x, y, z yönlerinde ısı aktarımı kondüksiyonla olmaktadır.

1) x yönünde enerjinin giriş hızı (ABCD) yüzeyi : $-k\frac{\partial T}{\partial x}dydz\Big|_x$

2) x yönünde enerjinin çıkış hızı (EFGH) yüzeyi : $-k\frac{\partial T}{\partial x}dydz\Big|_{x+dx}$

$$= -k\frac{\partial T}{\partial x}dydz\Big|_x + \frac{\partial}{\partial x}\left(-k\frac{\partial T}{\partial x}dydz\right)dx$$

3) y yönünde enerjinin giriş hızı (AEHD) yüzeyi : $-k\frac{\partial T}{\partial y}dxdz\Big|_y$

4) y yönünde enerjinin çıkış hızı (BFGC) yüzeyi : $-k\frac{\partial T}{\partial y}dxdz\Big|_{y+dy}$

$$= -k\frac{\partial T}{\partial y}dxdz\Big|_y + \frac{\partial}{\partial y}\left(-k\frac{\partial T}{\partial y}dxdz\right)dy$$

5) z yönünde enerjinin giriş hızı (AEFB) yüzeyi : $-k\frac{\partial T}{\partial z}dxdy\Big|_z$

6) z yönünde enerjinin çıkış hızı (DHGC) yüzeyi : $-k\frac{\partial T}{\partial z}dxdy\Big|_{z+dz}$

$$= -k\frac{\partial T}{\partial z}dxdy\Big|_z + \frac{\partial}{\partial z}\left(-k\frac{\partial T}{\partial z}dxdy\right)dz$$

Enerjinin birikim hızı : $\frac{\partial(\rho C_p T dxdydz)}{\partial t} = \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t}dxdydz$

Tüm terimler enerji denkliğinde yerine yazılırsa;

$$-k\frac{\partial T}{\partial x}dydz\bigg|_x - \left(-k\frac{\partial T}{\partial x}dydz\bigg|_x + \frac{\partial}{\partial x}\left(-k\frac{\partial T}{\partial x}dydz\right)dx\right)$$

$$-k\frac{\partial T}{\partial y}dxdz\bigg|_y - \left(-k\frac{\partial T}{\partial y}dxdz\bigg|_y + \frac{\partial}{\partial y}\left(-k\frac{\partial T}{\partial y}dxdz\right)dy\right)$$

$$-k\frac{\partial T}{\partial z}dxdy\bigg|_z - \left(-k\frac{\partial T}{\partial z}dxdy\bigg|_z + \frac{\partial}{\partial z}\left(-k\frac{\partial T}{\partial z}dxdy\right)dz\right) = \rho C_p\frac{\partial T}{\partial t}dxdydz$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial T}{\partial x}dxdydz\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(k\frac{\partial T}{\partial y}dxdydz\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(k\frac{\partial T}{\partial z}dxdydz\right) = \rho C_p\frac{\partial T}{\partial t}dxdydz$$

$$k\left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right]=\rho C_p\frac{\partial T}{\partial t}$$

$$\left[\frac{\partial^2 \mathbf{T}}{\partial \mathbf{x}^2}+\frac{\partial^2 \mathbf{T}}{\partial \mathbf{y}^2}+\frac{\partial^2 \mathbf{T}}{\partial \mathbf{z}^2}\right]=\boldsymbol{\alpha}^{-1}\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \mathbf{t}}$$

bulunur.

BÖLÜM 2. SAYISAL YÖNTEMLER

2.1 Cebirsel Denklemlerin Sayısal Çözümleri

Mühendislik hesaplamalarında karşılaşılan pek çok cebirsel denklem, bilinen kurallarla analitik olarak kolayca çözülememektedir. Bu denklemler aşağıdaki fonksiyonlar şeklinde olabilir.

1. Polinom biçiminde olan fonksiyonlar
2. Trigonometrik fonksiyonlar
3. Üstel fonksiyonlar
4. Logaritmik fonksiyonlar
5. Yukarıdaki fonksiyonların iki ya da daha fazlasını içeren fonksiyonlar.

$f(x) = ax^2 + bx + c = 0$ şeklindeki bir denklemin çözümü kolayca yapılabilmektedir. Ancak;

$$f(x) = ax^3 + bx^2 + cx + d = 0$$
$$f(x) = e^x + x^2 + x = 0$$
$$f(x) = \tan x + 2x = 0$$

denklemlerinin analitik çözümleri oldukça güçtür. Bu tip denklemleri çözmek için değişik sayısal yöntemler vardır. Bu yöntemlerden

1. Newton-Raphson yöntemi
2. Wegstein yöntemi

yaygın olarak kullanılmaktadır. Burada bu yöntemler üzerinde durulacaktır.

2.1.1 Newton-Raphson Yöntemi

Bu yöntemin esası, fonksiyonun Taylor serisine açılıp sıfıra eşitlenmesi prensibine dayanmaktadır.

f(x) gibi bir fonksiyonun Taylor açılımı;

$$f(x) = f(x_0) + (x-x_0)\, f'(x_0) + \frac{(x-x_0)^2}{2!}\, f''(x_0) + \cdots + \frac{(x-x_0)^n}{n!}\, f^{(n)}(x_0)$$

şeklindedir. Bu serinin birinci türevinden sonraki terimleri ihmal edilerek sıfıra eşitlenirse Newton-Raphson yönteminin temel eşitliği bulunur.

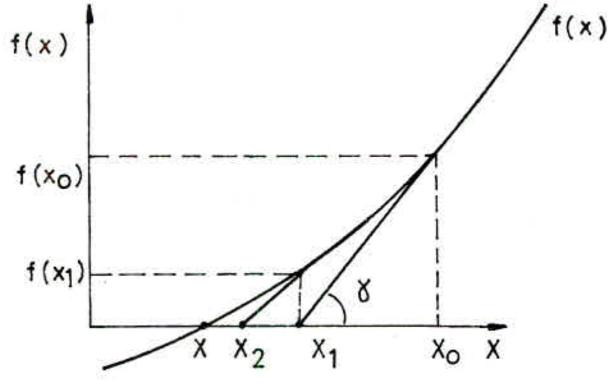
$$f(x) = f(x_0) + (x-x_0)\, f'(x_0) = 0$$

Bu denklemden x çekilirse;

$$x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

elde edilir. Bu denklemin, cebirsel bir denklemin köklerinin bulunmasında nasıl kullanıldığı aşağıda açıklanmıştır.

f(x) fonksiyonunun grafiği aşağıdaki gibi verilmiş olsun.



Burada f(x) fonksiyonunu sıfır yapan x değeri, bu fonksiyonun kökü ya da köklerinden birisidir. Bu yönteme göre cebirsel bir denklemin kökünün bulunması için x_0 gibi bir tahmini değerle çözüme başlanır. Daha sonra $(x_0,f(x_0))$ noktasından eğriye bir teğet çizilir. Bu teğetin x eksenini kestiği nokta x_1 değeridir.

$(x_0,f(x_0))$ noktasına çizilen teğetin eğimi;

$$\tan\alpha = f'(x_0) \quad \text{ya da} \quad \tan\alpha = \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1} = f'(x_0)$$

yazılabilir. Buradan;

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1} \quad \Rightarrow \quad x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

elde edilir. Eğer, $x_1 = x_0$ ise denklemin kökü x_1' dir. x_0, x_1'den farklı ise, bu kez x_0 için yapılan işlemler x_0 yerine x_1 alınarak yinelenir.

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$$

Yukarıdaki eşitlik genel olarak yazılırsa;

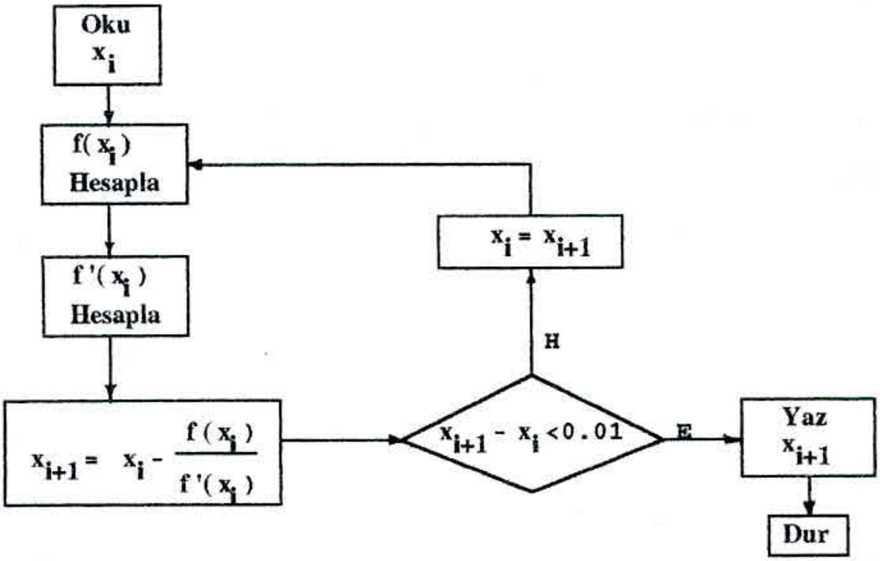
$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

ifadesi elde edilir. Ardışık yineleme (iterasyon) işlemine ;

$$x_{i+1} = x_i$$

eşitliği sağlanıncaya kadar devam edilir.

Newton-Raphson yöntemiyle cebirsel denklem çözümü için bilgisayar algoritması aşağıdaki gibi verilebilir.



Örnek 2.1 :300 atm. ve 20 °C sıcaklıkta bulunan 112 kg N_2 gazının hacmini van der Waals denkleminden Newton-Raphson yöntemiyle bulunuz.

Çözüm:

P = 300 atm., T = 20°C, m = 112 kg, V = ?

van der Waals hal denklemi:

$$\left[P + \frac{n^2 a}{V^2}\right]\left[V - nb\right] = nRT$$

Bu denklem hacıma (V) göre düzenlenirse,

$$V^3 - \left[nb + \frac{nRT}{P} \right] V^2 + \frac{n^2 a}{P} V - \frac{abn^3}{P} = 0 \qquad (1)$$

elde edilir.

N_2 için van der Waals sabitleri: $a = 1.35\ \text{atm.dm}^6\text{mol}^{-2}$
$b = 0.0385\ \text{dm}^3\text{mol}^{-1}$

N_2 mol sayısı:

$$n = \frac{112 \cdot 10^3\ g}{28\ g\ mol^{-1}} = 4000\ mol$$

Newton-Raphson yönteminin temel eşitliği,

$$V_{i+1} = V_i\ \frac{f(V_i)}{f'(V_i)}$$

dır. $V_{i+1} = V_i$ olana kadar işlem yinelenir.

Veriler (1) eşitliğinde yerine yazılırsa;

$$f(V) = V^3 - 474\ V^2 + 72000\ V - 1.1 \cdot 10^7 = 0 \qquad (2)$$

elde edilir. Bu fonksiyonun türevinin alınması gerekir.

$$f'(V) = 3V^2 - 948V + 72000 \quad \text{(türev fonksiyonu)} \qquad (3)$$

İlk deneme hacim değeri ideal gaz denkleminden bulunabilir.

$$V_0 = \frac{nRT}{P} = (4000)\ (0.082)\ (293)\ /\ (300) = 320\ dm^3$$

$$f(V_0) = -3.7 \cdot 10^6\ , \quad f'(V_0) = 7.6 \cdot 10^4$$

bulunur.

$$V_1 = V_0 - \frac{f(V_0)}{f'(V_0)} = 320 - \frac{-3.7\cdot 10^6}{7.6\cdot 10^4} = 369.177 \text{ dm}^3$$

$V_1 \neq V_0$ olduğundan yineleme işlemine devam edilmelidir.

$$V_2 = V_1 - \frac{f(V_1)}{f'(V_1)} = 369.177 - \frac{f(369.177)}{f'(369.177)} = 359.29 \text{ dm}^3$$

Bu adımda da $V_2 \neq V_1$ olduğundan aynı işleme V_2 kullanılarak devam edilir.

$$V_3 = V_2 - \frac{f(V_2)}{f'(V_2)} = 359.29 - \frac{f(359.29)}{f'(359.29)} = 358.774 \text{ dm}^3$$

Bu adımda V_2 ile V_3 değerlerinin birbirine iyice yaklaştığı görülmektedir. V_3 değeri bu denklemin kökü kabul edilebilir. Bu işlemler bilgisayarlarla çok hızlı bir şekilde yapıldığından, istenilen hata ölçüsünde sonuca gidilebilir.

Bu örnek için Fortran dilinde yazılmış bir bilgisayar programı aşağıda verilmiştir.

```
C234567
C Newton-Raphson yöntemiyle van der Waals denkleminden hacmin
C bulunması.
C Burada V1 ve V2 hacim, F1: Hacime bağlı fonksiyon, F2: Türev
C fonksiyonu, N: basamak sayısı
      N=1
      WRITE(*,*)"SONUÇLAR"
      WRITE(*,*)
      V1=320
90    F1=V**3-474*V**2+72000*V-1.1E7
      F2=3*V**2 -948*V+72000
      V2=V1-(F1/F2)
      HATA=ABS(V2-V1)
      IF(HATA.LT.0.0001) GOTO 180
      WRITE(*,*)"V2=",V2,"V1=",V1,"HATA=",HATA
      V1=V2
      N=N+1
      GOTO 90
180   WRITE(*,*)"V2=",V2,"V1=",V1,"HATA=",HATA
      END
```

2.1.2 Wegstein Yöntemi

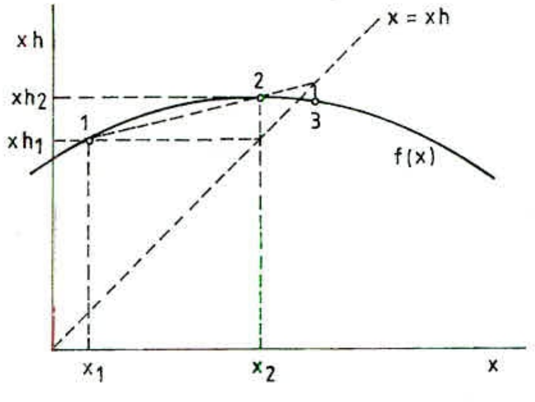
Bu yöntem x=f(x) şeklinde yazılabilen cebirsel denklemlere uygulanmaktadır. Newton –Raphson yönteminde olduğu gibi bu yöntemde de, x_1 gibi ilk deneme değeriyle çözüme başlanır. Bu x_1 değerinden yararlanarak hesaplanan xh_1 değeri bulunur ($xh_1=f(x_1)$). Hesaplanan x değeri (xh_1) x_2'ye eşit alınır ve bu x_2 değerinden de xh_2 hesaplanır($xh_2=f(x_2)$). Yapılan bu işlemlerle (x_1,xh_1) ve (x_2,xh_2) noktaları bulunur. Bu noktalardan geçen doğrunun x=xh diyagonalini kestiği noktada, $x=xh=x_3$ ' dır. Bu doğrunun denklemi yazılıp,

$$\tan\alpha = \frac{xh_2 - xh_1}{x_2 - x_1} = \frac{xh - xh_1}{x - x_1}$$

$x=xh=x_3$ alınarak, x_3 çekilirse,

$$x_3 = \frac{xh_1 x_2 - x_1 xh_2}{x_2 - x_1 - xh_2 + xh_1} = \frac{xh_2 x_1 - x_2 xh_1}{x_1 - x_2 - xh_1 + xh_2}$$

bulunur.



Bu yöntemin algoritması aşağıdaki gibidir:

1) x_1 değeri seçilir
2) $xh_1 = f(x_1)$, seçilen x_1 değerinden xh_1 değeri hesaplanır.
3) $x_2=xh_1$, xh_1 değeri x_2 olarak alınır
4) $xh_2=f(x_2)$, x_2 değerinden xh_2 değeri hesaplanır

Bu değerler bulunduktan sonra Wegstein yönteminin temel eşitliğinden;

$$x_3 = \frac{x_1 xh_2 - xh_1 x_2}{x_1 - x_2 - xh_1 + xh_2}$$