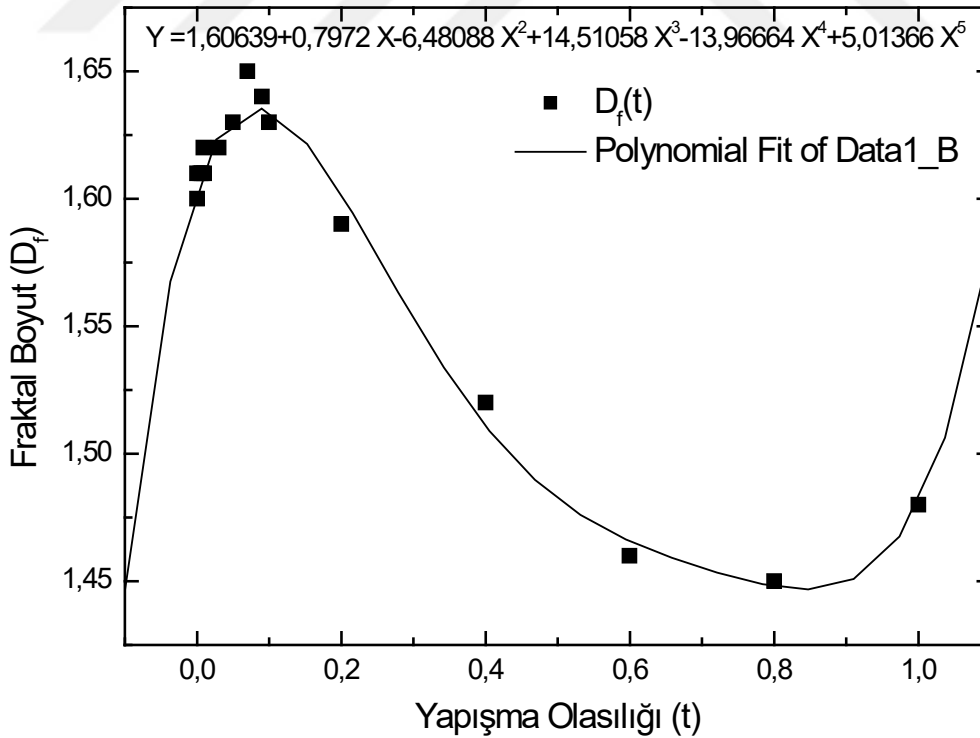
(b)

Şekil 4.4: (a) Parçacık sayısının parçacık boyutuna göre değişimi, (b) parçacık sayısının ve parçacık boyutu logaritmaları ve en küçük kareler yöntemi ile hesaplanan eğilim doğruları.

DLA algoritması ve yapışma olasılık parametresine göre üretilen küme temsillerinin fraktal boyut değerine göre değişimi Şekil 4.5'te gösterilmektedir. Fraktal boyut değeri ile yapışma olasılık parametresi arasındaki ilişkiyi nümerik bir model olarak, 5. Dereceden polinom fonksiyon olarak tanımlamak mümkündür. Buna göre fraktal boyut değerinin yapışma olasılık parametresi ile ilişkili a , b_1 , b_2 , b_3 , b_4 ve b_5 değerli 5. dereceden polinom ve katsayıları ile beraber,

$$D_f(t) = a + b_1t + b_2t^2 + b_3t^3 + b_4t^4 + b_5t^5 \quad (4.6)$$

fonksiyonu ile tanımlamak mümkündür. İstatistiksel olarak katsayıları belirlemek için lineer olmayan regresyon metodu kullanılmaktadır. Nümerik model parametre değerleri $a = 1,606 \pm 0,004$, $b_1 = 0,797 \pm 0,145$, $b_2 = -6,481 \pm 1,298$, $b_3 = 14,511 \pm 4,012$, $b_4 = -13,967 \pm 4,929$ ve $b_5 = 5,014 \pm 2,078$ ve regresyon katsayısı $R = 0,98377$ değerleri hesaplanmıştır. Regresyon katsayı değerine göre uyum oldukça "kabul edilebilir" düzeydedir. Ayrıca fraktal boyut değerinin yapışma olasılığı parametresine bağlı değişimi grafiği Şekil 4.5'te gösterilmiştir. Eğilim çizgisi veri değerlerini yaklaşık olarak temsil etmektedir [46].



Şekil 4.5: DLA algoritması ve yapışma olasılık parametresine göre üretilen birikinti temsillerinin fraktal boyut değerine göre değişimi.

Kümelerin oluşumu termodinamik açıdan nerede ise tersinir bir süreçtir. Ancak entropi değerini hesaplariken bazı varsayımlar yapılmaktadır. Olası en önemli varsayım, küme oluşum süreci içindeki her bir mikro durumun eşit derecede olasılık değerine sahip olmasıdır. Ancak gerçek sistemde bu durumu gözlemlemek mümkün değildir. Küme oluşum şartları ve süreci, her bir parçacığın kümenin bir elemanı olarak aktif olması, önceki konum ve şartların gerçekleşmesi ile ilişkilidir. Yani küme oluşum sürecinin geçmişteki oluşum süreci için de bir tarihi vardır. Küme oluşumu süreci radyal parçacıkların küme elemanı olarak kümeyle yerleşme olasılığı ile ilişkili olduğundan son oluşumun statik küme üzerinden hesaplamalar yapmakla küme oluşum sürecinin değişimini tanımlayabilir.

Bir sistemin entropi değeri, termodinamik açıdan Boltzmann, iletişim teorisine göre de ilk defa 1948'de Claude E. Shannon tarafından önerilen Shannon entropisi olarak belirlenebilir [16,47,48]. Boltzmann entropisi için aşağıdaki yaklaşım önerilebilir. Statik küme temsilinin entropi değerini hesaplamak için her bir kümenin $1 < r < R_{\max}$ aralığında radyal parçacık sayıları hesaplanmaktadır. $\Delta r = r_j - r_i$ aralığı bir piksel olarak alınmıştır. Buna göre Δr aralığındaki parçacık sayısı n_k değeri en büyük,

$$\Delta A = \pi(r_j^2 - r_i^2) \quad (4.7)$$

gözleri içerisinde farklı yerleşim kombinasyonu oluşturmaktadır. Her bir parçacık için eşit değerde yapışma olasılık değeri verildiğinde, entropi, Boltzmann sabitinin olası farklı yerleşim durum sayısının (mikro durum) doğal logaritması ile çarpımına eşittir. Buna göre entropi değeri,

$$S = k_B \ln \Omega \quad (4.8)$$

istatistiksel olarak tanımlanmıştır. (4.8) denklemindeki $k_B = 1.381 \times 10^{-23}$ J/K Boltzmann sabiti ve Ω açık sistem olan DLA kümelerinin mikro durum sayısıdır. Buna göre Δr aralığında parçacık sayısı n_k olmak üzere ΔA tane olan yerleşim gözü için mikrodurum sayısı ΔA değerinin n_k 'ya göre kombinasyonu olarak belirlenir. Buna göre n_k 'nın ΔA 'ya göre mikro durum sayısı,

$$C \binom{\Delta A}{n_k} = \frac{\Delta A!}{(\Delta A - n_k)! n_k!} \quad (4.9)$$

bağıntısı ile tanımlanır.

Termodinamik kavram olarak entropi bir sistem, için yaygın türden bir değişkendir. Buna göre bir sistemi oluşturan alt sistem entropi değerlerinin toplamı, o sistemin bütünsel entropi değerine eşittir. Böylece DLA birikinti temsilleri için entropi,

$$S_{ij} = k_B \ln \left[\frac{\Delta A!}{n_k! (\Delta A - n_k)!} \right] \quad (4.10)$$

bağıntısı ile tanımlanabilir. Logaritmik işlem özelliği kullanılarak (4.10) bağıntısı aşağıdaki gibi yazılabilir. Buna göre entropi;

$$S_{ij} = k_B \{ \ln \Delta A! - [\ln n_k! - \ln(\Delta A - n_k)!] \} \quad (4.11)$$

Ancak $\Delta A!$ ve $n_k!$ faktöriyel fonksiyonu ile işlemler yapmak oldukça problem çıkaracaktır. Büyük faktöriyel hesaplamaları için Stirling bağıntısı kullanılabilir. Bu bağıntı ΔA faktöriyel için;

$$\ln \Delta A! \approx \Delta A \ln \Delta A - \Delta A \quad (4.12)$$

şeklinde tanımlanmıştır. (4.12) denklemini (4.11) denkleminde kullanıldığında entropi;

$$S_{ij} = k_B \sum \{ \Delta A \ln \Delta A - \Delta A - [(\Delta A - n_k) \ln(\Delta A - n_k) - (\Delta A - n_k)] - [n_k \ln n_k - n_k] \} \quad (4.13)$$

denklemini elde edilir. Düzenlenirse DLA küme temsiline entropisi,

$$S = \sum_{i,j=1} S_{ij} = k_B \sum \{ \Delta A \ln \Delta A - (\Delta A - n_k) \ln(\Delta A - n_k) - n_k \ln n_k \} \quad (4.14)$$

bağıntısı sonucuna ulaşılır. Radyal parçacık konumları referans alınarak parçacıkların mikro durumları belirlenip entropi değerleri hesaplanmaktadır. Entropinin radyal küme yarı çapına göre değişim grafiği Şekil 4.6'da gösterilmektedir.

Diğer bir entropi yaklaşımı Shannon entropisidir. DLA kümelerinde bir rastgele değişken olarak parçacık sayısına ait belirsizlik, radyal parçacık sayı değişkeninin olası sonuçların

doğasının ortalama seviyesidir. Bilgi teorisinde entropi kavramı Claude Shannon tarafından 1948 tarihinde önerilmiştir. Ayrık rastgele değişkenin entropi değerini H olarak tanımlamıştır. Kümede radyal yarıçap r_1, r_2, \dots, r_i konumlu parçacık sayısı n_i olan olası değeri n_1, n_2, \dots, n_n ve olasılık kütle fonksiyonu $P(n)$ olmak üzere Shannon entropisi beklenen değer arasındaki ilişki,

$$H(n) = E[-\log(P(n_i))] \quad (4.15)$$

bağıntısı ile belirlenir. Burada E beklenen değer operatörü ve n_i bilgi içeriği arasındaki ilişkidir. Böylece DLA kümeleri için Shannon entropisi,

$$H(n) = -\sum_{i=1}^n P(x_i) \log_b P(x_i) \quad (4.16)$$

bağıntısı ile tanımlanır. Burada b bir baz değerine göre logaritmayı belirtir. Normal sistemler için $b = 2$ olan Euler sayısı e veya entropiden gelen birimleri bit için $b = 2$, doğa için $b = e$ ve yasaklar için $b = 10$ değerlerini alır. Örneğin $P(n_i) = 0$ bazında i , toplam kısmına karşılık gelen değeri $b(0)$ olarak alınır. Yani,

$$\lim_{P \rightarrow 0^+} P \log P = 0 \quad (4.17)$$

koşulu sağlanır.

İki değişkenin koşullu entropisi için işlem yapılabilir. Buna x ve y rasgele değişkenler olmak üzere, sırası ile x_i ve y_i için entropi,

$$H(x, y) = -\sum_{i,j} P(x_i, y_j) \log \frac{P(x_i, y_j)}{P(y_j)} \quad (4.18)$$

bağıntısı ile hesaplanır.

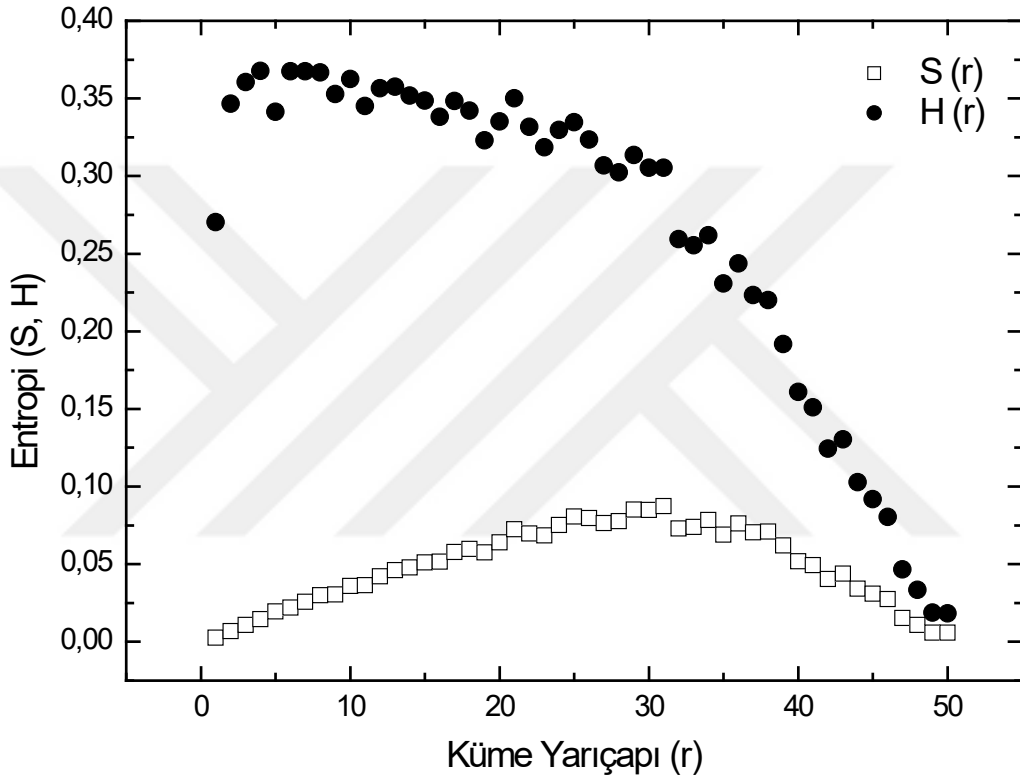
DLA kümesinde radyal parçacık dağılımına göre parçacığın r_i yarıçaplı çember yörünge üzerinde bulunma olasılığı,

$$P(n_i, r_i) = \frac{n_i}{2\pi r_i} \quad (4.19)$$

bağıntısı ile tanımlanır. Burada sırası ile n_i , r_i parçacık sayısı ve çembersel yerleşkenin yarıçapıdır. Buna göre DLA küme temsillerindeki Shannon entropisi yaklaşık olarak,

$$H(n_i, r_i) = - \sum_{i=1}^N P\left(\frac{n_i}{2\pi r_i}\right) \log P\left(\frac{n_i}{2\pi r_i}\right) \quad (4.20)$$

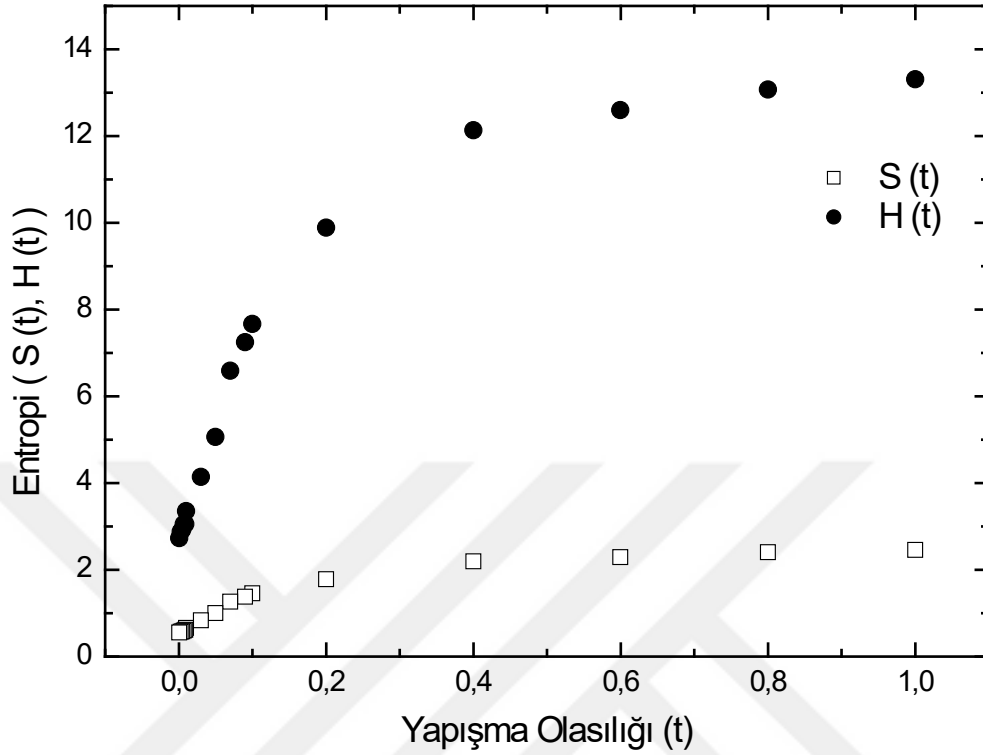
bağıntısı ile hesaplanabilir [49].



Şekil 4.6: DLA algoritması ve yapışma olasılık parametresine göre üretilen küme temsillerinin entropi değerinin radyal yarıçapa bağlı değişimi.

DLA küme temsilleri için hesaplanan Boltzmann ve Shannon entropisinin radyal yarı çapa bağlı değişimi Şekil 4.6'da gösterilmiştir. Boltzmann entropisi r değerine göre artarken $r < r_G$ değerinden sonra azalmaktadır. Shannon entropisi ise radyal yarıçap değerine göre değeri azalmaktadır. Hesaplanan iki farklı tür entropi değerleri Tablo 4.1'de özetlenerek verilmiştir. Ayrıca entropi değerinin yapışma olasılığına bağlı değişim grafiği Şekil 4.7'de gösterilmektedir. Yapışma olasılık parametresi azalırken entropi değerlerinin azaldığı belirlenmektedir. DLA kümelerinde yapışma olasılık parametresi küçüldüğünde parçacık dağılımı morfolojik deseni olarak azalmakta, küme yoğun dağılımlı bir yapıya dönüşmektedir. Küme yapısı Eden modeli küme temsillerine dönüşmektedir. Dolayısı ile

belirsizlik artmaktadır. Yani küme kanonik bir özellik kazanmaktadır. Böyle yapıli kümelerde parçacıklar arası etkileşimleri belirlemek oldukça zordur.



Şekil 4.7: DLA algoritması ve yapışma olasılık parametresine göre üretilen küme temsillerinin entropi değerinin simülasyon yapışma olasılığı t ye göre değişimi.

Ayrıca DLA ve Eden modeli küme temsillerinin entropi değerleri Tablo 4.1’de sunulmaktadır. Bu çalışmada hesaplanan sonuçların diğer büyüme modeli kümeleri ile karşılaştırması Tablo 4.2’de verilmektedir. Entropi değerine karşılık fraktal boyutlar için elde edilenler daha fazladır, çünkü D_f çok daha büyük küme boyutları kullanılarak belirlenebilir.

Tablo 4.1: t parametresine göre dağılım genişliği (σ), jirasyon yarıçapı (r_G), fraktal boyut (D_f), Boltzmann entropisi (S) ve Shannon entropisi (H) değerleri.

| t | σ | r_G | Regresyon katsayısı | D_f | Regresyon katsayısı | S | H |
|-------|----------------|----------------|---------------------|---------------|---------------------|------|-------|
| 1,0 | 28,239 ± 1,455 | 24,343 ± 0,276 | 0,9594 | 1,476 ± 0,022 | 0,999199 | 2,46 | 13,31 |
| 0,8 | 25,119 ± 0,931 | 23,288 ± 0,249 | 0,96734 | 1,452 ± 0,020 | 0,99925 | 2,40 | 13,07 |
| 0,6 | 24,521 ± 0,951 | 22,132 ± 0,187 | 0,97833 | 1,458 ± 0,020 | 0,999224 | 2,29 | 12,60 |
| 0,4 | 23,066 ± 0,783 | 20,432 ± 0,172 | 0,98177 | 1,517 ± 0,019 | 0,999383 | 2,19 | 12,13 |
| 0,2 | 19,518 ± 0,942 | 17,419 ± 0,185 | 0,97429 | 1,586 ± 0,023 | 0,999235 | 1,78 | 9,89 |
| 0,1 | 17,850 ± 0,778 | 14,518 ± 0,196 | 0,9737 | 1,633 ± 0,025 | 0,999154 | 1,46 | 7,67 |
| 0,09 | 17,310 ± 0,757 | 14,560 ± 0,173 | 0,97725 | 1,641 ± 0,027 | 0,999041 | 1,38 | 7,25 |
| 0,07 | 15,396 ± 0,495 | 13,987 ± 0,152 | 0,98213 | 1,645 ± 0,025 | 0,999149 | 1,26 | 6,59 |
| 0,05 | 14,016 ± 0,529 | 12,938 ± 0,140 | 0,98241 | 1,633 ± 0,028 | 0,99898 | 1,00 | 5,06 |
| 0,03 | 13,270 ± 0,614 | 12,721 ± 0,139 | 0,98031 | 1,624 ± 0,030 | 0,99877 | 0,83 | 4,14 |
| 0,01 | 11,333 ± 0,428 | 12,353 ± 0,139 | 0,97958 | 1,609 ± 0,031 | 0,998605 | 0,66 | 3,35 |
| 0,009 | 11,398 ± 0,600 | 12,395 ± 0,160 | 0,97147 | 1,615 ± 0,033 | 0,998453 | 0,61 | 3,05 |
| 0,007 | 12,261 ± 0,938 | 12,348 ± 0,157 | 0,97001 | 1,608 ± 0,034 | 0,998421 | 0,60 | 3,05 |
| 0,005 | 12,287 ± 0,911 | 12,361 ± 0,151 | 0,97199 | 1,605 ± 0,034 | 0,998446 | 0,58 | 2,92 |
| 0,003 | 12,471 ± 1,167 | 12,336 ± 0,161 | 0,96659 | 1,606 ± 0,035 | 0,998332 | 0,57 | 2,88 |
| 0,001 | 12,558 ± 1,426 | 12,371 ± 0,192 | 0,95281 | 1,595 ± 0,038 | 0,998 | 0,55 | 2,73 |

Tablo 4.2: Literatürdeki büyüme modelleri ve DLA modeli yapışma olasılık parametresi t = 1 için küme temsililerinin fraktal boyut ve entropi değerlerinin karşılaştırılması.

| Modelleri | Fraktal Boyut | Entropi (t = 1) | |
|---------------------|---------------|-----------------|------------|
| | | Boltzmann (kS) | Shannon S |
| DLA | 1,5 [16] | 1,4 | - |
| Eden | 1,7 [16] | 1,3 | - |
| DLA (Bu çalışmada) | 1,48-1,62 | 2,46-0,66 | 13,31-3,05 |
| Eden (Bu çalışmada) | 1,62-1,60 | 0,66-0,55 | 3,35-2,73 |

DLA ve Eden Modeli gibi küme büyümesi ve morfolojisi kendi faz uzayında yavaş geçişlere sahiptir. Kümelenmenin gerçekleştiği örgü yapısı, parçacık sayısı ve yapışma olasılığı olası sonuçların asimptotik davranış öncesi oluşum yüzeyi yapısını tanımlaması beklenebilir. Çeşitli büyüme modellerinin entropisi için hesaplanan değerler ve fraktal boyut değerlerine durağan bir bağımlılık gösterir. DLA ve Eden Modeli küme temsillerinin fraktal boyut ve entropi değerleri ve literatür değerleri Tablo 4.2'de gösterilmektedir. Bu çalışmada sırası ile DLA ve Eden için fraktal boyut değeri 1,48-1,62 ve 1,62-1,60, entropi değeri 2,46-0,66 ve 0,66-0,55 olarak hesaplanmıştır. Ayrıca bu çalışmada ek olarak Shannon entropi değerini DLA için 13,31-3,05 ve Eden için 3,35-2,73 olarak hesaplanmıştır. Vicsek ve arkadaşları ilgili çalışmada sırası ile fraktal boyut değerini DLA için 1,5 ve Boltzmann entropisi değerini 1,4 değerinde ve Eden Modeli için 1,7 ve 1,3 olarak hesaplamışlardır [16].

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında, Monte Carlo Tekniği kullanılarak küme büyümelerini temsil eden DLA ve Eden Modelleri algoritması ve yapışma olasılığı parametresi değerine göre üretildi. Küme temsilleri yapışma olasılık parametresi küçüldükçe saçaklı yapıdan daha yoğun yapıya dönüştüğü belirlendi. Bunlara ait foto metrik ve ölçekleme metoduyla parçacık dağılımı, fraktal boyut ve entropi değeri hesaplanarak karşılaştırıldı. Radyal parçacık dağılımının Gauss Dağılımı göstermekte olduğu belirlendi. Fraktal boyut değerinin yapışma olasılık parametresine göre değişimi nümerik bir model olarak 5. dereceden polinom fonksiyonu ile tanımlandı. Yapışma olasılık parametresi $t \leq 0,01$ değeri için DLA kümelerinin Eden Modeli kümeler ile benzeştiği sonucuna varıldı. DLA modeli kümelerde radyal hücresele Boltzmann entropi değerinin, jirasyon yarıçapına kadar artarken daha sonraki değerlerde azalmakta olduğu belirlendi. Ancak Shannon entropi değeri ise radyal yarıçapa bağlı olarak azalmaktadır. Yapışma olasılık parametresine göre her iki tür entropi değeri artmaktadır. Bu tez çalışmasında kullanılan metot ve önerilen yaklaşım diğer büyüme modellerine ve reel görsel kümelere uygulanabilir. Ayrıca, küme büyüme sürecinde parçacıkların küme elamanı olma süreci için geçmiş davranışlarının kesin belirlenmesi ve kümenin büyüme esnasında her bir parçacıkların eklenme olasılıklarının hesaplanması gibi ek yöntemlerin uygulanması ile kümelerin tanımlanmasında daha fazla yararlı olabilir ve ek bilgiler sağlayabilir.

6. KAYNAKLAR

- [1] H. E. Stanley and N. Ostrowsky, *On Growth and Form: Fractal and Non-Fractal Patterns in Physics*, no. 100., Springer, Dordrecht 1986.
- [2] H. J. Herrmann, “Geometrical cluster growth models and kinetic gelation,” *Physics Reports*, vol. 136, no. 3. pp. 153–224, Apr. 1986, doi: 10.1016/0370-1573(86)90047-5.
- [3] T. Vicsek, F. Family, and P. Meakin, “Multifractal geometry of diffusion-limited aggregates,” *EPL*, vol. 12, no. 4, pp. 217–222, 1990, doi: 10.1209/0295-5075/12/3/005.
- [4] B.B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature*. San Francisco: Freeman, 1982.
- [5] Z. Rácz and T. Vicsek, “Diffusion-controlled deposition: Cluster statistics and scaling,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 51, no. 26, 1983, doi: 10.1103/PhysRevLett.51.2382.
- [6] P. Meakin, “Diffusion-controlled deposition on surfaces: Cluster-size distribution, interface exponents, and other properties,” *Phys. Rev. B*, vol. 30, no. 8, 1984, doi: 10.1103/PhysRevB.30.4207.
- [7] M. Bayirli and T. Ozbey, “Numerical approaches about the morphological description parameters for the manganese deposits on the magnesite ore surface,” *Zeitschrift für Naturforsch. - Sect. A J. Phys. Sci.*, vol. 68, no. 6–7, 2013, doi: 10.5560/ZNA.2013-0010.
- [8] T. Ozbey and M. Bayirli, “A numerical study for the relationship between natural manganese dendrites and DLA patterns,” *Zeitschrift für Naturforsch. - Sect. A J. Phys. Sci.*, vol. 71, no. 3, 2016, doi: 10.1515/zna-2015-0406.
- [9] P. Meakin, “Formation of fractal clusters and networks by irreversible diffusion-limited aggregation,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 51, no. 13, 1983, doi: 10.1103/PhysRevLett.51.1119.
- [10] M. Bayirli and H. Kockar, “A numeric application using diffusion limited aggregation model for the manganese dendrites,” *Zeitschrift für Naturforsch. - Sect. A J. Phys. Sci.*, vol. 65, no. 10, 2010, doi: 10.1515/zna-2010-1003.
- [11] T. Ozbey ve M. Bayirli, “Mangan sıvamaları ve DLA modeli için sayısal bir hesaplama,” *Balıkesir Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi*, 18, 1-9, 2016.
- [12] T. A. Witten and L. M. Sander, “Diffusion-limited aggregation, a kinetic critical phenomenon,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 47, no. 19, 1981, doi: 10.1103/PhysRevLett.47.1400.
- [13] D. Stauffer, “Scaling theory of percolation clusters,” *Phys. Rep.*, vol. 54, no. 1, pp. 1–74, Jul. 1979, doi: 10.1016/0370-1573(79)90060-7.
- [14] T. A. Witten and L. M. Sander, “Diffusion-limited aggregation,” *Phys. Rev. B*, vol. 27, no. 9, 1983, doi: 10.1103/PhysRevB.27.5686.

- [15] K. Binder and D. Stauffer, “Statistical theory of nucleation, condensation and coagulation,” *Adv. Phys.*, vol. 25, no. 4, 1976, doi: 10.1080/00018737600101402.
- [16] T. Vicsek, F. Family, J. Kertesz, and D. Platt, “Distribution and entropy of clusters in growth models,” *Epl*, vol. 2, no. 11, pp. 823–828, Dec. 1986, doi: 10.1209/0295-5075/2/11/002.
- [17] B. Karaoğlu, *İstatistik Mekaniğe Giriş*. Seyir Yayıncılık, Birinci Basım, İstanbul, 2003.
- [18] T. Vicsek, *Fractal Growth Phenomena*. World Scientific, Singapore, 1992.
- [19] M. Eden, “A two-dimensional growth process,” *Berkeley Symp. Math. Stat. Probab.*, vol. 4, pp. 223–239, 1961.
- [20] S. Wolfram, “Universality and complexity in cellular automata,” *Phys. D Nonlinear Phenom.*, vol. 10, no. 1–2, pp. 1–35, 1984, doi: 10.1016/0167-2789(84)90245-8.
- [21] Y.-F. . Chang, “Entropy Decrease in Isolated Systems: Theory, Fact and Tests: Physics”, *Int. J. Fundam. Phys. Sci.*, vol. 10, no. 2, pp. 16-26, Jun. 2020. doi: 10.14331/ijfps.2020.330137.
- [22] Y. Chen, “A Wave-Spectrum Analysis of Urban Population Density: Entropy, Fractal, and Spatial Localization,” *Discret. Dyn. Nat. Soc.*, vol. 2008, 2008, doi: 10.1155/2008/728420.
- [23] H. Honjo and M. Sano, “Entropy Spectrum of Self-Similar Fractal Patterns,” *Prog. Theor. Phys.*, vol. 94, no. 5, 1995, doi: 10.1143/PTP.94.737.
- [24] S. Sato and Y. Hayakawa, “Entropy spectrum for distribution of history probabilities in growth models,” *Phys. Rev. E - Stat. Physics, Plasmas, Fluids, Relat. Interdiscip. Top.*, vol. 55, no. 6, 1997, doi: 10.1103/PhysRevE.55.7793.
- [25] “Entropi - Vikipedi.” <https://tr.wikipedia.org/wiki/Entropi>. Erişim tarihi: 11 Aralık 2021.
- [26] J. S. Langer, “Instabilities and pattern formation in crystal growth,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 52, no. 1, 1980, doi: 10.1103/RevModPhys.52.1.
- [27] J. S. Langer and H. Müller-Krumbhaar, “Theory of dendritic growth-I. Elements of a stability analysis,” *Acta Metall.*, vol. 26, no. 11, 1978, doi: 10.1016/0001-6160(78)90078-0.
- [28] J. S. Langer and H. Müller-Krumbhaar, “Theory of dendritic growth-II. Instabilities in the limit of vanishing surface tension,” *Acta Metall.*, vol. 26, no. 11, 1978, doi: 10.1016/0001-6160(78)90079-2.
- [29] H. Müller-Krumbhaar and J. S. Langer, “Theory of dendritic growth-III. Effects of surface tension,” *Acta Metall.*, vol. 26, no. 11, 1978, doi: 10.1016/0001-6160(78)90080-9.
- [30] W. W. Mullins and R. F. Sekerka, “Morphological Stability of a Particle Growing by Diffusion or Heat Flow,” *J. Appl. Phys.*, vol. 34, no. 2, 1963, doi: 10.1063/1.1702607.

- [31] W. W. Mullins and R. F. Sekerka, “Stability of a planar interface during solidification of a dilute binary alloy,” *J. Appl. Phys.*, vol. 35, no. 2, 1964, doi: 10.1063/1.1713333.
- [32] T. Vicsek, “Formation of solidification patterns in aggregation models,” *Phys. Rev. A*, vol. 32, no. 5, 1985, doi: 10.1103/PhysRevA.32.3084.
- [33] P. A. Rikvold, “Simulations of a stochastic model for cluster growth on a square lattice,” *Phys. Rev. A*, vol. 26, no. 1, 1982, doi: 10.1103/PhysRevA.26.647.
- [34] M. Bayırlı, “İki boyutlu uzayda tanecik kümeleşmesinin incelenmesi”, Doktora tezi, Gazi Üniv., Ankara, 2003.
- [35] O. Shochet, K. Kassner, E. Ben-Jacob, S. G. Lipson, and H. Müller-Krumbhaar, “Morphology transitions during non-equilibrium growth. I. Study of equilibrium shapes and properties,” *Phys. A Stat. Mech. its Appl.*, vol. 181, no. 1–2, 1992, doi: 10.1016/0378-4371(92)90199-Z.
- [36] M. Ausloos, N. Vandewalle, and R. Cloots, “Magnetic eden model.,” *EPL*, vol. 24, no. 8, 1993, doi: 10.1209/0295-5075/24/8/002.
- [37] Y. V. Ivanenko, N. I. Lebovka, and N. V. Vygornitskii, “Eden growth model for aggregation of charged particles,” *Eur. Phys. J. B*, vol. 11, no. 3, 1999, doi: 10.1007/s100510050958.
- [38] T. C. Lubensky and J. Isaacson, “Statistics of lattice animals and dilute branched polymers,” *Phys. Rev. A*, vol. 20, no. 5, 1979, doi: 10.1103/PhysRevA.20.2130.
- [39] M. Bayırlı, T. Ozbey and I. Gulgonul, “Determination of Poly Morphological Transitions of Dendrites on Natural Magnesite Surfaces,” *International Journal of Scientific and Technological Research*, vol. 4, no. 4, pp. 109-116, 2018. [Online] Erişim adresi: <https://www.iiste.org/Journals/index.php/JSTR/article/view/42718>
- [40] J. Kertesz and T. Vicsek, “Diffusion-limited aggregation and regular patterns: Fluctuations versus anisotropy,” *J. Phys. A. Math. Gen.*, vol. 19, no. 5, 1986, doi: 10.1088/0305-4470/19/5/008.
- [41] P. Meakin, *Fractals, Scaling and Growth Far From Equilibrium*. Cambridge University Press, Cambridge, 1998.
- [42] K. Wiesenfeld, “Resource Letter: ScL-1: Scaling laws,” *Am. J. Phys.*, vol. 69, no. 9, 2001, doi: 10.1119/1.1383601.
- [43] “Microsoft Excel Elektronik Tablo Yazılımı | Microsoft 365.” <https://www.microsoft.com/tr-tr/microsoft-365/excel>. Erişim tarihi: 11 Aralık 2021.
- [44] “OriginLab - Origin and OriginPro - Data Analysis and Graphing Software.” <https://www.originlab.com/>. Erişim tarihi: 11 Aralık 2021.
- [45] “ImageJ – Image Processing and Analysis in Java.” <https://imagej.nih.gov/ij/>. Erişim tarihi: 11 Aralık 2021.
- [46] R. Tapramaz, *Sayısal Çözümleme*. Literatür Yayıncılık, Birinci Basım, İstanbul, 2002.

- [47] P. M. Cincotta and I. I. Shevchenko, “Correlations in area preserving maps: A Shannon entropy approach,” *Phys. D Nonlinear Phenom.*, vol. 402, p. 132235, Jan. 2020, doi: 10.1016/J.PHYSD.2019.132235.
- [48] P. M. Cincotta, C. M. Giordano, R. Alves Silva, and C. Beaugé, “The Shannon entropy: An efficient indicator of dynamical stability,” *Phys. D Nonlinear Phenom.*, vol. 417, p. 132816, Mar. 2021, doi: 10.1016/J.PHYSD.2020.132816.
- [49] “Entropi (bilgi teorisi) - Vikipedi.” [https://tr.wikipedia.org/wiki/Entropi_\(bilgi_teorisi\)](https://tr.wikipedia.org/wiki/Entropi_(bilgi_teorisi)). Erişim tarihi: 11 Aralık 2021.



