

Monte Carlo Yöntemleri ve Kısmî Differansiyel Denklem Çözümüne Uygulanmaları

Kaya YAZGAN

TCDD

ÖZET

Bu yazıda Monte Carlo yöntemleri ve rasgele sayı üretimi hakkında temel bilgiler verilmiştir. Eliptik bir kısmî differansiyel denklem veren, kare şeklindeki bir levha üzerinde ısı dağılımı probleminin çözümünde kullanılabilecek iki Monte Carlo yöntemi tanıtılmıştır.

SUMMARY

An introductory Information on-Monte Carlo methods and random number generation. is presented in this article. A problem of steady-state heat distribution on a square plate which gives a partial differential equation of elliptic type is approached by two different Monte Carlo methods.

1. GİRİŞ

tik bakışta farklı olan birçok fiziksel olayın matematiksel olarak ifade edildiklerinde eşdeğer denklemler verdikleri uzun süredir bilinen bir gerçek. Yüzyılımızda bir yandan sosyal bilimlerin gelişimi ile istatistik de bilimsel bir nitelik kazanmış, diğer yandan başta atom fiziği olmak üzere bazı doğa bilimi alanlarında istatistiksel yöntemler uygulanmaya başlamıştır. Kökü eskilere dayanmasına karşın Monte Carlo yöntemlerinin geniş uygulama alanı bulması da bu gelişim içindedir.

Monte Carlo yöntemlerinin kesin bir tanımını vermek yerine, ilişkili diğer kavramlarla birlikte Monte Carlo'nun da ne olduğunu belirtmeye çalışalım. Bir fiziksel olayın matematiksel olarak formüle edilmesi «uygulamalı matematik» alanına girer. İstatistiksel bir olayın «matematiksel ifadesi» matematiksel istatistik olur. İstatistiksel bir olayın bir başka istatistiksel olaya dönüşümü «benzeşim» (simulasyon) yöntemidir. İstatistiksel bir olayın kendi içinden alınan örneklerle incelenmesi «örnekleme» (sampling) diye adlandırılır. «Monte Carlo» ise önce matematiksel bir sorunun istatistiksel yoldan çözülmesi olarak görüldü, örneğin 1777 de Buffon, bir çubuk atma deneyinin istatistiksel sonucundan yararlanarak ^ sayıma yakınsayan bir deney önerdi. Yöntemin sistemleştirilip ünlü kumar şehrinden esinlenen adını alması ise 1949 da Metropolis ve Ulam'ın yazısı ile [1].

Monte Carlo yöntemlerinin bugünkü uygulanış alanları ve şekilleri üç grupta toplanabilir.

1. istatistiksel bir olayın önce matematiksel bir yapıya dönüştürülmesi, sonra da bu matematiksel olayın bir başka istatistiksel olay aracılığıyla incelenmesi,

2. İstatistiksel özellikleri oldukça belirgin fiziksel bir olayın doğrudan doğruya istatistiksel bir yöntemle çözülmesi, örneğin atom fiziğinde parçacıkların hareketleri ile ilgili problemlerin çözümü,

3. İlk bakışta istatistiksel özelliği göze çarpmayan fiziksel bir olayın önce matematiksel olarak ifade edilmesi, sonra da bu matematiksel yapının istatistiksel bir yöntemle çözülmesi.

Bu incelemede özellikle üçüncü tip uygulamalar üzerinde durulmakta, örnek olarak ikinci aşamadan kısmî differansiyel denklemlerin çözümü ele alınmaktadır.

İkinci aşamadan kısmî differansiyel denklemler, örneğin Laplace, Poisson, ısı iletimi gibi denklemler, fizik ve mühendislik dallarında pek çok karşılaşılan denklemlerdir. Bunların analitik çözümleri ancak belirli özel durumlarda, oldukça uzun ve çapraşık yöntemler izlenerek elde edilebilmektedir. Bilgisayarların gelişimine paralel olarak gelişen sayısal yöntemler ise, uygulama kolaylığı, hızı ve analitik çözümü olmayan problemleri bile çözülebilir kılması ile günümüzde bu alanda kesin bir egemenlik sağlamıştır.

Sayısal yöntemler kendi içinde iki grupta incelenebilir. «Deterministik» sayısal yöntemlerde kısmî differansiyel denklem bir sonlu farklar denklemine dönüştürülür, ilerde değinileceği gi-

bi, katsayıların oluşturduğu matrisin tersi bulunmaya çalışılır (*) [2]. Elde edilen sonlu farklar denklemleri «olasılıksal» yöntemler, rasgele sayılar dizisi ve istatistiksel değerlendirmeler kullanılarak çözümlerse asıl konumuz olan Monte Carlo yöntemleri alanına girilmiş olur. Önce yukarıda adı geçen rasgele sayılar dizisi üzerinde duralım.

2. RASGELE SAYILAR DİZİSİ ÜRETİMİ

Birbiriyle hiçbir ilişkisi olmayan sayılardan oluşan bir dizi elde etmek yüzyılımızın başından beri üzerinde çalışılan bir konudur [3], [4]. 1927 yılında Tippett tarafından yayınlanan 40000 sayılık diziyi, 1939 da 100000, 1955 de 1000000 sayılık dizilerin yayınlanması izledi. Günümüzde önceden basılmış sayı dizilerinin kullanılmasından çok algoritmik bir yolla rasgele sayıların teker teker elde edilmesi ve hesaplamalarda kullanılması yoluna gidilmekte.

Algoritmik bir yöntemle rasgele sayılar elde etme fikri ilk bakışta olanaksız görünüyorsa da geliştirilen birçok yöntemle «rasgelemiş gibi davranan» sayılardan oluşan dizilerin elde edilmesi günümüz bilgisayarlarında çok görülen bir uygulamadır. Yazımızda rasgele sayı dizisi denildiğinde böyle bir dizi amaçlanmaktadır.

John von Neumann tarafından 1946 da ortaya atılan «orta kareler yöntemi» birbirinden oldukça bağımsız sayılar dizisi veren bir yöntemdir. 2n basamaklı bir sayı, serinin ilk sayısı olarak seçilir, bu sayının orta n basamağının karesi olan sayı serinin ikinci sayısıdır. Her sayı bir sonrakinin bulunmasında kullanılarak seri sürdürülür, örneğin 2425 sayısıyla başladığımızı düşünelim. 42 nin karesi olan 1764 ikinci sayımızdır, 76 nm karesi olan 5776 üçüncü sayımızdır... Bu yöntemin sakıncası kısa süre sonra kendini yiteneleyen serilere dönüşmesi, orta basamaklarda sıfır elde edince ise hep sıfır vermesidir, örneğin yukarıda başlanan dizi 16 tane rasgele sayı verdikten sonra sıfıra ulaşır (*). Daha iyi bir başlangıç sayısı seçimi ile çok daha uzun diziler elde edilebilir, örneğin Metropolis 38 bitlik 75000 sayılık bir dizi elde etti.

Çok kullanılan diğer bir yöntemde rasgele sayı, kendinden bir önceki sayıya dayanarak ve elden geldiği kadar büyük bir periyotla kendini yitenelemesi için belirli koşullara uyularak hesaplanır. X rasgele sayıyı, n ise adım sayısını gösterirse, X_{n+1} ;

$$X_{n+1} = (aX_n + c) \text{ mod } m$$

(*) Bu genellemenin dışında kalan bir istisna, hiperbolik denklemlere uygulanabilir. Karakteristik Eğriler Yöntemidir.

(***)2425, 1764, 5776, 5929, 8464, 2116, 0121, 0144, 0196, 0361, 1296, 0841, 7056, 0025, 0004, 0000, 0000.

formülünden hesaplanabilir. Burada,

$$\begin{aligned} X_0 &\geq 0 \text{ serinin ilk sayısı} \\ a &\geq 2 \text{ çarpan} \\ c &\neq 0 \text{ artım} \end{aligned}$$

$m > X_0$, a, c modüldür. Mümkün olan en büyük periyotlu diziyi elde etmek için bu sabit sayılar birkaç teorem yardımıyla belirlenir [5], [6], [7].

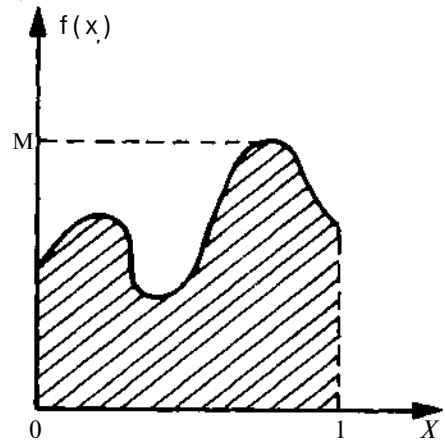
Bu iki yöntemin dışında, daha önce elde edilen sayıların belirli katsayılarla çarpımları toplanarak, çembersel kaymalar ve VEYA mantık işlemleri kullanarak algoritmik rasgele sayı üretim yöntemleri de vardır.

3. MONTE CARLO YÖNTEMLERİYLE İNTEGRAL ALMAK

Rasgele sayılar dizisinin nasıl elde edildiğini gördükten sonra,

$$I = \int_0^1 f(x) dx \quad (D)$$

eşitliğindeki I yi iki Monte Carlo yöntemi ile bulmaya çalışalım (Şekil 1).



Şekil 1.

a. \bar{t}_A aradığımız I değerine, Şekil 1 deki taralı alana ulaşan bir ortalama olsun. (0,1) aralığı içinde düzgün dağılmış bağımsız rasgele sayılardan i'inci deneyde elde edilenleri u_i ve v_j ile gösterelim.

$t_{Ai} = M$, eğer (U_j, v_j) noktası Şekil 1 in taralı kısmında ise, $f(u_i) < v_j, M$
 $t_{Ai} = 0$, eğer $f(u_i) > v_j, M$...

$$\bar{t}_A = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N t_{Ai}$$

N deney sonunda elde edilen sonuçtur. $B \left\{ \cdot \right\}$ beklenen değeri gösterirse,

$$B \left\{ \bar{t}_k \right\} = I \text{ yazılabilir.}$$

b. iki ayrı rasgele sayı kullanmak yerine daha basit bir yöntemle de (1) integralinin sonucuna yaklaşabiliriz.

$$t_{B_i} = f(u_i)$$

$$\bar{t}_B = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(u_i)$$

Yine,

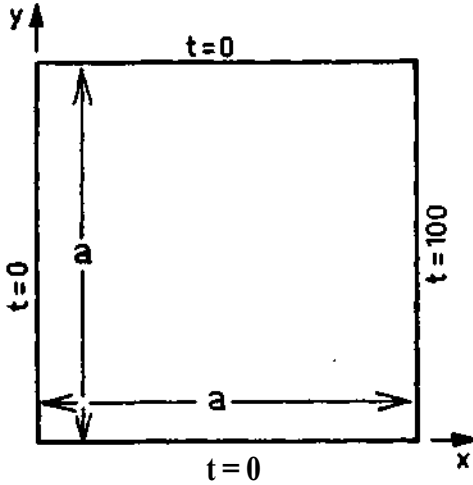
$$B \left\{ \bar{t}_B \right\} = I$$

İlk bakışta umulanın tersine bu iki yöntemden daha basit olanı, b yöntemi, diğerine göre daha küçük bir varyans vermektedir, sonuca daha büyük bir hızla yaklaşmak mümkündür [8].

Monte Carlo yöntemleri hakkında bir fikir edindikten sonra ikinci aşamadan eliptik bir kısmi differansiyel denklemin kesikli ve sürekli Monte Carlo yöntemleriyle çözülmesini inceleyelim.

Problem

Bir kenarı 100 °C da, diğer üç yanı 0°C da tutulan kare şeklinde bir levhadaki durgun durum ısı dağılımını inceleyelim (Şekil 2).



Şekil 2.

«t» ile gösterilen ısıнын Laplace denkleminde göre dağılmış olduğu bilinir:

$$\frac{3^* t}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 t}{\partial y^2} = 0 \quad (2)$$

Karenin kenarları a uzunlukta ise, denklemler birlikte aşağıdaki sınır şartları problemin tanımlanmasını tamamlar :

$$t(x,y) = 0 \quad x = a, \quad 0 \leq y \leq a \\ y = 0, \quad 0 \leq x \leq a$$

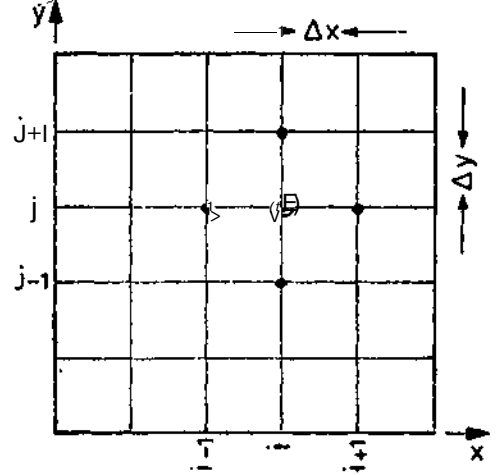
$$y = a, \quad 0 \leq x \leq a \text{ için}$$

$$t(x,y) = 100 \quad x = a, \quad 0 \leq y \leq a \text{ için.}$$

Bu problemin analitik çözümü bilinmektedir [9] ve bu nedenle sayısal çözümlerimizdeki yanılmayı bulmakta kullanılabilir.

4. KESİKLİ MONTE CARLO

Bu yöntemde ısıнын yayılması bir ızgara üzerindeki rasgele yürüyüş yardımıyla elde edilir (Şekil 3). Deterministik sayısal yöntemlerde olduğu gibi, verilen (2) denklemin sonlu farklar



Şekil 3.

denkleminde çevrilir. Eğer t_{ij} , (ij) noktasındaki ısıyı gösterirse ve üçüncü aşamadan daha yukarı türevli terimler ihmal edilirse aşağıdaki iki Taylor serisi açılışı elde edilir.

$$t \approx t_{i,j} - A^* \frac{3t}{3!} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 t}{\partial x^2} - \frac{(A^* P)}{3!} \frac{yt}{3x^2} \quad (3)$$

$$t_{i+1,j} \approx t_{i,j} + \Delta x \frac{\partial t}{\partial x} + \frac{(A^*)^2}{2!} \frac{\partial^2 t}{\partial x^2} + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3 t}{\partial x^3} \quad (4)$$

(3) ve (4) denklemlerinin her tarafına toplama ($3^2 t / 9x^2$) için bir yaklaşım verir:

$$t_{i,j} + t_{i+1,j} \approx 2 t_{i,j} + (A^*)^2 \frac{\partial^2 t}{\partial x^2} \\ \frac{\partial^2 t}{\partial x^2} \approx \frac{t_{i,j} - 2t_{i,j} + t_{i+1,j}}{(A^*)^2} \quad (5)$$

Benzer işlem ($\partial^2 t / \partial y^2$) için de yapılırsa,

$$\frac{\partial^2 t}{\partial y^2} \approx \frac{t_{i,j-1} - 2t_{i,j} + t_{i,j+1}}{(A^*)^2} \quad (6)$$

elde edilir.

Laplace denklemi (2), içine (5) ve (6) da elde edilen sonlu fark yaklaşımları yerleştirilirse ve $A^x = A_y = h$ alınırsa,

$$M \approx \frac{t_{i+1,j} + t_{i-1,j} + t_{i,j+1} + t_{i,j-1}}{4h^2} \quad (7)$$

bulunur.

Deterministik sayısal yöntemlerle Laplace denkleminin çözümü, (7) denkleminin her nokta için yazılması ile elde edilen sonlu farklar denklemleri sisteminin çözümüne dönüşür.

Şimdi de olasılıksal bir yönde problemi ele alalım. Isının levha üstünde yayılmasını, Şekil 3 deki noktalara uğrayarak yapılan bir rasgele yürüyüşe benzetelim. $P(i,j)$, (i,j) noktasında olmanın olasılığını gösterebilir. Yürüyüşü yapan cisim bir adımda küçük karelerin ancak bir kenarı boyunca ilerliyorsa ve bir noktadayken eşit olasılıklarla komşu dört noktadan birine yöneliyorsa (i,j) noktasında olmanın olasılığı, bir adım önce komşu dört noktada olma olasılıklarının toplamına eşittir.

$$P(i,j) = \frac{1}{4} P(i+1,j) + \frac{1}{4} P(i-1,j) + \frac{1}{4} P(i,j+1) + \frac{1}{4} P(i,j-1) \quad (8)$$

(7) ve (8) denklemlerinin aynı fiziksel olayı tanımladıkları açıktır.

Söz konusu edilen rasgele yürüyüşü aşağıdaki algoritmaya göre bilgisayar için programlamak çok kolaydır.

4.1. Kesikli Monte Carlo Algoritması

ADIM 1. Yolculuk sayılarını saymak için kullanılacak Y sayıcısını sıfırlayın.

ADIM 2. Koordinat parametrelerini (I,J) , başlangıç noktasının (N_0) koordinatlarına eşitleyin.

ADIM 3. 0 ile 1 arasında dağılmış bağımsız rasgele sayı dizisinden bir R sayısı alın. R nin değerine göre eşit olasılıklarla komşu noktalardan birine gidin, (örneğin $0 \leq R < 0,25$ ise sola ilerleyin, yani I parametresini bir arttırın).

Eğer yeni ulaşılan nokta bir sınır noktası ise, ADIM 4 e aksi halde ADİM 3 e gidin.

ADIM 4. Ulaşılan sınır noktasına ait sayıcıyı bir arttırın. Yolculuk sayısını veren Y sayıcısını bir arttırın. Y nin değeri önceden belirlenen bir üst limite ulaşırsa ADİM 5 e, aksi halde ADİM 2 ye gidin.

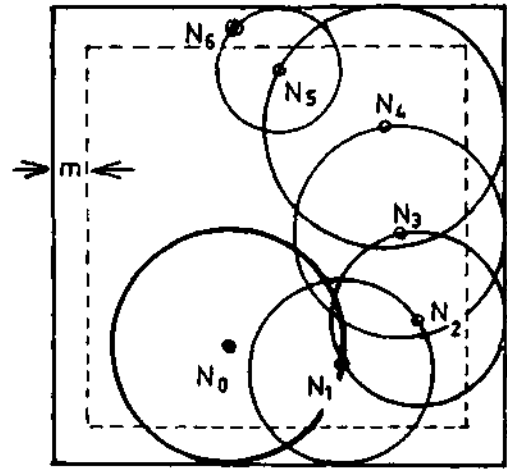
ADİM 5. Her sınır noktası için ayrılan sayıcının içindeki sayıyı (bu noktadan toplamda kaç çir-

kış yapıldığını gösteren sayıyı) bu noktanın sınır değeri (bizim problemimizde 0 veya 100) ile çarpın. Bu çarpımları toplayın ve Y sayısının içindeki sayıya (toplam deney sayısına) bölün. Büyük deney sayılan için bu bölüm N_0 başlangıç noktasındaki ısıya yaklaşır (*).

Dikkat edilirse yukardaki algoritma ile levhanın çevresinde çeşitli sınır noktalarında uygulanan ismin N_0 başlangıç noktasına olan etkileri, bu noktaya yakınlıkları ve sınır değerinin büyüklüğü ile artmaktadır. Bu da fiziksel olayın temel niteliğidir.

5. SÜREKLİ MONTE CARLO

Süreklî Monte Carlo yönteminde ise, Şekil 3 de görülen ızgara üzerindeki kesikli hareket yerine Şekil 4 de görüldüğü gibi bir başlangıç noktasından başlayıp bir çember çevresi üzerindeki noktalara eşit olasılıkla gidilir. Çemberler çözüm alanı içinde kalmak koşuluyla her büyüklükte olabilir, hattâ çemberden başka şekiller aracılığıyla da rasgele yürüyüş yapılabilir [10].



Şekil 4.

5.1. Süreklî Monte Carlo Algoritması

ADİM 1. PAY ve PAYDA adlı iki sayıcıyı sıfırlayın.

ADİM 2. Koordinat parametrelerini (X, Y) başlangıç noktası N_0 koordinatlarına eşitleyin.

ADİM 3. (X, Y) noktasını merkez alan, çözüm alanının içinde kalan en büyük çemberi çizin.

(*) Burada sunulan algoritma yöntemi kolay açıklamak amacıyla verilmiştir. Bilgisayar için daha verimli bir şekilde uygulanabilir, örneğin her sınır noktası için bellekte bir yer ayrılmasına gerek yoktur.

• BünüHiÇevre'siinde"e'sit öfâsılıklaFlânbakğele 'bir üSlâta 'seçim v^'Y^f^âfâm-et'referifii'Jbû? yeni noktâniñkileri eşitlëyiñAl'geT > '(X,Y)J rökatası çö-Zü'm'Jalanırın"Şevresifë'işizilen' belirli' bir raaf-jih (mi),-ç'in'âe ise 'AÜİM'4 e'«idin/aksi' haldë ADİM 3'ü'yinteleyin.' > '.:'. ' '

-ADİM 4İPAY; sayıGisına'nulâşılan sınırdaki sı-
 •nv değëriñi" ekleyin? İPAYIDA":sayısına bir-- ekle-
 -yin'İEğër- PAYDA/dakİJisapl'öriceden belirleneñ
 ibiari'üsbdimite ulaştıysa'/itADİM ;5e; aksi'Jhalde
 ADİM. 2yel gidin.< nhzM: v j('r <

ADİM 5. PAYI PAYDAya bölün, sonuç N₀ nok-
 tasındaki ısı için aranan yaklaşımlı verir.

6. SOTTUÇ

• Bu.yazıda 'MonteCarlo yöntemleri'-hakkında ge-
 neJL bilgi verilmiş yen başitidiri fısı? probleminin
 iki Montë Carlo yöntemi'ile nasıl /çözülebilece-
 ği' fgösferilmiştir.F.y'Bürarâdâ pek: çok önemli ko-
 nuş,)amacını'dışın'ai"taşmamak için 'ele iSiMiña-
 HMŞms örneğın; dahasıkarmaşık •denklemler've-
 rildiğında çeşitli yönlerde ilerlemenin LoTâsli-
 ğı [11]; deney birçok kez yinlendiğında elde
 edilen sonuçların dağılımının varyansının yol-
 culuk sayısı (bizin'aigo'fiiñlarımızdaki {Y ve-
 ya ÇAYDA) ile olânvişiksil[12],-bin yolculuk
 için beklenen aaim^sayısı, içerdeki iki 'nokta
 arâsm'daki ^Hâreketin olasılığı, sonuçtaki doğru
 başamakların" sayısı [13] gibi konular tartışıl-
 madı.

-->UTU

KeşikliJVip'rite Carlo için verilen algoritma bel-
 lek yürüüidencgeleşitl'fillebiecei'i' gibi, çalışmamız
 sılasıhda daha çoto^ellek kullanma paşasma bir
 yolcululej sırasmdaAğranan noktalar heikkinda-
 ki, bilgiler, de-saklanarak 'geçmişlerin üstüste
 bindirilmesi' ycmtemi gelişitildi [14]. İ

Monte^Carle^ yöntemleFinin diğër/sayısal yön-
 temlerle' kVrşlaştırâbiâs'ından aşâğıdaki sonuç-
 lar-çıkma-tadİF. ".*^~*^»<<-----~--J

1. Çözüm, bütün çözüm alanında değil de ala-
 nın bir veya birkaç noktasında istenirse, ancak
 Monte Çasio. nyöalejalejudiğër«n'ö'ktâlardâki çd-
 zümü bulmaksızın istenen nokta veya noktalar-
 daki' çözüñü 've'rir.^ «">* . "

2. Monte^ Carlo yöntemleri • çok. işlem gerektir-
 melelerine' karşılık 'determîni^tik yöntemlerdeki
 büyük'mâtrislerin' saflân-masınl' gerekfiffmemek-
 tğdi,r.-,Bu,dâ günümüzün'.küçük belleklifve çok
 hızlı, bilgisayarları ^çinvönemli' bir özelliğtir.

3. Monte Carlo yöntemlerinde "doğruluk", "çö-
 züm alanının boyutlarından bağımsızdır, halbu-
 ki, determînis,tik sayısal yöntemlerde boyutların
 artması ile'doğruluk-azalar [15].

Kısacâ yaklaşık ^-sonuçlarını) yeterli' olduğu, t <mü-
 hendisliki lu.ygulamafaunnd'af. küçük bellekli- hızk
 bilgisayarlar için Monte' Carlo yöntemleri alış-
 gelmiş determînistik sayısal yöntemlerden da-
 ha iyi sonuçlar verebilirler.

KAYNAKLAR

1. *Metropolis N. ve Ulam S.*: «The Monte Car-
 ^ndio-;MeİHöD5;İr!Amër.'Stafis:"Asköç.i Völ. 44,
 33S-34İİ '1949." "
2. *Forsythe, G? E.*: «Solving Linear Algebraic
 Equations Can be Interesting», Bull. Amer.
 Math. Soc, Vol.57,299-329; 1953.
3. *Knuth, D., E.*: «The Art of Computer Prog-
 ramming», Mass., Addison-Wesley, 1969.n .
4. *Nance, JR. f. ve Clude, O. Jr.*: «A Bibliog-
 raphy on Random Number Generation»,
 Comput. Rev. iyöl. 18, 495-5q8, 1972.
5. *Greenberger, İHotes 'on a' N'ew Pseudo-Ran-
 dom' Nümer-i'Generâitdri'?*JPA'CMr'VölJ'8-,
 383-389, 1961.
6. *Hull ve Dobell*: «Random Number Gene-
 rators», İIAM Rev. Vol 4, 230-254, 1962.
7. *Carmichael*: Bull. Amer. Math. Soc, Vol.
 16, 232-238, 1910.1
8. *Morton, K. W.*: «On the Treatment of Mon-
 te Carlo Methods in Text Books», MTAÇ,
 Vol. 16,"223-224, 1956.
9. *Garslow, H. S. ejaeger, J. Ç.*: Operational
 Methods in Applied Mathematics, 1963.
10. *Muller, M. E.*: «Some Continuous Monte
 Carlo Methods for the Dirichlet Problem»,
 Ann. Ma«Hirıtâlis.,Völ. 27^569-589, 1956: .
- *Uik,yEkr.İlçh\;L<?W.<»«Monte Carlo-Sölutionis<
 Boundary Value- Prbblems vilnvol'viñg- the
 D^fference Analog, f 1^u^ + Ky - u^ 0»,
 J. ACM, Völ., 204-218,495?*
12. *Sfarfiider, Yw. A. (ed.)*: The Monte Çasılıo
 Method, Pergamon, Press., 1966 (1962^ta-
 ni)rihli Rusça, başkıdan'çeyiid).
13. *Cufliss, J. H.*: «Sampling Metİ'6dş Applied
 «to 'biffereñial' and ^Differençe' Equations»,
 T' P-ro.e. of IBMİSeminar onJScientific Com-
 putation',1949/, NewAYok-r
14. *Yazgan, K.*: «A Survey ori'the' NümerİHal
 ne' Solutions'of- Partial'DifferenferEquatıbs»;
 "t" Ms-Thësis, ODTÜ; 1973. >>
15. *Kac, M.*: «Applications of Statistical Met-
 hods to Differential and Integral Equa-
 tions»,cNotës' öh lectures'delivere'd at'Mi'T,
 1949.