

Reaksiyon-Difüzyon Denklem Sistemlerinin
B-spline Sonlu Elemanlar Yöntemi ile Nümerik Çözümleri

Ali Şahin

DOKTORA TEZİ

Matematik Anabilim Dalı

Haziran 2009

Numerical Solutions of the Reaction-Diffusion Equations
with B-spline Finite Element Method

Ali Şahin

DOCTORAL DISSERTATION

Department of Mathematics

June 2009

Reaksiyon-Difüzyon Denklem Sistemlerinin
B-spline Sonlu Elemanlar Yöntemi ile Nümerik Çözümleri

Ali Şahin

Eskişehir Osmangazi Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Lisansüstü Yönetmeliği Uyarınca
Matematik Anabilim Dalı
Uygulamalı Matematik Bilim Dalında
DOKTORA TEZİ
Olarak Hazırlanmıştır

Danışman: Prof. Dr. İdris Dağ

Haziran 2009

ONAY

Matematik Anabilim Dalı Doktora öğrencisi Ali ŞAHİN'in DOKTORA tezi olarak hazırladığı "Reaksiyon-Difüzyon Denklem Sistemlerinin B-spline Sonlu Elemanlar Yöntemi ile Nümerik Çözümleri" başlıklı bu çalışma, jürimizce lisansüstü yönetmeliğin ilgili maddeleri uyarınca değerlendirilerek kabul edilmiştir.

Danışman : Prof.Dr. İdris DAĞ

Doktora Tez Savunma Jürisi:

Üye : Prof.Dr. İdris DAĞ

Üye : Prof.Dr. M. Naci ÖZER

Üye : Yrd.Doç.Dr. Ömer ÖZBAŞ

Üye : Yrd.Doç.Dr. Murat SARI

Üye : Yrd.Doç.Dr. Bülent SAKA

Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun tarih ve sayılı kararıyla onaylanmıştır.

Prof. Dr. Nimetullah BURNAK

Enstitü Müdürü

ÖZET

Bu tez çalışmasının temel amacı, birçok bilim dalında bazı fiziksel olayları modellemek için kullanılan, reaksiyon-difüzyon denklem sistemlerinin nümerik çözümlerini elde etmektir. Bu amaç doğrultusunda, diferensiyel denklemlerin nümerik çözümlerinde yaygın olarak kullanılan sonlu elemanlar yöntemi kullanılmıştır.

Nümerik yöntemin uygulanışında, ilk olarak, Crank-Nicolson formülleri yardımıyla denklem sisteminin zaman ayrıştırması yapıldı. Daha sonra denklem sistemindeki lineer olmayan terimler lineerleştirilerek sonlu elemanlar yöntemi uygulandı. Sonlu elemanlar yönteminde, konum ayrıştırması için problemin çözüm bölgesi eşit uzunluklu alt aralıklara bölündü ve bu aralıklar üzerinde ağırlık fonksiyonu olarak dirac-delta fonksiyonu, taban fonksiyonu olarak da sırasıyla kuadratik, kübik, kuartik ve kuintik B-spline taban fonksiyonları seçildi. Böylece, reaksiyon-difüzyon denklem sistemi, katsayı matrisleri her satırında belirli sayıda sıfırdan farklı eleman bulunduran blok band matrisler olan matris denklemine dönüştürüldü. Elde edilen bu matris denkleminin çözümleri için ise Thomas algoritmaları ve Gauss eliminasyon yöntemi kullanıldı.

Farklı derecelerdeki B-spline fonksiyonlarının kullanımı ile ortaya konan nümerik yöntemler, farklı problemler üzerinde test edildi. Yöntemlerin doğruluğu araştırılırken lineer problem için L_2 ve L_∞ hata normları, lineer olmayan bazı problemler için ise bağıl hata kullanıldı. Bu sayede, elde edilen çözümler, gerek birbirileri ile gerekse de literatürde yer alan diğer bazı çalışmalarla karşılaştırılarak, önerilen yöntemlerin avantaj ve dezavantajları tartışıldı.

Seçilen test problemlerinin karakterine göre ortaya çıkan konumsal desenler, reaksiyon-difüzyon denklem sisteminde yer alan bağımlı değişkenlere ait yoğunluk değişimlerinin konum ve zaman eksenindeki izdüşüm grafikleriyle oluşturuldu.

Anahtar Kelimeler: Brusselator, Crank-Nicolson, Desen oluşturma, Gray-Scott, İzotermal, Kolokeyşin, Reaksiyon-difüzyon, Schnakenberg, Sonlu elemanlar, Spline.

SUMMARY

The main purpose of this thesis is to obtain the numerical solutions of the reaction-diffusion systems which are used for some physical facts in various disciplines. For this purpose, the finite element method that used widely in numerical solutions of differential equations is employed.

In the application of the numerical method, firstly, the time discretization of the equation system is achieved by the help of Crank-Nicolson formulae. Then, the resulted system is linearized and the finite element method is applied. In the finite element method, a uniform partition of the solution domain is considered for the space discretization. Over the mentioned mesh, dirac-delta function is taken as the weighted function and respectively, quadratic, cubic, quartic and quintic B-spline functions are chosen as the basis functions. Thus the reaction-diffusion system turns into a matrix equation such that the coefficient matrices are bloc matrices containing the certain number of non-zero elements in each row. The Thomas algorithms and the Gauss elimination method are used for the solutions of the obtained matrix equations.

The present methods given by the usage of B-splines in several degrees are tested on different problems. To investigate the accuracy of the methods, L_2 and L_∞ error norms are employed for the linear problem and the relative error is used for some nonlinear problems. By this means, the obtained results are compared with either in each other or some other works from the literature. Then the advantages and the disadvantages of the present methods are discussed.

Subject to the character of the test problems, the occurring spatial patterns are formed by the trajectories of the concentrations of the dependent variables in the reaction-diffusion system.

Keywords: Brusselator, Collocation, Crank-Nicolson, Finite element, Gray-Scott, Isothermal, Pattern formation, Reaction-diffusion, Schnakenberg, Spline.

TEŞEKKÜR

Doktora çalışmalarım boyunca, bana danışmanlık ederek, beni yönlendiren ve her türlü olanağı sağlayan danışmanım

Prof. Dr. İdris DAĞ'a,

değerli fikirlerine başvurduğum hocalarım

Yrd. Doç. Dr. Bülent SAKA ve Yrd. Doç. Dr. Dursun IRK'a,

desteklerini her zaman hissettiren çalışma arkadaşlarıma, eşime ve aileme teşekkürlerimi sunarım.

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	v
SUMMARY	vi
TEŞEKKÜR.....	vii
ŞEKİLLER DİZİNİ	xi
TABLolar DİZİNİ.....	xiii
1. GİRİŞ.....	1
1.1 Temel Kavramlar	1
1.2 Reaksiyon-Difüzyon Denklemlerine Giriş	3
1.2.1 Kimyasal modeller	5
1.2.2 Biyolojik modeller	7
1.2.3 Turing kararsızlığı ve desen oluşturma.....	8
1.2.4 Turing kararsızlığı için gerekli ve yeterli koşullar.....	10
1.3 Test Problemleri.....	10
1.3.1 Lineer problem	11
1.3.2 Otokatalitik kimyasal sistem.....	12
1.3.3 Brusselator modeli	15
1.3.4 Schnakenberg modeli.....	17
1.3.5 Gray-Scott modeli.....	18
1.4 Nümerik Çözümler için Model Sistem	20
1.4.1 Model sistemin oluşturulması	21
1.4.2 Turing analizi.....	22
1.4.3 Zaman ayrıştırması ve lineerleştirme.....	25
1.5 Sonlu Elemanlar Yöntemi.....	27
1.5.1 Kolokeyşin yöntemi	30
1.5.2 Galerkin yöntemi	30
1.5.3 En küçük kareler yöntemi	31
1.5.4 Moment yöntemi.....	31
1.6 B-spline Fonksiyonlar	32

İÇİNDEKİLER (Devam Ediyor)

	<u>Sayfa</u>
1.7 Tezin Ana Yapısı	34
2. REAKSİYON-DİFÜZYON DENKLEM SİSTEMLERİNİN KUADRATİK B-SPLINE KOLOKEYŞİN YÖNTEMİ İLE NÜMERİK ÇÖZÜMLERİ.....	36
2.1 Kuadratik B-spline Taban Fonksiyonları.....	36
2.2 Kuadratik B-spline Kolokeyşin Yöntemi	37
2.3 Başlangıç Koşulu	44
2.4 Test Problemleri.....	44
2.4.1 Lineer problem.....	44
2.4.2 Lineer olmayan problem (izotermal kimyasal sistem)	49
2.4.3 Lineer olmayan problem (Brusselator modeli).....	52
2.4.4 Lineer olmayan problem (Schnakenberg modeli)	55
2.4.2 Lineer olmayan problem (Gray-Scott modeli).....	57
2.5 Sonuçlar	59
3. REAKSİYON-DİFÜZYON DENKLEM SİSTEMLERİNİN KÜBİK B-SPLINE KOLOKEYŞİN YÖNTEMİ İLE NÜMERİK ÇÖZÜMLERİ	61
3.1 Kübik B-spline Taban Fonksiyonları.....	61
3.2 Kübik B-spline Kolokeyşin Yöntemi	62
3.3 Başlangıç Koşulu	67
3.4 Test Problemleri.....	68
3.4.1 Lineer problem.....	69
3.4.2 Lineer olmayan problem (izotermal kimyasal sistem)	73
3.4.3 Lineer olmayan problem (Brusselator modeli).....	76
3.4.4 Lineer olmayan problem (Schnakenberg modeli)	78
3.4.2 Lineer olmayan problem (Gray-Scott modeli).....	80
3.5 Sonuçlar	83
4. REAKSİYON-DİFÜZYON DENKLEM SİSTEMLERİNİN KUARTİK B-SPLINE KOLOKEYŞİN YÖNTEMİ İLE NÜMERİK ÇÖZÜMLERİ	84

İÇİNDEKİLER (Devam Ediyor)

	<u>Sayfa</u>
4.1 Kuartik B-spline Taban Fonksiyonları	84
4.2 Kuartik B-spline Kolokeyşin Yöntemi	85
4.3 Başlangıç Koşulu	89
4.4 Test Problemleri.....	91
4.4.1 Lineer problem.....	91
4.4.2 Lineer olmayan problem (Brusselator modeli).....	95
4.4.3 Lineer olmayan problem (Schnakenberg modeli)	97
4.4.4 Lineer olmayan problem (Gray-Scott modeli).....	99
4.5 Sonuçlar	100
5. REAKSİYON-DİFÜZYON DENKLEM SİSTEMLERİNİN KUİNTİK B-SPLINE KOLOKEYŞİN YÖNTEMİ İLE NÜMERİK ÇÖZÜMLERİ	102
5.1 Kuintik B-spline Taban Fonksiyonları	102
5.2 Kuintik B-spline Kolokeyşin Yöntemi	103
5.3 Başlangıç Koşulu	107
5.4 Test Problemleri.....	110
5.4.1 Lineer problem.....	110
5.4.2 Lineer olmayan problem (Brusselator modeli).....	113
5.4.3 Lineer olmayan problem (Schnakenberg modeli)	115
5.4.4 Lineer olmayan problem (Gray-Scott modeli).....	117
5.5 Sonuçlar	119
6. SONUÇLAR VE ÖNERİLER.....	121
KAYNAKLAR DİZİNİ.....	125
ÖZGEÇMİŞ.....	131

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Sekil</u>	<u>Sayfa</u>
1.1	Gierer-Meinhardt reaksiyonu 6
1.2	Brusselator reaksiyonu 16
1.3	Schnakenberg reaksiyonu 17
2.1	Kuadratik B-spline şekil fonksiyonları 37
2.2	İzotermal sistemde $k = 0.1$ için ilerleyen dalga çözümleri 49
2.3	İzotermal sistemde $k = 0.5$ için ilerleyen dalga çözümleri 50
2.4	İzotermal sistemde $k = 0.5$ için konum ve zamana göre yoğunluk değişimi . 50
2.5	İzotermal sistemde $k = 0.9$ için ilerleyen dalga çözümleri 51
2.6	İzotermal sistemde $k = 0.9$ için konum ve zamana göre yoğunluk değişimi. 52
2.7	Brusselator modelinde konum ve zamana göre U nun yoğunluk değişimi 53
2.8	Brusselator modelinde konum ve zamana göre V nin yoğunluk değişimi 54
2.9	$N = 100$ ve $N = 200$ için $t = 2.5$ anındaki salınım hareketleri 56
2.10	Gray-Scott modeli için $t = 0$ ve $t = 2000$ anındaki çözüm profilleri 58
2.11	Gray-Scott modelinde konum ve zamana göre U nun yoğunluk değişimi 58
2.12	Gray-Scott modelinde konum ve zamana göre V nin yoğunluk değişimi 59
3.1	Kübik B-spline şekil fonksiyonları 62
3.2	İzotermal sistemde $k = 0.1$ için ilerleyen dalga çözümleri 73
3.3	İzotermal sistemde $k = 0.5$ için ilerleyen dalga çözümleri 74
3.4	İzotermal sistemde $k = 0.5$ için konum ve zamana göre yoğunluk değişimi . 74
3.5	İzotermal sistemde $k = 0.9$ için ilerleyen dalga çözümleri 75
3.6	İzotermal sistemde $k = 0.9$ için konum ve zamana göre yoğunluk değişimi. 75
3.7	$N=200, \Delta t=0.01$ için periyodik dalga hareketi 77
3.8	Brusselator modelinde konum ve zamana göre U nun yoğunluk değişimi 78
3.9	Brusselator modelinde konum ve zamana göre V nin yoğunluk değişimi 78
3.10	$N = 100$ ve $N = 200$ için $t = 2.5$ anındaki salınım hareketleri 80
3.11	Kendini tekrarlayan spot desenlerinde dalgaların bölünme süreci 81
3.12	U fonksiyonu için kendini tekrarlayan spot desenleri 82
3.13	V fonksiyonu için kendini tekrarlayan spot desenleri 82

ŞEKİLLER DİZİNİ (Devam Ediyor)

<u>Sekil</u>		<u>Sayfa</u>
4.1	Kuartik B-spline şekil fonksiyonları	85
4.2	$N = 200$, $\Delta t = 0.03583$ için periyodik dalga hareketi	96
4.3	Brusselator modelinde konum ve zamana göre U nun yoğunluk değişimi	97
4.4	Brusselator modelinde konum ve zamana göre V nin yoğunluk değişimi	97
4.5	$N = 100$ ve $N = 200$ için $t = 2.5$ anındaki salınım hareketleri	99
4.6	Durağan dalga çözümleri	100
5.1	Kuintik B-spline şekil fonksiyonları	103
5.2	$N = 200$ ve $\Delta t = 0.01$ için periyodik dalga hareketi	114
5.3	$N = 100$ ve $N = 200$ için $t = 2.5$ anındaki salınım hareketleri	116
5.4	Gray-Scott modeli için $t=100$ ve $t=500$ anındaki çözümler	118
5.5	Gray-Scott modeli için $t=1000$ anındaki çözümler	118
5.6	Gray-Scott modelinde konum ve zamana göre U nun yoğunluk değişimi.....	119
5.7	Gray-Scott modelinde konum ve zamana göre V nin yoğunluk değişimi.....	119

TABLOLAR DİZİNİ

<u>Tablo</u>	<u>Sayfa</u>
1.1	Brusselator modelinde reaksiyon adımları..... 16
1.2	Model sisteminde katsayı düzenlemesi..... 21
2.1	Bölünme noktalarındaki kuadratik B-spline değerleri 37
2.2	$t = 1$ anında difüzyon baskın durum için hata normları 46
2.3	$t = 1$ anında reaksiyon baskın durum için hata normları..... 47
2.4	$t = 1$ anında reaksiyon güçlü baskın durum için hata normları..... 48
2.5	İzotermal sistem için farklı t anlarındaki bağıl hata değerleri 52
2.6	Brusselator modelinde farklı t anlarındaki bağıl hata değerleri..... 54
2.7	$N=100$ için $t = 2.5$ anındaki bağıl hata değerleri..... 57
3.1	Bölünme noktalarındaki kübik B-spline değerleri 62
3.2	$t = 1$ anında difüzyon baskın durum için hata normları 70
3.3	$t = 1$ anında reaksiyon baskın durum için hata normları..... 71
3.4	$t = 1$ anında reaksiyon güçlü baskın durum için hata normları..... 72
3.5	İzotermal sistem için farklı t anlarındaki bağıl hata değerleri 76
3.6	Periyodik hareket için yoğunluk değerleri 77
3.7	$N=100$ için $t = 2.5$ anındaki bağıl hata değerleri..... 79
4.1	Bölünme noktalarındaki kuartik B-spline değerleri..... 85
4.2	$t = 1$ anında difüzyon baskın durum için hata normları 92
4.3	$t = 1$ anında reaksiyon baskın durum için hata normları..... 93
4.4	$t = 1$ anında reaksiyon güçlü baskın durum için hata normları..... 94
4.5	Periyodik hareket için yoğunluk değerleri 96
4.6	$N=100$ için $t = 2.5$ anındaki bağıl hata değerleri..... 98
4.7	Durağan dalga çözümleri için yoğunluk değerleri..... 100
5.1	Bölünme noktalarındaki kuintik B-spline değerleri..... 103
5.2	$t = 1$ anında difüzyon baskın durum için hata normları 111
5.3	$t = 1$ anında reaksiyon baskın durum için hata normları..... 112
5.4	$t = 1$ anında reaksiyon güçlü baskın durum için hata normları..... 113
5.5	Periyodik hareket için yoğunluk değerleri 115

TABLULAR DİZİNİ (Devam Ediyor)

<u>Tablo</u>		<u>Sayfa</u>
5.6	$N=100$ için $t = 2.5$ anındaki bağıl hata değerleri.....	116

BÖLÜM 1

GİRİŞ

Bu tez çalışmasında, aşağıda genel hatları ile verilen reaksiyon-difüzyon denklem sistemlerinin bazı özel durumları dikkate alınacak ve denklemlerin sayısal çözümleri sonlu elemanlar yöntemi kullanılarak elde edilecektir. Elde edilen çözümler literatürde yer alan diğer sonuçlarla karşılaştırılarak önerilen nümerik yöntemlerin avantaj ve dezavantajları tartışılacaktır.

Bu bölümde, ilk olarak, diğer bölümlerde kullanılacak temel kavramlardan kısaca bahsedildi. Daha sonra reaksiyon-difüzyon denklemleri genel olarak incelendi ve bilinen bazı biyolojik ve kimyasal modeller tanımlandı. Test problemi olarak kullanılacak reaksiyon-difüzyon denklem sistemleri verilerek seçilen test problemlerinin bütününi kapsayacak şekilde bir denklem sistemi oluşturuldu ve bu sistem lineer hale getirildi. Sonlu elemanlar yöntemi tanımlandı ve bu yöntemin diferensiyel problemlerine uygulanışı üzerinde duruldu. Nümerik yöntemin uygulanışı esnasında seçilecek ağırlık fonksiyonlarının durumuna göre ortaya çıkan bazı özel haller incelendi. Son olarak, nümerik yöntemlerde taban fonksiyonu olarak kullanılan B-spline fonksiyonların tanımları verildi ve sahip oldukları bazı özellikler vurgulandı.

1.1 Temel Kavramlar

Bu kısımda, tezin ilerleyen aşamalarında ortaya çıkan bazı kavramların fiziksel ve kimyasal anlamları üzerinde kısaca duruldu. Bu amaçla hem fiziksel terimler açıklandı hem de literatürde yer alan bazı İngilizce terimler için tez içerisinde kullanılan Türkçe karşılıkları verildi.

Aktivatör: Bir reaksiyonun oluşumunu kolaylaştıran uyarıcı madde.

Boyutsuzlaştırma: Uygun değişken değiştirme yöntemiyle bir denklemdeki katsayıların kısmen ya da tamamen 1 olacak şekilde düzenlenmesi.

Competition: Belli bir hayat kaynağı için iki organizma veya iki populasyon arasında süren mücadele. Rekabet.

Dalga: Bir fizik terimi olarak, uzayda yayılan ve sıklıkla enerjinin taşınmasına yol açan titreşim.

Diffusion driven instability: Difüzyonun neden olduğu kararsızlık.

Habitat: Bir organizmanın yaşadığı ve geliştiği yer.

İnhibitör: Kimyasal ve biyokimyasal reaksiyonları geciktiren veya durduran, genellikle organik yapıda olan bileşikler.

İzotermal: Isı derecesi değişmeyen, devamlı aynı ısıyı gösteren.

Kataliz: Bir kimyasal tepkimenin katalizörler tarafından hızlandırılması olayı.

Katalizör: Kimyasal tepkimeyi hızlandıran fakat kendisi değişmeden kalan madde.

Konsantrasyon: Bir çözücüdeki çözünen madde miktarını belirtmede kullanılan bir terim. Yoğunluk.

Linearly stable uniform steady state: Doğrusal kararlı düzgün sabit durumlu

Model: Fiziksel ya da kimyasal bir olayın ifade edildiği denklem sistemi.

Mutualizm: Ortak yaşayan iki canlının birbirinden faydalandığı yaşama şekli.

Otokataliz: Bir reaksiyon ürününün, o reaksiyonu katalizleme durumu.

Pattern formation: Desen oluşturma

Popülasyon: Belli bir bölgede yaşayan aynı türün bireylerinden oluşan yaşama birliği ve topluluğu.

Reaktant: Kimyasal reaksiyona dâhil olan bir molekül.

Satürasyon: Doygunluk

Smoothness: Düzgünlük

Stationary: Durağan

Steady-State: Sabit durumlu.

Support: Destek

Uygun analitik çözüm: Diferensiyel denklemin çözümünün istenilen noktalar-daki değerlerinin bulunması açısından hesaplama yapmaya elverişli çözüm.

Yoğunluk: Birim kesit başına düşen kütle miktarı.

1.2 Reaksiyon-Difüzyon Denklemlerine Giriş

Fizik, kimya, biyoloji ve ekoloji gibi bilimin bir çok dalında önemli bir yere sahip olan reaksiyon-difüzyon denklemleri, bir çok alanda model olarak kullanılabilir. Bu denklemler sisteminin her yerde yaygın olması ve uygun analitik çözümlerinin sınırlılığı, bu denklemlerin doğru ve etkili nümerik çözümlerini önemli hale getirmiştir.

Bir boyutlu reaksiyon-difüzyon denklemleri genel olarak

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \phi(U) \quad (1.1)$$

şeklinde yazılır. Burada $U(x, t)$ konum ve zaman parametrelerine bağlı reel değerli bir fonksiyondur. (1.1) denkleminde, $\alpha \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}$ terimi, difüzyon terimi ve sıfırdan farklı bir sayı olan α da difüzyon katsayısı olarak adlandırılır. $\phi(U)$ fonksiyonu ise sistemin reaksiyonunu tanımlar.

Difüzyon mekanizması, bir bölgedeki bireylerin hareketlerini modeller. Bu bireyler bakteriler, moleküller, hücreler ya da fizikteki partiküller gibi çok küçük nesnelere olabileceği gibi hayvanlar, bitkiler ya da salgın hastalıklar ve dedikodu gibi bir takım olay türleri de olabilir. Diğer yandan, $\phi(U)$ ile verilen reaksiyon terimi ise doğum, ölüm gibi reaksiyon süreçlerini gösterir.

Denklemdaki temel matematiksel değişken, t zaman ve x konum olmak üzere, bireylerin yoğunluğunu belirleyen $U(x, t)$ fonksiyonudur. Popülasyon yoğunluğunun boyutu genellikle birim kesitteki organizma ya da partiküllerin sayısı olarak tanımlanır. Bir habitattaki popülasyon iki türlü değişebilir. Birincisi bölgedeki bireylerin bölge içinde hareketleri ile oluşan değişim, ikincisi ise fiziksel, kimyasal ya da biyolojik nedenlerle meydana gelebilecek doğum ve ölüm gibi faktörlerden kaynaklanan değişimdir.

Birçok matematiksel problemde olduğu gibi burada da $U(x, t)$ fonksiyonunun süreklilik ve türevlenebilirlik gibi bazı özelliklere sahip bir fonksiyon olduğunu kabul edeceğiz. Teknik olarak $U(x, t)$ fonksiyonu aşağıdaki şekilde tanımlanır:

x , Ω ile göstereceğimiz habitatta bir nokta ve $\{O_n\}_{n=1}^{\infty}$ de x noktası civarında Ω ile aynı boyutlu bölgelerin bir dizisi olsun. Burada O_n seçimi yapılırken O_n nin uzaysal ölçümünün (uzunluk, alan, hacim ya da matematiksel olarak Lebesgue

ölçümü) $|O_n|$ olmak üzere $n \rightarrow \infty$ iken $|O_n| \rightarrow 0$ ve $O_n \supset O_{n+1}$ olmasına dikkat edilir. Bu durumda $U(x, t)$ fonksiyonu,

$$U(x, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{t \text{ anında } O_n \text{ deki organizma sayısı}}{|O_n|}$$

limiti ile tanımlanır. Açıkça, Ω nın herhangi bir O alt bölgesinde t anındaki toplam popülasyon

$$\int_O U(x, t) dx$$

şeklindedir.

Reaksiyon-difüzyon denklemlerinin matematiksel gösterimini tamamlamak için başlangıç ve sınır koşullarının belirlenmesi gerekir. Fizik ve biyolojideki bazı modellerde denklem bütün \mathbb{R}^n üzerinde düşünülür. Böyle bir durumda uzayın sınırı $x = \infty$ olacaktır, ya da daha açık şekliyle, x noktasının orjine uzaklığı $|x|$ olmak üzere, sınır koşulu $|x| \rightarrow \infty$ iken çözümü sınırlayan davranış olacaktır. Buna göre bir sınır koşulu

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} U(x, t) = 0 \quad \text{ya da} \quad \lim_{|x| \rightarrow \infty} \nabla U(x, t) = 0$$

şeklinde verilebilir.

Başlangıç şartına gelince, örneğin popülasyon artışını modelleyen bir reaksiyon-difüzyon denkleminde, habitatın destekleyeceği nüfus miktarı sınırlı olacağından başlangıç koşulu

$$0 \leq U(x, 0) \leq 1, \quad -\infty < x < \infty$$

olacak şekilde seçilmelidir. Burada üst sınır olarak işlem kolaylığı açısından 1 alınmıştır.

Ekoloji problemleri ve kimyasal reaksiyonlar incelendiğinde, ekolojide farklı türlerin birbirleri ile etkileşim halinde oldukları, kimyasal reaksiyonlarda ise farklı kimyasal maddelerin reaksiyon sonrası yeni maddeler oluşturdukları görülmektedir. Birden fazla bağımlı değişkenin yer aldığı bu tarzdaki olayların modellenmesinde diferensiyel denklem sistemleri kullanılmaktadır.

$U(x, t)$ ve $V(x, t)$ doğadaki iki türün popülasyon yoğunluk fonksiyonları ya da iki farklı kimyasalın konsantrasyonu olmak üzere genel olarak bir boyutlu reaksiyon-

difüzyon denklem sistemi

$$\begin{aligned}\frac{\partial U}{\partial t} &= D_u \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + F(U, V) \\ \frac{\partial V}{\partial t} &= D_v \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + G(U, V)\end{aligned}\tag{1.2}$$

şeklinde ifade edilir. Burada D_u ile D_v sırasıyla U ve V nin difüzyon katsayıları, F ile G de sistemin reaksiyonunu temsil eden büyüme ve etkileşim fonksiyonlarıdır. F ile G daima lineer olmayan fonksiyonlardır.

Bir bölgeyi istila eden ya da orada yayılan bir türün popülasyonu dikkate alındığında, problemin çözüm bölgesi, $(-\infty, \infty)$ olacağı gibi (x_0, x_N) şeklinde sınırlı bir aralık da olabilir. (1.2) sisteminin sınır koşulları olarak

$$\begin{aligned}U(x_0, t) &= U(x_N, t) = 0, \\ V(x_0, t) &= V(x_N, t) = 0,\end{aligned}$$

şeklinde ifade edilen homojen Dirichlet sınır koşulu veya

$$\begin{aligned}U_x(x_0, t) &= U_x(x_N, t) = 0, \\ V_x(x_0, t) &= V_x(x_N, t) = 0,\end{aligned}$$

ile verilen homojen Neumann sınır koşulu kullanılabilir. Bunun yanında, problemin karakterine göre her iki sınır koşulunun ortak kullanımı da düşünülebilir.

Kimyasal ve biyolojik olayları modelleyen pek çok reaksiyon-difüzyon denklem sistemi var olsa da fikir verme açısından kimyager ve biyologların üzerinde çalıştıkları bazı modeller aşağıda genel hatlarıyla verildi. Farklı modeller için (Aragon, et al., 1998; Aragon, et al., 2002; Barrio, et al., 1999; Barrio, et al., 2002; Liu, et al., 2007) referanslarına bakılabilir.

1.2.1 Kimyasal modeller

Kimyasal reaksiyonları modelleyen çok sayıda reaksiyon-difüzyon mekanizması vardır. Bunların içinden bir kısmı test problemleri olarak ilerde ayrıntılı şekilde tanımlanacağından bilinen başka bazı kimyasal modeller buraya alınmıştır:

Thomas mekanizması

Bu model, ürik asit ayrışmasının ilk safhasını kataliz eden enzim içerisinde reaksiyona giren oksijen ve urik asitin etkileşimine dayanan bir modeldir. Reaksiyona giren ürik asit ve oksijenin yoğunlukları sırasıyla U ve V ile gösterilsin. Bu durumda reaksiyon hareketi, boyutsuzlaştırılmış formda,

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \nabla^2 U + \gamma(a - U - h(U, V)),$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} = d\nabla^2 V + \gamma(\alpha b - \alpha V - h(U, V))$$

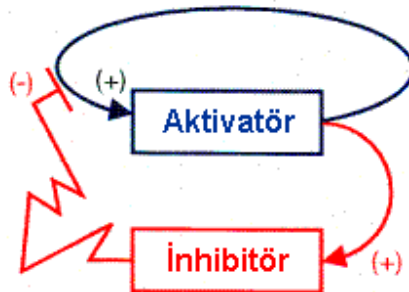
şeklinde ifade edilir (Thomas, 1975). Burada $a, b, d, \gamma, \alpha, \rho, k$ pozitif parametreler ve $h(U, V)$ terimi de

$$h(U, V) = \frac{\rho UV}{1 + U + kKU^2}$$

ile tanımlanan ve U ile V nin tükenme oranlarını gösteren bir fonksiyondur. Açıkça görüldüğü gibi U yoğunluğu azaldıkça $h(U, V)$ artarken, U yoğunluğu arttıkça $h(U, V)$ azalacaktır.

Gierer-Meinhardt modeli

Bir olgusal model olarak Gierer ve Meinhardt (1972) tarafından ortaya konan bu model, bir aktivatör ve inhibitör sistemi şeklinde düşünülebilir. Şekil 1.1 de de görüldüğü gibi, bu reaksiyonda, bir kimyasalın (aktivatör) harekete geçirdiği bir diğer kimyasala (inhibitör) ait ürün, aktivatörün ürününü engeller.



Şekil 1.1: Gierer-Meinhardt reaksiyonu

U fonksiyonu, aktivatörün yoğunluğunu, V fonksiyonu da inhibitörün yoğun-

luğunu göstermek üzere boyutsuzlaştırılmış formuyla Gierer-Meinhardt reaksiyonu

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \nabla^2 U + \gamma \left(a - bU + \frac{U^2}{V(1 + kU^2)} \right),$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} = d\nabla^2 V + \gamma(U^2 - V)$$

şeklinde ifade edilir. Burada a , b , d , γ pozitif parametreler ve k da saturasyon yoğunluğunun ölçümüdür.

CIMA reaksiyonu

Klor dioksit, iyot ve malonik asit reaksiyonunu gösteren bu model, a , b ve d pozitif parametreler olmak üzere

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \nabla^2 U + a - U - \frac{4UV}{1 + U^2},$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} = d\nabla^2 V + b \left(U - \frac{UV}{1 + U^2} \right).$$

denklem sistemiyle verilir. CIMA reaksiyonunda, aktivatör olan (I^-) iyot ve inhibitör olan $da(CIO_2^-)$ klor dioksittir. U ile V sırasıyla aktivatör ve inhibitörün yoğunluklarını gösterir. CIMA reaksiyon modelinin gelişimi ve bazı deneysel verileri hakkında daha ayrıntılı bilgi için (Epstein and Pojman, 1998; Maini, et al., 1997) referanslarına bakılabilir.

1.2.2 Biyolojik modeller

U nun büyüme oranı $A(U)$, V nin ölüm oranı da $C(V)$ olsun. $k > 0$ olmak üzere U ile V arasındaki etkileşim $B(U, V)$ ile gösterilirse, biyolojik olayları modelleyen reaksiyon-difüzyon denklem sistemleri aşağıdaki gibi özetlenebilir:

Av-avcı modeli

U ile av, V ile de yırtıcı hayvanın gösterildiği varsayılırsa, doğadaki av ile onları avlayan yırtıcı hayvanlar arasındaki etkileşimi modelleyen bu sistemin genel hali

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + A(U) - B(U, V)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} - C(V) + kB(U, V)$$

şeklindedir.

Rekabet modeli

Bu modelde, canlı türleri, sınırlı yiyecek kaynağı için ya da birbirlerinin büyümesini engellemek için yarışır. Bu modelin genel hali

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + A(U) - B(U, V)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + C(V) - kB(U, V)$$

ile verilir.

Mutualizm modeli

Farklı iki canlının birbirinden, karşılıklı faydalandığı müşterek yaşama şeklinin modellendiği bu sistem aşağıdaki şekildedir:

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D_u \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - A(U) + B(U, V)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} = D_v \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} - C(V) - kB(U, V)$$

1.2.3 Turing kararsızlığı ve desen oluşturma

Denklemlerini incelemek, tek denklemlerine göre çok daha geniş olgu ve alışılmadık dışında bazı olayları da beraberinde getirir. Bu konuda önemli bulguların birisi Alan Turing tarafından 1952 yılında ortaya konmuştur (Turing, 1952). Basit ama önemli olan bu görüşe göre, difüzyon terimlerinin yokluğunda ($D_u = D_v = 0$) eğer U ile V bir doğrusal kararlı düzgülü sabit duruma yaklaşıyorlarsa, $D_u \neq D_v$ olmak üzere, difüzyon terimlerinin sisteme girmesi, belirli koşullar altında, konumsal olarak homojen olmayan desenlerin oluşmasına neden olur. Bu durum difüzyonun neden olduğu kararsızlık ya da Turing kararsızlığı olarak adlandırılır. Bir sistemde, difüzyon, genellikle bir düzgülüleştirme ve kararlılaştırma süreci olarak bilindiğinden Turing kararsızlığı olarak adlandırılan bu olgu, alışılmadık dışında bir durum olarak karşımıza çıkar. Difüzyon teriminin sistemi nasıl kararsız hale getirdiğini sezgisel

olarak görebilmek için, her ne kadar gerçek olmasa da, Murray'in (2003) çalışmasında yer alan aşağıdaki bilgi verici örneği düşünebiliriz.

Bir kuru ot tarlasında çok sayıda çekirgenin yaşadığını ve bu çekirgelerin, sıcak karşısında terleme yoluyla yoğun miktarda nem ürettiğini varsayalım. Şimdi, otların bazı noktalardan ateşe verildiğini ve alevlerin yayılmaya başladığını düşünelim. Burada çekirgeleri bir engelleyici (inhibitör), ateşi de bir uyarıcı (aktivatör) olarak düşünebiliriz. Eğer bölgede ateşi söndürecek hiç nem yoksa, yangın basitçe bütün bölgeye yayılacak ve düzgün kömürleşmiş bir alan ortaya çıkacaktır. Bununla birlikte, çekirgeler yeterince ısındığında otları ıslatmak için terleme yoluyla yeterince nem üretecek ve kuru otları ıslatacaktır. Böylece daha önceden ıslanmış bu bölgelere ateş ulaştığında otlar yanmadan kalacaklardır. Konumsal desen açısından bu senaryo şu şekilde verilebilir: Reaktantlardan birisi olan ateş, aktivatör, D_A difüzyon katsayısıyla yayılmaya başlasın. Diğer bir reaktant olan çekirgeler, inhibitör, kendilerine doğru gelen ateşten çok daha hızlı hareket ederek uzaklaşacaklardır. Yani onlar da bir D_C difüzyon katsayısına sahiptirler ve D_C katsayısı D_A dan çok daha büyüktür. Sonrasında çekirgeler bol miktarda terleyecek ve ateşin yayılmasını engelleyecek kadar nem üreterek buldukları bölgeyi ıslatacaklardır. Bu yolla kömürleşecek alan bir sonlu bölgeye sınırlanmış olur. Bu sonlu bölge reaktantların yani ateş ve çekirgelerin difüzyon katsayılarına ve çeşitli reaksiyon parametrelerine bağlıdır. Eğer bir tek başlangıç ateşi yerine ateşler rastgele saçılırsa, bu yanma süreci sonunda bölge içinde kömürleşmiş ve kömürleşmemiş alanların konumsal olarak nasıl heterojen sabit durumlu dağılım sergilediğini görebiliriz. Her ateşin etrafında yukarıdaki senaryo tekrar edeceğinden çekirgelerin konumsal dağılımları da görülebilir. Eğer çekirgeler ve ateş aynı hızda yayılırsa bu şekilde hiç bir konumsal desen oluşmayacaktır.

1.2.4 Turing kararsızlığı için gerekli ve yeterli koşullar

d difüzyon katsayılarının oranı olmak üzere (1.2) sisteminin

$$\begin{aligned}\frac{\partial U}{\partial t} &= \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \gamma f(U, V), \\ \frac{\partial V}{\partial t} &= d \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \gamma g(U, V)\end{aligned}\tag{1.3}$$

şeklindeki boyutsuzlaştırılmış halini dikkate alalım. (1.3) sistemi için başlangıç koşullarının

$$\begin{aligned}U(x, 0) &= a(x), \\ V(x, 0) &= b(x)\end{aligned}$$

formunda verildiğini ve sınır koşullarının da

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla) \begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix} = 0, \quad x \in \partial\Omega$$

şeklinde olduğunu kabul edelim. Burada, Ω reaksiyon-difüzyon bölgesini, $\partial\Omega$ bu bölgenin sınırını ve \mathbf{n} de birim normal vektörü temsil etmektedir.

Teorem: (u_0, v_0) , (1.3) sisteminin ilgili homojen sabit durumlu çözümü olsun. Bu durumda

$$f(u_0, v_0) = 0 \quad \text{ve} \quad g(u_0, v_0) = 0$$

eşitlikleri sağlanır. Buna göre Turing kararsızlığı için gerekli ve yeterli koşullar,

$$\begin{aligned}f_u + g_v &< 0, \\ f_u g_v - g_v g_u &> 0, \\ dg_u + g_v &> 0, \\ (dg_u + g_v)^2 - 4d(g_u g_v - g_v g_u) &> 0,\end{aligned}\tag{1.4}$$

olmasıdır. Burada f_u ve g_v zıt işaretli olmalıdırlar. $f_u > 0$, $g_v < 0$ alınırsa (1.4) eşitsizliklerindeki birinci ve üçüncü koşullar difüzyon katsayılarının oranı olan d için $d > 1$ olmasını gerektirir (Murray, 2003).

1.3 Test Problemleri

Bu bölümde, önerilen nümerik yöntemlerin test edilmesi amacıyla kullanılacak olan test problemleri tanımlandı. Bu bağlamda, bir tanesi analitik çözümleri bilinen bir

lineer problem diğeri ise lineer olmayan kimyasal sistemler olmak üzere beş problem üzerinde duruldu. Nümerik yöntemlerin doğruluğu incelenirken analitik çözümü bilinen lineer problem için

$$L_2 = \|U^{tam} - U^{yaklasik}\|_2 = \sqrt{h \sum_{j=0}^N (U_j^{tam} - U_j^{yaklasik})^2}, \quad (1.5)$$

$$L_\infty = \|U^{tam} - U^{yaklasik}\|_\infty = \max_j |U_j^{tam} - U_j^{yaklasik}|,$$

ile tanımlanan hata normları, tam çözümü olmayan reaksiyon-difüzyon sistemleri için de

$$\text{Bağlı Hata} = \sqrt{\frac{\sum_{j=0}^N |U_j^{n+1} - U_j^n|^2}{\sum_{j=0}^N |U_j^{n+1}|^2}} \quad (1.6)$$

şeklindeki bağlı hata kullanıldı.

1.3.1 Lineer problem

(1.2) sisteminde $F(U, V)$ ve $G(U, V)$ reaksiyon terimlerinin daima lineer olmayan terimler oldukları ifade edilmişti. Ancak bu terimlerin lineer olmadığı durumlarda (1.2) sisteminin uygun analitik çözümlerinin sınırlılığı nedeniyle, yöntemlerin ürettiği hatalar için L_2 ve L_∞ normlarını hesaplamak mümkün olmamaktadır. Nümerik hesaplamalar için uygun analitik çözümünün varlığı dolayısıyla, bu problem nümerik yöntemlerin hatalarını inceleyebilmek için dikkate alındı.

$$\frac{\partial U}{\partial t} = d \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - aU + V \quad (1.7)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} = d \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} - bV$$

ile verilen denklem sistemi bir lineer reaksiyon-difüzyon denklem sistemidir. (1.7) sisteminin bilinen analitik çözümleri

$$\begin{aligned} U(x, t) &= (e^{-(a+d)t} + e^{-(b+d)t}) \cos(x) \\ V(x, t) &= (a - b) e^{-(b+d)t} \cos(x) \end{aligned} \quad (1.8)$$

şeklinde dir.

(1.7) sisteminin başlangıç koşulu, (1.8) çözümlerinde $t = 0$ alınmasıyla elde edilebilir. Çözüm bölgesi olarak $\left(0, \frac{\pi}{2}\right)$ aralığı seçildiğinde sınır koşulları,

$$\begin{aligned} U_x(0, t) &= 0, & U(\pi/2, t) &= 0, \\ V_x(0, t) &= 0, & V(\pi/2, t) &= 0 \end{aligned} \quad (1.9)$$

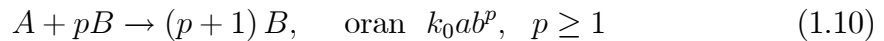
şeklinde ifade edilir.

Nümerik hesaplamalarda, program $t = 1$ zamanına kadar çalıştırılarak, bazı N ve Δt değerleri için elde edilen sonuçlar karşılaştırılacaktır. Ayrıca denklemde yer alan a , b ve d katsayılarının farklı seçimleriyle ortaya çıkan sistemlerde, reaksiyon ve difüzyon mekanizmaları irdelenecektir.

Chou ve arkadaşları (2007) reaksiyon-difüzyon denklem sistemlerinin nümerik çözümleri için iki algoritma geliştirmişler ve test problemlerinde de (1.7) sistemine yer vermişlerdir. Geliştirdikleri algoritmaların ilkinde her zaman lineer olan difüzyon terimini tam olarak integre ederken lineer olmayan reaksiyon terimi için kapalı formda bir yaklaşım yapmışlardır. İkinci yöntemlerinde ise hem reaksiyon hem de difüzyon terimlerine kapalı formda ikinci mertebeden Crank-Nicolson yaklaşımı yaparak ortaya çıkan denklem sisteminde multi-grid yöntemini kullanmışlardır. Yaptıkları karşılaştırmada (1.7) sistemi için önerdikleri ilk metodun difüzyon baskın durumda daha yüksek doğrulukta sonuçlar vermesine karşın reaksiyon baskın durumlarda her iki yöntemin de aynı sonuçları ürettiğini gözlemlemişlerdir.

1.3.2 Otokatalitik kimyasal sistem

Otokatalik kimyasal reaksiyonu,



şeklinde verilir. Burada a ile b sırasıyla A reaktantı ile B otokatalizörünün yoğunluklarını ve k_0 da oran sabitini göstermektedir. (1.10) sistemi, $p = 1$ için kuadratik otokataliz ve $p = 2$ için de kübik otokataliz olarak isimlendirilir. Her iki durum için de detaylı bilgiler (Billingham and Needham, 1991, 1992; Needham and Merkin, 1992) referanslarında bulunabilir. Daha genel durumlar için ise (Merkin and Needham, 1993) referansına bakılabilir.

(1.10) şeklindeki reaksiyonlar, uygun başlangıç koşulları altında, ilerleyen dalgaları temsil ederler. $p = 1$ için (1.10) reaksiyonunun modellendiği denklem sistemi

$$\frac{\partial a}{\partial t} = D_A \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + M_A (a_0 - a) - k_0 ab \quad (1.11)$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 b}{\partial x^2} - M_B b + k_0 ab$$

şeklindedir. Burada D_A , D_B ve M_A , M_B sırasıyla A reaktantı ile B katalizörünün difüzyon katsayıları ve kütle transfer katsayılarıdır. b_0 bir pozitif sabit ve $g(x)$ de, $[0, \infty]$ aralığının $[0, L]$ şeklindeki bir sonlu alt aralığı dışında sıfır olacak şekilde, B için bir yerel girdiyi göstermektedir. Buna göre (1.11) sisteminin başlangıç şartı

$$\begin{aligned} a(x, 0) &= a_0, \\ b(x, 0) &= b_0 g(x) \end{aligned} \quad (1.12)$$

ile ve sınır koşulları da $t > 0$ için

$$\begin{aligned} x = 0 \text{ için } a_x &= b_x = 0 \\ x \rightarrow \infty \text{ iken } a &\rightarrow a_0, \quad b \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (1.13)$$

ile verilir. (1.11) sistemiyle ilgili daha detaylı bilgi için (Finlayson and Merkin, 1997) referansına bakılabilir.

Bu tezde, yukarıda genel hatlarıyla anlatılan otokataliz sisteminin Merkin ve arkadaşları (1989) tarafından verilen

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - UV \quad (1.14)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} = \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} - kV + UV$$

şeklindeki özel durumu incelenecektir. (1.14) reaksiyon-difüzyon denklem sistemi bir izotermal kimyasal sistemdir. Buradaki $U = U(x, t)$ ve $V = V(x, t)$ fonksiyonları sırasıyla A ve B gibi iki reaktantın boyutsuzlaştırılmış yoğunlukları, $k > 0$ ise boyutsuzlaştırma parametresidir. (1.14) sistemindeki lineer olmayan UV terimi kuadratik otokatalizi modellerken $-kV$ terimi B reaktantındaki lineer azalmayı gösterir. (1.14) sisteminin ilerleyen dalga çözümünün varlığı için gerekli koşul $k < 1$

olmasıdır ve bu çözümlerin asimtotik hızı $2(1-k)^{1/2}$ şeklindedir (Merkin, et al., 1989). Asimtotik hız kavramı ilk olarak Aronson ve Weinberger (1975) tarafından reaksiyon difüzyon denklemleri için ortaya konmuştur. Bu kavram, c^* hızıyla yayılan bir salgın modeli üzerinde, sezgisel bir anlatımla, şu şekilde ifade edilebilir: $c > c^*$ olacak şekilde bir c hızıyla hareket eden birisi salgını geride bırakacak, öte yandan $c < c^*$ olacak şekilde bir c hızıyla hareket eden birisi ise salgın tarafından kuşatılacaktır (Wu and Liu, 2009).

Nümerik yöntemlerde, (1.14) sisteminin başlangıç koşulu olarak

$$\begin{aligned} \text{Her } x \text{ için } \quad U(x, 0) &= 1, \\ V(x, 0) &= \begin{cases} \exp(-x^2), & |x| \leq L \\ 0, & |x| > L \end{cases} \end{aligned} \quad (1.15)$$

seçildi. Bu seçimde A reaktantı sonsuz genişlikte birim olarak alınmıştır yani düzgün yoğunluğa sahiptir. Bu yoğunluğa yerel olarak bir miktar B reaktantı ilave edilmiştir. A ve B reaktantlarının reaksiyona girmesi sonrasında A ve B nin yoğunlukları değişir. Bu değişimde difüzyonun etkisiyle B reaktantı, bu başlangıç bölgesinden dışarıya doğru hareket eden reaksiyon-difüzyon dalgalarını netice verecek şekilde yayılım gösterir (Merkin, et al., 1989).

(1.14) sisteminin sınır koşulları olarak da

$$\begin{aligned} U_x(x_0, t) &= 0, \quad U(x_N, t) = 1, \\ V_x(x_0, t) &= 0, \quad V(x_N, t) = 0, \end{aligned} \quad (1.16)$$

alındı.

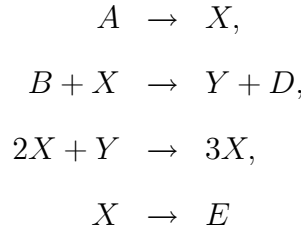
(1.14) sisteminin, $k < 1$ için asimtotik hızı $2(1-k)^{1/2}$ olan ilerleyen dalga çözümleri ürettiği (Merkin, et al., 1989) referansında ifade edilmiştir. Problemin çözüm bölgesi, herhangi bir reaksiyon-difüzyon dalgasının oluşması ve bu dalganın asimtotik hıza ulaşması için yeterli olacak şekilde seçilmelidir.

Twizell ve arkadaşları (1994) (1.14) kimyasal sisteminin nümerik çözümleri için sonlu farklar yöntemini kullanmışlar ve hesaplama maliyeti açısından ekonomik olan bu yöntemle sistemin ilerleyen dalga çözümlerini elde etmişlerdir. Lopez ve Ramos (1996) aynı sistem üzerinde kısmi lineerleştirilmiş, üçgensel ve köşegen θ -metotlarını uygulayarak elde ettikleri sonuçları karşılaştırmaya tâbi tutmuşlardır.

1.3.3 Brusselator modeli

Brusselator modeli, üç molekül kimyasal reaksiyonunu modelleyen bir genel reaksiyon-difüzyon denklem sistemidir. İlk olarak, Prigogine ve Lefever (1968) tarafından, iki değişkenli otokatalitik reaksiyonu gösteren bir sistem olarak ortaya konmuştur. Turing kararsızlığını sergileyen en basit reaksiyon-difüzyon denklem sistemlerinden birisi olmasından dolayı bu model üzerine geniş çalışmalar yapılmış ve sistem hem analitik hem de nümerik olarak incelenmiştir.

Farazi üç molekül reaksiyonunu modelleyen bu sistem için dört adımdan oluşan reaksiyon süreci,

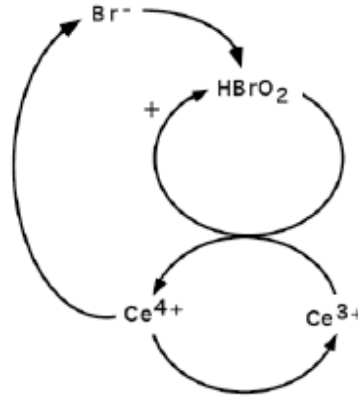


şeklinde verilir. Brusselator modelinin şematik gösterimi Şekil 1.2 de görülmektedir. Bu sistem için global reaksiyon $A + B \rightarrow D + E$ dir ve bu da A ile B girdilerinin D ile E çıktılarına dönüşmesi anlamına gelir. Brusselator modelinin yukarıda verilen reaksiyon adımlarının matematiksel karşılıkları Tablo 1.1 de görülmektedir. Bu reaksiyon adımlarından 3. adımda, 2 tane X molekülünün 3 tane X molekülüne dönüştüğü görülmektedir. Bu nedenle bu adım bir otokatalitik süreci temsil eder. Brusselator modelindeki kimyasal salımların kaynağı bu otokatalitik süreçtir. Bu adım aynı zamanda inhibitör özelliğine de sahiptir. Çünkü Y molekülünün ortaya koyması gereken reaksiyon engellenmektedir.

Genelliği bozmadan, oran sabitlerinin birim kabul edilmesi durumunda yukarıdaki reaksiyona karşılık gelen reaksiyon-difüzyon denklem sistemi

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial t} &= \varepsilon_1 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + A + U^2 V - (B + 1)U, \\ \frac{\partial V}{\partial t} &= \varepsilon_2 \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + BU - U^2 V \end{aligned} \tag{1.17}$$

ile ifade edilir.



Şekil 1.2: Brusselator reaksiyonu

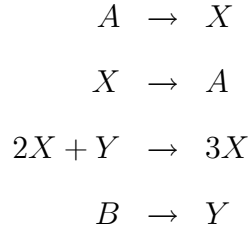
Tablo 1.1: Brusselator modelinde reaksiyon adımları

Adım	Reaksiyon	Matematiksel ifade
1	$A \xrightarrow{k_1} X,$	$\frac{\partial A}{\partial t} = -k_1 A$ $\frac{\partial U}{\partial t} = k_1 A$
2	$B + X \xrightarrow{k_2} Y + D,$	$\frac{\partial B}{\partial t} = -k_2 BU$ $\frac{\partial U}{\partial t} = -k_2 BU$ $\frac{\partial V}{\partial t} = k_2 BU$ $\frac{\partial D}{\partial t} = k_2 BU$
3	$2X + Y \xrightarrow{k_3} 3X,$	$\frac{\partial U}{\partial t} = k_3 U^2 V$ $\frac{\partial V}{\partial t} = -k_3 U^2 V$
4	$X \xrightarrow{k_4} E$	$\frac{\partial U}{\partial t} = -k_4 U$ $\frac{\partial E}{\partial t} = k_4 U$

1970 li yıllarda konumsal desenlerin keşfedilmesinden sonra, Brusselator modelindeki çeşitli Turing desenleri bir, iki ve üç boyutlu problemlerde analitik ve nümerik olarak incelenmiş ve benekli, çizgili, labirentli ve altıgenli desenler üzerine çalışmalar yayınlanmıştır (De Wit, et al., 1997; De Wit, 1999; Erneux and Reiss, 1983; Nicolis and Prigogine, 1977; Pena and Garcia, 2001). Yakın zamanda, Brusselator modeli için masa şekilli desenler üzerine bir çalışma Kolokolnikov ve arkadaşları (2006) tarafından yayınlanmıştır.

1.3.4 Schnakenberg modeli

En çok bilinen reaksiyon-difüzyon modellerinden birisi olan Schnakenberg modeli, Brusselator modelinin basitleştirilmiş bir halidir. İlk olarak Schnakenberg (1979) tarafından,

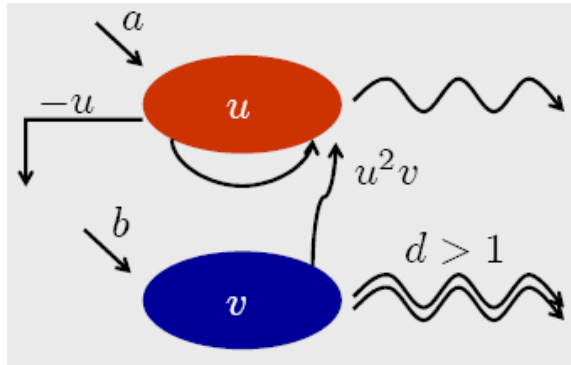


şeklindeki farazi üç molekül otokatalitik reaksiyonun modellendiği bu sistem, kütle korunumu kanununun kullanılmasıyla matematiksel olarak boyutsuzlaştırılmış formda

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \nabla^2 U + \gamma (a - U + U^2 V) \quad (1.18)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} = d \nabla^2 V + \gamma (b - U^2 V)$$

şeklinde ifade edilir. Burada a , b , d ve γ pozitif parametrelerdir. Lineer olmayan $U^2 V$ terimi, U nun aktivasyonunu, V nin de tükenişini temsil eder. Schnakenberg reaksiyonunun işleyiş mekanizması Şekil 1.3 de görülmektedir.



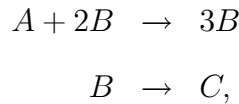
Şekil 1.3: Schnakenberg reaksiyonu

Reaksiyon-difüzyon mekanizmasını modelleyen nispeten kolay bir sistem olmasından dolayı Schnakenberg modeli üzerine literatürde pek çok çalışma vardır. Murray (2003) yazdığı kitabında, (1.18) sistemini detaylı şekilde incelemiştir. Ruuth (1995)

yaptığı çalışmada, reaksiyon-difüzyon denklem sistemlerinin nümerik çözümleri için önerdiği açık ve kapalı sonlu farklar yönteminde test problemi olarak (1.18) sistemini dikkate almış ve salınım problemi üzerine çalışmıştır. Aynı problem, Madzvamuse (2006) tarafından hareket eden grid üzerinde sonlu elemanlar yaklaşımıyla çözülmüştür. Her iki çalışmada da salınım problemi için birinci mertebeden Euler yönteminin zaman ayrıştırmasında yeterli doğrulukta sonuç üretmediği vurgulanmıştır. Zaman içerisinde genişleyen çözüm bölgesi üzerinde bir boyutlu Schnakenberg denklem sistemi Barrass ve arkadaşları (2006) tarafından, iki boyutlu denklem sistemi de Madzvamuse ve arkadaşları (2003) tarafından çözülmüştür.

1.3.5 Gray-Scott modeli

Gray-Scott modeli, doğada var olan bazı konumsal desenlerin bir kaç kimyasal tür tarafından oluşturulmasını modelleyen bir reaksiyon-difüzyon sistemidir. İlk olarak, Gray ve Scott (1984) tarafından ortaya konan bu model, A , B , C gibi üç farklı kimyasal türün



şeklindeki bir kimyasal reaksiyonuna karşılık gelir. Buradaki reaksiyonların her ikisi de tek yönlüdür. Bu nedenle C ürünü bir âtil türündür. B kimyasalı her iki reaksiyonda da yer aldığından dolayı kendi ürünü için bir katalizör görevi görür.

A kimyasalının yoğunluğu U ile B kimyasalının yoğunluğu da V ile gösterilirse Gray-Scott reaksiyonunu modelleyen matematiksel sistem boyutsuzlaştırılmış formda

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \varepsilon_1 \nabla^2 U - UV^2 + f(1 - U) \tag{1.19}$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} = \varepsilon_2 \nabla^2 V + UV^2 - (f + k)V$$

ile ifade edilir. Buradaki ε_1 ve ε_2 katsayıları reaksiyon sürecindeki difüzyon oranlarını, k sayısı B nin C ye dönüşme oranını ve f de geriye kalan A ile tükenen A , B , C kimyasallarının oranını göstermektedir.

(1.19) sisteminde birinci denklem, U da meydana gelen artışın zamana göre değişimini gösterir. Bu denklemde yer alan üç terimden ilki, $\varepsilon_1 \nabla^2 U$, difüzyon terimidir. Bu terim, U da meydana gelen artışın, U nun Laplası ile orantılı olacağını belirtir. Eğer bir bölgede A kimyasalının miktarı artıyorsa o bölgede $\nabla^2 U$ terimi pozitif demektir ve U da artacaktır. Diğer yandan, bir bölgedeki A kimyasalının yoğunluğu azalıyorsa, bu durumda $\nabla^2 U$ terimi negatiftir ve U azalacaktır. Bu süreç sadece difüzyon terimini içeren bir denklemle ifade edilmek istenirse

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \varepsilon_1 \nabla^2 U$$

şeklindeki ısı denklemi elde edilir.

Sistemde yer alan ikinci terim $-UV^2$ terimidir. Bu terim reaksiyon oranını gösterir. Gray-Scott sisteminin modellediği yukarıdaki reaksiyon sürecinin ilk basamağında, 1 tane A molekülü 2 tane de B molekülü gerekmektedir. Bu şekildeki bir reaksiyon, A nin yoğunluğu ile B nin yoğunluğunun karesinin çarpılması ile gösterilir. Bu da UV^2 terimini ortaya çıkarır. Bu reaksiyonda A kimyasalı B ye dönüştüğünden V deki artış U daki azalışa eşit olacaktır. Bu da ikinci denklemde UV^2 teriminin pozitif işaretli olarak yer alması demektir. Reaksiyon teriminin önünde bir sabit katsayının bulunmaması, sistemde yer alan diğer terimlerin katsayıları ile yapılan düzenlemeden dolayıdır.

(1.19) sisteminin birinci denklemdeki son terim, $f(1 - U)$ ile verilen yeniden türetme terimidir. Reaksiyon esnasında A kimyasalı tükenerek B kimyasalını oluşturduğundan, A kimyasalını yeniden türetecek bir yol olmadıkça bütün A kimyasalları tükenecektir. Denklemde yer alan bu yeniden türetme terimi, U büyüklüğünün, mevcut değeri ile 1 arasındaki farkla orantılı olacak şekilde artacağını ifade eder. Sonuç olarak, denklemdeki diğer iki terim hiç bir etki göstermese bile, U nun maksimum değeri 1 olacaktır. Buradaki f sabiti, yeniden türetme oranını gösterir.

İkinci denklemde yer alan terimlerin sadece üçüncüsü ilk denklemden farklılık göstermektedir. $-(f + k)V$ ile verilen bu terim, bir sınırlama terimidir. Bu terim olmadığı takdirde B kimyasalının yoğunluğu bir sınırlama olmaksızın artacaktır. Uzun zaman diliminde bu artışın meydana getireceği yoğunlaşma mazur görülse bile bu artış doğal olarak sistemin dışına taşmayı netice verecektir. $-(f + k)V$ sınırlama

terimi, B nin mevcut yoğunluğu ve iki sabitin, f ve k , toplamıyla orantılıdır. f yukarıda olduğu gibi A kimyasalı için ortamın geçirgenliğini gösterirken, k da bu oran ile B için olan oran arasındaki farkı gösterir.

Pearson (1993) yaptığı nümerik çalışmasında, iki boyutlu (1.19) sistemini dikkate almış ve bütün çözüm bölgesini kaplayıncaya kadar kendini tekrarlayan spot desenlerini gözlemlemiştir. Bir boyutlu problem üzerinde, kendini tekrarlayan spot desenleri, (Reynolds, et al., 1994) referansında çalışılmıştır. Reynolds ve arkadaşları, yaptıkları bu çalışmada, kendini tekrarlayan spot desenini şu şekilde tarif etmişlerdir: Tek bir spot önce bölünür ve iki yeni spot oluşur daha sonra bunlar da bölünür ve yeni spotlar ortaya çıkar. Bu bölünme işlemi bütün çözüm bölgesini kaplayana kadar devam eder. Doelman ve arkadaşları (1997), Gray-Scott modeli için detaylı bir çalışma ortaya koyarak, durağan ve ilerleyen desenler için elde ettikleri teorik sonuçları, nümerik olarak da simüle etmişlerdir. Bunu takip eden çalışmada ise Doelman ve arkadaşları (1998) bir boyutlu Gray-Scott modelini dikkate alarak singüler desenler için lineer kararlılık analizi üzerinde durmuşlardır. (1.19) sisteminin hareket eden grid üzerindeki nümerik çözümleri, Zegeling ve Kok (2004) tarafından verilmiştir. Yaptıkları çalışmalarında nümerik yöntem olarak sonlu farklar yöntemini kullanan Zegeling ve Kok (2004), hem bir boyutlu hem de iki boyutlu Gray-Scott sisteminin nümerik çözümlerini elde etmişlerdir.

1.4 Nümerik Çözümler için Model Sistem

Bu kısımda, nümerik çözümleri verilecek olan reaksiyon difüzyon denklem sistemleri için test problemi olarak tanıtılan sistemlerin bütünü kapsayacak şekilde bir model sistem oluşturulması amaçlandı. Oluşturulan bu sistemde yer alan lineer olmayan terimler lineerleştirilerek, bu tez çalışmasında önerilen nümerik tekniklerin seçilen modele uygulanabilirliği sağlandı. Ayrıca, (1.4) ile verilen, Turing kararsızlığı için gerekli ve yeterli şartların model sistem üzerinde oluşturduğu koşullar elde edildi.

1.4.1 Model sistemin oluşturulması

Yukarıda tanımlanan (1.7), (1.14), (1.17), (1.18) ve (1.19) modellerinin tamamını içerecek şekilde bir reaksiyon-difüzyon denklem sistemi, bir boyutlu olarak

$$\frac{\partial U}{\partial t} = a_1 \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + b_1 U + c_1 V + d_1 U^2 V + e_1 UV + m_1 UV^2 + n_1 \quad (1.20)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} = a_2 \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + b_2 U + c_2 V + d_2 U^2 V + e_2 UV + m_2 UV^2 + n_2$$

şeklinde ifade edilebilir. (1.20) sisteminin

$$U(x, 0) = U_0(x), \quad x \in \Omega$$

$$V(x, 0) = V_0(x), \quad x \in \Omega$$

formundaki başlangıç şartı ve nümerik yöntemlerde kullanılacak sınır koşulları ilerleyen bölümlerde her problemin kendi karakterine göre ayrıca belirtilecektir.

Test problemlerini netice verecek şekilde, (1.20) model sisteminde katsayı düzenlemesi Tablo 1.2 de görülmektedir.

Tablo 1.2: Model sisteminde katsayı düzenlemesi ($B' = B + 1$, $f' = f + k$)

Test Problemi	a_1	a_2	b_1	b_2	c_1	c_2	d_1	d_2	e_1	e_2	m_1	m_2	n_1	n_2
Lineer	d	d	$-a$	0	1	$-b$	0	0	0	0	0	0	0	0
İzotermal	1	1	0	0	0	$-k$	0	0	-1	1	0	0	0	0
Brusselator	ε_1	ε_2	$-B'$	B	0	0	1	-1	0	0	0	0	A	0
Schnakenberg	1	d	$-\gamma$	0	γ	$-\gamma$	0	0	0	0	0	0	γa	γb
Gray-Scott	ε_1	ε_2	$-f$	0	$-f'$	0	0	0	0	0	-1	1	f	0

1.4.2 Turing analizi

Turing kararsızlığı için boyutsuzlaştırılmış formda (1.4) ile verilen şartlar, model sistem üzerinde uygulanırsa aşağıdaki koşullar elde edilir:

$$(I) \quad \frac{\partial F}{\partial U} + \frac{\partial G}{\partial V} < 0$$

$$b_1 + c_2 + e_2U + d_2U^2 + e_1V + m_1V^2 + 2(d_1 + m_2)UV < 0,$$

$$(II) \quad \frac{\partial F}{\partial U} \frac{\partial G}{\partial V} - \frac{\partial F}{\partial V} \frac{\partial G}{\partial U} > 0$$

$$\begin{aligned} & (d_1e_2 - e_1d_2)U^2V + (e_1m_2 - m_1e_2)UV^2 + 2(b_1m_2 + d_1c_2 - c_1d_2 - m_1b_2)UV \\ & + (b_1d_2 - d_1b_2)U^2 + (m_1c_2 - c_1m_2)V^2 + (b_1e_2 - e_1b_2)U + (e_1c_2 - c_1e_2)V \\ & + 3(d_1m_2 - m_1d_2)U^2V^2 + b_1c_2 - c_1b_2 > 0, \end{aligned}$$

$$(III) \quad D_U \frac{\partial G}{\partial V} + D_V \frac{\partial F}{\partial U} > 0$$

$$a_1c_2 + a_2b_1 + a_1e_2U + a_1d_2U^2 + a_2e_1V + a_2m_1V^2 + 2(a_2d_1 + a_1m_2)UV > 0,$$

$$(IV) \quad \left(D_U \frac{\partial G}{\partial V} + D_V \frac{\partial F}{\partial U} \right)^2 - 4 \left(D_u D_v \left(\frac{\partial F}{\partial U} \frac{\partial G}{\partial V} - \frac{\partial F}{\partial V} \frac{\partial G}{\partial U} \right) \right) > 0,$$

$$\begin{aligned} & 2(a_1^2c_2e_2 - a_1e_2a_2b_1 + 2a_1a_2e_1b_2)U \\ & + (2a_1^2c_2d_2 + a_1^2e_2^2 + 4a_1a_2d_1b_2 - 2a_1d_2a_2b_1)U^2 \\ & + 2a_1^2d_2e_2U^3 + a_1^2d_2^2U^4 + 2(a_2^2b_1e_1 - a_1c_2a_2e_1 + 2a_1a_2c_1e_2)V \\ & + (2a_2^2b_1m_1 + a_2^2e_1^2 - 2a_1c_2a_2m_1 + 4a_1a_2c_1m_2)V^2 + 2a_2^2e_1m_1V^3 + a_2^2m_1^2V^4 \\ & + (4a_1^2c_2m_2 - 4a_1c_2a_2d_1 + 2a_1e_2a_2e_1)UV \\ & + (8a_1a_2c_1d_2 + 8a_1a_2m_1b_2 - 4a_1m_2a_2b_1 + 4a_2^2b_1d_1)UV \\ & + (14a_1d_2a^2m_1 + 4a_1^2m_2^2 + 4a_2^2d_1^2 - 4a_1m_2a_2d_1)U^2V^2 \\ & + (4a_1^2e_2m_2 + 6a_1d_2a_2e_1)U^2V + (4a_1^2d_2m_2 + 4a_1d_2a_2d_1)U^3V \\ & + (4a_2^2d_1e_1 + 6a_1e_2a_2m_1)UV^2 + (4a_2^2d_1m_1 + 4a_1m_2a_2m_1)UV^3 \\ & + 4a_1a_2c_1b_2 - 2a_1c_2a_2b_1 + a_1^2c_2^2 + a_2^2b_1^2 > 0. \end{aligned}$$

(1.20) sisteminde katsayıların uygun biçimde düzenlenmesiyle, elde edilen bu koşullar aşağıda verildiği şekilde her bir test probleminin karakterine göre ayrı ayrı belirlenebilir.

Schnakenberg modeli: Boyutsuzlaştırılmış formda (1.18) sistemi ile verilen reaksiyon için ilk olarak denge çözümlerini bulalım. Problemin denge çözümleri,

$$F(U, V) = a - U + U^2V \quad \text{ve} \quad G(U, V) = b - U^2V$$

olmak üzere

$$F(u_0, v_0) = 0 \quad \text{ve} \quad G(u_0, v_0) = 0 \quad (1.21)$$

olacak şekildeki pozitif (u_0, v_0) çözümleridir. Buna göre, (1.21) eşitliklerinden

$$\left. \begin{array}{l} a - u_0 + u_0^2v_0 = 0 \\ b - u_0^2v_0 = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow u_0 = a + b \quad \text{ve} \quad v_0 = \frac{b}{(a + b)^2}$$

çözümleri bulunur. Ayrıca, u_0 ve v_0 in pozitifliği $a + b > 0$ ve $b > 0$ olmasını gerektirir. Böylece, denge noktasında F ve G nin kısmi türevleri

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial F}{\partial U} \right]_{(U,V)=(u_0,v_0)} &= \frac{b - a}{a + b} \\ \left[\frac{\partial F}{\partial V} \right]_{(U,V)=(u_0,v_0)} &= (a + b)^2 \\ \left[\frac{\partial G}{\partial U} \right]_{(U,V)=(u_0,v_0)} &= \frac{-2b}{a + b} \\ \left[\frac{\partial G}{\partial V} \right]_{(U,V)=(u_0,v_0)} &= -(a + b)^2 \end{aligned}$$

şeklinde yazılabilir. F_U ve G_V nin zıt işaretli olmak zorunda olduğu yukarıda belirtilmiştir. Bu durum $b > a$ olmasını gerektirir.

(1.20) model sisteminde katsayılar Schnakenberg reaksiyonunu netice verecek şekilde düzenlenirse (u_0, v_0) denge noktasında Turing kararsızlığı için gerekli ve yeterli şartlar

$$\begin{aligned} \text{(I)} \quad F_U + G_V < 0 & \Rightarrow b - a < (a + b)^3, \\ \text{(II)} \quad F_U G_V - F_V G_U > 0 & \Rightarrow (a + b)^2 > 0, \\ \text{(III)} \quad D_U \frac{\partial G}{\partial V} + D_V \frac{\partial F}{\partial U} > 0 & \Rightarrow d(b - a) > (a + b)^3, \\ \text{(IV)} \quad \left(D_U \frac{\partial G}{\partial V} + D_V \frac{\partial F}{\partial U} \right)^2 > & \\ 4 \left(D_u D_v \left(\frac{\partial F}{\partial U} \frac{\partial G}{\partial V} - \frac{\partial F}{\partial V} \frac{\partial G}{\partial U} \right) \right) & \Rightarrow (d(b - a) - (a + b)^3)^2 > 4d(a + b)^3 \end{aligned}$$

şeklinde düzenlenir. Bu eşitsizlikler, (a, b, d) parametre uzayında bir bölge tanımlar. Tanımlanan bu bölge desen oluşturma uzayı ya da Turing uzayı olarak adlandırılır.

Gray-Scott modeli: (1.19) sisteminin denge çözümlerini elde etmek için

$$F(U, V) = f(1 - U) - UV^2 \quad \text{ve} \quad G(U, V) = UV^2 - (f + k)V$$

kabul edelim. Buna göre (u_0, v_0) bir denge çözümü ise

$$f(1 - u_0) - u_0 v_0^2 = 0 \quad \text{ve} \quad u_0 v_0^2 - (f + k)v_0 = 0$$

eşitlikleri sağlanır. Buradan,

$$\begin{aligned} f(1 - u_0) &= (f + k)v_0 \\ u_0 v_0 &= (f + k) \end{aligned}$$

denklemleri elde edilir. Bu iki denklemin ikisinden de v_0 çekilerek ifadeler eşitlenirse u_0 için

$$u_{1,2} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \sqrt{1 - 4 \frac{(f + k)^2}{f}} \right]$$

eşitlikleri bulunur. Bu değerlere karşılık gelen v_0 çözümleri ise

$$v_{1,2} = \frac{f}{2(f + k)} \left[1 \mp \sqrt{1 - 4 \frac{(f + k)^2}{f}} \right]$$

şeklinde olur. Bu çözümlerin Turing kararsızlığı için gerekli ve yeterli koşullarda kullanılmasıyla da, Gray-Scott sisteminin Turing uzayı elde edilmiş olur.

Brusselator modeli: Yukarıda yapılan işlemler Brusselator modeli için de benzer şekilde takip edildiğinde, denge çözümü olarak

$$(u_0, v_0) = \left(A, \frac{B}{A} \right)$$

bulunur. Bu çözümün Turing koşullarında kullanılmasıyla da Brusselator modeli için $\varepsilon_1, \varepsilon_2, A$ ve B parametrelerinin Turing uzayı belirlenmiş olur.

1.4.3 Zaman ayrıştırması ve lineerleştirme

(1.20) model sisteminin zaman ayrıştırması

$$U_t = \frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t}, \quad U = \frac{U^{n+1} + U^n}{2} \quad (1.22)$$

$$V_t = \frac{V^{n+1} - V^n}{\Delta t}, \quad V = \frac{V^{n+1} + V^n}{2}$$

eşitlikleriyle verilen Crank-Nicolson formülleri kullanılarak yapılacaktır. Buna göre (1.22) ifadeleri, (1.20) sisteminde yerlerine yazılarak gerekli düzenlemeler yapılırsa

$$\beta m_1 U^{n+1} - \frac{a_1}{2} U_{xx}^{n+1} + \beta m_2 V^{n+1} = \beta m_3 U^n + \frac{a_1}{2} U_{xx}^n + \frac{c_1}{2} V^n + \beta m_4, \quad (1.23)$$

$$\beta m_5 U^{n+1} + \beta m_6 V^{n+1} - \frac{a_2}{2} V_{xx}^{n+1} = \frac{b_2}{2} U^n + \beta m_7 V^n + \frac{a_2}{2} V_{xx}^n + \beta m_8$$

denklemlerini bulunur. Burada

$$\beta m_1 = \frac{1}{\Delta t} - \frac{b_1}{2} - d_1 Z m_1 - e_1 Z m_4 - m_1 Z m_7,$$

$$\beta m_2 = -\frac{c_1}{2} - d_1 Z m_2 - e_1 Z m_5 - m_1 Z m_8,$$

$$\beta m_3 = \frac{1}{\Delta t} + \frac{b_1}{2},$$

$$\beta m_4 = d_1 Z m_3 + e_1 Z m_6 + m_1 Z m_9 + n_1,$$

$$\beta m_5 = -\frac{b_2}{2} - d_2 Z m_1 - e_2 Z m_4 - m_2 Z m_7,$$

$$\beta m_6 = \frac{1}{\Delta t} - \frac{c_2}{2} - d_2 Z m_2 - e_2 Z m_5 - m_2 Z m_8,$$

$$\beta m_7 = \frac{1}{\Delta t} + \frac{c_2}{2},$$

$$\beta m_8 = d_2 Z m_3 + e_2 Z m_6 + m_2 Z m_9 + n_2$$

şeklindedir. (1.23) sistemi lineer bir sistemdir. Buradaki $Z m_1, Z m_2, Z m_3, Z m_4, Z m_5, Z m_6, Z m_7, Z m_8$ ve $Z m_9$ terimleri (1.20) sistemindeki lineer olmayan $U^2 V, UV$

ve UV^2 terimlerinin lineerleştirilmesi ile ortaya çıkan katsayılarıdır. Bu katsayıların değerleri, aşağıda verilen lineerleştirme tekniğinde görülmektedir.

$$\begin{aligned}
U^2V &= \left(\frac{U^{n+1} + U^n}{2} \right)^2 \cdot \left(\frac{V^{n+1} + V^n}{2} \right) \\
&= \frac{1}{8} \left[(U^{n+1})^2 + 2U^{n+1}U^n + (U^n)^2 \right] \cdot [V^{n+1} + V^n] \\
&= \frac{1}{8} \left[(U^{n+1}V^n + 2U^nV^n) U^{n+1} + (U^{n+1} + U^n)^2 V^{n+1} + (U^n)^2 V^n \right] \\
&= \frac{1}{8} \left[((U^n + \Delta t U_t^n) V^n + 2U^n V^n) U^{n+1} + ((U^n + \Delta t U_t^n) + U^n)^2 V^{n+1} + (U^n)^2 V^n \right] \\
&= \underbrace{\frac{1}{8} (3U^n + \Delta t U_t^n) V^n U^{n+1}}_{Zm_1} + \underbrace{\frac{1}{8} (2U^n + \Delta t U_t^n)^2 V^{n+1}}_{Zm_2} + \underbrace{\frac{1}{8} (U^n)^2 V^n}_{Zm_3} \\
&= Zm_1 U^{n+1} + Zm_2 V^{n+1} + Zm_3
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
UV &= \left(\frac{U^{n+1} + U^n}{2} \right) \cdot \left(\frac{V^{n+1} + V^n}{2} \right) \\
&= \frac{1}{4} [U^{n+1}V^{n+1} + U^{n+1}V^n + U^nV^{n+1} + U^nV^n] \\
&= \frac{1}{4} [U^{n+1}V^n + (U^{n+1} + U^n) V^{n+1} + U^nV^n] \\
&= \frac{1}{4} [U^{n+1}V^n + ((U^n + \Delta t U_t^n) + U^n) V^{n+1} + U^nV^n] \\
&= \underbrace{\frac{1}{4} V^n U^{n+1}}_{Zm_4} + \underbrace{\frac{1}{4} (2U^n + \Delta t U_t^n) V^{n+1}}_{Zm_5} + \underbrace{\frac{1}{4} U^n V^n}_{Zm_6} \\
&= Zm_5 U^{n+1} + Zm_6 V^{n+1} + Zm_7
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
UV^2 &= \left(\frac{U^{n+1} + U^n}{2} \right) \cdot \left(\frac{V^{n+1} + V^n}{2} \right)^2 \\
&= \frac{1}{8} [U^{n+1} + U^n] \cdot [(V^{n+1})^2 + 2V^{n+1}U^n + (V^n)^2] \\
&= \frac{1}{8} \left[(V^{n+1} + V^n)^2 U^{n+1} + (U^n V^{n+1} + 2U^n V^n) V^{n+1} + U^n (V^n)^2 \right] \\
&= \frac{1}{8} \left[((V^n + \Delta t V_t^n) + V^n)^2 U^{n+1} + (U^n (V^n + \Delta t V_t^n) + 2U^n V^n) V^{n+1} + U^n (V^n)^2 \right] \\
&= \underbrace{\frac{1}{8} (2V^n + \Delta t V_t^n)^2 U^{n+1}}_{Zm_7} + \underbrace{\frac{1}{8} (3V^n + \Delta t V_t^n) U^n V^{n+1}}_{Zm_8} + \underbrace{\frac{1}{8} U^n (V^n)^2}_{Zm_9}
\end{aligned}$$

Yapılan bu lineerleştirmede yer alan U_t^n ve V_t^n türevleri her bir zaman adımında

(1.20) sisteminden hesaplanabilir. Böylece sistemde yer alan lineer olmayan terimler

$$\begin{aligned}
 U^2V &= Zm_1U^{n+1} + Zm_2V^{n+1} + Zm_3 \\
 UV &= Zm_4U^{n+1} + Zm_5V^{n+1} + Zm_6 \\
 UV^2 &= Zm_7U^{n+1} + Zm_8V^{n+1} + Zm_9
 \end{aligned}
 \tag{1.24}$$

şeklinde bulunmuş olur.

1.5 Sonlu Elemanlar Yöntemi

Bir çok mühendis ve bilim adamı, ilgilendikleri fiziksel problemlerde iki temel unsur üzerinde dururlar. Bunlardan ilki, ilgilenilen fiziksel sürecin matematiksel formülasyonu, diğeri de matematiksel modelin nümerik olarak incelenmesidir. Bir fiziksel sürecin matematiksel olarak formüle edilmesi, genellikle bir diferensiyel denklem ortaya çıkarır. Bu diferensiyel denklemin analitik ya da nümerik olarak çözülmesi ve bilgisayarlar yardımıyla simülasyonunun yapılması, fiziksel sürecin karakteristikleri hakkında tahmin yürütülmesine olanak sağlar.

Model denklem olarak ortaya çıkan diferensiyel denklemlerin tam çözümlerinin bulunması için kullanılan analitik yöntemler, bir çok problemde büyük zorlukları da beraberinde getirirler. Bu problemlerin çözümlerinin elde edilmesi ve bu çözümlerin analizlerinin yapılması noktasında nümerik yöntemler bir alternatifi temsil ederler. Bu noktada, sonlu farklar ve varyasyonel yöntemler, literatürde sıklıkla kullanılan nümerik çözüm yöntemleri olarak karşımıza çıkar.

Sonlu elemanlar yöntemi, varyasyonel yöntemler kategorisine ait bir yöntemdir. Bununla birlikte, geleneksel varyasyonel metotlarda görülen bazı zorluklar, bu yöntemde ortaya çıkmaz. Bunun nedeni, yaklaşım fonksiyonlarının, problemin çözüm bölgesinin alt bölgelerinde, sistematik biçimde elde edilmesidir. Sonlu elemanlar yönteminde, diğeri nümerik yöntemlere göre avantaj olarak sayılabilecek üç temel özellik vardır. Birincisi, geometrik olarak karmaşık olan problemin çözüm bölgesi, *sonlu elemanlar* olarak adlandırılan daha basit alt bölgelerin bir koleksiyonu ile temsil edilir. İkincisi, her bir sonlu eleman üzerinde, herhangi bir sürekli fonksiyon cebirsel polinomların bir lineer kombinasyonu ile gösterilebilir düşüncesiyle, dife-

rensiyel problemin çözümleri için yaklaşım fonksiyonları oluşturulur. Üçüncüsü de, belirsiz katsayılardan oluşan cebirsel bağıntılar, diferensiyel denklemi sağlatarak belirlenir.

Verilen bir çözüm bölgesinin, ayrık parçaların bir koleksiyonu ile gösterilmesi fikri, sonlu elemanlar yöntemine has bir yaklaşım değildir. Antik matematikçiler, π sayısının değerine yaklaşım yaparken, çemberi yeterince küçük, sonlu sayıda kenarları olan bir çokgen olarak dikkate almış ve π sayısının yaklaşık 40 basamağını doğru hesaplamışlardır. Hrenikoff (1941), framework yöntemi olarak adlandırılan bir yöntem ortaya koymuş ve bu yöntemde, bir elastik düzlemi, yatay ve dikey şeritlerle oluşturulan alt bölgelerin bir koleksiyonu olarak tasarlamıştır. Bilinmeyen bir fonksiyona yaklaşım yapmak için alt bölgeler üzerinde tanımlı sürekli ve parçalı fonksiyonların kullanımı ise ilk olarak 1943 yılında, Courant tarafından ortaya konmuştur. Yaptığı çalışmasında, Courant (1943) üçgenel elemanların bağlanmasını kullanarak St Venant burulma problemi üzerine çalışmıştır. Sonlu elemanlar yönteminin temel yaklaşımları bu çalışmalarda kendini gösterse de, yöntemin formal gösterimi (Argyris and Kelsey, 1960) ve (Turner, et al., 1956) referanslarında yapılmıştır. *Sonlu eleman* terimi ise ilk olarak Clough tarafından 1960 yılında ortaya konmuştur (Clough, 1960). Literatürde, sonlu elemanlar yöntemi üzerine yapılan çalışmalar, o günden bu güne kadar geçen sürede çok hızlı bir artış sergilemiş ve bugün bazı dergiler hem teorik hem de uygulamaya yönelik olarak bu yönteme öncelik tanım hale gelmişlerdir. Yöntemle ilgili daha ayrıntılı bilgi için (Reddy, 1993; Zienkiewicz and Taylor, 1989) referanslarına bakılabilir.

Bir diferensiyel problem üzerinde sonlu elemanlar yönteminin uygulaması aşağıdaki şekildedir.

$L[u]$, u nun türevlerini içeren genel bir diferensiyel operatörü, $U_\mu[u]$ uygun sayıda sınır koşulu ve Ω ise sınırı $\partial\Omega$ ile gösterilen çözüm bölgesi olmak üzere

$$\begin{aligned} L[u] &= r(x), & x \in \Omega \\ U_\mu[u] &= \gamma_\mu, & x \in \partial\Omega \end{aligned} \tag{1.25}$$

sınır değer problemini dikkate alalım. Bu problemin çözümüne yapılacak yaklaşım,

$$u(x) = w(x, a_1, a_2, \dots, a_N)$$

şeklindedir. Burada a_1, a_2, \dots, a_N bulunması gerekli olan parametrelerdir.

$$a = [a_1 a_2 \dots a_N]$$

olarak alınırsa seçilecek uygun ψ_i taban fonksiyonları için yaklaşık çözüm

$$w(x, a) = \psi_0(x) + \sum_{i=1}^N a_i \psi_i(x) \quad (1.26)$$

şeklinde ifade edilebilir. Bu seçim, problemin sınır koşullarını da sağlayacak şekilde olmalıdır. Bu yaklaşık çözüm, diferensiyel denklemde yerine yazılırsa

$$E[x, a] = L[w(x, a)] - r(x)$$

rezidüsü bulunur. Bu rezidü, $w(x, a)$ yaklaşım fonksiyonunun diferensiyel denklemi sağlama ölçüsünü bize verir. Yapılan yaklaşımdaki ψ_i fonksiyonlarının sayısı olan N büyüdükçe $E[x, a]$ rezidüsünün de küçülmesi beklenir. Rezidü doğrudan sıfır olduğunda ise tam çözüm elde edilir. Rezidünün doğrudan sıfır olmasını sağlamak zor olduğundan sayısal yaklaşım yöntemlerinde $E[x, a]$ rezidüsünü mümkün olduğunca küçük yapacak yollar aranır. Sonlu elemanlar yönteminde bunun için rezidünün ağırlıklı integrali olan

$$(W_j, E[x, a]) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (1.27)$$

ifadesi sıfıra eşitlenir. Burada, $(W_j, E[x, a])$ ile

$$(W, E) = \int_{\Omega} W \cdot E \, dx$$

şeklinde bir iç çarpım kastedilir. W_j ise daha sonra belirtilecek olan bir ağırlık fonksiyonudur. Eğer $w(x, a)$ çözümü bir tam çözüm ise (1.27) ifadesi, ağırlık fonksiyonu nasıl seçilirse seçilsin sıfır olacaktır. Ağırlık fonksiyonlarının seçimi için değişik alternatifler vardır ve bu seçimlerin her birisi yaklaşık yöntem üzerinde farklı bir kritere karşılık gelir. Ağırlık fonksiyonları için bir seçim yapıldığında (1.27) iç çarpımı N bilinmeyenli bir cebirsel denklem sistemine dönüştür. Bu sistem uygun yöntemler kullanılarak çözülebilir. Buradan elde edilen çözümlerin, (1.26) denklemde yerlerine yazılmasıyla da (1.25) ile verilen diferensiyel denklemin yaklaşık çözümü bulunmuş olur.

Ağırlık fonksiyonunun farklı seçimlerine göre ortaya çıkan bazı sonlu eleman yöntemleri aşağıda kısaca tanıtılmıştır.

1.5.1 Kolokeyşin yöntemi

x_1, x_2, \dots, x_N noktaları, Ω bölgesinde N tane nokta olsunlar. Ağırlık fonksiyonu olarak dirac delta fonksiyonu seçilsin. Buna göre

$$\delta(x) = \begin{cases} \frac{1}{2\varepsilon}, & -\varepsilon < x < \varepsilon \\ 0, & \text{Diğer durumlar} \end{cases}$$

olmak üzere $W(x_j)$ ağırlık fonksiyonu

$$W(x_j) = \delta(x - x_j) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \begin{cases} \frac{1}{2\varepsilon}, & x_j - \varepsilon < x < x_j + \varepsilon \\ 0, & \text{Diğer durumlar} \end{cases}$$

şeklinde tanımlanır. Böylece, (1.27) ifadesi

$$\int_{\Omega} \delta(x - x_j) \cdot E[x, a] dx = 0 \quad (1.28)$$

halini alır. Buradan dirac delta fonksiyonunun özelliği gereği

$$E[x_j, a] = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N$$

eşitliği elde edilir. Bu ise $E[x, a]$ rezidüstantın Ω bölgesinden seçilen N tane noktada sıfır olarak alınması demektir. N tane kolokeyşin noktasının seçimi keyfi olmakla beraber eşit uzaklıktaki noktaların seçilmesi yaygın kullanımdır. Kolokeyşin yöntemi, sadece bölünme noktalarında hesaplama yaptığı için diğer yöntemlere göre hesaplama zamanındaki azalma nedeniyle ekonomik bir alternatifi temsil eder.

1.5.2 Galerkin yöntemi

Galerkin yöntemi, sonlu elemanlar yöntemleri içinde en çok kullanılan yöntemdir.

Bu yöntemin uygulanışında, (1.27) denklemindeki ağırlık fonksiyonları

$$W_j = \frac{\partial w(x, a)}{\partial a_j}, \quad j = 1, 2, \dots, N$$

şeklinde seçilir. Burada $w(x, a)$ fonksiyonu diferensiyel denklemin yaklaşık çözümüdür.

Böylece (1.27) ifadesi

$$\int_{\Omega} \psi_i(x) \cdot E[x, a] dx = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N$$

halini alır. Buradan elde edilecek cebirsel denklem sisteminin çözülmesiyle de

$$a = [a_1, a_2, \dots, a_N]$$

bilinmeyenleri bulunmuş olur.

1.5.3 En küçük kareler yöntemi

Bu yöntemde ağırlık fonksiyonları

$$W_j = \frac{\partial E[x, a]}{\partial a_j}, \quad j = 1, 2, \dots, N$$

olacak şekilde seçilir. Bu seçim a_1, a_2, \dots, a_N bilinmeyenlerinin bulunması için N tane denklem elde edilmesine olanak sağlar. Ağırlık fonksiyonlarının bu şekildeki seçimi

$$WE = \frac{1}{2} \int_{\Omega} E^2[x, a] dx = \text{minimum}$$

rezidüstün minimum olmasına karşılık gelir. WE yi minimum yapmak için gerekli koşullar ise

$$\frac{\partial WE}{\partial a_j} = \int_{\Omega} E[x, a] \frac{\partial E[x, a]}{\partial a_j} dx = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N$$

olmasıdır.

1.5.4 Moment yöntemi

Uygulanışı itibariyle Galerkin yöntemine benzeyen bu yöntemde, $P_j(x)$ ler polinom olmak üzere, ağırlık fonksiyonları

$$W_j = P_j(x)$$

şeklinde seçilir. Böylece (1.27) ile verilen iç çarpım

$$\int_{\Omega} P_j(x) \cdot E[x, a] dx = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N$$

formuna döner. Moment yönteminin Galerkin yönteminden farkı şu şekilde ifade edilebilir. Bu yöntemde rezidü ifadesi, seçilen fonksiyonlar ile ortogonal olacak

şekilde düzenlenir ve bu işlem için seçilen fonksiyonlar Galerkin yönteminde olduğu gibi yaklaşım fonksiyonu ile aynı olmak zorunda değildir. Uygulamada, ortogonalleştirme işlemi yapıldığı takdirde, $W_j = x^j$ seçiminin daha iyi sonuçlar ürettiği de görülmüştür (Jain, 1984).

1.6 B-spline Fonksiyonlar

Çok sayıdaki veri noktalarına bir tek eğri ile yaklaşmak büyük kolaylıklar sağlasa da bazı hallerde bu durum büyük hatalara neden olabilir. Ayrıca bu amaçla kullanılan Newton ve Lagrange interpolasyon polinomlarının derecesi, nokta sayısı arttıkça artacağından, bu tür polinomlarla yapılacak işlemler zorlaşır. Bu gibi durumlarda, art arda gelen iki veri arasında, birinci, ikinci ya da üçüncü dereceden fonksiyonlarla yaklaşımın yapıldığı spline interpolasyon yöntemi kullanılabilir. Spline interpolasyonu, tanımlanan aralık üzerinde, birbirini örtmeyen sonlu sayıda alt aralıklar yardımıyla daha küçük dereceden polinom bulma esasına dayanır (Saka, 2002).

Diferensiyel denklemin çözümüne yaklaşım yapmak için kullanılan $S(x)$ spline fonksiyonunun her bir $[x_{k-1}, x_k]$ aralığı üzerindeki parçası $S_k(x)$ ile diferensiyel denklemin tam çözümü de $y(x)$ ile gösterilsin. Bu durumda $S_k(x)$ fonksiyonunun sağlanması gereken temel iki koşul

$$i) \text{ İnterpolasyon koşulu: } S_k(x_{k-1}) = y(x_{k-1}) \text{ ve } S_k(x_k) = y(x_k)$$

$$ii) \text{ Süreklilik koşulu: } S'_k(x_k^-) = S'_k(x_k^+) \text{ ya da } S'_k(x_k) = S'_{k+1}(x_k)$$

şeklinindedir. Bunun dışında, spline fonksiyonların sahip olduğu diğer bazı özellikler ise şu şekilde sıralanabilir:

1. Spline fonksiyonlar düzgün fonksiyonlardır.
2. Spline fonksiyonlar uygun baza sahip olan sonlu boyutlu lineer uzaylardır.
3. Hesaplama yapma açısından spline fonksiyonlar kullanışlıdır.
4. Spline fonksiyonların hem türevleri hem de integralleri yine bir spline fonksiyondur.
5. Çözüm bölgesi üzerinde sürekli her fonksiyon, m . dereceden bir spline fonksiyon ile temsil edilebilir.

6. Küçük dereceden spline fonksiyonlar çok esnekler ve polinomlardaki gibi salınım yapmazlar.

B-spline fonksiyonlar da yine bir spline fonksiyondur. Ancak polinom derecesi, düzgünlük ve çözüm bölgesinin parçalanmasına göre, B-spline fonksiyonlar, minimal desteğe sahip fonksiyonlardır. Belirli derecede ve düzgünlükteki her spline fonksiyon aynı derece ve düzgünlükteki B-spline fonksiyonların bir lineer kombinasyonu ile temsil edilebilir (de Boor, 1978). Bu nedenle de B-spline fonksiyonlar, spline fonksiyonlar için bir taban oluştururlar. Aynı zamanda bir B-spline fonksiyonu Bézier eğrilerinin de bir genelleştirmesidir. B-spline terimi, ilk defa *basis spline* kelimesinin kısaltması olarak Schoenberg (1946) tarafından kullanılmıştır.

B-spline fonksiyonların tanımlanması bir kaç yolla yapılabilir. de Boor (1978) tarafından verilen aşağıdaki türetme yöntemi literatürde yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu yöntemle göre, 0. dereceden B-spline fonksiyonu,

$$B_i^0 = \begin{cases} 1, & x_i \leq x \leq x_{i+1} \\ 0, & \text{diğer durumlarda} \end{cases}$$

şeklinde tanımlanır. Bu adım fonksiyonunun kullanılmasıyla daha yüksek dereceden B-spline fonksiyonlar ardışık olarak,

$$B_i^k(x) = \frac{x - x_i}{x_{i+k} - x_i} B_i^{k-1}(x) + \frac{x_{i+k+1} - x}{x_{i+k+1} - x_{i+1}} B_{i+1}^{k-1}(x)$$

$$k = 1, 2, \dots, \quad i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

formülüyle hesaplanır. B-spline fonksiyonların, $[x_0, x_N]$ aralığında tanımlı fonksiyonlar için bir taban olduğu Prenter (1975) tarafından ifade edilmiştir. Yukarıdaki tanımlamadan da görüldüğü gibi B-spline fonksiyonlar, eşit uzunluklu alt aralıklar üzerinde tanımlanabileceği gibi çözüm bölgesi üzerinde eşit dağıtılmamış noktalar üzerinde de tanımlanabilir. B-spline fonksiyonların, geometrik olarak değişen uzunluğa sahip alt aralıklar üzerindeki tanımları için (Dag, 1994) referansına bakılabilir.

Pek çok önemli özelliğinden dolayı B-spline fonksiyonlar diferensiyel problemlerin çözümünde etkin rol almaktadır. Bu özelliklerinden bazıları şu şekilde özetlenebilir:

k. dereceden B-spline fonksiyonu B^k olmak üzere

i) *Pozitif olma ve yerel destek:* B^k fonksiyonu $k+1$ tane ardışık alt aralık üzerinde pozitifdir bu ardışık aralıkların dışında ise sıfırdır.

ii) *Düzgünlük:* B^k fonksiyonunun $(k-1)$. mertebeye kadar türevleri süreklidir. k . mertebeden türevi ise bölünme noktalarında süreksizdir.

iii) *Parçalı polinom yapısı:* B^k fonksiyonu $[x_i, x_{i+1}]$ aralığında parçalı polinomdur.

iv) *Simetri:* B^k fonksiyonu simetriktir.

v) *Monotonluk:* B^k fonksiyonu tanımlı olduğu aralığın yarısında monoton artan diğer yarısında ise monoton azalandır.

1.7 Tezin Ana Yapısı

Tezin ikinci, üçüncü, dördüncü ve beşinci bölümlerinde sırasıyla kuadratik, kübik, kuartik ve kuintik B-spline taban fonksiyonları kullanılarak (1.20) reaksiyon-difüzyon denklem sisteminin B-spline kolokeyşin formları elde edildi.

Kuadratik B-spline fonksiyonların ikinci mertebeden türevleri sürekli olmadığından, ikinci bölümde, denklem sisteminde konum parçalanması yapılarak sistem birinci mertebeden türevleri içerecek şekilde yeniden düzenlendi. Bu düzenleme ile (1.20) sistemi 4 bağımlı değişken ve dört denklem içeren bir sisteme dönüştürüldü ve buradan kuadratik B-spline kolokeyşin yöntemi ile nümerik çözümler elde edildi. Hesaplanan çözümler, biri lineer, diğerleri lineer olmayan toplam beş problem üzerinde test edildi.

Üçüncü bölümde, kübik B-spline fonksiyonları kullanılarak (1.20) sistemine sonlu elemanlar yöntemi uygulandı. Kübik B-spline fonksiyonlar, ikinci mertebeden türevleri sürekli olan en küçük dereceli B-spline polinomları olduklarından bu bölümde ortaya konan nümerik yöntem hesaplama maliyeti açısından en ekonomik yöntem olarak sunuldu. Yine burada da ikinci bölüme benzer olarak beş problem üzerinde nümerik yöntem test edildi ve kabul edilebilir sonuçlar elde edildi.

Taban fonksiyonları olarak daha yüksek dereceli polinom kullanımının sonuçlar üzerindeki etkilerini gözlemek amacıyla dördüncü bölümde kuartik B-spline fonksiyonları, beşinci bölümde ise kuintik B-spline fonksiyonları kullanıldı. Hesaplama maliyeti açısından bir dezavantaj getirirse de, yüksek dereceli polinom kullanımı ile kuadratik ve kübik fonksiyon kullanımına kıyasla doğruluğu daha yüksek sonuçlar

elde edildi.

Son bölümde ise elde edilen sonuçlar değerlendirilerek sunulan yöntemlerin avantaj ve dezavantajları tartışıldı ve bazı öneriler sunuldu.

BÖLÜM 2

REAKSİYON-DİFÜZYON DENKLEM SİSTEMLERİNİN KUADRATİK B-SPLİNE KOLOKEYŞİN YÖNTEMİ İLE NÜMERİK ÇÖZÜMLERİ

Bu bölümde, kuadratik B-spline taban fonksiyonları yardımıyla (1.20) sistemi için bir nümerik çözüm algoritması geliştirilecektir. Bu amaçla ilk olarak kuadratik B-spline fonksiyonları tanıtılacak daha sonra da nümerik yöntemin uygulaması açıklanacaktır. Nümerik yöntemin doğruluğu bir sonraki kısımda ele alınacak ve bu bağlamda, 1. bölümde tanıtılan test problemleri kullanılacaktır. Son olarak, elde edilen sonuçlar değerlendirilerek nümerik yöntemin avantaj ve dezavantajları tartışılacaktır.

2.1 Kuadratik B-spline Taban Fonksiyonları

$[a, b]$ çözüm aralığını,

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_{N-1} < x_N = b \quad (2.1)$$

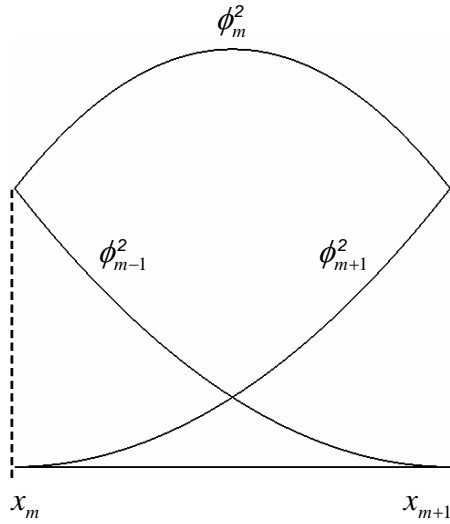
olacak şekilde eşit uzunluklu alt aralıklara bölelim.

$$h = x_{m+1} - x_m \text{ ve } m = -1, 0, \dots, N$$

olsun. Bu durumda $[x_{m-1}, x_{m+2}]$ aralığı üzerinde tanımlı kuadratik B-spline fonksiyonu ϕ_m^2 ile gösterilirse, ϕ_m^2 fonksiyonu

$$\phi_m^2 = \frac{1}{h^2} \begin{cases} (x_{m+2} - x)^2 - 3(x_{m+1} - x)^2 + 3(x_m - x)^2, & x \in [x_{m-1}, x_m] \\ (x_{m+2} - x)^2 - 3(x_{m+1} - x)^2, & x \in [x_m, x_{m+1}] \\ (x_{m+2} - x)^2, & x \in [x_{m+1}, x_{m+2}] \\ 0, & \text{diğer durumlarda} \end{cases}$$

şeklinde tanımlanır. ϕ_m^2 kuadratik B-spline fonksiyonu ardışık üç aralıkta sıfırdan farklı değer aldığından $[x_m, x_{m+1}]$ şeklindeki bir aralık, ardışık üç kuadratik B-spline fonksiyonu tarafından örtülür. Bu durum Şekil 2.1 ile gösterilmiştir.



Şekil 2.1: Kuadratik B-spline şekil fonksiyonları

ϕ_m^2 kuadratik B-spline fonksiyonu ve onun konuma göre türevinin (2.1) ayrıştırmasının bölünme noktalarında alacağı değerler ϕ_m^2 fonksiyonunun tanımından kolayca hesaplanabilir. Buna göre ilgili değerler Tablo 2.1 ile verilmiştir.

Tablo 2.1: Bölünme noktalarındaki kuadratik B-spline değerleri

	x_{m-1}	x_m	x_{m+1}	x_{m+2}
ϕ_m	0	1	1	0
$h(\phi_m)_x$	0	2	-2	0

2.2 Kuadratik B-spline Kolokeyşin Yöntemi

Kuadratik B-spline fonksiyonlardan oluşan $\{\phi_{-1}^2, \phi_0^2, \dots, \phi_N^2\}$ kümesinin, $[x_0, x_N]$ aralığında tanımlı fonksiyonlar için bir taban olduğu (Prenter, 1975) referansında belirtilmiştir. Bu nedenle, $[x_0, x_N]$ aralığı üzerinde tanımlı bir $U(x, t)$ fonksiyonuna

ve onun türevine

$$\begin{aligned}
U(x, t) &= \sum_{m=-1}^N \delta_m(t) \phi_m^2(x) \\
&= \delta_{-1} \phi_{-1}^2(x) + \delta_0 \phi_0^2(x) + \cdots + \delta_N \phi_N^2(x) \\
U_x(x, t) &= \sum_{m=-1}^N \delta_m(t) (\phi_m^2)_x \\
&= \delta_{-1} (\phi_{-1}^2)_x + \delta_0 (\phi_0^2)_x + \cdots + \delta_N (\phi_N^2)_x
\end{aligned}$$

şeklinde yaklaşım yapılabilir. Burada δ_m , reaksiyon-difüzyon denklem sisteminin kuadratik B-spline kolokeyşin formundan bulunması gereken zamana bağlı parametrelerdir. Tablo 2.1 ile verilen kuadratik B-spline fonksiyonların bölünme noktalarındaki değerleri, yapılan bu yaklaşımda kullanılırsa, x_m bölünme noktalarında U fonksiyonu ve onun konuma göre türevleri için

$$\begin{aligned}
U(x_m) &= U_m = \delta_{m-1} + \delta_m \\
U_x(x_m) &= (U_m)_x = \frac{2}{h}(\delta_m - \delta_{m-1})
\end{aligned} \tag{2.2}$$

eşitlikleri yazılabilir. Benzer şekilde bir $V(x, t)$ fonksiyonu için de zamana bağlı γ_m parametreleri yardımıyla

$$\begin{aligned}
V(x, t) &= \sum_{m=-1}^N \gamma_m(t) \phi_m^2(x) \\
&= \gamma_{-1} \phi_{-1}^2(x) + \gamma_0 \phi_0^2(x) + \cdots + \gamma_N \phi_N^2(x) \\
V_x(x, t) &= \sum_{m=-1}^N \gamma_m(t) (\phi_m^2)_x \\
&= \gamma_{-1} (\phi_{-1}^2)_x + \gamma_0 (\phi_0^2)_x + \cdots + \gamma_N (\phi_N^2)_x
\end{aligned}$$

şeklinde yaklaşım yapılabilir. Buradan x_m bölünme noktalarında V fonksiyonu ve onun konuma göre türevleri için

$$\begin{aligned}
V(x_m) &= V_m = \gamma_{m-1} + \gamma_m \\
V_x(x_m) &= (V_m)_x = \frac{2}{h}(\gamma_m - \gamma_{m-1})
\end{aligned} \tag{2.3}$$

bağıntıları elde edilir.

Dikkat edilecek olursa (1.20) sistemi ikinci mertebeden türevleri içermektedir. Oysa kuadratik B-spline fonksiyonların ikinci mertebeden türevleri sürekli değildir.

Bu nedenle (1.20) sisteminin kuadratik fonksiyonlarla çözülebilmesi için (1.20) sisteminde bir düzenlemenin yapılmasına ihtiyaç vardır.

$$\begin{aligned} U_x(x, t) &= -W(x, t), \\ V_x(x, t) &= -Y(x, t) \end{aligned}$$

şeklindeki bir düzenleme ile (1.20) sistemi

$$\begin{aligned} U_t &= -a_1 W_x + b_1 U + c_1 V + d_1 U^2 V + e_1 UV + m_1 UV^2 + n_1 \\ V_t &= -a_2 Y_x + b_2 U + c_2 V + d_2 U^2 V + e_2 UV + m_2 UV^2 + n_2 \\ U_x + W &= 0 \\ V_x + Y &= 0 \end{aligned} \tag{2.4}$$

formunda yeniden yazılabilir. Burada kullanılan W ve Y fonksiyonları için de λ_m ve μ_m parametreleri kullanılarak kuadratik B-spline fonksiyonları yardımıyla,

$$\begin{aligned} W(x, t) &= \sum_{m=-1}^N \lambda_m(t) \phi_m^2(x) \\ &= \lambda_{-1} \phi_{-1}^2(x) + \lambda_0 \phi_0^2(x) + \cdots + \lambda_N \phi_N^2(x) \\ W_x(x, t) &= \sum_{m=-1}^N \lambda_m(t) (\phi_m^2)_x \\ &= \lambda_{-1} (\phi_{-1}^2)_x + \lambda_0 (\phi_0^2)_x + \cdots + \lambda_N (\phi_N^2)_x \\ Y(x, t) &= \sum_{m=-1}^N \mu_m(t) \phi_m^2 \\ &= \mu_{-1} \phi_{-1}^2(x) + \mu_0 \phi_0^2(x) + \cdots + \mu_N \phi_N^2(x) \\ Y_x(x, t) &= \sum_{m=-1}^N \mu_m(t) (\phi_m^2)_x \\ &= \mu_{-1} (\phi_{-1}^2)_x + \mu_0 (\phi_0^2)_x + \cdots + \mu_N (\phi_N^2)_x \end{aligned}$$

eşitlikleri yukarıdaki yaklaşımlara benzer olarak bulunur. Buradan W ve Y fonksiyonları bölünme noktalarında, zamana bağımlı parametreler cinsinden

$$\begin{aligned} W(x_m) &= W_m = \lambda_{m-1} + \lambda_m \\ W_x(x_m) &= (W_m)_x = \frac{2}{h}(\lambda_m - \lambda_{m-1}) \end{aligned} \tag{2.5}$$

ve

$$\begin{aligned} Y(x_m) &= Y_m = \mu_{m-1} + \mu_m \\ Y_x(x_m) &= (Y_m)_x = \frac{2}{h}(\mu_m - \mu_{m-1}) \end{aligned} \tag{2.6}$$

şeklinde ifade edilebilir.

(2.4) sistemindeki lineer olmayan U^2V , UV ve UV^2 terimleri, (1.24) eşitlikleri yardımıyla lineerleştirilir ve (1.22) formülleri ile de sistemin zaman ayrıştırması yapılırsa (2.4) denklem sistemi

$$\begin{aligned}
\beta m_1 U^{n+1} + \frac{a_1}{2} W_x^{n+1} + \beta m_2 V^{n+1} &= \beta m_3 U^n - \frac{a_1}{2} W_x^n + \frac{c_1}{2} V^n + \beta m_4, \\
\beta m_5 U^{n+1} + \frac{a_2}{2} Y_x^{n+1} + \beta m_6 V^{n+1} &= \frac{b_2}{2} U^n - \frac{a_2}{2} Y_x^n + \beta m_7 V^n + \beta m_8, \\
U_x^{n+1} + W^{n+1} &= -U_x^n - W^n, \\
V_x^{n+1} + Y^{n+1} &= -V_x^n - Y^n
\end{aligned} \tag{2.7}$$

halini alır.

Kolokeyşin yönteminde ağırlık fonksiyonları olarak dirac delta fonksiyonlarının seçilmesi, nümerik yöntemin uygulanışında, kuadratik B-spline yaklaşımları olarak elde edilen (2.2), (2.3), (2.5) ve (2.6) eşitliklerinin bölünme noktalarında (2.7) denklem sistemini sağlamasını gerektirdiğinden, bu yaklaşım fonksiyonları (2.7) sisteminde yerlerine yazılarak ifade düzenlenirse birinci denklem için

$$\begin{aligned}
&\alpha_{m1} \delta_{m-1}^{n+1} + \alpha_{m2} \gamma_{m-1}^{n+1} + \alpha_{m3} \lambda_{m-1}^{n+1} + \alpha_{m4} \mu_{m-1}^{n+1} \\
&\quad + \alpha_{m5} \delta_m^{n+1} + \alpha_{m6} \gamma_m^{n+1} + \alpha_{m7} \lambda_m^{n+1} + \alpha_{m8} \mu_m^{n+1} \\
&= \alpha_{m9} \delta_{m-1}^n + \alpha_{m10} \gamma_{m-1}^n + \alpha_{m11} \lambda_{m-1}^n + \alpha_{m12} \mu_{m-1}^n \\
&\quad + \alpha_{m13} \delta_m^n + \alpha_{m14} \gamma_m^n + \alpha_{m15} \lambda_m^n + \alpha_{m16} \mu_m^n + \beta_{m4},
\end{aligned} \tag{2.8}$$

ikinci denklem için

$$\begin{aligned}
&\alpha_{m17} \delta_{m-1}^{n+1} + \alpha_{m18} \gamma_{m-1}^{n+1} + \alpha_{m19} \lambda_{m-1}^{n+1} + \alpha_{m20} \mu_{m-1}^{n+1} \\
&\quad + \alpha_{m21} \delta_m^{n+1} + \alpha_{m22} \gamma_m^{n+1} + \alpha_{m23} \lambda_m^{n+1} + \alpha_{m24} \mu_m^{n+1} \\
&= \alpha_{m25} \delta_{m-1}^n + \alpha_{m26} \gamma_{m-1}^n + \alpha_{m27} \lambda_{m-1}^n + \alpha_{m28} \mu_{m-1}^n \\
&\quad + \alpha_{m29} \delta_m^n + \alpha_{m30} \gamma_m^n + \alpha_{m31} \lambda_m^n + \alpha_{m32} \mu_m^n + \beta_{m8},
\end{aligned} \tag{2.9}$$

üçüncü denklem için

$$\begin{aligned}
&-\frac{2}{h} \delta_{m-1}^{n+1} + 0 \gamma_{m-1}^{n+1} + \lambda_{m-1}^{n+1} + 0 \mu_{m-1}^{n+1} + \frac{2}{h} \delta_m^{n+1} + 0 \gamma_m^{n+1} + \lambda_m^{n+1} + 0 \mu_m^{n+1} \\
&= \frac{2}{h} \delta_{m-1}^n + 0 \gamma_{m-1}^n - \lambda_{m-1}^n + 0 \mu_{m-1}^n - \frac{2}{h} \delta_m^n + 0 \gamma_m^n - \lambda_m^n + 0 \mu_m^n,
\end{aligned} \tag{2.10}$$

ve dördüncü denklem için de

$$\begin{aligned}
& 0\delta_{m-1}^{n+1} - \frac{2}{h}\gamma_{m-1}^{n+1} + 0\lambda_{m-1}^{n+1} + \mu_{m-1}^{n+1} + 0\delta_m^{n+1} + \frac{2}{h}\gamma_m^{n+1} + 0\lambda_m^{n+1} + \mu_m^{n+1} \\
& = \delta_{m-1}^n + \frac{2}{h}\gamma_{m-1}^n + 0\lambda_{m-1}^n - \mu_{m-1}^n + 0\delta_m^n - \frac{2}{h}\gamma_m^n + 0\lambda_m^n - \mu_m^n
\end{aligned} \tag{2.11}$$

bağıntıları bulunur. Burada $m = 0, 1, \dots, N$ olmak üzere yukarıdaki sistemde yer alan katsayılar

$\alpha_{m1} = \beta_{m1},$	$\alpha_{m9} = \beta_{m3},$	$\alpha_{m17} = \beta_{m5},$	$\alpha_{m25} = \frac{b_2}{2},$
$\alpha_{m2} = \beta_{m2},$	$\alpha_{m10} = \frac{c_1}{2},$	$\alpha_{m18} = \beta_{m6},$	$\alpha_{m26} = \beta_{m7},$
$\alpha_{m3} = -\frac{a_1}{h},$	$\alpha_{m11} = \frac{a_1}{h},$	$\alpha_{m19} = 0,$	$\alpha_{m27} = 0,$
$\alpha_{m4} = 0,$	$\alpha_{m12} = 0,$	$\alpha_{m20} = -\frac{a_2}{h},$	$\alpha_{m28} = \frac{a_2}{h},$
$\alpha_{m5} = \beta_{m1},$	$\alpha_{m13} = \beta_{m3},$	$\alpha_{m21} = \beta_{m5},$	$\alpha_{m29} = \frac{b_2}{2},$
$\alpha_{m6} = \beta_{m2},$	$\alpha_{m14} = \frac{c_1}{2},$	$\alpha_{m22} = \beta_{m6},$	$\alpha_{m30} = \beta_{m7},$
$\alpha_{m7} = \frac{a_1}{h},$	$\alpha_{m15} = -\frac{a_1}{h},$	$\alpha_{m23} = 0,$	$\alpha_{m31} = 0,$
$\alpha_{m8} = 0,$	$\alpha_{m16} = 0,$	$\alpha_{m24} = \frac{a_2}{h},$	$\alpha_{m32} = -\frac{a_2}{h},$

şeklindedir. (2.8), (2.9), (2.10) ve (2.11) denklemlerinden oluşan sistem, matris formunda yazılırsa

$$\mathbf{A}_2 \cdot \mathbf{d}_2^{n+1} = \mathbf{B}_2 \cdot \mathbf{d}_2^n + \mathbf{F}_2 \tag{2.12}$$

matris denklemleri bulunur. Burada

$$\mathbf{A}_2 = \begin{bmatrix} \alpha_{m1} & \alpha_{m2} & \alpha_{m3} & \alpha_{m4} & \alpha_{m5} & \alpha_{m6} & \alpha_{m7} & \alpha_{m8} \\ \alpha_{m17} & \alpha_{m18} & \alpha_{m19} & \alpha_{m20} & \alpha_{m21} & \alpha_{m22} & \alpha_{m23} & \alpha_{m24} \\ -2/h & 0 & 1 & 0 & 2/h & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -2/h & 0 & 1 & 0 & 2/h & 0 & 1 \\ & & & & \alpha_{m1} & \alpha_{m2} & \alpha_{m3} & \alpha_{m4} & \alpha_{m5} & \alpha_{m6} & \alpha_{m7} & \alpha_{m8} \\ & & & & \alpha_{m17} & \alpha_{m18} & \alpha_{m19} & \alpha_{m20} & \alpha_{m21} & \alpha_{m22} & \alpha_{m23} & \alpha_{m24} \\ -2/h & 0 & 1 & 0 & 2/h & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -2/h & 0 & 1 & 0 & 2/h & 0 & 1 \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & \alpha_{m1} & \alpha_{m2} & \alpha_{m3} & \alpha_{m4} & \alpha_{m5} & \alpha_{m6} & \alpha_{m7} & \alpha_{m8} \\ & & & & \alpha_{m17} & \alpha_{m18} & \alpha_{m19} & \alpha_{m20} & \alpha_{m21} & \alpha_{m22} & \alpha_{m23} & \alpha_{m24} \\ -2/h & 0 & 1 & 0 & 2/h & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -2/h & 0 & 1 & 0 & 2/h & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{B}_2 = \begin{bmatrix} \alpha_{m9} & \alpha_{m10} & \alpha_{m11} & \alpha_{m12} & \alpha_{m13} & \alpha_{m14} & \alpha_{m15} & \alpha_{m16} \\ \alpha_{m25} & \alpha_{m26} & \alpha_{m27} & \alpha_{m28} & \alpha_{m29} & \alpha_{m30} & \alpha_{m31} & \alpha_{m32} \\ 2/h & 0 & -1 & 0 & -2/h & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 2/h & 0 & -1 & 0 & -2/h & 0 & -1 \\ & & & & \alpha_{m9} & \alpha_{m10} & \alpha_{m11} & \alpha_{m12} & \alpha_{m13} & \alpha_{m14} & \alpha_{m15} & \alpha_{m16} \\ & & & & \alpha_{m25} & \alpha_{m26} & \alpha_{m27} & \alpha_{m28} & \alpha_{m29} & \alpha_{m30} & \alpha_{m31} & \alpha_{m32} \\ 2/h & 0 & -1 & 0 & -2/h & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 2/h & 0 & -1 & 0 & -2/h & 0 & -1 \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & \alpha_{m9} & \alpha_{m10} & \alpha_{m11} & \alpha_{m12} & \alpha_{m13} & \alpha_{m14} & \alpha_{m15} & \alpha_{m16} \\ & & & & \alpha_{m25} & \alpha_{m26} & \alpha_{m27} & \alpha_{m28} & \alpha_{m29} & \alpha_{m30} & \alpha_{m31} & \alpha_{m32} \\ 2/h & 0 & -1 & 0 & -2/h & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 2/h & 0 & -1 & 0 & -2/h & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

şeklinde her satırında sıfırdan farklı 8 eleman bulunduran $(4N + 4) \times (4N + 8)$

boyutlu blok band matrisler ve \mathbf{d}_2^n ile \mathbf{F}_2 de

$$\mathbf{d}_2^n = [\delta_{-1}^n, \gamma_{-1}^n, \lambda_{-1}^n, \mu_{-1}^n, \dots, \lambda_N^n, \mu_N^n]^T, \quad \mathbf{F}_2 = [\beta_{m4}, \beta_{m8}, \beta_{m4}, \beta_{m8}, \dots, \beta_{m4}, \beta_{m8}]^T$$

şeklindeki vektörlerdir.

(2.12) denkleminde, bilinmeyen sayısının denklem sayısından 4 tane fazla olduğu görülmektedir. Sınır koşullarının uygulanması ile $\delta_{-1}^n, \gamma_{-1}^n$ ve δ_N^n, γ_N^n sınır parametreleri sistemden elimine edilerek (2.12) denklemi çözülebilir hale getirilebilir. Bu eliminasyon işleminde, Dirichlet sınır koşulları için

$$\begin{aligned} m = 0 & \Rightarrow U_0 = \delta_{-1} + \delta_0 & \Rightarrow \delta_{-1} = U_0 - \delta_0, \\ & \Rightarrow V_0 = \gamma_{-1} + \gamma_0 & \Rightarrow \gamma_{-1} = V_0 - \gamma_0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} m = N & \Rightarrow U_N = \delta_{N-1} + \delta_N & \Rightarrow \delta_N = U_N - \delta_{N-1}, \\ & \Rightarrow V_N = \gamma_{N-1} + \gamma_N & \Rightarrow \gamma_N = V_N - \gamma_{N-1}, \end{aligned}$$

eşitlikleri, Neumann sınır koşulları için de

$$\begin{aligned} m = 0 & \Rightarrow U'_0 = \frac{2}{h} (\delta_0 - \delta_{-1}) & \Rightarrow \delta_{-1} = \delta_0 - \frac{h}{2} U'_0, \\ & \Rightarrow V'_0 = \frac{2}{h} (\gamma_0 - \gamma_{-1}) & \Rightarrow \gamma_{-1} = \gamma_0 - \frac{h}{2} V'_0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} m = N & \Rightarrow U'_N = \frac{2}{h} (\delta_N - \delta_{N-1}) & \Rightarrow \delta_N = \delta_{N-1} + \frac{h}{2} U'_N, \\ & \Rightarrow V'_N = \frac{2}{h} (\gamma_N - \gamma_{N-1}) & \Rightarrow \gamma_N = \gamma_{N-1} + \frac{h}{2} V'_N, \end{aligned}$$

eşitlikleri (2.12) sisteminde kullanılarak Gauss eliminasyon algoritması ile \mathbf{d}_2^{n+1} bilinmeyen vektörü hesaplanabilir. Lineerleştirmeden kaynaklanan hatayı minimize etmek için elde edilen çözüm parametreleri,

$$(\mathbf{d}^*)^{n+1} = \mathbf{d}^n + \frac{1}{2}(\mathbf{d}^{n+1} - \mathbf{d}^n), \quad (2.13)$$

ile tanımlanan bir iç iterasyona tabi tutulur ve böylece elde edilen δ ve γ parametreleri (2.2) ve (2.3) denklemlerinde yerlerine yazılarak her zaman adımında istenen çözümler hesaplanmış olur.

2.3 Başlangıç Koşulu

(2.12) sisteminde iterasyona başlayabilmek için çözüm parametrelerinin başlangıç değerlerinden oluşan \mathbf{d}_2^0 vektörünün bilinmesine ihtiyaç vardır. Bu değerler sistemin başlangıç şartından (2.2), (2.3), (2.5) ve (2.6) denklemleri yardımıyla bulunabilir. Buna göre, δ , γ , λ , μ parametreleri için $m = 1, \dots, N$ olmak üzere çözüm parametrelerinin başlangıç değerleri

$$\delta_0^0 = \frac{U_0}{2} + \frac{h}{4}U'_0, \quad \delta_{-1}^0 = \delta_0^0 - \frac{h}{2}U'_0, \quad \delta_m^0 = U_m - \delta_{m-1}^0,$$

$$\gamma_0^0 = \frac{V_0}{2} + \frac{h}{4}V'_0, \quad \gamma_{-1}^0 = \gamma_0^0 - \frac{h}{2}V'_0, \quad \gamma_m^0 = V_m - \gamma_{m-1}^0,$$

$$\lambda_0^0 = \frac{W_0}{2} + \frac{h}{4}W'_0, \quad \lambda_{-1}^0 = \lambda_0^0 - \frac{h}{2}W'_0, \quad \lambda_m^0 = W_m - \lambda_{m-1}^0,$$

$$\mu_0^0 = \frac{Y_0}{2} + \frac{h}{4}Y'_0, \quad \mu_{-1}^0 = \mu_0^0 - \frac{h}{2}Y'_0, \quad \mu_m^0 = Y_m - \mu_{m-1}^0$$

şeklinde bulunur. Buradan elde edilen başlangıç çözümlerinin kullanılması ile de (2.12) sisteminde iterasyona başlanır.

2.4 Test Problemleri

Yukarıda algoritması verilen kuadratik B-spline kolokeyşin yöntemi, bu kısımda nümerik örnekler üzerinde test edildi. Yöntemin doğruluğunu inceleyebilmek için (1.5) hata normları ve (1.6) ile verilen bağıl hata kullanıldı. Elde edilen sonuçlar tablo ve grafikler yardımıyla sunuldu.

2.4.1 Linear Problem

Bu kısımda (1.7) ile verilen reaksiyon-difüzyon sisteminin çözümleri elde edildi. Nümerik hesaplamalarda (1.7) sistemindeki katsayıların üç farklı durumu dikkate alındı. Sistemin başlangıç şartı, (1.8) çözümlerinde $t = 0$ alınarak elde edildi. Sınır koşulları olarak ise (1.9) ile verilen eşitlikler kullanıldı. Çözümlerde ortaya çıkan L_2 ve L_∞ hata değerleri tablo halinde verildi.

İlk olarak (1.7) sisteminde denklem katsayıları

$$a = 0.1, b = 0.01 \text{ ve } d = 1$$

şeklinde seçildi. Bu seçimle birlikte ortaya çıkan denklem sistemi, difüzyon teriminin reaksiyon terimine göre daha baskın olduğu bir sistemdir. Yukarıda verilen başlangıç ve sınır şartları altında, $x \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right)$ çözüm bölgesi üzerinde program çalıştırılarak $t = 1$ anında elde edilen sonuçlar Tablo 2.2 ile sunulmuştur. Tablo 2.2 incelendiğinde, V fonksiyonu için üretilen sonuçların U için üretilen sonuçlara göre doğruluğunun daha yüksek olduğu görülmektedir. $N = 256$ ve $N = 512$ alındığında sonuçlar birbirine çok yakındır. Diğer yandan, N sayısının sonuçlara olan etkisi, özellikle $\Delta t = 0.005$ ve $\Delta t = 0.01$ seçimleriyle birlikte ortaya çıkarken, $\Delta t = 0.02$ ve $\Delta t = 0.04$ için hata değerleri çok fazla değişmemektedir. (Chou, et al.,2007) referansı ile kıyaslandığında önerilen yöntemin CN-MG yöntemine çok yakın sonuçlar ürettiği ifade edilebilir.

İkinci olarak, (1.7) sisteminde denklem katsayıları

$$a = 2, b = 1 \text{ ve } d = 0.001$$

olacak şekilde seçildi. Böylece reaksiyon terimlerinin sistem üzerindeki etkisi artırıldı. Bu seçimle birlikte elde edilen hata normları Tablo 2.3 ile verildi. Sonuçlar incelendiğinde, difüzyonun sistem üzerindeki etkisinin azalmasının, doğruluk açısından, V çözümünü olumsuz etkilediği söylenebilir. Bunun yansıması, U fonksiyonunun modellenmesinde doğruluk oranında bir artış gözlemlenmektedir. Ayrıca, reaksiyonun etkin hale gelmesiyle birlikte, N parametresinin çözümler üzerindeki etkisinin iyice azaldığı görülmektedir. Tablo 2.3 incelendiğinde, kuadratik B-spline kolokeyşin yönteminin, reaksiyon baskın durum için Chou ve arkadaşlarının (2007) yaptığı çalışma ile aynı sonuçları ürettiği de görülmektedir.

Tablo 2.2: $t = 1$ anında difüzyon baskın durum için hata normları

N	Δt	U		V	
		$L_2 \times 10^4$	$L_\infty \times 10^4$	$L_2 \times 10^6$	$L_\infty \times 10^6$
64	0.005	0.642021	0.718208	3.01026	3.36747
	0.01	0.689406	0.770619	3.20680	3.58450
	0.02	0.875547	0.977742	3.97698	4.44077
	0.04	1.613415	1.801324	7.02611	7.84263
128	0.005	0.171259	0.192333	0.79660	0.89462
	0.01	0.217188	0.243795	0.98640	1.10719
	0.02	0.400059	0.449017	1.74162	1.95453
	0.04	1.129969	1.268788	4.75500	5.33853
256	0.005	0.054085	0.060869	0.24562	0.27642
	0.01	0.099606	0.112093	0.43355	0.48788
	0.02	0.281484	0.316840	1.18432	1.33299
	0.04	1.008703	1.135659	4.18587	4.71252
512	0.005	0.024851	0.028003	0.10816	0.12188
	0.01	0.070247	0.079168	0.29553	0.33305
	0.02	0.251790	0.283796	1.04482	1.17761
	0.04	0.977982	1.102377	4.04195	4.55602
(Chou, et al.,2007) CN-MG yöntemi					
512	0.005		0.0116		
	0.01		0.0627		
	0.02		0.267		
	0.04		1.09		

Tablo 2.3: $t = 1$ anında reaksiyon baskın durum için hata normları

N	Δt	U		V	
		$L_2 \times 10^4$	$L_\infty \times 10^4$	$L_2 \times 10^5$	$L_\infty \times 10^5$
64	0.005	0.027465	0.030752	0.071883	0.080485
	0.01	0.108509	0.121494	0.277648	0.310873
	0.02	0.432714	0.484495	1.100741	1.232462
	0.04	1.729974	1.936992	4.393648	4.393648
128	0.005	0.027022	0.030373	0.069144	0.077718
	0.01	0.107754	0.121116	0.274116	0.308105
	0.02	0.430710	0.484116	1.094037	1.229694
	0.04	1.722970	1.936613	4.374253	4.916648
256	0.005	0.026886	0.030278	0.068395	0.077026
	0.01	0.107461	0.121021	0.272970	0.307413
	0.02	0.429790	0.484022	1.091300	1.229002
	0.04	1.719544	1.936519	4.365153	4.915956
512	0.005	0.026839	0.030255	0.068175	0.076853
	0.01	0.107336	0.120997	0.272551	0.307241
	0.02	0.429351	0.483998	1.090084	1.228829
	0.04	1.717849	1.936495	4.360752	4.915783
(Chou, et al.,2007) CN-MG yöntemi					
512	0.005		0.0302		
	0.01		0.121		
	0.02		0.484		
	0.04		1.94		

Son olarak,

$$a = 100, b = 1 \text{ ve } d = 0.001$$

seçimi dikkate alındı. Bu seçim reaksiyonun güçlü baskın olduğu durumu netice verir. Bu durum için elde edilen sonuçlar Tablo 2.4 ile sunuldu. Reaksiyonun

güçlü baskın olduğu durumda nümerik yöntem önceki iki durumdan farklı olarak, U fonksiyonunu V ye göre daha az hatayla modellemiştir. Reaksiyonun etkisi arttıkça V nin hata normundaki artış burada da devam etmektedir. Bu problemde de N sayısındaki değişimin çözümler üzerindeki etkinliği azdır. Yine burada da önerilen yöntem (Chou, et al.,2007) referansı ile aynı sonuçları üretmiştir.

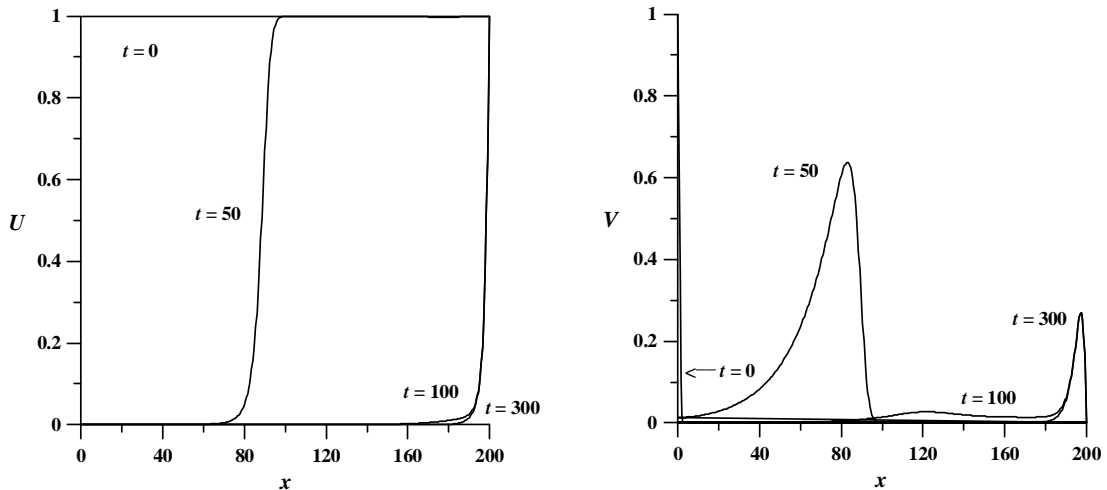
Tablo 2.4: $t = 1$ anında reaksiyon güçlü baskın durum için hata normları

N	Δt	U		V	
		$L_2 \times 10^5$	$L_\infty \times 10^5$	$L_2 \times 10^3$	$L_\infty \times 10^3$
64	0.005	0.07188	0.08049	0.071164	0.079680
	0.01	0.27765	0.31087	0.274872	0.307764
	0.02	1.10074	1.23246	1.089733	1.220137
	0.04	4.39365	4.91942	4.349711	4.870222
128	0.005	0.06914	0.07772	0.068453	0.076940
	0.01	0.27412	0.30811	0.271375	0.305024
	0.02	1.09404	1.22969	1.083096	1.217397
	0.04	4.37425	4.91665	4.330511	4.867482
256	0.005	0.06840	0.07703	0.067712	0.076255
	0.01	0.27297	0.30741	0.270240	0.304339
	0.02	1.09130	1.22900	1.080387	1.216712
	0.04	4.36515	4.91596	4.321502	4.866796
512	0.005	0.06818	0.07685	0.067494	0.076084
	0.01	0.27255	0.30724	0.269825	0.304168
	0.02	1.09008	1.22883	1.079183	1.216541
	0.04	4.36075	4.91578	4.317144	4.866625
(Chou, et al.,2007) CN-MG yöntemi					
512	0.005				0.0760
	0.01				0.304
	0.02				1.22
	0.04				4.87

2.4.2 Lineer olmayan problem (izotermal kimyasal sistem)

Bu kısımda (1.14) ile verilen izotermal kimyasal sisteminin nümerik çözümleri verildi. Hesaplamalarda ilerleyen dalga çözümlerinin asimtotik hızları için üç farklı durum dikkate alındı. (Twizell, et al., 1994; Lopez and Ramos, 1996) referanslarına benzer olarak (1.14) sisteminin nümerik ayrıştırması için $\Delta t = 0.1$ zaman adımı ve $N = 400$ bölünme noktası kullanılarak $x \in [0, 200]$ çözüm bölgesi üzerinde $t = 300$ anına kadar hesaplama yapıldı.

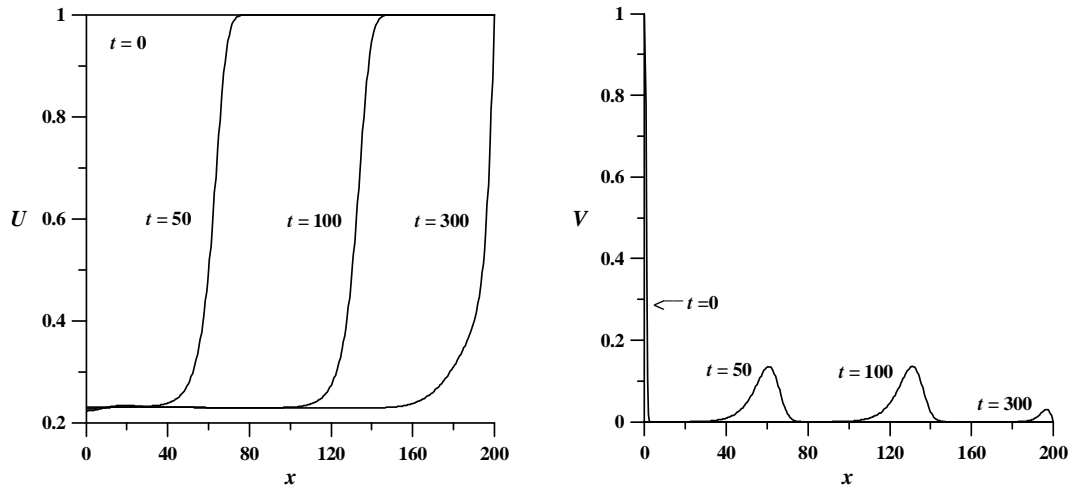
Problemin çözüm bölgesi dalgaların asimtotik hıza ulaşmaları için yeterli büyüklükte seçildi. Asimtotik hız değeri olan $2(1 - k)^{1/2}$ ifadesinde $k = 0.1$ alınırsa, hız değeri 1.897 olmaktadır. Şekil 2.2 ile verilen bu durumdaki dalga hareketi incelendiğinde, seçilen k değeriyle dalga hareketi çözüm bölgesinde asimtotik hıza ulaşmakta ve sağ sınırdaki dalgalar sıklaşma göstermektedir. Bununla birlikte, gerek üçüncü bölümde elde edilen sonuçlar, gerekse de (Twizell et.al, 1994) referansı dikkate alındığında, yapılan nümerik modellemede, ilerleyen dalgaların olması gerekenden biraz daha kısa zamanda sıklaşma gösterdikleri söylenebilir. Bu durum, yöntemin doğruluğu açısından dikkate alınması gereken bir husustur.



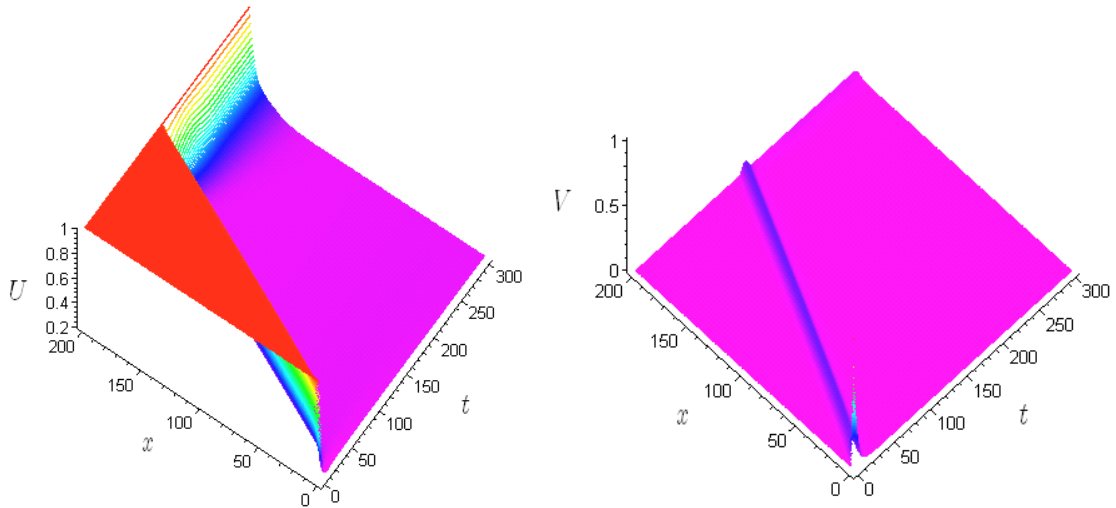
Şekil 2.2: İzotermal sistemde $k = 0.1$ için ilerleyen dalga çözümleri

$k = 0.5$ için dalga hareketinin asimtotik hızı 1.414 tür. k nın bu seçimiyle birlikte dalgalarındaki sıklaşma hareketinin bir önceki duruma göre daha geç ortaya çıktığı

Şekil 2.3 ten görülmektedir. U ve V fonksiyonlarının, konum ve zaman ikilisine göre yoğunluk değişimlerinin grafikleri Şekil 2.4 ile verildi. Şekil 2.4 incelendiğinde, V nin yoğunluğunun başlangıç aşamasında ani bir azalmaya uğradığı ancak daha sonra uzun süre genliğini değiştirmeden ilerleyen dalga hareketi sergilediği görülmektedir. Bu hareket esnasında genlik değeri yaklaşık 0.135 olarak gözlemlenmiştir.



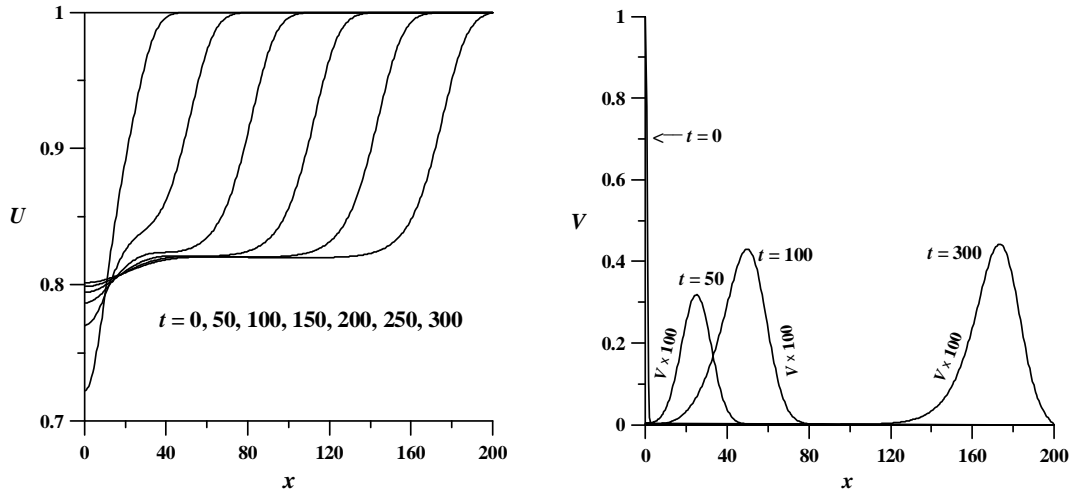
Şekil 2.3: İzotermal sistemde $k = 0.5$ için ilerleyen dalga çözümleri



Şekil 2.4: İzotermal sistemde $k = 0.5$ için konum ve zamana göre yoğunluk değişimi

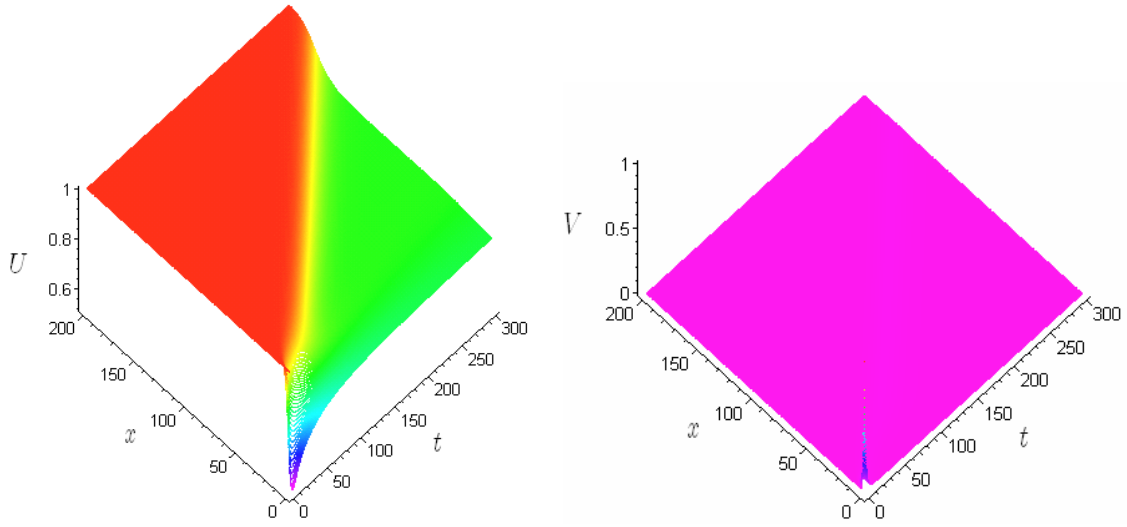
$k = 0.9$ seçilmesi durumunda ise dalganın asimtotik hız değeri 0.632 olmaktadır. Bu durum için ilerleyen dalga çözümleri Şekil 2.5 ile, U ve V fonksiyonlarının, konum

ve zamana göre yoğunluk değişimleri ise Şekil 2.6 ile verilmiştir. k nin bu seçimiyle birlikte dalga hareketi, çözüm bölgesinde asimtotik hıza ulaşamamakta ve zaman periyodu boyunca dalga hareketinde herhangi bir sıklaşma söz konusu olmamaktadır. Burada da, $k = 0.5$ durumuna benzer şekilde, V nin yoğunluğu, başlangıçta ani bir azalmaya uğramakta ve daha sonra genliğini değiştirmeden ilerleyen dalga hareketi sergilemektedir. Ancak $k = 0.9$ için başlangıçtaki yoğunluk düşüşü burada çok daha fazladır ve V nin çözüm bölgesi üzerindeki yoğunluğu sıfıra yakın bir değer olarak ölçülmektedir. Zaman periyodu içinde genlik değeri yaklaşık 0.0043 olarak gözlemlenmiştir.



Şekil 2.5: İzotermal sistemde $k = 0.9$ için ilerleyen dalga çözümleri

Yukarıda verilen şartlar altında, (1.14) izotermal kimyasal sistemi için farklı t anlarında hesaplanan (1.6) bağıl hata değerleri Tablo 2.5 ile verildi. Dalgaların asimtotik hıza ulaşmasıyla birlikte $(n + 1)$. zaman adımındaki çözümler ile n . zaman adımındaki çözümler birbirlerine çok yakın olacağından $|U^{n+1} - U^n|$ ve $|V^{n+1} - V^n|$ mutlak değerleri de sıfıra yakın sayılar olacaktır. Bu nedenle de dalgaların asimtotik hıza ulaşmalarıyla birlikte U ve V için ortaya çıkan bağıl hataların küçülmesi beklenir. Tablo 2.5 incelendiğinde $k = 0.1$ ve $k = 0.5$ için bu durum açıkça görülmektedir. Diğer yandan $k = 0.9$ için dalgaların asimtotik hıza ulaşmadığı yukarıda vurgulanmıştır. Bu nedenle de $k = 0.9$ için hata değerlerinde böyle bir azalma gözlenmemektedir.



Şekil 2.6: İzotermal sistemde $k = 0.9$ için konum ve zamana göre yoğunluk değişimi

Tablo 2.5: İzotermal sistem için farklı t anlarındaki bağıl hata değerleri

t	$k = 0.1$		$k = 0.5$		$k = 0.9$	
	U	V	U	V	U	V
	Hata $\times 10^3$	Hata $\times 10^3$	Hata $\times 10^3$	Hata $\times 10^3$	Hata $\times 10^3$	Hata $\times 10^3$
50	4.879104	15.63468	2.005960	16.50014	0.092705	5.459553
100	0.136987	3.098542	2.801014	16.53819	0.123990	4.267943
150	0.024451	0.056680	0.939880	16.02644	0.129954	4.294662
200	0.013708	0.048361	0.162594	2.663386	0.135502	4.261974
250	0.009845	0.045605	0.051780	0.412773	0.140918	4.240118
300	0.007814	0.043512	0.034250	0.378442	0.146408	4.209167

2.4.3 Brusselator modeli

(1.17) ile verilen Brusselator modeli için bu kısımda (Abdulle, 2002) referansına benzer olarak

$$U(x, 0) = 1 + \sin(2\pi x), \quad V(x, 0) = 3$$

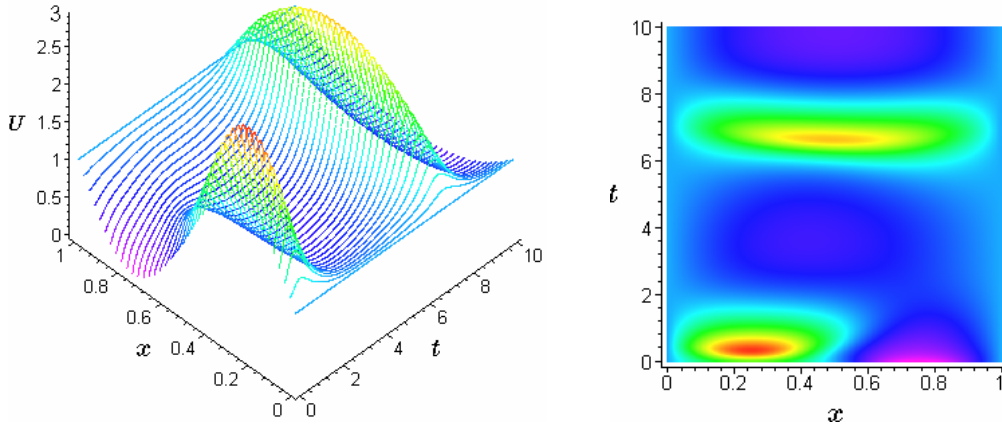
başlangıç şartı seçilerek

$$U_0 = U_N = 1 \quad \text{ve} \quad V_0 = V_N = 3$$

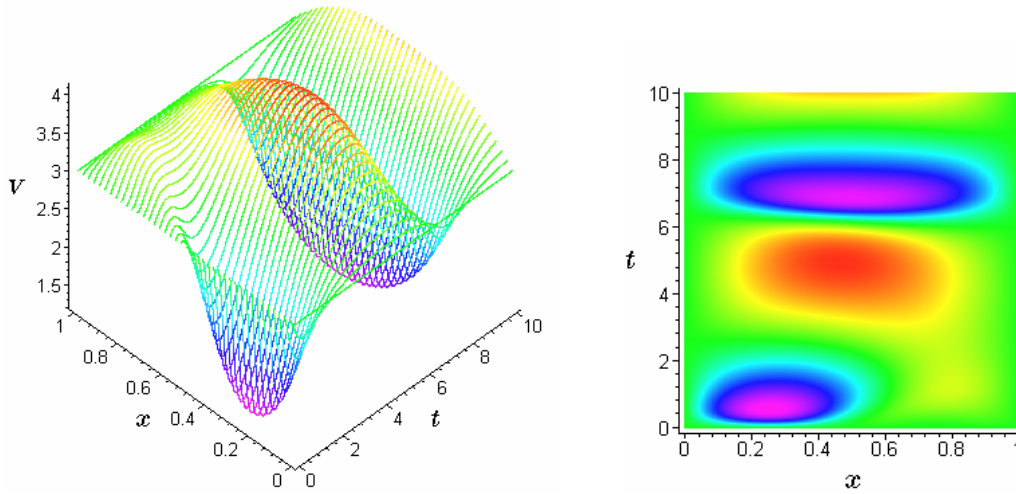
sınır koşulları altında sistemin çözümleri araştırıldı. Çözüm parametreleri olarak

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \frac{1}{50}, A = 1, B = 3, \Delta t = 0.025$$

alınarak $x \in [0, 1]$ bölgesi üzerinde $t \in [0, 10]$ zaman aralığında çözümler elde edildi. Hem U nun hem de V nin yoğunluk değişimleri hesaplanırken $N = 40$ bölünme noktası kullanıldı. Zaman periyodunda oluşan desenlerin daha net görülebilmesi için ise $N = 400$ seçilerek yoğunluk değişiminin konum-zaman eksenine izdüşümü alındı. Elde edilen çözümlerin grafikleri Şekil 2.7 ve Şekil 2.8 ile verildi. Şekiller incelendiğinde başlangıçta bir sintüs eğrisi ile başlayan U fonksiyonunun yoğunluk hareketinin önce düzleştiği sonra ise yüksekliğini artırarak bir tepe oluşturduğu görülmektedir. Başlangıçta bütün çözüm bölgesi üzerinde düzgün yoğunluğa sahip olan V fonksiyonunun ise zaman periyodu içerisinde U nun hareketine benzer ancak ters yönlü bir hareket sergilediği görülmektedir.



Şekil 2.7: Brusselator modelinde konum ve zamana göre U nun yoğunluk değişimi



Şekil 2.8: Brusselator modelinde konum ve zamana göre V nin yoğunluk değışimi

Kuadratik B-spline kolokeyşin yönteminin yukarıda seçilen parametreler ve koşullar altında Brusselator modeli için farklı zamanlarda ürettiğı (1.6) bağıl hata değeri Tablo 2.6 ile verildi. U ve V çözüm fonksiyonlarının büyüklüklerinde kısa zamanda hızlı değışimlerin ortaya çıkması $|U^{n+1} - U^n|$ ve $|V^{n+1} - V^n|$ mutlak değeri büyüteceğinden bu değışimin yaşandığı zaman periyodunda bağıl hata da büyüyecektir. Şekil 2.7 ve Şekil 2.8 incelendiğinde $t = 2, 6$ ve 8 de her iki çözüm fonksiyonunun da yoğunluklarında ani artma ve azalmalar görülmektedir. Bu nedenle U ve V için $t = 2, 6$ ve 8 anlarında bağıl hatanın artması beklenen bir durumdur ve bu durum Tablo 2.6 da görülmektedir.

Tablo 2.6: Brusselator modelinde farklı t anlarındaki bağıl hata değeri

t	U	V
	Hata $\times 10^3$	Hata $\times 10^3$
2	10.40117	5.005126
4	1.935147	1.480537
6	26.38979	15.82520
8	16.03732	8.053299
10	1.394376	2.528638

2.4.4 Schnakenberg modeli

Bu kısımda Schnakenberg modeli için salınım problemi dikkate alındı. Bu doğrultuda, (1.18) sistemindeki parametreler

$$a = 0.126779, b = 0.792366, d = 10 \text{ ve } \gamma = 10^4$$

olacak şekilde seçildi ve $[0, 1]$ çözüm aralığı üzerinde sistemin davranışları araştırıldı. Nümerik hesaplamalarda farklı Δt seçimleri kullanılarak yöntemin yakınsaklığı gözlemlendi.

Seçilen bu çözüm parametreleriyle birlikte, Schnakenberg modelinin denge çözümleri,

$$u_0 = a + b = 0.919145$$

ve

$$v_0 = \frac{b}{(a + b)^2} = 0.937903$$

şeklinde olduğundan problemin başlangıç şartının, bu denge çözümünü civarında küçük rastgele salınımlar yapacak şekilde olması amaçlandı. Bu amaca uygun olarak da

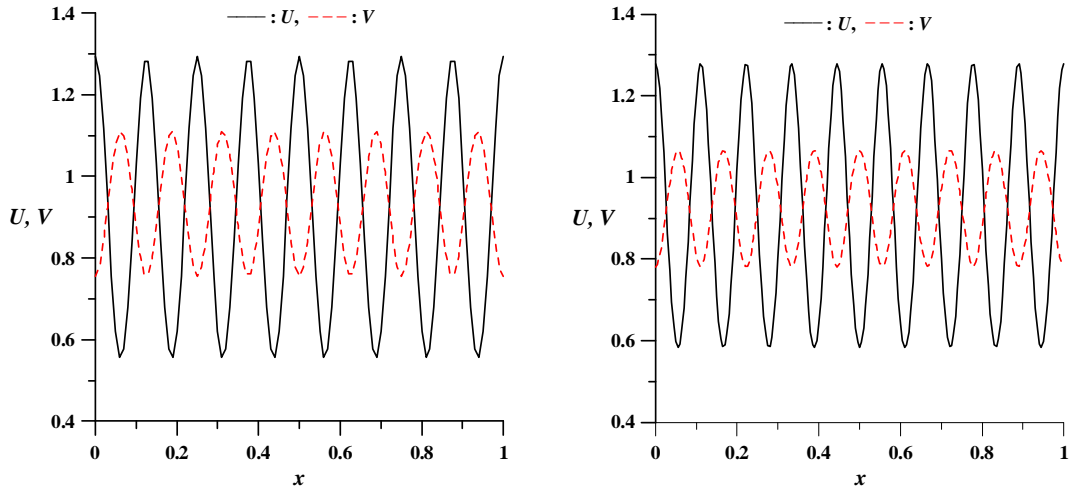
$$U(x, 0) = 0.919145 + 0.001 \sum_{j=1}^{25} \frac{\cos(2\pi jx)}{j} \quad (2.14)$$

$$V(x, 0) = 0.937903 + 0.001 \sum_{j=1}^{25} \frac{\cos(2\pi jx)}{j}$$

başlangıç şartı dikkate alındı. Çözümlerde, sınır koşulları olarak ise homojen Neumann sınır koşulları kullanıldı.

$\Delta t = 4 \times 10^{-6}$ seçimi için $t = 2.5$ anındaki çözüm davranışları Şekil 2.9 ile verildi. Bu şekil incelendiğinde, salınım hareketi boyunca U ile V fonksiyonlarının tepe noktaları 180 derece farklı olacak şekilde salınım yaptıkları görülmektedir. $N = 100$ alındığında U ve V fonksiyonlarının 8 salınım yaptıkları görülmektedir. Bununla birlikte $N = 200$ alındığında ise salınım sayısı 9 a çıkmaktadır. Bu sonuç, (Ruuth, 1995; Madzvamuse, 2006) referanslarıyla birlikte dikkate alındığında, yöntemin küçük N ile iyi sonuç üretmediğinin bir göstergesidir. Buradan (1.20) sisteminin zaman ayrıştırması için kullanılan Crank-Nicolson formüllerinin kuadratik

B-spline kolokeyşin yöntemiyle birlikte kullanılmasının, N nin küçük değerleri için, salınım hareketi sergileyen problemlerde iyi bir seçim olmadığı söylenebilir. Diğer yandan, N değeri artırıldığında daha yüksek doğrulukta sonuçlar elde edilse bile kuadratik B-spline kolokeyşin yöntemi (1.20) sisteminin nümerik çözümünde $4N + 4$ denklem ve $4N + 8$ bilinmeyenden oluşan denklem sistemini netice verdiğinden, N sayısındaki büyüme hesaplama maliyetini çok fazla artırmaktadır. Bu da önerilen yöntem için bir dezavantaj olarak ifade edilebilir.



Şekil 2.9: $N = 100$ ve $N = 200$ için $t = 2.5$ anındaki salınım hareketleri

$N = 100$ için $t = 2.5$ anındaki bağıl hata değerleri Tablo 2.7 de görülmektedir. Bu tabloda $\Delta t > 5 \times 10^{-6}$ için bağıl hata değerinde ani bir düşüş görülmektedir. Bunun nedeni, yaklaşık olarak $\Delta t > 5 \times 10^{-6}$ alındığında çözümlerin ardışık zaman adımlarında neredeyse tamamen aynı kalmasıdır. Örneğin $\Delta t = 6 \times 10^{-6}$ için çözüm bölgesi boyunca $U = 0.9191572$ ve $V = 0.7743576$ olurken $\Delta t = 7 \times 10^{-6}$ için çözümler $U = 0.9191730$ ve $V = 0.8458257$ değerlerine çok yakın değerler almaktadır. Bu nedenle de $|U^{n+1} - U^n|$ ve $|V^{n+1} - V^n|$ mutlak değerleri sifira yaklaşmakta ve bu da bağıl hatanın küçülmesini netice vermektedir. Bununla birlikte $\Delta t > 5 \times 10^{-6}$ için çözümlerin sergilemesi gereken salınım hareketi bozulduğundan önerilen nümerik yöntemin yakınsaklığının yaklaşık olarak $\Delta t > 5 \times 10^{-6}$ için bozulduğu söylenebilir.

Tablo 2.7: $N = 100$ için $t = 2.5$ anındaki bağıl hata değerleri

Δt	Adım sayısı	U	V
4×10^{-6}	625000	5.7237E-07	5.8411E-07
5×10^{-6}	500000	7.5679E-05	7.6379E-05
6×10^{-6}	416666	5.6511E-12	9.4700E-07
7×10^{-6}	357142	2.2271E-10	1.9875E-06
8×10^{-6}	312500	7.0806E-11	1.3678E-07
9×10^{-6}	277777	1.4225E-11	2.6953E-07

2.4.5 Lineer olmayan problem (Gray-Scott modeli)

Bu kısımda, (1.19) ile tanımlanan Gray-Scott modelinin nümerik çözümleri için Zegeling ve Kok' ün (2004) çalışmasına benzer olarak sistemde yer alan parametreler

$$\varepsilon_1 = 10^{-4}, \varepsilon_2 = 10^{-6}, f = 0.024 \text{ ve } k = 0.06$$

şeklinde seçildi. Sistemin başlangıç şartı olarak ise

$$U(x, 0) = 1 - \frac{1}{2} \sin^{100}(\pi x), \quad V(x, 0) = \frac{1}{4} \sin^{100}(\pi x)$$

alındı ve $[0, 1]$ bölgesi üzerinde çözümler araştırıldı. Konum ayrıştırması yapılırken $N = 300$ bölünme noktası, zaman ayrıştırması yapılırken de $\Delta t = 0.1$ zaman adımı kullanıldı. Nümerik hesaplamalar için program

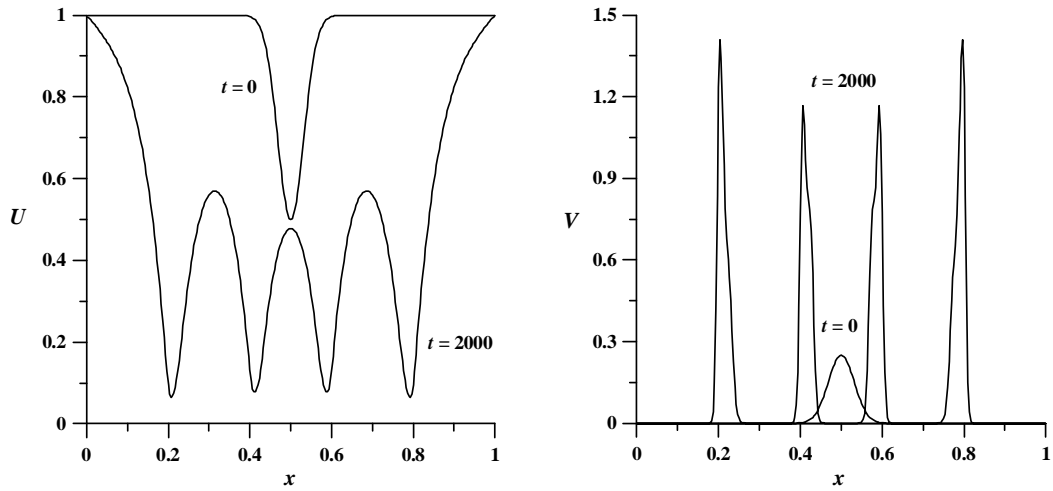
$$U(x_0, t) = 1, \quad U(x_N, t) = 1$$

ve

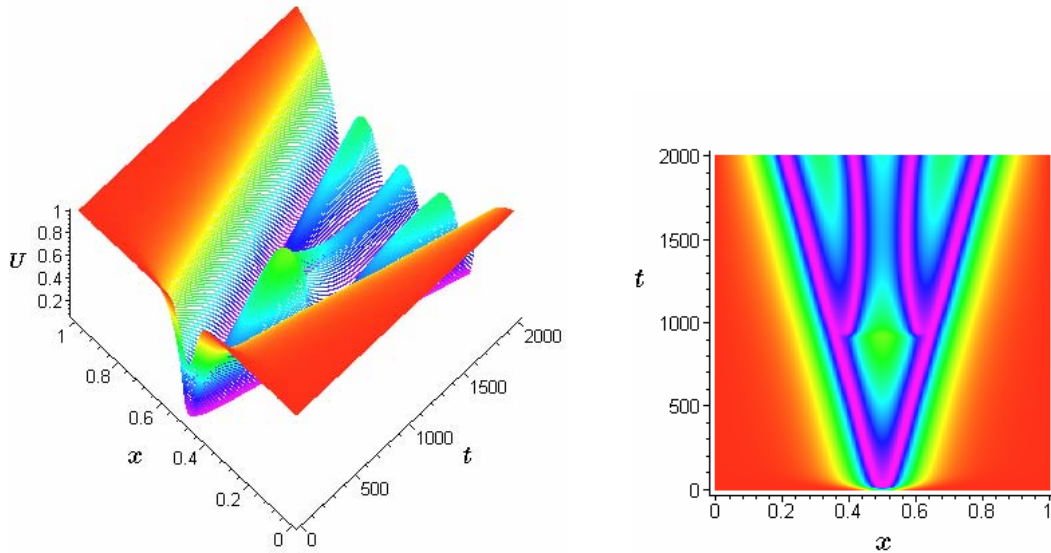
$$V(x_0, t) = 0, \quad V(x_N, t) = 0$$

Dirichlet sınır koşulları altında $t = 2000$ anına kadar çalıştırıldı ve böylece kendini tekrarlayan spot desenleri elde edildi. $t = 0$ ve $t = 2000$ anındaki çözüm profilleri Şekil 2.10 ile verildi. Seçilen bu koşullar altında, U ve V fonksiyonlarının başlangıç profillerinin önce ikiye bölündüğü daha sonra da herbir dalganın yine ikiye bölünerek

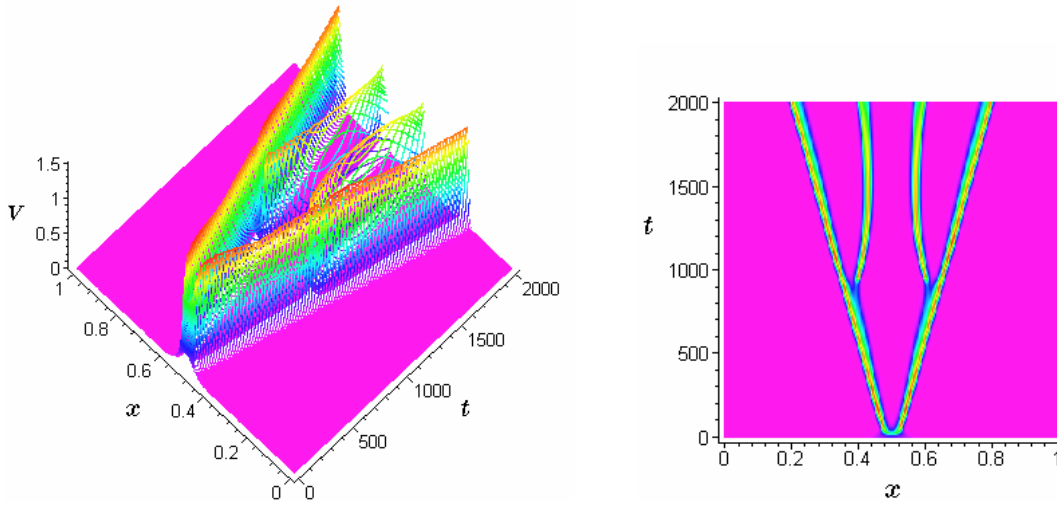
dört dalga oluşturdıkları görülmektedir. U ile V nin yoğunluk değişimini ve zaman içerisinde oluşturdıkları konumsal desenleri görebilmek için de Şekil 2.11 ve Şekil 2.12 oluşturuldu. İzdüşüm grafiklerine bakıldığında iki fonksiyonun da benzer desenleri oluşturdıkları görülmektedir.



Şekil 2.10: Gray-Scott modeli için $t = 0$ ve $t = 2000$ anındaki çözüm profilleri



Şekil 2.11: Gray-Scott modelinde konum ve zamana göre U nun yoğunluk değişimi



Şekil 2.12: Gray-Scott modelinde konum ve zamana göre U nun yoğunluk değişimi

2.5 Sonuçlar

Bu bölümde, reaksiyon-difüzyon denklem sistemlerinin nümerik çözümleri için kuadratik B-spline kolokeyşin yöntemi geliştirildi. Kuadratik B-spline fonksiyonların ikinci mertebeden türevleri sürekli olmadığından, nümerik yöntemin uygulamasına geçilmeden önce, yapılan düzenleme ile reaksiyon-difüzyon denklem sistemi birinci mertebeden türevleri içeren dört denklemlilik sistem haline getirildi. Daha sonra kolokeyşin yönteminin uygulanması ile katsayılar matrisi, her satırında sıfırdan farklı 8 eleman bulunduran $(4N + 4) \times (4N + 8)$ boyutlu blok band matrisler olan matris sistemi elde edildi. Normal şartlarda $N + 1$ bölünme noktası kullanıldığında (1.20) sisteminin nümerik çözümünde $2N + 2$ cebirsel denklem ortaya çıkacaktır. Burada ise ikinci mertebeden türev için yapılan düzenleme ile önerilen yöntem $4N + 4$ denklemlilik netice vermiştir. Bu ise sistemin çözümünde hesaplama maliyetini iki katına çıkaracağından, yöntem için bir dezavantaj teşkil etmektedir. Bu nedenle, konum ve zaman için çok küçük ayrıştırma parametrelerinin kullanıldığı hassas problemlerde bu yöntem ekonomik olmayacaktır. Ayrıca, kuadratik fonksiyonların yüksek mertebeden türevlerinin olmayışı, bu yöntemin yüksek mertebeden diferensiyel denklemlere uygulanmasında bir kısıtlayıcı faktör olarak karşımıza çıkmaktadır. Bununla

birlikte, literatürdeki (Twizell, et al., 1994; Ruuth, 1995; Madzvamuse, 2006) gibi çalışmalar ve ilerleyen bölümlerde sunulan daha yüksek dereceden polinom kullanımını öngören nümerik yöntemler dikkate alındığında, Schnakenberg modelinde salınım problemi ve izotermal kimyasal sistemde $k = 0.1$ durumu, nümerik yöntemin doğruluğu açısından istenen sonuçların türetilmediği durumlar olarak vurgulanabilir. Diğer yandan, kuadratik B-spline fonksiyonların basitliği ve nümerik yöntemde band matris sistemini netice vermesi de belirtilmesi gereken olumlu noktalardır.

Sonuç olarak, reaksiyon-difüzyon denklem sistemlerinin nümerik çözümlerinde, çok küçük konum ve zaman parçalanması gerektiren problemler için kuadratik B-spline kolokeyşin yöntemi bir takım dezavantajlar içerse de genel anlamda reaksiyon-difüzyon denklem sistemlerinin nümerik çözümleri için tavsiye edilebilir bir yöntemdir.

Bir sonraki bölümde, taban fonksiyonu olarak kübik B-spline fonksiyonları kullanılarak bir yandan hesaplama maliyeti açısından daha ekonomik bir yöntem sunulurken bir yandan da taban fonksiyonlarındaki derece artırımının sonuçların doğruluğu üzerindeki etkileri gözlenecektir.

BÖLÜM 3

REAKSİYON-DİFÜZYON DENKLEM SİSTEMLERİNİN KÜBİK B-SPLİNE KOLOKEYŞİN YÖNTEMİ İLE NÜMERİK ÇÖZÜMLERİ

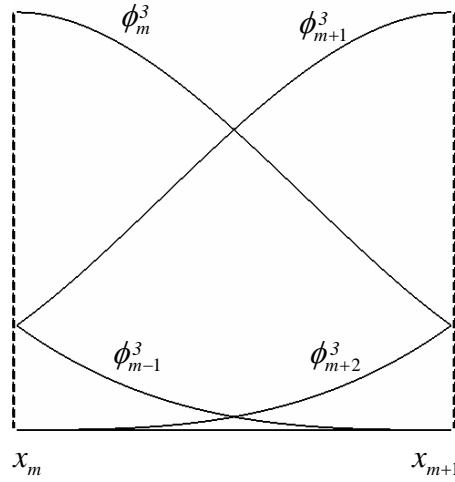
Bu bölümde, bir önceki bölüme benzer olarak (1.20) sistemi için bir nümerik çözüm yöntemi sunulacaktır. Bu kez nümerik yöntemin uygulanışında taban fonksiyonu olarak kübik-B-spline fonksiyonları seçilecek ve çözümlerde ortaya çıkacak farklılıklar gözlenecektir. Bu doğrultuda kübik B-spline fonksiyonlarının tanımı verilecek ve bazı özellikleri kısaca vurgulanacaktır. Daha sonra ise reaksiyon-difüzyon denklem sistemlerine kübik B-spline kolokeyşin yöntemi uygulanacaktır. Bir sonraki kısımda ise önceki bölümlerde verilen test problemleri üzerinde nümerik yöntemin doğruluğu ve seçilen problemlerin karakteristikleri araştırılacaktır. Son olarak da yöntemin getirdiği olanaklar ve limitasyonlar üzerinde durulacaktır.

3.1 Kübik B-spline Taban Fonksiyonları

$[a, b]$ aralığı üzerinde (2.1) ile verilen konum ayrıştırmasını dikkate alalım. Ardışık dört aralığı içerecek şekildeki bir $[x_{m-2}, x_{m+2}]$ aralığı üzerinde sıfırdan farklı değer alan kübik B-spline fonksiyonunu ϕ_m^3 ile gösterelim. Bu durumda, $h = x_{m+1} - x_m$ ve $m = -1, 0, \dots, N + 1$ olmak üzere ϕ_m^3 fonksiyonu

$$\phi_m^3 = \frac{1}{h^3} \begin{cases} (x - x_{m-2})^3, & x \in [x_{m-2}, x_{m-1}] \\ h^3 + 3h^2(x - x_{m-1}) + 3h(x - x_{m-1})^2 - 3(x - x_{m-1})^3, & x \in [x_{m-1}, x_m] \\ h^3 + 3h^2(x_{m+1} - x) + 3h(x_{m+1} - x)^2 - (x_{m+1} - x)^3, & x \in [x_m, x_{m+1}] \\ (x_{m+1} - x)^3, & x \in [x_{m+1}, x_{m+2}] \\ 0, & \text{diğer durumlarda} \end{cases}$$

şeklinde tanımlanır. ϕ_m^3 kübik B-spline fonksiyonu ardışık dört aralığı örttüğünden $[x_m, x_{m+1}]$ şeklindeki bir aralık da ardışık dört kübik B-spline fonksiyonu tarafından örtülür. Bu durum Şekil 3.1 ile gösterilmiştir.



Şekil 3.1: Kübik B-spline şekil fonksiyonları

(2.1) ayrıştırmasının bölünme noktalarında, ϕ_m^3 kübik B-spline fonksiyonu ve onun konuma göre türevlerinin alacağı değerler Tablo 3.1 de verilmiştir. Diferensiyel denklemin çözümlerine yapılacak yaklaşımlarda bu değerler kullanılacaktır.

Tablo 3.1: Bölünme noktalarındaki kübik B-spline değerleri

	x_{m-2}	x_{m-1}	x_m	x_{m+1}	x_{m+2}
ϕ_m^3	0	1	4	1	0
$h(\phi_m^3)_x$	0	3	0	-3	0
$h^2(\phi_m^3)_{xx}$	0	6	-12	6	0

3.2 Kübik B-spline Kolokeyşin Yöntemi

Nümerik yöntemin uygulamasında gerekli olan diferensiyel problemin çözümlerine yapılacak yaklaşım, kübik B-spline fonksiyonların oluşturduğu $\{\phi_{-1}^3, \phi_0^3, \dots, \phi_{N+1}^3\}$ kümesi yardımıyla elde edilebilir. Prenter (1975) yaptığı çalışmasında, $[x_0, x_N]$ aralığında tanımlı fonksiyonlar için $\{\phi_{-1}^3, \phi_0^3, \dots, \phi_{N+1}^3\}$ kümesinin bir taban oluşturduğunu ifade etmiştir. Bu nedenle $[x_0, x_N]$ aralığı üzerinde tanımlı herhangi bir sürekli $U(x, t)$ fonksiyonu kübik B-spline fonksiyonlarının bir lineer kombinasyonu

ile ifade edilebilir. Buna göre δ_m değerleri zamana bağlı parametreler olmak üzere

$$\begin{aligned} U(x, t) &= \sum_{m=-1}^{N+1} \delta_m(t) \phi_m^3(x) \\ &= \delta_{-1} \phi_{-1}^3(x) + \delta_0 \phi_0^3(x) + \cdots + \delta_{N+1} \phi_{N+1}^3(x) \end{aligned}$$

eşitliği U fonksiyonu için bir nümerik yaklaşım olarak alınabilir. Bununla birlikte, kübik B-spline fonksiyonların ikinci mertebeden türevleri de sürekli olduğundan U fonksiyonunun türevi için de

$$\begin{aligned} U_x(x, t) &= \sum_{m=-1}^{N+1} \delta_m(t) (\phi_m^3)_x \\ &= \delta_{-1} (\phi_{-1}^3)_x + \delta_0 (\phi_0^3)_x + \cdots + \delta_{N+1} (\phi_{N+1}^3)_x \end{aligned}$$

ve

$$\begin{aligned} U_{xx}(x, t) &= \sum_{m=-1}^{N+1} \delta_m(t) (\phi_m^3)_{xx} \\ &= \delta_{-1} (\phi_{-1}^3)_{xx} + \delta_0 (\phi_0^3)_{xx} + \cdots + \delta_{N+1} (\phi_{N+1}^3)_{xx} \end{aligned}$$

eşitlikleri geçerli olacaktır. Yapılan bu nümerik yaklaşımlarda, Tablo 3.1 ile verilen değerler kullanılırsa, x_m bölünme noktalarında U fonksiyonu ve onun konuma göre türevleri için

$$\begin{aligned} U(x_m) &= U_m &= \delta_{m-1} + 4\delta_m + \delta_{m+1} \\ U_x(x_m) &= (U_m)_x &= \frac{3}{h}(\delta_{m+1} - \delta_{m-1}) \\ U_{xx}(x_m) &= (U_m)_{xx} &= \frac{6}{h^2}(\delta_{m-1} - 2\delta_m + \delta_{m+1}) \end{aligned} \tag{3.1}$$

bağıntıları bulunur. Benzer şekilde bir $V(x, t)$ fonksiyonu için

$$\begin{aligned} V(x, t) &= \sum_{m=-1}^{N+1} \gamma_m(t) \phi_m^3(x) \\ &= \gamma_{-1} \phi_{-1}^3(x) + \gamma_0 \phi_0^3(x) + \cdots + \gamma_{N+1} \phi_{N+1}^3(x) \end{aligned}$$

ve onun konuma göre türevleri için de

$$\begin{aligned} V_x(x, t) &= \sum_{m=-1}^{N+1} \gamma_m(t) (\phi_m^3)_x \\ &= \gamma_{-1} (\phi_{-1}^3)_x + \gamma_0 (\phi_0^3)_x + \cdots + \gamma_{N+1} (\phi_{N+1}^3)_x \end{aligned}$$

ve

$$\begin{aligned} V_{xx}(x, t) &= \sum_{m=-1}^{N+1} \gamma_m(t) (\phi_m^3)_{xx} \\ &= \gamma_{-1} (\phi_{-1}^3)_{xx} + \gamma_0 (\phi_0^3)_{xx} + \cdots + \gamma_{N+1} (\phi_{N+1}^3)_{xx} \end{aligned}$$

yaklaşımları yapılabilir. Burada γ_m değerleri zamana bağlı parametrelerdir. Böylece x_m bölünme noktalarında V fonksiyonu ve türevleri için

$$\begin{aligned} V(x_m) &= V_m = \gamma_{m-1} + 4\gamma_m + \gamma_{m+1} \\ V_x(x_m) &= (V_m)_x = \frac{3}{h}(\gamma_{m+1} - \gamma_{m-1}) \\ V_{xx}(x_m) &= (V_m)_{xx} = \frac{6}{h^2}(\gamma_{m-1} - 2\gamma_m + \gamma_{m+1}) \end{aligned} \quad (3.2)$$

eşitlikleri bulunur.

Sonlu elemanları yönteminde ağırlık fonksiyonlarının dirac delta fonksiyonları olarak seçilmesinin, nümerik yöntemin uygulanışında yaklaşım fonksiyonlarının diferensiyel denklemde yerine yazılmasını netice verdiği daha önce vurgulanmıştı. Buna göre, (1.23) şeklinde lineerleştirilmiş reaksiyon-difüzyon denkleminin kolokeyşin yöntemi ile çözülmesi, (3.1) ve (3.2) ile verilen yaklaşımların (1.23) sisteminde yerlerine yazılarak elde edilecek denklem sisteminden zamana bağlı δ_m ve γ_m parametrelerinin elde edilmesi esasına dayanmaktadır. Bu yerine yazma işlemi sonrasında elde edilen ifade düzenlenirse, $m = 0, 1, \dots, N$ olmak üzere (1.23) sisteminde birinci denklem için

$$\begin{aligned} &\alpha_{m1}\delta_{m-1}^{n+1} + \alpha_{m2}\gamma_{m-1}^{n+1} + \alpha_{m3}\delta_m^{n+1} \\ &\quad + \alpha_{m4}\gamma_m^{n+1} + \alpha_{m5}\delta_{m+1}^{n+1} + \alpha_{m6}\gamma_{m+1}^{n+1} \\ &= \alpha_{m7}\delta_{m-1}^n + \alpha_{m8}\gamma_{m-1}^n + \alpha_{m9}\delta_m^n + \alpha_{m10}\gamma_m^n \\ &\quad + \alpha_{m11}\delta_{m+1}^n + \alpha_{m12}\gamma_{m+1}^n + \beta_{m4} \end{aligned} \quad (3.3)$$

ve ikinci denklem için de

$$\begin{aligned} &\alpha_{m13}\delta_{m-1}^{n+1} + \alpha_{m14}\gamma_{m-1}^{n+1} + \alpha_{m15}\delta_m^{n+1} \\ &\quad + \alpha_{m16}\gamma_m^{n+1} + \alpha_{m17}\delta_{m+1}^{n+1} + \alpha_{m18}\gamma_{m+1}^{n+1} \\ &= \alpha_{m19}\delta_{m-1}^n + \alpha_{m20}\gamma_{m-1}^n + \alpha_{m21}\delta_m^n + \alpha_{m22}\gamma_m^n \\ &\quad + \alpha_{m23}\delta_{m+1}^n + \alpha_{m24}\gamma_{m+1}^n + \beta_{m8} \end{aligned} \quad (3.4)$$

şeklinde her satırında sıfırdan farklı 6 eleman bulunduran $(2N + 2) \times (2N + 6)$ boyutlu band matrisler, \mathbf{d}_3^n ve \mathbf{F}_3 de

$$\begin{aligned}\mathbf{d}_3^n &= [\delta_{-1}^n, \gamma_{-1}^n, \delta_0^n, \gamma_0^n, \dots, \delta_{N+1}^n, \gamma_{N+1}^n]^T, \\ \mathbf{F}_3 &= [\beta_{m4}, \beta_{m8}, \beta_{m4}, \beta_{m8}, \dots, \beta_{m4}, \beta_{m8}]^T\end{aligned}$$

şeklindeki vektörlerdir.

(3.5) sisteminin çözülebilmesi için bilinmeyen sayısı ile denklem sayısı birbirine eşit olmalıdır. Sınır koşullarının uygulanması, δ_{-1}, γ_{-1} ve $\delta_{N+1}, \gamma_{N+1}$ sınır parametrelerinin sistemden elimine edilmesine ve dolayısıyla da (3.5) sisteminde bilinmeyen sayısı ile denklem sayısının eşitlenmesine olanak sağlar. Yapılan nümerik çözümlerde sınır koşulu olarak Dirichlet sınır koşulları kullanılıyorsa, (3.1) ve (3.2) bağıntılarından

$$\begin{aligned}m = 0 &\Rightarrow \delta_{-1} = U_0 - 4\delta_0 - \delta_1, \\ &\Rightarrow \gamma_{-1} = V_0 - 4\gamma_0 - \gamma_1,\end{aligned}$$

ve

$$\begin{aligned}m = N &\Rightarrow \delta_{N+1} = U_N - 4\delta_N - \delta_{N-1}, \\ &\Rightarrow \gamma_{N+1} = V_N - 4\gamma_N - \gamma_{N-1}\end{aligned}$$

ifadeleri elde edilir. Neumann sınır koşulları kullanılıyorsa da benzer yolla,

$$\begin{aligned}m = 0 &\Rightarrow \delta_{-1} = \delta_1 - \frac{h}{3}U'_0, \\ &\Rightarrow \gamma_{-1} = \gamma_1 - \frac{h}{3}V'_0,\end{aligned}$$

ve

$$\begin{aligned}m = N &\Rightarrow \delta_{N+1} = \frac{h}{3}U'_N + \delta_{N-1}, \\ &\Rightarrow \gamma_{N+1} = \frac{h}{3}V'_N + \gamma_{N-1}\end{aligned}$$

eşitlikleri bulunur. Sınır parametreleri elimine edildikten sonra (3.5) denkleminin çözümü Thomas algoritması yardımıyla elde edilebilir. Hesaplamalar için her bir zaman adımında (2.13) iç iterasyonunun kullanılması lineerleştirilmeden kaynaklanan hatayı azaltacaktır. Bu iç iterasyonun da uygulanmasının ardından elde edilen δ ve γ parametreleri (3.1) ve (3.2) denklemlerinde yerlerine yazılarak her bir zaman adımında istenen çözümler hesaplanabilir.

3.3 Başlangıç Koşulu

(3.5) sisteminde iterasyona başlayabilmek için çözüm parametrelerinin başlangıç değerlerinin bilinmesine ihtiyaç vardır. Bu değerler sistemin başlangıç şartından elde edilir. (3.3) ve (3.4) denklemleri verilen başlangıç şartlarına göre düzenlenirse

$$\begin{aligned}
 U^0(x_0, 0) &= U_0^0 = \delta_{-1}^0 + 4\delta_0^0 + \delta_1^0 \\
 U^0(x_1, 0) &= U_1^0 = \delta_0^0 + 4\delta_1^0 + \delta_2^0 \\
 U^0(x_2, 0) &= U_2^0 = \delta_1^0 + 4\delta_2^0 + \delta_3^0 \\
 &\vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \\
 U^0(x_N, 0) &= U_N^0 = \delta_{N-1}^0 + 4\delta_N^0 + \delta_{N+1}^0
 \end{aligned}$$

yazılır. Başlangıç şartı için oluşturulan bu sistem, $N + 1$ denklem ve $N + 3$ bilinmeyen içermektedir. Sınırlarda birinci türev bağıntısı yardımıyla δ_{-1}^0 ve δ_{N+1}^0 bilinmeyenleri

$$\delta_{-1}^0 = \delta_1^0 - \frac{h}{3}U_0', \quad \delta_{N+1}^0 = \delta_{N-1}^0 + \frac{h}{3}U_N'$$

şeklinde ifade edilirse denklem sistemi

$$\begin{bmatrix} 4 & 2 & & & & \\ 1 & 4 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & 1 & 4 & 1 \\ & & & & 2 & 4 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \delta_0^0 \\ \delta_1^0 \\ \vdots \\ \delta_{N-1}^0 \\ \delta_N^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_0^0 + \frac{h}{3}U_0' \\ U_1^0 \\ \vdots \\ U_{N-1}^0 \\ U_N^0 - \frac{h}{3}U_N' \end{bmatrix}$$

şeklinde yeniden düzenlenebilir. Benzer şekilde γ_m^0 başlangıç parametreleri için de

$$\begin{aligned}
 V^0(x_0, 0) &= V_0^0 = \gamma_{-1}^0 + 4\gamma_0^0 + \gamma_1^0 \\
 V^0(x_1, 0) &= V_1^0 = \gamma_0^0 + 4\gamma_1^0 + \gamma_2^0 \\
 V^0(x_2, 0) &= V_2^0 = \gamma_1^0 + 4\gamma_2^0 + \gamma_3^0 \\
 &\quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \\
 V^0(x_N, 0) &= V_N^0 = \gamma_{N-1}^0 + 4\gamma_N^0 + \gamma_{N+1}^0
 \end{aligned}$$

değerleri için Tablo 3.2 ile verildi. Tablo incelendiğinde, taban fonksiyonu olarak 3. dereceden polinom kullanılmasının lineer problem üzerinde kuadratik fonksiyon kullanımına göre çok küçük bir iyileşme yaptığı söylenebilir. $N = 64$ için Δt zaman adımında yapılan değişiklikler sistem üzerinde etkisini hissettirmezken, $N = 128$ ve daha büyük bölünme nokta sayılarında bu etki hata normları üzerinde daha belirgin bir şekilde görülmektedir. 2. bölümde elde edilen sonuçlarla kıyaslandığında, burada da N sayısının çözümlere olan etkisi sadece $\Delta t = 0.005$ ve $\Delta t = 0.01$ seçimlerinde kendini hissettirmektedir. Kübik B-spline kolokeyşin yöntemi ile Chou ve arkadaşlarının (2007) yaptığı çalışma karşılaştırıldığında her iki yöntemin de birbirlerine çok yakın sonuçlar ürettiği görülmektedir. Hesaplanan hata sonuçlarındaki farklılık virgülden sonra 6. basamakta ortaya çıkmaktadır.

(1.7) sistemindeki reaksiyonun etkisi

$$a = 2, b = 1 \text{ ve } d = 0.001$$

seçimiyle artırılabilir. Tablo 3.3 te görüldüğü gibi, reaksiyon mekanizmasının etkinliği, sistemin konum parçalanmasına olan bağımlılığını daha da azaltmıştır. $N = 64$ alınması ile $N = 512$ alınması arasında hata normlarında ortaya çıkan değişim yok sayılabilecek kadar azdır. Diğer yandan, reaksiyon terimlerinin denklem sistemi üzerinde baskın hale gelmesi V fonksiyonunun modellenmesinde hatayı arttıran bir faktör olarak ortaya çıkmaktadır. Reaksiyon baskın durum için (Chou, et al., 2007) referansı ile önerilen yöntemin ürettiği hatalar eşit olmaktadır.

Tablo 3.2: $t = 1$ anında difüzyon baskın durum için hata normları

N	Δt	U		V	
		$L_2 \times 10^4$	$L_\infty \times 10^4$	$L_2 \times 10^6$	$L_\infty \times 10^6$
64	0.005	0.32776	0.36698	1.53249	1.71588
	0.01	0.37344	0.41813	1.72104	1.92699
	0.02	0.55618	0.62274	2.47524	2.77144
	0.04	1.28727	1.44132	5.49255	6.14981
128	0.005	0.09300	0.10453	0.42860	0.48174
	0.01	0.13850	0.15568	0.61640	0.69283
	0.02	0.32053	0.36027	1.36764	1.53722
	0.04	1.04875	1.17879	4.37310	4.91535
256	0.005	0.03456	0.03892	0.15380	0.17321
	0.01	0.07997	0.09006	0.34123	0.38429
	0.02	0.26164	0.29465	1.09100	1.22867
	0.04	0.98844	1.11316	4.09057	4.60673
512	0.005	0.01997	0.02252	0.08522	0.09607
	0.01	0.06534	0.07366	0.27248	0.30716
	0.02	0.24683	0.27825	1.02151	1.15153
	0.04	0.97292	1.09675	4.01815	4.52957
(Chou, et al.,2007) CN-MG yöntemi					
512	0.005		0.0116		
	0.01		0.0627		
	0.02		0.267		
	0.04		1.09		

Reaksiyon terimlerinin daha da güçlü hale getirilmesi durumunda nümerik yöntemin ürettiği sonuçları analiz edebilmek için Tablo 3.4 oluşturuldu. Bu amaçla (1.7) sisteminde denklem katsayıları

$$a = 100, b = 1 \text{ ve } d = 0.001$$

şeklinde seçildi ve program $t = 1$ anına kadar çalıştırıldı.

Tablo 3.3: $t = 1$ anında reaksiyon baskın durum için hata normları

N	Δt	U		V	
		$L_2 \times 10^4$	$L_\infty \times 10^4$	$L_2 \times 10^5$	$L_\infty \times 10^5$
64	0.005	0.02724	0.03050	0.07024	0.07864
	0.01	0.10828	0.12124	0.27600	0.30903
	0.02	0.43249	0.48424	1.09909	1.23062
	0.04	1.72975	1.93674	4.39200	4.91757
128	0.005	0.02697	0.03031	0.06873	0.07726
	0.01	0.10770	0.12105	0.27371	0.30764
	0.02	0.43065	0.48405	1.09363	1.22923
	0.04	1.72291	1.93655	4.37384	4.91619
256	0.005	0.02687	0.03026	0.06829	0.07691
	0.01	0.10745	0.12101	0.27287	0.30730
	0.02	0.42978	0.48401	1.09120	1.22889
	0.04	1.71953	1.93650	4.36505	4.91584
512	0.005	0.02684	0.03025	0.06815	0.07682
	0.01	0.10733	0.12099	0.27253	0.30721
	0.02	0.42935	0.48399	1.09006	1.22880
	0.04	1.71785	1.93649	4.36073	4.91575
(Chou, et al.,2007) CN-MG yöntemi					
512	0.005		0.0302		
	0.01		0.121		
	0.02		0.484		
	0.04		1.94		

Tablo 3.4 incelendiğinde, reaksiyonun güçlenmesiyle birlikte, U fonksiyonu için oraya çıkan hata normlarında bir düşüş olduğu görülürken V fonksiyonu için hata normlarında belirgin bir artış gözlenmektedir. Bunun yanında, yukarıda vurgulanan

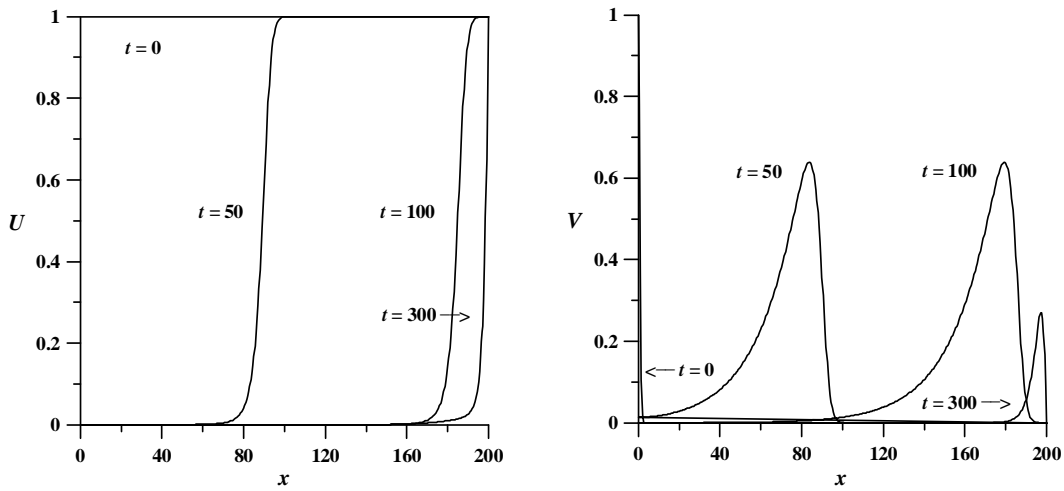
N sayısının çözümlere olan etkisindeki azalma burada daha da artmakta ve çözümler neredeyse sadece Δt ye bağlı olarak değişmektedir. Yine burada da (Chou, et al., 2007) referansı ile önerilen yöntemin ürettiği hataların neredeyse eşit olduğu söylenebilir.

Tablo 3.4: $t = 1$ anında reaksiyon güçlü baskın durum için hata normları

N	Δt	U		V	
		$L_2 \times 10^5$	$L_\infty \times 10^5$	$L_2 \times 10^3$	$L_\infty \times 10^3$
64	0.005	0.0702	0.0786	0.06953	0.07785
	0.01	0.2760	0.3090	0.27324	0.30594
	0.02	1.0991	1.2306	1.08810	1.21831
	0.04	4.3920	4.9176	4.34808	4.86839
128	0.005	0.0687	0.0773	0.06805	0.07648
	0.01	0.2737	0.3076	0.27097	0.30457
	0.02	1.0936	1.2292	1.08269	1.21694
	0.04	4.3738	4.9162	4.33010	4.86702
256	0.005	0.0683	0.0769	0.06761	0.07614
	0.01	0.2729	0.3073	0.27014	0.30423
	0.02	1.0912	1.2289	1.08029	1.21660
	0.04	4.3651	4.9158	4.32140	4.86668
512	0.005	0.0681	0.0768	0.06747	0.07606
	0.01	0.2725	0.3072	0.26980	0.30414
	0.02	1.0901	1.2288	1.07916	1.21651
	0.04	4.3607	4.9158	4.31712	4.86660
(Chou, et al.,2007) CN-MG yöntemi					
512	0.005				0.0760
	0.01				0.304
	0.02				1.22
	0.04				4.87

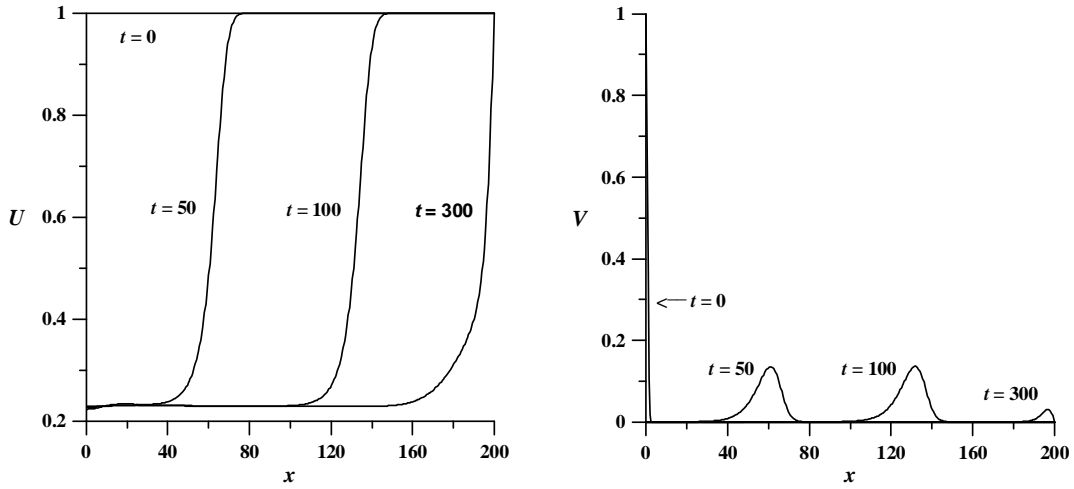
3.4.2 Lineer olmayan problem (izotermal kimyasal sistem)

Bu kısımda 2. bölüme benzer olarak (1.14) ile verilen izotermal kimyasal sisteminin çözümleri için üç ayrı durum dikkate alındı. Hesaplamalarda, 2. bölüm ile aynı koşul ve aynı parametreler kullanılarak sonuçlar arasında ortaya çıkacak farklar gözlemlendi. Bu amaçla, sistemin başlangıç koşulu olarak (1.15) seçildi ve (1.16) sınır koşulları altında elde edilen çözümlerin grafikleri verildi. Nümerik hesaplamalar için $\Delta t = 0.1$ ve $N = 400$ seçilerek $x \in [0, 200]$ çözüm bölgesi üzerinde $t = 300$ anına kadar hesaplama yapıldı. $k = 0.1$ için ilerleyen dalga çözümleri, Şekil 3.2 ile verildi. Bu durumda, dalga hareketi asimtotik hıza ulaşmakta ancak 2. bölüme kıyasla, dalgaların sağ sınır yakınındaki sıklaşmasında bir miktar gecikme olmaktadır. (Twizell, et al., 1994) referansı ile kıyaslandığında bu gecikmenin normal ve olması gereken durum olduğu ifade edilebilir.

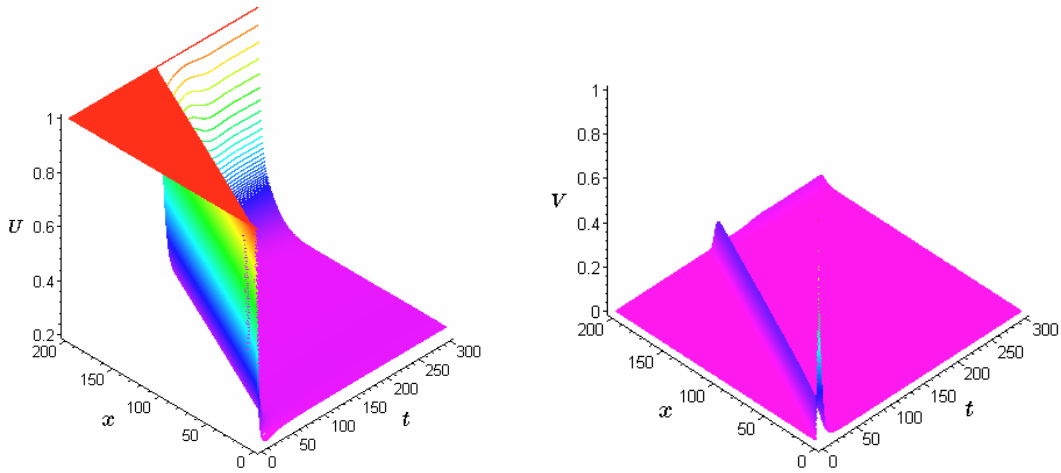


Şekil 3.2: İzotermal sistemde $k = 0.1$, $N = 400$, $\Delta t = 0.1$ için ilerleyen dalga çözümleri

$k = 0.5$ için ilerleyen dalga çözümleri Şekil 3.3 de görülmektedir. Bu durum için de dalgalar asimtotik hıza ulaşmakla birlikte sıklaşma hareketi daha da yavaşlamaktadır. U ve V fonksiyonlarının yoğunluklarındaki konum ve zamana göre değişim Şekil 3.4 te görülmektedir. $k = 0.5$ seçimiyle birlikte V fonksiyonunun genliği azalmakta ve ilerleyen dalga daha küçük genlikle hareket etmektedir.

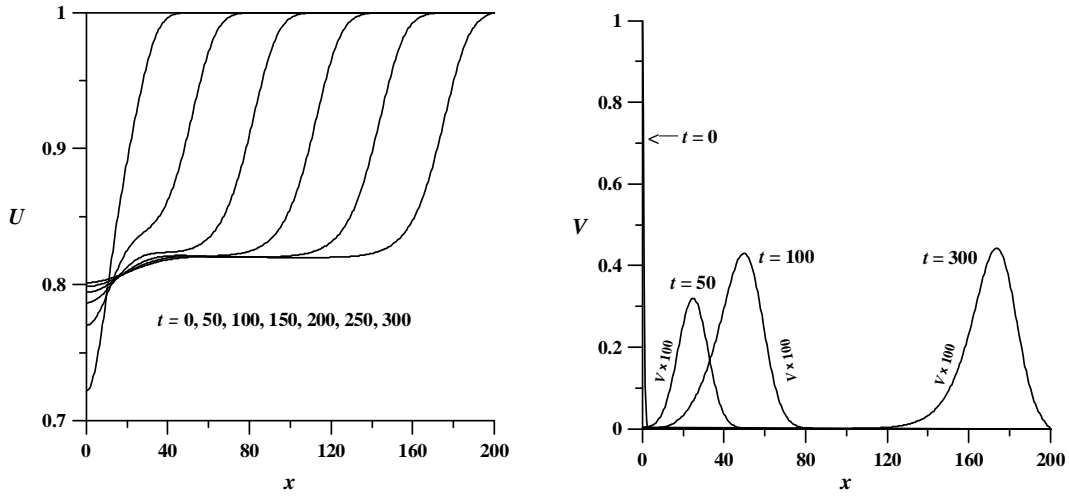


Şekil 3.3: İzotermal sistemde $k = 0.5$, $N = 400$, $\Delta t = 0.1$ için ilerleyen dalga çözümleri

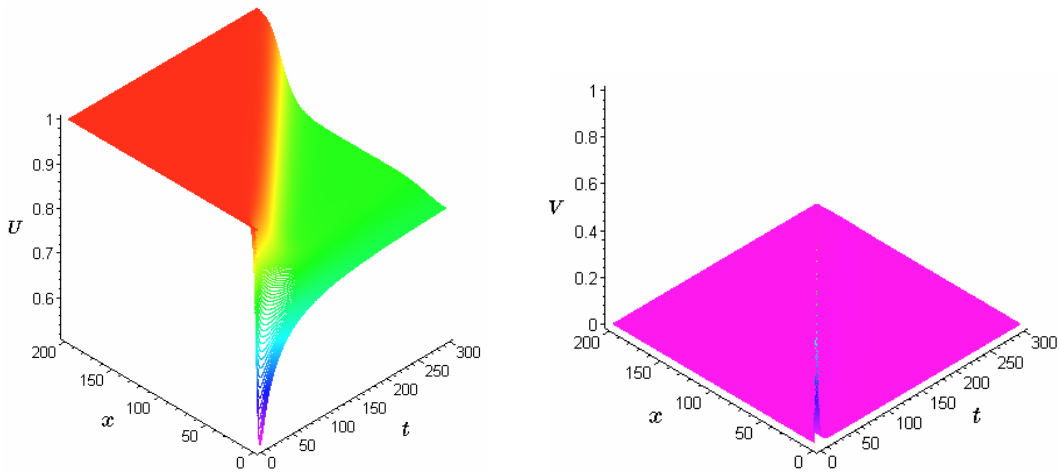


Şekil 3.4: İzotermal sistemde $k = 0.5$, $N = 400$, $\Delta t = 0.1$ için yoğunluk değişimi

$k = 0.9$ için ilerleyen dalga çözümleri Şekil 3.5 de görülmektedir. Bu şekil incelendiğinde $k = 0.9$ için dalgaların asimtotik hıza ulaşamadıkları ve sabit hıza yakın bir hızla ilerledikleri görülmektedir. Bu nedenle de hareket esnasında dalgalar arasında bir sıklaşma söz konusu değildir. Şekil 3.6 ile verilen konum ve zamana göre yoğunluk değişimleri incelendiğinde, k sayısının büyümesiyle birlikte V fonksiyonunun genliğinin iyice sıfıra yaklaştığı söylenebilir.



Şekil 3.5: İzotermal sistemde $k = 0.9$, $N = 400$, $\Delta t = 0.1$ için ilerleyen dalga çözümleri



Şekil 3.6: İzotermal sistemde $k = 0.9$, $N = 400$, $\Delta t = 0.1$ için yoğunluk değişimi

Yukarıda verilen k seçimleri için U ve V fonksiyonlarının farklı t anlarındaki (1.6) bağıl hata değerleri Tablo 3.5 de görülmektedir. Asimtotik hıza ulaşan dalga hareketindeki sıklıkla belirli bir t anından sonra (n) . ve $(n + 1)$. zaman adımlarındaki çözümlerin birbirlerine çok yaklaşmasını gerektirdiğinden $|U^{n+1} - U^n|$ ve $|V^{n+1} - V^n|$ mutlak değerleri sifra yaklaşacaktır. Bu nedenle de (1.6) bağıl hatası küçülecektir. Bağıl hatadaki bu küçülme $k = 0.1$ ve $k = 0.5$ için Tablo 3.5 de açıkça görülmektedir. Diğer yandan, $k = 0.9$ için dalgalar asimtotik hıza ulaşamayıp sabite yakın bir hızla ilerlediğinden bu durumdaki bağıl hata da çok fazla değişmemektedir.

Tablo 3.5: İzotermal sistem için farklı t anlarındaki bağıl hata değerleri

t	$k = 0.1$		$k = 0.5$		$k = 0.9$	
	U	V	U	V	U	V
	Hata $\times 10^3$	Hata $\times 10^3$	Hata $\times 10^3$	Hata $\times 10^3$	Hata $\times 10^3$	Hata $\times 10^3$
50	4.91747	15.6374	2.01453	16.5127	0.09290	4.18179
100	13.9958	15.6281	2.82266	16.5506	0.12406	3.87044
150	0.09931	0.45479	0.68232	16.2852	0.13006	3.99310
200	0.02235	0.00754	0.16243	2.49443	0.13562	4.00789
250	0.01311	0.00223	0.05149	0.04910	0.14105	4.01634
300	0.00957	0.00107	0.03421	0.01383	0.14654	4.00442

3.4.3 Lineer olmayan problem (Brusselator modeli)

(1.17) ile verilen Brusselator modeli için bu kısımda (Zegeling ve Kok, 2004) referansında yer alan test örneği dikkate alındı. Nümerik hesaplamalarda

$$\begin{aligned} U(x, 0) &= 0.5, \\ V(x, 0) &= 1 + 5x \end{aligned}$$

başlangıç şartı seçilerek

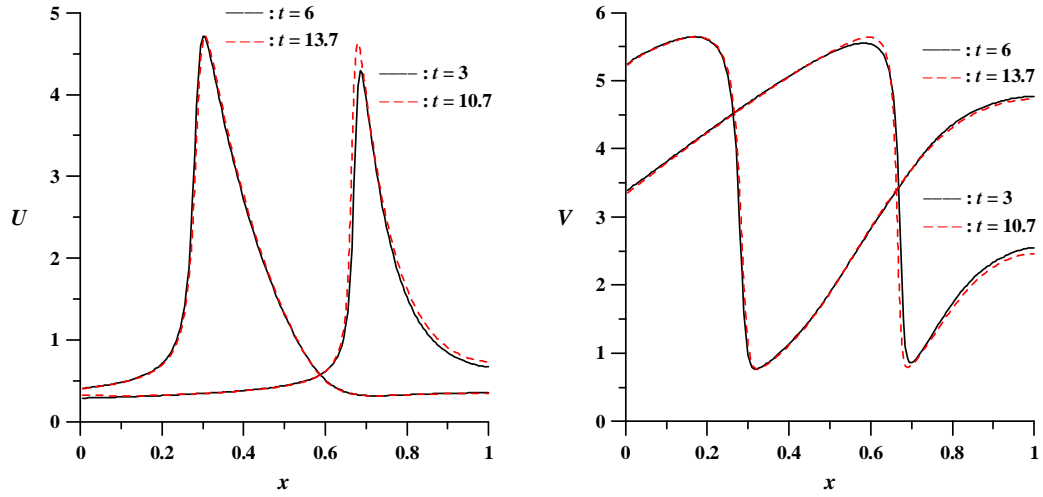
$$\begin{aligned} U_x(x_0, t) &= U_x(x_N, t) = 0, \\ V_x(x_0, t) &= V_x(x_N, t) = 0 \end{aligned}$$

sınır koşulları altında sistemin çözümleri araştırıldı. (1.17) sisteminde yer alan denklem katsayıları

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 10^{-4}, \quad A = 1, \quad B = 3.4$$

olarak alındı ve $x \in [0, 1]$ bölgesi üzerinde $t \in [0, 15]$ zaman aralığında çözümler elde edildi. Konum ayrıştırması için $N = 200$ bölünme noktası ve zaman ayrıştırması için de $\Delta t = 0.01$ zaman adımı kullanıldı. Bu seçimler altında elde edilen çözümler Şekil 3.7 ile verildi. Buradaki dalga hareketi incelendiğinde hem U hem de V

nin bu koşullar altında periyodik dalga hareketi ortaya koydukları görülmektedir. Periyodik hareket için yoğunluk değerleri Tablo 3.6 ile verildi. Tablo incelendiğinde, bu hareketin yaklaşık periyodu 7.7 olarak gözlemlenmektedir.

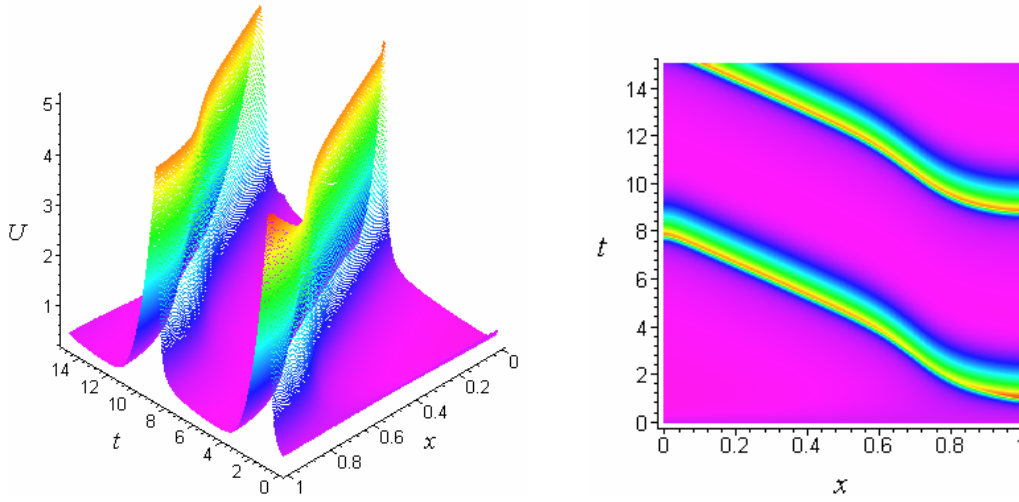


Şekil 3.7: $N = 200$, $\Delta t = 0.01$ için periyodik dalga hareketi

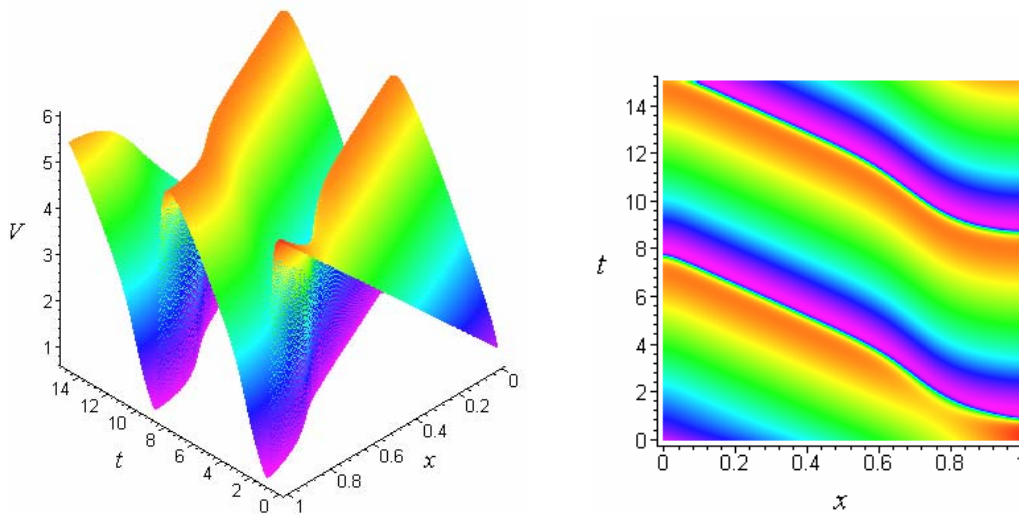
Tablo 3.6: Periyodik hareket için yoğunluk değerleri

Yoğunluk	t	$x = 0.0$	$x = 0.2$	$x = 0.4$	$x = 0.6$	$x = 0.8$	$x = 1.0$
U	3	0.285859	0.317966	0.377959	0.612863	1.519566	0.671123
	10.7	0.327067	0.321165	0.376196	0.611073	1.626541	0.734563
	6	0.404261	0.706716	2.716938	0.510445	0.326202	0.350458
	13.7	0.402817	0.691319	2.769687	0.500800	0.324518	0.347387
V	3	3.381906	4.251219	5.066734	5.537437	1.732675	2.548228
	10.7	3.340110	4.233840	5.056601	5.637847	1.659791	2.462952
	6	5.220968	5.606813	1.137112	2.825005	4.355426	4.772910
	13.7	5.209322	5.613875	1.119232	2.845503	4.317258	4.730594

Sergilenen bu periyodik hareket, fonksiyonların yoğunluk değişimlerini gösteren Şekil 3.8 ve Şekil 3.9 da da açıkça görülmektedir. Her iki şekilde de, yoğunluk değişimleri için $N = 200$ bölünme noktası kullanılırken oluşan desenlerin daha net görülebilmesi amacıyla izdüşüm alınırken $N = 400$ bölünme noktası alınmıştır.



Şekil 3.8: Brusselator modelinde konum ve zamana göre U nun yoğunluk değişimi



Şekil 3.9: Brusselator modelinde konum ve zamana göre V nin yoğunluk değişimi

3.4.4 Lineer olmayan problem (Schnakenberg modeli)

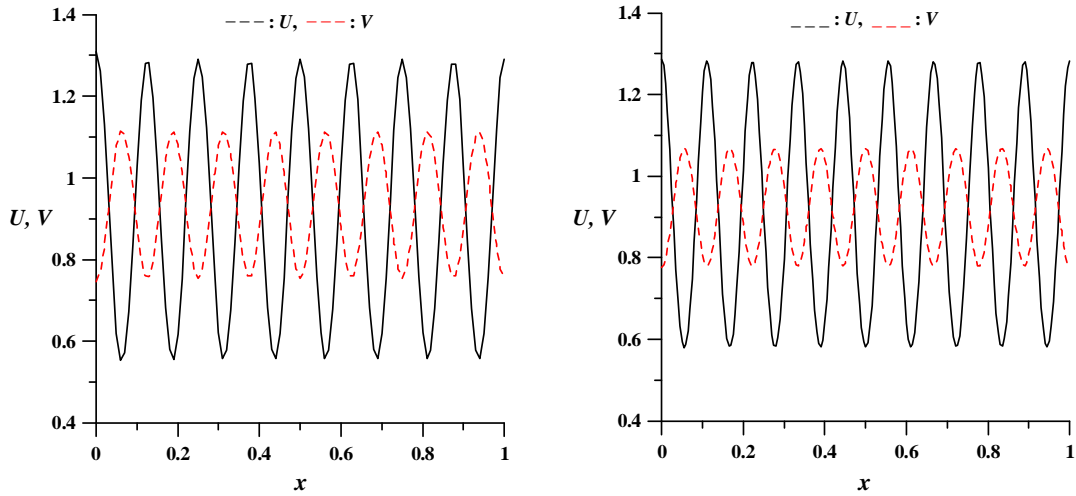
(1.18) ile verilen Schnakenberg modelinin kübik B-spline kolokeyşin yöntemiyle çözümünde 2. bölümde kullanılan parametreler aynı şekilde kullanıldı. Buna göre (2.14) ile verilen başlangıç şartı ve homojen Neumann sınır koşulları ile nümerik çözümlerden elde edilen bağıl hata değerleri Tablo 3.7 verildi. Tabloya bakıldığında

önerilen nümerik yöntemin yaklaşık olarak $\Delta t < 1.20 \times 10^{-4}$ için iyi sonuçlar verdiği ancak $\Delta t > 1.20 \times 10^{-4}$ için yakınsaklığın bozulduğu görülmektedir.

Tablo 3.7: $N = 100$ için $t = 2.5$ anındaki bağıl hata değerleri

Δt	Adım sayısı	U	V
5×10^{-6}	500000	0	2.347E-017
5×10^{-5}	50000	9.487E-017	1.967E-016
1×10^{-4}	25000	2.383E-016	6.016E-016
1.10×10^{-4}	22727	2.639E-016	6.599E-016
1.20×10^{-4}	20833	0.019850	0.019666
1.25×10^{-4}	20000	0.220017	0.220339

Çözümlerin ürettiğin salımm hareketlerini incelemek için Şekil 3.10 oluşturuldu. $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$ için sırasıyla $N = 100$ ve $N = 200$ alınarak elde edilen çözümler birlikte sunuldu. Şekil 3.10 incelendiğinde kuadratik B-spline kolokeyşin yöntemine benzer olarak burada da $N = 100$ için çözümlerin $[0, 1]$ aralığında 8 salımm yaptıkları görülmektedir. Oysa $N = 200$ için salımm sayısı 9 olmaktadır. Buradan, kübik B-spline fonksiyonların kolokeyşin yönteminde Crank-Nicolson formülleri ile birlikte kullanımının, küçük N değerleri için salımm problemleri açısından iyi sonuç vermediği ancak önerilen yöntemin hesaplama maliyeti açısından ekonomik bir alternatif olması sebebiyle de N sayısındaki artıştan kaynaklanan maliyetin kabul edilebilir olduğu söylenebilir.



Şekil 3.10: $N = 100$ ve $N = 200$ için $t = 2.5$ anındaki salınım hareketleri

3.4.5 Lineer olmayan problem (Gray-Scott modeli)

Bu kısımda, nümerik yöntem, Gray-Scott modeli üzerinde kendini tekrarlayan spot desenleri ile test edildi. (1.19) sisteminin nümerik çözümleri için parametreler

$$\varepsilon_1 = 1, \varepsilon_2 = 0.01, f = 0.02, k = 0.066$$

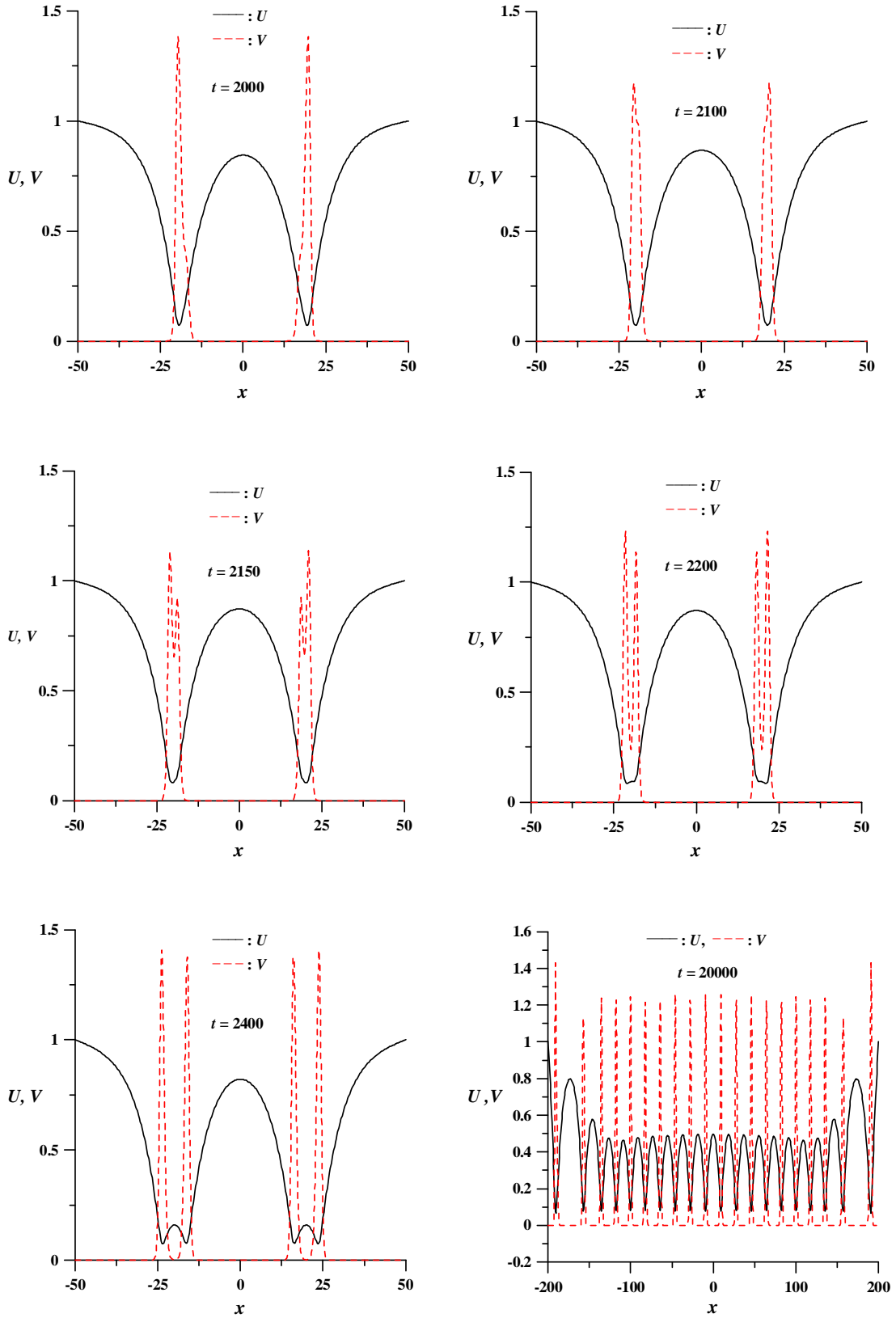
şeklinde seçildi. Bu seçimler ile birlikte (1.19) sisteminin başlangıç şartı olarak

$$U(x, 0) = 1 - \frac{1}{2} \sin^{100}\left(\pi \frac{(x-L)}{2L}\right), \quad (3.6)$$

$$V(x, 0) = \frac{1}{4} \sin^{100}\left(\pi \frac{(x-L)}{2L}\right)$$

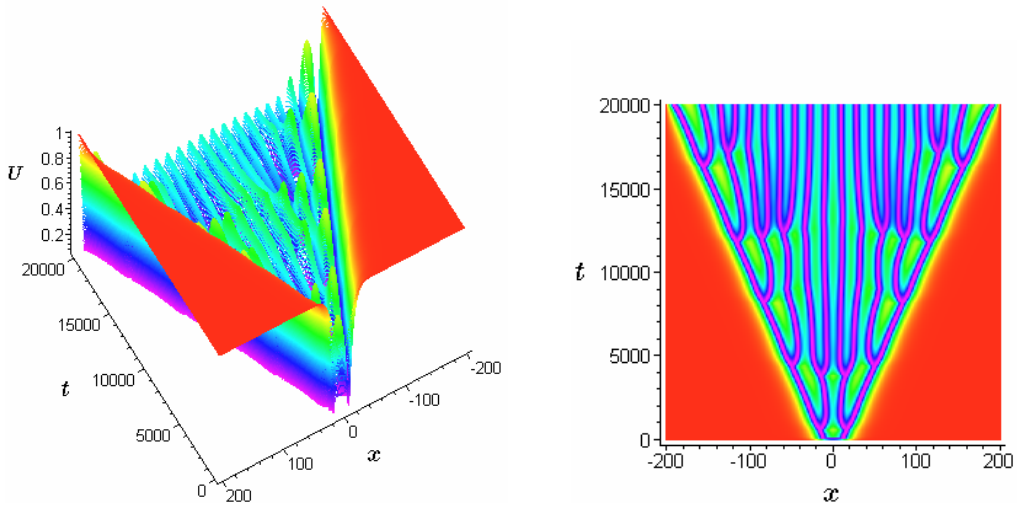
alındı ve $[-L, L]$ bölgesi üzerinde çözümler araştırıldı. Konum ayrıştırması için $N = 400$, zaman ayrıştırması için de $\Delta t = 0.2$ seçildi. Dirichlet sınır koşulları altında $t = 20000$ anına kadar program çalıştırıldı.

Bu başlangıç koşuluyla ilk olarak iki solitary dalgası oluşturuldu. Oluşan bu iki dalganın, zamanın ilerlemesiyle, giderek kendi içinde bölünmeye başladığı gözlemlendi. $t = 20000$ anına ulaşıldığında ise 20 tane tepe noktasının ortaya çıktığı görüldü. Zaman periyodu içerisindeki bu bölünme süreci Şekil 3.11 de görülmektedir.

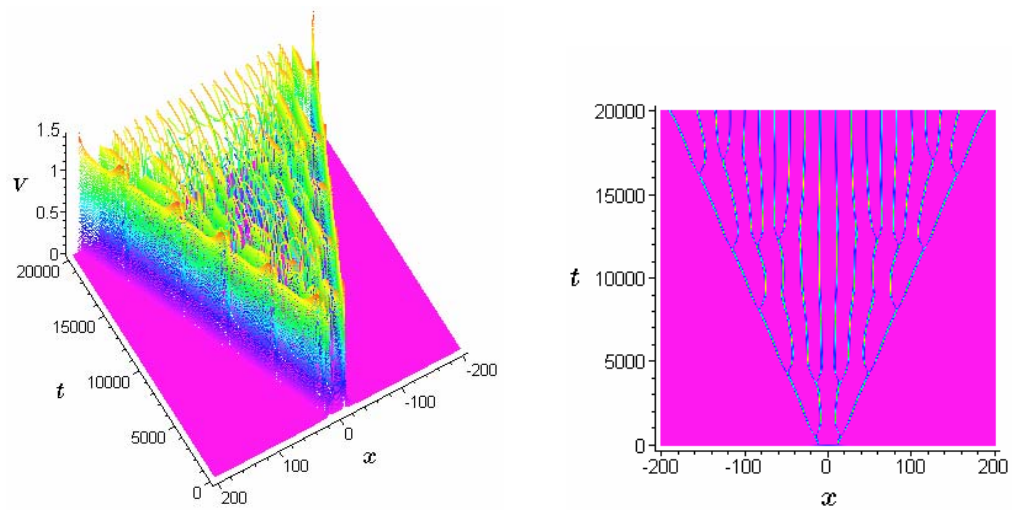


Şekil 3.11: Kendini tekrarlayan spot desenlerinde dalgaların bölünme süreci

U ile V nin konum ve zamana göre yoğunluk deęişimleri ve bu deęişimlere karşılık gelen konumsal desenler ise sırasıyla Şekil 3.12 ve Şekil 3.13 de görülmektedir. Kendini tekrarlayan spot desenleri olarak adlandırılan bu konumsal desenlerde başlangıçta iki dalga ile başlayan bölünme hareketinin zaman içinde bütün tanım bölgesini kaplayacak şekilde dallanmalar oluşturduğu görülmektedir.



Şekil 3.12: U fonksiyonu için kendini tekrarlayan spot desenleri



Şekil 3.13: V fonksiyonu için kendini tekrarlayan spot desenleri

3.4.6 Sonular

Reaksiyon-difüzyon denklem sistemlerinin nümerik çözümleri için kübik B-spline kolokeyşin yöntemi kullanıldı. Kübik B-spline fonksiyonlar, ikinci mertebeden türevleri sürekli olacak şekildeki en küçük dereceli B-spline fonksiyon olduklarından, bu bölümde ortaya konan nümerik yöntem diğer bölümlerdeki yöntemlere göre daha ekonomik bir yöntemdir. Bu bağlamda, $N + 1$ bölünme noktasının kullanıldığı kübik B-spline kolokeyşin yönteminin uygulanması ile katsayılar matrisi, her satırında 6 eleman bulunduran $(2N + 2) \times (2N + 6)$ boyutlu blok band matrisler olan matris sistemi elde edildi. Yöntemin netice verdiği bu sistemin çözülmesi hesaplama maliyeti açısından tezin diğer bölümlerinde yer alan nümerik yöntemlere göre bir avantaj olarak ifade edilebilir. Bununla birlikte, Schnakenberg modelinde salınım problemi literatürdeki benzer başka çalışmalarla birlikte göz önüne alındığında, nümerik yöntemin doğruluk açısından istenen sonuçları üretmediği söylenebilir. Ancak ekonomik bir yöntem olması dolayısıyla, N sayısının büyütülmesiyle istenen doğrulukta sonuçlar elde edilmesi de mümkündür. Diğer yandan, test problemlerinde gösterdiği iyi modellemeler de dikkate alındığında kübik B-spline kolokeyşin yönteminin reaksiyon-difüzyon denklem sistemlerinin nümerik çözümleri için tavsiye edilebilir bir yöntem olduğu söylenebilir.

Bir sonraki bölümde, taban fonksiyonu olarak kuartik B-spline fonksiyonlar kullanılarak, özellikle salınım problemi için kuadratik ve kübik B-spline fonksiyonların kullanımında gözlenen hatanın azaltılması hedeflenecektir.

BÖLÜM 4

REAKSİYON-DİFÜZYON DENKLEM SİSTEMLERİNİN KUARTİK B-SPLİNE KOLOKEYŞİN YÖNTEMİ İLE NÜMERİK ÇÖZÜMLERİ

Sonlu elemanlar yönteminde yakınsamayı hızlandıran faktörlerden birisi taban fonksiyonu olarak seçilen polinomların derecelerinin artırılmasıdır. Önceki iki bölümde taban fonksiyonu olarak kuadratik ve kübik fonksiyonlar kullanılmıştı. Bu bölümde ise kuartik B-spline fonksiyonlar kullanılacak ve bu derece artırımının sonuçlar üzerindeki etkisine bakılacaktır.

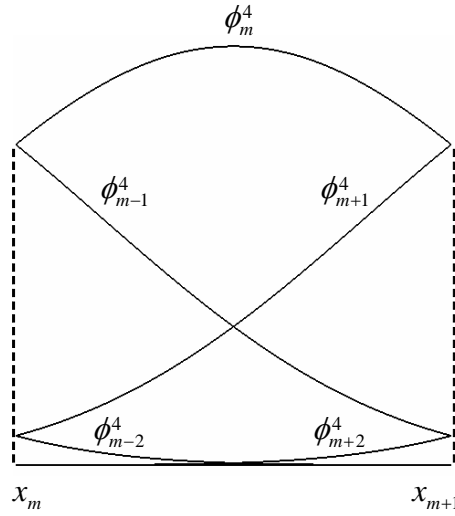
Önceki iki bölüme benzer şekilde burada da ilk olarak taban fonksiyonları tanımlandı. Daha sonra nümerik yöntemin uygulanışı verildi ve ardından test problemleri sunuldu.

4.1 Kuartik B-spline Fonksiyonlar

$[a, b]$ çözüm aralığı üzerinde (2.1) ile tanımlanan konum ayrıştırmasını düşünelim. Bu durumda $[x_{m-2}, x_{m+3}]$ aralığı üzerinde sıfırdan farklı değer alan ϕ_m^4 kuartik B-spline fonksiyonu

$$\phi_m^4(x) = \frac{1}{h^5} \begin{cases} (x - x_{m-2})^4, & [x_{m-2}, x_{m-1}] \\ (x - x_{m-2})^4 - 5(x - x_{m-1})^4, & [x_{m-1}, x_m] \\ (x - x_{m-2})^4 - 5(x - x_{m-1})^4 + 10(x - x_m)^4, & [x_m, x_{m+1}] \\ (x_{m+3} - x)^4 - 5(x_{m+2} - x)^4, & [x_{m+1}, x_{m+2}] \\ (x_{m+3} - x)^4, & [x_{m+2}, x_{m+3}] \\ 0 & \text{diğer durumlar} \end{cases}$$

şeklinde tanımlanır. Burada $m = -2, \dots, N + 1$ ve h da iki bölünme noktası arasındaki uzaklıktır. ϕ_m^4 kuartik B-spline fonksiyonu ardışık beş aralıkta sıfırdan farklı değer aldığından $[x_m, x_{m+1}]$ şeklindeki bir aralık, ardışık beş kuartik B-spline fonksiyonu tarafından örtülür. Bu durum Şekil 4.1 ile gösterilmiştir.



Şekil 4.1: Kuartik B-spline şekil fonksiyonları

ϕ_m^4 kuartik B-spline fonksiyonu ve onun konuma göre türevlerinin (2.1) ayrıştırmasındaki bölünme noktalarında alacağı değerler ise Tablo 4.1 de görülmektedir.

Tablo 4.1: Bölünme noktalarındaki kuartik B-spline değerleri

	x_{m-2}	x_{m-1}	x_m	x_{m+1}	x_{m+2}	x_{m+3}
ϕ_m^4	0	1	11	11	1	0
$h(\phi_m^4)_x$	0	4	12	-12	-4	0
$h^2(\phi_m^4)_{xx}$	0	12	-12	12	12	0
$h^3(\phi_m^4)_{xxx}$	0	24	-72	72	-24	0

4.2 Kuartik B-spline Kolokeyşin Yöntemi

$[a, b]$ aralığında tanımlı kuartik B-spline fonksiyonlardan oluşan

$$X = \{\phi_{-2}^4, \phi_{-1}^4, \dots, \phi_{N+1}^4\}$$

kümesinin bu aralıktaki fonksiyonlar için bir taban olduğu Prenter (1975) tarafından ifade edilmiştir. Buna göre $[x_0, x_N]$ aralığında tanımlı bir U fonksiyonu için yapılacak

nümerik yaklaşım, δ_m parametreleri yardımıyla

$$\begin{aligned} U &= \sum_{m=-2}^{N+1} \delta_m(t) \phi_m^4(x) \\ &= \delta_{-2}(t) \phi_{-2}^4(x) + \delta_{-1}(t) \phi_{-1}^4(x) + \cdots + \delta_{N+1}(t) \phi_{N+1}^4(x) \end{aligned}$$

şeklinde yazılabilir. Buradan, Tablo 4.1 ile verilen ϕ_m^4 fonksiyonlarının bölünme noktalarındaki değerleri kullanılırsa, U fonksiyonu ve onun konuma göre türevleri için bölünme noktalarında

$$\begin{aligned} U_m &= \delta_{m-2} + 11\delta_{m-1} + 11\delta_m + \delta_{m+1}, \\ (U_m)_x &= \frac{4}{h} (\delta_{m+1} + 3\delta_m - 3\delta_{m-1} - \delta_{m-2}), \\ (U_m)_{xx} &= \frac{12}{h^2} (\delta_{m+1} - \delta_m - \delta_{m-1} + \delta_{m-2}), \\ (U_m)_{xxx} &= \frac{24}{h^3} (\delta_{m+1} - 3\delta_m + 3\delta_{m-1} - \delta_{m-2}) \end{aligned} \tag{4.1}$$

eşitlikleri yazılabilir. Burada $\delta_m(t)$ reaksiyon-difüzyon denklem sisteminin kuartik B-spline kolokeyşin formundan elde edilecek zamana bağlı parametrelerdir. Benzer şekilde V fonksiyonu için de

$$\begin{aligned} V &= \sum_{m=-2}^{N+1} \gamma_m(t) \phi_m^4(x) \\ &= \gamma_{-2}(t) \phi_{-2}^4(x) + \gamma_{-1}(t) \phi_{-1}^4(x) + \cdots + \gamma_{N+1}(t) \phi_{N+1}^4(x) \end{aligned}$$

şeklinde yaklaşım yapılabilir. Böylece V çözümü ve onun türevleri için de

$$\begin{aligned} V_m &= \gamma_{m-2} + 11\gamma_{m-1} + 11\gamma_m + \gamma_{m+1}, \\ (V_m)_x &= \frac{4}{h} (\gamma_{m+1} + 3\gamma_m - 3\gamma_{m-1} - \gamma_{m-2}), \\ (V_m)_{xx} &= \frac{12}{h^2} (\gamma_{m+1} - \gamma_m - \gamma_{m-1} + \gamma_{m-2}), \\ (V_m)_{xxx} &= \frac{24}{h^3} (\gamma_{m+1} - 3\gamma_m + 3\gamma_{m-1} - \gamma_{m-2}), \end{aligned} \tag{4.2}$$

bağıntıları bulunur. Yine $\gamma_m(t)$ sistemin kolokeyşin formundan elde edilecek zamana bağlı parametrelerdir.

(4.1) ve (4.2) eşitliklerinden ilgili olanlar (1.23) sisteminde yerlerine yazılır ve

gerekli düzenlemeler yapılırsa $m = 0, 1, \dots, N$ olmak üzere

$$\begin{aligned}
& \alpha_{m1}\delta_{m-2}^{n+1} + \alpha_{m2}\gamma_{m-2}^{n+1} + \alpha_{m3}\delta_{m-1}^{n+1} + \alpha_{m4}\gamma_{m-1}^{n+1} \\
& \quad + \alpha_{m5}\delta_m^{n+1} + \alpha_{m6}\gamma_m^{n+1} + \alpha_{m7}\delta_{m+1}^{n+1} + \alpha_{m8}\gamma_{m+1}^{n+1} \\
& = \alpha_{m9}\delta_{m-2}^n + \alpha_{m10}\gamma_{m-2}^n + \alpha_{m11}\delta_{m-1}^n + \alpha_{m12}\gamma_{m-1}^n \\
& \quad + \alpha_{m13}\delta_m^n + \alpha_{m14}\gamma_m^n + \alpha_{m15}\delta_{m+1}^n + \alpha_{m16}\gamma_{m+1}^n + \beta_{m4},
\end{aligned} \tag{4.3}$$

ve

$$\begin{aligned}
& \alpha_{m17}\delta_{m-2}^{n+1} + \alpha_{m18}\gamma_{m-2}^{n+1} + \alpha_{m19}\delta_{m-1}^{n+1} + \alpha_{m20}\gamma_{m-1}^{n+1} \\
& \quad + \alpha_{m21}\delta_m^{n+1} + \alpha_{m22}\gamma_m^{n+1} + \alpha_{m23}\delta_{m+1}^{n+1} + \alpha_{m24}\gamma_{m+1}^{n+1} \\
& = \alpha_{m25}\delta_{m-2}^n + \alpha_{m26}\gamma_{m-2}^n + \alpha_{m27}\delta_{m-1}^n + \alpha_{m28}\gamma_{m-1}^n \\
& \quad + \alpha_{m29}\delta_m^n + \alpha_{m30}\gamma_m^n + \alpha_{m31}\delta_{m+1}^n + \alpha_{m32}\gamma_{m+1}^n + \beta_{m8}
\end{aligned} \tag{4.4}$$

denklemlerinden oluşan denklem sistemi elde edilir. Burada α_{mi} , $i = 1, 2, \dots, 32$ denklem katsayıları aşağıdaki şekildedir:

$\alpha_{m1} = \beta_{m1} + \frac{6a_1}{h^2}$,	$\alpha_{m12} = \frac{11c_1}{2}$,	$\alpha_{m23} = \beta_{m5}$,
$\alpha_{m2} = \beta_{m2}$,	$\alpha_{m13} = 11\beta_{m3} - \frac{6a_1}{h^2}$,	$\alpha_{m24} = \beta_{m6} - \frac{6a_2}{h^2}$,
$\alpha_{m3} = 11\beta_{m1} + \frac{6a_1}{h^2}$,	$\alpha_{m14} = \frac{11c_1}{2}$,	$\alpha_{m25} = \frac{b_2}{2}$,
$\alpha_{m4} = 11\beta_{m2}$,	$\alpha_{m15} = \beta_{m3} + \frac{6a_1}{h^2}$,	$\alpha_{m26} = \beta_{m7} - \frac{6a_2}{h^2}$,
$\alpha_{m5} = 11\beta_{m1} + \frac{6a_1}{h^2}$,	$\alpha_{m16} = \frac{c_1}{2}$,	$\alpha_{m27} = \frac{11b_2}{2}$,
$\alpha_{m6} = 11\beta_{m2}$,	$\alpha_{m17} = \beta_{m5}$,	$\alpha_{m28} = 11\beta_{m7} - \frac{6a_2}{h^2}$,
$\alpha_{m7} = \beta_{m1} - \frac{6a_1}{h^2}$,	$\alpha_{m18} = \beta_{m6} + \frac{6a_2}{h^2}$,	$\alpha_{m29} = \frac{11b_2}{2}$,
$\alpha_{m8} = \beta_{m2}$,	$\alpha_{m19} = 11\beta_{m5}$,	$\alpha_{m30} = 11\beta_{m7} - \frac{6a_2}{h^2}$,
$\alpha_{m9} = \beta_{m3} - \frac{6a_1}{h^2}$,	$\alpha_{m20} = 11\beta_{m6} + \frac{6a_2}{h^2}$,	$\alpha_{m31} = \frac{b_2}{2}$,
$\alpha_{m10} = \frac{c_1}{2}$,	$\alpha_{m21} = 11\beta_{m5}$,	$\alpha_{m32} = \beta_{m7} + \frac{6a_2}{h^2}$
$\alpha_{m11} = 11\beta_{m3} - \frac{6a_1}{h^2}$,	$\alpha_{m22} = 11\beta_{m6} + \frac{6a_2}{h^2}$,	

Lineerleştirmeden kaynaklanan hatayı minimize etmek için de, elde edilen çözüm parametreleri yine (2.13) iç iterasyonuna tabi tutulur. Böylece elde edilen δ ve γ parametreleri (4.1) ve (4.2) eşitliklerinde yerlerine yazılarak her zaman adımında istenen çözümler elde edilir.

4.3 Başlangıç Koşulu

\mathbf{d}_4^0 başlangıç çözüm vektörünün bilinmesi halinde (4.5) denklemi ardışık olarak çözümlerse herhangi bir n için \mathbf{d}_4^n çözümlerinin bulunabileceği açıktır. İterasyonun başlangıç adımını temsil eden \mathbf{d}_4^0 çözümleri, sistemin başlangıç koşulundan elde edilir.

$U(x, 0)$ başlangıç şartı, (4.1) yardımıyla çözüm bölgesinin bölünme noktalarında

$$\begin{aligned} U(x_0, 0) &= U_0 = \delta_{-2}^0 + 11\delta_{-1}^0 + 11\delta_0^0 + \delta_1^0 \\ U(x_1, 0) &= U_1 = \delta_{-1}^0 + 11\delta_0^0 + 11\delta_1^0 + \delta_2^0 \\ &\quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \\ U(x_N, 0) &= U_N = \delta_{N-2}^0 + 11\delta_{N-1}^0 + 11\delta_N^0 + \delta_{N+1}^0 \end{aligned}$$

şeklinde denklem sistemi ile ifade edilebilir. Bu sistemde $N + 1$ denklem, $N + 4$ bilinmeyen vardır. Bu sistemin çözümü için, (4.1) eşitliklerinde $m = 0$ alınarak U_0' ve U_0'' bağıntıları δ_{-2} , δ_{-1} bilinmeyenlerine göre ortak çözümlirse

$$\begin{aligned} \delta_{-2}^0 &= \frac{3}{2}\delta_0^0 - \frac{1}{2}\delta_1^0 - \frac{h}{16}U_0' + \frac{h^2}{16}U_0'' \\ \delta_{-1}^0 &= \frac{1}{2}\delta_0^0 + \frac{1}{2}\delta_1^0 - \frac{h}{16}U_0' - \frac{h^2}{48}U_0'' \end{aligned}$$

bulunur. Benzer şekilde (4.1) eşitliklerinde $m = N$ alınarak U_N' bağıntısından δ_{N+1} bilinmeyeni çekilirse

$$\delta_{N+1}^0 = \delta_{N-2}^0 + 3\delta_{N-1}^0 - 3\delta_N^0 + \frac{h}{4}U_N'$$

yazılabilir. Böylece δ_m^0 parametreleri için başlangıçta $N + 1$ denklem ve $N + 1$ bilinmeyenli denklem sistemi elde edilmiş olur. Bu sistem matris formunda yazılmak

kıyaslandığında bu referansın $N = 512$ bölünme noktası kullanarak elde ettiği doğruluğa kuartik B-spline kolokeyşin yönteminde $N = 64$ bölünme noktası kullanılarak ulaşıldığı söylenebilir. Bu da taban fonksiyonlarındaki derece artırımının sonuçlara olan etkisi açısından olumlu bir noktadır.

Tablo 4.2: $t = 1$ anında difüzyon baskın durum için hata normları

N	Δt	U		V	
		$L_2 \times 10^4$	$L_\infty \times 10^4$	$L_2 \times 10^6$	$L_\infty \times 10^6$
64	0.005	0.01522	0.01704	0.06280	0.07031
	0.01	0.06090	0.06818	0.25132	0.28139
	0.02	0.24362	0.27277	1.00545	1.12577
	0.04	0.97464	1.09127	4.02246	4.50381
128	0.005	0.01517	0.01705	0.06260	0.07036
	0.01	0.06067	0.06819	0.25039	0.28144
	0.02	0.24269	0.27278	1.00161	1.12581
	0.04	0.97089	1.09128	4.00700	4.50385
256	0.005	0.01514	0.01705	0.06248	0.07036
	0.01	0.06055	0.06819	0.24991	0.28144
	0.02	0.24222	0.27278	0.99967	1.12581
	0.04	0.96901	1.09128	3.99923	4.50386
512	0.005	0.01512	0.01705	0.06242	0.07036
	0.01	0.06049	0.06819	0.24967	0.28144
	0.02	0.24198	0.27278	0.99870	1.12582
	0.04	0.96807	1.09128	3.99533	4.50386
(Chou, et al.,2007) CN-MG yöntemi					
512	0.005		0.0116		
	0.01		0.0627		
	0.02		0.267		
	0.04		1.09		

İkinci olarak, $(a_1, b_1, c_2) = (0.001, -2, -1)$ seçimiyle reaksiyon daha baskın hale

getirildi. Bu durumdaki hata normları için de Tablo 4.3 oluşturuldu. Bu durumda, yöntem hâlâ V fonksiyonu için doğruluğu daha yüksek sonuçlar üretse de U ve V fonksiyonları için üretilen hataların, difüzyon baskın duruma göre birbirine daha da yakınlığı görülmektedir.

Tablo 4.3: $t = 1$ anında reaksiyon baskın durum için hata normları

N	Δt	U		V	
		$L_2 \times 10^4$	$L_\infty \times 10^4$	$L_2 \times 10^5$	$L_\infty \times 10^5$
64	0.005	0.02701	0.03025	0.06859	0.07680
	0.01	0.10806	0.12099	0.27435	0.30718
	0.02	0.43226	0.48399	1.09744	1.22877
	0.04	1.72952	1.93649	4.39035	4.91573
128	0.005	0.02691	0.03025	0.06832	0.07680
	0.01	0.10764	0.12099	0.27330	0.30718
	0.02	0.43060	0.48399	1.09322	1.22877
	0.04	1.72286	1.93649	4.37343	4.91573
256	0.005	0.02686	0.03025	0.06819	0.07680
	0.01	0.10743	0.12099	0.27276	0.30718
	0.02	0.42976	0.48399	1.09110	1.22877
	0.04	1.71952	1.93649	4.36495	4.91573
512	0.005	0.02683	0.03025	0.06812	0.07680
	0.01	0.10733	0.12099	0.27250	0.30718
	0.02	0.42934	0.48399	1.09003	1.22877
	0.04	1.71784	1.93649	4.36070	4.91573
(Chou, et al.,2007) CN-MG yöntemi					
512	0.005		0.0302		
	0.01		0.121		
	0.02		0.484		
	0.04		1.94		

Reaksiyon baskın durumda da N sayısındaki değişimin sonuçlardaki etkisinin yok denecek kadar az olduğu ve daha az bölünme noktası kullanarak (Chou, et al.,2007) referansı ile aynı doğrulukta sonuçlar elde edildiği vurgulanabilir. Ayrıca Δt deki değişimin sonuçlara olan etkisi açıkça görülmektedir.

Tablo 4.4: $t = 1$ anında reaksiyon güçlü baskın durum için hata normları					
N	Δt	U		V	
		$L_2 \times 10^5$	$L_\infty \times 10^5$	$L_2 \times 10^3$	$L_\infty \times 10^3$
64	0.005	0.06859	0.07680	0.06790	0.07603
	0.01	0.27435	0.30718	0.27161	0.30411
	0.02	1.09744	1.22877	1.08647	1.21648
	0.04	4.39035	4.91573	4.34645	4.86657
128	0.005	0.06832	0.07680	0.06764	0.07603
	0.01	0.27330	0.30718	0.27056	0.30411
	0.02	1.09322	1.22877	1.08228	1.21648
	0.04	4.37343	4.91573	4.32970	4.86657
256	0.005	0.06819	0.07680	0.06751	0.07603
	0.01	0.27276	0.30718	0.27004	0.30411
	0.02	1.09110	1.22877	1.08018	1.21648
	0.04	4.36495	4.91573	4.32130	4.86657
512	0.005	0.06812	0.07680	0.06744	0.07603
	0.01	0.27250	0.30718	0.26977	0.30411
	0.02	1.09003	1.22877	1.07913	1.21648
	0.04	4.36070	4.91573	4.31709	4.86657
(Chou, et al.,2007) CN-MG yöntemi					
512	0.005				0.0760
	0.01				0.304
	0.02				1.22
	0.04				4.87

Son olarak, reaksiyonun sistem üzerindeki etkisi biraz daha artırılarak reaksiyon

güçlü baskın durum incelendi. $(a_1, b_1, c_2) = (0.001, -100, -1)$ seçimi ile elde edilen sonuçlar Tablo 4.4 te sunuldu. Reaksiyonun sisteme olan etkisinin daha da artması, nümerik yöntemin U ve V çözümleri için ürettiği hataların değişerek U fonksiyonu için daha doğru sonuçların elde edilmesini sağlamıştır. Reaksiyon güçlü baskın durumda N sayısının çözümlere olan etkisi çok daha azalmıştır.

4.4.2 Lineer olmayan problem (Brusselator Modeli)

Bu kısımda, (1.17) ile verilen Brusselator modelinin

$$\begin{aligned} U(x, 0) &= \frac{1}{2}, \\ V(x, 0) &= 1 + 5x + \frac{1}{4} \tanh(20x) - \frac{1}{4} \tanh(20(x - 1)) \end{aligned}$$

şeklindeki başlangıç koşulu altındaki çözümleri araştırılacaktır. Bu başlangıç koşulu altında (1.17) sisteminin nümerik çözümleri daha önce Moore (1995) tarafından verilmişti. Nümerik hesaplamalarda sistemin sınır koşulu olarak

$$\begin{aligned} U_x(x_0, t) &= U_x(x_N, t) = 0 \\ V_x(x_0, t) &= V_x(x_N, t) = 0 \end{aligned}$$

koşulları seçilecektir. Kuartik B-spline kolokeyşin yönteminin iteratif çözümlerinde, sol sınırdaki bir ilave koşul gerektirdiği yukarıda söylenmişti. Bu amaçla,

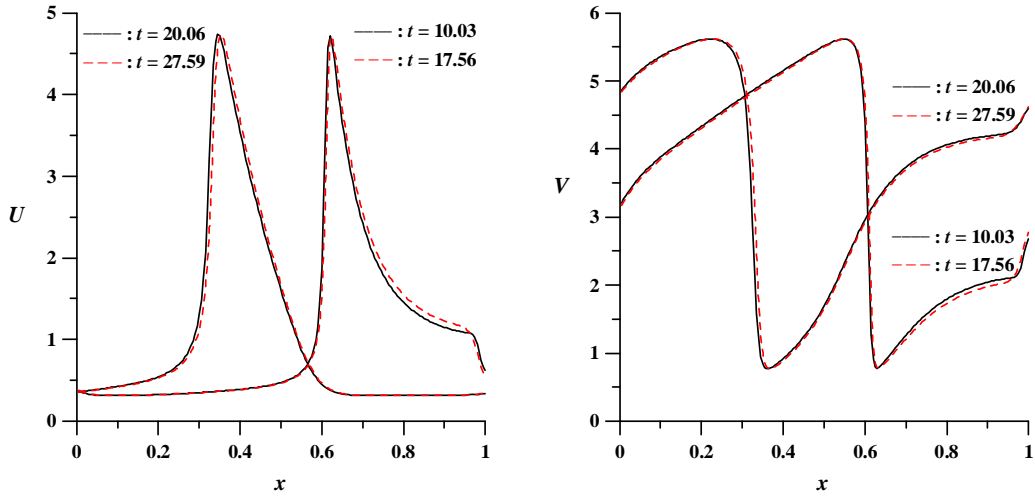
$$U_{xx}(x_0, t) = 0 \text{ ve } V_{xx}(x_0, t) = 0$$

ek koşulu sınır parametrelerinin eliminasyonu için kullanıldı. Problemin çözüm bölgesi olarak $x \in [0, 1]$ seçildi ve $t \in [0, 0.3583]$ zaman aralığında çözümler araştırıldı. Konum ayrıştırması için $N = 200$, zaman ayrıştırması için de $\Delta t = 0.03583$ seçildi. (1.17) sisteminde denklem katsayıları olarak

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 2 \times 10^{-5}, \quad A = 1, \quad B = 3.4$$

alındı. Bu seçimler altında U ve V fonksiyonlarının Brusselator modeli için üçüncü bölümde verilen probleme benzer şekilde periyodik hareket sergiledikleri Şekil 4.2 den görülmektedir. Bu hareketin zamana göre periyodunun yaklaşık olarak 7.5

olduğu söylenebilir. Periyodik hareket için çözüm bölgesinin farklı noktalarında hesaplanan U ve V nin yoğunluk değerleri Tablo 4.5 te görülmektedir. Bu tabloya göre U ve V fonksiyonları 7.53 lük bir zaman periyodunda birbirlerine yakın değerler almaktadır.



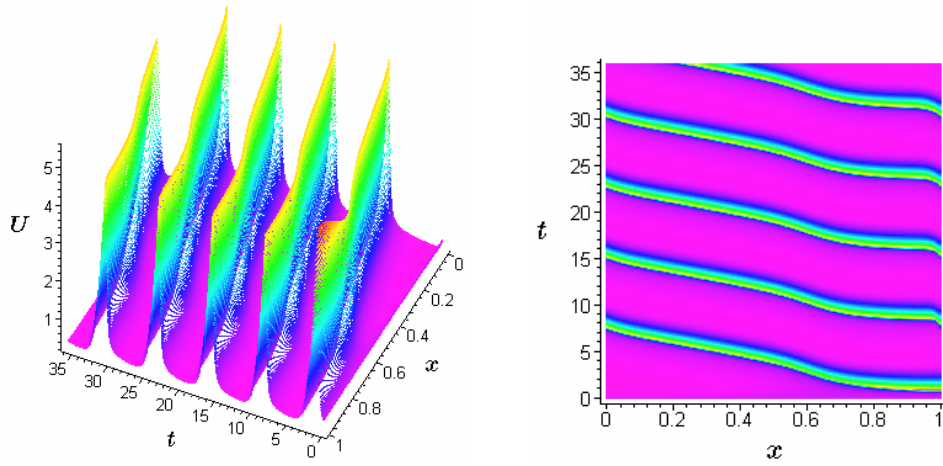
Şekil 4.2: $N = 200$, $\Delta t = 0.03583$ için periyodik dalga hareketi

Tablo 4.5: Periyodik hareket için yoğunluk değerleri

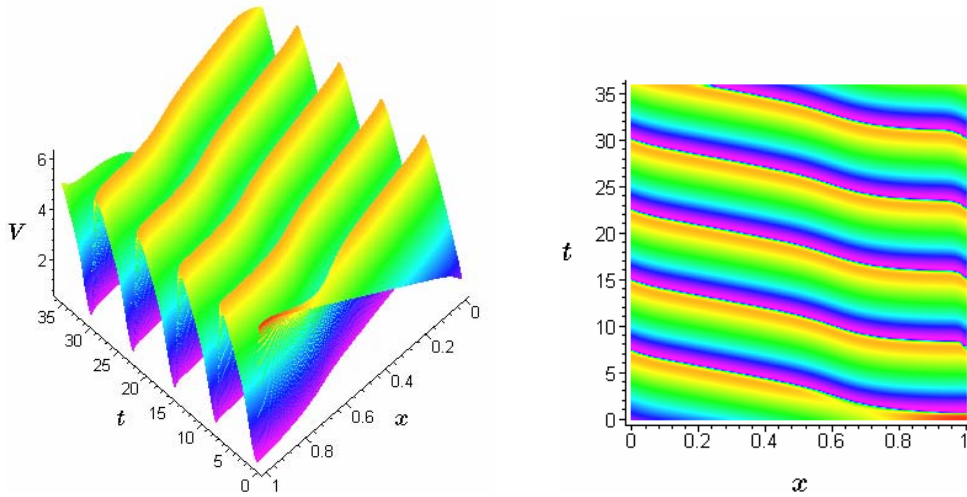
Yoğunluk	t	$x = 0.0$	$x = 0.2$	$x = 0.4$	$x = 0.6$	$x = 0.8$	$x = 1.0$
U	10.03	0.382159	0.325415	0.389607	1.876061	1.455534	0.624346
	17.56	0.394308	0.324122	0.386447	1.553062	1.547978	0.563527
	20.06	0.355914	0.543311	3.537913	0.451988	0.315781	0.340302
	27.59	0.353518	0.530671	3.685082	0.468064	0.314953	0.341286
V	10.03	3.155168	4.332275	5.151748	4.379747	1.795379	2.680802
	17.56	3.112429	4.302526	5.127774	4.731099	1.729644	2.774321
	20.06	4.829052	5.602084	0.918592	2.957845	4.059787	4.596394
	27.59	4.799185	5.593438	0.886583	2.920545	4.024131	4.614487

Çözümlerin konum ve zamana göre değişimleri Şekil 4.3 ve Şekil 4.4 ile verildi. Bu şekiller incelendiğinde, (1.17) sisteminin yukarıdaki şartlar altında periyodik hareket sergilediği açıkça görülmektedir. Şekil 4.3 ve Şekil 4.4 de çözümlerin oluşturduğu

konumsal desenlerin daha net görülmesi açısından yoğunluk değişiminin konum-zaman eksenine izdüşümü alınırken $N = 400$ bölünme noktası kullanıldı.



Şekil 4.3: Brusselator modelinde konum ve zamana göre U nun yoğunluk değişimi



Şekil 4.4: Brusselator modelinde konum ve zamana göre V nin yoğunluk değişimi

4.4.3 Linear olmayan problem (Schnakenberg modeli)

Önceki iki bölüme benzer olarak bu bölümde (1.18) ile verilen Schnakenberg modelinin (2.14) ile verilen başlangıç şartları altındaki çözümleri incelendi. Nümerik

hesaplamalarda (1.18) sistemi için 2. bölümde kullanılan parametreler burada da aynen kullanıldı. Sistemin sınır koşulu olarak

$$\begin{aligned} U_x(x_0, t) &= U_x(x_N, t) = 0 \\ V_x(x_0, t) &= V_x(x_N, t) = 0 \end{aligned}$$

ile ifade edilen homojen Neumann sınır koşuluna ek olarak sol sınır için

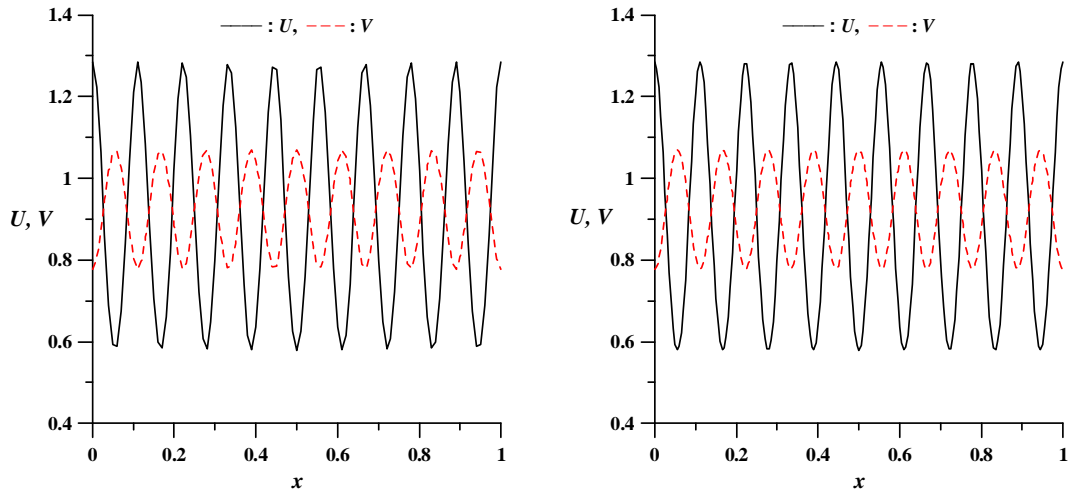
$$U_{xxx}(x_0, t) = 0 \text{ ve } V_{xxx}(x_0, t) = 0$$

koşulu kullanıldı. $N = 100$ alınarak farklı Δt değerleri için $t = 2.5$ anındaki bağıl hata değerleri hesaplandı ve sonuçlar Tablo 4.6 ile verildi. Tablo incelendiğinde kuartik B-spline kolokeyşin yönteminin yaklaşık olarak $\Delta t \leq 1.1 \times 10^{-4}$ için iyi sonuç verdiği fakat $\Delta t > 1.1 \times 10^{-4}$ durumunda yakınsamamın bozulduğu anlaşılmaktadır.

Tablo 4.6: $N = 100$ için $t = 2.5$ anındaki bağıl hata değerleri

Δt	Adım sayısı	U	V
5×10^{-6}	500000	8.22713E-17	1.34194E-16
5×10^{-5}	50000	2.66325E-16	2.38381E-16
1×10^{-4}	25000	3.82768E-16	4.14018E-16
1.1×10^{-4}	22727	1.01375E-15	4.36753E-16
1.2×10^{-4}	20833	5.20232E-02	5.05367E-02
1.3×10^{-4}	20000	7.79264E-02	7.58877E-02

(1.18) sisteminin yukarıdaki şartlar altında $[0, 1]$ aralığında salınım hareketi sergileyen çözümleri Şekil 4.5 de görülmektedir. Şekil 4.5 de $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$ alınarak çözüm profilleri ilk olarak $N = 100$ için daha sonra da $N = 200$ için oluşturuldu. Her iki durumda da fonksiyonların 9 salınım yaptıkları gözlemlendi. Kuadratik ve kübik B-spline kolokeyşin yöntemlerinde bu salınım hareketleri $N = 100$ için 8 olarak gözlemlenmiş ve bunun yöntemin doğruluğu açısından bir eksiklik olduğu vurgulanmıştı. Burada ise sunulan nümerik yöntem $N = 100$ için de doğru sonuçlar üreterek, konumsal ayrıştırma açısından yeterli doğrulukta olduğunu göstermiştir.



Şekil 4.5: $N = 100$, $N = 200$ için $t = 2.5$ anındaki salımm hareketleri

4.4.4 Linear olmayan problem (Gray-Scott modeli)

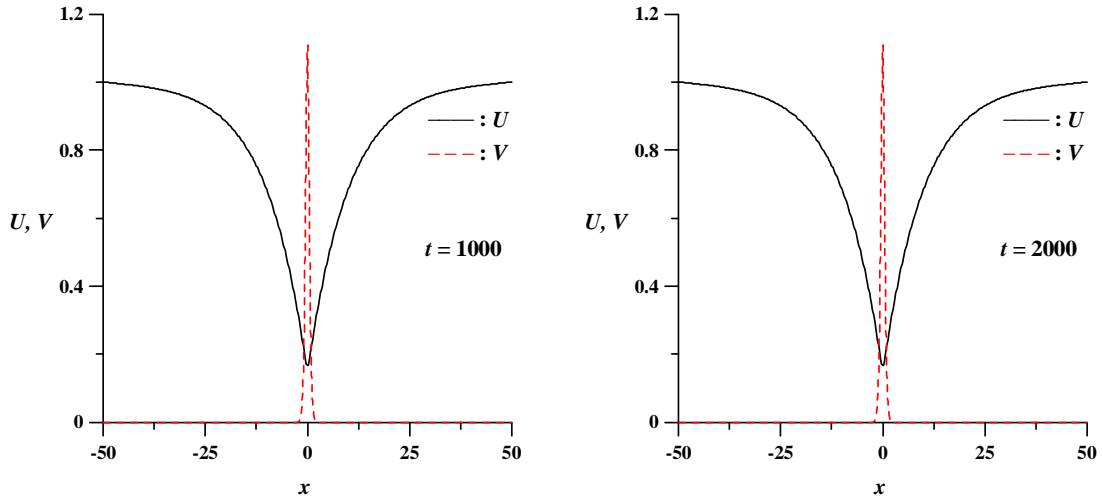
Bu kısımda (1.19) sisteminin nümerik çözümleri için durağan dalga problemi incelendi. Bunun için (1.19) sisteminde yer alan katsayılar

$$\varepsilon_1 = 1, \varepsilon_2 = 0.01, a = 1, b = 0.6$$

olarak seçildi. Bu seçimler altında (1.19) sisteminin başlangıç koşulu olarak (3.6) eşitlikleri kullanıldı ve $L = 50$ için $[-L, L]$ bölgesi üzerinde çözümler araştırıldı. Konum ayrıştırması için $N = 400$, zaman ayrıştırması için de $\Delta t = 0.2$ seçildi. Dirichlet sınır koşulları sol sınırdaki

$$U_x(x_0, t) = 0 \text{ ve } V_x(x_0, t) = 0$$

ilave koşuluyla birlikte kullanıldı. Durağan dalgaların $t = 1000$ ve $t = 2000$ zamanlarındaki konumları Şekil 4.6 ile gösterildi. $x = -1, 0$ ve 1 noktalarındaki yoğunluk değerleri ise Tablo 4.7 de verildi. Şekil 4.6 ve Tablo 4.7 beraber incelendiğinde aralarında 5000 zaman adımı fark olmasına rağmen U ve V fonksiyonlarında sonuçların değişmediği ve orjine göre simetrik değerlerin ortaya çıktığı söylenebilir.



Şekil 4.6: Durağan dalga çözümleri

Tablo 4.7: Durağan dalga çözümleri için yoğunluk değerleri

Yoğunluk	t	$x = -1$	$x = 0$	$x = 1$
U	1000	0.2233348	0.1653502	0.2233348
	2000	0.2233348	0.1653502	0.2233348
V	1000	0.1406958	1.1078481	0.1406958
	2000	0.1406957	1.1078480	0.1406957

4.4.5 Sonuçlar

Reaksiyon-difüzyon denklem sistemlerinin nümerik çözümleri için kuartik B-spline kolokeyşin yöntemi başarıyla uygulandı. Kolokeyşin yönteminin uygulanmasında, konum ayrıştırması için $N + 1$ bölünme noktası kullanılması ile katsayılar matrisi her satırında sıfırdan farklı 8 eleman bulunduran $(2N + 2) \times (2N + 8)$ boyutlu blok band matrisler olan matris denklemi elde edildi. Yöntemin netice verdiği bu sistemin çözümü hesaplama maliyeti açısından kuadratik B-spline kullanımına göre bir avantaj olarak ifade edilebilir. Bununla birlikte özellikle Schnakenberg modelinde salınım problemi küçük N değerleri için bir çok nümerik yöntemde yöntemin doğru sonuçları üretebilmesi açısından zorluk içerse de, kuartik B-spline kolokeyşin yöntemi bu problemde iyi sonuçlar vermiştir. Bu da yine yöntem açısından olumlu

bir durumdur. Diđer yandan, sınır kořullarının sisteme adapte edilerek çözümlerinin bulunması esnasında sol sınır için gerekli olan bir ilave sınır şartı, yöntemin kısıtlayıcı unsurlarından birisi olarak söylenebilir. Bu noktada, ilave sınır şartı koymadan alternatif başka yöntemlerle bu problem aşıldığı takdirde yöntemin daha genel problemlere uygulanabilirliğinin artacağı açıktır.

Sonuç olarak, kuartik B-spline kolokeyşin yöntemi, sol sınırında öngörülebilir bir ek koşul içeren reaksiyon-difüzyon denklem sistemlerinin nümerik çözümleri için tavsiye edilebilir bir yöntemdir.

BÖLÜM 5

REAKSİYON-DİFÜZYON DENKLEM SİSTEMLERİNİN KUİNTİK B-SPLİNE KOLOKEYŞİN YÖNTEMİ İLE NÜMERİK ÇÖZÜMLERİ

Taban fonksiyonu olarak kuintik B-spline fonksiyonların kullanımı bu bölümde gerçekleştirildi. Kullanılan bu taban fonksiyonlarının dördüncü mertebeden türevleri de sürekli olduğundan bu yöntem yüksek mertebeden diferensiyel denklemlerin çözümleri için bir alternatif olarak düşünülebilir. Önceki bölümlerde olduğu gibi burada da ilk olarak taban fonksiyonları tanıtıldı. Ardından nümerik yöntemin uygulanışına geçildi ve son olarak da test problemleri incelendi.

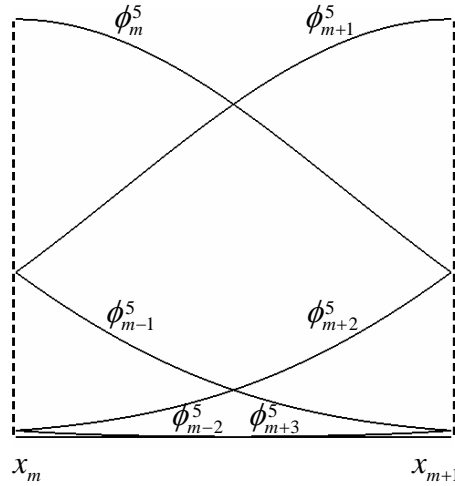
5.1 Kuintik B-spline Fonksiyonlar

Diferensiyel problemin $[a, b]$ çözüm aralığını x_m bölünme noktaları yardımıyla (2.1) ile verilen şekilde eşit uzunluklu alt aralıklara bölelim. İki nokta arası uzaklık h ve $m = -2, \dots, N + 2$ olsun. $[x_{m-3}, x_{m+3}]$ aralığı üzerinde sıfırdan farklı değer alan kuintik B-spline fonksiyonunu ϕ_m^5 ile gösterelim. Bu durumda ϕ_m^5 fonksiyonu

$$\phi_m^5(x) = \frac{1}{h^5} \begin{cases} (x - x_{m-3})^5, & [x_{m-3}, x_{m-2}] \\ (x - x_{m-3})^5 - 6(x - x_{m-2})^5, & [x_{m-2}, x_{m-1}] \\ (x - x_{m-3})^5 - 6(x - x_{m-2})^5 + 15(x - x_{m-1})^5, & [x_{m-1}, x_m] \\ (x - x_{m-3})^5 - 6(x - x_{m-2})^5 + 15(x - x_{m-1})^5 - 20(x - x_m)^5, & [x_m, x_{m+1}] \\ (x - x_{m-3})^5 - 6(x - x_{m-2})^5 + 15(x - x_{m-1})^5 - 20(x - x_m)^5 + 15(x - x_{m+1})^5, & [x_{m+1}, x_{m+2}] \\ (x - x_{m-3})^5 - 6(x - x_{m-2})^5 + 15(x - x_{m-1})^5 - 20(x - x_m)^5 + 15(x - x_{m+1})^5 - 6(x - x_{m+2})^5, & [x_{m+2}, x_{m+3}] \\ 0, & \text{diğer durumlar} \end{cases}$$

şeklinde tanımlanır. Yukarıdaki tanımlamadan da açıkça görüldüğü üzere ϕ_m^5 kuintik B-spline fonksiyonu, ardışık altı aralıkta sıfırdan farklı değer almaktadır. Bu

nedenle $[x_m, x_{m+1}]$ şeklindeki bir temsili aralık, ardışık altı kuintik B-spline fonksiyonu tarafından örtülecektir. Bu durum Şekil 5.1 ile gösterilmiştir. ϕ_m^5 kuintik B-spline fonksiyonu ve onun konuma göre türevlerinin (2.1) ayrıştırmasındaki bölünme noktalarında alacağı değerler ise Tablo 5.1 de görülmektedir.



Şekil 5.1: Kuintik B-spline şekil fonksiyonları

Tablo 5.1: Bölünme noktalarındaki kuintik B-spline değerleri

	x_{m-3}	x_{m-2}	x_{m-1}	x_m	x_{m+1}	x_{m+2}	x_{m+3}
ϕ_m^5	0	1	26	66	26	1	0
$h(\phi_m^5)_x$	0	5	50	0	-50	-5	0
$h^2(\phi_m^5)_{xx}$	0	20	40	-120	40	20	0
$h^3(\phi_m^5)_{xxx}$	0	60	-120	0	120	-60	0
$h^4(\phi_m^5)_{xxxx}$	0	120	-480	720	-480	120	0

5.2 Kuintik B-spline Kolokeyşin Yöntemi

$[a, b]$ aralığında tanımlı kuintik B-spline fonksiyonlardan oluşan

$$X = \{\phi_{-2}^5, \phi_{-1}^5, \dots, \phi_{N+2}^5\}$$

kümesinin bu aralıktaki fonksiyonlar için bir taban olduğu Prenter (1975) tarafından ifade edilmiştir. Buna göre U ve V çözümlerine yapılacak nümerik yaklaşımlar

$$\begin{aligned} U &= \sum_{m=-2}^{N+2} \delta_m(t) \phi_m^5(x) \\ &= \delta_{-2}(t) \phi_{-2}^5(x) + \delta_{-1}(t) \phi_{-1}^5(x) + \cdots + \delta_{N+2}(t) \phi_{N+2}^5(x) \end{aligned}$$

ve

$$\begin{aligned} V &= \sum_{m=-2}^{N+2} \gamma_m(t) \phi_m^5(x) \\ &= \gamma_{-2}(t) \phi_{-2}^5(x) + \gamma_{-1}(t) \phi_{-1}^5(x) + \cdots + \gamma_{N+2}(t) \phi_{N+2}^5(x) \end{aligned}$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada $\delta_m(t)$ ile $\gamma_m(t)$ sistemin kuintik B-spline kolokeyşin formundan elde edilecek zamana bağlı parametrelerdir. Bu nümerik yaklaşımda kuintik B-spline fonksiyonlarının Tablo 5.1 ile verilen bölünme noktalarındaki değerlerinin kullanılmasıyla U çözümü ve bu çözümün konuma göre türevleri için

$$\begin{aligned} U_m &= U(x_m) &= \delta_{m-2} + 26\delta_{m-1} + 66\delta_m + 26\delta_{m+1} + \delta_{m+2}, \\ (U_m)_x &= U_x(x_m) &= \frac{5}{h} (\delta_{m+2} + 10\delta_{m+1} - 10\delta_{m-1} - \delta_{m-2}), \\ (U_m)_{xx} &= U_{xx}(x_m) &= \frac{20}{h^2} (\delta_{m+2} + 2\delta_{m+1} - 6\delta_m + 2\delta_{m-1} + \delta_{m-2}), \\ (U_m)_{xxx} &= U_{xxx}(x_m) &= \frac{60}{h^3} (\delta_{m+2} - 2\delta_{m+1} + 2\delta_{m-1} - \delta_{m-2}), \\ (U_m)_{xxxx} &= U_{xxxx}(x_m) &= \frac{120}{h^4} (\delta_{m+2} - 4\delta_{m+1} + 6\delta_m - 4\delta_{m-1} + \delta_{m-2}), \end{aligned} \quad (5.1)$$

eşitlikleri elde edilir. Benzer yol takip edilerek V çözümü ve onun konuma göre türevleri için de

$$\begin{aligned} V_m &= V(x_m) &= \gamma_{m-2} + 26\gamma_{m-1} + 66\gamma_m + 26\gamma_{m+1} + \gamma_{m+2}, \\ (V_m)_x &= V_x(x_m) &= \frac{5}{h} (\gamma_{m+2} + 10\gamma_{m+1} - 10\gamma_{m-1} - \gamma_{m-2}), \\ (V_m)_{xx} &= V_{xx}(x_m) &= \frac{20}{h^2} (\gamma_{m+2} + 2\gamma_{m+1} - 6\gamma_m + 2\gamma_{m-1} + \gamma_{m-2}), \\ (V_m)_{xxx} &= V_{xxx}(x_m) &= \frac{60}{h^3} (\gamma_{m+2} - 2\gamma_{m+1} + 2\gamma_{m-1} - \gamma_{m-2}), \\ (V_m)_{xxxx} &= V_{xxxx}(x_m) &= \frac{120}{h^4} (\gamma_{m+2} - 4\gamma_{m+1} + 6\gamma_m - 4\gamma_{m-1} + \gamma_{m-2}) \end{aligned} \quad (5.2)$$

bağıntıları yazılabilir.

Elde edilen (5.1) ve (5.2) yaklaşımlarından ilgili olanlar (1.23) sisteminde yerle-

rine yazılır ve elde edilen denklem sisteminde gerekli düzenlemeler yapılırsa

$$\begin{aligned}
& \alpha_{m1}\delta_{m-2}^{n+1} + \alpha_{m2}\gamma_{m-2}^{n+1} + \alpha_{m3}\delta_{m-1}^{n+1} + \alpha_{m4}\gamma_{m-1}^{n+1} + \alpha_{m5}\delta_m^{n+1} \\
& \quad + \alpha_{m6}\gamma_m^{n+1} + \alpha_{m7}\delta_{m+1}^{n+1} + \alpha_{m8}\gamma_{m+1}^{n+1} + \alpha_{m9}\delta_{m+2}^{n+1} + \alpha_{m10}\gamma_{m+2}^{n+1} \\
& = \alpha_{m11}\delta_{m-2}^n + \alpha_{m12}\gamma_{m-2}^n + \alpha_{m13}\delta_{m-1}^n + \alpha_{m14}\gamma_{m-1}^n + \alpha_{m15}\delta_m^n \\
& \quad + \alpha_{m16}\gamma_m^n + \alpha_{m17}\delta_{m+1}^n + \alpha_{m18}\gamma_{m+1}^n + \alpha_{m19}\delta_{m+2}^n + \alpha_{m20}\gamma_{m+2}^n + \beta_{m4}, \\
& \quad \text{-----} \\
& \alpha_{m21}\delta_{m-2}^{n+1} + \alpha_{m22}\gamma_{m-2}^{n+1} + \alpha_{m23}\delta_{m-1}^{n+1} + \alpha_{m24}\gamma_{m-1}^{n+1} + \alpha_{m25}\delta_m^{n+1} \\
& \quad + \alpha_{m26}\gamma_m^{n+1} + \alpha_{m27}\delta_{m+1}^{n+1} + \alpha_{m28}\gamma_{m+1}^{n+1} + \alpha_{m29}\delta_{m+2}^{n+1} + \alpha_{m30}\gamma_{m+2}^{n+1} \\
& = \alpha_{m31}\delta_{m-2}^n + \alpha_{m32}\gamma_{m-2}^n + \alpha_{m33}\delta_{m-1}^n + \alpha_{m34}\gamma_{m-1}^n + \alpha_{m35}\delta_m^n \\
& \quad + \alpha_{m36}\gamma_m^n + \alpha_{m37}\delta_{m+1}^n + \alpha_{m38}\gamma_{m+1}^n + \alpha_{m39}\delta_{m+2}^n + \alpha_{m40}\gamma_{m+2}^n + \beta_{m8}
\end{aligned} \tag{5.3}$$

şeklinde bir denklem sistemi bulunur. (5.3) denklem sisteminde yer alan katsayılar ise şu şekilde oluşur:

$\alpha_{m1} = \beta_{m1} - \frac{10a_1}{h^2},$	$\alpha_{m15} = 66\beta_{m3} - \frac{60a_1}{h^2},$	$\alpha_{m29} = \beta_{m5},$
$\alpha_{m2} = \beta_{m2},$	$\alpha_{m16} = 33c_1,$	$\alpha_{m30} = \beta_{m6} - \frac{10a_2}{h^2},$
$\alpha_{m3} = 26\beta_{m1} - \frac{20a_1}{h^2},$	$\alpha_{m17} = 26\beta_{m3} + \frac{20a_1}{h^2},$	$\alpha_{m31} = \frac{b_2}{2},$
$\alpha_{m4} = 26\beta_{m2},$	$\alpha_{m18} = 13c_1,$	$\alpha_{m32} = \beta_{m7} + \frac{10a_2}{h^2},$
$\alpha_{m5} = 66\beta_{m1} + \frac{60a_1}{h^2},$	$\alpha_{m19} = \beta_{m3} + \frac{10a_1}{h^2},$	$\alpha_{m33} = 13b_2,$
$\alpha_{m6} = 66\beta_{m2},$	$\alpha_{m20} = \frac{c_1}{2},$	$\alpha_{m34} = 26\beta_{m7} + \frac{20a_2}{h^2},$
$\alpha_{m7} = 26\beta_{m1} - \frac{20a_1}{h^2},$	$\alpha_{m21} = \beta_{m5},$	$\alpha_{m35} = 33b_2,$
$\alpha_{m8} = 26\beta_{m2},$	$\alpha_{m22} = \beta_{m6} - \frac{10a_2}{h^2},$	$\alpha_{m36} = 66\beta_{m7} - \frac{60a_2}{h^2},$
$\alpha_{m9} = \beta_{m1} - \frac{10a_1}{h^2},$	$\alpha_{m23} = 26\beta_{m5},$	$\alpha_{m37} = 13b_2,$
$\alpha_{m10} = \beta_{m2},$	$\alpha_{m24} = 26\beta_{m6} - \frac{20a_2}{h^2},$	$\alpha_{m38} = 26\beta_{m7} + \frac{20a_2}{h^2},$
$\alpha_{m11} = \beta_{m3} + \frac{10a_1}{h^2},$	$\alpha_{m25} = 66\beta_{m5},$	$\alpha_{m39} = \frac{b_2}{2},$
$\alpha_{m12} = \frac{c_1}{2}$	$\alpha_{m26} = 66\beta_{m6} + \frac{60a_2}{h^2},$	$\alpha_{m40} = \beta_{m7} + \frac{10a_2}{h^2},$
$\alpha_{m13} = 26\beta_{m3} + \frac{20a_1}{h^2},$	$\alpha_{m27} = 26\beta_{m5},$	
$\alpha_{m14} = 13c_1,$	$\alpha_{m28} = 26\beta_{m6} - \frac{20a_2}{h^2},$	

(5.3) sistemi, bir matris denkleminde dönüştürülebilir. Buna göre sistemin katsayı

matrisleri

$$\mathbf{A}_5 = \begin{bmatrix} \alpha_{m1} & \alpha_{m2} & \alpha_{m3} & \cdots & \alpha_{m9} & \alpha_{m10} & & & & & \\ \alpha_{m21} & \alpha_{m22} & \alpha_{m23} & \cdots & \alpha_{m29} & \alpha_{m30} & & & & & \\ & & \alpha_{m1} & \alpha_{m2} & \alpha_{m3} & \cdots & \alpha_{m9} & \alpha_{m10} & & & \\ & & \alpha_{m21} & \alpha_{m22} & \alpha_{m23} & \cdots & \alpha_{m29} & \alpha_{m30} & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & \alpha_{m1} & \alpha_{m2} & \alpha_{m3} & \cdots & \alpha_{m9} & \alpha_{m10} & \\ & & & & \alpha_{m21} & \alpha_{m22} & \alpha_{m23} & \cdots & \alpha_{m29} & \alpha_{m30} & \end{bmatrix},$$

ve

$$\mathbf{B}_5 = \begin{bmatrix} \alpha_{m11} & \alpha_{m12} & \alpha_{m13} & \cdots & \alpha_{m19} & \alpha_{m20} & & & & & \\ \alpha_{m31} & \alpha_{m32} & \alpha_{m33} & \cdots & \alpha_{m39} & \alpha_{m40} & & & & & \\ & & \alpha_{m11} & \alpha_{m12} & \alpha_{m13} & \cdots & \alpha_{m19} & \alpha_{m20} & & & \\ & & \alpha_{m31} & \alpha_{m32} & \alpha_{m33} & \cdots & \alpha_{m39} & \alpha_{m40} & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & \alpha_{m11} & \alpha_{m12} & \alpha_{m13} & \cdots & \alpha_{m19} & \alpha_{m20} & \\ & & & & \alpha_{m31} & \alpha_{m32} & \alpha_{m33} & \cdots & \alpha_{m39} & \alpha_{m40} & \end{bmatrix},$$

şeklindeki $(2N+2) \times (2N+10)$ boyutlu matrisler olmak üzere 5.3 sistemine karşılık gelen matris denklemleri

$$\mathbf{A}_5 \cdot \mathbf{d}_5^{n+1} = \mathbf{B}_5 \cdot \mathbf{d}_5^n + \mathbf{F}_5 \quad (5.4)$$

olarak yazılır. Burada \mathbf{d}_5^n vektörü zamana bağlı parametrelerden oluşan

$$\mathbf{d}_5^n = [\delta_{-2}^n, \gamma_{-2}^n, \delta_{-1}^n, \gamma_{-1}^n, \dots, \delta_{N+2}^n, \gamma_{N+2}^n]^T$$

şeklindeki bilinmeyen vektörü ve \mathbf{F}_5 de 1.20 sisteminin lineerleştirilmesinden ve sistemdeki U ve V den bağımsız terimlerden kaynaklanan

$$\mathbf{F}_5 = [\beta_{m4}, \beta_{m8}, \beta_{m4}, \beta_{m8}, \dots, \beta_{m4}, \beta_{m8}]^T$$

şeklindeki ek vektördür.

(5.4) sisteminde bilinmeyen sayısı, denklem sayısından 8 fazla olduğundan sınır koşulları yardımıyla denklem ve bilinmeyen sayılarının eşit hale getirilmesi zorunludur. Bu amaçla (1.20) sisteminin sınır koşulları, (5.1) ve (5.2) ifadelerinde kullanılarak $\delta_{-2}, \gamma_{-2}, \delta_{-1}, \gamma_{-1}, \delta_{N+1}, \gamma_{N+1}, \delta_{N+2}, \gamma_{N+2}$ sınır parametreleri elimine edilecektir. Ancak bu eliminasyon işleminde her iki sınır için de birer ilave sınır koşuluna

5.4.1 Linear problem

Önerilen nümerik yöntemin ürettiği sonuçları analitik sonuçlarla karşılaştırmak için ilk olarak (1.7) sisteminde a_1, b_1, c_2 katsayılarının sırasıyla 1, -0.1 ve -0.01 seçilmesiyle ortaya çıkan difüzyon baskın durum incelendi. Bulunan sonuçlar Tablo 5.2 ile verildi. Sonuçlara bakıldığında, (1.7) sisteminin kuintik B-spline fonksiyonlar yardımıyla yapılan konum ayrıştırmasının kabul edilebilir doğrulukta sonuçlar verdiği ve N sayısının artırılmasının sonuçları neredeyse hiç değiştirmedeği görülmektedir. Diğer yandan Δt nin değişimi önceki bölümlerde olduğu gibi burada da sonuçları doğrudan etkilemektedir. Difüzyon baskın iken V çözümü için ortaya çıkan hatanın daha az olduğu da görülmektedir Tablo 5.2 den görülmektedir. (Chou, et al.,2007) referansıya bulunan sonuçlar karşılaştırıldığında her ikisinin de aynı doğrulukta sonuçlar ürettiği görülmektedir. Ancak önerilen nümerik yöntemin $N = 64$ bölünme noktası için de aynı doğrulukta sonuç vermesi dikkat edilmesi gereken bir noktadır.

İkinci olarak, (1.7) sisteminde reaksiyonun etkisini artırmak için a_1, b_1, c_2 katsayıları sırasıyla 0.001, -2 ve -1 şeklinde seçildi. Bu durumda hesaplanan hata normları Tablo 5.3 de sunuldu. Tablo 5.3 incelendiğinde, sistemde reaksiyonun etkili hale gelmesi ile difüzyon baskın durumun tersine U fonksiyonu için daha az hatanın ortaya çıktığı görülmektedir. Yine burada da N de meydana gelen değişiklikler sonuçları fazla etkilemezken Δt seçimi açıkça etkilemektedir.

Son olarak, $(a_1, b_1, c_2) = (0.001, -100, -1)$ seçimiyle reaksiyonun güçlü baskın olduğu durum incelendi ve bu durumdaki sonuçlar Tablo 5.4 ile verildi. Reaksiyonun etkisinin daha da artırılmasının V çözümündeki hatayı artırdığı, U çözümündeki hatayı ise azalttığı Tablo 5.4 bakarak vurgulanabilir. Yine Tablo 5.4 e göre, L_∞ hata normuna bakılarak reaksiyon güçlü baskın durum için N sayısındaki değişimin sonuçlara olan etkisinin sıfırlandığı söylenebilir.

Tablo 5.2: Difüzyon baskın durum için $t = 1$ deki hata normları

N	Δt	U		V	
		$L_2 \times 10^4$	$L_\infty \times 10^4$	$L_2 \times 10^6$	$L_\infty \times 10^6$
64	0.005	0.015229	0.017052	0.062855	0.070377
	0.01	0.060908	0.068197	0.251379	0.281461
	0.02	0.243631	0.272785	1.005507	1.125832
	0.04	0.974654	1.091286	4.022515	4.503872
128	0.005	0.015168	0.017048	0.062599	0.070362
	0.01	0.060670	0.068193	0.250397	0.281446
	0.02	0.242689	0.272782	1.001618	1.125816
	0.04	0.970895	1.091283	4.007000	4.503856
256	0.005	0.015138	0.017048	0.062477	0.070361
	0.01	0.060552	0.068193	0.249910	0.281445
	0.02	0.242218	0.272782	0.999674	1.125815
	0.04	0.969011	1.091283	3.999226	4.503855
512	0.005	0.015123	0.017048	0.062416	0.070361
	0.01	0.060493	0.068193	0.249667	0.281444
	0.02	0.241983	0.272782	0.998702	1.125815
	0.04	0.968068	1.091283	3.995334	4.503855
(Chou, et al.,2007) CN-MG yöntemi					
512	0.005		0.0116		
	0.01		0.0627		
	0.02		0.267		
	0.04		1.09		

Table 5.3: Reaksiyon baskın durum için $t = 1$ deki hata normları

N	Δt	U		V	
		$L_2 \times 10^4$	$L_\infty \times 10^4$	$L_2 \times 10^3$	$L_\infty \times 10^3$
64	0.005	0.027014	0.030247	0.068588	0.076795
	0.01	0.108058	0.120989	0.274352	0.307183
	0.02	0.432263	0.483990	1.097445	1.228771
	0.04	1.729523	1.936487	4.390351	4.915725
128	0.005	0.026910	0.030247	0.068323	0.076795
	0.01	0.107642	0.120989	0.273295	0.307183
	0.02	0.430597	0.483990	1.093216	1.228771
	0.04	1.722858	1.936487	4.373432	4.915725
256	0.005	0.026858	0.030247	0.068191	0.076795
	0.01	0.107433	0.120989	0.272765	0.307183
	0.02	0.429762	0.483990	1.091095	1.228771
	0.04	1.719516	1.936487	4.364948	4.915725
512	0.005	0.026832	0.030247	0.068124	0.076795
	0.01	0.107329	0.120989	0.272499	0.307183
	0.02	0.429344	0.483990	1.090033	1.228771
	0.04	1.717842	1.936487	4.360700	4.915725
(Chou, et al.,2007) CN-MG yöntemi					
512	0.005		0.0302		
	0.01		0.121		
	0.02		0.484		
	0.04		1.94		

Tablo 5.4: Reaksiyon güçlü baskın durum için $t = 1$ deki hata normları

N	Δt	U		V	
		$L_2 \times 10^5$	$L_\infty \times 10^5$	$L_2 \times 10^3$	$L_\infty \times 10^3$
64	0.005	0.068588	0.076795	0.067902	0.076027
	0.01	0.274352	0.307183	0.271609	0.304111
	0.02	1.097445	1.228771	1.086470	1.216484
	0.04	4.390351	4.915725	4.346447	4.866568
128	0.005	0.068323	0.076795	0.067640	0.076027
	0.01	0.273295	0.307183	0.270562	0.304111
	0.02	1.093216	1.228771	1.082284	1.216484
	0.04	4.373432	4.915725	4.329698	4.866568
256	0.005	0.068191	0.076795	0.067509	0.076027
	0.01	0.272765	0.307183	0.270037	0.304111
	0.02	1.091095	1.228771	1.080184	1.216484
	0.04	4.364948	4.915725	4.321299	4.866568
512	0.005	0.068124	0.076795	0.067443	0.076027
	0.01	0.272499	0.307183	0.269774	0.304111
	0.02	1.090033	1.228771	1.079133	1.216484
	0.04	4.360700	4.915725	4.317093	4.866568
(Chou, et al.,2007) CN-MG yöntemi					
512	0.005				0.0760
	0.01				0.304
	0.02				1.22
	0.04				4.87

5.4.2 Lineer olmayan problem (Brusselator modeli)

Bu kısımda (1.17) ile verilen Brusselator modeli için 3.bölümde verilen problemin aynısı dikkate alındı. Nümerik hesaplamalarda 3. bölümde kullanılan parametreler ve sabitler aynı şekilde seçildi. Ardışık çözümlere başlayabilmek için, kuintik B-

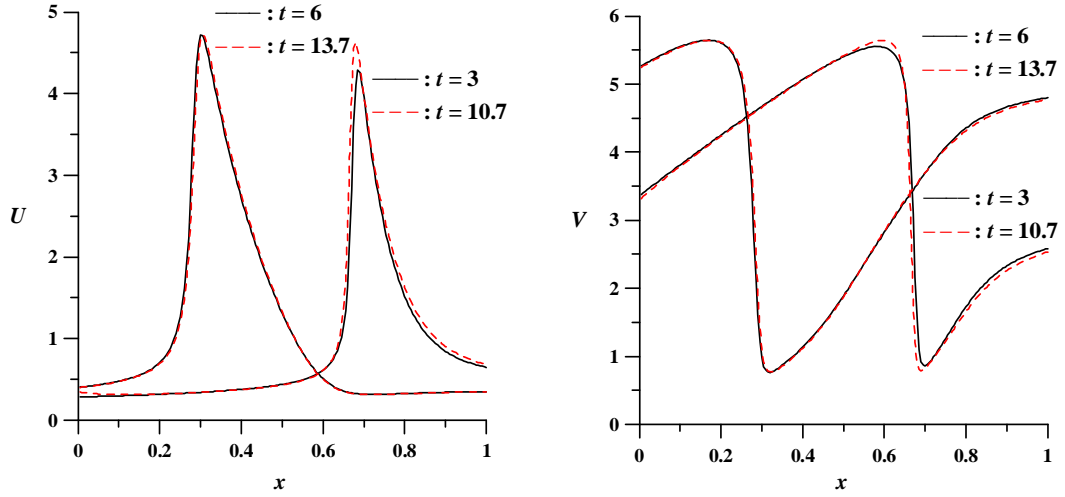
spline kolokeyşin yönteminin sağ ve sol her iki sınırdaki da birer ilave koşul gerektirdiği yukarıda söylenmişti. Bu bağlamda, sol sınır için

$$U_{xx}(x_0, t) = 0 \quad \text{ve} \quad V_{xx}(x_0, t) = 0$$

ek koşulları, sağ sınır için de

$$U_{xx}(x_N, t) = 0 \quad \text{ve} \quad V_{xx}(x_N, t) = 0$$

ek koşulları sınır parametrelerinin eliminasyonunda kullanıldı. Buna göre $N = 200$ ve $\Delta t = 0.01$ alınarak elde edilen çözümlerin sayısal değerleri Tablo 5.5 ile verildi. Tablo 5.5 de yer alan 6 farklı x noktasındaki U ve V yoğunluk değerlerine göre çözümler zamana göre 7.7 periyoduyla periyodik hareket sergilemektedir. Bu hareketin grafik gösterimi de Şekil 5.2 de görülmektedir. Çözümlerin yoğunluk değişimlerini ve bunlara karşılık gelen izdüşümleri gösteren figürler Şekil 3.8 ve Şekil 3.9 ile neredeyse tamamen aynı olduğundan buraya alınmamıştır.



Şekil 5.2: $N = 200$ ve $\Delta t = 0.01$ için periyodik dalga hareketi

Tablo 5.5: Periyodik hareket için yoğunluk değerleri

Yoğunluk	t	$x = 0.0$	$x = 0.2$	$x = 0.4$	$x = 0.6$	$x = 0.8$	$x = 1.0$
U	3	0.284657	0.317966	0.377959	0.612881	1.519483	0.648434
	10.7	0.347747	0.321168	0.376204	0.611218	1.626310	0.680742
	6	0.401741	0.706734	2.716642	0.510302	0.326204	0.352411
	13.7	0.398904	0.691408	2.769059	0.500480	0.324523	0.350579
V	3	3.363896	4.251219	5.066734	5.537413	1.732740	2.580615
	10.7	3.299664	4.233913	5.056668	5.637796	1.659946	2.534846
	6	5.257254	5.606791	1.137215	2.825295	4.355469	4.798749
	13.7	5.234725	5.613815	1.119445	2.846165	4.317357	4.774541

5.4.3 Lineer olmayan problem (Schnakenberg modeli)

Bu kısımda, önceki 3 bölüme benzer olarak (1.18) ile verilen Schnakenberg modelinin (2.14) ile verilen başlangıç şartları altındaki nümerik çözümleri araştırıldı. Çözümler için aynı parametreler ve aynı koşullar dikkate alındı. Sistemin sınır koşulu olarak

$$\begin{aligned} U_x(x_0, t) &= U_x(x_N, t) = 0, \\ V_x(x_0, t) &= V_x(x_N, t) = 0 \end{aligned}$$

ile ifade edilen homojen Neumann sınır koşuluna ek olarak sol sınır için

$$U_{xxx}(x_0, t) = 0 \text{ ve } V_{xxx}(x_0, t) = 0$$

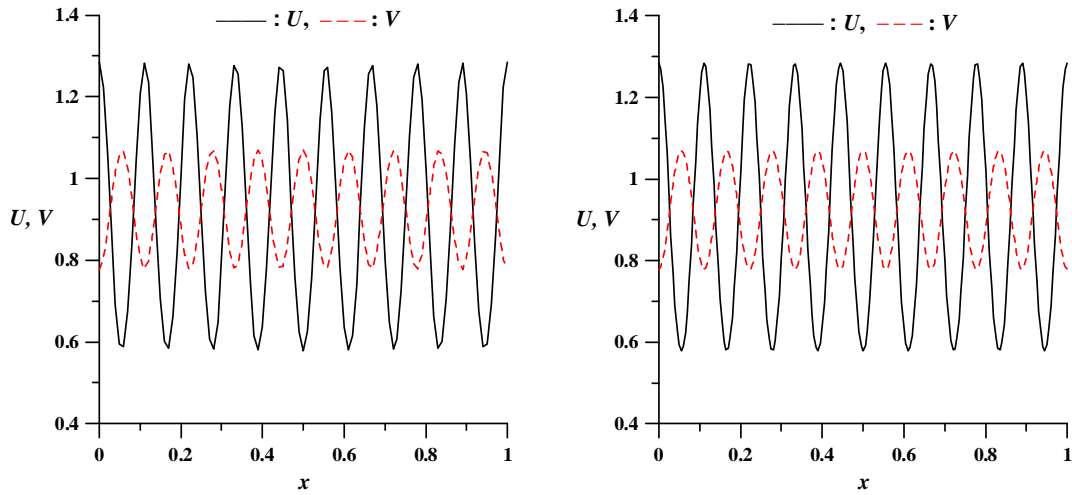
ve sağ sınır için de

$$U_{xxx}(x_N, t) = 0 \text{ ve } V_{xxx}(x_N, t) = 0$$

koşulları kullanıldı. $N = 100$ için $t = 2.5$ anındaki bağıl hata değerleri Tablo 5.6 ile verildi. Tablo 5.6 incelendiğinde nümerik yöntemin yakınsamasının yaklaşık olarak $\Delta t > 1.31 \times 10^{-4}$ için hızla bozulduğu görülmektedir. Bu durum önceki yöntemlerle karşılaştırıldığında kuintik B-spline kolokeyşin yönteminde Δt nin bir miktar daha büyük seçilebilmesinin mümkün olduğunu göstermektedir.

Table 5.6: $N = 100$ için $t = 2.5$ anındaki bağıl hata değerleri

Δt	Adım sayısı	U	V
5×10^{-6}	500000	5.716030E-14	5.456471E-14
5×10^{-5}	50000	1.565300E-10	1.110574E-10
1×10^{-4}	25000	9.874451E-10	8.859939E-10
1.10×10^{-4}	22727	1.078562E-09	1.001553E-09
1.20×10^{-4}	20833	1.505560E-09	1.379056E-09
1.30×10^{-4}	20000	1.747116E-09	1.455014E-09
1.31×10^{-4}	19083	7.116661E-09	6.851104E-09
1.32×10^{-4}	18939	1.056423E-01	1.030156E-01

Şekil 5.3: $N = 100$, $N = 200$ için $t = 2.5$ anındaki salınım hareketleri

Şekil 5.3 de $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$ için çözümlerin sergilediği salınım hareketleri görülmektedir. Sırasıyla $N = 100$ ve $N = 200$ alınarak oluşturulan bu şekillerde her iki durumda da $[0, 1]$ aralığı üzerinde çözümlerin 9 salınım yaptığı görülmektedir. Kuadratik ve kübik B-spline kullanımında $N = 200$ bölünme noktası kullanılarak elde edilen bu sonuca burada $N = 100$ nokta kullanımıyla ulaşılmıştır. Aynı sonuca ulaşmak için Ruuth (1995) ve Madzvamuse (2006) yaptıkları çalışmalarında bölünme nokta sayısını sabit tutmuş, $N = 100$, ancak sistemin zaman ayrıştırması için daha yüksek doğrulukta nümerik yöntem kullanmışlardır. Bu nedenle kuintik B-spline

kolokeyşin yönteminin konumsal ayrıştırımda doğruluk açısından iyi bir yöntem olduğu söylenebilir.

5.4.4 Lineer olmayan problem (Gray-Scott modeli)

3. bölümde verilen (1.19) sisteminin nümerik çözümlerine benzer olarak burada da (1.19) sistemi için (3.6) başlangıç şartları altında çözümler araştırıldı. (1.19) sisteminde yer alan ε_1 , ε_2 , a ve b parametreleri bu kez (Craster and Sassi, 2006) referansına benzer olarak

$$\varepsilon_1 = 1, \varepsilon_2 = 0.01, a = 9, b = 0.4$$

şeklinde seçildi. Problemin çözüm bölgesi, $L = 50$ alınarak $[-L, L]$ aralığı çözüm bölgesi olarak tasarlandı. Konum ayrıştırması için $N = 400$, zaman ayrıştırması için de $\Delta t = 0.2$ kullanıldı. Çözümlerde

$$\begin{aligned} U(x_0, t) = 1 \quad \text{ve} \quad U(x_N, t) = 1 \\ V(x_0, t) = 0 \quad \text{ve} \quad V(x_N, t) = 0 \end{aligned}$$

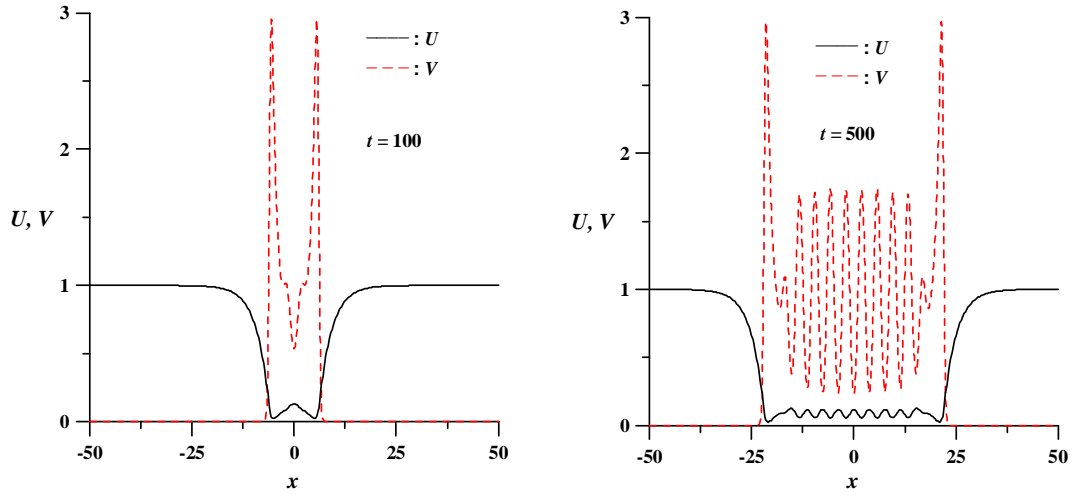
ile verilen Dirichlet sınır koşulları, sol sınırdaki

$$U'(x_0, t) = 0 \quad \text{ve} \quad V'(x_0, t) = 0$$

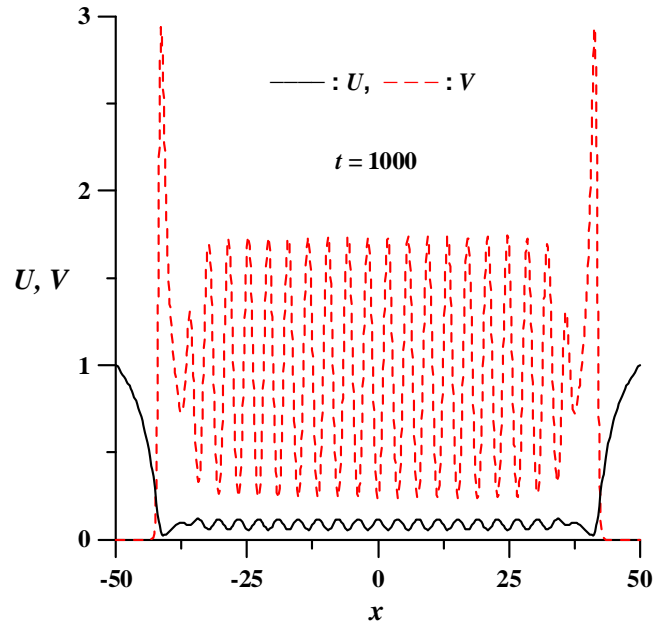
ve sağ sınırdaki

$$U'(x_N, t) = 0 \quad \text{ve} \quad V'(x_N, t) = 0$$

koşulları ile birlikte kullanıldı. Bu şartlar altında $t = 100$ ve $t = 500$ zamanlarındaki çözüm davranışları Şekil 5.4 ile verildi. Şekil 5.4 e bakıldığında yine burada da çözümlerin zaman içinde bölünmeye uğradığı görülmektedir. Ancak burada oluşan yeni dalgaların genlikleri 2. ve 3. bölümdeki durumlara göre daha küçüktür. $t = 1000$ anına ulaşıldığındaki çözümlerin durumu Şekil 5.5 de görülen duruma gelmektedir.

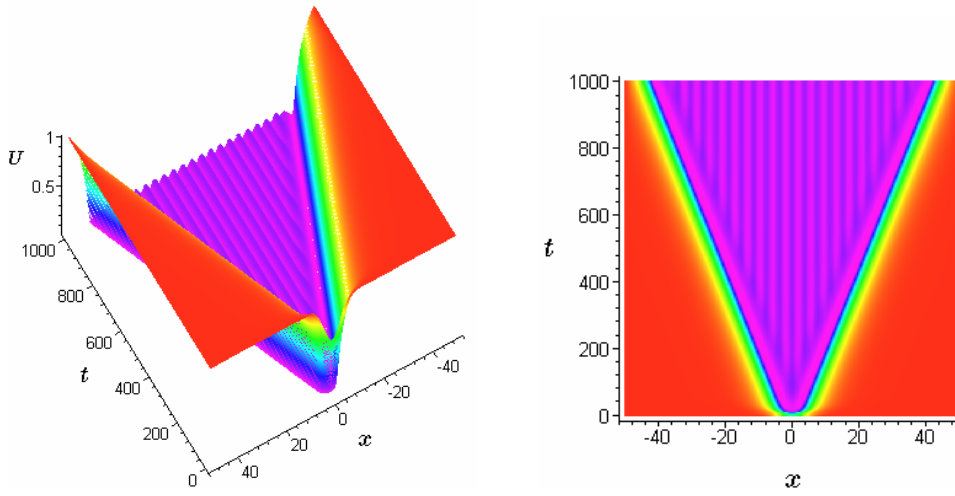


Şekil 5.4: Gray-Scott modeli için $t = 100$ ve $t = 500$ anındaki çözümler

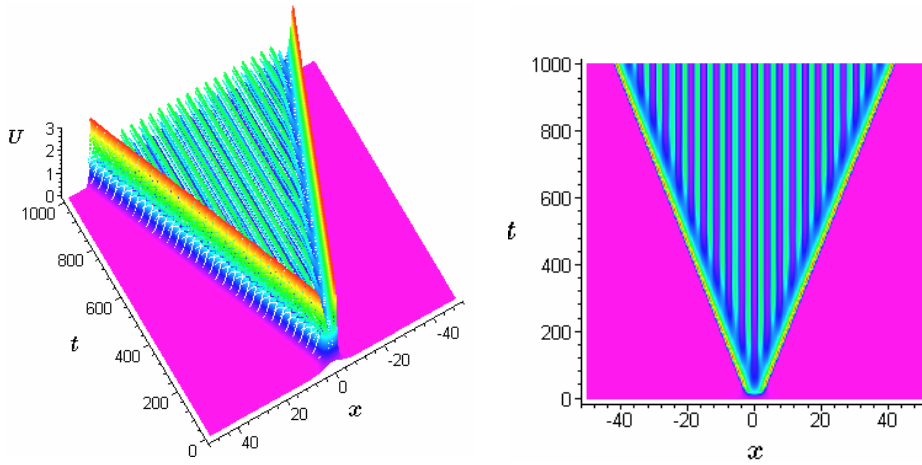


Şekil 5.5: Gray-Scott modeli için $t = 1000$ anındaki çözümler

Şekil 5.6 ve Şekil 5.7 de sırasıyla U ile V nin yoğunluk değişimleri ve bu değişimlere karşılık gelen konumsal desenler görülmektedir.



Şekil 5.6: Gray-Scott modelinde konum ve zamana göre U nun yoğunluk değişimi



Şekil 5.7: Gray-Scott modelinde konum ve zamana göre V nin yoğunluk değişimi

5.4.5 Sonuçlar

Reaksiyon-difüzyon denklem sistemlerinin nümerik çözümleri için kuintik B-spline kolokeyşin yöntemi uygulandı. Seçilen taban fonksiyonlarının beşinci dereceden olması hem sistemin çözüm maliyetini artırmış hem de işlemleri daha karmaşık hale getirmiştir. Konum ve zaman ayrıştırması sonucunda, her satırında sıfırdan farklı 10 eleman bulunduran $(2N + 2) \times (2N + 10)$ boyutlu blok band matrislerden oluşan matris denkleminin elde edilişi, kübik ve kuartik B-spline kullanımına göre

bir dezavantajdır. Ancak yöntemin band matris sistemi üretmesi ve bu sistemin de $2N + 2$ denklem içermesi hesaplama maliyeti açısından kuadratik B-spline kullanımına göre bir avantajdır. Bununla birlikte özellikle Schnakenberg modelinde salınım problemi, küçük N değerleri için bir çok nümerik yöntemde doğruluk açısından problem teşkil ettiğinden, kuintik B-spline kolokeyşin yönteminin bu problemde iyi sonuç vermesi dikkate alınması gereken bir husustur. Taban polinomunun yüksek dereceye sahip olması, yöntemin yüksek mertebeden diferensiyel denklem çözümlerinde kullanılmasına olanak sağlamaktadır. Bu da yine yöntem için olumlu bir durumdur. Diğer yandan, sınır koşullarının sisteme adapte edilerek çözüm parametrelerinin bulunması esnasında her iki sınır için de gerekli olan birer ilave sınır şartı, yöntemin kısıtlayıcı unsurlarından birisi olarak söylenebilir. Bu noktada, ilave sınır şartı koymadan alternatif başka yöntemlerle bu problem aşıldığı takdirde yöntemin daha genel problemlere uygulanabilirliğinin artacağı açıktır. Sonuç olarak, kuintik B-spline kolokeyşin yöntemi, sınırlarında ön görülebilir birer ek koşul içeren reaksiyon-difüzyon denklem sistemlerinin nümerik çözümleri için tavsiye edilebilir bir yöntemdir.

BÖLÜM 6

SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında reaksiyon-difüzyon denklemlerinin nümerik çözümleri, B-spline sonlu elemanlar yöntemi ile elde edildi. Literatürde p -refinement olarak adlandırılan kavram, nümerik yöntemin yakınsaklığını artırıcı bir faktör olarak ifade edilir ve nümerik yöntemde taban fonksiyonu olarak seçilen polinomların derecelerinin artırılmasını öngörür. Bu bağlamda, tez çalışmasında kuadratik, kübik, kuartik ve kuintik B-spline taban fonksiyonları kullanılarak polinomların derecelerinin artırılmasının ortaya çıkardığı sonuçlar incelendi.

Problemin zaman ayrıştırmasında Crank-Nicolson yöntemi kullanıldı. Bu sayede reaksiyon-difüzyon denklem sistemi, ardışık iki zaman adımını içeren denklem sistemi olarak düzenlendi.

Sunulan nümerik yöntemler ilk olarak analitik çözümleri bilinen bir lineer problem üzerinde test edildi ve bu problemin sırasıyla difüzyon baskın, reaksiyon baskın ve reaksiyon güçlü baskın durumları incelendi. İkinci olarak, izotermal kimyasal sistem dikkate alındı ve çözümlerin asimtotik hızda ilerleyişleri izlendi. Daha sonra Brusselator modeli üzerinde çözümlerin sergilediği periyodik hareketler çalışıldı. Önerilen yöntemlerin salınım problemleri üzerindeki etkinliği ise Schnakenberg modeliyle gözlemlendi. Son olarak da Gray-Scott modeli üzerinde durularak ortaya çıkan dalga hareketleri incelendi.

Reaksiyon-difüzyon denklemlerinin ikinci mertebeden türevler içermesi ve kuadratik B-spline fonksiyonların da ikinci mertebeden türevlerinin sürekli olmaması nedeniyle ikinci bölümde ilk olarak reaksiyon-difüzyon denklem sistemi birinci mertebeden türevleri içerecek şekilde yeniden düzenlendi. Bu düzenleme, sistemdeki denklem sayısını iki katına çıkardı. Bu nedenle de nümerik yöntem $4N + 4$ denklem ve $4N + 8$ bilinmeyenli, her satırında sıfırdan farklı 8 eleman içeren blok band matris denklemini netice verdi. Ortaya çıkan bu matris denkleminin çözümü Gauss yok etme yöntemiyle elde edildi. Bu sistemin büyük ve nümerik çözümlerinin maliyetli olması, reaksiyon-difüzyon denklem sistemlerinin çözümlerinde kuadratik B-spline kolokeyşin yönteminin kullanımını kısıtlayıcı bir unsur olarak gözlemlendi. Ayrıca,

kuadratik B-spline kolokeyşin yönteminin ürettiği sonuçlar incelendiğinde, izotermal kimyasal sisteminde $k = 0.1$ durumu ve Schnakenberg modelinde de salınım problemi, nümerik yöntemin doğruluk açısından tatmin edici sonuçları üretmediği durumlar olarak ortaya çıktı. Bu da yine yöntem için ürettiği sonuçların doğruluğu açısından bir dezavantaj olarak not edilebilir. Diğer yandan kuadratik B-spline fonksiyonların basitliği ve kullanım kolaylıkları da yöntemin avantajlı olduğu taraftır.

Sonuç olarak, kuadratik B-spline kolokeyşin yöntemi, çözümlerinde sık salınım hareketi sergilemeyen ve konum ve zaman için çok küçük ayrıştırma parametresi gerektirmeyen düşük mertebeden kısmi türevli diferensiyel denklemlerin çözümleri için tavsiye edilebilir bir yöntemdir. Aksi takdirde maliyeti yüksek, doğruluğu az ve uygulanabilirliği kısıtlı bir yöntemdir.

Üçüncü bölümde kullanılan kübik B-spline kolokeyşin yöntemi ise reaksiyon-difüzyon denklem sistemini $2N + 2$ denklem ve $2N + 6$ bilinmeyenli, her satırında sıfırdan farklı 6 eleman içeren blok band matris denklemine dönüştürdü. Elde edilen bu sistemin çözümü de Thomas algoritması ile yapıldı. Bu yöntem, ilk olarak ekonomik bir alternatif olarak ortaya çıkmaktadır. Ayrıca, yöntemin ürettiği sonuçlar da doğruluk açısından yeterli kabul edilebilecek seviyede görülmektedir. Schnakenberg modelinde, küçük N değeri için salınım problemini iyi modelleyemese de, maliyeti az bir yöntem olmasından dolayı bu açık N sayısını büyülterek kapatılabilmektedir. Ek olarak, kübik B-spline fonksiyonlarının diferensiyel problemlerine kolay adapte edilmesi bir avantaj olarak söylenebilir. Netice itibariyle kübik B-spline kolokeyşin yönteminin, basitliği, ucuz maliyeti ve ürettiği kabul edilebilir sonuçları ile reaksiyon-difüzyon denklem sistemlerinin çözümleri için etkili bir yöntem olduğu vurgulanabilir.

Nümerik çözümlerde kuartik B-spline taban fonksiyonlarının kullanımları, bir kısıtlayıcı unsur da hemen beraberinde getirmektedir. Problemin çözüm bölgesinde sol sınır için gerekli olan bir ilave koşul yöntemin göze çarpan kısıtlarından biridir. Çünkü bu durum seçilen problemlerin sınırda tamamen düz olmasını ya da sol sınır için öngörülebilir bir şart içermesini gerektirmekte bu ise yöntemin genel

problemlere uygulanmasını zora sokmaktadır. Bu bağlamda izotermal kimyasal sistem için böyle bir öngörü yapılamadığından bu problem dördüncü bölümde test problemi olarak alınmamıştır. Bu zorluğu aşma adına, sınırların dışına taşan bölünme noktası kullanmak yerine sınırlarda çoklu bölünme noktalarının kullanılması tavsiye edilebilir. Diğer yandan yöntem bazı nedenlerden dolayı da kuadratik ve kübik B-spline kullanımına göre daha avantajlı bir alternatifi temsil etmektedir. İlk olarak, reaksiyon-difüzyon sistemini $2N + 2$ denklem ve $2N + 8$ bilinmeyenli, her satırında sıfırdan farklı 8 eleman içeren blok band matris denklemine dönüştürmesi yöntem için maliyet açısından tercih edilebilir bir durumdur. Bunun yanı sıra test problemlerinde ortaya koyduğu sonuçlar itibariyle de yöntem bir farklılık göstermiştir. Kuadratik ve kübik B-spline fonksiyonların küçük N sayısı ile modelleyemediği Schnakenberg modelinde salınım problemi aynı şartlarda kuartik B-spline kolokeyşin yöntemiyle düzgün şekilde modellenebilmiştir. Ayrıca, üçüncü mertebeden türevlerinin de süreklilik şartını sağlaması nedeniyle kuartik B-spline fonksiyonların, yüksek mertebeden diferensiyel problemlerinde de kullanılabilirliği vurgulamaya değer bir noktadır.

Kuintik B-spline fonksiyonların kolokeyşin yönteminde kullanımları, kuartik B-spline fonksiyonlara benzer şekilde ilave sınır koşullarının kullanımı zorunlu hale getirmektedir. Zira yöntemin uygulanışında $2N + 2$ denklem ve $2N + 10$ bilinmeyen ortaya çıkmaktadır. Bu nedenle her iki sınırda da birer tane daha ek koşula ihtiyaç duyulmaktadır ki bu da yukarıda işaret edildiği gibi nümerik yöntem açısından bir olumsuz durumdur ve bu nedenle izotermal kimyasal sistem beşinci bölümde de kullanılamamıştır. Sınırlarda kullanılacak çoklu bölünme noktaları yardımıyla yöntemin çok daha genel problemlere uygulanabilirliğinin artırılması bu noktada yeni bir çalışma olarak tasarlanabilir. Bu kısıtlamanın yanında, salınım probleminde istenen doğrulukta sonuç üretmesi, yüksek mertebeden türevelenebilme özelliği ile daha geniş yelpazede kısmi türevli diferensiyel denklemlerin çözümü için alternatif olması ve yöntem uygulandıktan sonra elde edilen denklem sisteminin bir band matris sistemi olarak ifade edilebilmesi yöntemin avantajları arasında sayılabilir.

Sonu olarak, B-spline kolokeyşin yöntemleri, hem uygulamadaki kolaylığı ve hem de reaksiyon-difüzyon denklemlerinin nümerik çözümlerinde genel olarak verdiği kabul edilebilir sonuçlar nedeniyle, benzer tipteki kısmi türevli diferensiyel denklem sistemlerinin çözümlerinde kullanılabilir uygun yöntemler olarak tavsiye edilebilir.

KAYNAKLAR DİZİNİ

- Abdulle, A., 2002, Large stiff systems solved by Chebyshev methods, *Proc. Appl. Math. Mech.*, 1, 508-509.
- Aragon, J.L., Varea, C., Barrio, R.A. and Maini, P.K., 1998, Spatial patterning in modified Turing systems: Application to pigmentation patterns on Marine fish, *Forma*, 13, 213-221.
- Aragon, J.L., Torres, M., Gil, D., Barrio, R.A. and Maini, P.K., 2002, Turing patterns with pentagonal symmetry, *Phys. Rev. E*, 65, 1-9.
- Argyris, J.H. and Kelsey, S., 1960, *Energy theorems and structural analysis*, Butterworth Scientific Publications, London.
- Aronson, D.G. and Weinberger, H.F., 1975, Nonlinear diffusion in population genetics, combustion, and nerve pulse propagation in: J.A. Goldstein (Ed.), *Partial Differential Equations and Related Topics*, in: *Lecture Notes in Mathematics*, vol. 446, Springer-Verlag, Heidelberg, Berlin, 1975, pp. 5--49., 1, 508-509.
- Barrass, I., Crampin, E.J. and Maini, P.K., 2006, Mode transitions in a model reaction-diffusion system driven by domain growth and noise, *Bulletin of Mathematical Biology*, 68, 981-995.
- Barrio, R.A., Maini, P.K., Aragon, J.L. and Torres, M., 2002, Size-dependent symmetry breaking in models for morphogenesis, *Physica D*, 2920, 1-12.
- Barrio, R.A., Varea, C., Aragon, J.L. and Maini, P.K., 1999, A two dimensional numerical study of spatial pattern formation in interacting systems, *Bull. Math. Biol.*, 61, 483-505.
- Billingham, J. and Needham D.J., 1991, The development of travelling waves in quadratic and cubic autocatalysis with unequal diffusion rates. I. Permanent form travelling waves., *Phil Trans R Soc Lond*, A334:1-24.

KAYNAKLAR DİZİNİ (Devam Ediyor)

- Billingham, J. and Needham, D.J., 1992, The development of travelling waves in quadratic and cubic autocatalysis with unequal diffusion rates. I. Large time development in quadratic autocatalysis., *Quart Appl Math* 50:343—372.
- Chou, C.S., Zhang, Y.T., Zhao, R. and Nie, Q., 2007, Numerical Methods for stiff reaction-diffusion systems, *Discrete and Continuous Dynamical Systems-Series B*, 7, 515-525.
- Clough, R.W., 1960, The finite element method in plane stress analysis, *Journal of Structures Division, ASCE, Proceedings of 2d Conference on Electronic Computation*, 345-378.
- Courant, R., 1943, Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibration, *Bulletin of the American Mathematical Society*, 49, 1-43.
- Craster, R.V. and Sassi, R., 2006, Spectral algorithms for reaction-diffusion equations, Technical Report. Note del Polo, No. 99.
- Dag, I., 1994, Studies of B-spline finite elements, PhD thesis, University of Wales, Bangor, U.K.
- de Boor, C., 1978, A practical guide to splines, Springer.
- De Wit, A., 1999, Spatial patterns and spatiotemporal dynamics in chemical systems, *Advances in Chemical Physics*, 109, 435-513.
- De Wit, A., Borckmans, P., and Dewel, G., 1997, Twist grain boundaries in three dimensional lamellar Turing structures, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 94, 12765-12768.
- Doelman, A., Kaper, T.J. and Zegeling, P.A., 1997, Pattern formation in the one-dimensional Gray-Scott model, *Nonlinearity*, 10, 523-563.
- Doelman, A., Gardner, R.A. and Kaper, T.J., 1998, Stability analysis of singular patterns in the 1D Gray-Scott model: a matched asymptotics approach, *Physica D*, 122, 1-36.

KAYNAKLAR DİZİNİ (Devam Ediyor)

- Epstein, I.R. and Pojman, J.A., 1998, An Introduction to Nonlinear Chemical Dynamics, Oxford University Press.
- Erneux, T. and Reiss, E., 1983, Brusselator isolas, SIAM J. Appl. Math., 43, 1240-1246.
- Finlayson, A.B. and Merkin, J.H., 1997, Travelling waves in an open quadratic autocatalytic chemical system, Journal of Mathematical Chemistry, 21, 305-321.
- Gierer, A. and Meinhardt, H., 1972, A theory of biological pattern formation, Kybernetik, 12, 30-39.
- Gray, P. and Scott, S.K., 1984, Autocatalytic reactions in the isothermal, continuous stirred tank reactor: oscillations and instabilities in the system $A+2B\rightarrow 3B$, $B\rightarrow C$, Chem. Eng. Sci., 39, 1087-1097.
- Hrenikoff, A., 1941, Solution of problems in elasticity by the Framework method, Transactions of the ASME, Journal of Applied Mechanics, 8, 169-175.
- Jain, M.K., 1984, Numerical solutions of differential equations, Wiley, New Delhi.
- Kolokolnikov, T., Erneux, T., and Wei, J., 2006, Mesa-type patterns in the one-dimensional Brusselator and their stability, Physica D, 214, 63-77.
- Liu, R.T, Liaw, S.S. and Maini, P.K., 2007, Oscillatory Turing patterns in a simple reaction-diffusion system, Journal of the Korean Physical Society, 50, 234-238.
- Lopez, C.M.G. and Ramos, J.I., 1996, Linearized θ -methods Part II: Reaction-diffusion equations, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., 137, 357-378.
- Madzvamuse, A., 2006, Time-stepping schemes for moving grid finite elements applied to reaction-diffusion systems on fixed and growing domains, Journal of Computational Physics, 214, 239-263.

KAYNAKLAR DİZİNİ (Devam Ediyor)

- Madzvamuse, A., Wathen, A.J. and Maini, P.K., 2003, A moving grid finite element method applied to a biological pattern generator, *Journal of Computational Physics*, 190, 478-500.
- Maini, P.K., Painter, K.J. and Chau, H.N.P., 1997, Spatial pattern formation in chemical and biological systems, *J. Chem. Soc., Faraday Trans.*, 93(20), 3601-3610.
- Merkin, J.H., Needham, D.J. and Scott, S.K., 1989, The development of travelling waves in a simple isothermal chemical system I. Quadratic autocatalysis with linear decay, *Proc. R. Soc. Lond. A*, 424, 187-209.
- Merkin, J.H. and Needham D.J., 1993, Reaction-diffusion waves in an isothermal chemical system with general orders of autocatalysis and spatial dimension., *Z. Angew. Math. Phys. (ZAMP)*, 44, 707--721.
- Moore, P.K., 1995, Comparison of adaptive methods for one dimensional parabolic systems, *Applied Numerical Mathematics*, 16, 471-488.
- Murray, J.D., 2003, *Mathematical Biology II: Spatial Models and Biomedical Applications*, Third Edition, Springer, New York.
- Needham, D.J. and Merkin J.H., 1992, The effects of geometrical spreading in two and three dimensions on the formation of travelling wavefronts in a simple, isothermal chemical system, *Nonlinearity*, 5:413-452.
- Nicolis, G. and Prigogine, I., 1977, *Self-organization in nonequilibrium systems*, Wiley, New York.
- Pearson, J.E., 1993, Complex pattern in a simple system, *Science*, 261, 189-192.

KAYNAKLAR DİZİNİ (Devam Ediyor)

- Pena, B. and Perez-Garcia, C., 2001, Stability of Turing patterns in the Brusselator model, *Phys. Rev. E.*, 64 (5).
- Prenter, P.M., 1975, *Splines and variational methods*, Wiley, New York.
- Prigogine, I. and Lefever, R., 1968, Symmetry breaking instabilities in dissipative systems. II, *J. Chem. Phys.*, 48, 1695-1700.
- Reddy, J.N., *An introduction to the finite element method*, McGraw Hill, Singapore.
- Reynolds, W.N., Pearson, J.E. and Dawson, S.P., 1994, Dynamics of self-replicating patterns in reaction diffusion systems, *Physical Review Letters*, 72, 2797-2800.
- Ruuth, S.J., 1995, Implicit-explicit methods for reaction-diffusion problems in pattern formation, *Journal of Mathematical Biology*, 34, 148-176.
- Saka, B., 2002, RLW and K-S denklemlerinin B-spline kolokeyşin metodları ile çözümleri , *Doktora Tezi*, Eskişehir Osmangazi Üniversitesi.
- Schnakenberg, J., 1979, Simple chemical reaction systems with limit cycle behavior, *J. Theoret. Biol.*, 81, 389-400.
- Schoenberg, I.J., 1946, Contributions to the problem of approximation of equidistant data by analytic functions, *Quart. Appl. Math.* 4, 45-99; 112-141.
- Thomas, D., 1975, Artificial enzyme membrane, transport, memory and oscillatory phenomena, in: D.Thomas, J.-P.Kervenez (Eds.) *Analysis and control of imbolised enzyme systems*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 1975, 115-150.
- Turing, A.M., 1952, The Chemical Basis of Morphogenesis, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London.*, Series B, Biological Sciences, 237, 37-72.

KAYNAKLAR DİZİNİ (Devam Ediyor)

- Turner, M., Clough, R.W., Martin, H.H. and Topp, L., 1956, Stiffness and deflection analysis of complex structures, *Journal of Aeronautical Science*, 23, 805-823.
- Twizell, E.H., Wang, Y., Price, W.G. and Fakhr, F., 1994, Finite-Difference methods for solving the reaction-diffusion equations of a simple isothermal chemical system, *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 10, 435-454.
- Wu, S.L. and Liu, S.Y., 2009, Asymptotic speed of spread and traveling fronts for a nonlocal reaction-diffusion model with distributed delay, *Applied Mathematical Modelling*, 33, 2757-2765.
- Zegeling, P.A. and Kok, H.P., 2004, Adaptive moving mesh computations for reaction-diffusion systems, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 168, 519-528.
- Zienkiewicz, O.C. and Taylor, R.L., 1989, *The finite element method*, Vol.1, Basic formulation and linear problems, McGraw Hill, London.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı: Ali Şahin

Uyruğu: T.C.

Doğum Yeri, Tarihi: Kayseri, 11.09.1980

Medeni hali: Evli

Adres: Eskişehir Osmangazi Üniversitesi

Fen Edebiyat Fakültesi

Matematik ve Bilgisayar Bilimleri Bölümü

26480 – Eskişehir – Türkiye.

E-posta: alis@ogu.edu.tr ; asahinhc@gmail.com

Eğitim Bilgileri:

Doktora:

Eskişehir Osmangazi Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Matematik Anabilim Dalı
(2004–2009)

Yüksek Lisans:

Dumlupınar Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Matematik Anabilim Dalı
(2002–2004)

Lisans:

Hacettepe Üniversitesi
Fen Fakültesi
Matematik Bölümü
(1997–2002)

İş Denevimi:

Araştırma Görevlisi (2005–...) Eskişehir Osmangazi Üniv. Matematik ve Bilg. Bil. Böl.
Araştırma Görevlisi (2002–2005) Dumlupınar Üniversitesi, Matematik Bölümü