

BÖLÜM 3

SAYISAL TÜREV VE İNTEGRAL

3.1 Bilgisayarla türev

3.1.1 Bölünmüş fark tablolarıyla türev

3.1.2 Eşit aralıklı veri noktaları için türev

3.1.3 Eşit aralıklı veri noktaları için veri noktalarında türev

3.1.4 Yüksek mertebeden türevler

3.2 Sayısal integral

3.2.1 Trapez kuralı

3.2.3 Romberg integrasyonu

3.2.4 Bir veri seti için Romberg integrasyonu

3.2.5 Simpson kuralı

3.2.6 İntegral formüllerinin farklı bir yoldan elde edilmesi

3.2.7 Gauss kuadratürü

3.2.8 Çok-katlı integraller

BÖLÜM 3

SAYISAL TÜREV VE İNTEGRAL

3.1 Bilgisayarla türev

Bir $f(x)$ fonksiyonunun $x=a$ noktasındaki türevi

$$\left(\frac{df}{dx}\right)_a = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(a + \Delta x) - f(a)}{\Delta x} \quad (3.1)$$

şeklinde tanımlanır. Aynı türev bilgisayar yardımıyla yaklaşık olarak

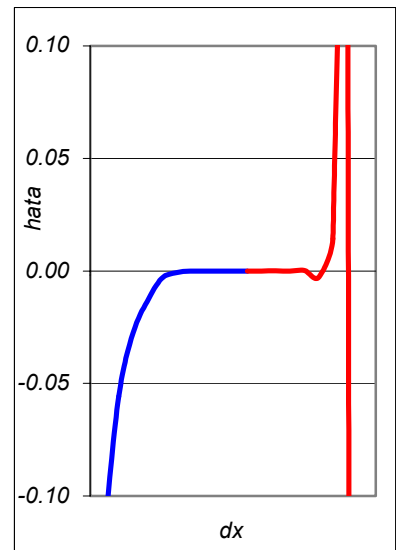
$$\left(\frac{df}{dx}\right)_a \approx \frac{f(a + \Delta x) - f(a)}{\Delta x} \quad (3.2)$$

şeklinde hesaplanabilir. Türevin bilgisayarla hesaplanan değerinin gerçeğe ne kadar yakın olduğu Δx 'in hangi büyüklükte seçildiğine bağlıdır. Türevdeki hata, Δx küçüldükçe önce azalacak, ancak bir süre sonra yuvarlatma hataları önemli olmaya başlayınca artmaya başlayacaktır.

Örnek

$f(x) = e^x \sin x$ fonksiyonunun $x=1.9$ 'daki değerini inceleyelim. Fonksiyonun türevi $f'(x) = e^x (\sin x + \cos x)$ olup bu noktadaki gerçek değeri $f'(1.9) = 4.1653826$ dir. Aşağıdaki tabloda EXCEL programıyla yapılmış hesaplama sonuçları yer almaktadır. Burada türevin sayısal hesabında ileri fark formülü kullanılmış olup, geri fark formülü uygulandığında benzeri sonucu elde etmek mümkündür.

dx	f'(x)	Hata	Hata oranı
0.05	4.05010	-1.153E-01	
0.05 / 2	4.10956	-5.582E-02	2.1
0.05 / 4	4.13792	-2.746E-02	2.0
0.05 / 8	4.15176	-1.362E-02	2.0
0.05 / 32	4.16200	-3.384E-03	4.0
0.05 / 128	4.16454	-8.448E-04	4.0
0.05 / 1024	4.16528	-1.055E-04	8.0
0.05 / 8192	4.16537	-1.319E-05	8.0
0.05 / 65536	4.16538	-1.647E-06	8.0
0.05 / 524288	4.16538	-2.027E-07	8.1
0.05 / 4194304	4.16538	-4.439E-08	4.6
0.05 / 33554432	4.16538	-1.934E-07	
0.05 / 268435456	4.16539	4.575E-06	
0.05 / 2147483648	4.16538	-1.934E-07	
0.05 / 17179869184	4.16565	2.668E-04	
0.05 / 137438953472	4.16260	-2.785E-03	
0.05 / 1099511627776	4.17969	1.430E-02	
0.05 / 8796093022208	4.37500	2.096E-01	
0.05 / 70368744177664	0.00000	-4.165E+00	



Burada Δx büyüklüğünün ilk değeri 0.05 alınmış, ikinci, üçüncü ve dördüncü değerleri bir önceki değerlerin yarısı, beşinci ve altıncı değerleri bir önceki değerlerin dörtte biri ve daha sonraki değerleri de bir önceki değerlerin 8 de biri olarak alınmıştır.

Bu tabloya göre Δx küçüldükçe beklendiği gibi türevdeki hata önce azalmakta, ancak Δx 'in belli bir değerinden ($0.05/4194304$) sonra artmaktadır. Bu değere kadar hatadaki küçülme oranı yaklaşık olarak Δx 'in küçülme oranı civarındadır.

Sayısal türevin bu şekilde birinci dereceden bölünmüş farklarla hesaplanması sırasında ortaya çıkan hataların belli oranlarda değişmesi tesadüfi değildir. Bunu daha kolay görmek için Δx yerine h olarak Taylor serisi açılımını

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(\xi)h^2}{2}$$

şeklinde yazalım. Buradaki sonuncu terim hata terimi olup, $x < \xi < x+h$ dir. Bu ifade $f'(x)$ için çözümlerse

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{f''(\xi)h}{2} \quad (3.4)$$

buradaki ilk terimin sayısal türev için kullanılan ileri fark formülü olduğu, ikinci terimin ise sayısal türev alınırken yapılan hata olduğu söylenebilir. Görüldüğü gibi hata terimi h ile orantılıdır. Mertebe açısından düşünülürse hata $O(h)$ mertebesindedir.

Yukarıdaki incelemeler $f(x-h)$ Taylor serisi için tekrarlanırsa

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \frac{f''(\xi)h}{2} \quad (3.5)$$

Burada $x-h < \xi < x$ olup, bu haldeki hata teriminin öncekiyle özdeş olduğu söylenemez.

Şimdi aynı Taylor açılımları bir üst mertebeden terime kadar sırasıyla

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)h^2}{2} + \frac{f'''(\xi)h^3}{6}$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{f''(x)h^2}{2} - \frac{f'''(\xi)h^3}{6}$$

şeklinde yazılıp yine birinci türev bu ifadelerden sırasıyla

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{f''(x)h}{2} - \frac{f'''(\xi)h^2}{6}$$

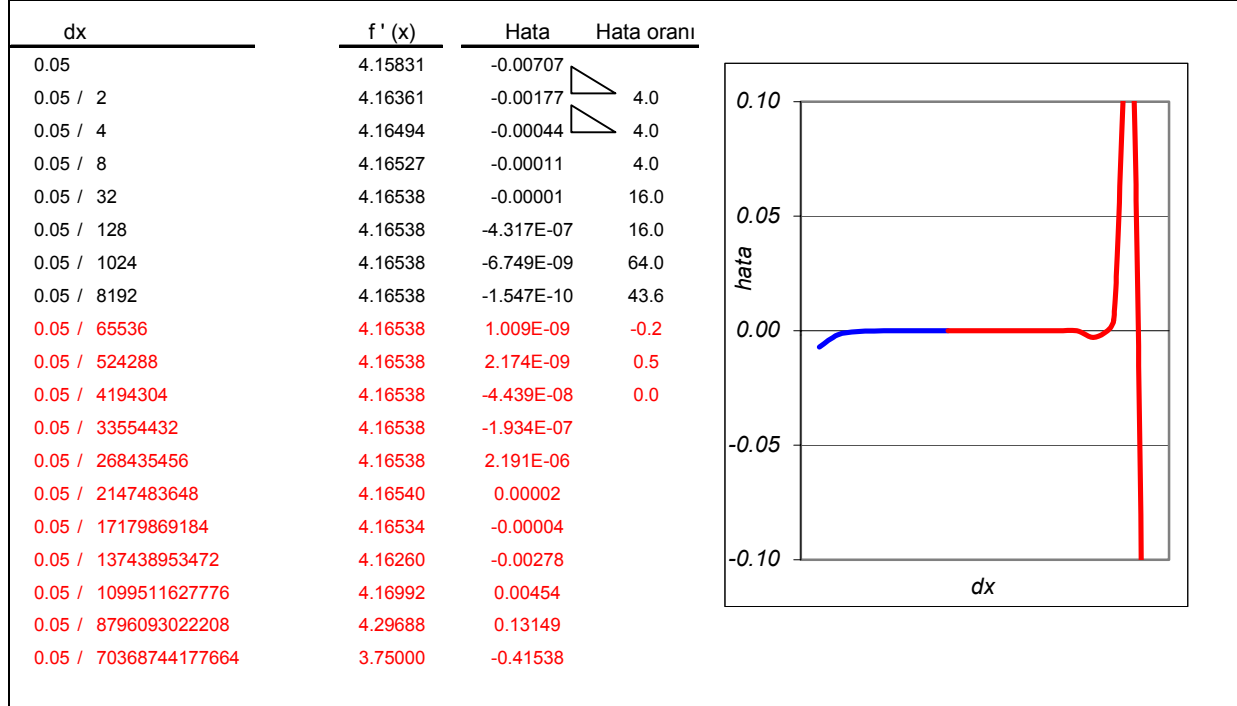
$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \frac{f''(x)h}{2} - \frac{f'''(\xi)h^2}{6}$$

şeklinde çekilerek bu iki ifadenin de aritmetik ortalaması alınırsa

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{f'''(\xi)h^2}{6} \quad (3.6)$$

elde edilir. Burada sağdaki ilk terim türevin merkezi farklarla sayısal yaklaşımını ifade etmektedir. İkinci terim de hatayı belirtmekte olup hata $O(h^2)$ mertebesindedir.

Bu incelemenin sonucu türev merkezi fark formülasyonunun daha iyi olduğunu göstermektedir. Nitekim yukarıdaki örnek fonksiyon için merkezi farklarla alınan türevler için bulunan hatalar aşağıda tablolanmış olup, sayısal türev almak için aynı miktarda hesap yapılmasına karşılık küçülen Δx lerle birlikte hatanın daha çabuk küçüldüğü görülmektedir. Örneğin Δx iki kat küçüldüğünde hata 4 kat küçülmeğe, Δx 4 kat küçülürken hata 16 kat küçülmeğe, Δx sekiz kat küçülürken hata 64 kat küçülmeğedir.



Bütün bu incelemeler interpolasyon yaparken veri noktalarının, interpolasyon noktası bunların orta bölgesinde yer alacak biçimde seçilmesinin uygun olduğunu anımsatmaktadır.

Elde edilen sonuçlar ayrıca türev için ortalama değer teoremine de uymaktadır:

$$\frac{f(b)-f(a)}{b-a} = f'(\xi), \quad a < \xi < b$$

$f'(x)$ türevinin değerini

- ileri fark yaklaşımı x ve $x+h$ noktaları arasındaki
- geri fark yaklaşımı $x-h$ ve x noktaları arasındaki
- merkezi fark yaklaşımı $x-h$ ve $x+h$ noktaları arasındaki

bir noktada vermektedir. Fonksiyon x noktası civarında anormal bir değişim göstermedikçe türevin hesaplandığı noktalar sırasıyla $x+h/2$, $x-h/2$ ve x noktasına yakındır.

Yukarıdaki incelemeler için seçilen örnekte bilinen bir fonksiyon kullanılmış olup bu fonksiyonun değeri istenilen noktalarda hesaplanabilmektedir. Genel olarak türevin doğru hesaplanabilmesi için fonksiyonun birbirine yakın noktalardaki değerlerinden yararlanılması gerektiği sonucu ortaya çıkmıştır.

Ancak pratikteki sayısal problemlerde çoğu zaman veri noktaları birbirine bu kadar yakın değildir. Bu bakımdan birinci mertebeden farklarla yapılan türev hesaplamaları o kadar doğru sonuç vermeyecektir. O halde pratikteki sayısal türev hesaplamalarında daha yüksek mertebeden fark formülasyonlarının kullanılması gerekir.

3.1.1 Bölünmüş fark tablolarıyla türev

Sayısal türev almanın bir yolu interpolasyonda olduğu gibi veri setine polinomsal yaklaşımla uydurulmuş olan bir fonksiyonun türevinden yararlanmaktır. Bunu, veri eşit aralıkla dağılmışsa basit farklar, aksi halde bölünmüş farklar yardımıyla yapmak mümkündür.

Bir fonksiyonun n 'inci dereceden bölünmüş farklar polinomuyla

$$f(x) = P_n(x) + Hata = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \dots + f[x_0, x_1, x_2, \dots, x_n] \prod_{i=0}^{n-1} (x - x_i) + Hata \quad (3.7)$$

şeklinde ifade edilebileceği daha önce gösterilmişti. Bölünmüş fark polinomunun türevi alınarak

$$P_n'(x) = f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2][(x - x_0) + (x - x_1)] + \dots + f[x_0, x_1, x_2, \dots, x_n] \sum_{i=0}^{n-1} \left[\prod_{\substack{k=0 \\ k \neq i}}^{n-1} (x - x_k) \right] \quad (3.8)$$

elde edilir. $P_n(x)$ fonksiyonundaki hata terimi de

$$Hata = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \quad (3.9)$$

şeklinde olup, türevdeki hatayı bulmak için bu son ifadenin türevini almak gerekir. Ancak bu ifadenin türevinde ortaya çıkacak olan

$$\frac{d}{dx} [f^{(n+1)}(\xi)]$$

terimi, ξ büyüklüğünün x e bağlı olması nedeniyle türevin alınmasını imkansız kılar. Bununla birlikte x büyüklüğü $x=x_j$ şeklinde veri noktalarından biri ile çakışık alınırsa türevdeki hata

$$Hata = \left[\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n (x_i - x_j) \right] \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}, \quad x_0 < \xi < x_n \quad (3.10)$$

şeklinde elde edilebilir. Görüldüğü gibi türev noktası veri noktasıyla çakışık olmasına, yani interpolasyon fonksiyonu bu noktada $f(x)$ fonksiyonuna uymasına rağmen hata sıfır değildir. Bununla birlikte veri noktasındaki türevin hatası ara noktadakinin daha küçük olacaktır.

Örnek:

Bir önceki örnekte ele alınan $f(x) = e^x \sin x$ fonksiyonunun çeşitli x noktalarındaki değerleri ve bölünmüş farkları aşağıdaki tabloda yer almaktadır.

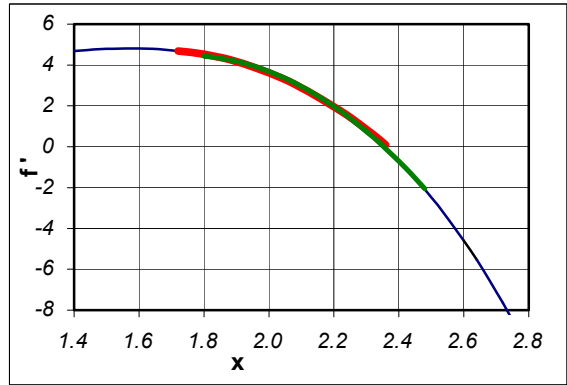
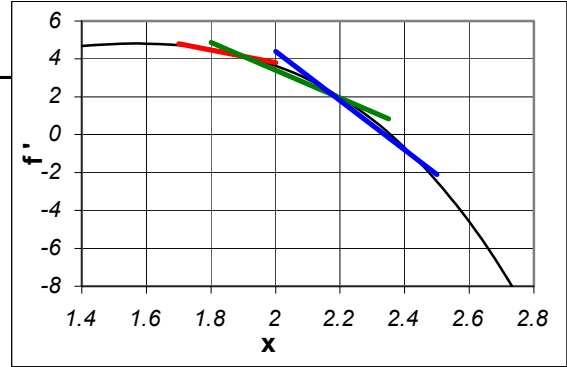
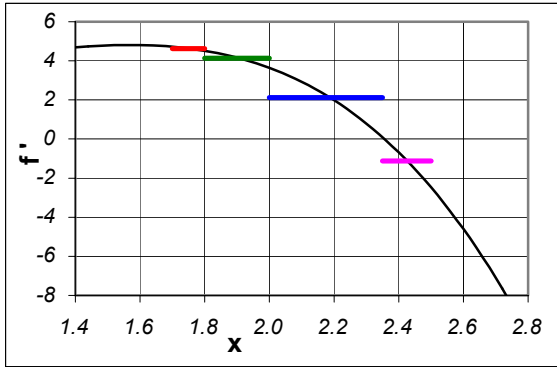
Hatırlanırsa birinci dereceden bölünmüş farklar

$$f[x_i, x_{i+1}] = \frac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i}$$

şeklinde ileri doğru hesaplanmakta olup, tabloda birinci bölünmüş fark sütununda yer alan değerler hizalarında buldukları x noktalarındaki $f'(x)$ türevleri için yapılmış tahminlerdir.

Fonksiyonun *gerçek türevi* aşağıdaki şekillerde *sürekli eğrilerle* belirtilmiş olup, ilk grafikte türevlerin birinci farklarla hesaplanan değerleri de yatay doğru parçalarıyla belirtilmiştir. Doğru parçaları bu türevlerin hesaplanmasında kullanılan x değerleri ile sınırlandırılmıştır. Yani örneğin $x=2.00$ ve $x=2.35$ veri noktaları arasındaki birinci farkla hesaplanan $f'(x)=2.1182$ türev değeri x 'in belirtilen iki değeri arasında bir yatay doğru parçasıyla gösterilmiştir.

i	x_i	f_i	$f[x_i, x_{i+1}]$	$f[x_i, \dots, x_{i+2}]$	$f[x_i, \dots, x_{i+3}]$	$f[x_i, \dots, x_{i+4}]$
0	1.70	5.4283	4.6311	-1.6469	-3.1137	-1.1492
1	1.80	5.8914	4.1371	-3.6708	-4.0331	
2	2.00	6.7188	2.1182	-6.4939		
3	2.35	7.4602	-1.1288			
4	2.50	7.2909				



(3.8) denkleminin ilk iki terimi kullanılarak türevler ikinci mertebeden bir yaklaşımla

$$P_2'(x) = f[x_i, x_{i+1}] + f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] [(x - x_{i+1}) + (x - x_i)] \quad (3.11)$$

şeklinde elde edilebilir. Bu ifade, ikinci dereceden bölünmüş farkların hesaplanmasında kullanılan iki uç noktasında değerleri

$$P_2'(x_i) = f[x_i, x_{i+1}] + f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] [x_i - x_{i+1}]$$

$$P_2'(x_{i+2}) = f[x_i, x_{i+1}] + f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] [(x_{i+2} - x_{i+1}) + (x_{i+2} - x_i)]$$

olan bir doğru parçasının denklemdir. Çeşitli aralıklar için elde edilen doğru parçaları yukarıdaki ikinci eğride fonksiyonun gerçek birinci türev eğrisiyle birlikte gösterilmiştir.

(3.8) denkleminin üç terimi alındığı takdirde türev için

$$P_3'(x) = f[x_i, x_{i+1}] + f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] [(x - x_{i+1}) + (x - x_i)] + f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3}] [(x - x_{i+1})(x - x_{i+2}) + (x - x_i)(x - x_{i+2}) + (x - x_i)(x - x_{i+1})] \quad (3.12)$$

elde edilir. Dört veri noktasının kullanıldığı bu bağıntı ikinci dereceden bir polinom olup $x_0 \div x_3$ noktaları arasında

$$P_3'(x) = f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2][(x - x_1) + (x - x_0)] \\ + f[x_0, x_1, x_2, x_3][(x - x_1)(x - x_2) + (x - x_0)(x - x_2) + (x - x_0)(x - x_1)]$$

ve $x_1 \div x_4$ noktaları arasında da

$$P_3'(x) = f[x_1, x_2] + f[x_1, x_2, x_3][(x - x_2) + (x - x_1)] \\ + f[x_1, x_2, x_3, x_4][(x - x_2)(x - x_3) + (x - x_1)(x - x_3) + (x - x_1)(x - x_2)]$$

şeklini alır. Bu fonksiyonlar da geçerli oldukları aralık için hesaplanarak üçüncü şekilde gerçek türev fonksiyonuna ait eğriyle karşılaştırılmıştır. Üç terim kullanılması halinde sayısal türevlerin gerçek türev değerlerine ne kadar yakın olduğu dikkati çekicidir.

Şayet ileri fark kullanarak bir veri setinin son noktaları civarında türev hesaplanmak istenirse interpolasyonda olduğu gibi polinomun derecesini düşürmek gerekecektir. Bu sorunu gidermenin yolu türev noktasına en yakın (ilerisinde veya gerisinde) noktaları sıralayarak işlem yapmaktır.

3.1.2 Eşit aralıklı veri noktaları için türev

Veri noktalarının eşit aralıklı dağılması halinde bölünmüş farklar yerine basit farklar kullanarak türev almak mümkündür.

Basit farklar kullanan bir interpolasyon polinomu

$$f(x) = P_n(s) + Hata \\ = f_i + s \Delta f_i + \frac{s(s-1)}{2!} \Delta^2 f_i + \frac{s(s-1)(s-2)}{3!} \Delta^3 f_i + \dots + \prod_{j=0}^{n-1} (s-j) \frac{\Delta^n f_i}{n!} + Hata \quad (3.13)$$

şeklinde yazılabilir. Burada

$$s = \frac{x - x_i}{h}; \quad h = \Delta x$$

$$Hata = \left[\prod_{j=0}^n (s-j) \right] \frac{\Delta^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}, \quad x_0 < \xi < x_n \quad (3.14)$$

dır. (3.13) ifadesinden türev alınarak

$$P_n'(s) = \frac{dP_n(s)}{dx} = \frac{dP_n(s)}{ds} \frac{ds}{dx} = \frac{1}{h} \left\{ \Delta f_i + \sum_{j=2}^n \left[\sum_{k=0}^{j-1} \left\{ \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq k}}^{j-1} (s-l) \right\} \frac{\Delta^j f_i}{j!} \right] \right\} \quad (3.15)$$

elde edilir. Burada hata terimi yine bilinmeyen bir büyüklük içermekte olup, (3.14) hata teriminin türevi ancak veri noktalarındaki ($x=x_i, s=0$) türevler için

$$Hata = \frac{(-1)^n h^n}{n+1} f^{(n+1)}(\xi), \quad x_0 < \xi < x_n \quad (3.16)$$

şeklinde hesaplanabilir.

3.1.3 Eşit aralıklı veri noktaları için veri noktalarında türev

Türevin veri noktalarında hesaplanması istendiği takdirde

$$s = \frac{x_i - x_{i-1}}{h} = 0$$

olup basit fark formülü daha da basitleşir:

$$f'(x_i) = \frac{1}{h} \left\{ \Delta f_i - \frac{\Delta^2 f_i}{2} + \frac{\Delta^3 f_i}{3} - \dots + (-1)^{n-1} \frac{\Delta^n f_i}{n} \right\} \quad (3.17)$$

Bu durumda hata mertebesini de, seçilen mertebeye bakarak bir sonraki terim yardımıyla kolaylıkla tespit etmek mümkündür. Örneğin yukarıdaki bağıntıda sadece ilk terim alınarak türev hesaplanırsa

$$f'(x_i) = \frac{1}{h} \left\{ \Delta f_i - \frac{1}{2} h f''(\xi) \right\}$$

olup hata $O(h)$ mertebesinde, iki terim alınması halinde

$$f'(x_i) = \frac{1}{h} \left\{ \Delta f_i - \frac{\Delta^2 f_i}{2} + \frac{1}{3} h f'''(\xi) \right\}$$

olup hata $O(h^2)$ mertebesinde, n adet terim alınması halinde ise hatanın $O(h^n)$ mertebesinde olacağı söylenebilir.

3.1.4 Yüksek mertebeden türevler

İkinci veya daha yüksek mertebeden türevler hesaplanmak istendiğinde normal olarak (3.8) veya (3.15) bağıntılarının türevleri kullanılabilir. Ancak bu yolla elde edilecek türev formülleri hayli karmaşık ve bilgisayar uygulaması zor olacaktır.

Burada daha pratik bir yöntem, kolay anlaşılması açısından eşit aralıklı nokta dağılımı hali için incelenecektir. Bu amaçla

$$\begin{array}{ll} x_- = x_0 - h & f_- \\ x_0 & f_0 \\ x_+ = x_0 + h & f_+ \end{array}$$

şeklinde tanımlanan eşit aralıklı üç veri noktasını ele alalım ve bu üç nokta yardımıyla $f'(x_0)$ türevini hesaplamaya çalışalım.

Eksen takımı $x_0=0$ noktasına çekilerek formülasyon daha basit bir hale getirilebilir. Böylece x değerleri sırasıyla $-h$, 0 ve $+h$ olur.

$f(x)$ fonksiyonuna bir yaklaşım olarak bu üç noktadan bir $P(x)$ parabolü geçirilirse, parabolün $P'(x)$ türevi de fonksiyonun $f'(x)$ türevinin yaklaşımı olur.

Türevin değeri $x=0$ noktasında aranmakta olup, bu türev veri noktalarındaki fonksiyon değerlerine

$$f'(0) \approx P'(0) = A \cdot f_- + B \cdot f_0 + C \cdot f_+ \quad (3.18)$$

şeklinde bağlanabilir. Burada A , B ve C bilinmeyen katsayılarıdır. Ayrıca $P(x)$ parabolü için

$$P(x) = ax^2 + bx + c \quad \rightarrow \quad P'(x) = 2ax + b$$

yazılabilir. Şimdi $P(x)$ fonksiyonunun üç farklı durumu için $P'(0)$ 'a ait (3.18) bağıntısını inceleyelim.

1. Durum: $P(x)=1$

yaklaşım fonksiyonunun değeri bütün noktalarda aynı olup

$$P(x) = 1 \quad \rightarrow \quad \begin{aligned} a = 0, \quad b = 0, \quad c = 1 &\rightarrow P'(0) = 0 \\ f_- = 1, \quad f_0 = 1, \quad f_+ = 1 & \end{aligned}$$

bu büyüklükler (3.18) de kullanılarak

$$A \cdot 1 + B \cdot 1 + C \cdot 1 = 0$$

2. Durum: $P(x)=x$

yaklaşım fonksiyonu lineer bir değişme göstermekte olup

$$P(x) = x \quad \rightarrow \quad \begin{aligned} a = 0, \quad b = 1, \quad c = 0 &\rightarrow P'(0) = 1 \\ f_- = h, \quad f_0 = 0, \quad f_+ = h & \end{aligned}$$

bu büyüklükler (3.18) de kullanılarak

$$A \cdot (-h) + B \cdot 0 + C \cdot h = 1$$

3. Durum: $P(x)=x^2$

yaklaşım fonksiyonu parabolik bir değişme göstermekte olup

$$P(x) = x^2 \quad \rightarrow \quad \begin{aligned} a = 1, \quad b = 0, \quad c = 0 &\rightarrow P'(0) = 0 \\ f_- = h^2, \quad f_0 = 0, \quad f_+ = h^2 & \end{aligned}$$

bu büyüklükler (3.18) de kullanılarak

$$A \cdot h^2 + B \cdot 0 + C \cdot h^2 = 0$$

elde edilen üç denklem matris formda yazılırsa

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -h & 0 & h \\ h^2 & 0 & h^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} A \\ B \\ C \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix}$$

Buradaki üçüncü denklemden

$$A = -C$$

Bu bilgi kullanılarak ikinci denklemden

$$A = -\frac{1}{2h}, \quad C = \frac{1}{2h}$$

Ve birinci denklemden

$$B = 0$$

elde edilir. Bulunan katsayılar kullanılarak (3.18) bağıntısı

$$f'(0) = -\frac{1}{2h} f_- + 0 \cdot f_0 + \frac{1}{2h} \cdot f_+ \quad \rightarrow \quad \boxed{f'(0) = \frac{f_+ - f_-}{2h}} \quad (3.19)$$

şekline gelir. Bu bağıntı, beklendiği gibi türev için merkezi bölünmüş farklar formülüdür.

Benzeri işlemler ikinci türev için de yapılabilir.

$$f''(0) \approx P''(0) = A \cdot f_- + B \cdot f_0 + C \cdot f_+ \quad (3.20)$$

$$P(x) = ax^2 + bx + c \quad \rightarrow \quad P''(x) = 2a$$

Yukarıdaki durumlar tekrar incelenerek

$$P(x) = 1 \quad \rightarrow \quad \begin{array}{l} a = 0, \quad b = 0, \quad c = 1, \quad P''(0) = 0 \\ f_- = 1, \quad f_0 = 1, \quad f_+ = 1 \end{array} \quad \rightarrow \quad A \cdot 1 + B \cdot 1 + C \cdot 1 = 0$$

$$P(x) = x \quad \rightarrow \quad \begin{array}{l} a = 0, \quad b = 1, \quad c = 0, \quad P''(0) = 0 \\ f_- = -h, \quad f_0 = 0, \quad f_+ = h \end{array} \quad \rightarrow \quad A \cdot (-h) + B \cdot 0 + C \cdot h = 0$$

$$P(x) = x^2 \quad \rightarrow \quad \begin{array}{l} a = 1, \quad b = 0, \quad c = 0, \quad P''(0) = 2 \\ f_- = h^2, \quad f_0 = 0, \quad f_+ = h^2 \end{array} \quad \rightarrow \quad A \cdot h^2 + B \cdot 0 + C \cdot h^2 = 2$$

denklemler matris formda yazılırsa

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -h & 0 & h \\ h^2 & 0 & h^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} A \\ B \\ C \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \end{Bmatrix}$$

bulunur. Buradaki ikinci denklemden

$$A = C$$

bu bilgi kullanılarak üçüncü denklemden

$$A = C = \frac{1}{h^2}$$

birinci denklemden

$$B = -\frac{2}{h^2}$$

ve bu katsayılar kullanılarak ikinci türev için

$$\boxed{f''(0) = \frac{f_- - 2f_0 + f_+}{h^2}} \quad (3.21)$$

elde edilir. Bu hesaplamadaki hatanın $O(h^2)$ mertebesinde olduğu gösterilebilir.

Herhangi bir x_0 noktası için daha fazla nokta kullanarak benzeri işlemler yapılırsa

$$\boxed{f''(x_0) = \frac{-f_2 + 16f_1 - 30f_0 + 16f_{-1} - f_{-2}}{12h^2} + O(h^2)}$$

$$\boxed{f'''(x_0) = \frac{f_2 - 2f_1 + 2f_{-1} - f_{-2}}{2h^3} + O(h^2)}$$

$$\boxed{f''(x_0) = \frac{f_2 - 4f_1 + 6f_0 - 4f_{-1} + f_{-2}}{h^4} + O(h^2)}$$

olduğu gösterilebilir.

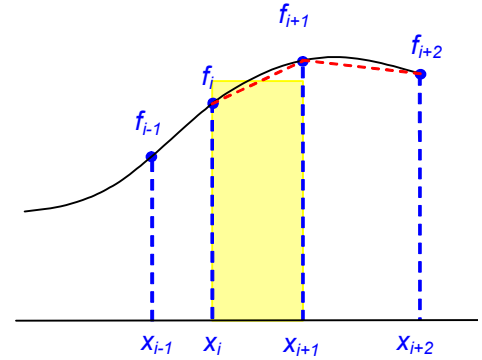
3.2 Sayısal integral

Belirli integral iki sınır noktası arasında bir eğrinin altında x eksenine arasında kalan alan olarak bilinir. Sayısal integral teknikleri de genel olarak bu hususun üzerine oturur. $x=a$ ve $x=b$ gibi iki sınır arasında kalan bölge küçük şeritlere ayrılır ve bu şeritlerin alanları toplanarak integral değeri elde edilir.

3.2.1 Trapez kuralı

Bir $f(x)$ eğrisi ile x eksenine arasında kalan alan küçük şerit bölgelere ayrıldığında eğrinin şeriti kestiği kısımdaki parçasına değişik yaklaşımlar yapmak mümkündür. Örneğin şerit bir dikdörtgen şeklinde kabul edilip dikdörtgenin üst köşelerinden birisi veya üst kenarının orta noktası eğri ile çakıştırılabilir.

Daha iyi bir yaklaşım eğri parçası yerine şerit kenarlarının eğriyi kestiği iki nokta arasında yer alan bir doğru parçası olarak şerit bölgeyi bir dik yamuk şeklinde kabul etmektir. Bu yaklaşım eğrinin birinci dereceden bir interpolasyon polinomu ile temsil edilmesi anlamına gelir.



Bu durumda x_i ve x_{i+1} noktaları arasındaki integral değeri

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \frac{f_{i+1} + f_i}{2} (x_{i+1} - x_i)$$

şeklinde hesaplanabilir.

Trapez kuralının hatasını bulmak için interpolasyon polinomlarından yararlanılabilir. Bu amaçla x_i ve x_{i+1} noktaları arasında birinci-dereceden Newton-Gregory interpolasyon polinomu hatırlanırsa

$$f(x) \approx P_1(x) = f_i + s \Delta f_i + \text{hata}$$

Burada $s = \frac{x - x_i}{h}$ ve $\text{hata} = s(s-1) \frac{h^2}{2} f''(\xi)$

$f(x)$ fonksiyonunun iki nokta arasındaki integralini $P_1(x)$ i integre ederek bulabiliriz.

$$\begin{aligned} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx &\approx \int_{x_i}^{x_{i+1}} P_1(x) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} (f_i + s \Delta f_i) dx = h \int_0^1 (f_i + s \Delta f_i) ds = h \left(f_i s + \frac{s^2}{2} \Delta f_i \right)_0^1 = h \left(f_i + \frac{\Delta f_i}{2} \right) \\ &= h \left(f_i + \frac{f_{i+1} - f_i}{2} \right) = \frac{h}{2} (f_i + f_{i+1}) \end{aligned}$$

Hata terimi de integre edilerek

$$\text{hata} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} s(s-1) \frac{h^2}{2} f''(\xi) dx = \frac{h^3}{2} f''(\xi) \int_0^1 s(s-1) ds = \frac{h^3}{2} f''(\xi) \left(\frac{s^3}{3} - \frac{s^2}{2} \right)_0^1 = \frac{h^3}{2} f''(\xi) \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2} \right)$$

$$hata = -\frac{h^3}{12} f''(\xi) = O(h^3)$$

bulunur.

$x=a$ ve $x=b$ gibi iki nokta arasında bir fonksiyonun integrali, bu aralık $\Delta x=h$ olmak üzere n adet küçük aralığa ayrılıp her bir aralıkta trapez kuralı uygulanarak

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^{n-1} (h/2)(f_i + f_{i+1}) = h (f_0/2 + f_1 + f_2 + \dots + f_{n-1} + f_n/2)$$

şeklinde alınabilir. Bu durumda hata da lokal hataların toplamına eşit olacaktır.

$$hata = -\frac{h^3}{12} [f''(\xi_1) + f''(\xi_2) + \dots + f''(\xi_n)]$$

Burada ξ_i lerin herbiri o indisle belirtilen aralığın içerisindeki bir noktadır. Şayet $f''(x)$ fonksiyonu $[a,b]$ aralığında sürekli ise bu aralıkta öyle bir ξ noktası vardır ki bu noktada $f''(\xi_i)$ lerin toplamı $f''(\xi)$ ye eşittir. Ayrıca $b-a=nh$ olup, buna göre

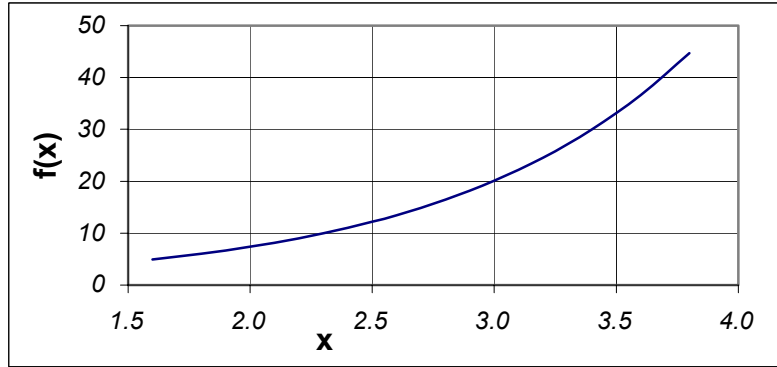
$$hata = -\frac{h^3}{12} n f''(\xi) = -\frac{b-a}{12} h^2 f''(\xi) = O(h^2)$$

elde edilir. Görüldüğü gibi lokal hatalar $O(h^3)$ mertebesinde iken toplam hata $O(h^2)$ mertebesinde dir.

Örnek:

Tabloda değerleri verilen fonksiyonu $x=1.8$ ile $x=3.4$ noktaları arasında integre ediniz.

x	f(x)
1.6	4.953
1.8	6.050
2.0	7.389
2.2	9.025
2.4	11.023
2.6	13.464
2.8	16.445
3.0	20.086
3.2	24.533
3.4	29.964
3.6	36.598
3.8	44.701



$$\int_a^b f(x) dx = 0.2(6.050/2 + 7.389 + 9.025 + \dots + 24.533 + 29.964/2) = 23.9944$$

Tablodaki değerler aslında $f(x) = e^x$ fonksiyonundan üretilmiş olup integralin gerçek değeri

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{1.8}^{3.4} e^x dx = e^{3.4} - e^{1.8} = 23.9144$$

olarak bulunabilir. Bu durumda trapez kuralına göre yapılan integrasyonun toplam hatası 0.08 olmaktadır. Aynı hata sayısal olarak tahmin edilirse:

$$hata = -\frac{h^3}{12}nf'''(\xi), \quad 1.8 \leq \xi \leq 3.4$$

$$hata = -\frac{(0.2)^3 \times 8}{12} \times \{(e^{3.4}) \div (e^{1.8})\} = \{(-0.1598) \div (-0.0323)\}$$

bulunur.

3.2.2 Eşit aralıklı olmayan veri noktaları hali

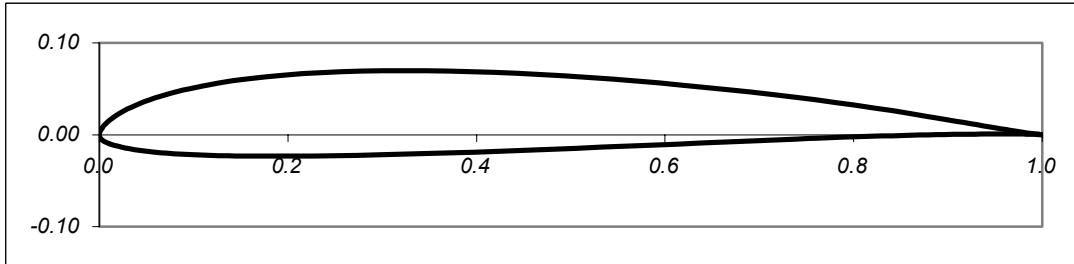
Özellikle deneysel çalışmalardan elde edilen veri noktaları eşit aralıklı değildir. Bu halde de trapez kuralını uygulamak mümkündür.

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{f_{i+1} + f_i}{2} (x_{i+1} - x_i)$$

Örnek:

Bir kanat profilinin alanını verilmiş nokta koordinatlarını kullanarak trapez kuralı yardımıyla hesaplayınız.

Burada örnek olarak aşağıda şekli görülen SD 7080 profili alınmış olup bu profilin verilmiş nokta koordinatları aşağıdaki tabloda soldaki sütunlarda yer almaktadır.



İntegral için iki farklı yol izlenmiş olup, birincisinde doğrudan profil koordinatları kullanılarak integral

$$\int_a^b y(x) dx = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{y_{i+1} + y_i}{2} (x_{i+1} - x_i)$$

şeklinde hesaplanmıştır. İkincisinde ise profil noktalarının x koordinatları için

$$x - x_{HK} = \frac{c}{2}(1 - \cos \theta), \quad c = x_1 - x_{HK}, \quad dx = \frac{c}{2} \sin \theta d\theta$$

değişken dönüşümü uygulanarak integral

$$\int_a^b y(x) dx = \frac{c}{2} \int_a^b y(\theta) \sin \theta d\theta = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{f_{i+1}(\theta) + f_i(\theta)}{2} (\theta_{i+1} - \theta_i)$$

şeklinde hesaplanmıştır.

SD7080 airfoil			chord = 0.99997					
i	x	y	Trapez integrali	$\cos \theta$	$\sin \theta$	θ	$y(\theta) \cdot \sin \theta$	Trapez integrali
0	1	0		-1.00000	0.00000	-3.14159	0.00000	
1	0.99671	0.00015	-0.0000002	-0.99342	-0.11453	-3.02681	-0.00002	0.00000
2	0.98689	0.00047	-0.0000030	-0.97378	-0.22750	-2.91209	-0.00011	-0.00001
3	0.97079	0.00076	-0.0000099	-0.94158	-0.33679	-2.79808	-0.00026	-0.00002
4	0.94871	0.00087	-0.0000180	-0.89742	-0.44118	-2.68468	-0.00038	-0.00004
5	0.92104	0.00069	-0.0000216	-0.84208	-0.53936	-2.57192	-0.00037	-0.00004
6	0.8882	0.00017	-0.0000141	-0.77639	-0.63025	-2.45972	-0.00011	-0.00003
7	0.85068	-0.00072	0.0000103	-0.70135	-0.71282	-2.34809	0.00051	0.00002
8	0.809	-0.00201	0.0000569	-0.61799	-0.78619	-2.23698	0.00158	0.00012
9	0.76376	-0.00366	0.0001283	-0.52751	-0.84955	-2.12646	0.00311	0.00026
10	0.71557	-0.00564	0.0002241	-0.43112	-0.90229	-2.01653	0.00509	0.00045
11	0.66505	-0.00783	0.0003403	-0.33008	-0.94395	-1.90718	0.00739	0.00068
12	0.61281	-0.01015	0.0004696	-0.22560	-0.97422	-1.79835	0.00989	0.00094
13	0.55945	-0.0125	0.0006043	-0.11887	-0.99291	-1.68995	0.01241	0.00121
14	0.50559	-0.0148	0.0007352	-0.01115	-0.99994	-1.58195	0.01480	0.00147
15	0.45183	-0.01696	0.0008537	0.09637	-0.99535	-1.47427	0.01688	0.00171
16	0.39877	-0.01891	0.0009516	0.20250	-0.97928	-1.36689	0.01852	0.00190
17	0.347	-0.02059	0.0010225	0.30604	-0.95202	-1.25977	0.01960	0.00204
18	0.2971	-0.02194	0.0010611	0.40584	-0.91394	-1.15290	0.02005	0.00212
19	0.24962	-0.02289	0.0010643	0.50081	-0.86556	-1.04627	0.01981	0.00213
20	0.20508	-0.02338	0.0010304	0.58989	-0.80749	-0.93988	0.01888	0.00206
21	0.16397	-0.02337	0.0009609	0.67211	-0.74045	-0.83374	0.01730	0.00192
22	0.12676	-0.02279	0.0008588	0.74653	-0.66535	-0.72796	0.01516	0.00172
23	0.09383	-0.02156	0.0007302	0.81239	-0.58311	-0.62255	0.01257	0.00146
24	0.06549	-0.01962	0.0005835	0.86908	-0.49468	-0.51746	0.00971	0.00117
25	0.04198	-0.01694	0.0004298	0.91610	-0.40096	-0.41256	0.00679	0.00087
26	0.02347	-0.01354	0.0002821	0.95312	-0.30260	-0.30742	0.00410	0.00057
27	0.01016	-0.00948	0.0001532	0.97974	-0.20028	-0.20164	0.00190	0.00032
28	0.00216	-0.00492	0.0000576	0.99574	-0.09221	-0.09234	0.00045	0.00013
HK	0.00003	0.00061	0.0000046	1.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00002
30	0.00322	0.00763	0.0000131	0.99362	0.11278	0.11302	0.00086	0.00005
31	0.01068	0.01558	0.0000866	0.97870	0.20530	0.20677	0.00320	0.00019
32	0.02237	0.02383	0.0002304	0.95532	0.29558	0.30006	0.00704	0.00048
33	0.03821	0.03203	0.0004424	0.92364	0.38327	0.39333	0.01228	0.00090
34	0.05814	0.03983	0.0007161	0.88378	0.46791	0.48692	0.01864	0.00145
35	0.0821	0.04699	0.0010401	0.83586	0.54895	0.58111	0.02580	0.00209
36	0.10996	0.05334	0.0013976	0.78013	0.62561	0.67592	0.03337	0.00280
37	0.14157	0.05875	0.0017716	0.71691	0.69716	0.77143	0.04096	0.00355
38	0.1767	0.06312	0.0021406	0.64665	0.76279	0.86761	0.04815	0.00429
39	0.21509	0.06641	0.0024863	0.56987	0.82174	0.96445	0.05457	0.00497
40	0.25644	0.06858	0.0027909	0.48716	0.87331	1.06196	0.05989	0.00558
41	0.3004	0.06966	0.0030385	0.39924	0.91685	1.16011	0.06387	0.00607
42	0.34656	0.06969	0.0032162	0.30692	0.95174	1.25884	0.06633	0.00643
43	0.39448	0.06871	0.0033161	0.21108	0.97747	1.35812	0.06716	0.00663
44	0.4437	0.0668	0.0033349	0.11263	0.99364	1.45792	0.06637	0.00666
45	0.49371	0.06404	0.0032717	0.01261	0.99992	1.55819	0.06403	0.00654
46	0.54399	0.06052	0.0031314	-0.08795	0.99612	1.65886	0.06029	0.00626
47	0.59402	0.05635	0.0029235	-0.18802	0.98217	1.75994	0.05535	0.00584
48	0.64326	0.05163	0.0026585	-0.28650	0.95808	1.86137	0.04947	0.00532
49	0.69117	0.04647	0.0023500	-0.38232	0.92403	1.96310	0.04294	0.00470
50	0.7372	0.04097	0.0020124	-0.47438	0.88032	2.06506	0.03607	0.00403
51	0.78084	0.03519	0.0016618	-0.56167	0.82736	2.16720	0.02911	0.00333
52	0.82169	0.02919	0.0013150	-0.64337	0.76556	2.26969	0.02235	0.00264
53	0.85943	0.02313	0.0009873	-0.71885	0.69516	2.37295	0.01608	0.00198
54	0.89372	0.01728	0.0006928	-0.78743	0.61640	2.47743	0.01065	0.00140
55	0.92413	0.01195	0.0004444	-0.84826	0.52959	2.58348	0.00633	0.00090
56	0.95018	0.00743	0.0002524	-0.90036	0.43515	2.69139	0.00323	0.00052
57	0.97133	0.00395	0.0001203	-0.94266	0.33376	2.80130	0.00132	0.00025
58	0.98701	0.00162	0.0000437	-0.97402	0.22647	2.91315	0.00037	0.00009
59	0.99671	0.00037	0.0000097	-0.99342	0.11453	3.02681	0.00004	0.00002
60	1	0	0.0000006	-1.00000	0.00000	3.14159	0.00000	0.00000
			0.0604433					0.06055

İki sonuç arasındaki farklılık ilk integralde hücum kenarı civarında trapez yaklaşımından meydana gelen kayıplardan kaynaklanmaktadır.

3.2.3 Romberg ekstrapolasyonu

Trapez kuralı ile alınan integraldeki hatayı Romberg ekstrapolasyon yöntemiyle azaltmak mümkündür.

Trapez yönteminde hata $O(h^2)$ mertebesinde olup, bir h değeriyle yapılan integral ile $h/2$ alınarak yapılan ikinci bir integralin sonuçları birleştirilerek integral için daha iyi bir tahmin yapılabilir:

$$\begin{pmatrix} \text{Daha} \\ \text{iyi} \\ \text{tahmin} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{Daha} \\ \text{doğru} \\ \text{integral} \end{pmatrix} + \frac{1}{2^n - 1} \left[\begin{pmatrix} \text{Daha} \\ \text{doğru} \\ \text{integral} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \text{Daha az} \\ \text{doğru} \\ \text{integral} \end{pmatrix} \right]$$

Bu yöntem bilinen bir $f(x)$ fonksiyonu için uygulanırken önce keyfi bir h değeri için integral alınır. Sonra h değerinin yarısı alınarak yeni bir integral hesabı yapılır. Bu iki integral sonucu yukarıdaki bağıntıda kullanılarak integral için hata mertebesi $O(h^4)$ olan daha iyi bir tahmin elde edilir.

Yapılan bu işlemler bir tabloda yerleştirilerek ardarda daha iyi integral tahminleri yapılabilir. Her bir ekstrapolasyon hatanın $O(h^4)$, $O(h^6)$, $O(h^8)$,... şeklinde azalmasını sağlar. Yakınsamaya bakılarak integral için optimum bir değer bulunabilir.

Adım uzunluğunun yarıya indirildiği her bir aşamada fonksiyonun bazı noktalardaki değeri bir önceki aşamada bilindiğinden bu noktalarda tekrar hesap yapmaya gerek yoktur.

Örnek:

$f(x)=e^{-x^2}$ fonksiyonunun $a=0.2$ ve $b=1.5$ noktaları arasındaki integralini Romberg yöntemini kullanarak hesaplayınız. Başlangıçtaki adım uzunluğunu $h = (b-a)/2 = 0.65$ olarak alınız.

İntegral için ilk tahmin

$$\int_a^b f(x) dx = h \left[\frac{f(a)}{2} + f(a+h) + \frac{f(b)}{2} \right]$$

$$= 0.65 \times \left[\frac{e^{-0.2^2}}{2} + e^{-0.85^2} + \frac{e^{-1.5^2}}{2} \right]$$

$$= 0.66211$$

İkinci tahminde adım uzunluğu $h = 0.65/2 = 0.325$ alınırsa

$$\int_a^b f(x) dx = 0.65947$$

elde edilir. Ardarda yapılan bu iki integral Romberg formülünde kullanılarak

$$\int_a^b f(x) dx = 0.65947 + \frac{1}{2^2 - 1} (0.65947 - 0.66211) = 0.65859$$

bulunur. Aşağıdaki tabloda ardarda bölünmüş adım uzunlukları için elde edilen integral sonuçları yer almaktadır.

Değişik adım uzunlukları için elde edilen integral sonuçları ve bunlar yardımıyla yapılan çeşitli seviyedeki tahminler küçük tabloda özetlenmiştir. Herbir seviyede tahminler bir önceki seviyede tahmin edilen sonuçlardan hareketle hesaplanmaktadır. Kullanılan n üsleri de tablonun altında gösterilmiştir.

$$e = 2.7182818$$

h = 0.65			h = 0.325			h = 0.1625			h = 0.08125		
x	x ²	f(x)	x	x ²	f(x)	x	x ²	f(x)	x	x ²	f(x)
0.20	0.0400	0.96079	0.200	0.04000	0.96079	0.200	0.04000	0.96079	0.200	0.04000	0.96079
0.85	0.7225	0.48554	0.525	0.27563	0.75910	0.363	0.13141	0.87686	0.281	0.07910	0.92395
1.50	2.2500	0.10540	0.850	0.72250	0.48554	0.525	0.27563	0.75910	0.363	0.13141	0.87686
Integral =		0.66211	1.175	1.38063	0.25142	0.688	0.47266	0.62334	0.444	0.19691	0.82126
			1.500	2.25000	0.10540	0.850	0.72250	0.48554	0.525	0.27563	0.75910
			Integral =		0.65947	1.013	1.02516	0.35874	0.606	0.36754	0.69244
			Yeni tahmin =		0.65859	1.175	1.38063	0.25142	0.688	0.47266	0.62334
						1.338	1.78891	0.16714	0.769	0.59098	0.55379
						1.500	2.25000	0.10540	0.850	0.72250	0.48554
						Integral =		0.65898	0.931	0.86723	0.42012
						Yeni tahmin =		0.65881	1.013	1.02516	0.35874
									1.094	1.19629	0.30231
									1.175	1.38063	0.25142
									1.256	1.57816	0.20635
									1.338	1.78891	0.16714
									1.419	2.01285	0.13361
									1.500	2.25000	0.10540
									Integral =		0.65886
									Yeni tahmin =		0.65882

h	Integral	1. tahmin	2. tahmin	3. tahmin
0.65000	0.66211			
0.32500	0.65947	0.65859		
0.16250	0.65898	0.65881	0.65882	
0.08125	0.65886	0.65882	0.65882	0.65882
n =		2	4	8

3.2.4 Bir veri seti için Romberg ekstrapolasyonu

Yukarıda bilinen bir fonksiyon için uygulanan Romberg yöntemini, bilinmeyen bir fonksiyona ait tablolanmış veri noktaları için de uygulamak mümkündür. Ancak veri noktalarının eşit aralıklı olması gerekir. Ayrıca fonksiyon bilinmediğinde h adım uzunluğunu yarıya indirerek ara noktalarda veri değeri elde etmek mümkün olmayacaktır. Bu bakımdan tahminler bu defa h değeri ikiye katlanarak yapılacaktır.

Örnek:

Tablodaki veri noktalarını kullanarak $x=1.8$ ve $x=3.4$ noktaları arasındaki integral için iyileştirilmiş bir tahmin yapınız.

Bu veri daha önce trapez kuralının uygulanması için kullanılmış olup $h=0.2$ adım uzunluğuyla integral sonucu 23.9944 olarak bulunmuştur. $h=0.4$ ve $h=0.8$ adım uzunlukları için kullanılan veri noktaları ve elde edilen integral sonuçları tabloda verilmiştir.

x	f(x)	h		
		0.2	0.4	0.8
1.6	4.953			
1.8	6.050	6.050	6.050	6.050
2.0	7.389	7.389		
2.2	9.025	9.025	9.025	
2.4	11.023	11.023		
2.6	13.464	13.464	13.464	13.464
2.8	16.445	16.445		
3.0	20.086	20.086	20.086	
3.2	24.533	24.533		
3.4	29.964	29.964	29.964	29.964
3.6	36.598			
3.8	44.701			
Integral =		23.9944	24.2328	25.1768

h	İntegral	1. Tahmin	2. Tahmin
0.2	23.9944	23.9149	23.9147
0.4	24.2328	23.9181	
0.8	25.1768		

$h=0.2$ ve $h=0.4$ adım uzunlukları için bulunan integral sonuçları kullanılarak daha iyi bir tahmin

$$\int_a^b f(x)dx = 23.9944 + \frac{(23.9944 - 24.2328)}{2^2 - 1} = 23.9149$$

şeklinde ve $h=0.4$ ve $h=0.8$ adım uzunlukları için bulunan integral sonuçları kullanılarak daha iyi bir tahmin

$$\int_a^b f(x)dx = 24.2328 + \frac{(24.2328 - 25.1768)}{2^2 - 1} = 23.9181$$

şeklinde elde edilir. Bu iki tahmin değeri kullanılarak daha iyi bir tahmin

$$\int_a^b f(x)dx = 23.9149 + \frac{(23.9149 - 23.9181)}{2^2 - 1} = 23.9147$$

olarak elde edilebilir.

Verilen tablo değerlerini $f(x)=e^x$ fonksiyonuna ait olduğu ve integralin tam değerinin 23.9144 olduğu hatırlanırsa, yapılan en son tahminin hesaplanan integral değerlerinden ve ilk tahmini değerlerden daha doğru olduğu görülür.

3.2.5 Simpson kuralları

Trapez yönteminde fonksiyon lineer polinomlarla temsil edilmektedir. Fonksiyona bir kuadratik veya kübik interpolasyon polinomuyla yaklaşılması halinde integrasyonun daha hassas sonuç vermesi beklenir. Simpson kuralları bu hususa dayanmaktadır. Simpson kuralları "**1/3 kuralı**" ve "**3/8 kuralı**" olarak bilinmektedir.

Simpson'un 1/3 kuralı ikinci dereceden Newton-Gregory ileri fark polinomu integre edilerek elde edilebilir. Eşit h aralığıyla sıralanmış x_0 , x_1 ve x_2 noktaları için Newton-Gregory formülü

$$f(x) = f_0 + s\Delta f_0 + \frac{s(s-1)}{2} \Delta^2 f_0$$

şeklinde olup, $x_0 - x_2$ aralığında integre edilerek

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx &= \int_{x_0}^{x_2} \left[f_0 + s\Delta f_0 + \frac{s(s-1)}{2} \Delta^2 f_0 \right] dx \\ &= h \int_0^2 \left[f_0 + s\Delta f_0 + \frac{s(s-1)}{2} \Delta^2 f_0 \right] ds \\ &= hf_0 [s]_0^2 + h\Delta f_0 \left[\frac{s^2}{2} \right]_0^2 + h\Delta^2 f_0 \left[\frac{s^3}{6} - \frac{s^2}{4} \right]_0^2 \\ &= h \left[2f_0 + 2\Delta f_0 + \frac{1}{3} \Delta^2 f_0 \right] = h \left[2f_0 + 2(f_1 - f_0) + \frac{1}{3}(f_2 - 2f_1 + f_0) \right] \end{aligned}$$

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{3} [f_0 + 4f_1 + f_2]$$

elde edilir. İnterpolasyon polinomunun hatası integrale edilerek Simpson 1/3 kuralı için hata da

$$Hata = -\frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\xi), \quad x_0 < \xi < x_2$$

şeklinde tahmin edilebilir.

Simpson 1/3 kuralında ardarda üç nokta kullanılması, ardarda iki şerit üzerinde integral alınması olarak da yorumlanabilir. Buna göre bu yöntemin uygulanması için integral aralığının **eşit aralıklı çift sayıda** alt-bölgeye ayrılmış olması gereklidir.

Simpson'un 3/8 kuralı da benzeri şekilde üçüncü dereceden Newton-Gregory ileri fark polinomu integrale edilerek elde edilebilir. Bunun için ardarda dört noktaya ihtiyaç vardır:

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x) dx \approx \int_{x_0}^{x_3} P_3(x) dx = \frac{3h}{8} (f_0 + 3f_1 + 3f_2 + f_3)$$

Yöntemin hatası için

$$Hata = -\frac{3}{80} h^5 f^{(4)}(\xi), \quad x_0 < \xi < x_3$$

bulunabilir.

Simpson 3/8 kuralında ardarda dört nokta kullanılması, ardarda üç şerit üzerinde integral alınması olarak da yorumlanabilir. Buna göre bu yöntemin uygulanması için de integral aralığının **eşit aralıklı üçle bölünebilir sayıda** alt-bölgeye ayrılmış olması gereklidir.

Görüldüğü gibi 3/8 kuralının hatası 1/3 kuralına göre daha fazladır. Buna rağmen bazı hallerde 3/8 kuralını kullanmak gerekebilir. Şayet veri setindeki şerit sayısı çift değilse ilk bakışta 1/3 kuralının kullanılması mümkün değilmiş gibi düşünülebilir. Oysa integralin uygun bir kısmı 3/8 kuralı ile hesaplanıp kalan kısmında 1/3 kuralı uygulanabilir.

Örnek:

$f(x)=e^{-x^2}$ fonksiyonunu $x=0.2$ ve $x=2.6$ noktaları arasında sırasıyla trapez kuralı, Simpson 1/3 ve 3/8 kurallarıyla integre ediniz. Sonuçları karşılaştırınız.

Aşağıdaki tabloda ilk üç sütunda 24 nokta için x ve $f(x)$ değerleri, dördüncü sütunun el altında 24 nokta ile trapez kuralı kullanılarak hesaplanan integral değeri yer almaktadır. Dördüncü ve beşinci sütunlarda Simpson 1/3 ve 3/8 kurallarıyla hesaplanmış lokal integraller ve sütunların en altlarında da bunların toplamları, yani integral sonuçları yer almaktadır. Daha sonraki sütunlarda sırasıyla 12, 6 ve 18 nokta ile yapılan benzeri hesaplamaların sonuçlarına yer verilmiştir.

Hesaplamaların sonuçları ayrıca alttaki küçük tabloda özetlenmiştir. Verilen fonksiyonun MATLAB ile hesaplanmış gerçek değeri 0.68865 olup bu değer kullanılarak elde edilen hata değerleri de aynı tabloda gösterilmiştir.

e =		24 şerit			12 şerit			6 şerit			18 şerit			
		h = 0.1			h = 0.2			h = 0.4			h = 0.133333			
i	x	f(x)	1/3	3/8	f(x)	1/3	3/8	f(x)	1/3	3/8	x	f(x)	1/3	3/8
0	0.20	0.96079			0.96079			0.96079			0.2000	0.96079		
1	0.30	0.91393									0.3333	0.89484		
2	0.40	0.85214	0.18229		0.85214						0.4667	0.80430	0.23753	
3	0.50	0.77880		0.26392							0.6000	0.69768		0.33779
4	0.60	0.69768	0.15550		0.69768	0.33780		0.69768			0.7333	0.58404	0.18574	
5	0.70	0.61263									0.8667	0.47184		
6	0.80	0.52729	0.12252	0.19639	0.52729		0.46032				1.0000	0.36788	0.12619	0.21166
7	0.90	0.44486									1.1333	0.27680		
8	1.00	0.36788	0.08915		0.36788	0.21165		0.36788	0.54925		1.2667	0.20100	0.07449	
9	1.10	0.29820		0.12239							1.4000	0.14086		0.09711
10	1.20	0.23693	0.05992		0.23693						1.5333	0.09526	0.03821	
11	1.30	0.18452									1.6667	0.06218		
12	1.40	0.14086	0.03720	0.06388	0.14086	0.09710	0.18619	0.14086		0.64475	1.8000	0.03916	0.01703	0.03262
13	1.50	0.10540									1.9333	0.02381		
14	1.60	0.07730	0.02133		0.07730						2.0667	0.01397	0.00659	
15	1.70	0.05558		0.02792							2.2000	0.00791		0.00802
16	1.80	0.03916	0.01129		0.03916	0.03262		0.03916	0.12940		2.3333	0.00432	0.00222	
17	1.90	0.02705									2.4667	0.00228		
18	2.00	0.01832	0.00552	0.01022	0.01832		0.03814				2.6000	0.00116	0.00065	0.00144
19	2.10	0.01216												
20	2.20	0.00791	0.00249		0.00791	0.00802		0.00791						
21	2.30	0.00504		0.00313										
22	2.40	0.00315	0.00104		0.00315									
23	2.50	0.00193												
24	2.60	0.00116	0.00040	0.00080	0.00116	0.00144	0.00395	0.00116	0.00959	0.04248				
integral =		0.68897	0.68865	0.68865	0.68992	0.68863	0.68860	0.69378	0.68824	0.68723		0.68921	0.68865	0.68864

n	Trapez		Simpson 1/3		Simpson 3/8	
	integral	hata	integral	hata	integral	hata
6	0.69378	-0.00513	0.68824	0.00041	0.68723	0.00142
12	0.68992	-0.00127	0.68863	0.00002	0.68860	0.00005
18	0.68921	-0.00056	0.68865	0.00000	0.68864	0.00001
24	0.68897	-0.00032	0.68865	0.00000	0.68865	0.00000

3.2.6 İntegral formüllerinin farklı bir yoldan elde edilmesi

Daha önce interpolasyon için kullanılan "bilinmeyen katsayıların tayini" yönteminin benzeri integral için de kullanılabilir. Burada yöntemi tanıtmak için en basit formüller ele alınarak $x=x_1$ ve $x=x_2$ noktaları arasında $f(x)$ fonksiyonunun integrali için sadece $f(x_1)$ ve $f(x_2)$ fonksiyon değerlerinin kullanıldığı

$$\int_a^a f(x) dx = A \cdot f(x_1) + B \cdot f(x_2)$$

biçiminde bir formül elde edilmeye çalışılacaktır. Burada A ve B tayin edilecek olan katsayılarıdır.

$x_1, f(x_1)$ ve $x_2, f(x_2)$ noktalarından geçen birinci dereceden bir polinom

$$f(x) \approx P(x) = ax + b$$

şeklinde tarif edilebilir. Eksen takımının başlangıç noktası $x_1=0$ ($x_2=h=x_2-x_1$) olacak biçimde kaydırılırsa işlemlerde kolaylık sağlanabilir.

Bu durumda iki farklı hal söz konusu olabilir:

Birinci hal: $P(x) = 1 \rightarrow b = 1, a = 0$

$$\int_a^a P(x) dx = \int_0^h (1) dx = h = A \cdot P(0) + B \cdot P(h) = A \cdot 1 + B \cdot 1$$

İkinci hal: $P(x) = x \rightarrow a = 1, b = 0$

$$\int_a^a P(x) dx = \int_0^h (x) dx = \frac{h^2}{2} = A \cdot P(0) + B \cdot P(h) = A \cdot 0 + B \cdot h$$

Bu iki denklem matris biçimde yazılırsa

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & h \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} A \\ B \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} h \\ h^2 / 2 \end{Bmatrix}$$

İkinci denklemden $B = h/2$

İlk denklemden $A+B = h \rightarrow A = h-h/2 = h/2$

Böylece $\int_a^a f(x) dx = \frac{h}{2} [f(x_1) + f(x_2)]$

elde edilir. Bu bağıntı bildiğimiz trapez kuralıdır.

Üç noktalı bir formül için $x_{-1} = -h$, $x_0 = 0$ ve $x_1 = h$ noktaları alınır ve bu üç noktadan

$$P(x) = ax^2 + bx + c$$

şeklinde bir parabolün geçtiği varsayılırsa aranan formül

$$\int_a^a f(x) dx = A \cdot f(x_{-1}) + B \cdot f(x_0) + C \cdot f(x_1)$$

şeklinde olup

Birinci hal: $P(x) = 1 \rightarrow c = 1, a = b = 0$

$$\int_{-h}^h P(x) dx = \int_{-h}^h (1) dx = 2h = A \cdot P(-h) + B \cdot P(0) + C \cdot P(h) = A \cdot 1 + B \cdot 1 + C \cdot 1$$

İkinci hal: $P(x) = x \rightarrow b = 1, a = c = 0$

$$\int_a^a P(x) dx = \int_{-h}^h (x) dx = 0 = A \cdot P(-h) + B \cdot P(0) + C \cdot P(h) = A \cdot (-h) + B \cdot (0) + C \cdot (h)$$

Üçüncü hal: $P(x) = x^2 \rightarrow a = 1, b = c = 0$

$$\int_a^a P(x) dx = \int_{-h}^h (x^2) dx = \frac{2h^3}{3} = A \cdot P(-h) + B \cdot P(0) + C \cdot P(h) = A \cdot h^2 + B \cdot (0) + C \cdot h^2$$

Bu denklemler matris biçimde yazılırsa

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -h & 0 & h \\ h^2 & 0 & h^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} A \\ B \\ C \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 2h \\ 0 \\ 2h^3/3 \end{Bmatrix}$$

İkinci denklemden $A = C$

Üçüncü denklemden $A = C = h/3$

İlk denklemden $B = 4h/3$

Böylece
$$\int_a^a f(x) dx = \frac{h}{3} [f(x_{-1}) + 4f(x_0) + f(x_1)]$$

elde edilir. Bu bağıntı da bildiğimiz Simpson 1/3 kuralıdır.

3.2.7 Gauss kuadratürü

Önceki bölümlerde geçen integral formülleri eşit aralıklı noktalar için geçerli idi. Üç terimli, üç parametrelili en son formülde de eşit aralıklı noktalardaki fonksiyon değerleri ağırlık faktörleriyle çarpılarak integralin elde edilebileceği görüldü. Üç parametrelili bu çözümün ikinci dereceden bir polinomun (derecesi parametre sayısından bir eksik) integraline eşdeğer olduğu bilinmektedir.

Gauss, eşit aralıklı belli noktalarda fonksiyon değerlerinin kullanılması zorunluluğunun ortadan kaldırılması halinde parametre sayısının üçten altıya çıkacağı düşüncesiyle farklı bir yöntem geliştirmiştir. Bu yöntemde fonksiyon değerlerinin ağırlık faktörleri yanında fonksiyon değerlerinin hesaplandığı noktaların x koordinatları da ilave parametreler olmaktadır.

Altı parametrelili bir yaklaşım gerçekte 5 inci dereceden bir polinomun integraline eşdeğer olup daha yüksek mertebeden bir yaklaşım anlamına gelmektedir.

Bu prensibe dayanan yöntemler Gauss kuadratür formülleri olarak bilinmektedir. Bu yöntemler, x in istenilen değerlerinde f(x) fonksiyonunun bulunması gerektiğinden ancak f(x) fonksiyonun açık biçimde bilinmesi halinde kullanılabilir.

Burada örnek olarak basit halde dört bilinmeyen parametre içeren iki-terimli bir formül çıkartılacaktır:

$$\int_{-1}^1 f(t) dt \approx af(t_1) + bf(t_2)$$

Yöntem önceki bölümde izah edilen bilinmeyen parametrelerin tayini yöntemiyle aynıdır. İşlemleri basitleştirmek için başlangıç noktasına göre simetrik bir integral aralığı (-1 ile +1 arasında) alınacak ve integral değişkeni t ile belirtilecektir. Formülasyon 3. dereceden herhangi bir polinom için geçerli olacaktır.

$$f(t) = t^3 \quad \int_{-1}^1 t^3 dt = 0 = at_1^3 + bt_2^3$$

$$f(t) = t^2 \quad \int_{-1}^1 t^2 dt = \frac{2}{3} = at_1^2 + bt_2^2$$

$$f(t)=t \quad \int_{-1}^1 t \, dt = 0 = at_1 + bt_2$$

$$f(t)=1 \quad \int_{-1}^1 dt = 2 = a + b$$

Üçüncü eşitliği t_1^2 ile çarpıp birinciden çıkartarak

$$0 = (at_1^3 + bt_2^3) - t_1^2(at_1 + bt_2) = b(t_2^3 - t_1^2t_2) = bt_2(t_2 - t_1)(t_2 + t_1)$$

Bu eşitliğin geçerli olabilmesi için seçenekler

$$b = 0, \quad t_2 = 0, \quad t_2 = t_1 \quad \text{veya} \quad t_2 = -t_1$$

olmakla birlikte, bunlardan sadece sonuncusu geçerlidir. Buna göre

$$\begin{aligned} t_2 = -t_1 \quad \rightarrow \quad 0 = at_1 + bt_2 \quad \rightarrow \quad a = b \\ 2 = a + b \quad \rightarrow \quad a = b = 1 \\ \frac{2}{3} = at_1^2 + bt_2^2 \quad \rightarrow \quad t_2 = -t_1 = \sqrt{\frac{1}{3}} = 0.5773 \end{aligned}$$

Böylece

$$\int_{-1}^1 f(t) \, dt \approx f(-0.5773) + f(0.5773)$$

elde edilir. Bu iki fonksiyon değerinin herhangi bir kübik polinomun $t=-1$ ile $t=1$ arasındaki integralinde kullanılması halinde integralin tam (exact) değerini vereceğini göstermek mümkündür.

Genel bir kübik polinom

$$f(t) = a_0 + a_1t + a_2t^2 + a_3t^3$$

İntegre edilerek

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 f(t) \, dt &= \int_{-1}^1 (a_0 + a_1t + a_2t^2 + a_3t^3) \, dt \\ &= \left(a_0t + \frac{a_1}{2}t^2 + \frac{a_2}{3}t^3 + \frac{a_3}{4}t^4 \right)_{-1}^1 \\ &= a_0(1+1) + \frac{a_1}{2}(1-1) + \frac{a_2}{3}(1+1) + \frac{a_3}{4}(1-1) \\ &= 2a_0 + \frac{2}{3}a_2 \end{aligned}$$

elde edilir. Aynı integral yukarıda geliştirilen formülasyonla hesaplanırsa

$$f\left(\frac{-1}{\sqrt{3}}\right) = a_0 + a_1\left(\frac{-1}{\sqrt{3}}\right) + a_2\left(\frac{-1}{\sqrt{3}}\right)^2 + a_3\left(\frac{-1}{\sqrt{3}}\right)^3$$

$$f(t_2) = f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) = a_0 + a_1\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + a_2\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^2 + a_3\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)^3$$

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 f(t) dt &= w_1 f(t_1) + w_2 f(t_2) = a_0 + a_0 + a_2 \frac{1}{3} + a_2 \frac{1}{3} \\ &= 2a_0 + \frac{2}{3}a_2 \end{aligned}$$

şeklinde yine aynı sonuç elde edilir.

Şimdi integral sınırlarının -1 ve $+1$ değil de a ve b gibi olduğu genel bir hal dikkate alınır. Gauss kuadratörü parametrelerinden yararlanabilmek için -1 ve $+1$ sınır değerlerinin bir değişken dönüşümüyle a ve b sınır değerlerine dönüştürülmesi gerekir. Şayet

$$x = \frac{(b-a)t + b + a}{2}, \quad dx = \frac{(b-a)}{2} dt, \quad \begin{array}{l} t = -1 \rightarrow x = a \\ t = +1 \rightarrow x = b \end{array}$$

değişken dönüşümü kullanılırsa
$$\int_a^b f(x) dx = \frac{(b-a)}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{(b-a)t + b + a}{2}\right) dt$$

elde edilir.

Örnek:

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin x dx \quad \text{integralini Gauss kuadratürlerini kullanarak hesaplayınız.}$$

İki terimli Gauss formülünün kullanılabilmesi için integral değişkeninin, sınır değerleri -1 ve $+1$ olacak biçimde dönüştürülmesi gerekmektedir. Nitekim yukarıdaki değişken dönüşümü uygulanırsa

$$x = \frac{(b-a)t + b + a}{2} = \frac{(\pi/2 - 0)t + \pi/2 + 0}{2} = \frac{\pi}{4}(t + 1) \quad \rightarrow \quad dx = \frac{\pi}{4} dt$$

Böylece verilen integral

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin x dx = \frac{\pi}{4} \int_{-1}^1 \sin\left[\frac{\pi}{4}(t + 1)\right] dt$$

şekline gelir. Gauss formülü dönüştürülmüş integralin değerini integrandın $t = -1/\sqrt{3}$ ve $t = 1/\sqrt{3}$ noktalarındaki değerlerinin ağırlıklı bir toplamı olarak verir. Nitekim

$$\frac{\pi}{4}(t + 1) = \frac{\pi}{4}\left(-\frac{1}{\sqrt{3}} + 1\right) = \frac{\pi}{4}\left(\frac{-1 + \sqrt{3}}{\sqrt{3}}\right) = \left(\frac{-\sqrt{3} + 3}{12}\right)\pi = 0.10566\pi$$

$$\frac{\pi}{4}(t + 1) = \frac{\pi}{4}\left(\frac{1}{\sqrt{3}} + 1\right) = \frac{\pi}{4}\left(\frac{1 + \sqrt{3}}{\sqrt{3}}\right) = \left(\frac{\sqrt{3} + 3}{12}\right)\pi = 0.39434\pi$$

olup

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin x \, dx = \frac{\pi}{4} [\sin(0.10566\pi) + \sin(0.39434\pi)] = 0.99847$$

elde edilir. Verilen integralin tam değeri

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin x \, dx = -[\cos x]_0^{\pi/2} = -[0 - 1] = 1$$

olup Gauss kuadraturü ile yapılan hatanın miktarı 0.00153 tür.

Gauss yönteminin değeri integral için sadece iki noktada fonksiyon değerinin hesaplanmasının yeterli olmasıdır. Yine sadece iki noktada fonksiyon değerinin hesaplanmasını gerekli kılan trapez kuralı ile integral hesaplanmış olsaydı

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin x \, dx = \frac{\sin 0 + \sin\{\pi/2\}}{2} \left(\frac{\pi}{2} - 0 \right) = \frac{\pi}{4} = 0.7854$$

elde edilirdi. Veya Simpson 1/3 kuralı uygulansaydı

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin x \, dx = \frac{\pi/4}{3} [\sin(0) + 4 \sin(\pi/4) + \sin(\pi/2)] = \frac{\pi}{12} (0 + 2.82843 + 1) = 1.00228$$

bulunurdu. Görüldüğü gibi her iki yöntemin hatası da Gauss yönteminden daha fazladır.

Gauss yöntemi iki terimden daha fazlası için de geliştirilebilir. n adet nokta için formül genel olarak

$$\int_{-1}^1 f(t) \, dt = \sum_{i=1}^n w_i f(t_i)$$

şeklinde yazılır. Bu formül derecesi $2n-1$ ve daha küçük olan polinomlar için tam (exact) dır.

Yukarıda 2-nokta için izah edilen yöntem n nokta için genelleştirilerek

$$w_1 t_1^k + w_2 t_2^k + \dots + w_n t_n^k = \begin{cases} 0, & k = 1, 3, 5, \dots, 2n-1 \\ \frac{2}{k+1}, & k = 0, 2, 4, \dots, 2n-2 \end{cases}$$

şeklinde $2n$ denklemlilik bir denklem sistemi elde edilir. Bu yöntem çok aşık olmakla birlikte elde edilen denklem sisteminin çözümü o kadar basit değildir. Ancak Legendre polinomları kullanarak daha kolay bir yaklaşım ortaya koymak mümkündür.

Verilen bir n değeri için t_i ler n 'inci dereceden bir Legendre polinomunun kökleridir. Legendre polinomları

$$(n+1)L_{n+1}(x) - (2n+1)xL_n(x) + nL_{n-1}(x) = 0$$

$$L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = x$$

şeklinde bir rekürsion formülüyle tanımlanmaktadır. Buradan $L_2(x)$ için

$$L_2(x) = \frac{3xL_1(x) - 1 \cdot L_0(x)}{2} = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}$$

elde edilebileceği görülmektedir. $L_2(x)=0$ polinomunun kökü $\pm 1/\sqrt{3} = \pm 0.5773$ olup bu kökler tam olarak iki-terimli formüldeki t değerleridir.

Sonraki polinomlar için rekürsiyon bağıntısından

$$L_3(x) = \frac{5x^3 - 3x}{2}$$

$$L_4(x) = \frac{35x^4 - 30x^2 + 3}{8}$$

vb. elde etmek mümkündür.

Legendre polinomlarının kökleri, non-linear denklem köklerini bulmak için kullanılan standart yöntemlerle elde edilebilir. Bu kökler bir kez elde edildikten sonra yukarıda iki-noktalı Gauss kuadratürü için yazılan denklemlerin benzerleri yazılarak ağırlık faktörleri için kolaylıkla çözülebilir.

Aşağıdaki tabloda 5 inci dereceye kadar Legendre polinomların kökleri yer almaktadır. Bu katsayılarla 9 uncu dereceye kadar polinomların karşılığı olan Gauss kuadratürlerini uygulamak mümkündür. Tabloda ilgili Gauss kuadratürlerine ait ağırlık faktörleri de sunulmuştur.

n	t	w	geçerlilik derecesi
2	-0.57735027 0.57735027	1 1	3
3	-0.77459667 0.00000000 0.77459667	0.55555555 0.88888889 0.55555555	5
4	-0.86113631 -0.33998104 0.33998104 0.86113631	0.34785485 0.65214515 0.65214515 0.34785485	7
5	-0.90617985 -0.53846931 0.00000000 0.53846931 0.90617985	0.23692689 0.47862867 0.56888889 0.47862867 0.23692689	9

Burada Legendre polinomlarının bazı özelliklerini özetlemekte yarar vardır:

1. Legendre polinomları ortogondur. Yani:

$$\int_{-1}^1 L_n(x)L_m(x) dt = \begin{cases} = 0 & n \neq m \\ > 0 & n = m \end{cases}$$

Bu husus bir çok başka önemli fonksiyonların da özelliğidir. Örneğin $\cos(nx)$, $n = 0,1,2,\dots$ fonksiyonları için de

$$\int_{-1}^1 \cos(mx)\cos(nx) dt = \begin{cases} = 0 & n \neq m \\ > 0 & n = m \end{cases}$$

olup, bu durum bu fonksiyonun $[0,2\pi]$ aralığında ortogonal olduğu anlamına gelmektedir.

2. n 'inci dereceden herhangi bir polinom Legendre polinomlarının toplamı olarak yazılabilir:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n c_i L_i(x)$$

3. $L_n(x) = 0$ polinomunun n adet kökü $[-1,1]$ aralığında yer alır.

Bu özellikler yardımıyla Gauss kuadratürünün $2n-1$ 'inci ve daha küçük derecedeki polinomlar için tam (exact) olduğunu göstermek mümkündür.

Örnek:

Dört terimli Gauss formülünü kullanarak $f(x)=e^{-x^2}$ fonksiyonunu $x=0.2$ ve $x=2.6$ noktaları arasında integre ediniz. Sonuçları değerlendiriniz.

Hesaplanacak integral

$$I = \int_{0.2}^{2.6} e^{-x^2} dx$$

olup

$$x = \frac{(b-a)t + b + a}{2} = \frac{(2.6-0.2)t + 2.6 + 0.2}{2} = 1.2t + 1.4$$

$$dx = \frac{b-a}{2} dt = \frac{2.6-0.2}{2} dt = 1.2dt$$

değişken dönüşümü ile

$$I = 1.2 \int_{-1}^1 e^{-(1.2t+1.4)^2} dt = 1.2 \sum_{i=1}^4 w_i f(t_i)$$

elde edilir. Gauss kuadratürünün ilk terimi

$$t_1 = -0.86114, \quad w_1 = 0.34785 \quad \rightarrow \quad f(t_1) = e^{-(1.2t_1+1.4)^2} = 0.87422, \quad w_1 f(t_1) = 0.30410$$

olup, diğer terimlere ait hesap sonuçları da aşağıdaki tabloda verilmiştir.

$t_1 = -0.86114$	$w_1 = 0.34785$	$f_1 = 0.87422$	$w_1 * f_1 = 0.30410$
$t_2 = -0.33998$	$w_2 = 0.65215$	$f_2 = 0.37377$	$w_2 * f_2 = 0.24375$
$t_3 = 0.33998$	$w_3 = 0.65215$	$f_3 = 0.03805$	$w_3 * f_3 = 0.02482$
$t_4 = 0.86114$	$w_4 = 0.34785$	$f_4 = 0.00268$	$w_4 * f_4 = 0.00093$
			Integral = 0.68833

İntegralin tam sonucu daha önce 0.68865 olarak verilmişti. Buna göre 4 terimli Gauss formülü ile elde edilen sonuçtaki hata 0.00032 olup, Simpson 1/3 formülüyle 6 aralıkta ve trapez kuralı ile 18 aralıkta elde edilen integral sonuçlarından daha az hatalıdır.

Örnek:

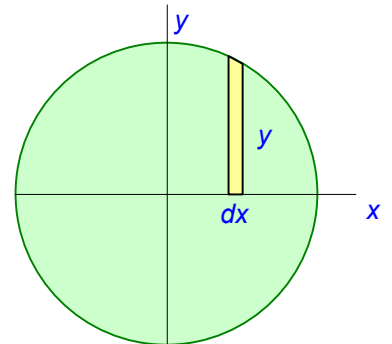
$R=0.4m$ yarıçaplı dairenin alanını çeşitli yöntemlerle hesaplayınız.

Dairenin denklemi $x^2 + y^2 = R^2$

olup, buradan $y = \sqrt{R^2 - x^2}$

$$S = 2 \int_{-R}^R y dx = 2 \int_{-R}^R \sqrt{R^2 - x^2} dx$$

bulunur. Veya $x = \frac{(b-a)t + b + a}{2} = \frac{(R-[-R])t + R - R}{2} = Rt, \quad dx = Rdt$



değişken dönüşümü ile

$$S = 2 \int_{-1}^1 \sqrt{R^2 - R^2 t^2} R dt = 2R^2 \int_{-1}^1 \sqrt{1-t^2} dt$$

elde edilir. Bu integral t 'nin -1 ile $+1$ arasındaki eşit aralıklı 19 değeri kullanılarak trapez, Simpson 1/3 ve Simpson 3/8 formülleriyle ayrı ayrı hesaplanmış olup, sonuçlar aşağıdaki tabloda sunulmuştur.

R = 0.40000			h = 0.111111111		
S = 0.5026548					
i	t	f(t)	Trapez	Simpson 1/3	Simpson 3/8
1	-1.00000	0.00000	0.00000		
2	-0.88889	0.45812	0.45812		
3	-0.77778	0.62854	0.62854	2.46103	
4	-0.66667	0.74536	0.74536		4.00534
5	-0.55556	0.83148	0.83148	4.44144	
6	-0.44444	0.89581	0.89581		
7	-0.33333	0.94281	0.94281	5.35751	6.87002
8	-0.22222	0.97500	0.97500		
9	-0.11111	0.99381	0.99381	5.83660	
10	0.00000	1.00000	1.00000		7.84922
11	0.11111	0.99381	0.99381	5.98762	
12	0.22222	0.97500	0.97500		
13	0.33333	0.94281	0.94281	5.83660	7.84922
14	0.44444	0.89581	0.89581		
15	0.55556	0.83148	0.83148	5.35751	
16	0.66667	0.74536	0.74536		6.87002
17	0.77778	0.62854	0.62854	4.44144	
18	0.88889	0.45812	0.45812		
19	1.00000	0.00000	0.00000	2.46103	4.00534
S =			0.49571	0.49992	0.49932
Hata =			0.00695	0.00273	0.00333

Değişik terim sayısı ile Gauss kuadratürleri kullanarak elde edilen sonuçlar aşağıdaki tabloda yer almaktadır. Aynı tabloda ayrıca dairenin sadece pozitif çeyreğinde

$$S = 4 \int_0^R \sqrt{R^2 - x^2} dx$$

şeklinde hesaplanmış integral sonuçlarına da yer verilmiştir. Bu integral

$$x = \frac{(b-a)t + b + a}{2} = \frac{(R-0)t + R-0}{2} = \frac{R}{2}(t+1) \quad dx = \frac{R}{2} dt$$

değişken dönüşümü sonucunda

$$S = 4 \int_{-1}^1 \sqrt{R^2 - \frac{R^2}{4}(t+1)^2} \frac{R}{2} dt = R^2 \int_{-1}^1 \sqrt{4 - (t+1)^2} dt$$

şekline gelmektedir.

R = 0.40000								
S = 0.502655		-R < x < R				0 < x < R		
n	t	w	f(t)	w * f(t)	S / hata	f(t)	w * f(t)	S
2	-0.57735	1.00000	0.81650	0.81650	0.52256	1.95483	1.95483	0.50951
	0.57735	1.00000	0.81650	0.81650	-0.01990	1.22962	1.22962	-0.00686
3	-0.77460	0.55556	0.63246	0.35136	0.50932	1.98726	1.10403	0.50497
	0.00000	0.88889	1.00000	0.88889		1.73205	1.53960	
	0.77460	0.55556	0.63246	0.35136	-0.00666	0.92239	0.51244	-0.00232
4	-0.86114	0.34785	0.50837	0.17684	0.50569	1.99517	0.69403	0.50372
	-0.33998	0.65215	0.94043	0.61330		1.88796	1.23122	
	0.33998	0.65215	0.94043	0.61330		1.48474	0.96827	
	0.86114	0.34785	0.50837	0.17684	-0.00303	0.73224	0.25471	-0.00106
5	-0.90618	0.23693	0.42289	0.10019	0.50429	1.99780	0.47333	0.50323
	-0.53847	0.47863	0.84265	0.40331		1.94602	0.93142	
	0.00000	0.56889	1.00000	0.56889		1.73205	0.98534	
	0.53847	0.47863	0.84265	0.40331		1.27793	0.61166	
	0.90618	0.23693	0.42289	0.10019	-0.00164	0.60537	0.14343	-0.00057

Görüldüğü gibi integral aralığı küçültülünce Gauss kuadratürleri daha iyi sonuçlar vermiştir. Buna göre verilen integrali önce

$$S = 4 \int_0^R \sqrt{R^2 - x^2} dx = 4R \int_0^1 \sqrt{1 - (x/R)^2} dx = 4R^2 \int_0^1 \sqrt{1 - \bar{x}^2} d\bar{x}, \quad \bar{x} = x/R$$

şeklinde boyutsuz olara yazıp, daha sonra da N adet aralıkta

$$S = 4R^2 \sum_{j=1}^N S_j, \quad S_j = \int_{\bar{x}_j}^{\bar{x}_{j+1}} \sqrt{1 - \bar{x}^2} d\bar{x}$$

şeklinde yazarak hesaplamaya çalışalım.

$$x = \frac{(b-a)t + b + a}{2} = \frac{(x_{j+1} - x_j)t + x_{j+1} - x_j}{2} = m_j t + n_j, \quad m_j = \frac{x_{j+1} - x_j}{2}, \quad n_j = \frac{x_{j+1} + x_j}{2}$$

$$dx = m_j dt$$

değişken dönüşümü ile

$$S_j = m_j \int_{\bar{x}_j}^{\bar{x}_{j+1}} \sqrt{1 - (m_j t + n_j)^2} dt = m_j \sum_{i=1}^n w_i f(t_i)$$

elde edilir. Aşağıdaki tabloda iki- ve üç-terimli Gauss kuadratürleri kullanılarak 18 aralık sayısıyla integral hesaplanmıştır.

R = 0.40		h = 0.0444444									
S = 0.50265											
	x	m _j	n _j	f (t1)	f (t2)	S _j	f (t1)	f (t2)	f (t3)	S _j	
1	0.00000	0.02222	0.02222	0.99996	0.99939	0.04443	0.99999	0.99975	0.99922	0.04443	
2	0.04444	0.02222	0.06667	0.99855	0.99684	0.04434	0.99878	0.99778	0.99648	0.04434	
3	0.08889	0.02222	0.11111	0.99516	0.99229	0.04417	0.99558	0.99381	0.99173	0.04417	
4	0.13333	0.02222	0.15556	0.98976	0.98572	0.04390	0.99038	0.98783	0.98496	0.04390	
5	0.17778	0.02222	0.20000	0.98233	0.97709	0.04354	0.98315	0.97980	0.97612	0.04354	
6	0.22222	0.02222	0.24444	0.97281	0.96634	0.04309	0.97384	0.96966	0.96516	0.04309	
7	0.26667	0.02222	0.28889	0.96114	0.95340	0.04255	0.96239	0.95736	0.95200	0.04255	
8	0.31111	0.02222	0.33333	0.94725	0.93817	0.04190	0.94872	0.94281	0.93655	0.04190	
9	0.35556	0.02222	0.37778	0.93103	0.92056	0.04115	0.93273	0.92590	0.91868	0.04115	
10	0.40000	0.02222	0.42222	0.91236	0.90041	0.04028	0.91431	0.90649	0.89827	0.04028	
11	0.44444	0.02222	0.46667	0.89108	0.87754	0.03930	0.89330	0.88443	0.87513	0.03930	
12	0.48889	0.02222	0.51111	0.86702	0.85175	0.03819	0.86952	0.85951	0.84904	0.03819	
13	0.53333	0.02222	0.55556	0.83991	0.82276	0.03695	0.84273	0.83148	0.81972	0.03695	
14	0.57778	0.02222	0.60000	0.80946	0.79021	0.03555	0.81263	0.80000	0.78680	0.03555	
15	0.62222	0.02222	0.64444	0.77528	0.75365	0.03398	0.77883	0.76465	0.74981	0.03398	
16	0.66667	0.02222	0.68889	0.73685	0.71245	0.03221	0.74085	0.72487	0.70811	0.03221	
17	0.71111	0.02222	0.73333	0.69345	0.66576	0.03020	0.69798	0.67987	0.66082	0.03020	
18	0.75556	0.12222	0.87778	0.59026	0.31725	0.11092	0.62189	0.47907	0.23311	0.11010	
19	1.00000										
				S =	0.50345						0.50293
				Hata =	-0.00080						-0.00028

3.2.8 Çok-katlı integraller

Bazı durumlarda iki-katlı veya daha çok katlı integrallerin sayısal hesabı gerekebilir.

$$\int_a^b \left[\int_c^d f(x,y) dy \right] dx = \int_c^d \left[\int_a^b f(x,y) dx \right] dy$$

integralini dikkate alalım. Buradaki integral bölgesi

$$x = a, \quad x = b, \quad y = c, \quad y = d$$

doğrularıyla sınırlanmış bir dikdörtgensel bölgedir. Ancak her zaman dikdörtgensel bölge olmayabilir.

Bu tip integraller sayısal olarak hesaplanırken bir doğrultudaki değişkenin sabit değerleri için diğer doğrultuda integral hesaplanır.

Önceki paragraflarda izah edilen integral yöntemleri çok-katlı integrallere kolaylıkla adapte edilebilir. Herhangi bir integral formülü bağımsız değişkenin çeşitli değerlerinde hesaplanmış fonksiyon değerlerinin lineer bir kombinasyonudur. Diğer bir deyişle, bir kuadratur formülü çeşitli fonksiyonel değerlerin ağırlıklı bir toplamıdır. Buna göre iki-katlı bir integralde içteki integral dıştaki integral değişkeninin sabit bir değeri için fonksiyon değerlerinin ağırlıklı bir toplamı olarak hesaplanabilir. Bu şekilde hesaplanan toplamaların daha sonra diğer doğrultuda ağırlıklı toplamaları hesaplanarak integralin değeri elde edilir.

Şayet bir fonksiyonun değerleri sadece düğüm noktalarında biliniyorsa, hesaplamalar bu noktalarla kısıtlı olacaktır. Bu gibi durumlarda Newton-Cotes formülasyonunun kullanılması uygun olur. Çoğu zaman bütün doğrultularda aynı formülasyonun kullanılması uygun olmaktadır.

Örnek:

Tabloda verilen fonksiyon değerlerini ($x=1.5$, $x=3.0$, $y=0.2$, $y=0.6$) koordinatlarıyla sınırlı dikdörtgensel bölge içinde integre ediniz.

Bu örnekte y doğrultusunda Simpson 1/3 formülü kullanılacaktır. Ancak x doğrultusunda aralık sayısı çift olmadığından Simpson 1/3 kullanılamayacak olup, bu doğrultuda trapez kuralı kullanılacaktır.

Nitekim y 'nin sabit $0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ ve 0.6 değerleri için x doğrultusunda integraller trapez kuralıyla

$$I_y = h_x \cdot \left[\frac{f_{(1.5,y)}}{2} + f_{(2.0,y)} + f_{(2.5,y)} + \frac{f_{(3.0,y)}}{2} \right] *$$

şeklinde hesaplanmış olup sonuçlar tabloda her bir sütunun altında yer almaktadır. Bu değerler y doğrultusunda Simpson 1/3 kuralıyla

$$I = \frac{h_y}{3} [I_{0.2} + 4I_{0.3} + I_{0.4}] + \frac{h_y}{3} [I_{0.4} + 4I_{0.5} + I_{0.6}]$$

şeklinde integrale edilmiş olup integralin sonucu en sağdaki hücrede yer almaktadır.

$x \setminus y$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	
0.5	0.165	0.428	0.687	0.942	1.190	1.431	
1.0	0.271	0.640	1.003	1.359	1.703	2.035	
1.5	0.447	0.990	1.524	2.045	2.549	3.031	
2.0	0.738	1.568	2.384	3.177	3.943	4.672	
2.5	1.216	2.520	3.800	5.044	6.241	7.379	
3.0	2.005	4.090	6.136	8.122	10.030	11.841	
3.5	3.306	6.679	9.986	13.196	16.277	19.198	
		3.3140	5.0070	6.6523	8.2368	9.7435	2.6446

Simpson 1/3

Bu örnekteki integralin gerçek analitik çözümü 2.5944 olup elde edilen sayısal çözümün hatası büyüktür. Bunun nedeni x doğrultusundaki adım uzunluğunun büyük olmasıdır. Daha yüksek mertebeden polinomlar kullanarak çözüm hassasiyetini arttırmak mümkündür.

Yukarıdaki örnek de göstermiştir ki çift katlı integral ağırlıklı fonksiyon değerlerinin çift katlı bir toplamına indirgenmiştir. Yapılan hesaplamaları aşağıdaki biçimde gösterebiliriz:

$$\begin{aligned} \int f(x,y) dx dy &= \sum_{j=1}^m v_j \sum_{i=1}^n w_i f_{ij} \\ &= \frac{\Delta y}{3} \frac{\Delta x}{2} [(f_{11} + 2f_{21} + 2f_{31} + f_{41}) \\ &\quad + 4(f_{12} + 2f_{22} + 2f_{32} + f_{42}) \\ &\quad + \dots \\ &\quad + (f_{15} + 2f_{25} + 2f_{35} + f_{45})] \end{aligned}$$

Bu formülü sembolik olarak

$$\int f(x,y) dx dy = \frac{\Delta y}{3} \frac{\Delta x}{2} \begin{Bmatrix} 1 & 4 & 2 & 4 & 1 \\ 2 & 8 & 4 & 8 & 2 \\ 2 & 8 & 4 & 8 & 2 \\ 1 & 4 & 2 & 4 & 1 \end{Bmatrix} f_{ij}$$

şeklinde de göstermek mümkündür. Burada matris içerisindeki büyüklükler fonksiyon değerleriyle çarpılacak ağırlık faktörlerini belirtmektedir. Ağırlık faktörleri birer doğrultudaki integrallere ait ağırlık faktörlerinin kombinasyonudur. Başka Newton-Cotes formülasyonlarının kombinasyonları da benzeri şekilde ifade edilebilir. Bu tip gösterimler elle hesaplar için çok uygun olup, daha yüksek boyutlu integraller için de uygulanabilir.

Çok katlı integraller için yukarıdaki biçimde yapılan düzenlemeleri bilgisayar programları için daha uygun hale getirmek mümkündür. Bu amaçla tek değişkenli bir nümerik integral formülü ele alırsak

$$\int_{-l}^l f(x) dx = \sum_{i=1}^n a_i f(x_i)$$

Daha önce de gösterilmiştir ki bu tip formüller belli derecedeki polinomlar için tam (exact) yapılabilir. Yukarıdaki formülün s derecesine kadarki polinomlar için geçerli olduğunu varsayalım.

Şimdi

$$\int_{-l}^l \int_{-l}^l \int_{-l}^l f(x,y,z) dx dy dz = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n a_i a_j a_k f(x_i, y_j, z_k)$$

şeklindeki bir çok katlı integral formülünü dikkate alalım. Bu formülün x , y ve z değişkenleri için yazılmış s derecesine kadarki bütün polinomlar için tam (exact) olduğunu göstermek istiyoruz. Bu tip polinomlar, α , β , γ büyüklükleri negatif olmayan ve toplamları s büyüklüğüne eşit veya daha küçük tam sayılar olmak üzere x^α , y^β , z^γ biçimindeki terimlerin lineer bir kombinasyonudur.

$$f(x,y,z) = x^\alpha y^\beta z^\gamma$$

fonksiyonu için integral

$$I = \int_{-l}^l \int_{-l}^l \int_{-l}^l x^\alpha y^\beta z^\gamma dx dy dz = \left(\int_{-l}^l x^\alpha dx \right) \left(\int_{-l}^l y^\beta dy \right) \left(\int_{-l}^l z^\gamma dz \right)$$

şeklinde bir boyutlu integrallerin çarpımı haline getirilebilir. Her bir integral ağırlık faktörleri ve fonksiyon değerleri cinsinden yazılarak

$$I = \left(\sum_{i=1}^n a_i x_i^\alpha \right) \left(\sum_{j=1}^n a_j y_j^\beta \right) \left(\sum_{k=1}^n a_k z_k^\gamma \right)$$

Bu toplamların çarpımının açılımının nasıl olacağını daha basit bir hal için kolaylıkla gösterebiliriz:

$$\begin{aligned} I &= \left(\sum_{i=1}^3 u_i \right) \left(\sum_{j=1}^2 v_j \right) = (u_1 + u_2 + u_3)(v_1 + v_2) \\ &= (u_1 v_1 + u_1 v_2) + (u_2 v_1 + u_2 v_2) + (u_3 v_1 + u_3 v_2) = \sum_{i=1}^3 \left(\sum_{j=1}^2 u_i v_j \right) \\ &= u_1 v_1 + u_1 v_2 + u_2 v_1 + u_2 v_2 + u_3 v_1 + u_3 v_2 = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^2 u_i v_j \end{aligned}$$

Buna göre

$$I = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n a_i a_j a_k x_i^\alpha y_j^\beta z_k^\gamma$$

elde edilir. Bu bağıntı çoklu integral için başlangıçta önerilen ağırlıklı toplam formülünün geçerliğini göstermektedir. Bu formülü iç içe üç döngü kullanarak bilgisayar için kolaylıkla programlamak mümkündür. a_i ağırlık katsayıları herhangi bir nümerik integrasyon formülünden elde edilebilir.

Örnek:

$$I = \int_0^1 \int_{-1}^0 \int_{-1}^1 y z e^x dx dy dz$$

integralini x doğrultusunda üç-terimli Gauss kuadratörü, y ve z doğrultularında da iki-terimli Gauss kuadratörü kullanarak hesaplayınız.

Öncelikle y ve z için

$$y = \frac{(b-a)u + b + a}{2} = \frac{(0 - [-1])u + 0 - 1}{2} \rightarrow y = \frac{1}{2}(u - 1), \quad dy = \frac{1}{2} du$$

$$z = \frac{(b-a)v + b + a}{2} = \frac{(1-0)v + 1 + 0}{2} \rightarrow z = \frac{1}{2}(v + 1), \quad dz = \frac{1}{2} dv$$

değişken dönüşümleri yaparak integrali

$$I = \frac{1}{16} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 (u-1)(v+1) e^x dx du dv$$

şekline getirelim. İki- ve üç-noktalı Gauss formülleri sırasıyla

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = (1) f(-0.5774) + (1) f(0.5774)$$

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = (5/9) f(-0.7746) + (8/9) f(0) + (5/9) f(0.7746)$$

şeklinde olup, yukarıdaki integral buna göre düzenlenerek

$$I = \frac{1}{16} \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^3 a_i a_j b_k (u_i + 1)(v_j - 1) e^{x_k}$$

yazılabilir. Burada

$$a_1 = a_2 = 1, \quad b_1 = b_3 = 5/9, \quad b_2 = 8/9$$

dır. Buna göre integralin bazı terimleri yazılırsa

$$\begin{aligned}
I = \frac{1}{16} & \left[1 \cdot 1 \cdot \frac{5}{9} (-0.5774 + 1)(-0.5774 - 1)e^{-0.7746} + 1 \cdot 1 \cdot \frac{8}{9} (-0.5774 + 1)(-0.5774 - 1)e^0 \right. \\
& + 1 \cdot 1 \cdot \frac{5}{9} (-0.5774 + 1)(-0.5774 - 1)e^{-0.7746} \\
& + 1 \cdot 1 \cdot \frac{5}{9} (0.5774 + 1)(-0.5774 - 1)e^{-0.7746} + 1 \cdot 1 \cdot \frac{8}{9} (0.5774 + 1)(-0.5774 - 1)e^0 \\
& \left. + 1 \cdot 1 \cdot \frac{5}{9} (0.5774 + 1)(-0.5774 - 1)e^{-0.7746} \dots \dots \right]
\end{aligned}$$

Bu integralin sonucu

$$I = 0.58758$$

olarak, analitik sonucu da

$$I_a = \frac{1}{4}(e - e^{-1}) = 0.58760$$

şeklinde elde edilebilir.