1. BÖLÜM

GİRİŞ

İntegral hesabı bir çok alanda sıklıkla karşımıza çıkmaktadır. Ancak integralin tam değeri maalesef her zaman analitik olarak bulunamamaktadır. Bu yüzden integralin gerçek değerini tam ya da yaklaşık olarak hesaplayan çeşitli nümerik integrasyon metotları üretilmiştir.

Nümerik integrasyon metotları integrali alınacak olan fonksiyonun bazı noktalardaki değerleri kullanılarak oluşturulur. Ancak iyi bir yaklaşım için bu fonksiyonun hangi noktalardaki değerlerinin kullanılacağı ve kaç nokta seçilmesi gerektiği düşünülür. Genel olarak $\int_a^b f(x)dx$ şeklindeki bir integral için nümerik integrasyon metodu n kullanılan nokta sayısı olmak üzere $Q_n(f) = \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$ şeklinde ifade edilir. Burada x_i integrasyon noktalarını ve w_i ise integrasyon ağırlıklarının gösterir. $[a,b]$ integrasyon aralığını eşit uzunlukta parçalayarak fonksiyonun hangi noktalardaki değerinin alınacağına karar verilebilir. Polinomsal interpolasyon ile $f(x)$ fonksiyonunun bu noktalardaki değerleri kullanılarak bir polinom oluşturulur. Polinomlar tam olarak integrallenebildiği için $f(x)$ yerine bu polinomun integrali alınır. Böylece integral değerine yaklaşık bir sonuç elde edilir. Kullanılan nokta sayısı artırılarak daha iyi sonuçlar elde edilebilir. Bu şekilde oluşturulan integrasyon metotları Newton-Cotes formülleri olarak adlandırılır. Daha iyi bir yaklaşım için $[a,b]$ aralığı parçalanarak her bir parçaya ayrı ayrı Newton-Cotes formülleri uygulanır. Bu şekilde oluşturulan integrasyon metotlarına da Kompozit Newton-Cotes formülleri adı verilir. Bölüm 2.1 ve 2.2 de bu konular tanıtılmıştır.

n nokta kullanılarak Newton-Cotes formülleriyle derecesi en fazla $n-1$ olan polinomlar tam olarak integrallenebilir. Daha yüksek dereceden polinomların tam olarak integrallenebilmesi için Newton-Cotes formülleri yeterli gelmemiştir. Bunun için ortogonal polinomlar baz alınarak Gauss integrasyon metotları oluşturulur. n-noktalı Gauss integrasyon metodu için n. dereceden ortogonal polinomun kökleri integrasyon noktalarını, ortogonal polinomların çeşitli değerleri kullanılarak oluşturulan bir lineer denklem sisteminin çözümü ise ağırlıkları verir. Ancak integrasyon noktaları ve ağırlıklar pratikte burada belirtildiği gibi hesaplanmaz. Kolaylığı açısından Jacobi matrisi olarak bilinen simetrik, üç köşegenli matrisin özdeğerleri ve özvektörleri kullanılarak hesaplanır. Gauss integrasyon metodu ile n nokta kullanılarak derecesi en fazla $2n-1$ olan bir polinom tam olarak integrallenmektedir. Bölüm 2.4 de Gauss integrasyon metotları etraflıca işlenmiş ilgili bir çok teorem verilerek, çeşitli özel ağırlık fonksiyonlarına göre oluşturulmuş ortogonal polinomların Gauss integrasyon metotları verilmiştir: Gauss-Legendre, Gauss-Hermite, Gauss-Laguerre, Gauss-Chebyshev gibi… Gauss integrasyon metotlarından çok iyi yaklaşımlar elde etmemize rağmen hatasını pratik olarak hesaplamak oldukça zordur. Çünkü hatanın hesabı için integrali alınan fonksiyonunun $2n$. türevinin hesaplanması gerekir.

Hatanın yaklaşık hesabı için çeşitli çalışmalar yapılmıştır. Farklı bir integrasyon metodu daha oluşturularak bu iki metottan elde edilen sonuçlar arasındaki fark, integrasyon hatasına bir yaklaşım olarak kabul edilmiştir. İkinci metot için en az $n+1$ nokta gerekir. Çünkü n nokta ile en yüksek yaklaşım derecesine sahip tek integrasyon metodu Gauss integrasyon metodudur.

n Gauss integrasyon noktası ile birlikte yeni $n+1$ integrasyon noktası daha alınarak oluşturulan $2n+1$ noktalı, yaklaşım derecesi $3n+1$ olan bir integrasyon metodu üretilmiştir(Kronrod,1964). Kronrod bu çalışmasında $[-1,1]$ aralığında Legendre polinomlarını kullanmış ve bu çalışmasının sonucunda tüm integrasyon noktalarının reel ve bunlara karşılık gelen tüm ağırlıkların pozitif olduğunu ispatlamıştır. Ancak bu durum genelleştirilemez. Çünkü derecesi birden büyük tüm klasik Laguerre polinomları $(\alpha = 0)$ için oluşturulacak yeni integrasyon noktalarının bir kısmı kompleks değerler alır. Aynı durum $n = 1,2,4$ dereceli Hermite polinomları kulanıldığında da ortaya çıkar. Gauss-Kronrod metotlarının ilk ortaya çıkışı 1964 olmasına rağmen değişik ağırlık fonksiyonlarına göre Gauss-Kronrod metotlarının varlığı ve tekliği, Kronrod noktalarının reel olup olmadığı, ilgili ağırlıkların pozitif olup olmadıkları, Kronrod noktaları ve ağırlıklarının hesaplanması gibi konular henüz tam olarak aydınlığa kavuşmamış problemlerdir. Bölüm 3.3 de Gauss-Kronrod integrasyon metotları tanıtılarak çeşitli örnekler verilecektir. Gauss-Kronrod metotlarının integrasyon noktalarının ve ağırlıklarının hesaplanması için kullanılan ortogonal polinomların yineleme katsayılarını kullanmak en pratik yoldur. Bölüm 3.3.2 de bu katsayıların hesabı için kullanılacak olan Laurie algoritması verilmiştir.

Gauss-Kronrod metotlarının her zaman mevcut olmaması farklı metotların üretilmesini sağlamıştır. Laurie(1996) Anti-Gauss kuralları olarak adlandırılan yeni bir metot önermiştir. Derecesi $2n+2$ den küçük tüm reel katsayılı polinomlar için bu metodun hatası Gauss integrasyon metodundaki hata ile aynı büyüklükte ama ters işarettedir. $n+1$ yeni nokta ile elde edilen bu yeni metodun yaklaşım derecesini artırmak için Ehrich(2002) yaptığı çalışmada klasik Hermite polinomları kullanıldığı zaman yaklaşım derecesi $2n+3$, Laguerre polinomları için $2n+2$ elde etmiştir. Hasçelik(2005) bu özelliği genel-Hermite polinomlarına genişletmiş, yaklaşım derecesi olarak $2n+3$ elde etmiştir. Bölüm 3.4.de Anti-Gauss kuralları incelenecek, Gauss ve Anti-Gauss integrasyon metotları kullanılarak oluşturulan Averaj integrasyon metodu tanıtılacaktır.

Şu ana kadar bahsedilen tüm integrasyon kurallarının hesabı için gerekli olan en önemli şey kullanılan ortogonal polinomların üç terimli yineleme bağıntısındaki katsayılardır. Ancak her ağırlık fonksiyonu için yineleme katsayılarının tanımında kullanılan integralleri kolayca hesaplamak mümkün olmamaktadır. Özellikle büyük n değerleri için polinomlar bilgisayarın hafızasında fazla yer kapladığı için bu katsayılar hızlı bir şekilde elde edilmemektedir.

Yineleme katsayılarının hesabı için bu integralleri kullanmayan Bölüm 4.1. de moment tabanlı metotlar verilmiştir. Bu metot temel olarak determinant hesabına dayanmaktadır. Moment tabanlı metotlar nümerik kararlı değildir. Ancak hassaslık derecesi artırılırsa iyi sonuçlar vermektedir. Moment tabanlı metotların nümerik kararlı olmaması katsayıların farklı bir yoldan hesaplanmasını gerektirir.

Yineleme katsayılarının elde edilmesi için kullanılan integrallere sonlu bir toplamla yaklaşma fikri ortaya atılmıştır. Bölüm 4.2.3.1 de Stieltjes algoritması verilmiştir. Stieltjes algoritması, ilk katsayılar kullanılarak ($P_o = 1$ kabul edildiği için α_0, β_0 yineleme katsayıları elde edilebilir) üç terimli yineleme bağıntısından sırayla diğer katsayıların elde edilmesi temeline dayanmaktadır. Sadece son katsayılarda hata kabul edilmeyecek şekilde büyük değerler vermektedir. Bununla birlikte, elde edilmek istenen yineleme katsayılarının sayısı başta seçilen sayıdan küçük seçilerek ve gerekli normalizasyon işlemleri yapılarak bu problem ortadan kaldırılabilir. Bölüm 4.2.3.2 de Stieltjes algoritmasına alternatif olarak Lanczos tipi algoritma verilmiştir. Bu algoritma nümerik kararlı değildir. Ancak Gragg ve Harrod(1984) tarafından Givens rotasyonları kullanılarak nümerik kararlı bir şekle dönüştürülmüştür.

Hermite, Legendre, Laguerre, Chebyshev gibi klasik polinomların üç terimli yineleme bağıntısındaki katsayılar bilinmektedir. Ama yeni bir ağırlık fonksiyonu kullanılarak oluşturulacak ortogonal polinomların bu yineleme katsayıları her zaman kolaylıkla hesaplanamamaktadır. Bölüm 5 de

$$w(x) = |x|^{\alpha}\, exp\left[-x^2\right]\cos^2(x) \qquad x \in R,\ \alpha > -1$$

ve benzeri ağırlık fonksiyonları kullanılarak oluşturulmuş ortogonal polinomların yineleme bağıntılarındaki katsayılar Lanczos tipi algoritmayı kullanan bir metotla yaklaşık olarak hesaplanarak, ilgili Gauss integrasyon metotları oluşturulmuştur. α nın farklı değerleri için bu metotla elde edilen yineleme katsayıları tablolarda gösterilmiş ve bu katsayılar kullanılarak integrasyon metotları elde edilmiştir. Bu metot ve farklı metotlar kullanılarak elde edilen hata değerleri bir tabloda verilerek aralarında en iyi sonucun yukarda belittiğimiz algoritma ile bulunan değerden elde edildiği gözlenmiştir. Bu metot farklı tipteki her ağırlık fonksiyonu için de kullanılabilir. Bu algoritma dışında $w(x) = |x-b|^{\alpha}\exp(-x^2),\ b \in R,\ \alpha > -1$ tipi bir ağırlık fonksiyonu ile oluşturulacak ortogonal polinomlarının yineleme katsayılarını Milonovic ve Cvetkovic(2003) asimptotik açılımlar veya lineer olmayan denklem sistemlerinin çözümünü kullanarak hesaplamıştır.

2. BÖLÜM

NÜMERİK İNTEGRASYON

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \tag{2.1}$$

integralini ele alalım. Nümerik integrasyon metotları, verilen bu integralin değerini tam ya da yaklaşık olarak hesaplayan metotlardır. Bu metotlar genellikle integralin analitik olarak hesaplanmadığı durumlarda kullanılır. İntegralin gerçek değeri ile nümerik metotla bulunan değer arasındaki fark integrasyon hatasını verir.

$$R(f) = I(f) - Q_n(f) \tag{2.2}$$

Buradaki $Q_n(f)$ nümerik metotla bulunan değerdir.

$$R(P) = \begin{cases} 0, & \forall P \in \prod_m \\ \neq 0, & \exists P \in \prod_{m+1} \end{cases}$$

$\prod_m$ derecesi en fazla m olan polinomlar kümesi olmak üzere, $Q_n(f)$ integrasyon metodunun yaklaşım derecesi m dir, denir. Aşağıdaki bölümlerde çeşitli integrasyon metotları incelenecektir.

2.1 NEWTON-COTES FORMÜLLERİ

$f(x)$ fonksiyonu $[a,b]$ integrasyon aralığında tanımlı olsun. Bu metodun kullanılabilmesi için $[a,b]$ aralığının sonlu olması gerekir. Newton-Cotes formüllerinde verilen $f(x)$ fonksiyonu uygun bir $P(x)$ polinomu ile değiştirilir ve bu polinomun integrali alınarak orijinal integralin değerine yaklaşık bir sonuç elde edilir.

Newton-Cotes formüllerinde eşit uzaklıktaki noktaların fonksiyon değerleri kullanılır. Bunun için $[a,b]$ aralığı aşağıdaki gibi parçalanacaktır:

$$x_i = a + ih \qquad i = 0,1,....,n \qquad h = \frac{b-a}{n}$$

$$P_n(x_i) = f(x_i) \quad i = 0,1,....,n$$

şartlarını sağlayan $P_n \in \prod_n$ polinomu göz önüne alınsın. P_n polinomsal interpolasyon kullanılarak elde edilir. Bu interpolasyonla n noktadan derecesi en fazla $n-1$ olan bir polinom oluşturulur. $L_i(x),\ i = 0,1,...,n$ Lagrange polinomları kullanılarak P_n polinomu

$$L_i(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^{n} \frac{x - x_k}{x_i - x_k} \ , \ P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} L_i(x) f(x_i) = \sum_{i=0}^{n} L_i(x) f_i$$

şeklinde bulunur. Newton-Cotes formülünde kullanılan polinom için interpolasyon uygulanırsa, $x_i = a + ih$ olduğu için

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} L_i(x) f_i \qquad L_i(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^{n} \frac{x - x_k}{x_i - x_k} = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^{n} \frac{t-k}{i-k} = \varphi(t)$$

$$\int_a^b P_n(x)dx = \sum_{i=0}^{n} f_i \int_a^b L_i(x)dx = h\sum_{i=0}^{n} f_i \int_0^n \varphi(t)dt = h\sum_{i=0}^{n} f_i \alpha_i$$

elde edilir. Dikkat edilirse α_i değerleri sadece kullanılan nokta sayısına bağlıdır. Özellikle integrali alınan $f(x)$ fonksiyonuna ve integralin sınırları olan a,b değerlerine bağlı olmadığı görülür.

Örnek 2.1. $n = 2$ için α_i ağırlıkları Lagrange interpolasyon polinomu kullanılarak aşağıdaki gibi bulunur:

$$\alpha_0 = \int_0^2 \frac{t-1}{0-1}.\frac{t-2}{0-2}dt = \frac{1}{2}\int_0^2 (t^2 - 3t + 2)dt = \frac{1}{2}(\frac{8}{3} - \frac{12}{2} + 4) = \frac{1}{3}$$

$$\alpha_1 = \int_0^2 \frac{t-0}{1-0}.\frac{t-2}{1-2}dt = \frac{1}{2}\int_0^2 (t^2 - 2t)dt = \frac{1}{2}(\frac{8}{3} - 4) = \frac{4}{3}$$

$$\alpha_2 = \int_0^2 \frac{t-0}{2-0}.\frac{t-1}{2-1}dt = \frac{1}{2}\int_0^2 (t^2 - t)dt = \frac{1}{2}(\frac{8}{3} - \frac{4}{2}) = \frac{1}{3}$$

Bu değerler integrasyon formülünde yerleştirilirse

$$\int_a^b P_2(x)dx = \frac{1}{3}h(f_0 + 4f_1 + f_2)$$

elde edilir. Bu metot Simpson kuralı olarak adlandırılır.

Newton-Cotes formüllerindeki α_i sayılarının her biri bir rasyonel sayıdır ve bu rasyonel sayıların paydası ortaktır. Bu rasyonel sayılar

$$\sum_{i=0}^{n} \alpha_i = n$$

özelliğini sağlar. Newton-Cotes formülleri için integrasyon hatası

$$\int_a^b P_n(x)dx - \int_a^b f(x)dx = h^{p+1}Kf^{(p)}(\xi) \qquad \xi \in (a,b)$$

şeklinde ifade edilir. ρ ve K değeri sadece n değerine bağlıdır. Kullanılan nokta sayısına göre Newton-Cotes formüllerine çeşitli isimler verilmiştir. Bunlar şöyle sıralanabilir:

$n=1$ için Newton-Cotes formülü yamuk kuralı olarak bilinir. $(x_1, f_1), (x_2, f_2)$ noktalarından oluşan Lagrange interpolasyon polinomu

$$P_2(x) = \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} f_1 + \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} f_2$$

şeklindedir. Yamuk kuralının hatası $\frac{1}{12}h^3 f''(\xi),\ \xi \in (a,b)$ ile verilir. Bu kuralın yaklaşım derecesi birdir.

3 noktalı Newton-Cotes formülü Simpson kuralı olarak adlandırılır. Simpson kuralının yaklaşım derecesi üçtür. Yaklaşım derecesinin yüksek olması nedeniyle sıklıkla kullanılır.

4 noktalı Newton-Cotes formülü Simpson's 3/8 kuralıdır ve

$$\int_a^b P_4(x)dx = \frac{3}{8}h(f_1 + 3f_2 + 3f_3 + f_4)$$

formülüyle belirtilir. Hatası ise $\frac{3}{80}h^5 f^{(4)}(\xi),\ \xi \in (a,b)$ ile verilir.

5 noktalı Newton-Cotes formülü

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{2}{45}h(7f_1 + 32f_2 + 12f_3 + 32f_4 + 7f_5) - \frac{8}{945}h^7 f^{(6)}(\xi)$$

şeklindedir ve Milne kuralı olarak bilinir.

7 noktalı Newton-Cotes formülü

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{1}{140}h(41f_1 + 216f_2 + 27f_3 + 272f_4 + 27f_5 + 216f_6 + 41f_7) - \frac{9}{1400}h^9 f^{(8)}(\xi)$$

şeklindedir ve Weddle kuralı olarak adlandırılır. Daha detaylı bilgi için http://www.mathworld.com internet adresine bakılabilir.

n eğer büyük değer seçilirse bazı α_i değerleri negatif çıkar. Bu durumda formül nümerik amaç bakımından uygun değildir.

2.2. KOMPOZİT METOTLAR

Newton-Cotes formüllerini $[a,b]$ aralığının tümüne uygulamak yerine bu aralık eşit parçalara ayrılıp her bir parçaya ayrı ayrı uygulanılarak elde edilen metotlardır. Bu metodun Newton-Cotes formüllerine göre avantajı hatanın daha az olmasıdır. Verilen integral aşağıdaki gibi parçalanır sonra her bir aralığa Newton-Cotes integrasyon kuralı uygulanır:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{a=x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx + ... + \int_{x_{n-1}}^{x_n=b} f(x)dx \qquad (2.2.1)$$

Yamuk kuralı için hata $\frac{b-a}{12} f^{(2)}(\xi)$ iken kompozit yamuk için hata $\frac{b-a}{12}(\frac{b-a}{n})^2 f^{(2)}(\xi)$ şeklindedir. Kompozit yamuk için hatanın daha az olduğu buradan görülür. Hata hakkında daha detaylı bilgi için Bulirsch(2000, s 123) bakılabilir.

2.3. ORTOGONAL POLİNOMLAR

$\lambda(x)$, $x \to -\infty$, $x \to \infty$ için sonlu limitlere sahip, azalmayan bir fonksiyon ve $d\lambda$ üreteç pozitif ölçüm olsun. Uygulamalarda görülen ölçümlerin çoğu mutlak süreklidir. Bu yüzden $d\lambda(x) = w(x)dx$ şeklinde yazılabilir. Ağırlık fonksiyonu olarak adlandırılan w negatif olmayan, integrallenebilir bir fonksiyondur. İntegral aralığı sonlu, yarı sonlu, sonsuz olabileceği gibi sonlu veya sayılamaz çoklukta λ nın w_k pozitif atlamalara sahip olduğu ayrık x_k noktalarından oluşabilir.

Karesi integrallenebilen fonksiyonlar uzayı

$$L_2[a,b] = \left\{ f \left| \int_a^b w(x)[f(x)]^2 dx < \infty \right. \right\}$$

üzerinde

$$\langle f, g \rangle = \int_R w(x) f(x) g(x) dx \qquad (2.3.1)$$

şeklinde bir iç çarpım tanımlarsa $f = g$ için

$$\| f \| = \sqrt{\langle f, f \rangle} = \left(\int_R f^2(x) w(x) dx \right)^{1/2} \qquad (2.3.2)$$

f fonksiyonunun normu elde edilir. $\| f \| \geq 0$ olduğu açıktır.

$\prod_k \subset \prod$ derecesi k ya eşit ya da daha küçük olan polinomlar kümesi olsun. Her mertebeden

$$\mu_k = \mu_k(d\lambda) = \int_R x^k d\lambda(x) \quad k = 0,1,2,..., \qquad (2.3.3)$$

momentler tanımlı olmak üzere herhangi $p, q \in \prod$ için $\langle p, q \rangle = 0$ ise p polinomu q polinomuna ortogonal(diktir) denir. Sayılabilir bir kümenin tüm elemanlarının birbiriyle iç çarpımı 0 ise bu kümeye ortogonal denir. Eğer ortogonal polinomların başkatsayısı bire eşitse bu polinomlara monik ortogonal polinomlar denir.

Normları bire eşit olan ortoganal elemanlardan oluşan kümeye ortonormal küme denir. Ortogonal bir kümeden ortonormal bir küme elde etmek için ortogonal polinomlar, normlarına bölünür. Yani

$$\tilde{P}_k = \frac{P_k}{\| P_k \|}, \quad k = 0,1,2,...,$$

şeklinde ortonormal polinomlar oluşturulur. Bu polinomlar aşağıdaki özelliği sağlar:

$$\left(\tilde{P}_k, \tilde{P}_l \right) = \delta_{kl} = \begin{cases} 0 & k \neq l \\ 1 & k = l \end{cases}$$

2.3.1. Üç Terimli Yineleme Bağıntısı

Üç terimli yineleme bağıntısı kullanılarak ortogonal polinomlar kolaylıkla oluşturulabilir. Bu bağıntı ortogonal polinomları ve türevlerini bulmak için kullanılması dışında yineleme katsayılarından ortogonal polinomların kökleri ve

Gauss integrasyon kuralında kullanılan ağırlıklar bulunabilir. Ayrıca monik ortogonal polinomlardan ortonormal polinomları oluştururken de kullanılabilir. Üç terimli yineleme bağıntısı aşağıdaki özelliği sağlayan

$$\left(rp,q\right)=\left(p,qr\right) \qquad \forall p,q,r\in\prod \text{ için} \tag{2.3.4}$$

iç çarpımlarda tanımlıdır.

Teorem 2.3.1. $[a,b]$ aralığında $w(x)$ ağırlık fonksiyonuna göre ortogonal yani $\left\langle P_i,P_k\right\rangle=0 \quad i\neq k$ şartını sağlayan $P_j\in\prod_j,\ j=0,1,...$ polinomları vardır ve tektir. Bu polinomlar Gram-Schmidt yöntemi ile

$$P_{-1}(x)=0,\quad P_0(x)=1$$

$$P_{i+1}(x)=(x-a_i)P_i(x)-b_i^2P_{i-1}(x) \qquad i=1,2,...,n$$

$$a_i=\frac{\left\langle xP_i,P_i\right\rangle}{\left\langle P_i,P_i\right\rangle} \qquad i=0,1,...,n$$

$$b_i=\frac{\left\langle P_i,P_i\right\rangle}{\left\langle P_{i-1},P_{i-1}\right\rangle} \qquad i=1,2,...,n \tag{2.3.5}$$

şeklinde ifade edilir. Buradaki polinomlar monik ortogonal polinomlardır. Yani polinomların baş katsayıları bire eşittir.

2.4. GAUSS İNTEGRASYON METODU

$w\left(x\right)$ ağırlık fonksiyonu olmak üzere $I(f)=\int_a^b w(x)f(x)dx$ integrali göz önüne alınsın. $[a,b]$ aralığı sonlu, yarı sonlu veya sonsuz olabilir. Ağırlık fonksiyonu aşağıdaki şartları sağlasın:

a) $w(x)\geq 0$, $\quad \forall x\in[a,b]$ aralığında ölçülebilir.

b) $\mu_0>0$ olmak üzere tüm momentler $\mu_k=\int_a^b x^k w(x)dx$ var ve sınırlıdır.

c) $\left[a,b\right]$ aralığında negatif olmayan tüm $P\left(x\right)$ polinomları için

$$\int_a^b w(x)P(x)dx = 0 \ \Rightarrow \ P(x) \equiv 0 \tag{2.4.1}$$

sağlanır veya buna denk olarak $\int_a^b w(x)dx > 0$ kullanılabilir.

Pratikte sık kullanılan ağırlık fonksiyonları aşağıdaki tabloda gösterilmiştir:

[a,b] aralığı	Ağırlık fonksiyonları	Ortogonal polinomlar
[-1,1]	1	$P_n(x)$:Legendre polinomları
[-1,1]	$1/\sqrt{1-x^2}$	$T_n(x)$:Chebyshev polinomları
$[0,\infty)$	e^{-x}	$T_n(x)$:Laguerre polinomları
$(-\infty,\infty)$	e^{-x^2}	$H_n(x)$:Hermite polinomları

n -noktalı Gauss integrasyon metodu

$$Q_n^G(f) = \sum_{i=1}^{n} w_{ni} f(x_{ni}) \tag{2.4.2}$$

şeklinde ifade edilir. Burada x_{ni} integrasyon noktaları, w_{ni} integrasyon ağırlıkları olarak adlandırılır. x_{ni} ve w_{ni} ifadelerinde görülen n indisleri kolaylık açısından anlaşıldığı sürece sonraki kısımlarda kullanılmayacaktır. Daha önceki bölümde bahsedilen Newton-Cotes formüllerinde x_i apsis değerleri $[a,b]$ aralığı eşit parçalara bölünerek seçilmişti. Ancak aralıkların eşit olarak parçalanması metodun yaklaşım derecesi dikkate alındığında en iyi seçim değildir. Bu bölümde yaklaşım derecesinin maksimum olmasını sağlayan metot verilmiştir.

Aşağıda integrasyon metotları için sıklıkla kullanılan bir kaç tanım verilmiştir:

1)Eğer metodun yapısında kullanılan denklemler (kompleks de olabilir) bir çözüme sahipse integrasyon formülü mevcuttur denir.

2) Eğer tüm noktalar ve ağırlıklar reel ise formül reeldir denir.

3) Eğer tüm ağırlıklar pozitifse formül pozitiftir denir.

Gauss formülleri yukarda verilen şartlar altında her n için mevcuttur ve pozitiftir. Aynı zamanda integrasyon noktalarının hepsi ayrık ve integrasyon aralığı içerisindedir.

Teorem 2.4.1. $P \in \prod_{n-1} \Rightarrow \langle P, P_n \rangle = 0$

İspat: Sıfır elemanını içinde bulundurmayan bir ortogonal küme lineer bağımsız olduğundan $\{P_i(x),\ i = 0,1,...,n\}$ kümesi $\prod_n$ vektör uzayı için bir taban oluşturur. $\prod_n$ kümesine ait herhangi bir polinom $\{P_i(x),\ i = 0,1,...,n\}$ polinomlarının bir lineer kombinasyonu şeklinde yazılabilir. Bu yüzden $P \in \prod_{n-1}$ için

$$P(x) = c_1 P_1(x) + c_2 P_2(x) + ... + c_n P_n(x)$$

şeklinde ifade edilebilir. Her iki tarafın $w(x)$ ile çarpılarak integrali alınırsa $\{P_i(x),\ i = 0,1,...,n\}$ polinomlarının ortogonal olmasından istenen elde edilir.

Teorem 2.4.2. P_n polinomlarının kökleri basittir ve hepsi (a,b) aralığındadır.

İspat: P_n polinomunun (a,b) açık aralığında işaret değiştiren kökleri $a<x_1 < x_2 < ... < x_n < b$ olsun. Bu kökler katlı kökler ise katı tek olmak zorundadır, aksi halde P_n işaret değiştirmez. Eğer

$$q(x) = \prod_{k=1}^{m} (x - x_k) \quad m \le n$$

şeklinde tanımlanırsa $P_n(x)q(x)$ polinomu $[a,b]$ aralığında negatif olmaz. Dolayısıyla (2.4.1) şartından dolayı

$$\langle P_n, q \rangle = \int w(x) P_n(x) q(x) dx \ne 0$$

sağlanır. Bu ise ancak $\deg(q) = m = n$ olması durumunda mümkündür; çünkü der(q)<n olması durumunda $q(x) = \sum_{i=0}^{n-1} c_i P_i(x)$ şeklinde yazılabileceğinden

yukarıdaki integralin değeri sıfıra eşittir. $\deg(q)=m=n$ olması da köklerin basit olmasını gerektirir.

Teorem 2.4.3. $a \le x_1 < x_2 < ... < x_n \le b$ rasgele verilen noktalar olsun. O zaman her $P \in \prod_{n-1}$ için

$$\int_a^b w(x)P(x)dx = \sum_{i=1}^{n} P(x_i)\int_a^b L_i(x)w(x)dx \tag{2.4.3}$$

eşitliği sağlanır. Burada $L_i(x),\ \ i=1,2,...,n$ verilen apsis noktalarına karşılık gelen Lagrange polinomlarıdır.

İspat: $\deg(P) \le n-1$ olduğundan

$$P(x) = P(x_1)L_1(x) + P(x_2)L_2(x) + ... + P(x_n)L_n(x)$$

sağlanır. Her iki taraf $w(x)$ ağırlık fonksiyonu ile çarpılıp $[a,b]$ aralığında integrali alınırsa istenen elde edilir.

Yukarıdaki teoremde integrasyon noktaları rasgele alınmıştı. Şimdi bu noktaların daha uygun yani daha yüksek dereceden polinomları hatasız integralleyebilecek şekilde nasıl seçileceği gösterilecektir.

Teorem 2.4.4. $a \le x_1 < x_2 < ... < x_n \le b$ noktaları Gram-Schmidt veya başka yolla elde edilen n. dereceden $P_n(x)$ ortogonal polinomunun kökleri ise her $P \in \prod_{2n-1}$ için

$$\int_a^b w(x)P(x)dx = \sum_{i=1}^{n} w_i P(x_i) \qquad w_i = \int_a^b w(x)L_i(x)dx \tag{2.4.4}$$

eşitliği sağlanır.

İspat: $P \in \prod_{2n-1}$ olduğu için

$$P(x) \equiv P_n(x)q(x) + r(x) \qquad q, r \in \prod_{n-1}$$

şeklinde yazılabilir. $r \in \prod_{n-1}$ olduğundan $x_1, x_2, ..., x_n$ değerleri için Lagrange polinomu kullanılarak

$$r(x) = \sum_{i=1}^{n} r(x_i) L_i(x)$$

şeklinde yazılabilir. Teorem (2.4.1) ve $P(x)$, $r(x)$ polinomlarının tanımı dikkate alınırsa

$$\int_a^b w(x)P(x)dx = \int_a^b w(x)\left[P_n(x)q(x) + r(x)\right]dx = \int_a^b w(x)r(x)dx$$

$$= \int_a^b w(x)\left(\sum_{i=1}^{n} L_i(x)P(x_i)\right) = \sum_{i=1}^{n} P(x_i)\int_a^b L_i(x)w(x)dx = \sum_{i=1}^{n} P(x_i)w_i$$

elde edilir.

Teorem 2.4.5. Eğer her $P \in \prod_{2n-1}$ için

$$\int_a^b w(x)P(x)dx = \sum_{i=1}^{n} w_i P(x_i)$$

eşitliği sağlanırsa w_i ağırlıkları pozitiftir.

İspat: $P_k(x) = |L_k(x)|^2 \in \prod_{2n-2}$ $\quad k = 1, 2, ..., n-1$ polinomları için (2.4.4) eşitliği sağlanır. Lagrange polinomlarının $L_i(x_j) = \delta_{ij}$ özelliğinden

$$0 < \int_a^b w(x)\left[L_k(x)\right]^2 dx = \sum_{i=1}^{n} \left[L_k(x_i)\right]^2 w_i = w_k \qquad k = 1, 2, ..., n$$

elde edilir.

Teorem 2.4.6.

$$A = \left[P_i(x_j) \right]_{nxn} = \begin{bmatrix} P_0(x_0) & P_0(x_1) & . & . & P_0(x_{n-1}) \\ P_1(x_0) & P_1(x_1) & . & . & P_1(x_{n-1}) \\ . & . & & & . \\ . & . & & & . \\ P_{n-1}(x_0) & P_{n-1}(x_1) & & & P_{n-1}(x_{n-1}) \end{bmatrix} \qquad (2.4.5)$$

matrisi tekil değildir; burada $\{P_0, P_1, ..., P_{n-1}\}$ ortogonal polinomlar kümesidir.

İspat: Herhangi bir kare matrisin determinantı ile transpozunun determinantı eşit olduğundan A tekil değilse bu matrisin transpozu A^T de tekil değildir. A^T matrisinin tekil olduğu varsayılsın. O zaman

$$A^T c = \begin{bmatrix} P_0(x_0) & P_0(x_1) & . & . & P_0(x_{n-1}) \\ P_1(x_0) & P_1(x_1) & . & . & P_1(x_{n-1}) \\ . & . & & & . \\ . & . & & & . \\ P_{n-1}(x_0) & P_{n-1}(x_1) & & & P_{n-1}(x_{n-1}) \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ . \\ . \\ c_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ . \\ . \\ 0 \end{bmatrix}$$

şartını sağlayan sıfırdan farklı bir $c^T = \left[c_0 \; c_1 \; .\, . \; c_{n-1} \right] \in R^n$ vektörü vardır. Şimdi

$$q(x) = \sum_{i=0}^{n-1} c_i p_i(x) \in \prod_{n-1}$$

polinomu göz önüne alınsın. Yukarıdaki matris eşitliğinden dolayı $x_0, x_1, ..., x_{n-1}$ bu polinomun kökleridir. Yani $q \in \prod_{n-1}$ polinomu n tane köke sahiptir; bu ise ancak $q(x) = 0$ olması durumunda mümkündür. Bu da matrisinin tekil olmasıyla çelişir.

Sonuç 2.4.7. Farklı $x_0, x_1, ..., x_{n-1}$ noktaları için $f_i = f(x_i) = P(x_i),\ i = 0,1,...,n-1$ şartlarını sağlayan bir $P \in \prod_{n-1}$ polinomu vardır ve tektir.

İspat: $\{P_0, P_1, ..., P_{n-1}\}$ ortogonal polinomlar kümesi $\prod_{n-1}$ uzayı için bir taban oluşturduğundan herhangi bir $P \in \prod_{n-1}$ polinomu $\{P_0, P_1, ..., P_{n-1}\}$ polinomlarının bir lineer kombinasyonu olarak $P(x)=\sum_{k=0}^{n-1} c_k P_k(x)$ şeklinde yazılabilir. $x_0, x_1, ..., x_{n-1}$ noktaları kullanılırsa $P(x_i)=\sum_{k=0}^{n-1} c_k P_k(x_i)=f_i$, $i=0,1,...,n-1$ elde edilir. Bu sistemin katsayı determinantı $\det\left[P_i(x_j)\right]_{nxn}$ sıfırdan farklı olduğundan sistemin çözümü var ve tektir dolayısıyla interpolasyon şartlarını sağlayan bir $P(x)$ polinomu var ve tek şekilde belirlenir.

Teorem 2.4.8.

a) $x_1, x_2, ..., x_n$, $n.$ dereceden ortogonal polinomun kökleri ve $\{w_1, w_2, ..., w_n\}$

$$\begin{bmatrix} P_0(x_1) & P_0(x_2) & . & . & . & P_0(x_n) \\ P_1(x_1) & P_1(x_2) & . & . & . & P_1(x_n) \\ . & . & & & & . \\ . & . & & & & . \\ . & . & & & & . \\ P_{n-1}(x_1) & P_{n-1}(x_2) & . & . & . & P_{n-1}(x_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ . \\ . \\ . \\ w_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle P_0, P_0 \rangle \\ 0 \\ . \\ . \\ . \\ 0 \end{bmatrix} \qquad (2.4.6)$$

sisteminin çözümü olsun. O zaman $i=1,2,...,n$ için

$$\int_a^b w(x)P(x)dx=\sum_{i=1}^{n} w_i P(x_i) \qquad \forall P \in \pi_{2n-1} \qquad (2.4.7)$$

b) Eğer x_i, w_i yukarıdaki lineer denklem sistemini sağlarsa x_i değerleri P_n polinomunun kökleri, w_i değerleri de (2.4.6) sistemini sağlar.

c) (2.4.7) eşitliğini her $P \in \prod_{2n}$ için sağlayan x_i, w_i, $i=1,2,...,n$ değerleri yoktur.

Not: (2.4.7) eşitliğinden Gauss integrasyon metodunun yaklaşım derecesinin $2n-1$ olduğu görülür. Yani

$$R_n(f)=0 \qquad f \in \prod_{2n-1}$$

Bu, n nokta ile elde edilebilecek en büyük derecedir.

İspat:

a) (2.4.7) eşitliğinin sağlandığını görelim: $x_1, x_2, ..., x_n$, P_n polinomunun kökleri olduğundan farklı değerlerdir. Dolayısıyla (2.4.6) sistemi tek çözüme sahiptir. Herhangi bir $P \in \prod_{2n-1}$ polinomu

$$P(x) \equiv P_n(x)q(x) + r(x) \qquad q, r \in \prod_{n-1}$$

şeklinde yazılabilir. $\{P_k\}_{k=0}^{n-1}$ kümesi $\prod_{n-1}$ için bir taban oluşturduğundan q ve r polinomları

$$q(x) = \sum_{k=0}^{n-1} a_k P_k(x) \quad , \quad r(x) = \sum_{k=0}^{n-1} b_k P_k(x)$$

şeklinde yazılabilir. $P_0(x) = 1$ olduğu da göz önünde tutularak

$$\int_a^b w(x)P(x)dx = \int_a^b w(x)[P_n(x)q(x) + r(x)]dx = (P_n, q) + (P_0, r)$$

elde edilir. Diğer taraftan (2.4.6) sistemi $\sum_{i=0}^{n} w_i P_k(x_i) = (P_0, P_k)$, $k = 0,1,...,n-1$, şeklinde yazılabileceği için

$$\sum_{i=0}^{n} w_i P(x_i) = \sum_{i=0}^{n} w_i [P_n(x_i)q(x_i) + r(x_i)] = \sum_{i=0}^{n} w_i r(x_i) = \sum_{k=0}^{n-1} b_k \left(\sum_{i=0}^{n} w_i P_k(x_i) \right) = b_0 (P_0, P_0)$$

elde edilir. Dolayısıyla (2.4.7) eşitliği sağlanır.

b) $i \neq j \Rightarrow x_i \neq x_j$ (2.4.7) eşitliği $P = P_k$, $k = 0,1,...,n-1$ polinomlarına uygulanırsa

$$\sum_{i=1}^{n} w_i P_k(x_i) = \int_a^b w(x)P_k(x)dx = (P_0, P_k), \qquad k = 0,1,,...,n-1$$

elde edilir, dolayısıyla w_i ağırlıkları (2.4.6) sistemini sağlar.

Eğer (2.4.4) eşitliği $Q_k(x) = P_n(x)P_k(x)$, $k = 0,1,...,n-1$ polinomlarına uygulanırsa

$$0=\left(P_n,P_k\right)=\sum_{i=1}^{n} w_i P_n(x_i)P_k(x_i),\;\; k=0,1,...n-1$$

ya da matris şeklinde

$$\begin{bmatrix} P_0(x_1) & P_0(x_2) & . & . & . & P_0(x_n) \\ P_1(x_1) & P_1(x_2) & . & . & . & P_1(x_n) \\ . & . & & & & . \\ . & . & & & & . \\ . & . & & & & . \\ P_{n-1}(x_1) & P_{n-1}(x_2) & . & . & . & P_{n-1}(x_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1P_n(x_1) \\ w_2P_n(x_2) \\ . \\ . \\ . \\ w_nP_n(x_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ . \\ . \\ . \\ 0 \end{bmatrix}$$

elde edilir. Katsayı matrisinin determinantı 2.4.6 teoreminden dolayı sıfırdan farklı olduğundan bu sistemin tek çözümü "aşikar çözüm" yani sıfır çözümdür, yani $w_iP_n\left(x_i\right)=0,\quad i=1,2,...,n$ sağlanır. w_i değerlerinin her biri pozitif olduğundan $P_n\left(x_i\right)=0,\qquad i=1,2,...,n$ sağlanır, böylece x_i değerleri P_n ortogonal polinomunun kökleri olmak zorundadır.

c) (2.4.7) eşitliğinin teoremin aksine her $P\in\prod_{2n}$ için sağlandığını varsayalım. O zaman negatif olmayan $P(x)=\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)^2$ polinomu için de sağlanır. Ancak bu, (2.4.1) şartından dolayı

$$0<\int_a^b w(x)f(x)dx=\sum_{i=1}^{n} w_iP(x_i)=0$$

çelişkisini verir.

Teorem 2.4.9. $f\in C^{2n}\left[a,b\right]$ ise Gauss integrasyon kuralı için hata

$$\int_a^b w(x)f(x)dx-\sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)=\frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}\left\|P_n\right\|^2\quad \xi\in(a,b) \tag{2.4.8}$$

eşitliği ile verilir.

İspat: $P \in \prod_{2n-1}$, $\{P(x_i) = f(x_i)\ ,\ \ P'(x_i) = f'(x_i),\ i = 1,2,...,n\}$ şartlarını sağlayan Hermite interpolasyon polinomu olsun. $der(P) < 2n$ olduğundan

$$\int_a^b w(x)P(x)dx = \sum_{i=1}^{n} w_i P(x_i) = \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$$

sağlanır. Dolayısıyla

$$\int_a^b w(x)f(x)dx - \int_a^b w(x)P(x)dx = \int_a^b w(x)f(x)dx - \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) = \int_a^b w(x)[f(x) - P(x)]dx$$

eşitliği sağlanır.Hermite interpolasyonu için hata formülü kullanılırsa her $x \in [a,b]$ için bir $\xi = \zeta(x) \in I[x_1, x_2, ..., x_n, x]$ değeri vardır öyle ki

$$f(x) - P(x) = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}(x - x_1)^2 .....(x - x_n)^2 = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}[P_n(x)]^2$$

eşitliği sağlanır. $P_n(x)$ polinomlarının kökleri basit olduğu için $P_n(x_i) \neq 0, \quad i = 1,2,...,n$ sağlanır. L'Hospital kuralı kullanılırsa

$$g(x) = f^{(2n)}(\zeta(x)) = \frac{f(x) - P(x)}{[P_n(x)]^2}(2n)!$$

$f^{(2n)}(\zeta(x))$ fonksiyonunun $[a,b]$ aralığında sürekli olduğu gösterilebilir. İntegraller için Ortalama Değer Teoremi kullanılırsa öyle bir $\xi = \zeta(x) \in (a,b)$ değeri vardır ki

$$\int_a^b w(x)[f(x) - P(x)]dx = \int_a^b w(x)[P_n(x)]^2 \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}dx = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}\langle P_n, P_n \rangle$$

eşitliği sağlanır.

Bu bölümdeki tüm teoremler ve ispatlar Bulisch(2000) kitabındaki üçüncü üniteden alınmıştır.

Not: (2.4.10) teoreminde kullanılan polinomlar Gram-Schmidt yöntemiyle elde edilen monik ortogonal polinomlardı. Eğer monik olmayan polinomlar kullanılırsa teoremde $\dfrac{\tilde{P}_n(x)}{A_n} = P_n(x)$ kullanılabilir ($\tilde{P}(x)$ monik olmayan ortogonal polinom). A_n, $\tilde{P}(x)$ polinomlarının baş katsayısıdır.

Sonuç 2.4.10. $R_n(f)$ hata terimi için $f^{(2n)}$, $[a,b]$ aralığında sürekli olmak şartıyla

$$R_n(f) \leq \frac{\left\| f^{(2n)}(\xi) \right\|_\infty}{(2n)!} \left\| P_n \right\|^2 = \frac{\left\| f^{(2n)}(\xi) \right\|_\infty}{(2n)!} b_0 b_1 \ldots b_n \tag{2.4.9}$$

sağlanır.

İspat: b_0 sadece $P_{-1} = 0$ da bir çarpan olarak kullanılır. Bu yüzden herhangi bir sayı seçilebilir. Genelde Gautschi(1988) izlenerek $b_0 = \int_a^b w(x)dx = \left\| P_0 \right\|^2$ seçilir. Bu seçim sayesinde $b_k = \dfrac{\left\| P_k \right\|^2}{\left\| P_{k-1} \right\|^2}$ olduğu da dikkate alınarak

$$b_0 b_1 \ldots b_n = \left\| P_0 \right\|^2 \frac{\left\| P_1 \right\|^2}{\left\| P_0 \right\|^2} \cdots \frac{\left\| P_n \right\|^2}{\left\| P_{n-1} \right\|^2} = \left\| P_n \right\|^2 \tag{2.4.10}$$

elde edilir. Bu özellik (2.4.8) eşitliğinde yerleştirilirse istenen elde edilir.

Sonuç 2.4.11. Eğer $f^{(2n)}$ integrasyon aralığında sürekli ve işareti bu aralıkta değişmiyorsa

$$R_n(f) > 0 \qquad \text{eğer} \qquad \operatorname{sign} f^{(2n)} = 1 \tag{2.4.11}$$

$$R_n(f) < 0 \qquad \text{eğer} \qquad \operatorname{sign} f^{(2n)} = -1 \tag{2.4.12}$$

sağlanır.

2.4.1. Ağırlıkların hesaplanması

Bundan önceki bölümde ağırlıklar için

$$w_i = \int_a^b w(x) L_i(x) dx = \int_a^b (w(x) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}) dx \qquad (2.4.13)$$

eşitliği verilmişti. Ağırlıkların bu yolla veya (2.4.6) sistemi kullanılarak bulunması n nokta sayısının büyük değerleri için kullanışlı değildir. Bu yüzden ağırlıkların hesaplanmasını kolaylaştıran başka bir yol tanıtılacaktır. (2.4.13) eşitliğiyle birlikte

$$\frac{\tilde{P}_n(x)}{A_n(x - x_i)} = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} (x - x_j) \qquad (2.4.14)$$

bağıntısı kullanılarak $i = 1, 2, ..., n$ için

$$w_i = \int_a^b w(x) \left[\frac{\tilde{P}_n(x)}{\tilde{P}_n'(x_i)(x - x_i)} \right] dx = \frac{1}{\tilde{P}_n'(x_i)} \int_a^b w(x) \frac{\tilde{P}_n(x)}{(x - x_i)} dx \qquad (2.4.15)$$

elde edilir. $x_1, x_2, ..., x_n$, P_n polinomunun kökleri olmak üzere genel bölünmüş farkları kullanarak herhangi bir $f \in C^{(2n)}[a,b]$ fonksiyonu için $x_1, x_2, ..., x_n$ apsis noktalarında fonksiyonunun kendisini ve birinci türevini kullanarak oluşturulan Hermite interpolasyon polinomu, hata terimini de ekleyerek yazılırsa

$$
\begin{aligned}
f(x) = P_{n-1}(x) + f[x_1, x_2, ..., x_n, x_1] \prod_{i=1}^{n} (x - x_i) \\
+ f[x_1, x_2, ..., x_n, x_1, x_2](x - x_1) \prod_{i=1}^{n} (x - x_i) \\
..... \\
..... \\
+ f[x_1, ..., x_n, x_1, ..., x_n](x - x_1)...(x - x_{n-1}) \prod_{i=1}^{n} (x - x_i) \\
+ f[x_1, ..., x_n, x_1, ..., x_n, x] \prod_{i=1}^{n} (x - x_i)^2
\end{aligned}
$$

elde edilir. Bu ifadenin son terimi hata terimidir.

$$f[x_1,...,x_n,x_1,...,x_n,x]=\frac{f^{(2n)}(\xi)}{2n!} \tag{2.4.16}$$

eşitliğini sağlayan bir $\xi(x)\in(\min\{x_o,...,x_n,x\},\max\{x_o,...,x_n,x\})$ değeri vardır. Şimdi (2.4.16) eşitliğinin her iki tarafı $w(x)$ ağırlık fonksiyonu ile çarpılıp $[a,b]$ aralığında integral alınırsa

$$\int_a^b w(x)f(x)dx=\int_a^b w(x)P_{n-1}(x)dx+0+...+$$

$$+\int_a^b w(x)f[x_0,x_1,...,x_n,x]\prod_{i=1}^{n}\left(x-x_j\right)^2dx \tag{2.4.17}$$

elde edilir. Aradaki terimler $\left\langle P,\tilde{P}_n\right\rangle=0,\quad \forall P\in\prod_{n-1}$ özelliğinden dolayı sıfırdır. Yukarıdaki ifadenin en son terimi için Ortalama Değer Teoremi kullanılır ve (2.4.17) ile polinomların normu dikkate alınırsa

$$\int_a^b w(x)f[x_0,x_1,...,x_n,x_1,...,x_n,x]\prod_{i=1}^{n}\left(x-x_j\right)^2dx=\frac{f^{(2n)}(\xi)}{A_n^2(2n)!}\left\langle\tilde{P}_n,\tilde{P}_n\right\rangle$$

elde edilir. $L_k(x),\ k=1,2,...,n$ polinomları $P_n(x)$ ortogonal polinomunun kökleri ile oluşturulan Lagrange polinomları ve $(n+1)$. dereceden ortogonal polinom $\tilde{P}_{n+1}$ olmak üzere

$$f(x)=\tilde{P}_{n+1}(x)L_k(x)=\left[\frac{A_{n+1}A_n}{\tilde{P}_n\,'(x_k)}x^{2n}+...\right],\ k=1,2,...,n \tag{2.4.18}$$

fonksiyonunun $[a,b]$ aralığında $w(x)$ ağırlık fonksiyonu ile çarpımının integrali alınırsa

$$\left\langle\tilde{P}_{n+1},L_k\right\rangle=0$$

olur. (2.4.18) de tanımlanan fonksiyonun $2n.$ türevi alınırsa

$$f^{(2n)}(x) = \frac{d^{2n}}{dx^{2n}}\left[\frac{A_{n+1}A_n}{\varphi_n^{'}(x_k)}x^{2n} + \dots\right] = A_{n+1}A_n\frac{(2n)!}{\varphi_n^{'}(x_k)}$$

elde edilir. Aşağıdaki eşitlikten

$$\int_a^b w(x)\tilde{P}_{n+1}(x)L_k(x) = \sum_{i=1}^{n}\tilde{P}_{n+1}(x_i)L_k(x_i)w_i + \frac{f^{(2n)}(\xi)}{A_n^2(2n)!}\left\langle \tilde{P}_n, \tilde{P}_n \right\rangle$$

$$= \tilde{P}_{n+1}(x_k)w_k + \frac{A_{n+1}}{A_n}\frac{\left\langle \tilde{P}_n, \tilde{P}_n \right\rangle}{\tilde{P}_n{'}(x_k)} \tag{2.4.19}$$

w_k ağırlıklarının hesaplanmasına yarayan

$$w_k = -\frac{A_{n+1}}{A_n}\frac{\left\langle \tilde{P}_n, \tilde{P}_n \right\rangle}{\tilde{P}_{n+1}(x_k)\tilde{P}_n^{'}(x_k)}$$

$$-\left(\frac{A_{n+1}}{A_n}\right)\frac{\left\|\tilde{P}_n\right\|^2}{\tilde{P}_n(x_k)\tilde{P}_n^{'}(x_k)} \qquad k = 1, 2, \dots, n \tag{2.4.20}$$

(2.4.20) formülü elde edilir.

Teorem 2.4.12. $a_k \neq 0,\ c_{k+1} > 0,\ k = 0, 1, \dots, n\ (n \geq 1)$ olmak üzere

$$\varphi_{-1}(x) = 0, \qquad \varphi_1(x) = A_0 \neq 0$$

$$\varphi_{k+1}(x) = (a_k x - b_k)\varphi_k(x) - c_k\varphi_{k-1}(x), \qquad k = 0, 1, \dots, n \tag{2.4.21}$$

yineleme bağıntısından elde edilen $\{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_n(x)\}$ ortogonal polinomları ile oluşturulan n - noktalı Gauss integrasyon metodunun ağırlıkları

$$w_k = -\left(\frac{A_{n+1}}{A_n}\right)\frac{\left\|\varphi_n\right\|^2}{\varphi_{n+1}(x_k)\varphi_n^{'}(x_k)} = \frac{a_n}{c_n}\frac{\left\langle \varphi_n, \varphi_n \right\rangle}{\varphi_{n-1}(x_i)\varphi_n^{'}(x_i)} \tag{2.4.22}$$

eşitliğinden elde edilebilir.

İspat: $A_{n+1} = a_n A_n$ olduğu yineleme bağıntısından hemen çıkar. (2.4.21) bağıntısı $k = n$ için yazılır ve bu bağıntıda $x = x_1, x_2, ..., x_n$ alınırsa

$$\varphi_{n+1}(x_i) = -c_n \varphi_{n-1}(x_i) \quad i = 1, 2, ...n$$

elde edilir. Bu değerler (2.4.20) eşitliğinde yerleştirilirse istenen elde edilir.

Teorem 2.4.13.

$$T_n = \begin{bmatrix} a_0 & \sqrt{b_1} & & & \\ \sqrt{b_1} & a_1 & . & & \\ & . & . & . & \\ & & . & . & \sqrt{b_{n-1}} \\ & & & \sqrt{b_{n-1}} & a_{n-1} \end{bmatrix} \tag{2.4.23}$$

olsun. Bu matrisin $a_k, b_k,\ k = 0,1,...,n$ elemanları Teorem 2.3.1 de belirtilen ortogonal polinomların yineleme katsayıları olmak üzere $\det(xI - T_n) = P_n(x)$ elde edilir. Burada $P_n(x)$, n. dereceden monik ortogonal polinomdur. T_n matrisine n-noktalı Gauss integrasyon metodunun Jacobi matrisi adı verilir.

İspat: $k = 1$ için $\det(xI - T_1) = (x - a_0)P_0(x) = P_1(x)$

$k = 2$ için $\det(xI - T_2) = (x - a_1)P_1(x) - b_1 = P_2(x)$

$k = 3$ için $\det(xI - T_3) = (x - a_2)P_2(x) - b_2 P_1(x) = P_3(x)$

….

….

Bu şekilde devam edilirse ortogonal polinomların bilinen üç terimli yineleme bağıntısı oluşur. Dolayısıyla $\det(xI - T_n) = P_n(x)$ elde edilir.

Not: Simetrik üç köşegenli T_n matrisi aşağıdaki özelliği sağlar:

$$T_n = W_n \Lambda_n W_n^T,\ \Lambda_n = diag[\lambda_1, \lambda_2, ...\lambda_n],\quad W_n W_n^T = I$$

b_k katsayılarının pozitifliğinden λ_j özdeğerleri ayrık ve W_n matrisinin ilk satır elemanlarının tümü sıfırdan farklıdır. İntegrasyon noktaları ve ağırlıkları

$$x_i = \lambda_i, \quad w_i = \left(e_1^T W_n e_1\right)^2, \qquad 1 \le i \le n \tag{2.4.24}$$

şeklinde verilir.

Teorem 2.4.14. x_i integrasyon noktaları T_n matrisinin özdeğerleridir (Bulirsch, 2000).

Teorem 2.4.15. $\mathrm{V_i} = \left[v_{i1}\, v_{i2} \ldots v_{in}\right]^{\mathrm{T}}$, i=1,2,...,n T_n matrisinin x_i özdeğerine karşılık gelen $v_i^T v_i = 1$ eşitliğini sağlayan özvektörü olsun. O zaman

$$w_i = v_{i1}^2 \int_a^b w(x)dx = v_{i1}^2 \left\|P_0\right\|^2 \tag{2.4.25}$$

bağıntısı sağlanır (Bulirsch, 2000).

(2.4.14) ve (2.4.15) teoremleri Gauss integrasyon kuralı ile cebirsel özdeğer problemleri arasındaki bağıntıyı verir. İntegrasyon noktası ile özdeğer ilişkisi üç terimli yineleme bağıntısından kolaylıkla çıkarılabilir. Ancak ağırlıkların (2.4.25) karekterizasyonu daha karışıktır.

Teorem 2.4.16.

$$\int_a^b w(x) f(x) dx = \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) + R_n(f) \tag{2.4.26}$$

integrasyon toplamı düzgün f fonksiyonları için J_n Jacobi matrisi kullanılarak

$$\sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) = \mu_0 e_1^T f(T_n) e_1 \quad e_1^T = [1, 0, \ldots, 0] \in R^n$$

şeklinde ifade edilebilir.

Newton-Cotes formülü ile kıyaslandığında Gauss integrasyon metodu çok iyi sonuçlar vermektedir. Verilen herhangi bir integral için hesaplama süresini de göz önünde tutarak kaç n nokta sayısı ile daha avantajlı sonuç alınacağı bilinseydi o zaman Gauss integrasyon metodu çok kullanışlı olacaktı. Gauss formülünün hatası teorik olarak bilinmesine rağmen pratikte bu değeri hesaplamak oldukça güçtür. Çünkü $2n$. türevi bulmak kolay değildir. Şimdi çok sık kullanılan bir takım özel Gauss integrasyon metotları tanıtılacaktır.

2.4.2. Gauss-Legendre İntegrasyon Metodu

$[-1,1]$ aralığında $w(x)=1$ ağırlık fonksiyonuna göre oluşturulan Gauss integrasyon metodudur. İntegrasyon noktaları n. dereceden $P_n(x)$ Legendre polinomunun kökleridir. Legendre polinomlarının

$$(m+1)P_{m+1}(x)=(2m+1)xP_m(x)-mP_{m-1}(x) \tag{2.4.27}$$

$$\left(x^2-1\right)P_m'(x)=mxP_m(x)-mP_{m-1}(x) \tag{2.4.28}$$

bağıntılarını sağladığı gösterilebilir. Legendre polinomlarının normu

$$\|P_k\|^2=\int_{-1}^{1}[P_k(x)]^2\,dx=\frac{2}{2k+1} \tag{2.4.29}$$

eşitliği verilir. (2.4.27), (2.4.28) bağıntıları kullanılarak

$$P_{n+1}(x_i)=\frac{\left(x_i^2-1\right)P_n'(x_i)}{n+1} \tag{2.4.30}$$

sağlanır. (2.4.30) ile norm kullanılarak (2.4.20) deki ağırlığı veren eşitlikte yerleştirilirse Legendre integrasyon metodunun ağırlıkları için

$$w_i=\frac{2}{\left(x_i^2-1\right)\left[P_n'(x_i)\right]^2}=\frac{2\left(1-x_i^2\right)}{\left[nP_{n-1}(x_i)\right]^2},\qquad i=1,2,\dots,n \tag{2.4.31}$$

formülü elde edilir. Hata terimi ise

$$R_n[f] = \frac{2}{(2n+1)(2n)!} f^{(2n)}(\xi) \tag{2.4.32}$$

şeklindedir.

2.4.3. Gauss-Hermite İntegrasyon Metodu

Gauss-Hermite integrasyon kuralı

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x)dx$$

şeklindeki integrallerin hesaplanması için kullanılır. $(-\infty,\infty)$ aralığında $w(x) = e^{-x^2}$ ağırlık fonksiyonuna göre oluşturulan bir Gauss integrasyon kuralının noktaları n. dereceden $H_n(x)$ Hermite polinomunun kökleridir. Hermite polinomları x^k polinomlarının toplamı olarak

$$H_n(x) = \sum_{k=0}^{\lfloor m/2 \rfloor} (-1)^k \frac{n!}{k!(n-2k)!} (2x)^{n-2k} \tag{2.4.33}$$

şeklinde yazılır. $\lfloor x \rfloor = \max\{k \mid k \in N, k \le x\}$ tam değer fonksiyonunu gösterir. (2.4.32) eşitliği kullanılarak $\frac{A_{n+1}}{A_n} = 2$ olduğu görülür.

$$\|H_n\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n^{\,2}(x)dx = 2^n n!\sqrt{\pi} \tag{2.4.34}$$

olduğu göz önünde bulundurularak Gauss-Hermite integrasyon kuralı için ağırlıklar

$$w_k = -\frac{A_{n+1}}{A_n} \frac{\|H_n\|^2}{H_{n+1}(x_k)H_n^{'}(x_k)} = \frac{2^{n-1} n!\sqrt{\pi}}{n^2 \left[H_{n-1}(x_k)\right]^2},\ k = 1,2,...,n \tag{2.4.35}$$

şeklinde elde edilir. Hata terimi

$$R_n[f] = \frac{2^n n!\sqrt{\pi}}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi) \tag{2.4.36}$$

ile belirtilir.

Yukarıdaki formülü kullanmak için $\sqrt{\pi}$ sayısının nümerik değerine gereksinim vardır. Ancak $\sqrt{\pi}$ değerini tam olarak hatasız ifade etmemiz mümkün değildir. İşlemler sembolik de yapılabilir. Ama bu her zaman mümkün değildir. Bu yüzden yineleme bağıntısı ile ortogonal küme elde etmek yerine aşağıdaki yineleme bağıntısı kullanılarak ortonormal bir küme elde etmek ve bu kümeyi kullanarak işlem yapmak daha uygundur.

$$\tilde{H}_{-1} = 0,\ \tilde{H}_0 = \frac{1}{\pi^{1/4}},\ \tilde{H}_{k+1} = x\sqrt{\frac{2}{k+1}}\tilde{H}_k - \sqrt{\frac{k}{k+1}}\tilde{H}_{k-1} \qquad (2.4.37)$$

bu polinomlar kullanılarak Gauss-Hermite integrasyon kuralı için ağırlıklar aşağıdaki eşitlikten elde edilir:

$$w_k = \frac{2}{\left[\tilde{H}_n^{'}(x_k)\right]} = \frac{1}{n\left[\tilde{H}_{n-1}(x_k)\right]^2},\quad k = 1,2,...,n \qquad (2.4.38)$$

2.4.4. Gauss-Laguerre İntegrasyon Metodu

$[0,\infty)$ aralığında $w(x) = e^{-x}$ ağırlık fonksiyonuna göre oluşturulan Gauss integrasyon metodudur. İntegrasyon noktaları n. dereceden $L_n(x)$ Laguerre polinomunun kökleridir. İntegrasyon ağırlıkları ise

$$w_i = -\frac{A_{n+1}}{A_n L_n^{'}(x_i) L_{n+1}(x_i)} = \frac{A_n}{A_{n-1}}.\frac{\left\| L_n(x) \right\|^2}{L_{n-1}(x_i) L_n^{'}(x_i)} \qquad (2.4.39)$$

şeklindedir. Burada A_n, $L_n(x)$ polinomunun başkatsayısıdır. Laguerre polinomları için

$$A_n = \frac{(-1)^n}{n!} \qquad (2.4.40)$$

sağlanır. Dolayısıyla $\frac{A_{n+1}}{A_n} = \frac{-1}{n+1}$, $\frac{A_n}{A_{n-1}} = \frac{-1}{n}$ olur. Ayrıca

$$\left\langle L_n(x), L_n(x) \right\rangle = \int_0^\infty w(x)[L_n(x)]^2\, dx = 1 \qquad (2.4.41)$$

eşitliği sağlanır. Böylece

$$w_i = \frac{1}{(n+1)L_n^{'}(x_i)L_{n+1}(x_i)} = -\frac{1}{nL_{n-1}(x_i)L_n^{'}(x_i)}, \quad i = 1,2,...,n$$

elde edilir. Laguerre polinomlarının

$$xL_n^{'}(x) = nL_n(x) - nL_{n-1}(x) = (x-n-1)L_n(x) + (n+1)L_{n+1}(x) \tag{2.4.42}$$

yineleme bağıntısı kullanılarak x_i, $i = 1,2,...,n$ değerleri $L_n\left(x\right)$ polinomunun kökleri olmak üzere

$$\mathrm{nL_n}(x) = (x-n-1)L_n(x) = 0$$

elde edilir. (2.4.41) den

$$x_i L_n^{'}(x_i) = -nL_{n-1}(x_i) = (n+1)L_{n+1}(x_i)$$

sağlanır. Böylece ağırlıklar

$$w_i = \frac{1}{x_i[L_n^{'}(x_i)]^2} = \frac{x_i}{(n+1)^2[L_{n+1}(x_i)]^2} \tag{2.4.43}$$

şeklinde elde edilir. Hata terimi ise

$$R_n[f] = \frac{\left(n!\right)^2}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi) \tag{2.4.44}$$

şeklindedir. $w(x) = x^{\alpha}e^{-x}$ ağırlık fonksiyonuna göre genelleştirilmiş Laguerre polinomu $L_n^{\alpha}(x)$ için

$$A_n = \frac{(-1)^n}{n!} \text{ ve } \left\|[L_n^{\alpha}(x)]\right\|^2 = \int_0^{\infty} x^{\alpha}e^{-x}[L_n^{\alpha}(x)]^2 dx = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!} \tag{2.4.45}$$

olmak üzere

$$w_i = \frac{\Gamma(n+\alpha)}{n!(n+\alpha)\left[L_{n-1}^{\alpha}(x_i)\right]^2} = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)x_i}{n!(n+1)^2\left[L_{n+1}^{\alpha}(x_i)\right]^2} \tag{2.4.46}$$

ve hata terimi

$$R_n[f] = \frac{n!\Gamma\left(n+\alpha+1\right)}{(2n)!} f^{(2n)}(\xi) \tag{2.4.47}$$

ile ifade edilir.

2.4.5 Gauss-Chebyshev İntegrasyon Metodu

Gauss-Cheyshev integrasyon kuralı

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)dx$$

şeklindeki integrallerin hesaplanması için kullanılır. n-noktalı Gauss-Cheyshev integrasyon kuralının noktaları n. dereceden $T_n\left(x\right)$ Cheyshev polinomunun kökleridir.

$$T_n(x) = \frac{n}{2}\sum_{k=0}^{[n/2]}(-1)^k \frac{(n-k-1)!}{k!(n-2k)!}\left(2x\right)^{n-2k} \tag{2.4.48}$$

.

$$\left\langle T_k, T_m \right\rangle = \int_{-1}^{1} \frac{T_k(x)T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\left(\delta_{kn} + \delta_{n0}\right) \tag{2.4.49}$$

olduğu göz önünde bulundurularak Gauss-Cheyshev integrasyon kuralı için ağırlıklar

$$w_k = \frac{\pi}{T_{n+1}(x_k)T_n^{'}(x_k)} \qquad k = 1,2,...,n \tag{2.4.50}$$

şeklinde elde edilir.

$$T_k\left(x\right) = \cos\left(k \arccos x\right) \qquad k = 0,1,... \tag{2.4.51}$$

eşitliği kullanılarak $T_n(x)$ polinomunun kökleri

$$x_k = \cos\left[\frac{(2k-1)\pi}{2n}\right], \quad k = 1, 2, ..., n \tag{2.4.52}$$

olarak elde edilir. Bu değerler (2.4.48) polinomunda yerleştirilerek

$$T_n^{'}(x_k) = \frac{(-1)^{k+1} n}{\sin\left[\frac{2k-1}{2n}\pi\right]}, \; T_{n+1}(x_k) = (-1)^k \sin\left[\frac{2k-1}{2n}\pi\right] \tag{2.4.53}$$

elde edilir. Gauss-Cheyshev integrasyon kuralının ağırlıkları ise birbirine eşit olmak üzere

$$w_k = \frac{\pi}{n}, \quad k = 1, 2, ..., n \tag{2.4.54}$$

ile verilir.

3. BÖLÜM

GAUSS İNTEGRASYON METODUNUN HATASINI YAKLAŞIK OLARAK HESAPLAMAK İÇİN KULLANILAN METOTLAR

3.1. GAUSS-RADAU ve GAUSS-LOBATTO İNTEGRASYON METOTLARI

Eğer aralık sonlu (en azından Radau için yarı sonlu aralık) ise sınır (uç noktalardan) biri veya ikisi Gauss integrasyon noktası olarak alınarak Gauss integrasyon metodundan yeni bir integrasyon metodu oluşturulabilir.

$[a,b]$ integrasyon aralığının uç noktalarından birisi integrasyon noktası olarak alınır kalan diğer interpolasyon noktaları metodun yaklaşım derecesi mümkün olduğu kadar büyük olacak şekilde seçilirse böyle bir metoda Gauss-Radau integrasyon metodu denir. Eğer her iki uç da integrasyon noktası olarak alınır diğer noktalar metodun yaklaşım derecesi maksimum olacak şekilde seçilirse böyle bir metoda da Gauss-Lobatto integrasyon metodu denir.

Gauss-Radau metotları ağırlık fonksiyonu $(b-x)w(x)$ veya $(x-a)w(x)$ alınarak elde edilen Gauss integrasyon metotları, Gauss-Lobatto metotları da ağırlık fonksiyonu $(b-x)(x-a)w(x)$ alınarak oluşturulan Gauss integrasyon metotları gibi düşünülebilir.

3.1.1 Gauss-Radau İntegrasyon Metodu

Gauss-Radau noktalarının biri ilk sınır noktası olan a seçilirse buna göre $(n+1)$-noktalı Gauss-Radau integrasyon formülü

$$\int_a^b f(x)dx = \lambda_0 f(a) + \sum_{v=1}^{n} \lambda_v^a f(\tau_v^a) + R_n^a(f) \tag{3.1.1}$$

şeklinde verilir. Burada $\tau_i^a,\ i=1,2,...,n$ Gauss-Radau integrasyon noktalarını, $\lambda_i^a,\ i=0,1,...,n$ ise ağırlıkları gösterir. Jacobi matrisi ise

$$J_{n+1}^{R,a} = \begin{bmatrix} J_n & \sqrt{\beta_n} e_n \\ \sqrt{\beta_n} e_n^T & \alpha_n^r \end{bmatrix} \tag{3.1.2}$$

$$\alpha_n^r = a - \frac{\pi_{n-1}(a)}{\pi_n(a)} \tag{3.1.3}$$

ile verilir. $J_{n+1}^{R,a}$ matrisinin özdeğerleri integrasyon noktalarını, bu özdeğerlere karşılık gelen normları bir yapılmış özvektörlerin birinci bileşenlerinin karesi de ağırlıkları tanımlarken kullanılır.

a yerine b yazılarak da Gauss-Radau integrasyon metodu oluşturulabilir. Bu durumda Gauss-Radau formülü

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{v=1}^{n} \lambda_v^b f(\tau_v^b) + \lambda_{n+1}^b f(b) + R_n^b(f) \tag{3.1.4}$$

şeklinde ifade edilir.

R_n^a, R_n^b hataları için

$$R_n^a(f) > 0\ ,\ R_n^b(f) < 0, \qquad \text{eğer } [a,b] \text{ de} \qquad sign\, f^{2n+1} = 1 \tag{3.1.5}$$

$$R_n^a(f) < 0, R_n^b(f) > 0, \qquad \text{eğer } [a,b] \text{ de} \qquad sign\, f^{2n+1} = -1 \tag{3.1.6}$$

özellikleri sağlanır. Buradan Gauss-Radau yaklaşımlarından birisi integralin tam değeri için üst sınır iken diğerinin alt sınır olduğunu gösterir. Gauss-Radau integrasyon formüllerinin yaklaşım derecesi $2n$ dir.

3.1.2. Gauss-Lobatto İntegrasyon Metodu

$n+2$ nokta kullanılarak Gauss-Lobatto integrasyon kuralı

$$\int_a^b f(x)dx = \lambda_0 f(a) + \sum_{v=1}^{n} \lambda_v f(\tau_v) + \lambda_{n+1} f(b) + R_n^{a,b}(f) \tag{3.1.7}$$

şeklinde verilir. Jacobi matrisi

$$J_{n+2}^L = \begin{bmatrix} J_{n+1} & \sqrt{\beta_{n+1}^L} e_{n+1} \\ \sqrt{\beta_{n+1}^L} e_{n+1}^T & \alpha_{n+1}^L \end{bmatrix} \tag{3.1.8}$$

olur. Burada $\alpha_{n+1}^L, \beta_{n+1}^L$ aşağıdaki aşağıdaki lineer sistemin çözümünden bulunur:

$$\begin{bmatrix} \pi_{n+1}(a) & \pi_n(a) \\ \pi_{n+1}(b) & \pi_n(b) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{n+1}^L \\ \beta_{n+1}^L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a\pi_{n+1}(a) \\ b\pi_{n+1}(b) \end{bmatrix} \tag{3.1.9}$$

Gauss-Lobatto metodunun yaklaşım derecesi $2n+1$ dir. Gauss-Radau fomülünde olduğu gibi Gauss-Lobatto integrasyon kuralında da hata için aşağıdaki özellik verilmiştir:

$$R_n^{a,b}(f) < 0 \qquad \text{eğer} \quad [a,b] \text{de} \qquad sign\, f^{2n+2} = 1 \tag{3.1.10}$$

$$R_n^{a,b}(f) > 0 \qquad \text{eğer} \quad [a,b] \text{de} \qquad sign\, f^{2n+2} = -1 \tag{3.1.11}$$

3.2. GAUSS–KRONROD İNTEGRASYON METODU

Şu ana kadar bahsettiğimiz metotlar 19.yy. da yapılan çalışmalarla ilgiliydi. 20. yy. da ise Gauss-Kronrod integrasyon metodu ortaya atılmıştır. Kronrod(1964) $w(x)=1$ ve $[a,b]=[-1,1]$ alarak n-noktalı Gauss-Legendre integrasyon kuralının hatasını hesaplamak için ekonomik bir yol sunmuştur.

Amacımız $n \to \infty$ için bir nümerik integrasyon kuralından bulunan sonucun integralin tam değerine yakınsadığı farzedilerek herhangi bir n için

$$\left| I\, f - Q_n(f) \right|$$

değerini hesaplamaktır. Bunun için ortak yaklaşım $m > n$ olmak üzere ikinci bir integrasyon metodu kullanılarak

$$\left| I\, f - Q_n(f) \right| \approx \left| Q_m(f) - Q_n(f) \right|$$

bağıntısı yardımıyla hata hakkında fikir sahibi olmaktır.

Gauss-Kronrod metotları bir bakıma Gauss-Radau ya da Gauss-Lobatto metotlarının genelleştirilmiş şeklidir. Önceki bölümde belirtildiği gibi Gauss-Radau integrasyon metodunda uç noktaların birisi Gauss-Lobatto integrasyon metodunda ise her iki uç nokta integrasyon noktası alınmış, diğer noktalar ise metodun yaklaşım derecesini maksimum yapacak şekilde seçilmişti. Gauss-Kronrod metotlarında ise Gauss integrasyon metodunda kullanılan $w(x)$ ağırlık fonksiyonuna göre oluşturulan

$$\varphi_n(x) = A_n \prod_{k=1}^{n} (x - x_k^G) \tag{3.2.1}$$

ortogonal polinomunun kökleri ve bu noktalara ek olarak $(n+1)$ tane

$$\tau_1^K, \tau_2^K, \ldots, \tau_{n+1}^K$$

Kronrod noktası daha belirlenecektir.

$(2n+1)$-noktalı Gauss-Kronrod integrasyon kuralı: $If = \int_a^b w(x) f(x) dx$

integrali için w, $[a,b]$ aralığında negatif olmayan ağırlık fonksiyonu olmak üzere

$$Q_{2n+1}^K(f) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i^K f(x_i^G) + \sum_{j=1}^{n+1} \lambda_j^{*K} f(\tau_j^K) \tag{3.2.2}$$

şeklinde ifade edilir.

$x_i^G =$ n-noktalı Gauss integrasyon metodunun noktaları

$\tau_j^K = n+1$ tane yeni Kronrod noktası

λ_i^K, λ_j^{*K} =Gauss- Kronrod integrasyon metodunun ağırlıkları

Metodun yaklaşım derecesinin maksimum olması için $\tau_1^K, \tau_2^K, ..., \tau_{n+1}^K$ integrasyon noktaları ile $\lambda_1^K, \lambda_2^K, ..., \lambda_n^K$; $\lambda_1^{*K}, \lambda_2^{*K}, ..., \lambda_{n+1}^{*K}$ integrasyon ağırlıkları şöyle belirlenir: Stieltjes polinomu olarak bilinen

$$\psi_{n+1}(x) = \prod_{j=1}^{n+1} (x - \tau_j^K) \tag{3.2.3}$$

ile genelde işaret değiştiren

$$W(x) = w(x) \prod_{j=1}^{n} (x - x_j^G) = w(x)\varphi_n(x) \tag{3.2.4}$$

ağırlık fonksiyonu tanımlansın. Buna göre τ_j^K değerleri

$$\langle p, \psi_{n+1} \rangle_W = \int_a^b W(x)\psi_{n+1}(x)\, p(x)dx = 0\,, \quad \forall p \in \Pi_n \tag{3.2.5}$$

ya da buna denk olan

$$\langle p, \psi_{n+1} \rangle_W = \int_a^b W(x)\psi_{n+1}(x) x^j dx = 0\,, \quad j = 0,1,...,n \tag{3.2.6}$$

eşitliğini sağlayacak şekilde seçilir. Kronrod $\psi_{n+1}(x)$ polinomunun katsayılarını (3.2.6) eşitliğinden elde edilen üç köşegenli matris oluşturan lineer denklem sistemini çözerek bulmuştur. Gauss-Kronrod metotlarının ağırlıkları Gauss integrasyon kurallarında olduğu gibi integrasyon noktaları ile oluşturulan Lagrange polinomlarının integralleri alınarak hesaplanabilir. Büyük n değerleri için integrasyon noktalarının ve ağırlıkların daha az hata ile (nümerik olarak kararlı bir şekilde) hesaplanabilmesi için Gauss integrasyon kurallarında olduğu gibi üç köşegenli bir matris oluşturmak mümkündür. Gauss-Kronrod integrasyon metodunda da benzer şekilde bir özdeğer–özvektör ilişkisi vardır. Bu ilişki Laurie(1997) tarafından bulunmuştur. Bu matrisin özdeğerleri Kronrod noktalarını, normları bir yapılmış özvektörlerinin birinci bileşenlerinin kareleri de ağırlıkları verir.

Gauss-Kronrod integrasyon kuralının yaklaşım derecesi n nin çift değerleri için $3n+1$, n nin tek değerleri için ise $3n+2$ olur. Yani

$$\begin{aligned} R_n^K(f)=0 \qquad & f\in\prod_{3n+1} \qquad n \text{ çift ise} \\ R_n^K(f)=0 \qquad & f\in\prod_{3n+2} \qquad n \text{ tek ise} \end{aligned} \tag{3.2.7}$$

özelliğini sağlar.

Laurie $\lambda_\nu^K>0$, $\lambda_\mu^{*K}>0$, $\tau_\mu^K\in R$ kabul edip ($2n+1$). mertebeden simetrik üç köşegenli Jacobi matrisini oluşturmuştur. Bu Jacobi matrisi

$$\tilde{T}_{2n+1}=J_{2n+1}^K=\begin{bmatrix} J_n & \sqrt{\tilde{b}_n}e_n & 0 \\ \sqrt{\tilde{b}_n}e_n^T & \tilde{a}_n & \sqrt{\tilde{b}_{n+1}}e_1^T \\ 0 & \sqrt{\tilde{b}_{n+1}}e_1 & J_n^* \end{bmatrix} \tag{3.2.8}$$

veya daha açık olarak

$$\tilde{T}_{2n+1}=\begin{bmatrix} \tilde{a}_0 & \sqrt{\tilde{b}_1} & & & & \\ \sqrt{\tilde{b}_1} & \tilde{a}_1 & \sqrt{\tilde{b}_2} & & & \\ & . & . & . & & \\ & & . & . & . & \\ & & & . & . & \sqrt{\tilde{b}_{2n}} \\ & & & & \sqrt{\tilde{b}_{2n}} & \tilde{a}_{2n} \end{bmatrix} \tag{3.2.9}$$

şeklinde gösterilir. Simetrik üç köşegenli Gauss-Kronrod $\tilde{T}_{2n+1}$ matrisi

$$\tilde{T}_{2n+1}=\tilde{W}_{2n+1}\tilde{\Lambda}_{2n+1}\tilde{W}_{2n+1}^T \qquad \tilde{\Lambda}_{2n+1}=diag\left[\tilde{\lambda}_1,\tilde{\lambda}_2,\ldots,\tilde{\lambda}_{2n+1}\right] \quad \tilde{W}_{2n+1}\tilde{W}_{2n+1}^T=I$$

özelliğini sağlar.

Önerme 3.2.1. Jacobi –Kronrod matrisi var ve reel $\Leftrightarrow$ uygun Kronrod formülü var, reel ve pozitiftir.

Bu önermeden Kronrod formülünün integrasyon aralığı dışında nokta içermediği sonucu çıkarılmaz. Monegato(1982) bu yeni noktaların ağırlıklarının pozitif olmasının Kronrod noktalarının, Gauss noktaları arasında yer almasına bağlı olduğunu bulmuştur. Bu durumda integrasyon aralığı dışında en fazla iki nokta olabilir ki onlar da uç noktalarıdır.

Önerme 3.3.2. Eğer uygun Kronrod formülü var, reel ve pozitifse Bölüm 3.2.2.deki algoritma rahatlıkla kullanılabilir.

Bu Gauss-Kronrod formülü reel ve pozitif değilse algoritmanın işlemeyeceği anlamına gelmez. Hala iyi çalışabilir. Ancak bu durumda yukarıdaki önermeden dolayı Jacobi–Kronrod matrisi reel olmaz. Böylece $\tilde{b}_j$ yineleme katsayılarının en azından biri negatif olur.

Negatif ağırlıklar ve reel olmayan noktalar arasındaki farkı ayırmanın kolay bir yolu yoktur. Örneğin 3-noktalı Gauss-Hermite formülünün 7 noktalı Kronrod açılımını oluşturmaya çalışırken (bunun imkansız olduğu ispatlanmıştır) $\tilde{b}_6 = -1$ olduğu görülür. Uygun Kronrod formülü kompleks noktalıdır. 4 noktalı Gauss-Hermite formülünün 9 noktalı Kronrod açılımını elde etmeye çalışırken (bunun imkansız olduğu henüz ispatlanmamıştır). $\tilde{b}_6 = -1/4$ $\tilde{b}_8 = -1/4$ elde edilir ve formül reel noktalı ama Gauss noktalarının ikisi negatif ağırlığa sahip olur.

Önerme 3.3.3. $\tilde{T}_{2n+1}$ matrisinin baş ve son nxn boyutundaki alt matrisleri $\hat{T}_n$, $\breve{T}_n$ olsun. $\hat{T}_n$ ve $\breve{T}_n$ aynı özdeğerlere sahiptir. Yani karekteristik polinomları eşittir. Ek olarak

$$\text{n tek ise} \quad \tilde{a}_{j-1} = a_{j-1}\ , \quad \tilde{b}_j = b_j \qquad 1 \le j \le \frac{3n+1}{2} \tag{3.2.10}$$

$$\text{n çift ise} \quad \begin{array}{ll} \tilde{a}_j = a_j & 0 \le j \le \dfrac{3n}{2} \\ \tilde{b}_j = b_j & 1 \le j \le \dfrac{3n}{2} \end{array} \tag{3.2.11}$$

Bu önermede $\hat{T}_n$ *ve* $\breve{T}_n$ (3.2.8) matrisinde verilen J_n ve J_n^* matrislerine karşılık gelir. (Laurie,1997)

Sonuç 3.3.4. $\breve{T}_n$ nin ilk $n-1$ elemanı n tek ise (3.2.10) dan n çift ise (3.2.11) den bulunur. $\hat{T}_n$ ile aynı özdeğerlere sahip reel simetrik üç köşegenli bir $\breve{T}_n$ matrisi vardır $\Leftrightarrow (2n+1)$ noktalı Gauss-Kronrod kuralı reel noktalara ve pozitif ağırlıklara sahiptir.

π_{n+1} her zaman tek olarak belirlenir ancak köklerin integrasyon aralığının içinde olup olmadığı hatta reel olup olmadığı bile belli değildir. T_n *ve* $\widehat{T}_n$ matrislerinin özdeğerleri aynı ise noktalar reel ve ağırlıklar pozitiftir.

3.2.1. Örnekler

Örnek 3.1. $[a,b]=[-1,1]$, $w(x)=1$ için $n=1$ alınarak Gauss-Kronrod integrasyon metodu oluşturulacaktır. $\varphi(x)=x$ birinci dereceden Legendre polinomudur. Dolayısıyla $W(x)=1.x=x$ olur. Buna göre $\psi_2(x)=(x-\tau_1^K)(x-\tau_2^K)$ şeklinde olacaktır. τ_1^K , τ_2^K değerleri

$$\left\langle x^j,\psi_2\right\rangle_W=\int_{-1}^{1} x(x-\tau_1^K)(x-\tau_2^K)x^j dx=0, \qquad j=0,1$$

eşitliklerinden elde edilebilir. Bu eşitliklerden

$$x_1^G=0,\ \tau_1^K=-\sqrt{\frac{3}{5}},\ \tau_2^K=\sqrt{\frac{3}{5}}$$

bulunur. Ağırlıklar ise $L_j(x),\quad j=0,1,2$ Lagrange polinomları kullanılarak

$$\lambda_1=\int_{-1}^{1} L_0(x)dx \qquad \lambda_i^*=\int_{-1}^{1} L_i(x)dx \quad i=1,2$$

integrallerinden

$$\lambda_1=\frac{8}{9},\quad \lambda_1^*=\lambda_2^*=\frac{5}{9}$$

olarak elde edilir.Yukarda bulunan integrasyon noktaları ve ağırlıkları kullanılarak derecesi beşe eşit veya daha küçük integraller tam olarak integrallenebilir.

Örnek 3.2. $[a,b]=[-1,1]$, $w(x)=1$, $n=2$ alarak yukardakine benzer başka bir örnek verilsin:

$$\varphi_2(x)=\left(x-\frac{1}{\sqrt{3}}\right)\left(x+\frac{1}{\sqrt{3}}\right)=\left(x^2-\frac{1}{3}\right)$$

Dolayısıyla $W(x)=1.\left(x^2-\frac{1}{3}\right)$ olur. Buna göre $\psi_3(x)=(x-\tau_1^K)(x-\tau_2^K)(x-\tau_3^K)$ şeklinde olacaktır. $\tau_1^K,\tau_2^K,\tau_3^K$, x_1^G , x_2^G değerleri

$$\left\langle x^j,\psi_2\right\rangle_W=\int_{-1}^{1}\left(x^2-\frac{1}{3}\right)(x-\tau_1^K)(x-\tau_2^K)(x-\tau_2^K)x^j dx=0, \qquad j=0,1,2$$

eşitliklerinden elde edilebilir. Bu eşitliklerden

$$x_1^G=-\frac{1}{\sqrt{3}}\,,\ x_2^G=\frac{1}{\sqrt{3}},\ \tau_1^K=0,\ \tau_2^K=-\sqrt{\frac{6}{7}},\quad \tau_3^K=\sqrt{\frac{6}{7}}$$

bulunur. Ağırlıklar ise $L_j(x),\quad j=0,1,2,3,4$ Lagrange polinomları kullanılarak

$$\lambda_i=\int_{-1}^{1}L_{i-1}(x)dx,\quad i=1,2 \qquad\qquad \lambda_i^*=\int_{-1}^{1}L_{i+1}(x)dx,\quad i=1,2,3$$

integrallerinden bulunur.

Genel olarak Kronrod noktalarının hesaplanması lineer olmayan cebirsel sistemlerin çözümünü gerektirdiği için bu yöntemle Gauss-Kronrod integrasyon metodunun elde edilmesi güçtür. Bu yüzden matrisler kullanılarak elde edilmeye çalışılacaktır.

Örnek 3.3. n=1 olsun. $\tilde{T}_3$ Gauss-Kronrod matrisinin ortogonal polinomlar için yineleme katsayıları $\left\{\tilde{a}_j\right\}_{j=0}^{1}$, $\left\{\tilde{b}_j\right\}_{j=1}^{2}$ olsun. * ile belirtilen eleman bilinmemektedir.

$$\tilde{T}_3 = \begin{bmatrix} \tilde{a}_0 & \sqrt{\tilde{b}_1} & 0 \\ \sqrt{\tilde{b}_1} & \tilde{a}_1 & \sqrt{\tilde{b}_2} \\ 0 & \sqrt{\tilde{b}_2} & * \end{bmatrix}$$

Ancak Önerme 3.3.3 den $\tilde{a}_2 = \tilde{a}_0$ olduğu bilinmektedir. Özellikle 1-noktalı Gauss kuralı ile bağlantılı 3-noktalı Gauss-Kronrod kuralı reel noktalara ve pozitif ağırlıklara sahiptir. $\tilde{T}_3$ matrisinin özdeğerleri integrasyon noktalarını ve normları bir yapılmış özvektörlarinin birinci bileşenlerinin karesi de integrasyon ağırlıklarını verir.

Örnek 3.4. $n = 2$ olsun. $\tilde{T}_5$ Gauss-Kronrod matrisinin ortogonal polinomlar için yineleme katsayıları $\left\{\tilde{a}_j\right\}_{j=0}^{3}$, $\left\{\tilde{b}_j\right\}_{j=1}^{3}$ olsun. $\tilde{a}_4$, $\tilde{b}_4$ elemanları bilinmemektedir.

Önerme 3.3.3 den $\tilde{T}_5$ matrisinin baş ve son $2x2$ lik matrisleri aynı köşegen toplamına (bu matrislerin izleri eşittir) sahiptir.

$$\tilde{a}_3 + \tilde{a}_4 = \tilde{a}_0 + \tilde{a}_1 \tag{3.2.12}$$

Buradan $\tilde{a}_4$ hesaplanır. $\tilde{T}_5$ matrisinin baş ve son 2x2 lik matrislerinin determinantları aynıdır. Bu özellikten

$$\tilde{a}_0\tilde{a}_1 - \tilde{b}_1 = \tilde{a}_3\tilde{a}_4 - \tilde{b}_4 \tag{3.2.13}$$

elde edilir. Buradan $\tilde{b}_4$ hesaplanır.

Örnek 3.5. $[a,b] = [-1,1]$ ve $w(x) = \frac{2}{\pi}\left(1 - x^2\right)^{1/2}$ olsun. Gauss-Kronrod matrisinin elemanları

$$\tilde{T}_5 = \begin{bmatrix} 0 & 1/2 & & & \\ 1/2 & 0 & 1/2 & & \\ & 1/2 & 0 & 1/2 & \\ & & 1/2 & 0 & * \\ & & & * & * \end{bmatrix}$$

(3.2.12) ve (3.2.13) denklemlerinden $\tilde{a}_4 = 0$ ve $\tilde{b}_4 = 1/2$ olur. Bu matrisin özdeğerleri ve özvektörleri

$$\tilde{\lambda}_k = \cos\left(\frac{\pi}{6}k\right), \quad \tilde{w}_k = \frac{1}{3}\sin^2\left(\frac{\pi}{6}k\right) \qquad 1 \le k \le 5$$

şeklindedir.

3.2.2. Laurie Algoritması

Verilen bir pozitif ölçüm için $(2n+1)$-noktalı Gauss-Kronrod integrasyon kuralının Jacobi–Kronrod matrisi beş terimli bir yineleme bağıntısı kullanılarak bulunur.

İki farklı monik ortogonal polinom sistem olsun. Birincisi: n noktalı Gauss integrasyon metodunda kullanılan $w(x)$ ağırlık fonksiyonuna göre oluşturulmuş $P_n(x)$ polinomları olsun. Bu polinomların üç terimli yineleme bağıntısı

$$P_{-1}(x) = 0, \qquad P_0(x) = 1$$

$$P_{j+1}(x) = (x - a_j)P_j(x) - b_j P_{j-1}(x) \quad j = 0,1,...,n \tag{3.2.14}$$

şeklinde verilir. İkincisi: $\breve{T}_n$ Jacobi matrisini oluşturmak için kullanılan ortogonal polinomlar olsun. Bu polinomların ağırlık fonksiyonunun ne olduğu bilinmemektedir. Bu ağırlık fonksiyonu $W(x)$ ile gösterilsin. Bu polinomların üç terimli yineleme bağıntısı

$$\pi_{-1}(x) = 0, \qquad \pi_0(x) = 1$$

$$\pi_{j+1}(x) = (x - \alpha_j)\pi_j - \beta_j \pi_{j-1} \qquad j = 0,1,...,n \tag{3.2.15}$$

şeklinde yazılsın. $W(x)$ ağırlık fonksiyonuna göre oluşturulan iç çarpım $(f, gh)_W = (fg, h)_W$ özelliğini sağlasın. Salzer(1973), aşağıdaki gibi P_j polinomlarını π_k polinomlarının sonlu bir toplamı şeklinde ifade etmiştir:

$$P_l = \sum_{k=0}^{l} \frac{\sigma_{k,l}}{\sigma_{k,k}} \pi_k \tag{3.2.16}$$

$$\sigma_{k,l} = \langle \pi_k, P_l \rangle_W \tag{3.2.17}$$

Beş terimli bağıntıyı oluşturmak için (3.2.14) bağıntısında $j = l$ yazıp $W(x)$ ağırlık fonksiyonuna göre (3.2.14) sonundaki eşitliğin π_k ile iç çarpımı alınsın ve (3.2.15) bağıntısında $j = k$ yazıp $W(x)$ ağırlık fonksiyonuna göre (3.2.15) sonundaki eşitliğin P_l ile iç çarpımı alınsın. Bu iki ifade birbirinden çıkarılırsa

$$\sigma_{k,l+1} + a_l \sigma_{k,l} + b_l \sigma_{k,l-1} - (\sigma_{k+1,l} + \alpha_k \sigma_{k,l} + \beta_k \sigma_{k-1,l}) = 0 \tag{3.2.18}$$

elde edilir. $\sigma_{k,l}$ için aşağıdaki özellikler verilebilir:

$$\sigma_{0,0} = \langle \pi_0, P_0 \rangle_W = \beta_0 \tag{3.2.19}$$
$$\sigma_{-1,l} = 0, \qquad l = 0,1,...,n \tag{3.2.20}$$
$$\sigma_{k,-1} = 0, \qquad k = 0,1,...,n \tag{3.2.21}$$
$$\sigma_{k,l} = 0, \qquad l = 0,1,...,k-1 \tag{3.2.22}$$

$\pi_{-1} = P_{-1} = 0$ olduğundan (3.2.20) ve (3.2.21) kolaylıkla görülür. π_k kendisinden daha küçük dereceden polinomlara $W(x)$ ağırlık fonksiyonuna göre ortogonal olduğu için (3.2.22) sağlanır. Önerme (3.2.3) den $\pi_n = P_n$ olur. Dolayısıyla

$$\sigma_{k,n} = 0, \qquad k = 0,1,...,n-1 \tag{3.2.23}$$

elde edilir. (3.2.18) den

$$\beta_k = \frac{\sigma_{k,k}}{\sigma_{k-1,k-1}} \tag{3.2.24}$$

$$\begin{aligned} \alpha_k &= a_k + \frac{\sigma_{k,k+1} - \beta_k \sigma_{k-1,k}}{\sigma_{k,k}} \\ &= a_k + \frac{\sigma_{k,k+1}}{\sigma_{k,k}} - \frac{\sigma_{k-1,k}}{\sigma_{k-1,k-1}} \end{aligned} \tag{3.2.25}$$

çıkarılabilir.

Gauss-Kronrod metotlarının ilk ortaya çıkışı 1964 olmasına rağmen değişik ağırlık fonksiyonlarına göre Gauss-Kronrod metotlarının varlığı ve tekliği, Kronrod noktalarının reel olup olmadığı, ilgili ağırlıkların pozitif olup olmadıkları, Kronrod noktaları ve ağırlıklarının hesaplanması gibi konular halen güncelliğini koruyan araştırma konularıdır.

3.3. ANTİ-GAUSS İNTEGRASYON METODU

3.2 bölümünde de belirtildiği gibi $I(f)-Q_n^G(f)$ hatasını tam olarak hesaplamak kolay değildir. Genel metot $A(f)-Q_n^G(f)$ hatasını kullanmaktır. Burada A, yaklaşım derecesi $2n-1$ den büyük olan bir integrasyon kuralıdır. Böyle bir A integrasyon formülü en azından $n+1$ ek noktaya sahiptir. Eğer Q_n^G metodunda n keyfi nokta eklersek yeni noktaların ağırlıkları sıfır olur. Çünkü $2n$ noktalı bir formülün yaklaşım derecesi en azından $2n-1$ olmalıdır. Zaten derecesi $2n-1$ olan tek formül Gauss formülüdür.

$n+1$ ek noktalı bir A formülü oluşturmak için çeşitli olasılıklar mevcuttur:

1) $(n+1)$ noktalı Gauss formülünün yaklaşım derecesi $2n+1$ dir. Bu yüzden Q_{n+1}^G, A formülü gibi kabul edilebilir ama bu işlem çok güvenilir değildir.

2) Bazı ağırlık fonksiyonları için $(2n+1)$-noktalı orijinal n noktayı içeren derecesi en azından $3n+1$ olan bir formül bulmak mümkündür. Ama sıklıkla Q_n^G bir reel Kronrod açılıma sahip değildir. Gauss-Hermite, Gauss-Laguerre gibi…

3) Hiç reel Kronrod açılımı olmadığı durumlarda yaklaşım derecesi $2n$ den büyük $3n+1$ den küçük bir nümerik integrasyon metodu araştırılır. Bunun için Anti-Gauss integrasyon formülü

$$Q_n^{AG}(f)=\sum_{i=1}^{n+1}\lambda_i f(\xi_i) \tag{3.3.1}$$

şeklinde verilsin. Bu formülün en önemli özelliği derecesi $2n+2$ den küçük olan tüm reel polinomlar için uygulandığında hatasının G_n Gauss integrasyon metodunun hatası ile aynı büyüklükte ama ters işaretli olmasıdır:

$$I(p)-Q_n^{AG}(p)=-[I(p)-Q_n^G(p)] \qquad p\in\prod_{2n+1} \qquad (3.3.2)$$

(3.2.2) eşitliği kullanılarak $I(f)-Q_n^G(f)$ hatası yaklaşık olarak $[Q_n^{AG}(f)-Q_n^G(f)]/2$ formülünden hesaplanır. Bunun dışında Averaj integrasyon metodu olarak adlandırılan $Q_{2n+1}^{Av}=\left(Q_n^G+Q_{n+1}^{AG}\right)/2$ metodu da hata hesabı için kullanılabilir. Averaj integrasyon metodunun yaklaşım derecesi $(2n+1)$ dir.

Bu formül her zaman mevcuttur ve kolaylıkla oluşturulabilir. Pozitif ağırlıklara ve reel noktalara sahiptir. En fazla iki nokta integrasyon aralığının dışında kalabilir.

3.3.1. Anti-Gauss İntegrasyon Formülünün Yapısı

$$Q_{n+1}^{AG}(p)=2I(p)-Q_n^G(p) \qquad p\in\prod_{2n+1} \qquad (3.3.3)$$

Q_{n+1}^{AG} integrasyon formülünün integrasyon noktaları ve ağırlıkları aşağıdaki gibi bulunur:

1) $\{\alpha_j,\ j=0,1,...,n\}$, $\{\beta_j,\ j=1,2,...,n\}$ katsayıları aşağıdaki bağıntıdan bulunabilir:

$$\pi_{-1}(x)=0, \qquad \pi_0(x)=1$$

$$\pi_{j+1}(x)=(x-\alpha_j)\pi_j-\beta_j\pi_{j-1} \quad j=0,1,..,n \qquad (3.3.4)$$

π_j polinomları $Q_{n+1}^{AG}=2I-Q_n^G$ lineer fonksiyoneline göre diktir. β_0 katsayısı herhangi bir sonlu sayı olabilir. Burada $\beta_0=(2I-Q_n^G)\pi_0$ kabul edilmiştir.

$$
\textbf{2)} \begin{bmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & & & \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & & \\ & . & . & . & \\ & & . & . & \sqrt{\beta_n} \\ & & & \sqrt{\beta_n} & \alpha_n \end{bmatrix} \tag{3.3.5}
$$

simetrik üç köşegenli matrisinin özdeğerleri integrasyon formülünün noktaları ve normları bir yapılmış özvektörlerinin ilk bileşenlerinin karesi ağırlıklarla orantılıdır. Katsayılar aşağıdaki formüllerle verilir.

$$
\begin{aligned}
\alpha_j &= \frac{\left\langle 2I - Q_n^G \right\rangle (x\pi_j^2)}{\left\langle 2I - Q_n^G \right\rangle (\pi_j^2)}, \quad j = 0,1,\ldots,n \\
\beta_j &= \frac{\left\langle 2I - Q_n^G \right\rangle (\pi_j^2)}{\left\langle 2I - Q_n^G \right\rangle (\pi_{j-1}^2)}, \quad j = 1,2,\ldots,n
\end{aligned} \tag{3.3.6}
$$

$\{P_j,\ j = 0,1,\ldots,\}$ integrasyon metodunda kullanılan $w(x)$ ağırlık fonksiyona göre oluşturulmuş ortogonal polinomlar dizisi olsun. Bu polinomlar aşağıdaki

$$
\begin{aligned}
&P_{-1}(x) = 0, \qquad P_0(x) = 1 \\
&P_{j+1}(x) = (x - a_j)P_j(x) - b_j P_{j-1}(x) \quad j = 0,1,\ldots
\end{aligned} \tag{3.3.7}
$$

$$
\begin{aligned}
a_j &= \frac{I(xP_j^2)}{I(P_j^2)} \qquad j = 0,1,\ldots \\
b_j &= \frac{I(P_j^2)}{I(P_{j-1}^2)} \qquad j = 1,2,\ldots
\end{aligned} \tag{3.3.8}
$$

üç terimli yineleme bağıntısını sağlar.

$$
\left(2I - Q_n^G\right) p = Ip \qquad p \in \prod_{2n-1} \tag{3.3.9}
$$

bağıntısından dolayı (bu bağıntı Gauss integrasyon metodunu mertebesinin yaklaşım derecesinin $2n-1$ olmasından hemen çıkar)

$$\alpha_j = a_j \qquad j = 0,1,...,n-1$$
$$\beta_j = b_j \qquad j = 0,1,...,n-1$$
$$\pi_j = P_j \qquad j = 0,1,...,n \tag{3.3.10}$$

elde edilir. Bu durumda sadece α_n , β_n katsayıları bilinmemektedir. x_i, $i = 1,2,...,n$ sayıları $P_n = \pi_n$ polinomunun kökleri olduğu için bu sonuç Q_n^G metoduna uygulanırsa

$$Q_n^G(x\pi_n^2) = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i \pi_n^2(x_i) = 0$$

$$Q_n^G(\pi_n^2) = \sum_{i=1}^{n} w_i \pi_n^2(x_i) = 0 \tag{3.3.11}$$

elde edilir. Bu özellik α_n bulunması için uygulanırsa

$$\alpha_n = \frac{\left(2I - Q_n^G\right)(x\pi_n^2)}{\left(2I - Q_n^G\right)(\pi_n^2)} = \frac{2I(x\pi_n^2)}{2I(\pi_n^2)} = \frac{2I(xP_n^2)}{2I(P_n^2)} = a_n \tag{3.3.12}$$

elde edilir.

$$\beta_n = \frac{\left(2I - G_n\right)(\pi_n^2)}{\left(2I - G_n\right)(\pi_{n-1}^2)} = \frac{2I(\pi_n^2)}{2I(\pi_{n-1}^2) - G_n(\pi_{n-1}^2)} = \frac{2I(\pi_n^2)}{2G_n(\pi_{n-1}^2) - G_n(\pi_{n-1}^2)} = \frac{2I(\pi_n^2)}{I(\pi_{n-1}^2)} = 2b_n \tag{3.3.13}$$

$\pi_{n-1}^2 \in \prod_{2n-2}$ olduğu ve Gauss integrasyon metodu derecesi $2n$ den küçük tüm polinomları tam olarak integralleyebildiği için β_n katsayısının hesaplanmasında kullanılan $I(\pi_{n-1}^2) = Q_n^G(\pi_{n-1}^2)$ elde edilir.

Ehrich(2002), Laurie'nin bu algoritmasını genelleştirerek

$$Q_{2n+1}^{Av*} = \frac{1}{2+\gamma}\left(\left(1+\gamma\right)Q_n + Q_{n+1}^{AG}\right) \qquad \gamma > -1 \tag{3.3.14}$$

şeklinde ifade etmiştir. Bu durumda hata

$$R_{n+1}^{AG}(f) = -(1+\gamma) R_n^G(f), \qquad f \in \prod_{2n+1} \tag{3.3.15}$$

olarak verilir. Hatırlanacağı gibi Laurie'nin algoritmasında $\gamma = 0$ olarak alınmıştı.

Önerme 3.3.1 w, $(-\infty,\infty)$ aralığında integrallenebilir bir ağırlık fonksiyonu olsun ve $\{P_n\}_{n\in N}$, $w(x)$ ağırlık fonksiyonuna göre oluşturulmuş monik ortogonal polinomlar dizisi olsun. Buna göre oluşturulacak Anti-gauss formülü

$$\tilde{P}_{n+1} = P_{n+1} - (1+\gamma) \frac{\|P_n\|^2}{\|P_{n-1}\|^2} P_{n-1} \tag{3.3.16}$$

polinomunun köklerini integrasyon noktası olarak kabul eder. Tüm $\gamma > -1$ için $\tilde{P}_{n+1}$ polinomunun kökleri reel ve P_n polinomunun kökleri arasında ardışık olarak yerleşmiştir. (Ehrich,2002)

Sven Ehrich, Laguerre ve klasik Hermite polinomları için kulanılan Anti-Gauss ve Averaj integrasyon metotlarında daha yüksek yaklaşım derecesi oluşturacak γ değerlerini bulmuştur.

Önerme 3.3.2. Mümkün en yüksek yaklaşım derecesine sahip Gauss-Lagurre integrasyon kuralı için kullanılan averaj formülü tektir ve bunun için

$$\gamma = \frac{2n+\alpha+1}{n(n+\alpha)} \tag{3.3.17}$$

olarak belirlenir. Yaklaşım derecesi $2n+2$ olur. (Ehrich, 2002)

Önerme 3.3.3. Mümkün en yüksek yaklaşım derecesine sahip klasik Gauss-Hermite integrasyon kuralı için kullanılan averaj formülü tektir ve bunun için

$$\gamma = \frac{1}{n} \tag{3.3.18}$$

olarak belirlenir. Yaklaşım derecesi $2n+3$ olur. (Ehrich, 2002)

Önerme 3.3.4 Genel Gauss-Hermite integrasyon kuralı için en yüksek dereceli averaj formülü tektir ve

$$\gamma = \begin{cases} \dfrac{1-2\alpha}{2\alpha+n}, & n \ tek \\ \\ \dfrac{2\alpha+1}{n}, & n \ çift \end{cases}$$

değeri için elde edilir. Bu değerle elde edilen averaj formülünün yaklaşım derecesi $2n+3$ olur. (Hasçelik)

4. BÖLÜM

GENEL BİR AĞIRLIK FONKSİYONUNA GÖRE ORTOGONAL POLİNOMLARI OLUŞTURMAKTA KULLANILAN YİNELEME KATSAYILARININ ELDE EDİLMESİ

Bu bölümde ortogonal polinomları oluşturmakta kullanılan üç terimli yineleme bağıntısının katsayılarının hesaplanması için kullanılabilecek çeşitli metotlar tanıtılacaktır. Daha sonraki bölümde ise çeşitli örnekler ile bu metotlardan elde edilen sonuçlar karşılaştırılacaktır.

4.1 MOMENT TABANLI METOTLAR

Ortogonal polinomlar, dolayısıyla bu polinomları oluşturmakta kullanılan yineleme katsayıları, momentlerin determinant formuyla ifade edilebilir. Gerçekten, ortogonal polinomların klasik teorisi momentlerle kurulmuştur. Ancak ortogonal polinomları oluşturmak için momentlerin kullanımı yazık ki nümerik olarak kararlı değildir.

4.1.1. Momentlerin Determinant Formuyla Klasik Yaklaşım

$$\mu_r = \mu_r(d\lambda) = \int_R x^r d\lambda(x) \qquad r = 0,1,2,...., \qquad \mu_0 > 0 \tag{4.1.1}$$

momentleri kullanılarak n . mertebeden Hankel determinantı

$$\Delta_0 = 1$$

$$\Delta_n = \det\begin{bmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdot & \cdot & \mu_{n-1} \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdot & \cdot & \mu_n \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \mu_{n-1} & \cdot & \cdot & \cdot & \mu_{2n-2} \end{bmatrix}, \qquad n = 1, 2, ... \tag{4.1.2}$$

şeklinde tanımlanır. Ek olarak

$$\Delta_0^{'} = 0, \qquad \Delta_1^{'} = \mu_1$$

$$\Delta_n^{'} = \det\begin{bmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdot & \cdot & \mu_{n-2} & \mu_n \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdot & \cdot & \mu_{n-1} & \mu_{n+1} \\ \cdot & \cdot & & & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & & & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & & & \cdot & \cdot \\ \mu_{n-1} & \mu_n & \cdot & \cdot & \mu_{2n-3} & \mu_{2n-1} \end{bmatrix}, \qquad n = 2, 3, ... \tag{4.1.3}$$

tanımlansın. Böylece $\Delta_n^{'}$, Δ_{n+1} $(n+1)$. mertebeden Hankel determinantının sondan bir önceki sütununun çıkarılmasıyla oluşur.

Teorem 4.1.1. $d\lambda$ ölçümüne göre k . dereceden monik ortogonal polinom π_k olsun. O halde

$$\pi_k(x) = \frac{1}{\Delta_k}\begin{vmatrix} \mu_0 & \mu_1 & \cdot & \cdot & \cdot & \mu_k \\ \mu_1 & \mu_2 & \cdot & \cdot & \cdot & \mu_{k+1} \\ & & & & & \\ & & & & & \\ \mu_{k-1} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \mu_{2k-1} \\ 1 & x & . & . & . & x^k \end{vmatrix} = x^k - \frac{\Delta_k^{'}}{\Delta_k} x^{k-1} + ... \quad k = 1, 2, ...$$

(4.1.4)

Teorem 4.1.2. π_k monik ortogonal polinomları için a_k ve b_k yineleme katsayıları

$$a_k = \frac{\Delta'_{k+1}}{\Delta_{k+1}} - \frac{\Delta'_k}{\Delta_k} \qquad k = 0,1,2,.... \tag{4.1.5}$$

$$b_k = \frac{\Delta_{k+1}\Delta_{k-1}}{\Delta_k^{\ 2}} \qquad k = 1,2,3,.... \tag{4.1.6}$$

şeklinde verilir.

Eğer $\Delta_{-1} = 1$ olarak tanımlanırsa (4.1.6) eşitliği $k = 0$ için de sağlanır. Bu yüzden $\Delta_1 = \mu_0 = b_0$ olur.

Not: (4.1.5), (4.1.6) formülleri a_k ve b_k yineleme katsayılarını hesaplamak için tavsiye edilmez. (4.1.5), (4.1.6) ile çözülen problemler nümerik kararlı olmayabilir. Bununla birlikte yüksek duyarlılıkla çalışıldığında iyi sonuçlar verebilir.

4.2. DİSKRİTİZASYON METODU

Diskritizasyon metodundaki ana fikir verilen $d\lambda$ ölçümüne bir N -noktalı $d\lambda_N$ diskritizasyon ölçümüyle yaklaşmaktır. Bu ölçüm kullanılarak elde edilen yeni $a_{k,N} = a_{k,N}(d\lambda_N)$, $b_{k,N} = b_{k,N}(d\lambda_N)$ katsayıları eğer diskritizasyon metodu başarılı bir şekilde uygulanırsa herhangi bir k için $\lim\limits_{N\to\infty} a_{k,N} = a_k$, $\lim\limits_{N\to\infty} b_{k,N} = b_k$ özellikleri sağlanır. Yani oluşturmak istenilen ortogonal polinomların yineleme katsayılarına yakınsama sağlanır.

Metot uygulanırken metodun yakınsaması, diskrit(ayrık) ölçüme göre oluşturulan yineleme katsayılarının hesabı ve diskritizasyon metodundaki parçalamanın nasıl yapılacağı çözülmesi gereken sorulardır.

İntegrasyon aralığı $[-1,1]$ seçilsin. Bilindiği gibi her aralık uygun değişken değişimi ile $[-1,1]$ aralığına dönüştürülebilir. Bu, aşağıdaki formüllerle gösterilebilir:

$$\phi(t)=\begin{cases}\frac{1}{2}(b-a)\tau+\frac{1}{2}(b+a) & -\infty<a<b<\infty\\ b-\frac{1-\tau}{1+\tau} & -\infty=a<b<\infty\\ a+\frac{1-\tau}{1+\tau} & -\infty<a<b=\infty\\ \frac{\tau}{1-\tau^2} & -\infty=a<b=\infty\end{cases}$$

$d\lambda_N$ diskrit ölçümü ile iç çarpımı oluştururken kullanılan noktaların $[-1,1]$ aralığına dahil olduğu kabul edilsin. p ve q polinom olmak üzere

$$\langle p,q\rangle_{d\lambda_N}=\int_R p(x)q(x)d\lambda_N(x)=\sum_{i=1}^{N} w_v p(x_v)q(x_v) \tag{4.2.1}$$

iç çarpımı (x_v , w_v N 'e bağlıdır) şeklinde tanımlanır. Bu iç çarpım $N\to\infty$ için $\langle p,q\rangle_{d\lambda}$ iç çarpımına yakınsarsa, diskrit ortogonal $P_{n,N}$ polinomlarının $N\to\infty$ için sürekli ortogonal P_n polinomlarına yakınsamasını düşünmek mantıklıdır. Bu aşağıdaki teoremden çıkarılabilir:

Teorem 4.2.1. $d\lambda$, $[-1,1]$ üzerinde pozitif bir ölçüm ve her mertebeden tüm momentler sınırlı olsun. $d\lambda_N$ diskrit ölçüm, $x_{v,N}$ $[-1,1]$ aralığında diskrit integrasyon noktaları ve $w_{v,N}$ diskrit integrasyon ağırlıkları olmak üzere

$$\lim_{N\to\infty}(p,q)_{d\lambda_N}=(p,q)_{d\lambda} \qquad p\in\prod, q\in\prod \tag{4.2.2}$$

($\prod$: reel polinomlar sınıfı) sağlansın. O halde herhangi bir k için $d\lambda_N$ ölçümüne göre $a_{k,N}$, $b_{k,N}$ yineleme katsayıları $N\to\infty$ için sürekli ortogonal polinomların üç terimli yineleme bağıntısındaki katsayılarına yakınsar:

$$\lim_{N\to\infty}a_{k,N}=a_k \qquad \lim_{N\to\infty}b_{k,N}=b_k \tag{4.2.3}$$

Ek olarak $P_{n,N}(x)$, $N\to\infty$ için $x\in[-1,1]$ için $P_n(x)$ polinomuna düzgün yakınsar. İspat için (Gautschi, 2004, s 91) bakılabilir.

Sonuç 4.2.2 n sabit P_n ortogonal polinomunun kökleri azalan sıraya göre $\tau_1, \tau_2, ..., \tau_n$ ve $P_{n,N}$ diskrit ortogonal polinomunun kökleri yine azalan sıraya göre $\tau_{1,N}, \tau_{2,N}, ..., \tau_{n,N}$ olsun. O halde (4.2.1) teoreminin varsayımları altında

$$\lim_{N\to\infty} \tau_{v,N} = \tau_v \qquad \lim_{N\to\infty} P_{m,N}(\tau_{v,N}) = P_m(\tau_v) \qquad v = 1, 2, ..., n \quad m \neq n \tag{4.2.4}$$

sağlanır.

Bu bölümde $[-1,1]$ aralığında bir takım şartlar sağlanırsa bu metotla ortogonal polinomlarının üç terimli bağıntısındaki yineleme katsayılarının elde edileceği görülür. Teorem inceleme kolaylığı açısından $[-1,1]$ aralığı için verilmiş olmasına rağmen kullanılan her aralıkta bu özellik sağlanır.

4.2.1 Diskritizasyon İşleminin Genel Amacı

$w(x)$ mutlak sürekli olsun. Bu yüzden $d\lambda(x) = w(x)dx$ şeklinde yazılabilir. (4.2.1) eşitliği ile tanımlanan $(p,q)_{d\lambda_N}$ diskrit iç çarpımı uygun bir integrasyon formülü kullanılarak elde edilebilir. Bu iç çarpım kullanılarak bir $f(x)$ fonksiyonunun $(-1,1)$ aralığındaki integralinin değeri diskritizasyon metodu kullanılarak

$$\int_{-1}^{1} f(x)w(x)dx \cong \sum_{v=1}^{N} w_v f(x_v)w(x_v) \tag{4.2.5}$$

veya

$$\int_{-1}^{1} f(x)w(x)dx \cong \sum_{v=1}^{N} w_v f(x_v) \tag{4.2.6}$$

şeklinde yazılabilir. Ancak (4.2.6) formu $w(x)$ ağırlık fonksiyonuna bağlıdır. (4.2.5) seçimi her zaman kullanılabilir.

(4.2.5) formuna örnek olarak Chebyshev noktaları kullanılarak oluşturulan Fejer integrasyon kuralı verilebilir. Bu metodun yaklaşım derecesi $\geq n-1$ dir. Bu metodun integrasyon noktaları

$$x_i^F = \cos\theta_i^F \,, \quad \theta_i^F = \frac{2i-1}{2N}\pi \,, \qquad i = 1,2,...,N \tag{4.2.7}$$

ve ağırlıkları

$$w_i^F = \frac{2}{N}\left(1 - 2\sum_{n=1}^{\lfloor N/2 \rfloor} \frac{\cos 2n\theta_i^F}{4n^2 - 1}\right), \qquad i = 1,2,...,N \tag{4.2.8}$$

şeklinde verilmiştir. Her i değeri için $w_i^F > 0$ ve Fejer integrasyon kuralının sürekli fonksiyonlar için yakınsak olduğu bilinir. Özellikle f bir polinom ve $w(x)$ ağırlık fonksiyonu $[-1,1]$ aralığında sürekli ise $N \to \infty$ için $x_i = x_i^F$, $w_i = w_i^F$ yakınsaması gerçekleşir. İlginç olarak w fonkiyonunun monoton olması şartıyla $w(x)$, ± 1 noktalarında tekilliklere sahip olsa bile yakınsama sağlanır. Böyle durumlarda yakınsama hızı hakkında çok az şey bilinmektedir. Yakınsama çok yavaş da olabilir. Fejer integrasyon metodunun noktaları ve ağılıkları kolaylıkla bulunduğu ve her integral için uygulanabileceği için yukarıda verilmiştir. Ancak biz örneklerimizde $(-\infty,\infty)$ aralığında çalıştığımız için aralık değiştirme işi ile uğraşmamak için Gauss-Hermite integrasyon metodunu kullandık.

$[a,b]$ aralığını herhangi bir sayıda parçalayıp her parçaya Fejer integrasyon kuralı veya herhangi uygun bir integrasyon metodu uygulanarak diskritizasyon işlemi yapılır. Ama bu parçalama ne dikkate alınarak yapılacaktır? Bunun için önerilen sistematik yol şudur: Eğer tekillik varsa a uç noktasının solunda kalsın ve b düzenli bir nokta olsun. Amaç, hatanın belli bir ε değerinden küçük olacak şekilde bir sonuç elde edilmesidir. $a < x_1^0 < b$ olacak şekilde a ya yakın bir x_1^0 seçilsin. $[a, x_1^0]$ aralığına n-noktalı uygun integrasyon kuralı uygulansın. $n = 2,3,...$ olabilir. $[a,b]$ aralığına uygulanarak bulunan sonuç ile $[a, x_1^0]$ aralığına uygulanarak bulunan sonuç arasındaki fark $n < N_{\max}$ için ε dan küçük kalabiliyorsa x_1^0 a göre a dan biraz daha uzak olan bir x_1^1 noktası x_1^0 ile değiştirilir. Aynı işlemler x_1^1 için yapılır. Aksi halde yani iki yaklaşım arasındaki fark $n < N_{\max}$ için ε dan büyük kalıyorsa hata şartı sağlanana kadar a ya daha yakın noktalar seçerek işleme devam edilir. Sonuç olarak x_1 noktası bulunur ki $[a, x_1]$ aralığına $n = N_{\max}$ sayısı civarında noktaya sahip uygun integrasyon kuralı uygulanırsa istenen sonuç elde edilir. x_1 diskritizasyon işleminin ilk noktası olarak seçilir. $x_1 < x_2^0 \le b$ olmak üzere $[x_1, x_2^0]$ aralığında $[a, x_1]$ aralığının bulunması için yapılan tüm işlemler aynen uygulanır.

4.2.2. Çok Katlı Diskritizasyon Metodu

Çok katlı diskirtizasyon metodunu kullanmaktaki amacı bir örnekle gösterelim. $w(x,c) = \sqrt{1-x^2} + c,\ c > 0$ olsun. $w(x,c)$ nin diskritizasyonu için hangi integrasyon kuralı uygulanmalıdır? Bu soruya cevap aranacaktır. $[-1,1]$ aralığının tümüne bir tek integrasyon kuralını uygulayarak başarılı olmak zordur. Hızlı bir yakınsama elde edilmez. Örneğin $c = 1$ için $w(.,1)$ ağırlık fonksiyonuna göre 690 noktalı Fejer integrasyon kuralı uygulandığında ancak 10^{-3} büyüklüğünde bir hata elde edilmiştir.

Çok katlı diskritizasyon metodu aşağıdaki gibi ifade edilir:

$$\int_a^b f(x)w(x)\,dx = \sum_{\mu=1}^{m} \int_{a_\mu}^{b_\mu} f_\mu(x) w_\mu(x)\,dx \tag{4.2.9}$$

Burada $[a,b]$ aralığı m alt aralığa parçalanır:

$$[a,b] = \bigcup_{\mu=1}^{m} [a_\mu, b_\mu] \qquad m \ge 1 \tag{4.2.10}$$

Bu aralıkların ayrık olması gerekmez. Her alt arlıkta w_μ ağırlık fonksiyonu oluşturulur (w_μ, w ye eşit olmayabilir). (4.2.9) eşitliğinde f_μ, μ ye bağlıdır ve f fonksiyonundan farklı olabilir. (4.2.9) ile tanımlanan diskritizasyon için sağdaki her integral bileşenine bir integrayon kuralı uygulanır. Uygulanacak kural w_μ ağırlık fonksiyonuna bağlı olarak seçilir.

4.2.3. Diskrit Ölçüme Göre Yineleme Katsayılarının Hesabı

4.2.3.1. Stieltjes yöntemi

Diskrit ortogonal polinomlarının yineleme katsayıları

$$a_{k,N} = \frac{\left(xP_{k,N}, P_{k,N}\right)_{d\lambda_n}}{\left(P_{k,N}, P_{k,N}\right)_{d\lambda_n}} \;, \quad b_{k,N} = \frac{\left(P_{k,N}, P_{k,N}\right)_{d\lambda_n}}{\left(P_{k-1,N}, P_{k-1,N}\right)_{d\lambda_n}} \qquad (4.2.11)$$

formülleriyle verilir. Bu formüllerde görülen tüm iç çarpımlar

$$(p,q)_{d\lambda_N} = \int_R p(x)q(x)d\lambda_N(x) = \sum_{i=1}^{N} w_v p(x_v)q(x_v) \qquad (4.2.12)$$

sonlu toplam şeklinde ifade edilebildiği için hesaplaması gayet kolaydır. Tek problem $P_{k,N}, P_{k-1,N}$ polinomlarını oluşturabilmektir. Ancak bunlar da üç terimli yineleme bağıntısı kullanılarak elde edilebilir:

$$P_{k+1,N}(x) = (x - a_{k,N})P_{k,N}(x) - b_{k,N}P_{k-1,N}(x) \qquad (4.2.13)$$

$P_{0,N} = 1$ olduğu için $a_{0,N}$ katsayısı (4.2.11) da $k = 0$ alınarak elde edilebilir. (4.2.13) bağıntısında $k = 0$ alınarak tüm x_v noktaları için $P_{1,N}$ polinomunun değerleri elde edilir. $P_{0,N}(x_v)$ ve $P_{1,N}(x_v)$ değerleri (4.2.11) formüllerinde yerleştirilirse $a_{1,N}$, $b_{1,N}$ yineleme katsayıları bulunur. (4.2.13) bağıntısında $k = 1$ alınarak tüm x_v noktaları için $P_{2,N}$ polinomunun değerleri bulunur. Bu şekilde devam edilerek istenildiği kadar yineleme katsayıları hesaplanır.

k, N sayısına yaklaşırken yineleme katsayılarının nümerik kararsız olmaya eğilimli olması önemli bir problemdir. Bununla birlikte N, elde edilmek istenen yineleme katsayılarının sayısından büyük seçilerek ve gerekli normalizasyon işlemleri yapılarak bu problem ortadan kaldırılabilir.

4.2.3.2. Lanczos tipi algoritma

A verilen reel simetrik bir matris olmak üzere $Q^T A Q = T$ eşitliği sağlanacak şekilde bir Q ortogonal matrisi ile üç köşegenli, simetrik bir T matrisi vardır. Lanczos algoritması, verilen A matrisinden Q ve T matrislerini tek olarak üreten bir metottur.

Diskrit(ayrık) iç çarpımın x_v noktaları ve w_v ağırlıkları kullanılarak $\sqrt{w}$ vektörü ve D_t köşegen matrisi aşağıdaki gibi tanımlanırsa

$$\sqrt{w} = [\sqrt{w_1}, \sqrt{w_2}, \ldots, \sqrt{w_n}]^T \quad D_t = diag[x_1, x_2, \ldots, x_n] \tag{4.2.14}$$

N. mertebeden bir Q_1 ortogonal matrisi ve $(N+1)$. mertebeden bir T matrisi

$$\begin{bmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & Q_1^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{w}^T \\ \sqrt{w} & D_t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0^T \\ 0 & Q_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \sqrt{b_{0,N}}\, e_1^T \\ \sqrt{b_{0,N}}\, e_1 & J_N(d\lambda_N) \end{bmatrix} = T \tag{4.2.15}$$

eşitliği sağlanacak şekilde Lanczos algoritması kullanılarak elde edilebilir. (4.2.15) eşitliğinde $e_1 = [1,0,\ldots,0]^T \in R^N$ ve $d\lambda_N$ diskrit(ayrık) ölçümün $J_N(d\lambda_N)$, N. mertebeden Jacobi matrisinin sıfırdan farklı elemanları tam olarak diskrit polinomların yineleme bağıntısındaki elde etmek istediğimiz $a_{N,k}, b_{N,k}$ katsayılarıdır. Algoritma nümerik kararlı değildir, ancak kararlı versiyonu Rutishauser(1963) in fikirleri izlenerek Gragg ve Harrod(1984) tarafından, (4.2.15) deki ortogonal benzerlik dönüşümü inşa edilirken Givens rotasyonları kullanılarak geliştirilmiştir.

http://www.cs.purdue.edu/archieves/2001/wxg/codes internet adresinden Stieltjes ve Lanczos algoritmaları için matlab programı bulunabilir. Biz bu çalışmamızda Stieltjes algoritmasında karşılaşılan sorunlardan dolayı Lanczos tipi algoritmayı kullandık.

5. BÖLÜM

HERMİTE TİPİ AĞIRLIK FONKSİYONLARINA GÖRE GAUSS İNTEGRASYON METODUNUN OLUŞTURULMASI

$$w(x) = |x|^{\alpha} \exp(-x^2)\cos^2(x), \qquad x \in R,\ \alpha > -1 \tag{5.1}$$

ağırlık fonksiyonuna göre Gauss integrasyon metodunu oluşturmak için öncelikle integrasyon noktaları ile ağırlıklarının hesaplanması gerekmektedir. Bunun için ortogonal polinomları oluşturmakta kullanılan üç terimli yineleme bağıntısında görülen a_k, b_k katsayılarının hesaplanması gerekmektedir. Bu katsayıları (2.3.9) da verilen iç çarpımı kullanarak hesaplamak n nokta sayısı büyük değer alındığında oldukça güçtür. Örneğin Matematica 5.0 kullanılarak yapılan programda bir saatte sadece 10 tane katsayı değeri hesaplanmıştır.

Bu yüzden bu katsayıların hesabı için farklı bir yöntem uygulanmalıdır. Moment tabanlı metotları uygulamak düşünülebilir. Ancak bu metot nümerik olarak kararlı olmadığı için pek güvenilir değildir. Aynı zamanda çok büyük n değerleri için bu metodu kullanmak da bayağı zahmetlidir. Çünkü nxn boyutundaki bir çok matrisin yanlış yapılmadan oluşturulması ve bu matrislerin determinantlarının minimum hata ile hesaplanması güçtür.

Katsayıların hesabı için diskritizasyon metodu uygulanabilir. Gautschi-Stieltjes veya Lanczos tipi algoritma kullanılarak uygulanan aşağıdaki algoritma ile bu katsayılar yaklaşık olarak hesaplanabilir.

Algoritma *

1) Öncelikle integrasyon hatası için verilecek tolerans miktarı ε_{tol} ve kullanılabilecek maksimum nokta sayısı $N_{\max}$ belirlenir.
2) Gauss-Hermite integrasyon metodunda kullanılan integrasyon noktaları ve ağırlıklar belirlenerek bu noktalar ve ağırlıklar Lanczos algoritmasında kullanılarak $n,\ n \leq N_{\max}$ tane diskrit yineleme katsayıları elde edilir.
3) Diskrit katsayıları kullanılarak Gauss integrasyon metodundan integrale yaklaşık bir sonuç elde edilir. Eğer $\dfrac{|G_n(f) - A\,G_{n+1}|}{|G_n(f)|} \leq \varepsilon_{tol}$ veya $\dfrac{|G_n(f) - G_{2n+1}^{Av}(f)|}{|G_{2n+1}^{Av}(f)|} \leq \varepsilon_{tol}$ sağlanmazsa n artırılarak algoritma tekrar uygulanır.

Not: Bu algoritma sayesinde diskrit katsayılar bir kere hesaplandıktan sonra oluşturulan her Gauss integrasyon metodu için kullanılabilir. Her Gauss kuralı için tekrar hesaplama yapılmaması bu algoritmanın kullanışlılığını gösterir.

Eğer ağırlık fonksiyonu $w(x) = |x|^{\alpha} \exp[-(x+b)^2],\ \alpha > -1,\ b \in \mathbb{R}$ veya benzer şekilde $w(x) = |x|^{\alpha} \exp[-(x+b)^2]$ şeklinde seçilirse ortogonal polinomları oluşturmakta kullanılan üç terimli yineleme bağıntısındaki katsayılar nümerik kararlı bir şekilde Milonovic ve Cvetkovic(2003) in önerdiği asimptotik açılımlara veya lineer olmayan denklem sistem çözümlerine dayanan metotla hesaplanabilir. Son örnekte bununla ilgili bir örnek verilmiştir.

Not: Tablolarda $e \pm m = 10^{\pm m}$ göstermektedir. Bu tabloların oluşturulmasında kullanılan hassaslık derecesi 16 dır.

Örnek 5.1.

$$I(f) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2)\cos^2(x)\, f(x)dx \tag{5.2}$$

integrali göz önüne alınsın. Bu integrallerin değerleri Mathematica 5.0 programında 'NIntegrate' komutu $WP \to 32$ ile aşağıdaki gibi bulunmuştur: $I(1) = 1.2122515915394041051787$, $I([(x+1)/2]^{10}) = 0.4011251463321418901594$, $I(BesselJ[2,x]) = 0.0325509987976100903411 7$,

$I(\frac{1}{4+x^2}) = 0.2882181150325538462028683408357 8308$. Tablo 1 de verilen, Algoritma* ile bulunan yineleme katsayıları kullanılarak bu integral hesaplanabilir. Bu integral için çeşitli metotlar kullanılarak elde edilen hatalar Tablo 2 de verilmiştir. Tablo 2 de kullanılan ifadelerin açıklaması aşağıda verilmiştir:

$R_n[f] =$ İntegralin gerçek değeri ile $w(x) = \exp(-x^2)$ ağırlık fonksiyonu kullanılarak ve $F(x) = f(x)\cos^2(x)$ seçilerek n-noktalı Gauss-Hermite integrasyon metodu ile elde edilen sonuç arasındaki fark

$\tilde{R}_n[f]=$ İntegralin gerçek değeri ile $w(x) = \exp(-x^2)\cos^2(x)$ ağırlık fonksiyonuna göre Lanczos tipi algoritma yardımıyla oluşturulan Algoritma*dan elde edilen sonuç arasındaki fark

$R_n[f]_{moment}=$İntegralin gerçek değeri ile $w(x) = \exp(-x^2)\cos^2(x)$ ağırlık fonksiyonuna göre moment tabanlı metot kullanılarak oluşturulan yineleme katsayıları ile oluşturulacak integrasyon metodundan elde edilen sonuç arasındaki fark

Tablo 2: (5.2) için elde edilen hatalar

$f(x)$	n	$R_n[f]$	$\tilde{R}_n[f]$	$R_n[f]_{moment}$
1	1	-5.6e-001	1.1e-015	1.1e+00
$[(x+1)/2]^{10}$	6	5.0e-002	-2.4e-015	3.6e-002
$BesselJ[2,x]$	10	-1.7e-007	-1.3e-016	2.9e-003
$\frac{1}{4+x^2}$	40	4.1e-013	9.1e-015	2.6e-003

Örnek 5.2.

$$I(f) = \int_{-\infty}^{\infty} |x| \exp(-x^2)\cos^2(x) f(x)dx \qquad (5.3)$$

integrali göz önüne alınsın. $I(1)=0.46192049308723158086636$, $I([(x+1)/2]^{10})=0.87743849138380161462\,12$,
$I(BesselJ[2,x])=0.025330873228035608402\,17$
$I(\frac{1}{4+x^2})=0.10438813671694799174189768154675\,22$. Bu integral için çeşitli metotlar kullanılarak elde edilen hatalar Tablo 3 de verilmiştir:

Tablo 3: (5.3) için elde edilen hatalar

$f(x)$	n	$R_n[f]$	$\tilde{R}_n[f]$	$R_n[f]_{moment}$
1	1	-0.5e-001	2.2e-016	4.6e-001
$[(x+1)/2]^{10}$	6	-0.1e-001	7.5e-015	8.1e-002
$BesselJ[2,x]$	10	-3.6e-007	-2.0e-016	2.5e-003
$\frac{1}{4+x^2}$	40	6.6e-013	1.3e-014	1.5e-002

Örnek 5.3.

$$I(f)=\int_{-\infty}^{\infty}|x|^2\exp(-x^2)\cos^2(x)f(x)dx \tag{5.4}$$

integrali göz önüne alınsın. Burada $I(1)=0.28010112968305596105\,98$, $I([(x+1)/2]^{10})=2.11985202874268130207\,3$,
$I(BesselJ[2,x])=0.02568816700509031075$,
$I(\frac{1}{4+x^2})=0.05937913140918872036\,71896$. Bu integral için çeşitli metotlar kullanılarak elde edilen hatalar Tablo 4 de verilmiştir:

Tablo 4: (5.4) için elde edilen hatalar

$f(x)$	n	$R_n[f]$	$\tilde{R}_n[f]$	$R_n[f]_{moment}$
1	1	-0.4e-001	-5.5e-017	4.6e-001
$[(x+1)/2]^{10}$	6	-0.1e-001	1.2e-014	2.0e-001
$BesselJ[2,x]$	10	-7.8e-007	-4.8e-016	2.3e-003
$\frac{1}{4+x^2}$	40	1.1e-012	2.1e-014	5.4e-003

Örnek 5.4.

$$I(f)=\int_{-\infty}^{\infty}|x|^{1/2}\exp(-x^2)\cos^2(x)f(x)dx \qquad (5.5)$$

integrali göz önüne alınsın. $I(1)=0.68911817188406442030 66$,
$I([(x+1)/2]^{10})=0.58293208089868669037 55$,
$I(BesselJ[2,x])=0.027797673144861452692 47$,
$I(\frac{1}{4+x^2})=0.159837344217926000827912244319948887 2$. Tablo 5 de Algoritma* kullanılarak elde edilen yineleme katsayılarının değerleri verilmiştir. Bu integral için çeşitli metotlar kullanılarak elde edilen hatalar Tablo 6 da verilmiştir:

Tablo 6: (5.6) için elde edilen hatalar

$f(x)$	n	$R_n[f]$	$\tilde{R}_n[f]$	$R_n[f]_{moment}$
1	1	-0.5e-001	1.1e-016	6.8e-001
$[(x+1)/2]^{10}$	6	-0.0e-001	-1.3e-015	5.3e-002
$BesselJ[2,x]$	10	-2.5e-017	-1.9e-016	2.8e-003
$\frac{1}{4+x^2}$	40	-5.2e-013	1.2e-014	3.7e-002

Bu algoritma (5.1) ağırlık fonksiyonu dışında diğer ağırlık fonksiyonları için de uygulanabilir. Mesela ağırlık fonksiyonu Milonovic ve Cvetkovic(2003) in incelediği gibi $w(x)=|x|^{\alpha}\exp[-(x+b)^2]$ veya benzer şekilde $w(x)=|x|^{\alpha}\exp[-(x+b)^2]$ seçelim. Bununla ilgili aşağıdaki örnek incelenmiştir.

Örnek 5.5.

$$I(f)=\int_{-\infty}^{\infty}\exp[-(x+26)^2]|x|^{-1/2}f(x)dx \qquad (5.6)$$

integrali göz önüne alınsın. $I[1]$=0.34770337003.... ve $I[(x+25)^9]$=111.1204354.... Bu integral için çeşitli metotlar kullanılarak elde edilen hatalar Tablo 7 de verilmiştir. Tablo 7 de kullanılan ifadelerin açıklaması aşağıda verilmiştir:

$R_n[f]$= İntegralin tam değeri ile $w(x)=\exp(-x^2)$ ağırlık fonksiyonu kullanılarak $F(x)=|x|^\alpha \exp(-2bx-b^2)f(x)$ fonksiyonuna Gauss-Hertmite integrasyon metodu uygulanması ile elde edilen değer arasındaki farkı belirtir.

$\tilde{R}_n[f]$= İntegralin tam değeri ile $t=x-b$ değişken değişimi yapıldıktan sonra $w(x)=\exp(-x^2)$ ağırlık fonksiyonu kullanılarak $F(x)=|x-b|^\alpha f(x)$ fonksiyonuna Gauss-Hermite integrasyon metodu uygulanması ile elde edilen değer arasındaki farkı belirtir.

$R_n[f]_{mil}$= İntegralin gerçek değeri ile Milonovic ve Cvetkovic(2003) de verilen yöntemle elde edilen sonuç arasındaki farkı belirtir.

$R_n[f]_*$= İntegralin gerçek değeri ile Algoritma* la bulunan değer arasındaki farkı belirtir.

Tablo 7: (5.6) için elde edilen hatalar

$f(x)$	n	$R_n[f]$	$\tilde{R}_n[f]$	$R_n[f]_{mil}$	$R_n[f]_*$
1	1	3.5 e-001	9.7e-005	-1.0e-016	-1.1e-016
$(x+25)^9$	5	1.1e+002	4.3e+000	6.8e-013	3.8e-013

Tablo 1: $w(x) = \exp(-x^2)\cos^2(x)$ ağırlık fonksiyonuna göre Algoritma* kullanılarak elde edilen α_k, β_k katsayıları

k	α_k **katsayıları**	β_k **katsayıları**
0	1.232741449803027e-016	1.212251591539403e+000
1	4.351215953067217e-017	2.310585786300053e-001
2	3.123466443789786e-015	6.869647145006693e-001
3	2.830856951258504e-015	2.537655548724934e+000
4	3.339041862502020e-016	2.794862839020809e+000
5	-3.677832437724272e-015	1.906969305992230e+000
6	-3.715390588966452e-015	3.672845071577098e+000
7	8.828085658461809e-016	3.633870332682200e+000
8	4.249360218087673e-015	3.062215393663627e+000
9	1.257250995646205e-014	4.899505423377805e+000
10	-5.929271597257004e-015	3.983653437783731e+000
11	-1.146642129830572e-014	4.414926594667138e+000
12	-2.135682183803728e-015	5.751715119741059e+000
13	6.821602902206911e-016	5.077190186565195e+000
14	-1.317395155575871e-015	8.271225689356246e+000
15	-2.219880409917253e-016	9.373407247647256e+000
16	3.851111681070184e-015	9.478963098982318e+000
17	1.797853119863363e-014	9.002670623395042e+000
18	4.894612243929447e-015	7.563837804397767e+000
19	-2.314560509830965e-014	1.114550235846500e+001
20	-1.640562296415852e-014	1.096686292865722e+001
21	7.217769568245913e-015	1.095558377516631e+001
22	1.830452288946646e-014	1.013042842748381e+001
23	7.828675105917323e-015	1.111617193840645e+001
24	-8.382069968886279e-015	1.391924630181286e+001
25	-1.086383172248903e-014	1.111822146599663e+001
26	1.970429526380927e-014	1.237303472205406e+001
27	4.368530904574543e-014	1.283689255556898e+001
28	1.228589451055778e-015	1.437155771830255e+001
29	-2.366323386617825e-014	1.289521697596426e+001
30	-4.669556411293712e-014	1.276972591512300e+001
98	-1.924379883088209e-013	4.673724670355544e+001
99	-4.664951890954490e-014	4.712032125211145e+001
100	3.360980972862513e-014	4.640028686649814e+001
199	-1.094188663259730e-013	9.692081156411248e+001
200	-1.056394563658011e-013	9.666260927709189e+001

Tablo 5: $w(x) = |x|^{1/2} \exp(-x^2)\cos^2(x)$ ağırlık fonksiyonuna göre Algoritma* kullanılarak elde edilen α_k, β_k katsayıları

k	α_k **katsayıları**	β_k **katsayıları**
0	3.233308720410205e-016	6.891181718840643e-001
1	3.735242317231354e-016	3.558099189055250e-001
2	1.163349978566453e-015	8.835018076309857e-001
3	-3.753214462925855e-015	3.128016258375786e+000
4	-2.263097883367255e-015	2.294819245376246e+000
5	-4.661007072031554e-015	2.218990118107498e+000
6	-2.055277050784289e-015	3.957658885997895e+000
7	-4.191516766282360e-015	3.340571235790546e+000
8	3.357013861387249e-015	3.350820240295168e+000
9	7.618052218805332e-015	5.088711560482480e+000
10	-2.174927089143351e-015	3.650969611712423e+000
11	-4.432440123244982e-015	5.069557118664134e+000
12	-4.398230519538279e-015	5.420425281454653e+000
13	-1.401055971290932e-014	5.572405998243514e+000
14	-7.992122558258521e-015	8.986269746864096e+000
15	-3.026273632010612e-015	9.244193093789598e+000
16	1.972129040215906e-014	9.651388920132735e+000
17	1.776364504093290e-014	8.403770771761732e+000
18	-1.317451791447051e-014	8.059932835926777e+000
19	-1.528680176458050e-015	1.178737473272136e+001
20	3.910149078785695e-015	1.054781749529423e+001
21	1.716401938074332e-014	1.118125263074876e+001
22	-5.797044958590291e-015	9.701890415907309e+000
23	-2.123483616784812e-014	1.234308393311991e+001
24	8.868145565911109e-015	1.323902773743283e+001
25	6.197478140916911e-015	1.112388764991676e+001
26	-2.588685604065660e-015	1.263163892139305e+001
27	1.058154193817066e-014	1.309499787757256e+001
28	-5.450541326281024e-016	1.445669548767967e+001
29	-3.553363694606598e-014	1.230231500888141e+001
30	-2.605524600645244e-014	1.369802873818456e+001
98	-1.671233283894033e-013	4.665428339162560e+001
99	5.098380774261263e-014	4.693144520395063e+001
100	4.971340881278426e-015	4.694308869883511e+001
199	-7.593106736452344e-014	9.617623356698012e+001
200	3.920499242824957e-013	9.773920912587613e+001

SONUÇLAR

Bu çalışmada öncelikle verilen bir integralin değerini tam veya yaklaşık olarak hesaplamak için kullanılan nümerik integrasyon metotları tanıtılarak bunlarla ilgili özellikler ayrıntılı bir şekilde incelenmiştir. Ayrıca Gauss integrasyon metotlarının Hermite, Legendre, Laguerre, Chebyshev polinomları kullanılarak oluşturulan türleri verilmiştir.

Gauss integrasyon metodunu kullanarak en iyi yaklaşımı kaç nokta ile elde edeceğimizi bilmemekteyiz. Çünkü bu metodun hatasını pratik olarak hesaplamak oldukça zordur. Bu yüzden hatanın yaklaşık hesabı için farklı bir integrasyon metodu kullanılarak bu iki integrasyon ile bulunan sonuçlar arasındaki fark yaklaşık hata olarak kabul edilir. Bu ikinci metot için bu çalışmada Gauss-Kronrod ve Anti-Gauss integrasyon kuralları verilmiştir. Gauss-Kronrod her ağırlık fonksiyonu için mevcut değildir. Bu durumda Anti-Gauss kuralları kullanılır.

Bu çalışmanın asıl amacı farklı türden ağırlık fonksiyonları kullanılarak oluşturulacak ortogonal polinomların üç terimli yineleme bağıntısındaki katsayıların elde edilmesiydi. Bu katsayıların hesaplanması her ağırlık fonksiyonu için kolay değildir. Bu yüzden 4. bölümde bu katsayıların hesabı için farklı algoritmalar verilmiştir. Bu metotlar arasında diskritizasyon metodunun daha iyi sonuçlar verdiği örneklerden görülür.

5. bölümde ise özel olarak (5.1) ile verilen ağırlık fonksiyonuna göre oluşturulacak ortogonal polinomlarının üç terimli yineleme bağıntısındaki katsayılar hesaplanmış ve bu değerler kullanılarak Gauss integrasyon metotları oluşturulmuştur. Çeşitli fonksiyonlar ile Gauss integrasyon metotlarından elde edilen sonuçlar diskritizasyon metodunun yeterince iyi sonuçlar verdiğini göstermiştir. Bu sadece (5.1) de verilen ağırlık fonksiyonu için değil farklı ağırlık fonksiyonları için de kullanılabilir.

KAYNAKLAR

[1] Borges, C. F. , Gragg, W. B.(1993). A parellel divide and conguer algorithm for the generalized symmetric definite tridigional eigenvalue problem. in *Numerical Linear Algebra.* eds. Reichel, L. , Ruttan, A. , Varga, R.S. , de Gruyter, Berlin 11-29

[2] Bulirsch, R., Stoer, J. (2000). *Introduction to Numerical Analysis*. Berlin Heidelberg: Springer- Verlag

[3] Calio, F., Gautschi, W., and E. Marchetti (1986). On computing Gauss-Kronrod formulae. *Math. Comp.* **47**(176), 639-650

[4] Calvetti, D., Golub, G. H. Gragg, W. B. L. Reichel (1999). Computation of Gauss-Kronrod quadrature rules. *Math. Comp*., **69**(231), pp26-38

[5] Ehrich, S. (1994). Error bounds for Gauss-Kronrod quadrature formulae. *Math. Comp*., **62**, 295-304

[6] Ehrich, S. (2001). Quadrature and orthogonal polynomials. *J. Comput. Appl. Math*. **127**(1-2), 153-171

[7] Ehrich, S. (2002). On strafied extensions of Gauss-Laguerre and Gauss-Hermite quadrature formulas. *J. of Comput. Appl. Math*. **140**, 291-299

[8] Gautschi, W. (1982). On generating orthogonal polinomials. *SIAM J.Scient. Statist.Comput.* **3**, 289-317, MR 84e:65022

[9] Gautschi, W. (1988). Gauss-Kronrod quadrature-a survey, in *Numerical methods of approximation theory III*, eds. G.V. Milovanovic(Univ. Nis) 39-66

[10] Gautschi, W. (1994). Algorithm 726: ORTHPOL a package of routines for

generating orthogonal polynomials and Gauss-type quadrature rules, *ACM Trans. Math.* Software **20**, 21-62

[11] Gautschi, W. (1999). Orthogonal Polynomials and Quadrature: *Electron. Trans. Numer. Anal.* **9**, 65-76

[12] Gautschi, W. (2002). The Interplay between classical analysis and (Numerical) Linear Algebra – A Tribute to Gene H. Golub: *Electron. Trans. Numer. Anal.* **13**, 119-147

[13] Gautschi, W. (2004). *Orthogonal polynomials applications and computation*.,Oxford University Press

[14] Gragg, W. B., W. J. Harrod (1984). The numerically stable reconstruction of Jacobi matrices from spectral data. *Numer. Math.,* **44**(3), 37-335,

[15] Golub, G. H., J. Kautsky (1983). Calculation of Gauss quadratures with multiple free and fixed knots. *Numer. Math.***,** **41**, 147-163

[16] Hascelik, A. Ihsan, On modified Anti-Gauss rules for generalized Hermite measure. to appear.

[17] Hascelik, A. Ihsan, *Introduction to numeric integration.* to appear.

[18] Kronrod A. S. (1965). *Nodes and weights of quadrature formulas*.Sixteen-place tables. Newyork: Consultants Bureau

[19] Laurie, P. D. (1985). Practical error estimation in numerical integration. *J. Comput. Appl. Math.* **12-13**, 425-431

[20] Laurie, P. D. (1996). Anti-Gaussian quadrature formulas. *Math. Comp*., **65** (214), 739-747

[21] Laurie, P. D. (1997). Calculation of Gauss-Kronrod Quadrature Rules.

Math. Comp., **66** (219), 1133-1145

[22] Milonovic, G. V., A. S. Cvetkovic (2000). Numerical construction of the generalized Hermite polynomials.

[22] Monegato, G. (1982). Stieltjes polynomials and related quadrature rules, *SIAM* Rev **24**, 137-158

[23] Monegato, G. (2001). An overview of the computational aspects of Kronrod quadrature rules (Survey Paper). *Numerical Algorithms,* **26**, 173-196

[24] Patterson, T. N. L (1993). Modified optimal quadrature extensions. *Numer. Math*., **60**, 511-520

[25] Patterson, T. N. L (1999). Strafied nested and related quadrature rules, *J.Comput. Appl. Math*., **112**, 243-251

[26] Peherstorfer, F. (1990). On Stieltjes polynomials and Gauss-Kronrod quadrature. *Math.Comp,*. **55**, pp649-664

[27] Piessens, R., M. Branders (1974). A note on the optimal addition of abscissas to quadrature formulas of Gauss and Lobatto type. *Math. Comp*. **28**(125) 135-139

[28] Rutishauser, H. (1963).On Jacobi rotation patterns *Proc. Sympos. Appl. Math*.,**15**, 219-239

[29] Salzer, H. E. (1973). A recurrence scheme for converting from one orthogonal expansion into another, *Comm. ACM*.**16**, 705-707,M52:15956

[30] Szegö, G. (1975). *Orthogonal Polynomials*, 4th ed., Amer. Math. Soc.