



Simülasyon Nedir ?

Terim anlamı gerçek bir dünya sistemin zaman üzerinden taklit edilmesidir. Kelime anlamı olarak ise bir şeyin benzeri veya sahtesi anlamına gelmektedir. Yani , genişletilmiş zaman periyodu içinde, mantıksal ve matematiksel ilişkiler içerisindeki karmaşık gerçek hayat sistemlerinin yapısını , davranışını incelemek ve açıklamak için olayı bilgisayar ortamında canlandırıp olay üzerinde kontrol kurma gayretlerinin bütünüdür. Simülasyon tekniği bir teoriden öte problemin çözümünde kullanılan bir metodolojidir.

Simülasyon Neden Önemlidir?

Çalışılacak alanın gerçek bir sistemi yoksa, eğer ki gerçek sisteme erişmek kolay değilse, gerçek bir sistemde deney yapmak tehlike arz ediyorsa, gerçek bir sistemle deney yapmak rahatsız ediciyse , eğer ki bir sistemin analitik çözüm tekniği yoksa veya çok zorsa , Sistem çok yavaş ya da çok hızlıysa ,gerçek sistemlerde deney yapmak ekonomik olmuyorsa simülasyon kullanmak kolaylık sağladığından oldukça önemlidir.

Simülasyonun Özellikleri Nelerdir?

Simülasyon modeli üzerinde daha sonra yapılacak analiz için veri, çoğu kez gerçek hayattakinden daha ucuz ve kolay elde edilir.

Simülasyon bir sistemdeki dahili karmaşık etkileşimleri etüd etme ve bunlar üzerinde çok sayıda deney yapma olanağı sağlar.

Simülasyon tekniği analitik çözümlerin doğruluğunu ispatlamak için kullanılabilir.

Simüle edilecek sistemin modeli kurulduktan sonra, değişik durumların analizi için istenildiği kadar kullanılabilir.

Moleküler Simülasyon Metodları

Birçok simülasyon metodu geliştirilmiş olmasına rağmen, pek çok simülasyoncu modellerini hala genel amaçlı programlama metodları ile kurmaktadır.

- 1) INDO
- 2) ZINDO
- 3) SINDOI
- 4) PM3
- 5) AM1
- 6) CNDO
- 7) Hückel
- 8) Extended Hückel
- 9) MINDO
- 10)PRDDO.
- 11)SAMI
- 12)Fense – Hall Method
- 13)PM3/TM
- 14)Gaussian Theory

Moleküler Simülasyon Yöntemine Bir Örnek

- 1) INDO : Farklı örtüşme yönteminin ara ihmali bir zamanlar organik sistemler için kullanılıyordu. Günümüzde yerini daha doğru yöntemler almıştır. INDO hala bazen ab initio hesaplamaları için bir ilk tahmin olarak kullanılmaktadır.
- 2) ZINDO : ZERNER INDO yöntemi ayrıca spektroskopik INDO olarak da adlandırılır. Bu . Özellikle elektronik spektrum sonuçlarının yeniden üretilmesi amacıyla INDO yönteminin yeniden parametrelendirilmesidir.
- 3) SINDOI : diferansiyel örtüşme yönteminin simetrik olarak ortogonalleştirilmiş ara ihmali hem yarı deneysel bir yöntem hem de bu yöntemi içeren bir bilgisayar programıdır.
- 4) PM3 : Parametrelendirme yöntemi 3 , geliştirilmiş bir parametre seti ile birlikte AM1 yöntemiyle neredeyse aynı denklemleri kullanır.

Çeşitli Amaçlarla Kullanılan Simülasyon Paket Programları

Günümüzde, kullanılan pek çok simülasyon paket programı vardır. Bunlardan yaygın olarak kullanılanlar aşağıdaki yazılımlardır:

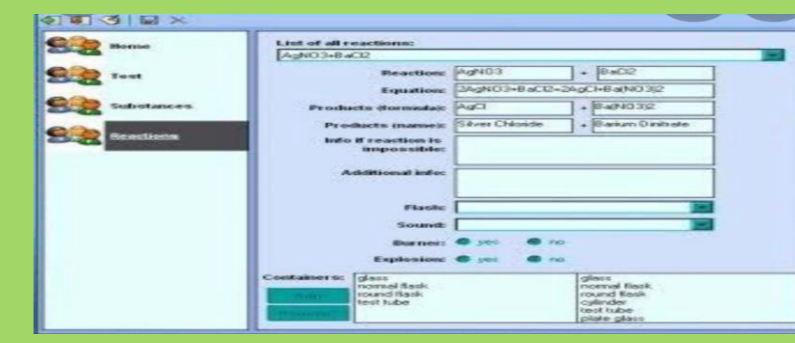
- SIMAN (SIMulation Analysis)
- SIMSCRIPT
- SLAM (Simulation Language for Alternative Modelling)
- INSIGHT
- MODSIM
- SIM ++
- Simulink/Matlab gibi diller sayılabilir. Bunlara ek olarak üretim sistemlerinin simülasyonu için,
- AutoMod
- ProModel
- SIMFACTORY
- WITNESS
- XCELL + isimli dillerin yanı sıra network uygulamaları için geliştirilmiş
- NETWORK
- COMNET isimli yazılımlardan söz edilebilir.



Monte Carlo Simülasyonu

Monte carlo yöntemi rastgele üretilmiş sayılar kullanılarak deneysel ve istatistiksel problemlerin çözümü için kullanılan bir yöntemdir. Bu yöntem 1930 lardan sonra hızla gelişmeye başlamış bir tekniktir. Metodun bir probleme uygulanması , problemin rastgele sayıları kullanarak simüle edilip , hesap edilmek istenen parametrenin bu simülasyonların sonuçlarına bakılarak yaklaşık hesaplanması fikrine dayanır.

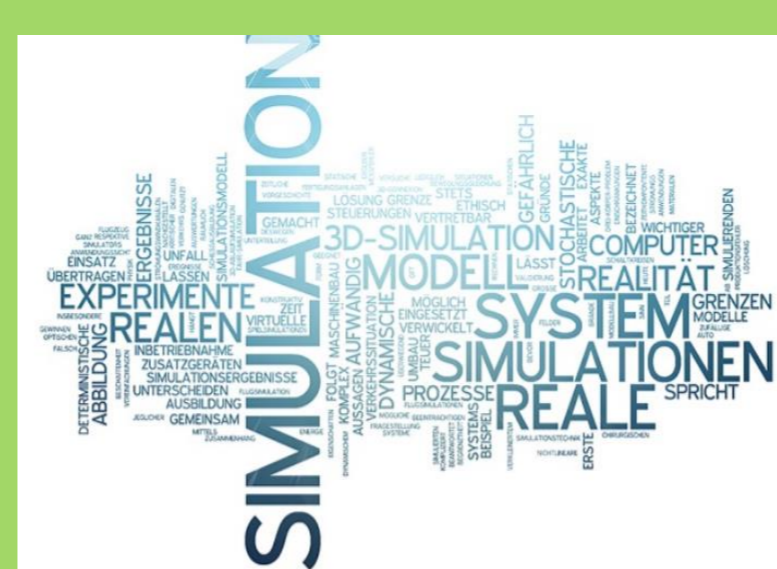
Monte carlo metodunda çok sayıda gelişigüzel sayı gerektiğinden bu sayılar bilgisayarda üretilir. Monte carlo metodu , analitik yollarla çözülemeyen problemleri simülasyon yöntemiyle 'yaklaşık' olarak çözmemize yarar. Özellikle 'çok zor' bir problemi , analitik yollarla çözebilmek için aşırı basitleştirmek yerine monte carlo metodları ile 'yaklaşık ' olarak çözmek daha doğru olur.



Simülasyon İle İlgili Dergiler

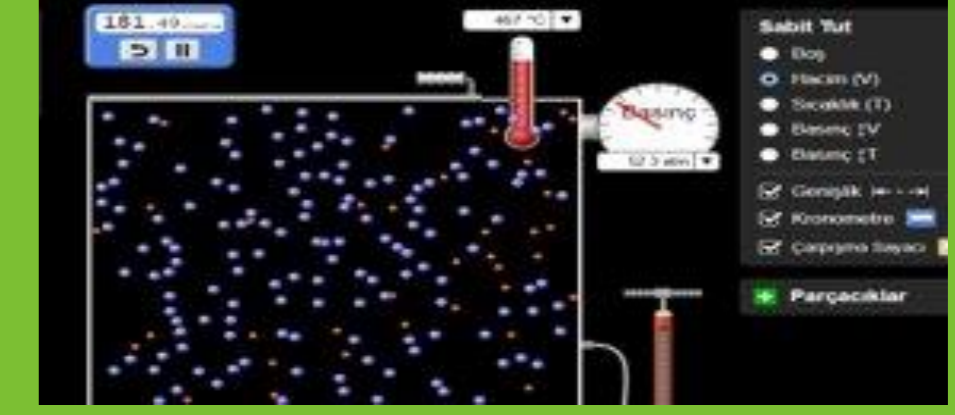
Chemistry Laboratory Applications Supported with Simulation (Procedia - Social and Behavioral Sciences Volume 176, 20 February 2015, Pages 970-976)

Simülasyonlarla kimya öğretiminin öğrenci imajlarına etkisi (KESİT AKADEMİ DERGİSİ) Moleküler dinamiğin bilgisayar simülasyonu : kimyada metodoloji, uygulamalar ve perspektifler (ANGEWANDTE CHEMIE INTERNATIONALE EDITION)



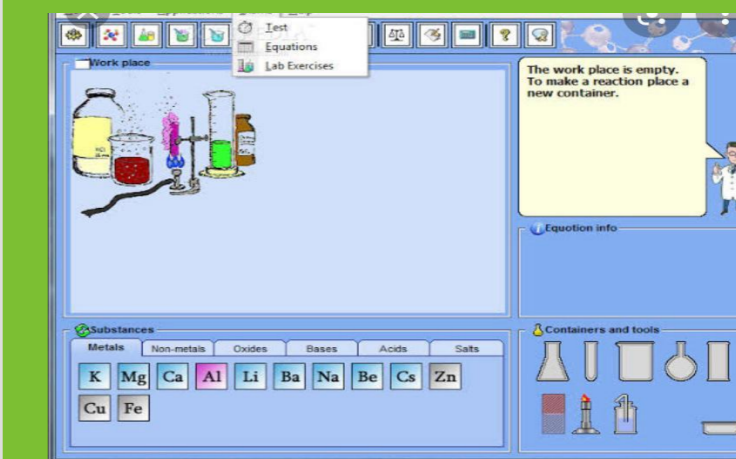
Etkileşimli Kimya Eğitiminde Simülasyonla (Web Üzerindeki Örnekler)

<https://phet.colorado.edu/tr/simulation/gas-properties>



<https://phet.colorado.edu/sims/html/>

<https://elearning.cpp.edu/learning-objects/organic-chemistry/tlc/?page=simulation.html>



Simülasyon Türleri

- 1.Fiziksel Simülasyonlar
- 2.Yöntem Simülasyonlar
- 3.Prosedürel Simülasyonlar
- 4.İşlevsel Simülasyonlar

Simülasyon Modelleme Süreçleri

- 1.Sistemin Tanımı
- 2.Modelin Formülasyonu
- 3.Veriler Derleme
- 4.Bilgisayar Programının Formüle Edilmesi
- 5.Modelin Geçerliliğinin Kontrolü
- 6.Stratejik Ve Taktik Planlama
- 7.Deneme ve Duyarlılık Analizleri
- 8.Uygulama ve Belgeleme

Simülasyon İle İlgili Dergiler ve Akademik olarak dergilerde yer alan bazı simülasyon çalışma örnekleri

MONTE CARLO SİMÜLASYON METODU VE MCNP KOD SİSTEMİ

Monte Carlo metodu, olasılık teorisi üzerine kurulu bir sistemdir. Monte Carlo metodunda istatistiksel ve matematiksel tekniklerle bir deneyi veya çözülmesi gereken bir fiziksel olayı tesadüfi sayıları defalarca kullanarak simülasyon edilip çözmek esastır. 1 Günümüzde bu metot, fizik ve matematik problemlerinin çözümünde MCNP Monte Carlo N – Parçacık Taşınım kodunu kullanarak nükleer transport hesaplamalarda iyi sonuçlar vermektedir.

KAYNAKÇALAR

<http://tez.sdu.edu.tr/Tezler/TF01052.pdf>

(<http://idari.cu.edu.tr/sempozyum/bil34.htm>)

Monte carlo simülasyon metodu ve MCNP kod sistemi ,A, HANÇERLİOĞULLARI ,ekim 2006 cilt :14 no :2 Kastomonu eğitim dergisi 545

Ümmüye NUR TÜZÜN , (2017), Kesit Akademi Dergisi, Sayı 12, 2017, 623 - 635

Angewandte chemie international edition in english / volume 29 , issue 9/ p.992-1023