T.C.
BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
MATEMATİK EĞİTİMİ ANABİLİM DALI

DİFERANSİYEL DENKLEMLERİN NÜMERİK ÇÖZÜMLERİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Canan AKTAŞ

Balıkesir, Ağustos-1995

T.C
BALIKESİR ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
MATEMATİK EĞİTİMİ ANABİLİM DALI

DİFERANSİYEL DENKLEMLERİN NÜMERİK ÇÖZÜMLERİ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Canan AKTAŞ

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Aydın OKÇU

Sınav Tarihi : 02.08.1995

Jüri Üyeleri : Prof. Dr. Aydın OKÇU (Danışman)
Prof. Dr. Turgut ÖZİŞ
Prof. İbrahim AKYÜZ

Balıkesir, Ağustos-1995

ÖZ

SONLU FARK YÖNTEMLERİYLE DİFERANSİYEL DENKLEMLERİN NÜMERİK ÇÖZÜMLERİ

Canan AKTAŞ
Balıkesir Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü,
Matematik Eğitimi Anabilim Dalı

(Yüksek Lisans Tezi / Tez Danışmanı : Prof. Dr. Aydın OKÇU)

Balıkesir, 1995

Parabolik denklemler sonlu fark yöntemleri kullanılarak çözülürler. Sonlu fark yaklaşımları; açık ve kapalı yöntemler olmak üzere iki grupta incelenir. Açık yöntem, U(x, t+k) bilinmeyen değerlerinin; adım adım U(x, t) bilinen değerlerini kullanarak doğrudan hesaplanmasıdır. Dolayısıyla, t yönünde noniterativ işlem yapar. Bir nonlineer denkleme uygulandığında sonuçta bir denklem sistemi vermesine rağmen kararlılık söz konusu olduğunda bazı kısıtlamalar getirdiğinden yeterli değildir. Kapalı yöntem, çözümde iterativ işlem kullanılmasıdır. Kararlılık ve yakınsaklık bakımından iyi olmakla birlikte, lineer olmayan bir denkleme uygulandığında yine lineer olmayan bir denklem sistemi verir. Bu yöntemlerle ilgili ayrıntılı açıklamalar 2 ve 3. bölümlerde verilmiştir.

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2},\ 0<x<X,\ t>0$$

bağıntısı sonlu fark yöntemleri kullanılarak

$$\frac{dV}{dt} = AV + b$$

şeklindeki adi diferansiyel denkleme indirgenir. Burada A ve b, t 'den bağımsızdır ve V(t), V(0)=g başlangıç koşulunu sağlar. A, (N-1) mertebeli,

$$A = \frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} -2 & 1 & & & & \\ 1 & -2 & 1 & & & \\ & & \cdot & & & \\ & & & \cdot & & \\ & & & & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

şeklinde bir matristir.

$$\frac{dV}{dt} = AV + b$$

formundaki adi diferansiyel denklemin çözümü 3. Bölüm'de gösterilmiştir. Kararlılık konusu 4. Bölüm'de verilmiştir. 5. Bölüm'de difüzyon ve reaksiyon difüzyon denklemleri için nümerik yöntemler anlatılmıştır.

Ekler bölümünde $\frac{dV}{dt} = AV + b$ diferansiyel denkleminin özdeğerlerinin bulunuş yöntemi ve klasik açık yaklaşımın bilgisayar programı Basic dilinde verilmiştir.

ANAHTAR SÖZCÜKLER : kısmî diferansiyel denklemler / sonlu fark yöntemleri / klasik açık yaklaşım / klasik kapalı yaklaşım / Crank-Nicolson yöntemi / doğrular yöntemi

ABSTRACT

NUMERICAL SOLUTION OF DIFFERANTIAL EQUATIONS WITH FINITE DIFFERENCE METHODS

Canan AKTAŞ
Balıkesir University, Institute of Science, Department of Mathematics Education

(M.Sc. Thesis / Supervisor : Prof. Dr. Aydın OKÇU)

Balıkesir-Turkey, 1995

Parabolic equations are solved by means of finite difference methods. Finite difference approximations are studied in two groups, namely explicit and implicit. The explicit method is the direct computation of U(x, t+k) unknown values by using U(x, t) known values in a step-by-step manner. Thus, this method operates noniteratively in the direction of t.

When applied to a non-linear equation, it does yield an equation system, but when it comes to stability, it is not efficient as it brings about certain restrictions. The implicit method is the utilization of an iterative operation in the solution.

Although this is efficient as far as stability and convergence are concerned, it yields a nonlinear equation when applied to another nonlinear equation. Detailed explanations concerning these methods have been given in section 2 and 3 of this thesis. Equation

$$\frac{\partial U}{\partial t}=\frac{\partial^2 U}{\partial x^2},\ 0<x<X,\ t>0$$

can be reduced to the ordinary differential equation

$$\frac{dV}{dt}=AV+b$$

by using finite difference methods. Here, A and B are independent of t; and V(t) satisfies V(0)=g initial condition.

A is a matrix in the form of

$$A=\frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -2 & 1 \\ & & & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

having an (N-1) order. The solution of ordinary differential equation in the form of

$$\frac{dV}{dt} = AV + b$$

has been shown in section 3.

The subject of stability has been given in section 4. In section 5 numerical methods for diffusion and reaction-diffusion have been explained.

Calculation method of eigenvalues of differential equation $\frac{dV}{dt} = AV + b$ and Basic-Language computer program for classical explicit approximation have been given in the appendix section.

KEY WORDS : partial differential equations / finite difference methods / classical explicit approximation / classical implicit approximation / Crank-Nicolson method / method of lines

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ

Bu çalışmayı bana vererek çalışmalarım süresince yakın ilgi ve yardımlarını esirgemeyen sayın Hocam; Prof.Dr.Aydın Okçu'ya, tezin yazımında yardımcı olan sayın Hocam; Yrd.Doç.Dr.Ömer GEMİCİ'ye ve sayın Bilgisayar İşletmeni Recep TURAN 'a teşekkür ve şükranlarımı sunmayı bir borç bilirim.

Balıkesir-1995 Canan AKTAŞ

1. TEMEL KAVRAMLAR

1.1 Kısmî Türevli Diferansiyel Denklem

Bir *kısmî türevli diferansiyel denklem*, iki veya daha çok bağımsız değişken ile bir veya daha çok bağımlı değişkenin, bağımsız değişkenlere göre kısmî türevlerini içeren bir denklemdir. n tane bağımsız ve bir tane bağımlı değişkenli, kısmî türevli denklemin genel şekli; $x_1, x_2, \dots, x_n$ bağımsız değişkenleri ve

$$U_{x_1} = \frac{\partial U}{\partial x_1}, \quad U_{x_2} = \frac{\partial U}{\partial x_2}, \quad U_{x_3} = \frac{\partial U}{\partial x_3}, \quad \cdots, \quad U_{x_n} = \frac{\partial U}{\partial x_n}$$

U bağımlı değişkeninin kısmî türevlerini göstermek üzere,

$$F\left(x_1, x_2, \dots, x_n, U_{x_1}, U_{x_2}, \dots, U_{x_n}, U_{x_1 x_1}, U_{x_1 x_2}, \dots\right) = 0$$

biçimindedir.

Bir veya birden fazla bağımlı değişkeni ve onların bir veya birden fazla bağımsız değişkenlere göre türevlerini içeren denklem takımına *diferansiyel denklem sistemi* denir.

Kısmî türevli denklemlerin fiziksel bilimlerde ve mühendislikte pek çok uygulamalarına rastlanır.

1.2. Sonlu Farklar

Günümüzün uygulamalı bilim dallarında ortaya çıkan problemler, teorik yöntemler ile çözülmeye başlanmış bulunmaktadır. Hatta bazı durumlarda, problemin analitik çözümü olsa bile sayısal yöntemlerin kullanılmasıyla çözüm, çok daha basit hale getirilebilmektedir.

Bir diferansiyel denklem şeklinde ifade edilebilen problemlerin yaklaşık çözümlerinde en çok kullanılan sayısal yöntem *sonlu fark* yaklaşımlarıdır. Problemlerin sonlu farklar ile çözülmesinde temel mantık, türevlerin sonlu fark operatörleri ile yer değiştirmesidir. Bu yer değiştirme Taylor serisi açılımı kullanılarak gerçeklenir. Çözüme geçmeden önce problem bölgesi genellikle geometrik şekiller içeren kafeslere bölünür ve problemin yaklaşık çözümü her bir kafesin *kesim (grid) noktaları* üzerinden hesaplanır.

Sonlu fark yaklaşımları; *açık (explicit)* ve *kapalı (implicit) yöntemler* olmak üzere iki grupta incelenir. Açık yöntem, U(x, t+k) bilinmeyen değerlerinin, adım adım U(x, t) bilinen değerlerini kullanarak doğrudan hesaplanmasıdır. Dolayısıyla, t yönünde noniterativ işlem yapar. Lineer olmayan bir denkleme uygulandığında sonuçta bir denklem sistemi vermesine rağmen kararlılık söz konusu olduğunda bazı kısıtlamalar getirdiğinden yeterli değildir. Kapalı yöntem, çözümde iterativ işlem kullanılmasıdır. Kararlılık ve yakınsaklık bakımından iyi olmakla birlikte, lineer olmayan bir denkleme uygulandığında yine lineer olmayan denklem sistemi verir [1]

Eğer, herhangi bir U(x, t), x 'e göre dördüncü, t 'ye göre de ikinci mertebeye kadar diferansiyellenebiliyorsa, bu fonksiyon için sonlu fark yaklaşımları aşağıdaki gibi verilebilir:

U(x, t) fonksiyonu; h, x yönündeki grid uzunluğu olmak üzere (x, t) civarındaki (x+h, t) ve (x-h, t) noktalarında Taylor serisine açılırsa sırasıyla,

$$U(x+h,t) = U(x,t) + h\frac{\partial U}{\partial x}(x,t) + \frac{h^2}{2!}\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x,t) + \frac{h^3}{3!}\frac{\partial^3 U}{\partial x^3}(x,t) + \frac{h^4}{4!}\frac{\partial^4 U}{\partial x^4}(x,t) + \cdots \tag{1.1}$$

$$U(x-h,t) = U(x,t) - h\frac{\partial U}{\partial x}(x,t) + \frac{h^2}{2!}\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x,t) - \frac{h^3}{3!}\frac{\partial^3 U}{\partial x^3}(x,t) + \frac{h^4}{4!}\frac{\partial^4 U}{\partial x^4}(x,t) + \cdots \tag{1.2}$$

bulunur. $\frac{\partial U}{\partial x}$ için (1.1) ve (1.2) 'den

$$\frac{\partial U}{\partial x}(x,t) = h^{-1}\left[U(x+h,t) - U(x,t)\right] + O(h) \tag{1.3}$$

ve

$$\frac{\partial U}{\partial x}(x,t) = h^{-1}\left[U(x,t) - U(x-h,t)\right] + O(h) \tag{1.4}$$

ifadeleri elde edilir.

Burada "O" sonsuz terimli bir eşitliğin sonlu bir terimde kesildiğini, O(h) terimi ise hatanın $h \to 0$ olduğundan h ile orantılı olduğunu gösterir ve buna *kesme (truncation) hatası* adı verilir.

Eğer (1.1) ve (1.2) eşitlikleri taraf tarafa çıkarılır ve toplanırsa

$$U(x+h,t) - U(x-h,t) = 2h\frac{\partial U}{\partial x}(x,t) + \frac{h^3}{3}\frac{\partial^3 U}{\partial x^3}(x,t) + \cdots \tag{1.5}$$

$$U(x+h,t)+U(x-h,t)=2U(x,t)+h^2\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x,t)+\frac{h^4}{12}\frac{\partial^4 U}{\partial x^4}(x,t)+\cdots \tag{1.6}$$

elde edilebilir.

$\dfrac{\partial U}{\partial x}$ için (1.5) ve (1.6)'dan sırasıyla

$$\frac{\partial U}{\partial x}(x,t)=(2h)^{-1}\left[U(x+h,t)-U(x-h,t)\right]+O(h^2) \tag{1.7}$$

ve

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x,t)=(h^2)^{-1}\left[U(x+h,t)-2U(x,t)+U(x-h,t)\right]+O(h^2) \tag{1.8}$$

yazılabilir [2].

(1.3), (1.4), (1.7) ve (1.8) denklemlerine sırasıyla *ileri fark*, *geri fark*, *birinci merkezi fark* ve *ikinci merkezi fark yaklaşımları* adı verilir.

k, t yönündeki grid uzunluğu olmak üzere yukarıdakine benzer şekilde U(x, t) fonksiyonunun $\dfrac{\partial U}{\partial t}(x,t)$ türevi için

$$\frac{\partial U}{\partial t}(x,t)=k^{-1}\left[U(x,t+k)-U(x,t)\right]+O(k) \tag{1.9}$$

$$\frac{\partial U}{\partial t}(x,t)=k^{-1}\left[U(x,t)-U(x,t-k)\right]+O(k) \tag{1.10}$$

ileri ve geri fark yaklaşımlarını yazmak mümkündür.

Bu yaklaşımlar operatör olarak

$$\frac{\partial U}{\partial x}(x,t)=\Delta_x U(x,t)=h^{-1}\left[U(x+h,t)-U(x,t)\right]+O(h), \tag{1.11}$$

$$\frac{\partial U}{\partial x}(x,t)=\nabla_x U(x,t)=h^{-1}\left[U(x,t)-U(x-h,t)\right]+O(h), \tag{1.12}$$

$$\frac{\partial U}{\partial x}(x,t)=\delta_x U(x,t)=(2h)^{-1}\left[U(x+h,t)-U(x-h,t)\right]+O(h^2), \tag{1.13}$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}(x,t)=\Delta^2{}_x U(x,t)=h^{-2}\left[U(x+h,t)-2U(x,t)+U(x-h,t)\right]+O(h^2), \tag{1.14}$$

$$\frac{\partial U}{\partial t}(x,t)=\Delta_t\ U(x,t)=k^{-1}\left[U(x,t+k)-U(x,t)\right]+O(k), \tag{1.15}$$

şeklinde ifade edilebilir. Bu operatörlere *sonlu fark operatörleri* adı verilir [2].

2. PARABOLİK DENKLEMLER

2.1 Sonlu Fark Yöntemleri

Herhangi bir karmaşık problemi çözmek için kullanılan tüm nümerik yöntemlerin hesaplama aşaması genellikle bir hayli aritmetik içerir. Bu yüzden çeşitli farklı problemlerin bir çözüme ulaşması için düzenleme olağandır. Bu düzenleme, tüm denklemlerin ifade edilmesiyle yapılabilir. O zaman aynı matematik formülüyle birlikte tüm problemler belirli bir çözümle ilgilenebilirler. Örneğin, yapışkan ortamdaki sarkacın salınımı, bir direnç vasıtasıyla sığaçtan (kapasitörden) elektrik yükü boşaltma ve indükleme, farklı fizik problemleridir; fakat matematik olarak ifade edildiğinde özdeş oldukları görülür.

Bu işlem, T zaman sonra, ince düzgün bir çubuğun bir ucundan X uzaklığında U sıcaklığını veren çözüm olan

$$\frac{\partial U}{\partial T}=K\frac{\partial^2 U}{\partial X^2}, \tag{2.1}$$

(K bir sabit olmak üzere) parabolik denklemiyle tanımlanır [3].

L çubuğun uzunluğunu ve U_0, sıfır zamanında maximum veya minimum olacak şekilde belirli bir sıcaklığı temsil etmek üzere;

$$x=\frac{X}{L}$$

ve

$$u=\frac{U}{U_0}$$

konulduğu zaman,

$$\frac{\partial U}{\partial X}=\frac{\partial U}{\partial x}\frac{dx}{dX}=\frac{\partial U}{\partial x}\frac{1}{L}$$

ve

$$\frac{\partial^2 U}{\partial X^2}=\frac{\partial}{\partial X}\left(\frac{\partial U}{\partial X}\right)=\frac{\partial}{\partial X}\left(\frac{1}{L}\frac{\partial U}{\partial x}\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial U}{\partial x}\frac{1}{L}\right)\frac{dx}{dX}=\frac{1}{L^2}\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

olur. Bu yüzden, (2.1) denklemi,

$$\frac{\partial (uU_0)}{\partial T}=\frac{K}{L^2}\frac{\partial^2 (uU_0)}{\partial x^2}$$

biçimine dönüşür. Yani,

$$\frac{1}{KL^{-2}}\frac{\partial u}{\partial T}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

dir. $t=KT/L^2$ yazarsak ve sol taraf için bir fonksiyonun fonksiyonu kuralını uygularsak (2.1)

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

haline dönüşür.

$$\frac{1}{KL^{-2}}\left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{KL^{-2}}\frac{\partial t}{\partial T}\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{KL^{-2}}\frac{K}{L^2}\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

bulunur.

2.2 Çözümün Açık Yöntemi

$$\frac{\partial U}{\partial t}\cong\frac{U_{i,j+1}-U_{i,j}}{k}\quad , \qquad \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\cong\frac{U_{i+1,j}-2U_{i,j}+U_{i-1,j}}{h^2}$$

denklemlerine göre, [3]

$$\frac{\partial U}{\partial t}=\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \tag{2.3}$$

için bir sonlu fark yaklaşımı

$$\frac{u_{i,j+1}-u_{i,j}}{k}=\frac{u_{i+1,j}-2u_{i,j}+u_{i-1,j}}{h^2}$$

dir. Burada u, $x_i=ih$, (i=0, 1, 2, ...) ve $t_j=jk$, (j=0, 1, 2, ...) olmak üzere fark denklemleri yaklaşımının tam çözümüdür.

Bu, $r=\delta t / (\delta x)^2=k / h^2$ olan

$$u_{i,j+1}=ru_{i-1,j}+(1-2r)u_{i,j}+ru_{i+1,j} \tag{2.4}$$

olarak yazılabilir ve j 'inci zaman dizisi boyunca bilinen sıcaklıkların terimlerinde (i, j+1) 'inci *mesh noktası*nda $u_{i,j+1}$ bilinen sıcaklığı için bir formül verir. Böylece, t=k olmak üzere bilinen sınırın terimlerinde birinci zaman dizisi boyunca u 'nun bilinmeyen esas değerlerini ve t=0 boyunca başlangıç değerlerini hesaplayabiliriz. O zaman birinci boyunca hesaplanan esas değerlerin terimlerinde, ikinci zaman dizisi boyunca bilinmeyen esas değerler şeklinde devam eder (Bak. Şekil. 2.1).

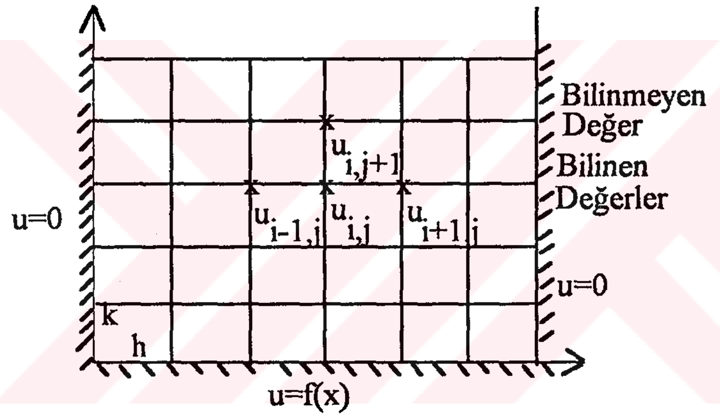
Örnek 2.1

Bir nümerik örnek olarak,

a) $U=2x$ $\quad 0\le x \le 1/2$ (2.5)

b) $U=2(1-x)$ $\quad 1/2 \le x \le 1$ (2.6)

koşullarında (2.4) 'ü çözelim.



Şekil 2.1

Diğer bir deyişle,

i) Tüm $t>0$ için $x=0$ ve $x=1$ 'de $U=0$ (sınır koşulu)

ii) $\left.\begin{array}{l} U=2x, 0\le x\le \frac{1}{2} \\ U=2(1-x), \frac{1}{2}\le x\le 1 \end{array}\right\}$ t=0 (başlangıç koşulu)

koşullarını sağlayan $\dfrac{\partial U}{\partial t}=\dfrac{\partial^2 U}{\partial x^2}$ 'nin nümerik çözümünü elde etmeye çalışıyoruz.

$\delta x=h=1/10$ için başlangıç değerleri ve sınır değerleri Çizelge 2.1 'de gösterildiği gibidir. Problem $x=1/2$ 'ye göre simetriktir, bu yüzden bize sadece $0 \le x \le 1/2$ için çözüm gereklidir.

Durum 1

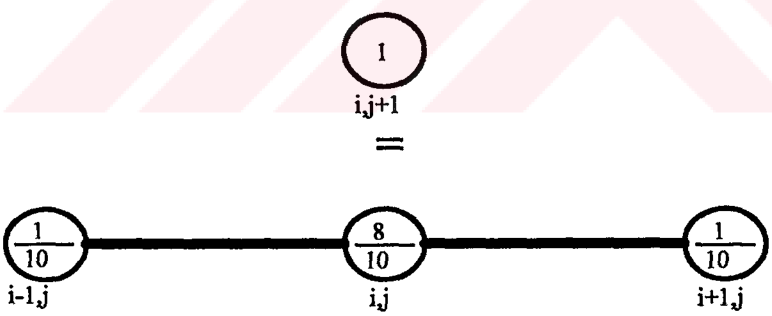
$\delta x=h=1/10$, $\delta t=k=1/1000$ alındığında $r=k/h^2=1/10$ olur. Denklem (2.4)

$$u_{i,j+1}=0.1(u_{i-1,j}+8u_{i,j}+u_{i+1,j}) \qquad (2.6)$$

olarak okunur. Bu dört fonksiyon değeri arasındaki ilişki elle hesaplanması Şekil.(2.2) deki molekül ile çok uygun olarak temsil edilir. Atomlardaki sayılar, göz önüne alınan mesh noktalarındaki fonksiyon değerinin çarpanlarıdırlar.

Çizelge 2.1

	x=0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	x
j=0	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0	0.8	
j=1	0							
j=2	0							
j=3	0							
j=4	0							
t								



Şekil 2.2

Çizelge 2.1 'in verileri için Denklem (2.6) 'nın uygulanması Çizelge 2.2 'de gösterilmiştir. Burada, $x=4/10$ ve $6/10$ 'da simetriden dolayı U 'nun değerleri eşittir (Çizelge 2.2 'de t 'nin artış değerleri yani j 'nin aşağı doğrudur). Örnek olarak,

$$u_{5,1}=\frac{1}{10}\{0.8+(8\times 1)+0.8\}=0.9600$$

$$u_{4,2}=\frac{1}{10}\{0.6+(8\times 0.8)+0.96\}=0.7960$$

Bu koşulları sağlayan kısmî diferansiyel denklemin analitik çözümü,

$$U = \frac{8}{\pi^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^2}(\sin\frac{1}{2}n\pi)(\sin n\pi x)\exp(-n^2\pi^2 t)$$

olur [4].

Çizelge 2.2

	i=0 x=0	i=1 0.1	i=2 0.2	i=3 0.3	i=4 0.4	i=5 0.5	i=6 0.6
(j=0)t=0.000	0	0.2000	0.4000	0.6000	0.8000	1.000	0.8000
(j=1)t=0.001	0	0.2000	0.4000	0.6000	0.8000	0.9600	0.8000
(j=2)t=0.002	0	0.2000	0.4000	0.6000	0.7960	0.9280	0.7960
(j=3)t=0.003	0	0.2000	0.4000	0.5996	0.7896	0.9016	0.7896
(j=4)t=0.004	0	0.2000	0.4000	0.5986	0.7818	0.8792	0.7818
(j=5)t=0.005	0	0.2000	0.3999	0.5971	0.7732	0.8597	0.7732
.							
.							
.							
(j=10)t=0.01	0	0.1996	0.3968	0.5822	0.7281	0.7867	0.7281
.							
.							
.							
(j=20)t=0.02	0	0.1938	0.3781	0.5373	0.6486	0.6891	0.6486

Çizelge 2.3

	Sonlu Fark Çözümü (x=0.3)	Analitik Çözüm (x=0.3)	Fark	Yüzdelik Hata
t=0.005	0.5971	0.5966	0.0005	0.08
t=0.01	0.5822	0.5799	0.0023	0.4
t=0.02	0.5373	0.5334	0.0039	0.7
t=0.10	0.2472	0.2444	0.0028	1.1

Yukarıda verildiği gibi x=0.3 'te sonlu fark çözümü ile bu çözümün karşılaştırması sonlu fark çözümünün uygun doğrulukta olduğunun gösterilmesidir. Yüzdelik hatası, kısmi diferansiyel denklemin analitik çözümünün yüzdeliği olarak ifade edilen çözümlerin farkıdır. Denklem 2.5 'te, x=0.5 noktasındaki karşılaştırmada, -2 'den +2 'ye $\partial U/\partial x$ 'in başlangıç değerlerindeki süreksizlikten dolayı sonlu fark çözümüne yeterince uygun doğrulukta olmadığı görülür. Bununla beraber Çizelge 2.4 'ün gözden geçirilmesi, bu süreksizliğin t arttıkça yok olduğu sonucunu göstermektedir [3].

Parabolik denklemin çözümünün, başlangıç değerleri ve başlangıç türevlerindeki süreksizliklerin sonucu olarak (sınır değerleri sabit olmak üzere) t arttıkça azaldığı analitik olarak ispatlanır [3].

"Richtmyer'de [5], başlangıç fonksiyonu ve onun ilk (p-1) türevlerinin sürekli olması ve p 'inci türevin genellikle süreksiz olması bu belirli sonlu fark denklemi için gösterilir. O zaman, kısmî diferansiyel denklemin çözümü ve fark denkleminin yakınsak çözümü arasındaki fark δt için, $(\delta t)^{(p+2)/(p+4)}$ mertebeli olur.

Çizelge 2.4

	Sonlu Fark Çözümü (x=0.5)	Analitik Çözüm (x=0.5)	Fark	Yüzdelik Hata
t=0.005	0.8597	0.8404	0.0193	2.3
t=0.01	0.7867	0.7743	0.0124	1.6
t=0.02	0.6891	0.6809	0.0082	1.2
t=0.10	0.3056	0.3021	0.0035	1.2

Çizelge 2.5

	i=0	1	2	3	4	5	6
	x=0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6
T=0.000	0	0.2000	0.4000	0.6000	0.8000	1.000	0.8000
0.005	0	0.2000	0.4000	0.6000	0.8000	0.8000	0.8000
0.010	0	0.2000	0.4000	0.6000	0.7000	0.8000	0.7000
0.015	0	0.2000	0.4000	0.5500	0.7000	0.7000	0.7000
0.020	0	0.2000	0.3750	0.5500	0.6250	0.7000	0.6250
.							
.							
.							
0.100	0	0.0949	0.1717	0.2484	0.2778	0.3071	0.2778

p=1 olmak üzere bu örnekte fark $(\delta t)^{3/5}$ mertebe kadardır. $(0.001)^{3/5}=0.016$ iken, sonlu fark çözümünün, çoğunlukla hata tahminleri için ortak özellik olan tahmini gösterimlerden gerçekten daha iyi olduğu görülür. Diğer taraftan $p\to\infty$ olmak üzere tüm türevler süreklidir ve hata δt mertebeli olur.

Durum 2

$\delta x=h=1/10$, $\delta t=k=5/1000$ alınarak $r=k/h^2=0.5$ 'tir. O zaman Denklem (2.4),

$$u_{i,j+1}=\frac{1}{2}(u_{i-1,j}+u_{i+1,j}) \qquad (2.7)$$

yi verir ve çözüm, Çizelge 2.5 'te yazılan sınır ve başlangıç değerlerine Denklem (2.7) uygulandığında elde edilir.

Çizelge 2.6

	Sonlu Fark Çözümü (x=0.3)	Analitik Çözüm (x=0.3)	Fark	Yüzdelik Hata
t=0.005	0.6000	0.5966	0.0034	0.57
t=0.01	0.6000	0.5799	0.0201	3.5
t=0.02	0.5500	0.5334	0.0166	3.1
t=0.10	0.2484	0.2444	0.0040	1.6

Bu sonlu fark çözümünün kısmî diferansiyel denkleminin çözümüne yaklaşım önceki kadar her yönüyle iyi değildir. Bununla birlikte, pek çok teknik amaç için elverişli olabilir.

Durum 3

$\delta x=1/10$, $\delta t=1/100$ alınarak $r=\delta t/(\delta x)^2=1$ 'dir. O zaman Denklem (2.4),

$$u_{i,j+1}=(u_{i-1,j}-u_{i,j}+u_{i+1,j}) \tag{2.9}$$

verir ve bu sonlu fark denkleminin çözümü aşağıdaki gibidir(Bak. Çizelge. 2.7).

Çizelge 2.7

	i=0 x=0	1 0.1	2 0.2	3 0.3	4 0.4	5 0.5	6 0.6
t=0.00	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0	0.8
0.01	0	0.2	0.4	0.6	0.8	0.6	0.8
0.02	0	0.2	0.4	0.6	0.4	1.0	0.4
0.03	0	0.2	0.4	0.2	1.2	-0.2	1.2
0.04	0	0.2	0.0	1.4	-1.2	2.6	-1.2

Başlangıç değerleri ve verilen sınır değerlerine göre (2.9) denklemi doğru çözüm olmasına rağmen kısmî diferansiyel denklemin bir çözümü olarak düşünülmesi açıkça anlamsızdır.

Bu üç durum, r 'nin değerinin önemli olduğunu açıkça gösterir.

2.3 Crank-Nicolson Kapalı Yöntemi

Açık yöntem basit hesaplama olmasına rağmen ciddi sakıncaları vardır. Zaman adımı $\delta t=k$ muhakkak çok küçüktür, çünkü işlem $0<k/h^2\leq 1/2$ yani $k\leq 1/2h^2$ için geçerlidir ve uygun doğruluğu bulmak için $h=\delta x$ olarak küçük olmak zorundadır. Crank ve Nicolson [6] hesaplamanın toplam değerini azaltan ve r 'nin tüm sonlu değerleri için doğru (yani tutarlı ve sabit) olan bir yöntem önermiş ve kullanmışlardır. Onlar,

$$\{ih, (j+1/2)k\}$$

orta noktasında ve j 'inci ve (j+1) 'inci zaman seviyelerinde

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

yerine sonlu fark yaklaşımlarının konmasıyla sağlanan kısmî diferansiyel denklemini incelemişlerdir. Diğer bir deyişle onlar, $r=k/h^2$ olan

$$-ru_{i-1,j+1}+(2+2r)u_{i,j+1}-ru_{i+1,j+1}=ru_{i-1,j}+(2-2r)u_{i,j}+ru_{i+1,j} \qquad (2.10)$$

denklemini veren

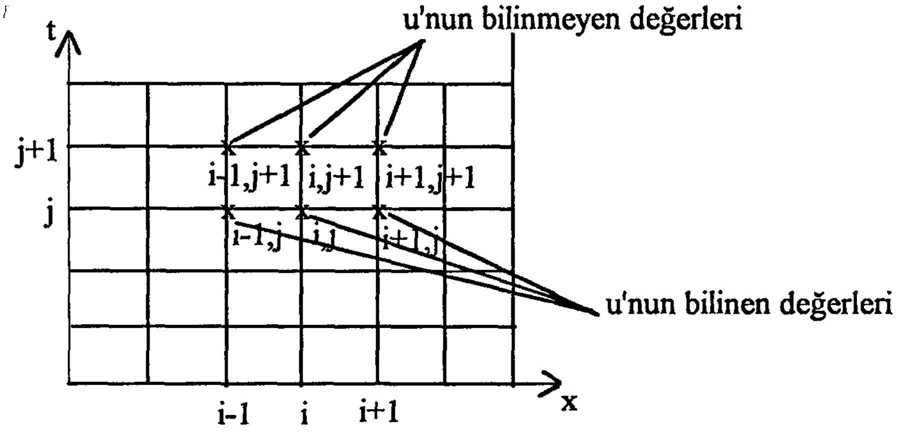
$$\frac{u_{i,j+1}-u_{i,j}}{k}=\frac{1}{2}\left\{\frac{u_{i+1,j+1}-2u_{i,j+1}+u_{i-1,j+1}}{h^2}+\frac{u_{i+1,j}-2u_{i,j}+u_{i-1,j}}{h^2}\right\}$$

ile

$$\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_{i,j+\frac{1}{2}}=\left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\right)_{i,j+\frac{1}{2}}$$

denklemine yaklaştırmışlardır.

Genellikle, Denklem (2.10) 'un sol tarafı üç bilinmeyen içerir ve sağ tarafındaki u 'nun esas değerlerinin üçü bilinmektedir (Bak. Şekil. 2.4). Eğer, j=0 ve i=1, 2, ..., N için her bir zaman sırası boyunca N tane iç mesh noktası varsa Denklem (2.10), bilinen başlangıç ve sınır değerlerinin terimlerindeki birinci zaman sırası boyunca N adet bilinmeyen esas değer için N tane karmaşık denklem verir.



Şekil. 2.4

Benzer şekilde j=1 birinci boyunca hesaplanan değerlerin terimlerinde ikinci zaman sırası boyunca u 'nun N bilinmeyen değerlerini ifade eder. Bilinmeyen *pivotal (esas)* değerin hesaplanması, kapalı bir yöntem gibi tarif edilen karmaşık denklemlerin bir kümesinin çözümünü gerekli kılan bir yöntemdir.

Sonlu fark notasyonunu bildiğimize göre Crank-Nicolson yöntemi

$$\frac{1}{k}\delta_t u_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2h^2}\left\{\delta_x^{\,2} u_{i,j+1} + \delta_x^{\,2} u_{i,j}\right\}$$

ile

$\{ih, (j+1/2)k\}$

noktasında kısmî diferansiyel denklemine yaklaştırılır. Burada t ve x indisleri sırasıyla t ve x doğrultusundaki farklanmayı gösterir.

Örnek 2.2

Daha önce çalışılan örneğin, yani

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \quad , \qquad 0 < x < 1 \ , \ t > 0$$

denkleminin nümerik çözümünü hesaplamak için Crank-Nicolson yöntemi kullanılır. Burada,

(i) $U=0$, $x=0$ ve $x=1$, $t \geq 0$,

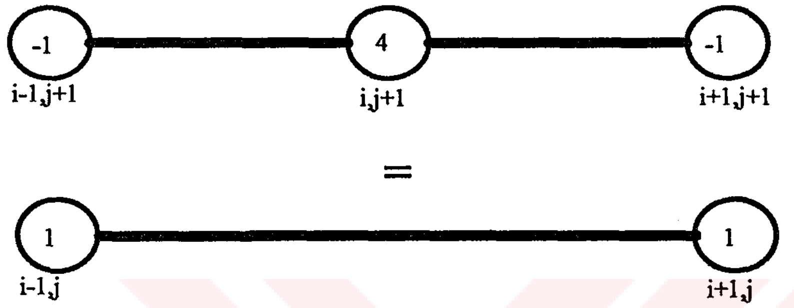
(ii) $U=2x$, $0 \leq x \leq 1/2$, $t=0$,

(iii) $U=2(1-x)$, $1/2 \leq x \leq 1$, $t=0$

h=1/10 alınır. Yöntem, $r=k/h^2$ 'nin tüm sonlu değerleri için doğru olmasına rağmen büyük değer, $\partial U/\partial t$ için doğru olmayan yaklaşımı verecektir. Uygun değer r=1 'dir ve (2.10) 'da $u_{i,j}$ 'nin katsayısını sıfır yapmak avantajdır. O zaman k=1/100 ve (2.10)

$$-u_{i-1,j+1}+4u_{i,j+1}-u_{i+1,j+1}=u_{i-1,j}+u_{i+1,j} \tag{2.11}$$

haline gelir. Denklem (2.11) için incelenen hesaplama molekülü Şekil. 2.5 'te gösterilir. $u_{i,j+1}$, u_i (i=1, 2, ... , 9) tarafından belirtilir. Simetriden dolayı bu probleme göre, $u_6=u_4$, $u_7=u_3$, vs 'dir (Bak. Şekil.2.6).



Şckil 2.5

İlk zaman adımı için u 'nun değerleri,

$-0+4u_1-u_2=0+0.4$, $\quad -u_1+4u_2-u_3=0.2+0.6$,

$-u_2+4u_3-u_4=0.4+0.8$, $\quad -u_3+4u_4-u_5=0.6+1.0$,

$-2u_4+4u_5 \;=0.8+0.8$.

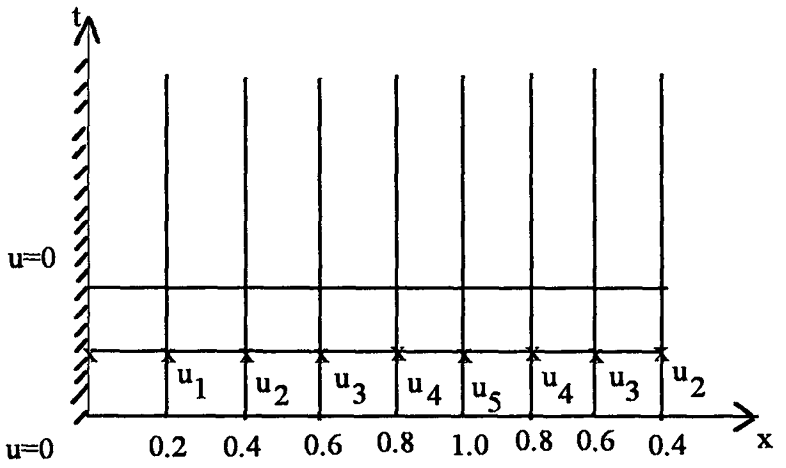
Bunlar, daha sonra gösterildiği gibi $u_1=0.1989$, $u_2=0.3956$, $u_3=0.5834$, $u_4=0.7381$, $u_5=0.7691$ vermesi için sistematik eliminasyonlarla kolaylıkla çözülür. Böylece gelecek zaman sırası boyunca u 'nun *pivotal (esas)* değerleri için denklemler,

$-0+4u_1-u_2=0+0.3956$, $\quad -u_1+4u_2-u_3=0.1989+0.5834$,

$-u_2+4u_3-u_4=0.3956+0.7381$, $\quad -u_3+4u_4-u_5=0.5834+0.7691$,

$-2u_4+4u_5 \;=2\times 0.7381$

bulunur.



Şekil 2.6

Çizelge 2.8

	x=0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
t=0.00	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
t=0.01	0	0.1989	0.3956	0.5834	0.7381	0.7691
t=0.02	0	0.1936	0.3789	0.5400	0.6461	0.6921
.	0					
.						
.						
t=0.1	0	0.0948	0.1803	0.2482	0.2918	0.3069
Analitik çözüm t=0.1	0	0.0934	0.1776	0.2444	0.2873	0.3021

Bu denklemlerin çözümü, kısmî diferansiyel denklemin çözümü ile t=0.1 'de sonlu fark çözümünü karşılaştıran şekillerle birlikte Çizelge 2.8 'de verilmiştir. Kolayca görülebileceği gibi nümerik çözüm iyi bir çözümdür. Çizelge 2.9, t 'nin çeşitli değerleri için x=0.5 'te her iki çözümü göstermektedir. Çizelge 2.4 incelendiğinde, görülmüştür ki bu örnekte zaman dağılımına dayanan kapalı yöntemin doğruluğu, pek çok zaman adımı olarak on kez kullanılan açık yöntemle yaklaşık aynı alınmıştır.

Öncelikle bahsedildiği gibi iki çözüm arasındaki fark bu noktada $\partial U/\partial x$ 'in başlangıç değerindeki adi süreksizlikten dolayı x=0.5 'te meydana gelir.

$\dfrac{\partial U}{\partial t}=\dfrac{\partial^2 U}{\partial x^2}$ için Crank-Nicolson yöntemi, r 'nin tüm değerleri için sabit olmasına rağmen, çözümün ve tüm hataların $j\to\infty$ olarak sıfıra yöneldiğini ileri sürebilir.

Çizelge 2.9

	Sonlu Fark Çözümü (x=0.5)	Analitik Çözüm (x=0.5)	Fark	Yüzdelik Hata
t=0.01	0.7691	0.7743	-0.0052	-0.7
t=0.02	0.6921	0.6809	+0.0112	+1.6
t=0.10	0.3069	0.3021	0.0048	1.6

2.4 Gauss Eliminasyon Yöntemi ile Denklemlerin Çözümü (Pivotlama Olmaksızın)

Her bir zaman sırası boyunca N-1 içteki mesh noktaları var olduğunda (2.10) Crank-Nicolson denklemleri çok genel olarak

$$
\begin{array}{ll}
+b_1u_1-c_1u_2 & =d_1 \\
-a_2u_1+b_2u_2-c_2u_3 & =d_2 \\
\quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot & \\
\qquad \cdot \quad \cdot \quad \cdot & \\
\qquad -a_iu_{i-1}+b_iu_i-c_iu_{i+1} & =d_i \\
\qquad\qquad \cdot \quad \cdot \quad \cdot & \\
\qquad\qquad -a_{N-1}u_{N-2}+b_{N-1}u_{N-1} & =d_{N-1}
\end{array}
$$

yazılabilir. Burada a, b, c ve d 'ler bilinmektedir. İlk denklem, ikinci denklemden u_1 'i elimine etmek için kullanılabilir. Yeni ikinci denklem, üçüncü denklemden u_2 'yi elimine etmek için kullanılabilir ve sonuna kadar bu şekilde devam eder. Fakat sondan bir önceki denklem, sadece u_{N-1} bilinmeyenli denklemi veren son denklemden u_{N-2} 'yi elimine etmek için kullanılabilir. u_{N-2}, u_{N-3}, … , u_2, u_1 bilinmeyenleri sıra ile geri koyma tarafından bulunabilir. Her bir yeni yöntemdeki c katsayısının hiçbiri incelenen eski denklemdekinin aynısı değildir. Eliminasyonların aşağıdaki aşamasının

$$\alpha_{i-1}u_{i-1}-c_{i-1}u_i=S_{i-1} \quad , \quad -a_iu_{i-1}+b_iu_i-c_iu_{i+1}=d_i,$$

ye ulaştığı kabul edilir. Burada, $\alpha_1=b_1$, $S_1=d_1$ 'dir. u_{i-1} ' in elimine edilmesi

$$\left(b_i-\frac{a_ic_{i-1}}{\alpha_{i-1}}\right)u_i-c_iu_{i+1}=d_i+\frac{a_iS_{i-1}}{\alpha_{i-1}}$$

yani

$$\alpha_iu_i-c_iu_{i+1}=S_i \tag{2.12}$$

ye yol açar. Burada,

$$\alpha_i = b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\alpha_{i-1}}$$

ve

$$S_i = d_i + \frac{a_i S_{i-1}}{\alpha_{i-1}} \qquad (i=2, 3, \ldots)$$

denklemidir. Aynı anda sağlanan denklemlerin son çifti

$$\alpha_{N-2}u_{N-2} - c_{N-2}u_{N-1} = S_{N-2}$$

ve

$$-a_{N-1}u_{N-2} + b_{N-1}u_{N-1} = d_{N-1}$$

dir. u_{N-2} 'nin eliminasyonu

$$\left(b_{N-1} - \frac{a_{N-1}c_{N-2}}{\alpha_{N-2}}\right)u_{N-1} = d_{N-1} + \frac{a_{N-1}S_{N-2}}{\alpha_{N-2}}$$

eşitliğini verir. Yani

$$\alpha_{N-1}u_{N-1} = S_{N-1} \tag{2.13}$$

denklemidir.

Denklem (2.12) ve (2.13), çözümün

$$u_{N-1} = \frac{S_{N-1}}{\alpha_{N-1}}$$

eşitliğiden, yani

$$u_i = \frac{1}{\alpha_i}(S_i + c_i u_{i+1}) \qquad (i=N-2, N-3, \ldots , 1)$$

denkleminden hesaplanabildiğini gösterir. Burada α ve S 'nin değerleri,

$$\alpha_1 = b_1 \ ; \ \ \alpha_i = b_i - \frac{a_i}{\alpha_{i-1}} c_{i-1}$$

$$S_1 = d_1 \ ; \ \ S_i = d_i + \frac{a_i}{\alpha_{i-1}} S_{i-1} \qquad (i=2, 3, \ldots , N-1)$$

tarafından verilmiştir. Çoğu problemde α_i ve a_i/α_{i-1} zamandan bağımsızdır ve zaman adımları sayısına önem vermeksizin sadece bir kez hesaplanması gereklidir.

Bir örnek olarak denklemleri,

$4u_1-u_2=0.4$, $-u_1+4u_2-u_3=0.8$,

$-u_2+4u_3-u_4=1.2$, $-u_3+4u_4-u_5=1.6$,

$-2u_4+4u_5=1.6$

olan son çalışılan örneği inceleyelim. Böylece,

$a_2=a_3=a_4=1$, $a_5=2$, $b_1=b_2=b_3=b_4=b_5=4$;

$c_1=c_2=c_3=c_4=1$; $d_1=0.4$, $d_2=0.8$, $d_3=1.2$, $d_4=d_5=1.6$

dır. Bu yüzden, her zaman adımı için değişken olmayan

$\alpha_1=4$,

$$\frac{a_2}{\alpha_1}=\frac{1}{4}=0.25, \qquad \alpha_2=4-\frac{a_2}{\alpha_1}=3.75,$$

$$\frac{a_3}{\alpha_2}=\frac{1}{3.75}=0.2667, \qquad \alpha_3=4-\frac{a_3}{\alpha_2}=3.7333,$$

$$\frac{a_4}{\alpha_3}=\frac{1}{3.7333}=0.2679, \qquad \alpha_4=4-\frac{a_4}{\alpha_3}=3.7321,$$

$$\frac{a_5}{\alpha_4}=\frac{2}{3.7321}=0.5359, \qquad \alpha_5=4-\frac{a_5}{\alpha_4}=3.4641,$$

katsayılarını veren

$$\alpha_1=b_1=4 \ ; \ \alpha_i=b_i-\frac{a_i}{\alpha_{i-1}}c_{i-1}=4-\frac{a_i}{\alpha_{i-1}} \qquad (i=2, 3, 4, 5)$$

olur.

$$S_1=d_1=0.4 \quad \text{ve} \quad S_i=d_i+\frac{a_i}{\alpha_{i-1}}S_{i-1} \qquad (i=2, 3, 4, 5) \text{ oldukça}$$

$$S_1=0.4 \ , \qquad S_2=0.8+\frac{a_2}{\alpha_1}S_1=0.8+(0.25)(0.4)=0.9 \ ,$$

$$S_3 = 1.2 + \frac{a_3}{\alpha_2} S_2 = 1.4400 \quad , \quad S_4 = 1.6 + \frac{a_4}{\alpha_3} S_3 = 1.9858 \quad ,$$

$$S_5 = 1.6 + \frac{a_5}{\alpha_4} S_4 = 2.6642$$

bulunur ve ilk zaman adımı için çözüm,

$$u_5 = \frac{S_5}{\alpha_5} = 0.7691 \quad , \qquad u_4 = \frac{1}{\alpha_4}(S_4 + c_4 u_5) = 0.7381,$$

$$u_3 = \frac{1}{\alpha_3}(S_3 + c_3 u_4) = 0.5834 \quad , \qquad u_2 = \frac{1}{\alpha_2}(S_2 + c_2 u_3) = 0.3956,$$

$$u_1 = \frac{1}{\alpha_1}(S_1 + c_1 u_2) = 0.1989$$

olur.

3. KISMÎ DİFERANSİYEL DENKLEMLERİN DOĞRULAR YÖNTEMİ (*METHOD OF LINES*) İLE NÜMERİK ÇÖZÜMÜ

3.1 Adi Diferansiyel Denklemlere İndirgenmesi

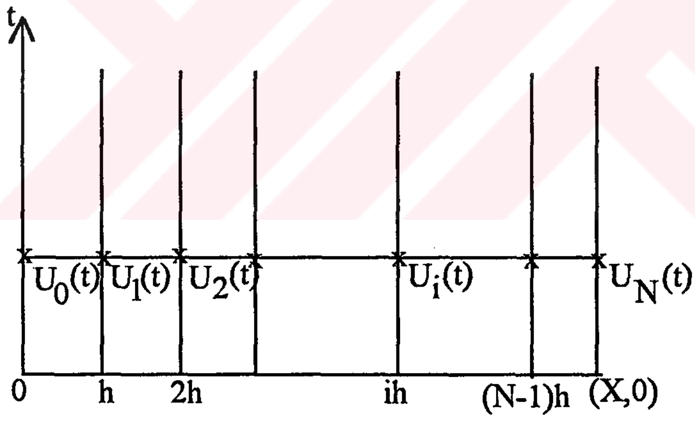
$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}, 0 < x < X, t > 0 \cdots \tag{3.1}$$

denklemini göz önüne alalım. Burada U, U(x,0)=g(x), $0 \le x \le X$ başlangıç koşulunu sağlar ve t>0 olmak üzere x=0 ve X 'te bilinen sınır değerlerine sahiptir. Eğer x, (x,t) 'de türevli ise,

$$\frac{1}{h^2}\{U(x-h,t) - 2U(x,t) + U(x+h,t)\} + O(h^2)$$

ile yerine geçer ve x,

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{1}{h^2}\{U(x-h,t) - 2U(x,t) + U(x+h,t)\} + O(h^2) \tag{3.2}$$



Şekil 3.1

adi diferansiyel denklemi olarak yazılabilen Denklem (3.1) 'in bir sabiti olarak göz önüne alınır.

$0 \le x \le X$ aralığı, Nh=X olmak üzere i=0(1)N olan x_i=ih şeritleri ile N eşit alt aralığa bölünür ve t zaman seviyesi boyunca i=1(1)N-1 olan her mesh noktası x_i=ih 'de (3.2) denklemi yazılır. $U_i(t)$ 'ye yaklaşan (N-1) adi diferansiyel denklemler sisteminin $V_i(t)$ değerleri tam çözüm olacak şekilde aşağıdadır.

$$\frac{dV_1(t)}{dt} = \frac{1}{h^2}(V_0 - 2V_1 + V_2)$$

$$\frac{dV_2(t)}{dt} = \frac{1}{h^2}(V_1 - 2V_2 + V_3)$$

$$\vdots$$

$$\frac{dV_{N-1}}{dt} = \frac{1}{h^2}(V_{N-2} - 2V_{N-1} + V_N),$$

Burada V_0 ve V_N bilinen sınır değerleridir. Bunlar,

$$\frac{d}{dt}\begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \\ \vdots \\ V_{N-2} \\ V_{N-1} \end{bmatrix} = \frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} -2 & 1 & & & & \\ 1 & -2 & 1 & & & \\ & & . & . & . & \\ & & & . & . & . \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} V_1 \\ V_2 \\ \vdots \\ V_{N-2} \\ V_{N-1} \end{bmatrix} + \frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} V_0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ V_N \end{bmatrix}$$

olarak matris formunda yazılabilir. Yani

$$\frac{dV(t)}{dt} = AV(t) + b \quad \ldots \qquad (3.3)$$

gibidir. Burada $V(t)=[V_1, V_2, \cdots V_{N-1}]^T$, b sıfırların ve bilinen sınır değerlerinin sütun vektörü ve (N-1) mertebeli A matrisi

$$A=\frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & & . & & \\ & & & . & \\ & & & -2 & 1 \\ & & & 1 & -2 \end{bmatrix} \qquad (3.4)$$

olarak verilir. A ve b, t 'den bağımsız ve V(t), V(0)=g başlangıç koşulunu sağlamak üzere,

$$\frac{dV(t)}{dt} = AV(t) + b$$

adi diferansiyel denklemin çözümü,

$$V(t)=\frac{-b}{A}+\left(g+\frac{b}{A}\right)\exp(At)$$

olarak değişkenlerin ayrışımı yöntemi ile kolaylıkla gösterilir.

Bölüm (3.2) 'de,

$$V(0)=[g_1,g_2,\ldots,g_{N-1}]^T=g$$

başlangıç koşulunu sağlayan (3.3) 'ün çözümünün (burada b, t 'den bağımsız olmak üzere),

$$V(t)=-A^{-1}b+\{\exp(tA)\}(g+A^{-1}b)\cdots \tag{3.5}$$

olduğu gösterilir. Böylece,

$$V(t+k)=-A^{-1}b+\{\exp(t+k)A\}(g+A^{-1}b)$$

$$V(t+k)=-A^{-1}b+\{\exp(t+k)A\}(g+A^{-1}b)$$

olur. (3.5) denklemine göre, bu

$$V(t+k)=-A^{-1}b+\{\exp(kA)\}(V(t)+A^{-1}b) \tag{3.6}$$

olduğunu gösterir. Eğer tüm sınır değerleri sıfır ise,

$$V(t+k)=\{\exp(kA)\}V(t) \tag{3.7}$$

bulunur. Eğer stability ile belirli bir nümerik çözümden daha fazla ilgili olduğumuzu farz edersek sınır değerleri her zaman elimine edilebilir. g 'den g^* 'a başlangıç değerlerinin vektörünü kısaltırız.

Denklem (3.5) 'e göre $V^*(t)$ çözümü,

$$V^*(t)=-A^{-1}b+\{\exp(tA)\}(g^*+A^{-1}b) \tag{3.8}$$

olur. O zaman (3.5) ve (3.8) denklemleri,

$$V^*(t)-V(t)=\{\exp(tA)\}(g^*-g)$$

denklemini gösterir. Böylece t zamanında kısaltma vektörü

$$e(t)=V^{*}(t)-V(t)\ , \qquad e(t)=\{\exp(tA)\}e(0)$$

ile başlangıç kısaltma vektörü

$$e(0)=g^{*}-g$$

denklemiyle bağlantılıdır. Daha önce de olduğu gibi,

$$e(t+k)=\{\exp(kA)\}e(t)$$

olur.

3.2 $\dfrac{dV(t)}{dt}=AV(t)+b$ 'nin Çözümü Üzerine Bir Not

Reel nxn matrisli **P** 'nin üstel matrisi

$$\exp P=e^{P}=I_n+P+\frac{P^2}{2!}+\frac{P^3}{3!}+\ldots\sum_{m=0}^{\infty}\frac{P^m}{m!} \tag{3.9}$$

tarafından tanımlanır. Burada $P=I_n$; n mertebeli birim matristir. Eğer Q, PQ=QP olacak biçimde reel nxn matrisi ise,

$$e^{P}e^{Q}=e^{Q}e^{P}=e^{P+Q}$$

denklemi (3.9) tarafından ispatlanabilir. Böylece,

$$e^{P}e^{-P}=e^{-P}e^{P}=e^{0}$$

olur. Ama (3.9) 'a göre, $e^{0}=I_n$ 'dir. Bu yüzden

$$e^{P}e^{-P}=I_n\ \ldots \tag{3.10}$$

bulunur. $(e^{P})^{-1}e^{P}=I_n$ ile tanımlı e^{P} 'nin $(e^{P})^{-1}$ tersi ile (3.10) 'un her iki tarafının önçarpımı, $e^{-P}=(e^{P})^{-1}$ olduğunu gösterir. A, t 'den bağımsız olmak üzere, (3.9) 'da P=At konulduğunda ve t 'ye göre diferansiyeli bulunduğunda

$$\frac{d}{dt}(e^{At})=Ae^{At}=e^{At}A$$

şeklinde olur.

Şimdi, g, t 'den bağımsız olmak üzere $V(t)=e^{At}g$ 'yi göz önüne alalım. Bu açıkça $V(0)=g$ başlangıç koşulunu sağlar. t 'ye göre diferansiyelini bulursak

$$\frac{dV}{dt}=Ae^{At}g=AV$$

denklemini verir. Diğer bir deyişle, $V(0)=g$ 'yi sağlayan

$$\frac{dV}{dt}=AV \tag{3.11}$$

çözümü $V(t)=e^{At}g$ 'dir. Benzer şekilde, $V(0)=g$ başlangıç koşulunu açıkça sağlayan

$$V(t)=-A^{-1}b+e^{tA}(g+A^{-1}b)$$

vektör fonksiyonu, b vektörü ve t 'den bağımsız A matrisi şartıyla

$$\frac{dV}{dt}=AV+b$$

denkleminin çözümüdür. A matrisinin özdeğerlerinin bulunuşu ekte verilmiştir.

3.3 Adi Diferansiyel Denklemler Yoluyla Sonlu Fark Yaklaşımı

Daha basit bir şekilde anlatmak gerekirse,

$$\frac{\partial U}{\partial t}=\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\ , \quad 0<x<X\ , \quad t>0$$

denklemiyle ilişkili sınır değerlerini sıfır olarak kabul edelim. Denklem (3.7) 'ye göre, t zaman seviyesi boyunca $i=1(1)N-1$ olmak üzere $x_i=ih$ mesh noktalarında V(t) vektör değerlerinin U(t) yaklaşımı tarafından sağlanan bağıntısı,

$$V(t+k)=\{\exp(kA)\}V(t)\ , \quad t=0,\ k,\ 2k,\ \ldots \tag{3.12}$$

denklemidir. Burada A matrisi Denklem (3.4) ile tanımlanır. Exp(kA) 'dan,

$$I+kA+\frac{1}{2}k^2A^2+\frac{1}{6}k^3A^3+\cdots$$

açılımı k^2 mertebeli en büyük dereceli hata terimi ile I+kA 'ya yaklaştırılır.

$$u=[u_1,u_2,\cdots,u_{N-1}]^T$$

değerlerinin vektörü yani Denklem (3.12) 'deki yaklaşık V,

$$u(t+k)=(I+kA)u(t) \tag{3.13}$$

sonlu fark denklemlerinin çözümü olacaktır. Eğer $t=t_j=jk$ ve $r=k/h^2$ ise bu denklemler sınır değerleri sıfır olmak üzere,

$$\begin{bmatrix} u_{1,j+1} \\ u_{2,j+1} \\ \vdots \\ u_{N-2,j+1} \\ u_{N-1,j+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1-2r) & r & & & \\ r & (1-2r) & r & & \\ & & \ddots & & \\ & & r & (1-2r) & r \\ & & & r & (1-2r) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{1,j} \\ u_{2,j} \\ \vdots \\ u_{N-2,j} \\ u_{N-1,j} \end{bmatrix}$$

olarak bulunur. i. denklem klasik,

$$u_{i,j+1} = ru_{i-1,j} + (1-2r)u_{i,j} + ru_{i+1,j} \quad , i=1(1)N-1$$

açık yaklaşımıdır. Diğer daha yüksek mertebeli yaklaşımlar Padé yaklaşımları tarafından verilir.

3.4 e^θ için , θ Reel Olmak Üzere Padé Yaklaşımları

e^θ 'nın $(1+p_1\theta)/(1+q_1\theta)$ şeklinde yaklaştırılması gerektiğini kabul ederiz. Burada p_1 ve q_1 sabitlerdir. p_1 ve q_1 'in tayini θ ve θ^2 'nin katsayılarından gelecek olan iki denklemi gerektirir. Bu yüzden en büyük dereceli hata terimi θ^3 mertebeli olacaktır. Böylece,

$$e^\theta = \frac{1+p_1\theta}{1+q_1\theta} + c_3\theta^3 + c_4\theta^4 + \cdots$$

olur. Bu yüzden,

$$(1+q_1\theta)(1+\theta+\frac{1}{2}\theta^2+\frac{1}{6}\theta^3+\cdots) \equiv 1+p_1\theta+(1+q_1\theta)(c_3\theta^3+c_4\theta^4+\cdots)$$

şeklindedir. Böylece,

$$(1+q_1-p_1)\theta+(\frac{1}{2}+q_1)\theta^2+(\frac{1}{6}+\frac{1}{2}q_1-c_3)\theta^3+\text{daha yüksek mertebeli terimler} \equiv 0$$

Bu, $p_1=1/2$, $q_1= -1/2$ ve $c_3= -1/12$ ile üç mertebeli terimler için eşitsizliği sağlar. Rasyonel yaklaşım

$$\left(1+\frac{1}{2}\theta\right)/\left(1-\frac{1}{2}\theta\right)$$

$\exp\theta$ için iki mertebeli (1,1) Pade yaklaşımı adını alır ve en büyük dereceli hata terimi üç mertebelidir. Genellikle,

$$e^{\theta}=\frac{1+p_1\theta+p_2\theta^2+\cdots+p_T\theta^T}{1+q_1\theta+q_2\theta^2+\cdots+q_S\theta^S}+c_{S+T+1}\theta^{S+T+1}+O(\theta^{S+T+2})$$

ile $\exp\theta$ yaklaşımı mümkündür. Burada c_{S+T+1} bir sabittir.

$$R_{S,T}(\theta)=\frac{1+p_1\theta+\cdots+p_T\theta^T}{1+q_1\theta+\cdots+q_S\theta^S}=\frac{P_T(\theta)}{Q_S(\theta)}$$

rasyonel fonksiyonu, e^{θ}için (S+T) mertebeli (S,T) Padé yaklaşımı adını alır. Çizelge 3.1, $\exp\theta$ için ilk sekiz Padé yaklaşımını ve bu yaklaşımın en büyük dereceli hata terimlerini verir.

Çizelge 3.1

(S,T)	$R_{S,T}(\theta)$	Başlıca hata terimi
(0,1)	$1+\theta$	$\frac{1}{2}\theta^2$
(0,2)	$1+\theta+\frac{1}{2}\theta^2$	$\frac{1}{6}\theta^3$
(1,0)	$\frac{1}{1-\theta}$	$-\frac{1}{2}\theta^2$
(1,1)	$\frac{1+\frac{1}{2}\theta}{1-\frac{1}{2}\theta}$	$-\frac{1}{12}\theta^3$
(1,2)	$\frac{1+\frac{2}{3}\theta+\frac{1}{6}\theta^2}{1-\frac{1}{3}\theta}$	$-\frac{1}{72}\theta^4$
(2,0)	$\frac{1}{1-\theta+\frac{1}{2}\theta^2}$	$\frac{1}{6}\theta^3$
(2,1)	$\frac{1+\frac{1}{3}\theta}{1-\frac{2}{3}\theta+\frac{1}{6}\theta^2}$	$\frac{1}{72}\theta^4$
(2,2)	$\frac{1+\frac{1}{2}\theta+\frac{1}{12}\theta^2}{1-\frac{1}{2}\theta+\frac{1}{12}\theta^2}$	$\frac{1}{720}\theta^5$

3.5 Padé Yaklaşımları Yoluyla Standart Sonlu Fark Yaklaşımları

3.5.1 Klasik Açık Yaklaşım

$$\frac{\partial U}{\partial t}=\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

için klasik açık yaklaşımının (0,1) Padé yaklaşımı ile exp(kA) tarafından verildiği Çizelge 3.1 ve Denklem (3.13) ile görülür.

3.5.2 Klasik Kapalı Yaklaşım

(1,0) Padé yaklaşımı,

$$u(t+k)=(I-kA)^{-1}u(t)$$

ile

$$V(t+k)=\{\exp(kA)\}V(t)$$

denklemine yaklaşır. (I-kA) matrisi ile her iki tarafın önçarpımı,

$$(I-kA)u(t_j+k)=u(t_j)\ ,\quad j=0,\ 1,\ 2,\ \ldots$$

denklemini verir. Burada

$$u(t_j+k)=\left[u_{1,j+1},u_{2,j+1},\cdots,u_{N-1,j+1}\right]^T$$

ve A matrisi, (3.4) tarafından tanımlanır. Sıfır sınır koşulları olmak üzere,

$$\begin{bmatrix} (1+2r) & -r & & & \\ -r & (1+2r) & -r & & \\ & & \ddots & & \\ & & -r & (1+2r) & -r \\ & & & -r & (1+2r) \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} u_{1,j+1} \\ u_{2,j+1} \\ \vdots \\ u_{N-2,j+1} \\ u_{N-1,j+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u_{1,j} \\ u_{2,j} \\ \vdots \\ u_{N-2,j} \\ u_{N-1,j} \end{bmatrix}$$

i. denklem kapalı veya

$$-ru_{i-1,j+1}+(1+2r)u_{i,j+1}-ru_{i+1,j+1}=u_{i,j}\quad ,\quad i=1(1)N-1$$

geriye fark denklemini verir. Bu, tüm $r=k/h^2>0$ için koşulsuz sabittir. En büyük dereceli hata terimleri, $\partial^2 U/\partial x^2$ 'ye merkezi fark yaklaşımından dolayı x 'de h^2 ve t 'de k mertebelidir. (exp(kA) için (1,0) Pade yaklaşımının en büyük dereceli hata terimi $O(k^2)$ 'dir. Yöntem t 'de birinci mertebede doğrudur denir.

3.5.3 Crank-Nicolson Denklemleri

$$V(t+k)=\{\exp(kA)\}V(t)$$

denklemi yerine Çizelge (3.1) 'den (1,1) Padé yaklaşımını, yani

$$u(t+k)=\left(I-\frac{1}{2}kA\right)^{-1}\left(I+\frac{1}{2}kA\right)u(t)$$

denklemini koyarız. Nümerik hesaplamalar için bu ,

$$\left(I-\frac{1}{2}kA\right)u(t+k)=\left(I+\frac{1}{2}kA\right)u(t)$$

olarak yazılır. Bu,

$$-ru_{i-1,j+1}+2(1+r)u_{i,j+1}-ru_{i+1,j+1}=ru_{i-1,j}+2(1-r)u_{i,j}+ru_{i+1,j},i=1(1)N-1$$

Crank-Nicolson denklemini verir. Bu da Padé yaklaşımı yoluyla k^3 mertebeli bir hata terimine sahip olan t 'de ikinci mertebede doğrudur ve ileri fark yönteminden daha geniş zaman aralıkları ile birlikte kullanılabilir [3].

4. KARARLILIK, HASSASİYET VE HASSASİYETİN ARTTIRILMASI

Sınır değerleri sıfir olan

$$\frac{\partial U}{\partial t}=\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \ , \ 0<x<X \ , \ t>0$$

denklemi ile ilişkili ve başlangıç değerlerinin vektörü

$$U(0)=g=[g_1,g_2,\cdots,g_{N-1}]^T \ , \ Nh=X$$

olarak kabul edilir. O zaman, $t_j=jk$ zaman seviyesi boyunca $x_i=ih$, $i=1(1)N-1$ mesh noktalarında U(t) 'ye yaklaşan V(t) değerlerinin vektörü,

$$V(t_j+k)=\{\exp(kA)\}V(t_j) \ , \ j=0,\ 1,\ 2,\ \ldots$$

bağıntısını sağlar. Eğer, kA 'nın üsteli $R_{S,T}(kA)$ olan (S,T) Padé yaklaşımı ile yaklaşırsa sonlu fark denklemlerinin sonuç kümesi,

$$u(t_j+k)=R_{S,T}(kA)u(t_j)$$

olur. Bu da,

$$u(t_j)=R_{S,T}(kA)u(t_{j-1})$$

olarak denk şekilde yazılabilir. Tekrar uygulandığında bu,

$$u(t_j)=[R_{S,T}(kA)]^j u(0) \tag{4.1}$$

gösterir. Burada, u(0)=U(0)=g 'dir. Artık, A matrisinin özdeğerleri,

$$\lambda_s=\frac{-4}{h^2}\sin^2\frac{s\pi}{2N} \ , \ s=1(1)N-1$$

dir ve tümü farklıdır. Böylece, A 'nın (N-1) özvektörleri v_s lineer bağımsızdır ve başlangıç değerlerinin yani g vektörünün (N-1) boyutlu uzayı için bir taban olarak kullanılabilir. Diğer bir deyişle g,

$$g=\sum_{s=1}^{N-1}c_s v_s$$

olarak ifade edilebilir. Burada c_s sabittir. Bu yüzden (4.1) denklemi,

$$u(t_j) = \left[R_{S,T}(kA)\right]^j \sum_{s=1}^{N-1} c_s v_s = \sum_{s=1}^{N-1} c_s \left[R_{S,T}(kA)\right]^j v_s \tag{4.2}$$

olarak yazılır.

$$Av_S = \lambda_s v_S$$

ve

$$f(A)v_S = f(\lambda_s)v_S$$

olduğunu hatırlarsak sonlu fark denklemlerinin çözümü Denklem (4.2) 'den

$$u(t_j) = \sum_{s=1}^{N-1} c_s \left[R_{S,T}(k\lambda_s)\right]^j v_s \tag{4.3}$$

olarak elde edilebilir. Denklem (4.3), $u(t_j)$ 'nin sadece ve sadece $|R_{S,T}(k\lambda_s)|<1$, $s=1(1)N-1$ olmak üzere $j \to \infty$ olarak sıfir vektörüne yöneleceğini gösterir. Tüm yuvarlanan hatalarda sıfıra yaklaşacaktır. Çünkü, hatalar $j=1, 2, ...$ olmak üzere $u(t_j)$ 'nin bileşenleri olarak aynı aritmetik operatörlere bağlıdırlar. Eğer, bu koşul $r=k/h^2$ 'nin değerine bağlıysa denklemler şartlı sabittir. Bu , t artması ile çözüm sıfıra yöneldiğinde, sabit h ve k için matris yöntemi tarafından belirlenen koşullu (şartlı) stabilitye tam olarak karşılık gelir.

Tüm $r>0$ için $|R_{S,T}(k\lambda_s)|<1$ olduğunda denklemler A_0 sabitli olarak söylenir. A_0 stability, reel $R_{S,T}(k\lambda_s)$ için $-1<R_{S,T}(k\lambda_s)<1$ 'i belirtmesine rağmen, $R_{S,T}(k\lambda_s)$ 'nin bazı değerlerinin $k\lambda_s$ 'nin özel değerleri için -1 'e yakın olması muhtemeldir. Denklem (4.3) 'teki $\left[R_{S,T}(k\lambda_s)\right]^j$ nin değerlerinde j arttıkça işaretteki değişiklikler birbirini takip edecek ve büyüklükte çok yavaş azalacaktır.

(4.3) 'teki reel katsayılar $R_{S,T}(k\lambda_s)$, eğer $0<R_{S,T}(k\lambda_s)<1$ ($s=1(1)N-1$ olmak üzere) ve büyüklük olarak $k\lambda_S$ arttıkça $R_{S,T}(k\lambda_s) \to 0$ yaklaşırsa sabit ve istenmeyen sonlu salınımların dışında bir çözüm verebilir. λ_s reel ve negatif olmak üzere,

$$R_{(1,0)}(k\lambda_s) = \frac{1}{1-k\lambda_s}$$

olan (1,0) Padé yaklaşımı bu türden bir çözüm verebilir. Bu da $k\lambda_s \to -\infty$, $\lambda_s<0$ ve reel olmak üzere pozitif ve/veya negatif değerlerden sıfıra yönelen $R_{S,T}(k\lambda_s)$ için uygundur.

Bir sonuç olarak eğer $k\lambda_s \to -\infty$, λ_s reel, negatif ve sıfırdan farklı olmak üzere

$|R_{S,T}(k\lambda_s)|<1$, s=1(1)N-1

ve

$R_{S,T}(k\lambda_s)\to 0$

ise fark denklemlerinin bir kümesi L_0 sabitli olarak söylenir.

Gourlay ve Morris'e [7] göre $\lambda_s=-(4/h^2)\sin^2 s\pi/2N$ 'den z pozitif olan $k\lambda_S=-z$ konması ve yöntemin sembolü olan $R_{S,T}(-z)$ denmesi olağandır. O zaman fark denklemlerinin bir kümesi, tüm z >0 için $|R_{S,T}(-z)|<1$ ve $z\to\infty$ olarak $R_{S,T}(-z)\to 0$ olmak üzere L_0 sabitli olur. (1,0) Padé yaklaşımına göre, $R_{1,0}(-z)=1/(1+z)$ 'dir ve geri fark denkleminin L_0 sabitli olduğunu gösteren her iki koşuluda sağlar (Bak. Şekil 4.2).

Crank–Nicolson tasarısına göre,

$$R_{1,1}(-z)=\frac{1-\frac{1}{2}z}{1+\frac{1}{2}z}=\frac{2/z-1}{2/z+1} \tag{4.4}$$

olur. Açıkça, tüm z>0 için $|R_{1,1}(-z)|<1$ fakat $z\to\infty$ olarak $R_{1,1}(-z)\to -1$ olan tasarının A_0 sabitli olduğunu gösterir. h 'yi azaltarak doğruluğu arttırma çabası gösterildiğinde, A_0 sabitli yöntemlerle istenmeyen sonlu titreşimlerin büyüklük artması da çok rastlanan bir şeydir.

Bu, eğer (4.3) denkleminin $R_{S,T}(k\lambda_s)$ terimi h azalmasından dolayı -1'e çok yaklaşırsa meydana gelir. Crank–Nicolson denklemleri bu olayı gösterir. Çünkü h 'deki bir azalma $\lambda_S=(-4/h^2)\sin^2 s\pi/2N$ 'nin büyüklüğünü arttırır. Yani z artar ve (4.4) bağıntısındaki $R_{1,1}(-z)$ 'nin -1 'e daha fazla yaklaşmasını sağlar. Bir sonuç olarak 1978'den beri araştırmanın çoğu t 'de yüksek mertebe doğruluklu L_0 sabitli yöntemlerin kuşağına doğrudur [7, 8, 9].

Parabolik denklemler için Padé yaklaşım tasarıları S>T iken L_0 sabitli ve S=T iken A_0 sabitlidir.

4.1 Crank–Nicolson Yöntemi için Zaman Adımı Üzerine Gerekli Bir Sınırlama

Nümerik çalışmalar, çok yavaş azalmakta olan sonlu salınımların başlangıç değerlerindeki veya başlangıç ve sınır değerleri arasındaki süreksizliklerin komşuluğunda olan Crank–Nicolson yöntemi ile meydana geldiğini dolaylı olarak belirtir [3].

$$\frac{\partial U}{\partial t}=\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}\ ,\ 0<x<X,\ t>0$$

için sınır değerlerini sıfır ve başlangıç değerlerinin vektörünü $U_0=g$ olarak kabul edelim. O zaman Denklem (4.3) 'te görülen Crank–Nicolson veya (1,1) Padé yaklaşımı çözümü

$$u_j=\sum_{s=1}^{N-1} c_s \mu_s^j v_s \tag{4.5}$$

olacaktır. Burada ,

$$\mu_s=\frac{1+\frac{1}{2}k\lambda_s}{1-\frac{1}{2}k\lambda_s}\ ,\ s=1(1)N-1 \tag{4.6}$$

olarak alınır. Bu da,

$$\left(I-\frac{1}{2}kA\right)^{-1}\left(I+\frac{1}{2}kA\right)$$

büyültme matrisinin özdeğerleridir. λ_s ve v_s (3.4) 'ün yani A matrisinin özdeğerleri ve göz önüne alınan özvektörleridir.

$$\left(Nh=X,\ \lambda_s=-\left(\frac{4}{h^2}\right)\sin^2\frac{s\pi}{2N}\ \text{olmak üzere}\right)$$

ve

$$g=\sum_{s=1}^{N-1} c_s v_s \tag{4.7}$$

dir. Sıklıkla v_s ile bağlantılı büyüme faktörü olarak adlandırılan μ_s özdeğerleri λ_s negatif olduğundan dolayı s 'lere ilşkin modüllerde 1'den daha küçüktür. Böylece Denklem (4.5), uj 'nin, $j\to\infty$ iken sıfır vektörüne yaklaştığını gösterir. Yani denklemler koşulsuz sabittirler. Bununla beraber (4.6) 'ya göre $k\lambda_s=-4r\sin^2 s\pi/2N$ büyük olduğundan (burada $r=k/h^2$ dir) μ_s 'nin -1 'e yakın olacağı görülür. Bu, r değerinin büyük, N ve s değerlerinin her ikisinin de büyük yani s=N-1, N-2, ... olmak üzere $s\pi/2N\cong\pi/2$ olduğunda meydana gelecektir. (4.7) ve (4.5) denklemlerine göre başlangıç değerlerinin yüksek frekanslı, $c_{N-1}v_{N-1}$, $c_{N-2}v_{N-2}$, ..., elemanlarının sırasıyla j. zaman seviyesinde $c_{N-1}\mu^j v_{N-1}$, $c_{N-2}\mu^j v_{N-2}$, ..., dönüştürülmekte olduğu görülür.

Bu elemanlar j artarken işarette değişiklikle birbirini takip edecek ve sadece çok yavaş azalacaktır. Eğer c_{N-1} , c_{N-2} , ... başlangıç ve sınır değerleri arasındaki süreksizlikler var olduğunda meydana gelen yaklaşımlar gibi büyük ise, çözüm süreksizliğe yakın noktalarda sınırlı olarak salınacaktır (Bak. Şekil 4.1).

Bununla birlikte, Lawson ve Morris [8], bu salınan terimlerin daha düşük frekanslı c_1v_1 elemanından daha hızlı sıfıra yaklaşan yüksek frekanslı $c_{N-1}v_{N-1}$ elemanını sağlamasının kötü sonuçlar doğurmayacağını belirtmektedir. Buna göre,

$$|\mu_{N-1}|<|\mu_1|$$

yani

$$-\mu_1<\mu_{N-1}<\mu_1$$

koşuluna göre (4.5) 'ten,

$$\frac{-1-\frac{1}{2}k\lambda_1}{1-\frac{1}{2}k\lambda_1}<\frac{1+\frac{1}{2}k\lambda_{N-1}}{1-\frac{1}{2}k\lambda_{N-1}}<\frac{1+\frac{1}{2}k\lambda_1}{1-\frac{1}{2}k\lambda_1}$$

olarak yazılır. Eşitsizliğin sağ tarafı otomatikman

$$\lambda_s=-(4/h^2)\sin^2 s\pi/2N$$

tarafından sağlanır. Eşitsizliğin sol tarafı,

$$k^2\lambda_1\lambda_{N-1}<4 \qquad (4.8)$$

olduğunu gösterir. Büyük N için,

$$\lambda_1\cong-4\pi^2/4h^2N^2=-\pi^2/X^2$$

ve

$$\lambda_{N-1}\cong-(4/h^2)\sin^2\pi/2=-4/h^2$$

dir. Böylece (4.8) 'e göre, yaklaşık olarak

$$k/h<X/\pi$$

veya

$$k<hX/\pi$$

dir. Şekil (4.1),

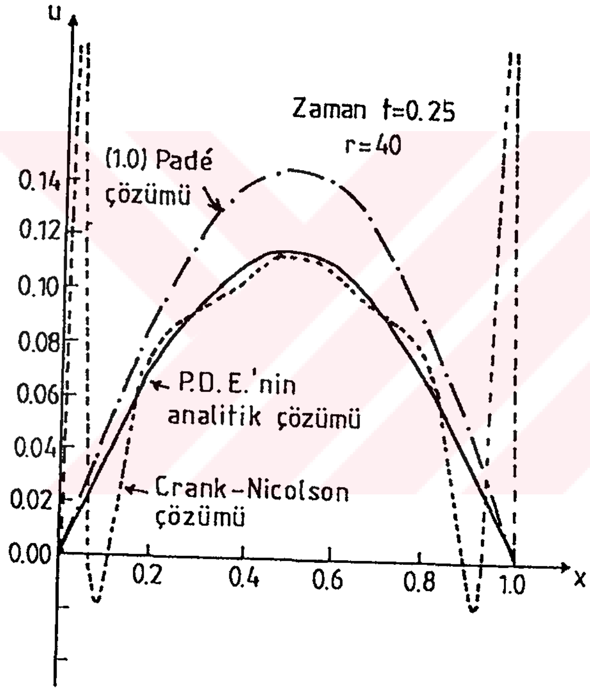
$$U(0,t)=U(1,t)=0 \ , \ t>0$$

ve

$$U(0,x)=1 \ , \ 0\leq x\leq 1 \ , \ t=0$$

eşitliğini sağlayan 0< x<1, t>0 olmak üzere,

$\dfrac{\partial U}{\partial t}=\dfrac{\partial^2 U}{\partial x^2}$ 'nin, Crank–Nicolson ve geri fark veya h=.025 ve r=40 için (1,0) Padé yaklaşımı çözümleri ile birlikte t=.25 'teki analitik çözümü göstermektedir.



Şekil 4.1

4.2 Padé Yaklaşımlarıyla Bağlantılı Yerel Kesme Hataları

(3.4) ile tanımlı kA matrisinin üsteli, (S,T) Padé yaklaşımı tarafından yaklaştırıldığında, (i,j) noktasında

$$\frac{\partial U}{\partial t}-\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}=0$$

bağıntısına yaklaştırılan fark denklemi

$$\frac{1}{k}\left\{u(t_j+k)-R_{S,T}(kA)u(t_j)\right\}=0 \quad , \quad i=1(1)N-1$$

bağıntısının i. satırıdır. Burada,

$$R_{S,T}(kA)=Q_S^{-1}(kA)P_T(kA)$$

dır. Q_S^{-1} 'in singüler olmadığını kabul edersek fark denklemleri

$$\frac{1}{k}\left\{Q_S(kA)u_{j+1}-P_T(kA)u_j\right\}=0 \quad , \quad i=1(1)N-1$$

olarak yazılabilir. O zaman yerel kesme hatası $T_{i,j}(U)$'nun tanımı, i=2(1)N-2 olmak üzere,

$$\frac{1}{k}\left\{Q_S(kA)U_{j+1}-P_T(kA)U_j\right\}$$

bağıntısının $T_{i,j}(U)$=i. satırını verir.

$$\frac{1}{k}\left\{Q_S(kA)U_{j+1}-P_T(kA)U_j\right\}$$

denklemindeki tüm terimler Taylor serisi tarafından yaklaşık (i,j) noktasında açık olarak yazılırsa o zaman, (i,j) 'de yerel kesme hatasının asıl kısmının

$$\left[-\frac{1}{12}h^2\frac{\partial^4 U}{\partial x^4}+C_q k^{q-1}\frac{\partial^q U}{\partial t^q}\right]_{i,j}$$

olduğu gösterilebilir. Burada q=S+T+1 'dir. C_q sabitlerinin bazıları Çizelge 4.1 'de verilmiştir [10].

Çizelge 4.1

(S,T)	q ve r	C_q	E_r
(0,1)	2	$\frac{1}{2}$	$\frac{4}{3}$
(1,1)	3	$-\frac{1}{12}$	$\frac{1}{10}$
(1,0)	2	$-\frac{1}{2}$	$\frac{4}{3}$
(2,0)	3	$\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{3}$
(2,1)	4	$\frac{1}{72}$	$-\frac{8}{945}$
(2,2)	5	$\frac{1}{720}$	$-\frac{1}{1890}$
(1,2)	4	$-\frac{1}{72}$	$-\frac{8}{945}$

$$-\frac{1}{12}h^2\frac{\partial^4 U}{\partial x^4}$$

elemanı,

$$\{u(x-h,t)-2u(x,t)+u(x+h,t)\}/h^2$$

ile

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$$

bağıntısının yaklaşımından ortaya çıkar ve bir Padé yaklaşımı ile exp(kA) yaklaşımları olan her fark tasarısının yerel kesme hatasının asıl bölümünde görünecektir. C_q terimi (S,T) ile tarif edilir.

4.3 Stiff (Yoğun) Denklemler

Yerel kesme hatasının

$$-h^2(\partial^4 U/\partial x^4)/12$$

parçasının büyüklüğü, N arttırılarak azaltılabilir. Çünkü Nh=X 'tir. X sabit bir sayıdır. Bu, A matrisinin s=1(1)N-1 olan $\lambda_s=-(4/h^2)\sin^2 s\pi/2N$ özdeğerlerinin sayısını ve değer kümesini kaçınılmaz bir şekilde arttırır. Bir sonuç olarak, fark denklemlerinin analitik çözümü yani

$$u_j = \sum_{s=1}^{N-1} c_s\left[R_{S,T}(k\lambda_s)\right]^j v_s$$

olarak kabul edilen

$$|R_{S,T}(k\lambda_s)|<1$$

azalması genellikle değişen oranlarla çok sayıda elemanı kapsayabilir. Bu olaya sebep olan denklemlerin *"stiff" (yoğun)* olduğu söylenir. Genelde, eğer A matrisinin özdeğerleri μ_s, v_s reel ve $\mu_s>0$ olmak üzere $\lambda_s=-\mu_s+iv_s$ ise, denklemlerin *yoğun oranı "stiffness ratio"*,

$$\frac{\max \mu_s}{\min \mu_s}$$

olarak hesaplanır. (3.4) tarafından tanımlanan A 'ya karşın büyük N için yoğun oran,

$$\left\{\sin^2(N-1)\pi/2N\right\}/\sin^2\pi/2N \cong 4N^2/\pi^2$$

bağıntısıdır.

4.4 t 'deki Doğruluğu Arttırması için Bir Extrapolasyan Yöntemi

$$U(0,t)=U(X,t)=0 \ , \ t>0$$

sınır koşullarını sağlayan

$$\frac{\partial U}{\partial t}=\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \ , \ 0<x<X \ , \ t>0$$

denklemini göz önüne alalım. Önceden gösterildiği gibi $x_i=ih$, i=1(1)N-1 mesh noktalarında U 'ya yaklaşan V vektör değerleri t ve t+k zaman seviyeleri boyunca

$$V(t+k)=\{\exp(kA)\}V(t)\ ,\quad t=0, k, 2k, \ldots \tag{4.9}$$

eşitliğini sağlar. Eğer, exponansiyel (1,0) Padé yaklaşımı tarafindan yaklaştırılırsa, V 'ye yaklaşan $u=[u_1, u_2, \ldots, u_{N-1}]^T$ değerlerinin vektörü A matrisi (3.4) ile tanımlı olmak üzere,

$$u(t+k)=(I-kA)^{-1}u(t) \tag{4.10}$$

kapalı geri fark denklemlerinin çözümü olacaktır. 2k 'lik zaman aralığı boyunca,

$$u^{(1)}(t+2k)=(I-2kA)^{-1}u(t) \tag{4.11}$$

verir. Ayrıca, (4.10) denkleminin k zaman aralığı üzerine iki kez uygulanması

$$u^{(2)}(t+2k)=(I-kA)^{-1}u(t+k)=(I-kA)^{-1}(I-kA)^{-1}u(t)$$

yani,

$$u^{(2)}(t+2k)=(I-kA)^{-2}u(t) \tag{4.12}$$

eşitliğine götürür. (4.11) ve (4.12) denklemleri, $i=1(1)N-1$ olan $U_i(t+2k)$ 'ye yaklaşımları hesaplayan iki farklı geri fark denklemlerini gösterirler. (4.11) ve (4.12) matris terslerinin binom açılımı

$$u^{(1)}(t+2k)=(I+2kA+4k^2A^2)u(t)+O(k^3) \tag{4.13}$$

ve

$$u^{(2)}(t+2k)=(I+2kA+3k^2A^2)u(t)+O(k^3) \tag{4.14}$$

bağıntılarıyla gösterilir. Bununla birlikte, $U_i(t+2k)$ 'ye yaklaşımı $i=1(1)N-1$ olmak üzere (4.13) veya (4.14) 'ten daha doğru veren bir denklem olan

$$V(t+2k)=\{\exp(2kA)\}V(t)$$

eşitliğinde exp(2kA) 'nın Mac Laurin açılımı

$$V(t+2k)=(I+2kA+2k^2A^2)V(t)+O(k^3) \tag{4.15}$$

olarak meydana gelir. (4.13), (4.14) ve (4.15) denklemleri karşılaştırıldığında, ne (4.13) ne de (4.14), k^2 mertebeli terimlerin doğruluğunu tam olarak göstermez. Bununla birlikte, (4.13) ve (4.14) 'ün basit bir lineer kombinasyonu, en büyük dereceli hata terimi $O(k^3)$ ile t 'de ikinci mertebe doğrulukta bir yaklaşım vektörü $u^{(E)}$ olarak üretilen,

$$\begin{aligned} u^{(E)}(t+2k)&=2u^{(2)}(t+2k)-u^{(1)}(t+2k)\\ &=(I+2kA+2k^2A^2)u(t) \end{aligned}$$

eşitliği olacaktır. Bu yüzden extrapolasyon (dıştan kestirim) için algoritma,

$$(I-2kA)u^{(1)}(t+2k)=u(t) \qquad (4.16)$$

$$(I-kA)^2u^{(2)}(t+2k)=u(t) \qquad (4.17)$$

ve

$$u^{(E)}(t+2k)=2u^{(2)}-u^{(1)} \qquad (4.18)$$

eşitliklerini verir. Şüphesiz extrapolasyon işlemi için yaklaşık çözüm değerleri sonraki iki zaman seviyesinde başlangıç değerleri olarak kullanılır.

4.5 Extrapolasyon Yöntemi için Sembol

Eğer Denklem (4.18),

$$u^{(E)}(t+2k)=S_{1,0}(kA)u(t)=\{2(I-kA)^{-2}-(I-2kA)^{-1}\}u(t)$$

biçiminde yazılırsa o zaman,

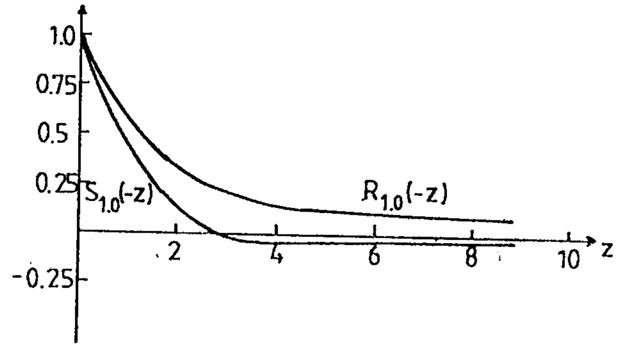
$$S_{1,0}(kA)=2(I-kA)^{-2}-(I-2kA)^{-1}$$

dir. Bu yüzden extrapolasyon yönteminin $S_{1,0}(-z)$ sembolü,

$$S_{1,0}(-z)=\frac{2}{(1+z)^2}-\frac{1}{1+2z}=\frac{1+2z-z^2}{1+4z+5z^2+2z^3}$$

bağıntısıdır.

Şekil 4.2, tüm $z>0$ için $|S_{1,0}(-z)|<1$ olduğunu gösterirken, pay ve paydanın z^2 ile bölümü $z\to\infty$ oldukça $S_{1,0}(-z)\to 0$ olduğunu gösterir. Böylece denklem L_0 sabitlidir. Sembol, $z>1+\sqrt{2}$ için küçük ve negatiftir. Bu da $z=-k\lambda_s>1+\sqrt{2}$ için nümerik çözümde salınımlar veya dalgalanmalar meydana gelebileceğini ima eder. Şüphesiz salınımlar veya dalgalanmalar sonraki hesaplamalarda şiddetli bir şekilde yavaşlayacaktır. Çünkü $S_{1,0}(-z)$, z 'nin bu değerleri için küçüktür [3].



Şekil 4.2

4.6 Extrapolasyon Yönteminin Aritmetiği

$$I-2kA=\begin{bmatrix} (1+4r) & -2r & & & \\ -2r & (1+4r) & -2r & & \\ & & & \ddots & \\ & & & -2r & (1+4r) \end{bmatrix}$$

oldukça, sıfir sınır değerleri ile birlikte (4.16) 'nın

$$\begin{aligned} (1+4r)u^{(1)}_{1,j+2} - 2ru^{1}_{2,j+2} &= u_{1,j} \\ -2ru^{(1)}_{1,j+2} + (1+4r)u^{(1)}_{2,j+2} - 2ru^{(1)}_{3,j+2} &= u_{2,j} \\ \vdots \qquad\qquad \vdots \qquad & \\ -2ru^{(1)}_{N-2,j+2} + (1+4r)u^{(1)}_{N-1,j+2} &= u_{N-1,j} \end{aligned}$$

denklemlerini vermesi izler. Bunlar, Gauss–eliminasyon'daki algoritma ile çözülür. Benzer şekilde Denklem (4.17), iki tridiagonal (üçgensel) sistem gibi işlemden geçirilir. Bu da,

$$(I-kA)u^{(2)}(t+k)=u(t) \tag{4.19}$$

ve

$$(I-kA)u^{(2)}(t+2k)=u^{(2)}(t+k) \tag{4.20}$$

olur. Burada (4.19) için denklemler,

$$\begin{aligned}
(1+2r)u^{(2)}_{1,j+1} - ru^{(2)}_{2,j+1} &= u_{1,j} \\
-ru^{(2)}_{1,j+1} + (1+2r)u^{(2)}_{2,j+1} - ru^{(2)}_{3,j+1} &= u_{2,j} \\
\\
-ru^{(2)}_{N-2,j+1} + (1+2r)u^{(2)}_{N-1,j+1} \qquad &= u_{N-1,j+1}
\end{aligned}$$

eşitlikleridir. (4.20) için de benzer şekildedir. Ayrıca, Denklem (4.17)

$$(I-2kA+k^2A^2)u^{(2)}(t+2k)=u(t) \tag{4.21}$$

olarak yazılır. Burada,

$$I-2kA+k^2A^2=I-2r$$

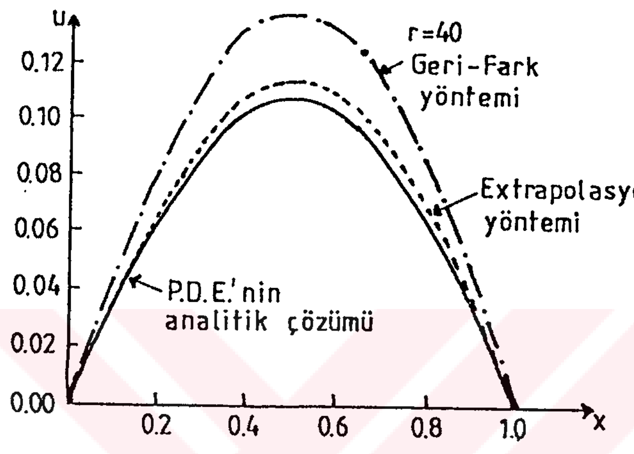
$$\begin{bmatrix}
-2 & 1 & & & & \\
1 & -2 & 1 & & & \\
 & 1 & -2 & 1 & & \\
 & & & & \ddots & \\
 & & & & 1 & -2
\end{bmatrix}
+ r^2
\begin{bmatrix}
5 & -4 & 1 & & & & & & \\
-4 & 6 & -4 & 1 & & & & & \\
1 & -4 & 6 & -4 & & 1 & & & \\
 & 1 & -4 & 6 & & -4 & 1 & & \\
 & & & & \ddots & & & & \\
 & & & & 1 & & -4 & 6 & -4 \\
 & & & & & & 1 & -4 & 5
\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}
(1+4r+5r^2) & (-2r-4r^2) & r^2 & & & \\
(-2r-4r^2) & (1+4r+6r^2) & (-2r-4r^2) & r^2 & & \\
r^2 & (-2r-4r^2) & (1+4r+6r^2) & (-2r-4r^2) & r^2 & \\
 & r^2 & (-2r-4r^2) & (1+4r+6r^2) & (-2r-4r^2) & r^2 \\
 & & & \ddots & & \\
 & & r^2 & (-2r-4r^2) & (1+4r+6r^2) & (-2r-4r^2) \\
 & & & r^2 & (-2r-4r^2) & (1+4r+5r^2)
\end{bmatrix}$$

O zaman Denklem (4.21), bir guindiagonal çözücü denen $u^{(2)}(t+2k)$ 'nin elemanları için doğrudan çözülür. $U(0,t)=U(1,t)=0$, $t>0$ ve $U(x,0)=1$, $0\le x\le 1$ olan

$$\frac{\partial U}{\partial t}=\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \;,\; 0<x<1 \;,\; t>0$$

bağıntısının ısı transferi problemi için Şekil 4.3 'te, Denklem (4.10) olan geri fark yöntemi ile t=0.25 te çözümlerin grafiklerini ve h=k=0.025 ve r=40 olarak alınan Denklem (4.18) olan extrapolasyon yöntemini göstermektedir. x=0.5 'te maksimum hatalar .0324 (geri fark) ve .0061 (extrapolasyon) 'dir [3].



Şekil 4.3

4.7 Ek Açıklamalar

Eğer, klasik kapalı olmayan yöntem extrapole edilirse, $0<r\leq 1/4$ için $|S_{0,1}(-z)|\leq 1$ olduğu kolaylıkla gösterilir. Bilhassa başlangıç değerleri veya başlangıç ve sınır değerleri arasında süreksizlikler mevcutsa koşullu sabit ve A_0 sabitli yöntemlerin extrapolasyonunda genelde az avantaj vardır.

Tahmin edilebileceği gibi, t 'de üçüncü ve dördüncüde doğru olan L_0 sabitli fark yöntemleri sırasıyla üç veya dört zaman seviyeleri üzerine extrapolasyon tarafından meydana getirilir ve böyle iki denklem Gourlay ve Morris'de [7] göz önüne alınır. (2,0), (2,1), (2,2) ve (3,0) Padé yaklaşımlarının extrapolasyonu [9] ve [10] numaralı kaynaklarda verilmiştir.

4.8 Extrapolasyon Denklemlerinin Lokal Kesme Hataları Ve Genişletme Sembolleri

Genelde, (S,T) Padé yaklaşımı için extrapolasyon formülü,

$$u^{(E)}(t+2k)=\alpha u^{(2)}-(\alpha-1)u^{(1)}$$

bağıntısıdır. Burada

$\alpha=2^{S+T}/(2^{S+T}-1)$

olur. (i,j) 'de extrapolasyon denkleminin lokal kesme hatasının asıl bölümü

$$\left[\frac{-1}{12}h^2\frac{\partial^4 U}{\partial x^4}+E_r k^{r-1}\frac{\partial^r U}{\partial t^r}\right]_{i,j} \quad , \quad i=2(1)N-2$$

bağıntısıdır. Burada r=S+T+2 'dir. E_r sabitlerinin bir kısmı Çizelge 4.1 'de verilmiştir. (S,T) Padé yaklaşımı ile bağlantılı tahmini yönteminin genişletme sembolü,

$$S_{S,T}(-z)=\alpha[R_{S,T}(-z)]^2-(\alpha-1)R_{S,T}(-2z)$$

olur.

Bir örnek olarak, $\exp\theta$ için (2,0) Padé yaklaşımını yani

$$R_{2,0}(\theta)=1/(1-\theta+\frac{1}{2}\theta^2)$$

eşitliğini göz önüne alalım. Bunun için,

$$\alpha=2^2/(2^2-1)=4/3,\ u^{(E)}=\frac{4}{3}u^{(2)}-\frac{1}{3}u^{(1)}$$

ve

$$r=4$$

olur. Lokal kesme hatasının asıl bölümü

$$\left[-\frac{1}{12}h^2\frac{\partial^4 U}{\partial k^4}-\frac{1}{3}k^3\frac{\partial^4 U}{\partial t^4}\right]_{i,j}$$

ve

$$S_{2,0}(-z)=\frac{4}{3(1+z+\frac{1}{2}z^2)}-\frac{1}{3(1+2z+2z^2)}$$

olur. Bu da L_0 kararlılığını verdiğini kolaylıkla gösterir.

4.9 O.D.E. 'nin Bir Sisteminin Özdeğer–Özvektör Çözümü İlk Sonuçlar

(i) Eğer N mertebeli A matrisi i=1(1)N olmak üzere N lineer bağımsız özvektör x_i ' ye N farklı özdeğer λ_i 'ye karşılık gelirse o zaman,

$$Ax_i = \lambda_i x_i \ , \quad i=1(1)N$$

N denklemleri

$$A[x_1, x_2, \ldots, x_N] = [Ax_1, Ax_2, \ldots, Ax_N]$$

$$=[\lambda_1 x_1, \lambda_2 x_2, \ldots, \lambda_N x_N]$$

$$=[x_1, x_2, \ldots, x_N]\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_N \end{bmatrix}$$

olarak matris formunda yazılabilir. Sık sık *modal matris* olarak adlandırılan

$$[x_1, x_2, \ldots, x_N] = X$$

özvektörlerinin ve

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \lambda_N \end{bmatrix} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_N) = D$$

bağıntısının matrisini koyarsak, özdeğer–özvektör denklemleri $AX=XD$ olarak ifade edilebilir. Böylece,

$$X^{-1}AX = D \tag{4.22}$$

olur.

(ii) (4.22) denklemine göre,

$$(X^{-1}AX)^2 = (X^{-1}AX)\,(X^{-1}AX) = X^{-1}A^2X = D^2$$

$$= \mathrm{diag}(\lambda_1^2, \lambda_2^2, \cdots, \lambda_N^2)$$

olur. Benzer düşünceyle,

$$X^{-1}A^{m}X=D^{m}=\mathrm{diag}(\lambda_1^{m},\lambda_2^{m},\cdots,\lambda_N^{m})$$

dir.

(iii) expA 'nın tanımına göre,

$$X^{-1}(\exp A)X=X^{-1}\left[I_N+A+\frac{1}{2!}A^2+\cdots\right]X$$

$$=I_N+D+\frac{1}{2!}D^2+\cdots$$

yani,

$$X^{-1}(\exp A)X=\exp D$$

olur.

(iv) Kolaylık için 2x2 matrislerini kullanarak, t bir skaler olmak üzere exp(tD) 'nin tanımı,

$$\exp(tD)=I_2+tD+\frac{1}{2!}(tD)^2+\cdots+\frac{1}{m!}(tD)^m+\cdots$$

$$=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}t\lambda_1 & 0\\ 0 & t\lambda_2\end{bmatrix}+\frac{1}{m!}\begin{bmatrix}t^m\lambda_1^m & 0\\ 0 & t^m\lambda_2^m\end{bmatrix}+\cdots$$

$$=\begin{bmatrix}(1+t\lambda_1+\cdots+\frac{1}{m}t^m\lambda_1^m+\cdots) & \\ & (1+t\lambda_2+\cdots+\frac{1}{m!}t^m\lambda_2^m+\cdots)\end{bmatrix}$$

yani,

$$\exp(tD)=\begin{bmatrix}\exp(t\lambda_1) & 0\\ 0 & \exp(t\lambda_2)\end{bmatrix} \qquad (4.23)$$

olur.

4.10 $\frac{dV}{dt} = AV$ 'nin Özdeğer–Özvektör Çözümü

Önceden gösterildiği gibi, A, t 'den bağımsız olmak üzere, $\frac{dV}{dt} = AV$ 'nin çözümü,

$$V(t)=\{\exp(tA)\}V(0) \tag{4.24}$$

olur. N-1 mertebeli kabul etmek koşuluyla X, A 'nın modal matrisi olmak üzere

$$V(t)=XY(t) \tag{4.25}$$

koyarız. O zaman (4.24) ve (4.25) denklemlerine göre,

$$XY(t)=\{\exp(tA)\}V(0)=\{\exp(tA)\}XY(0)$$

dır. Böylece (iii) ve (iv) 'e göre Y(t) 'nin s 'inci elemanı $Y_s(t)$ 'nin

$$Y_s(t)=\{\exp(t\lambda_S)\}Y_s(0)$$

olduğu sonucunu çıkararak

$$Y(t)=X^{-1}\{\exp(tA)\}XY(0)$$

$$=\{\exp(tD)\}Y(0)$$

$$=\begin{bmatrix} \exp(t\lambda_1) & & & \\ & \exp(t\lambda_2) & & \\ & & \ddots & \\ & & & \exp(t\lambda_{N-1}) \end{bmatrix} Y(0)$$

olur. Bu yüzden Denklem (4.25)

$$\begin{bmatrix} V_1(t) \\ V_2(t) \\ \vdots \\ V_{N-1}(t) \end{bmatrix} = X \begin{bmatrix} Y_1(0)\exp(t\lambda_1) \\ Y_2(0)\exp(t\lambda_2) \\ \vdots \\ Y_{N-1}(0)\exp(t\lambda_{N-1}) \end{bmatrix} \tag{4.26}$$

çözümünü verir. Burada XY(0)=V(0) 'dır. Bilinen özvektörler için yani yukarıdakilerin ikincisi Gauss-eliminasyon tarafından Y(0) 'ın elemanları için çözülebilir.

5. DİFÜZYON VE REAKSİYON-DİFÜZYON DENKLEMLERİ İÇİN NÜMERİK YÖNTEMLERİN BİR AİLESİ

İkinci mertebe parabolik kısmi diferansiyel denklemlerin nümerik çözümü için yöntemlerin bir ailesi geliştirilmiştir. Yöntemler, zaman bakımından ikinci, üçüncü veya dördüncü mertebede doğrudur. Bu yöntemlerin beşi Gourlay ve Morris'e göre L_0 sabitli, diğer taraftan altıncısı A_0 sabitli olarak görünür. Yöntemler, üçü difüzyon ve biri reaksiyon difüzyon problemi olmak üzere literatürden dört problem üzerinde test edilir.

5.1 Yöntemlerin Türetilmesi

5.1.1 Giriş

Son yıllarda, bir takım yazarlar, Lawson ve Swayne [11], Lawson ve Morris [8], ve Gourlay ve Morris [7] sabit katsayılı ikinci mertebe parabolik diferansiyel denklemlerin nümerik çözümü için yöntemlerin A_0 ve L_0 sabitli geliştirilmesiyle ilgilenmişlerdir. Bu makalelerdeki yöntemlerin düzeni sadece lineer denklemler için yapılabilir, fakat Cash [12], çok aşamalı Runge-Kutta formülleri gibi [7] ve [8] 'deki yöntemlerin açıklanmasıyla lineer olmayan denklemler için de aynı mertebelerin uygulanabildiğini gösterdiler.

[8] ve [7] 'de izlenen işlem öyle bir işlemdi ki kısmî türev yerine uygun bir sonlu fark konulmasıyla tahmin edilir ve nümerik çözüm birinci mertebe adi diferansiyel denklemlerin sonuç sistemiyle elde edilir.

[13] 'de

$$Dy(t)=f(t,y);\ y(t_0)=g \tag{5.1}$$

birinci mertebe başlangıç değer probleminin nümerik çözümü için çok aşamalı türev yöntemlerinin bir ailesini geliştirdiler. Burada y ve f çoğunlukla yeter derecede türevlenebilir ve D, t 'ye göre diferansiyel bulmayı gösterir. [13] 'te çıkarılan yöntemlerin ailesi

$$y(t+k)=R(kD)y(t) \tag{5.2}$$

bağıntısına dayandırılmıştır. Burada k, t 'de (bir zaman adımı) bir nicelik farkı ve R(kD), üstel fonksiyon exp(kD) için bir rasyonel yaklaşımdır. Çok aşamalı türev yöntemleri (5.1) biçiminin tek bir problemi için geliştirilmiştir, fakat böyle başlangıç değer problemlerinin bir sisteme genişlemesi kolaylıkla olur ve bu yüzden yöntemler lineer olmayan parabolik kısmî diferansiyel denklemler için uygulanabilir.

$$\frac{\partial u}{\partial t}=v\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\Phi(u)\ ; \qquad X_0\le x\le X_1\ ,\ t>0\ ,\ v>0 \tag{5.3}$$

ikinci mertebe kısmî diferansiyel denklemini göz önüne alalım. Öyle ki içinde

$$u=u(x,t) \quad \text{ve} \quad u(X_0,t)=w_0\,,\ u(X_1,t)=w_1\ ,\ t>0 \tag{5.4}$$

sınır koşulları ve

$$u(x,0)=g(x),\ X_0 \le x \le X_1 \tag{5.5}$$

başlangıç koşulları ile birlikte reaksiyon-difüzyon problemlerinde ortaya çıkar. (5.3) 'te, v 'nin bir sabit ve ϕ 'nin, (5.3) 'ün (5.4) ve (5.5) ile birlikte tek bir çözüme sahip olduğunu garantileyen yeter derecede düzgün u 'nun bir fonksiyonu olduğunu kabul edelim. (5.5) 'te g(x) fonksiyonu sürekli olarak kabul edilir, fakat $w_0=g(X_0)$, $w_1=g(X_1)$ 'in eşit olduğu kabul edilmez, öyle ki sınır ve başlangıç koşulları arasında süreksiz olduğu kabul edilir.

$X_0 \le x \le X_1$ aralığının, $(N+1)h=X_1-X_0$ gibi her biri h genişliğinde N+1 alt aralığa bölündüğünü ve t 'ninde k uzunluğunun adımlarına ayrıştığını kabul edelim. $\Omega=[X_0<x<X_1]\times[t>0]$ açık bölgesi ve onun $x=X_0$, $x=X_1$ ve t=0 doğrularından ibaret olan $\partial\Omega$ sınırı dikdörtgen mesh ile kaplanmaktadır. Mesh noktaları m=0, 1, ..., N+1 ve n=0, 1, 2, ... ile (mh, nk) koordinatlarına sahiptir.

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} = h^{-2}\left[u(x-h,t)-2u(x,t)+u(x+h,t)\right]+O(h^2) \tag{5.6}$$

standart tahminini yaparak ve (5.1) 'i, (5.4) ve (5.6) ile birlikte n zaman seviyesinde (m=1, 2, ..., N; n=0, 1, 2, ...) (mh, nk) kesikli noktalarının her birine uygulayarak denklem (5.3)

$$\frac{dU}{dt} = f(t,U) = AU + b + \phi \tag{5.7}$$

birinci mertebe başlangıç değer problemine dönüşür. (5.7) 'de,

$$U=U(t)=U(nk)=U^n$$

N mertebeli bir vektördür. Bu mertebenin elemanları

$$u_m^n \equiv u(mh,\ nk)$$

için sonlu fark yaklaşımlarıdır.

$$b=vh^{-2}(w_0, 0, \ldots, 0, w_1)^T$$

(5.4) 'te verilen sınır koşullarının vektörüdür.

$$\phi^n=\mathrm{diag}[\,\phi(U_m^n)]e$$

dir. Burada, $e=(1, 1, \ldots, 1)^T$, N mertebeli birim vektördür ve A

$$A = vh^{-2}\begin{bmatrix} -2 & 1 & & & & 0 \\ 1 & -2 & 1 & & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & & 1 & -2 & 1 \\ 0 & & & & & 1 & -2 \end{bmatrix} \qquad (5.8)$$

(5.8) ile verilen N mertebeli kare matristir. v 'nin değişken olduğu duruma ulaşmak anında gerçekleşir. (5.8) 'de A matrisinin şartını sağlayan değerler, v >0 'dan tüm s=1, 2, ..., N için λ_S <0 olacak şekilde

$$\lambda_S = -4vh^{-2}\sin^2[\, s\pi/2(N+1)\,]\ ,\ s=1, 2, \ldots, N \qquad (5.9)$$

dur.

5.1.2 İkinci Mertebe Yöntem ve Onun Extrapolasyonları

[13] 'te geliştirilen ve analiz edilen çok aşamalı türev yöntemlerinin ailesinin üyelerinden biri, (5.2) 'de (2,0) Padé yaklaşımının kullanımına dayandırılan öğedir. Bu, t=0, k, 2k, ... için

$$\left(1 - kD + \frac{1}{2}k^2D^2\right)y(t+k) = y(t) \quad ; \quad y(t_0)=g \qquad (5.10)$$

verir. Yöntem zaman bakımından ikinci mertebede doğrudur. (5.7), yani (5.3) 'e göre denklem (5.10) birinci yöntem olur ve TK1 ile gösterilir.

$$\text{TK1:}\left(I - k\overline{D} + \frac{1}{2}k^2\overline{D}^2\right)U(t+k) = U(t) \ ; \ U(0)=g \qquad (5.11)$$

ile verilir. Burada, $\overline{D}$=diag(D) bir diagonal matristir; bu, tamamıyla lineer olmayan cebrik sistemin çözümüyle bulunan U^{n+1} çözüm vektörü olacak şekilde,

$$\left(I - kA + \frac{1}{2}k^2A^2\right)U^{n+1} - k\left(I - \frac{1}{2}kA - \frac{1}{2}k\overline{D}\right)\phi^{n+1} = U^n + k\left(I - \frac{1}{2}kA\right)b \qquad (5.12)$$

yi verir. ϕ^{n+1} 'nin önündeki katsayı [12] 'den bulunur.

$$\left(I - k\overline{D} + \frac{1}{2}k^2\overline{D}^2\right)U^* = U(t) \quad ,$$

$$\left(I - k\overline{D} + \frac{1}{2}k^2\overline{D}^2\right)U^{(1)}(t+2k) = U^* \;;$$

$$\left(I - 2k\overline{D} + 2k^2\overline{D}^2\right)U^{(2)}(t+2k) = U(t)$$

iki aşamalı bu işlemle elde edilen (5.11) 'in ekstrapolasyonu u(t+2k) 'ye üçüncü mertebe bir yaklaşım vermek üzere [13] 'te gösterilmiş olan

$$\text{TK2}: U^{(E)}(t+2k) = \frac{4}{3}U^{(1)} - \frac{1}{3}U^{(2)} \tag{5.13}$$

dür. Ayrıca, $V^{(E)}(t+3k)$ 'nin,

$$\left(I - k\overline{D} + \frac{1}{2}k^2\overline{D}^2\right)V^* = U(t),$$

$$\left(I - k\overline{D} + \frac{1}{2}k^2\overline{D}^2\right)V^+ = V^*,$$

$$\left(I - k\overline{D} + \frac{1}{2}k^2\overline{D}^2\right)V^{(1)}(t+3k) = V^+;$$

$$\left(I - 2k\overline{D} + 2k^2\overline{D}^2\right)V^{(2)}(t+3k) = V^*;$$

$$\left(I - 3k\overline{D} + \frac{9}{2}k^2\overline{D}^2\right)V^{(3)}(t+3k) = U(t);$$

üç aşama algoritma ile [12] 'den elde edilmiştir.

$$\text{TK3}: V^{(E)}(t+3k) = \frac{45}{22}V^{(1)} - \frac{27}{22}V^{(2)} + \frac{2}{11}V^{(3)} \tag{5.14}$$

u(t+3k) 'ye dördüncü mertebe bir yaklaşımdır.

Cash [12], 3 ve 4 mertebeli çok aşamalı yöntemlerin hiç de önemsiz olmadığını belirtir.

5.1.3 Üçüncü Mertebe Yöntem ve Onun Ekstrapolasyonu

[13] 'te geliştirilen ve analiz edilen katlı türev yöntemler ailesinin diğer üyesi exp(kD) için (2,1) Padé yaklaşımına dayandırılır. (5.7) 'ye uygulandığında bu, t=0, k, 2k, ... ile

$$\text{TK4:}\left(I-\frac{2}{3}k\overline{D}+\frac{1}{6}k^2\overline{D}^2\right)U(t+k)=\left(I+\frac{1}{3}k\overline{D}\right)U(t) \qquad U(0)=g, \tag{5.15}$$

verir. Bu da,

$$\left(I-\frac{2}{3}kA+\frac{1}{6}k^2A^2\right)U^{n+1}-\frac{2}{3}k\left(I-\frac{1}{4}kA-\frac{1}{4}k\overline{D}\right)\phi^{n+1}$$

$$=\left(I+\frac{1}{3}kA\right)U^{n}+\frac{1}{3}k\phi^{n}+k\left(I-\frac{1}{6}kA\right)b \tag{5.16}$$

sonucunu gösterir (burada ϕ^n ve ϕ^{n+1} çarpanları [12] 'den bulunur). Bu yöntem zamanında üçüncü mertebe de doğrudur ve U^{n+1} çözüm vektörü, lineer olmayan cebrik sistemin çözümüyle tamamıyla belirlenir.

(5.15) 'in ekstrapolasyonu,

$$\left(I-\frac{2}{3}k\overline{D}+\frac{1}{6}k^2\overline{D}^2\right)W^{*}=\left(I+\frac{1}{3}k\overline{D}\right)U(t),$$

$$\left(I-\frac{2}{3}k\overline{D}+\frac{1}{6}k^2\overline{D}^2\right)W^{(1)}(t+2k)=\left(I+\frac{1}{3}k\overline{D}\right)W^{*},$$

$$\left(I-\frac{4}{3}k\overline{D}+\frac{2}{3}k^2\overline{D}^2\right)W^{(2)}(t+2k)=\left(I+\frac{2}{3}k\overline{D}\right)U(t),$$

iki aşama işlemiyle, u(t+2k) için $W^{(E)}(t+2k)$ dördüncü mertebe yaklaşımı olan

$$\text{TK5: } W^{(E)}(t+2k)=\frac{8}{7}W^{(1)}-\frac{1}{7}W^{(2)} \tag{5.17}$$

yi verir.

5.1.4 Dördüncü Mertebe Yöntem

[13] 'teki, exp(kD) için (2,2) Padé yaklaşımına dayandırılan katlı türev yöntemler ailesinin üçüncü bir üyesidir. Başlangıç değer problemi (5.7) 'ye uygulandığında bu, t=0, k, 2k, ... ile,

$$\text{TK6: } \left(I-\frac{1}{2}k\overline{D}+\frac{1}{12}k^2\overline{D}^2\right)U(t+k)=\left(I+\frac{1}{2}k\overline{D}+\frac{1}{12}k^2\overline{D}^2\right)U(t)\ ,\ U(0)=g \qquad (5.18)$$

kesin denklemini verir. Bu da,

$$\left(I-\frac{1}{2}kA+\frac{1}{12}k^2A^2\right)U^{n+1}-\frac{1}{2}k\left(I-\frac{1}{6}kA-\frac{1}{6}k\overline{D}\right)\phi^{n+1}$$

$$=\left(I+\frac{1}{2}kA+\frac{1}{12}k^2A^2\right)U^{n}+\frac{1}{2}k\left(I+\frac{1}{6}kA+\frac{1}{6}k\overline{D}\right)\phi^{n}+kb \qquad (5.19)$$

sonucunu gösterir. ϕ^n ve ϕ^{n+1} çarpanları [12] 'den bulunur.

Bu yöntem zamanında dördüncü mertebe de doğrudur ve U^{n+1} çözüm vektörü Newton-Raphson yöntemi gibi lineer olmayan bir çözücü kullanarak (5.19) çözümüyle elde edilir [14].

6. SONUÇ

Bilindiği gibi, kısmî diferansiyel denklemler, mühendislik ve bilimsel problemleri en sıkça temsil eden matematiksel formüllerdir. Diğer yandan bir uygulamalı problem için kısmî diferansiyel denklemi oluşturmak ne kadar kolaysa, bu probleme çözüm bulmakta o denli karmaşık bir işlem olabilir. Bu sonuç oldukça genel ve zayıf bir sonuç olmasına rağmen, bazı durumlarda kısmî diferansiyel denklemlerin çözümünü bulmak oldukça kolay olabilir. Fakat, gerçek bilimsel problemlerde veya mühendislik problemlerinde problem sayısı oldukça çoktur ve bunların büyük bir kısmıda lineer olmayan problemlerdir. Bu problemlerin büyük çoğunluğunun analitik çözümü olmadığı için nümerik olarak çözülmesi gerekir.

Pratikte, kısmî diferansiyel denklemler için çok çeşitli yöntemler olmasına rağmen, çeşitli model problemlerde açığa çıkan yakınsama ve kararlılık sorunları bu problemler için farklı yaklaşımlar doğurmuştur. Bunun yanında kısmî diferansiyel denklemler için oluşturulan bilgisayar programı kütüphaneleride yeterli değildir.

İşte doğrular yöntemi (=*method of lines*) bu aşamada devreye girmektedir. Çünkü adi diferansiyel denklemler, kısmî diferansiyel denklemlere nazaran çözümleri teorik olarak daha oturmuş bir alanı oluşturmaktadır. Bunun yanında adi diferansiyel denklemlerin bilgisayar programı kütüphaneleri oldukça gelişmiş durumdadır.

Ayrıca, doğrular yöntemi bütün (eliptik, parabolik, hiperbolik) denklemlere kolayca adapte edilebildiğinden, diğer çözüm sınıfları arasında önemli bir yere sahip olmaktadır.

7. EKLER

EK A. Tridiagonal Matrisin Özdeğerleri

$$A=\begin{bmatrix} a & b & & & \\ c & a & b & & \\ & c & a & b & \\ & & & & \\ & & & c & a \end{bmatrix}$$

N mertebeli kare matris olsun. Burada a, b ve c reel veya kompleks sayılar olabilir.

λ, A 'nın özdeğerini ve v, v_1, v_2, ..., v_N elemanlarıyla göz önüne alınan özvektörü göstersin. O zaman özdeğer denklemi $Av=\lambda v$ olan

$$(a-\lambda)v_1+bv_2=0$$

$$cv_1+(a-\lambda)v_2+bv_3=0$$

$$cv_{j-1}+(a-\lambda)v_j+bv_{j+1}=0$$

ve

$$cv_{N-1}+(a-\lambda)v_N=0$$

ı verir.

Eğer, $v_0=v_{N+1}=0$ olarak tanımlarsak bu N denklem

$$cv_{j-1}+(a-\lambda)v_j+bv_{j+1}=0 \ , \ j=1(1)N \tag{A.1}$$

tek fark denklemine dönüştürülür. (A.1) 'in çözümü

$$v_j = Bm_1^j + Cm_2^j \tag{A.2}$$

dir [3]. Burada B ve C keyfi sabitler ve m_1, m_2

$$c+(a-\lambda)m+bm^2=0 \tag{A.3}$$

denkleminin kökleridir. (A.2) denklemine göre,

$v_0=v_{N+1}=0$

an,

$$0=B+C$$

ve

$$0 = Bm_1^{N+1} + Cm_2^{N+1}$$

dir.Böylece,

$$\left(\frac{m_1}{m_2}\right)^{N+1} = 1 = e^{i2s\pi} \quad , \quad s=1(1)N$$

dir. Burada, $i=\sqrt{-1}$ 'dir. Bu yüzden,

$$\frac{m_1}{m_2} = e^{\frac{i2s\pi}{N+1}} \tag{A.4}$$

dür. (A.3) denklemine göre,

$$m_1 m_2 = \frac{c}{b} \tag{A.5}$$

dir. (A.4) ve (A.5) 'ten m_2 'nin eliminasyonu

$$m_1 = \left(\frac{c}{b}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{is\pi}{N+1}} \tag{A.6}$$

dır. Benzer şekilde,

$$m_2 = \left(\frac{c}{b}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{is\pi}{N+1}} \tag{A.7}$$

olur. (A.3) denklemine göre,

$$m_1+m_2=(\lambda-a)/b \tag{A.8}$$

dir. Bu da,

$$\lambda = a + b\left(\frac{c}{b}\right)^{\frac{1}{2}}\left(e^{\frac{is\pi}{(N+1)}} + e^{\frac{-is\pi}{(N+1)}}\right) \tag{A.9}$$

denklemini verir.

EK B. CRANK-NICOLSON AÇIK (*EXPLICIT*) YÖNTEMİNİN BİLGİSAYAR PROGRAMI

```
5 CLS
10 DIM U(20,20),X(20)
20 INPUT K,H
30 R=K/H^2
40 X$="#.# # # # ": I=0
50 FOR J=0 TO 10
60 U(J, I)=0
70 NEXT J: J=0
80 FOR I=1 TO 11
90 X(I)=X(I-1)+H
100 IF X(I-1) >=0 AND X(I-1)<=0.5 THEN U(J, I-1)=2*X(I-1): LPRINT
        TAB(I*7) USING X$; U(J, I-1);
110 IF X(I-1) > 0.5 AND X(I-1)<=1 THEN U(J, I-1)=2*(1-(X(I-1)): LPRINT
        TAB(I*7) USING X$; U(J, I-1);
120 NEXT I
130 FOR J=0 TO 9
140 FOR I=1 TO 5
150 U(J+1, I)=0.1*U(J, I-1) +0.8*U(J, I)+0.1*U(J, I+1)
160 NEXT I: NEXT J
170 FOR J=0 TO 9: LOCATE J+2, 7: LPRINT USING X$; U(J,0);
180 FOR I=1 TO 5
190 LOCATE J+3, 7: LPRINT USING X$; U(J,0);: LOCATE  J+3,
        (I+1)*7: LPRINT USING X$;U(J+1, I);
200 NEXT I: NEXT J
210 FOR J=1 TO 10
220 FOR I=1 TO 4
230 U(J, 5+I)=U(J, 5-I)
240 NEXT I, J
250 FOR J=0 TO 9
260 FOR I=6 TO 9
270 LOCATE J+3, (I+1)*7: LPRINT USING X$; U(J+1, I);
280 NEXT I: NEXT J
```

KAYNAKÇA

[1] Ames, W. F., Nonlinear Partial Differential Equations in Engineering, Academic Press, New York, 1965.

[2] Şenel, M., Nümerik Analiz, Anadolu Üniversitesi, Eskişehir, 1983.

[3] Smith, G.D., Numerical Solution of Partial Differential Equations, Oxford University Press, New York Toronto, 1985.

[4] Zachmanoglou, E.C. and Dale W. Thoe, Introduction to Partial Differential Equations with Applications, New York, 1986

[5] Richtmyer, R.D. and Morton, K.W., Difference Methods for Initial-Value Problems, Interscience Publishers, New York, (1967).

[6] Crank, J. and Nicolson, P., "A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differantial equations of the heat conduction type", *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 43, (1947) 50-67.

[7] Gourlay, A.R. and Morris, J.Ll., "The extrapolation of first order methods for parabolic differential equations", *II. Sıam J. Num. Anal.*, 17, (1980) 641-655.

[8] Lawson, J.D. and Morris, J.Ll., "The extrapolation of first order methods for parabolic differential equations", *I. Sıam J. Num. Anal.*, 15, (1978) 1212-12224.

[9] Twizell, E.H. and Khaliq, A.Q.M., "L_0-stable methods for parabolic partial differential equations", Brunel University, Department of Mathematics, Technical Report TR/02/82, England, (1982).

[10] Khaliq, A.Q.M., Numerical methods for ordinary differential equations with applications to partial differential equations, Ph.D. Thesis, Brunel University, (1983).

[11] Lawson J.D. and Swayne D., A simple efficient algorithm for the solution of heat conduction problems, in Proceedings Sixth Manitoba Conference on Numerical Mathematics, (1976) 239-250.

[12] Cash, J.R., "Two new finite difference schemes for parabolic equations", *Sınum*, 21, (1984) 433-446.

[13] Twizell E.H. and Khaliq A.Q.M., "One-step multiderivative methods for first order ordinary differential equations", *Bıt.*, 21, (1981) 518-527.

[14] Twizell E.H. and Khaliq A.Q.M., "A family of numerical methods for diffusion and reaction-diffusion equations", *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 2, (1986) 31-45.