x_3 değeri hesaplanır. Böylece Wegstein yönteminin ilk aşaması tamamlanmış olur. İkinci aşamada ise aşağıdaki işlemler gerçekleştirilir.

5) $x_1=x_2$ alınır ve xh_1 değeri hesaplanır ($xh_1=f(x_1)$).
6) $x_2=x_3$ alınır ve xh_2 değeri hesaplanır ($xh_2=f(x_2)$).

5. ve 6. işlemler gerçekleştirildikten sonra Wegstein eşitliğinden yeni bir x_3 değeri hesaplanır. İlk aşamada hesaplanan x_3 ile ikinci aşamada hesaplanan x_3 değerleri birbirine yeterince yakın ise denklemin çözümü x_3' dür. Çözüme yeterince yaklaşılamamışsa iterasyon işlemine devam edilir.

Örnek 2.2 :

$-x^2 + \ln x + x = 0$ denkleminin Wegstein yöntemine göre çözüm algoritmasını yazınız.

Çözüm :

Öncelikle $-x^2 + \ln x + x = 0$ denkleminin $x = f(x)$ şeklinde yazılması gerekir. Buna göre;

$$x = f(x) = x^2 - \ln x$$

elde edilir. Çözüm algoritması:

1. x_1 değeri denklemin kökü olsun.
2. $xh_1 = x_1{}^2 - \ln x_1$ değerini hesaplanır.
3. $x_2 = xh_1$ xh_1 değeri x_2 kabul edilir.
4. $xh_2 = x_2{}^2 - \ln x_2$ değeri hesaplanır.

Yukarda hesaplanan değerlerden

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

bulunur.

5. $x_1 = x_2$, x_2 değeri x_1'e eşit alınır ve xh_1 değeri hesaplanır.

6. $x_2 = x_3$, x_3 değeri x_2 alınarak xh_2 değeri hesaplanır.

(5) ve (6) işlemlerinden bulunan değerlerden yeni x_3 değeri hesaplanır. İlk aşamadaki x_3 ile ikinci aşamadaki x_3 değerleri birbirine eşit ise x_3 değeri denklemin köküdür. x_3 değerleri birbirine eşit değilse, yineleme işlemine devam edilir.

2.2 Adi Türevli Diferansiyel Denklemlerin Sayısal Çözümleri

Adi türevli diferansiyel denklemlerin sayısal olarak çözülmesinde yaygın olarak kullanılan yöntemler;

1. Euler yöntemi (1. mertebe yöntem)
2. Modifiye Euler yöntemi (2. mertebe yöntem)
3. Runge-Kutta yöntemi (4. mertebe yöntem)

dir. Bu yöntemler, 1. mertebe ve 1. mertebeye indirgenmiş adi türevli adi diferansiyel denklemlerin sayısal olarak çözümüne uygulanabilir.

2.2.1 Euler Yöntemi

Bu yöntemin temeli, Newton-Raphson yönteminde olduğu gibi Taylor açılımına dayanmaktadır.

$$\frac{dy}{dx} = f(x,y) \tag{2.1}$$

şeklinde adi türevli diferansiyel denklemin x_0 ve y_0 başlangıç koşulu belli olsun. Bir x değeri için y değeri (2.2) eşitliğinin integrali alınarak bulunur.

$$\int_{y_0}^{y} dy = \int_{x_0}^{x} f(x,y)dx \qquad \Rightarrow \qquad y - y_0 = \int_{x_0}^{x} f(x,y)dx = \int_{x_0}^{x}\left[\frac{dy}{dx}\right]dx \tag{2.2}$$

Bu integralin alınması her f(x,y) fonksiyonu için kolay olmayabilir. integrasyon işlemi için aşağıdaki varsayım yapılır.

Euler yönteminin varsayımı:

f(x,y) fonksiyonunun x noktasındaki türevi, x_0 noktasındaki türevine eşittir.

Varsayıma göre fonksiyonun önce x_0 noktasındaki türevi alınır, sonra integrasyon işlemi gerçekleştirilir.

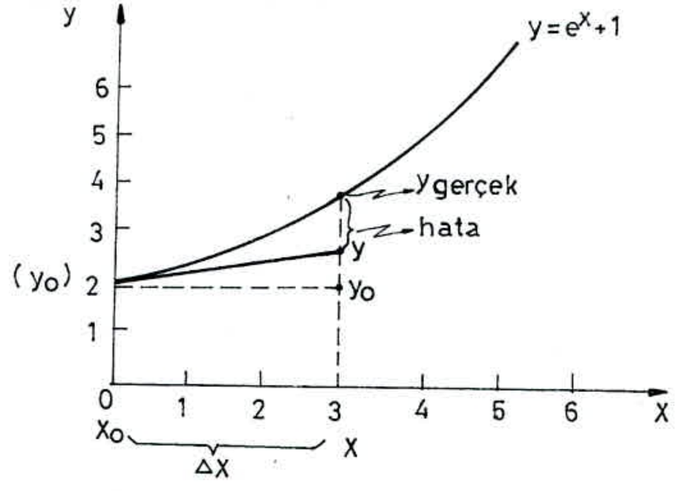
$$y - y_0 = \int_{x_0}^{x} f(x,y)dx = \int_{x_0}^{x}\left[\frac{dy}{dx}\right]_0 dx$$

$$y - y_0 = f(x_0,y_0)\,(x - x_0) = \left[\frac{dy}{dx}\right]_0 (x - x_0)$$

$$y = y_0 + f(x_0,y_0)\,\Delta x = y_0 + \left[\frac{dy}{dx}\right]_0 \Delta x$$

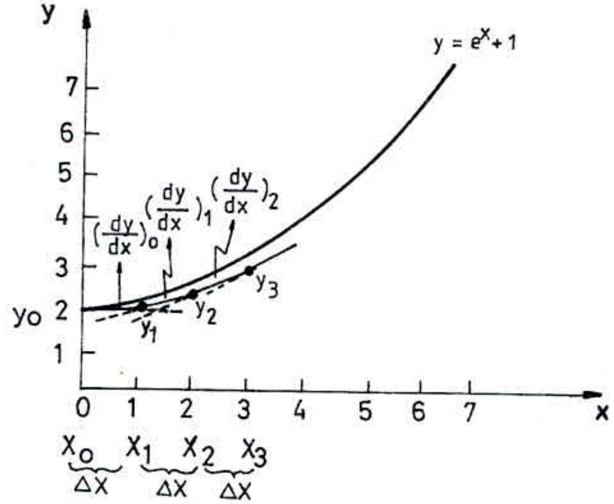
Hesaplanan y değerinin gerçek y değerine yakın olmasında Δx aralığı önemli rol oynamaktadır. Bu durum aşağıdaki örnek ile açıklanmıştır.

$$y = e^x + 1$$



x = 3 için, y değeri Euler yöntemine göre tek adımda bulunduğunda, grafikten de görüldüğü gibi gerçek y değeri ile hesaplanan y değeri arasında fark vardır.

Aynı işlem Δx küçük seçilerek üç adımda yapıldığında gerçeğe daha yakın bir değer elde edilir.



Adi türevli diferansiyel denklemlerin Euler yöntemi ile çözümü için aşağıdaki eşitlikler yazılabilir:

$$y_{i+1} = y_i + \left[\frac{dy}{dx}\right]_i \Delta x$$

$$x_{i+1} = x_i + \Delta x$$

"Bu yöntemin temeli Taylor açılımına dayanmaktadır" ifadesi aşağıdaki gibi doğrulanabilir. f(x) fonksiyonunun herhangi bir x noktasından uzaklıktaki değeri [f(x+Δx)] Taylor açılımına göre,

$$f(x+\Delta x) = f(x) + f'(x)\Delta x + f''(x)\frac{\Delta x^2}{2!} + \dots + f^{(n)}(x)\frac{(\Delta x)^n}{n!}$$

dur.Bu seride birinci türevden sonraki terimler ihmal edilirse;

$$f(x+\Delta x) = f(x) + f'(x)\Delta x$$

bulunur. Bu ifade yukarıda verilen Euler yönteminin temel eşitliğidir.

Örnek 2.3 :

$$\frac{dy}{dx} = 3x + y^2 \qquad \text{(Başlangıç koşulu } x=0\text{ , } y=1)$$

Diferansiyel denklemini Δx= 0.01 alarak Euler yöntemine göre 5 adım için çözünüz.

Çözüm :

1. Adım:

Türev bölümü

$$\left[\frac{dy}{dx}\right]_0 = 3x_0 + y_0^2 = 3(0) + 1^2 = 1$$

İntegral bölümü

$$y_1 = y_0 + \left[\frac{dy}{dx}\right]_0 \Delta x = 1 + (1)(0.01) = 1.01$$

$$x_1 = x_0 + \Delta x = 0 + 0.01 = 0.01$$

2. Adım:

$$\left[\frac{dy}{dx}\right]_1 = 3x_1 + y_1^2 = 3(0.01) + (1.01)^2 = 1.0501$$

$$y_2 = y_1 + \left[\frac{dy}{dx}\right]_1 \Delta x = 1.01 + (1.0501)\,(0.01) = 1.02$$

$$x_2 = x_1 + \Delta x = 0.01 + 0.01 = 0.02$$

3. Adım:

$$\left[\frac{dy}{dx}\right]_2 = 3x_2 + y_2^2 = 3(0.02) + (1.02)^2 = 1.1004$$

$$y_3 = y_2 + \left[\frac{dy}{dx}\right]_2 \Delta x = 1.02 + (1.1004)\,(0.01) = 1.0310$$

$$x_3 = x_2 + \Delta x = 0.02 + 0.01 = 0.03$$

4. Adım:

$$\left[\frac{dy}{dx}\right]_3 = 3x_3 + y_3^2 = 3(0.03) + (1.0310)^2 = 1.153$$

$$y_4 = y_3 + \left[\frac{dy}{dx}\right]_3 \Delta x = 1.0310 + (1.153)\,(0.01) = 1.043$$

$$x_4 = x_3 + \Delta x = 0.03 + 0.01 = 0.04$$

5. Adım:

$$\left[\frac{dy}{dx}\right]_4 = 3x_4 + y_4^2 = 3(0.04) + (1.043)^2 = 1.2079$$

$$y_5 = y_4 + \left[\frac{dy}{dx}\right]_4 \Delta x = 1.043 + (1.2079)\,(0.01) = 1.055$$

$$x_5 = x_4 + \Delta x = 0.04 + 0.01 = 0.05$$

elde edilir.

Kimya Mühendisliği problemlerinin çözümünde birinci mertebe diferansiyel denklemlerin yanında yüksek mertebeden diferansiyel denklemlerle de karşılaşılır. Aşağıda bu denklemlerin sayısal olarak nasıl çözülebileceği üzerinde durulmaktadır.

Yüksek Mertebeden Adi Diferansiyel Denklemlerin Sayısal Çözümü

n. mertebeden bir diferansiyel denklemin sayısal olarak çözümü istendiğinde, bu diferansiyel denklemin n tane birinci mertebe diferansiyel denkleme indirgenmesi gerekir. Sayısal değerleri bulabilmek için, ayrıca n tane başlangıç koşuluna gereksinim vardır. Örneğin;

$$\frac{d^3y}{dx^3} + a_2 \frac{d^2y}{dx^2} + a_1 \frac{dy}{dx} + a_0 y = f(x) \tag{2.3}$$

biçimindeki 3.mertebe birinci derece diferansiyel denklemi sayısal olarak çözülsün. Bunun için; denklemin 3 tane birinci mertebe diferansiyel denkleme indirgenmesi ve 3 tane de başlangıç koşulunun bilinmesi gerekir. İndirgeme işlemi için şu dönüşümler yapılabilir:

$$\frac{dy}{dx} = z \tag{2.4}$$

$$\frac{d^2y}{dx^2} = t \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dx}\left[\frac{dy}{dx}\right] = t \quad \Rightarrow \quad \frac{dz}{dx} = t \tag{2.5}$$

$$\frac{d^3y}{dx^3} = \frac{d}{dx}\left[\frac{d^2y}{dx^2}\right] = \frac{dt}{dx}$$

$\frac{dy}{dx}$, $\frac{d^2y}{dx^2}$ ve $\frac{d^3y}{dx^3}$ ifadeleri (2.3) diferansiyel denkleminde yerine yazılırsa;

$$\frac{dt}{dx} + a_2 t + a_1 z + a_0 y = f(x)$$

$$\frac{dt}{dx} = - a_2 t - a_1 z - a_0 y + f(x) \tag{2.6}$$

denklemleri elde edilir. x ve y değerlerinin bulunabilmesi için (2.4), (2.5) ve (2.6) denklemlerinin aynı anda (simultane) olarak çözülmesi gerekir.

Örnek 2.4 :

$$\frac{d^2y}{dx^2} - y = 0$$

diferansiyel denklemini x = 0 için y = 0 ve y' = 1 başlangıç koşulunda, $\Delta x = 0.01$ alarak Euler yöntemine göre üç adım için çözünüz.

Çözüm :

$$\frac{d^2y}{dx^2} - y = 0$$

$$\frac{dy}{dx} = z \qquad (2.7)$$

dönüşümü yapılırsa,

$$\frac{d^2y}{dx^2} = \frac{d}{dx}\left[\frac{dy}{dx}\right] = \frac{dz}{dx}$$

elde edilir. Bu eşitlik diferansiyel denklemde yerine yazıldığında,

$$\frac{dz}{dx} - y = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{dz}{dx} = y \qquad (2.8)$$

elde edilir. x ve y değerlerini bulmak için (2.7) ve (2.8) eşitlikleri aynı anda çözülmelidir.

1. Adım :

Türev bölümü

$$\left[\frac{dy}{dx}\right]_0 = z_0 = 1 \qquad \text{(2.7) eşitliğinde}$$

$$\left[\frac{dz}{dx}\right]_0 = y_0 = 0 \qquad \text{(2.8) eşitliğinden}$$

İntegral bölümü

$$y_1 = y_0 + \left[\frac{dy}{dx}\right]_0 \Delta x = 0 + (1)(0.01) = (0.01)$$

$$z_1 = z_0 + \left[\frac{dz}{dx}\right]_0 \Delta x = 1 + (0)(0.01) = 1$$

$$x_1 = x_0 + \Delta x = 0 + 0.01 = 0.01$$

2. Adım :

$$\left[\frac{dy}{dx}\right]_1 = z_1 = 1 \qquad \text{(2.7) eşitliğinden}$$

$$\left[\frac{dz}{dx}\right]_1 = y_1 = 0.01 \qquad \text{(2.8) eşitliğinden}$$

İntegral bölümü

$$y_2 = y_1 + \left[\frac{dy}{dx}\right]_1 \Delta x = 0.01 + (1)\,(0.01) = 0.02$$

$$z_2 = z_1 + \left[\frac{dz}{dx}\right]_1 \Delta x = 1 + (0.01)(0.01) = 1.0001$$

$$x_2 = x_1 + \Delta x = 0.01 + 0.01 = 0.02$$

3. Adım

$$\left[\frac{dy}{dx}\right]_2 = z_2 = 1.0001 \qquad \text{(2.7) eşitliğinden}$$

$$\left[\frac{dz}{dx}\right]_2 = y_2 = 0.02 \qquad \text{(2.8) eşitliğinden}$$

İntegral bölümü

$$y_3 = y_2 + \left[\frac{dy}{dx}\right]_2 \Delta x = 0.02 + (1.0001)(0.01) = 0.03$$

$$z_3 = z_2 + \left[\frac{dy}{dx}\right]_2 \Delta x = 1.0001 + (0.02)(0.01) = 1.0003$$

$$x_3 = x_2 + \Delta x = 0,02 + 0,01 = 0,03$$

elde edilir.