

T.C.
SİNOP ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
MATEMATİK ANABİLİM DALI



DİFÜZYON-REAKSİYON KİSMİ TÜREVLİ DENKLEMLERİN
MERTEBE İNDİRGENMİŞ MODELLEMESİ

YUSUF ÇAKIR

DOKTORA TEZİ

DANIŞMAN

Prof. Dr. Murat UZUNCA

SİNOP - 2024

TEZ KABUL

YUSUF ÇAKIR tarafından hazırlanan **DİFÜZYON-REAKSİYON KİSMİ TÜREVLİ DENKLEMLERİN MERTEBE İNDİRGENMİŞ MODELLEMESİ** başlıklı bu çalışma, 09.07.2024 tarihinde yapılan savunma sınavı sonucunda başarılı bulunarak, jürimiz tarafından **DOKTORA tezi** olarak kabul edilmiştir.

Başkan

Prof. Dr. Ayhan AYDIN
Atılım Üniversitesi / Fen Edebiyat Fakültesi

İmza

**Üye
(Danışman)**

Prof. Dr. Murat UZUNCA
Sinop Üniversitesi / Fen Edebiyat Fakültesi

İmza

Üye

Prof. Dr. Canay AYKOL KOCAKUŞAKLI
Ankara Üniversitesi / Fen Fakültesi

İmza

Üye

Doç. Dr. Demet HAN AYDIN
Sinop Üniversitesi / Fen Edebiyat Fakültesi

İmza

Üye

Dr. Öğretim Üyesi Turgut YELOĞLU
Sinop Üniversitesi / Fen Edebiyat Fakültesi

İmza

Enstitü Müdürü

Prof. Dr. Fadime DİRİK

.....

ETİK BEYANI

Tez Yazım Kurallarına uygun olarak hazırladığım bu tez çalışmasında; tez içinde sunduğum verileri, bilgileri ve dokümanları akademik ve etik kurallar çerçevesinde elde ettiğimi, tüm bilgi, belge, değerlendirme ve sonuçları bilimsel etik ve ahlak kurallarına uygun olarak sunduğumu, tez çalışmasında yararlandığım eserlerin tümüne uygun atıfta bulunarak kaynak gösterdiğimi, kullanılan verilerde herhangi bir değişiklik yapmadığımı, bu tezde sunduğum çalışmanın özgün olduğunu, bildirir, aksi bir durumda aleyhime doğabilecek tüm hak kayıplarını kabullendiğimi beyan ederim.

Yusuf Çakır

ÖZET

DOKTORA TEZİ

DİFÜZYON-REAKSİYON KİSMİ TÜREVİLİ DENKLEMLERİN MERTEBE İNDİRGENMİŞ MODELLEMESİ

YUSUF ÇAKIR

SİNOP ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
MATEMATİK ANABİLİM DALI
DANIŞMAN: PROF. DR. MURAT UZUNCA

Bu doktora tez çalışması beş temel kısımdan oluşmaktadır. İlk bölüm giriş kısmı olup, tez çalışmasının literatür taraması ile önemini belirtmektedir. İkinci bölümde Difüzyon-Reaksiyon Kısmi Türevli Denklem sistemleri tanıtılmış, örnek problemler verilmiş ve Temel Bileşenler Analizinin bazı önemli özellikleri ile uygulaması anlatılmıştır. Üçüncü bölümde Çekirdek Temel Bileşenler Analizi tanıtılmıştır. Dördüncü kısım olan Bulgular bölümünde, Difüzyon-Reaksiyon Kısmi Türevli Denklem sistemlerinin her bir sınıfı için örnekler incelenmiştir. Sonuç ve Öneriler bölümünde çalışmada elde edilen bulgular değerlendirilmiş, gelecekte yapılabilecek çalışmalar için fikirler sunulmuştur.

ANAHTAR KELİMELER: Difüzyon-reaksiyon kısmi türevli denklemler; Çekirdek temel bileşenler analizi; Çok boyutlu ölçekleme; Hamilton sistemler; Gradyan sistemler; Enerji yapısının korunması.

Temmuz 2024, 80 Sayfa

ABSTRACT

PH.D THESIS

REDUCED ORDER MODELLING OF DIFFUSION-REACTION PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS

YUSUF ÇAKIR

**SINOP UNIVERSITY INSTITUTE OF NATURAL AND APPLIED SCIENCES
DEPARTMENT OF MATHEMATICS
SUPERVISOR: PROF. DR. MURAT UZUNCA**

This doctoral thesis consists of five main parts. The first chapter is the introduction and states the importance of the thesis with a literature review. In the second chapter, Diffusion-Reaction Partial Differential Equation systems are introduced, related examples are given, and some important properties and application of Principal Component Analysis are explained. In the third section, Kernel Principal Component Analysis is introduced. In the fourth part, examples for each class of Diffusion-Reaction Partial Differential Equation systems are analyzed. In the Conclusion and Recommendations section, the findings of the study are evaluated and ideas for future studies are presented.

KEYWORDS: Diffusion-reaction partial differential equations; Kernel principal component analysis; Multi-dimensional scaling; Hamiltonian systems; Gradient systems; Preservation of energy structure.

July 2024, 80 Pages

TEŞEKKÜR

Tez çalışmamın her aşamasında bilgi, beceri ve değerli vaktini şahsımdan esirgemeyen, yol göstericiliği ile bana çok büyük destek ve katkı sağlayan, değerli danışman hocam Sayın Prof. Dr. Murat UZUNCA'ya teşekkürlerimi ve saygılarımı sunarım.

Ayrıca Tez çalışmam boyunca öneri ve görüşleri ile değerli katkılar sunan Jüri Üyesi hocalarıma çok teşekkür ederim.

Çalışmalarım boyunca bana daima destek olan sevgili eşim Rukiye ÇAKIR'a, evimizin neşeleri biricik kızlarım Elif ÇAKIR ve Ayşe Beyza ÇAKIR'a en içten teşekkürlerimi sunarım. Ayrıca desteğini her zaman hissettiğim ve hep yanımda olan beni destekleyen, bugünlere gelmemdeki emeklerini hiçbir zaman ödeyemeyeceğim annem, babam ve aileme çok teşekkür ederim. İyi ki varsınız.

Yusuf Çakır

İÇİNDEKİLER

	Sayfa
TEZ KABUL	ii
ETİK BEYANI.....	iii
ÖZET	iv
ABSTRACT.....	v
TEŞEKKÜR	vi
İÇİNDEKİLER	vii
TABLolar	ix
ŞEKİLLER.....	x
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ.....	xii
1. GİRİŞ	1
2. GENEL BİLGİLER.....	6
2.1. Difüzyon-Reaksiyon Kısmi Türevli Denklemler.....	6
2.1.1. Hamilton sistemler	8
2.1.2. Gradyan sistemler	10
2.1.3. Anti-gradyan sistemler.....	12
2.2. Ayırıklaştırılmış Model.....	14
2.2.1. Uzayda ayırıklaştırma	14
2.2.1.1. Bir boyutlu uzayda ayırıklaştırma.....	15
2.2.1.2. İki boyutlu uzayda ayırıklaştırma	17
2.2.2. Zamanda ayırıklaştırma	17
2.3. Temel Bileşenler Analizi	18
2.3.1. Temel bileşenler analizinin özellikleri.....	20
2.3.2. Temel bileşenler analizine geometrik yaklaşım.....	21
2.3.3. Temel bileşenler analizinin uygulanışı	22
2.4. Kovaryans Matrisinin Köşegenleştirilmesi.....	26
2.5. Boyut İndirgenmesi.....	26
2.6. Tekil Değer Ayırıştırması (TDA): Köşegenleştirmeye Alternatif	27
2.7. Gram Matrisi.....	28
2.8. C ve G Matrislerinin Köşegenleştirilmesinin Eşdeğer Olması	29

3. MATERYAL VE YÖNTEM.....	31
3.1. Çekirdek Temel Bileşenler Analizi.....	31
3.2. Yapının Yüksek Boyutlu Hale (M Boyuta) Dönüştürülmesi.....	31
3.3. Çekirdek Fonksiyonu.....	32
3.4. Merkezileştirme	32
3.5. ÇTBA ile İleriye Doğru Eşleme: $Y \rightarrow P_k \Phi(Y)$	33
3.6. ÇTBA ile Geriye Doğru Eşleme: $P_k \Phi(Y) \rightarrow Y$	37
4. BULGULAR.....	42
4.1. Hamilton Sistemler	42
4.1.1. Bir boyutlu KdV denklemi	42
4.1.2. İki boyutlu KdV denklemi	46
4.1.3. Bir boyutlu NLS denklemi.....	51
4.1.4. İki boyutlu NLS denklemi	55
4.2. Gradyan Sistemler.....	58
4.2.1. Bir boyutlu AC denklemi.....	58
4.2.2. İki boyutlu AC denklemi	63
4.2.3. İki boyutlu SH denklemi.....	65
4.3. Anti-Gradyan Sistemler	68
4.3.1. Bir boyutlu FHN denklemi	68
4.3.2. İki boyutlu FHN denklemi	70
5. SONUÇ VE ÖNERİLER.....	75
KAYNAKLAR	77
ÖZGEÇMİŞ	80

TABLÖLAR DİZİNİ

Sayfa

Tablo 4.1 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar	44
Tablo 4.2 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar ve çözüm süreleri	44
Tablo 4.3 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar	48
Tablo 4.4 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar ve çözüm süreleri	49
Tablo 4.5 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar	52
Tablo 4.6 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar ve çözüm süreleri	53
Tablo 4.7 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar	56
Tablo 4.8 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar ve çözüm süreleri	57
Tablo 4.9 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar	60
Tablo 4.10 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar ve çözüm süreleri	61
Tablo 4.11 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar	63
Tablo 4.12 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar ve çözüm süreleri	64
Tablo 4.13 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar	66
Tablo 4.14 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar ve çözüm süreleri	66
Tablo 4.15 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar	69
Tablo 4.16 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar ve çözüm süreleri	70
Tablo 4.17 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar	73
Tablo 4.18 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar ve çözüm süreleri	74

ŞEKİLLER DİZİNİ

Sayfa

Şekil 2.1 Temel bileşenler dönüşümünün iki boyutlu uzayda gösterimi	22
Şekil 2.2 TBA işlem akışı	25
Şekil 2.3 Doğrusal olarak ayrılabilen ve ayrılamayan veri dağılımları	25
Şekil 3.1 ÇTBA kullanılarak boyut azaltmanın gösterimi.....	37
Şekil 3.2 Özellik uzayından girdi uzayına geri dönüş	38
Şekil 4.1 $t = 0, 0.98, 2.98, 7.98$ zamanlarındaki dalga grafikleri.....	43
Şekil 4.2 Büyüklüklerin tam çözüm halinde korunumu	43
Şekil 4.3 $k = 2$ için $t = 0.5$ ve 3.82 'de tam/indirgenmiş çözüm grafikleri.....	45
Şekil 4.4 $k = 2$ için indirgenmiş büyüklüklerin korunumu	46
Şekil 4.5 Başlangıç dalgaları	47
Şekil 4.6 Büyüklüklerin tam çözüm halinde korunumu	48
Şekil 4.7 $k = 2$ için $t = 5$ zamanındaki tam/indirgenmiş çözümler	50
Şekil 4.8 $k = 2$ için indirgenmiş büyüklüklerin korunumu	51
Şekil 4.9 Büyüklüklerin tam çözüm halinde korunumu	52
Şekil 4.10 $k = 2$ için tam/indirgenmiş dalga profilleri	54
Şekil 4.11 $k = 2$ için indirgenmiş büyüklüklerin korunumu	54
Şekil 4.12 Büyüklüklerin tam çözüm halinde korunumu	55
Şekil 4.13 $k = 2$ için $t = 0.5$ ve 3 zamanlarındaki tam/indirgenmiş dalga profilleri....	57
Şekil 4.14 $k = 2$ için indirgenmiş büyüklüklerin korunumu	58
Şekil 4.15 $t = 0, 250, 400, 500$ zamanlarındaki dalga grafikleri.....	59
Şekil 4.16 Tam çözüm profili	59
Şekil 4.17 $k = 2$ için $t = 250, 500$ zamanlarındaki tam/indirgenmiş çözümler	61
Şekil 4.18 $k = 2$ için tam/indirgenmiş çözüm profilleri	62
Şekil 4.19 Tam enerji ile $k = 2$ için indirgenmiş enerji.....	62
Şekil 4.20 $k = 2$ için $t = 5$ zamanındaki tam/indirgenmiş çözüm profilleri.....	64
Şekil 4.21 Tam enerji ile $k = 2$ için indirgenmiş enerji.....	65
Şekil 4.22 Başlangıç profili ile $t = 10$ zamanındaki tam ve $k = 2$ için indirgenmiş çözüm profilleri.....	67
Şekil 4.23 Tam enerji ile $k = 2$ için indirgenmiş enerji.....	67
Şekil 4.24 $k = 2$ için $t = 0, 10, 30, 50$ zamanlarındaki tam/indirgenmiş çözümler	68

Şekil 4.25 Tam enerji ile $k = 2$ için indirgenmiş enerji.....	69
Şekil 4.26 $t = 0$ zamanındaki başlangıç profilleri	71
Şekil 4.27 $k = 2$ için $t = 15$ zamanındaki tam ve indirgenmiş çözüm profilleri	72
Şekil 4.28 $k = 2$ için $t = 30$ zamanındaki tam ve indirgenmiş çözüm profilleri	72
Şekil 4.29 $k = 2$ için tam/indirgenmiş çözümde enerji korunumu	74



SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

Simgeler

$\mathbb{R}$	: Reel sayılar kümesi
F	: Potansiyel fonksiyon
E	: Enerji fonksiyonu
Ω	: Konumsal alan
C	: Kovaryans matrisi
Δ	: Laplace operatörü
∇	: Gradyan operatörü
G	: Gram matrisi
Var	: Varyans
Cov	: Kovaryans
$\otimes$	: Kronecker çarpımı
D_1	: Birinci mertebe merkezi sonlu bölünmüş fark matrisi
D_2	: İkinci mertebe merkezi sonlu bölünmüş fark matrisi
K	: Çekirdek matrisi
κ	: Çekirdek fonksiyonu
H	: Merkezileştirme matrisi
Φ	: Özellik uzayına geçiş fonksiyonu
λ^i	: Özdeğerler
I_1	: Momentum
I_2	: Kütle

Kısaltmalar

TBA	: Temel Bileşenler Analizi
ÇTBA	: Çekirdek Temel Bileşenler Analizi
KTD	: Kısmi Türevli Denklemler
MİY	: Model İndirgeme Yöntemleri
ÇBÖ	: Çok Boyutlu Ölçekleme
KdV	: Korteweg-De Vries
NLS	: Doğrusal Olmayan Schrödinger
AC	: Allen-Chan
SH	: Swift-Hohenberg
FHN	: Fitz-Hugh Nagumo

1.GİRİŞ

Birçok bilim alanında yer bulan gerçek hayat problemlerindeki çoğu fiziksel fenomenin matematiksel modellenmesi, diferansiyel denklemler özellikle de Kısmi Türevli Denklemler (KTD) ile yapılmaktadır. Söz konusu KTD arasında en önemli alt gruplardan biri ikinci mertbe diferansiyel denklemler olup, çeşitli fiziksel olaylara karşılık gelen matematiksel modelleri difüzyon-reaksiyon sistemleri oluşturmaktadır. Fiziksel olarak difüzyon-reaksiyon sistemleri, örneğin bir kimyasal reaksiyon sürecinin modellenmesinde, bir veya daha fazla kimyasal maddenin konsantrasyonunun konum ve zamana göre değişimini modellemektedir. Sistemdeki ikinci mertbe türev terimini içeren difüzyon, maddelerin uzayda ne kadar yayıldığını göstermekte iken, bilinmeyen fonksiyonlara bağlı reaksiyon terimleri ise maddelerin konsantrasyonlarının ne ölçüde kullanıldığını işaret eder. Genel olarak bir $\Omega \times [0, T]$ uzay-zaman alanında m bileşenli bir difüzyon-reaksiyon sistemi

$$\partial_t \vec{w} = D \Delta \vec{w} + R(\vec{w}),$$

formunda ifade edilebilir. Burada, $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 1, 2$) uzay konumu değişkeni, $t \in [0, T] \subset \mathbb{R}$ zaman değişkeni olmak üzere $\vec{w}(x, t) = (w_1(x, t), w_2(x, t), \dots, w_m(x, t))^T$ vektörü bilinmeyen fonksiyonların vektörünü, $D \in \mathbb{R}^{m \times m}$ difüzyon katsayılarını içeren köşegen matrisi ve $R(\vec{w})$ vektörü ise bilinmeyen fonksiyonlara bağlı reaksiyon terimini ifade eden ve genelde doğrusal olmayan reaksiyon terimidir. ∂_t ve $\Delta = \partial_{x_1}^2 + \dots + \partial_{x_d}^2$ operatörleri ise sırasıyla t zaman değişkenine ve x_i konum değişkenlerine göre birinci ve ikinci mertbe kısmi türev operatörleridir. Difüzyon-reaksiyon denklemlerinin çözümleri hareketli dalgalar ve enerji tüketen solitonlar gibi daha karmaşık yapılar veya "*Turing kalıpları*" adı verilen kendi kendine organize olan desenlerin oluşumu dahil olmak üzere geniş bir davranış yelpazesi sergilerler. Son yıllarda, difüzyon-reaksiyon sistemleri model oluşumu için bir prototip model olarak çok ilgi çekmiştir. Difüzyon-reaksiyon süreçlerinin, biyolojide morfogenez ile bağlantılı süreçler ve hatta hayvan tüyleri ve deri pigmentasyonu ile ilgili kısımları da tartışılmıştır. Difüzyon-reaksiyon denklemlerinin diğer uygulamaları arasında ekolojik istilalar, salgın hastalıkların yayılması, tümör büyümesi ve yara iyileşmesi yer alır (Ei vd., 2005).

Hemen hemen tüm difüzyon-reaksiyon sistemleri, fiziksel olarak genelde sistem enerjisi olarak adlandırılan bir ölçü ile ilişkilidir. Bu noktada, sistem enerjisinin davranışsal özellikleri bakımından difüzyon-reaksiyon denklemleri Hamilton, gradyan ve anti-

gradyan sistemler olmak üzere üç genel sınıf altında kategorize edilebilirler. Hamilton sistemlerinin karakteristik yapısı, makine hassasiyetine kadar doğru bir şekilde çözüldüğünde, sistemin enerjisinin zaman içinde korunması temeline dayanmaktadır. Gradyan sistemlerde sürekli olarak azalan serbest bir enerji (Lyapunov fonksiyoneli) bulunup, serbest enerjinin yerel minimize edicileri kararlı durumlara karşılık gelir. Enerji güdümlü model oluşumu, gradyan sistemlerde salınımlı ve Turing desenleri şeklinde gerçekleşir. Anti-gradyan yapıya sahip difüzyon-reaksiyon sistemleri ise, bir tür aktivatör-inhibitör sistemi olarak görülebilir. Bu tip sistemlerde sistem enerjisinin belli bir karakteristiği yoktur, yani probleme göre bazı zaman aralıklarında enerji azalabiliyorken başka zaman aralıklarında artış gösterebilir. Bu tez çalışmasında, temel olarak bahsi geçen üç tip difüzyon-reaksiyon sistemleri ele alınacaktır.

Gerçek hayat problemlerinin modellenmesinde kullanılan matematiksel (diferansiyel) denklem sistemlerinin genelde analitik çözümlerinin bulunması mümkün olmamaktadır. Bu sebeple, söz konusu denklemler sayısal olarak çözülmektedir. Sayısal çözüm tekniklerinin temelinde denklemdeki bilinmeyen fonksiyonların bağımsız değişkenleri üzerinde sonlu ayrıklaştırma yöntemlerinin kullanılması yolu ile sistemdeki diferansiyel operatörleri temsil edecek matrisler belirlemek ve bilinmeyen fonksiyonun bağımsız değişken yönünden boyutsuzlaştırılması, yani bağımsız değişkenlere olan bağımlılığının sürekli bir şekilde ortadan kaldırılması yatmaktadır. Literatürde çeşitli amaçlara yönelik birçok ayrıklaştırma yöntemi geliştirilmiş ve kullanılmaktadır. Bunlar arasında en basit ve en sık kullanılanların başında sonlu farklar temelli yöntemler gelmektedir. Bu tez çalışmasında, diferansiyel operatörler merkezi fark türev formülleri ile yaklaşık hesaplanarak konum boyutunda ayrıklaştırma gerçekleştirilecektir. Diğer yandan, özellikle Hamilton ve gradyan sistemlerinin yaklaşık sayısal çözümlerinin bulunması açısından kullanılacak olan sayısal yöntemin, mevcut sürekli sistemin sahip olduğu yapıyı da koruması beklenmektedir. Bu nedenle, zaman boyutunda kullanılacak olan ayrıklaştırma yöntemi önem kazanmaktadır. Literatürde, verilen sistemin belirli yapılarını koruyan birçok zamanda ayıklaştırma yöntemleri olmakla birlikte bunların birçoğu kapalı formüller ve/veya yakınsama mertebesi düşük olan yöntemlerdir. Bu tez çalışmasında, zaman boyutunda ayrıklaştırma yöntemi olarak, ikinci mertebe yakınsaklığa sahip ve açık bir formül olan Kahan yöntemi kullanılacaktır (Kahan ve Li, 1997; Celledoni vd., 2012). Kahan yönteminin en önemli özelliklerinin başında, Hamilton ve gradyan sistemlerin enerji davranışlarını sayısal olarak koruyor olması gelmektedir.

Tamamen ayrıklaştırılmış bir diferansiyel denklem sisteminin çözümlerinin, kesinliğinin artırılması için ayrıklaştırmanın boyutunun sonlu ama büyük olması gerektiği bilinen bir gerçektir. Bu şekilde oluşturulan ayırık sistemlerin sayısal çözümlerinin bulunması, özellikle iki ve üç boyutlu konumsal uzayda, son derece zaman alıcı olmaktadır. Bu nedenle Model İndirgeme Yöntemleri (MİY), bu tür problemleri indirgenmiş veri ile çözmek için son derece önemli hale gelmiştir (Kuwamura, 2007). MİY tekniklerinin ilk kullanımı Lumley'nin 1967'deki çalışmalarına dayanır. Bu çalışmalarda, türbülans mekanizmalarının yoğunluğu ve akışkan problemlerinde mevcut olan büyük boyutlu yapıları açıklamak için MİY kullanılmıştır. Son 20 yılda, bilgisayar bilimi ve mühendisliğine olan ilginin artmasıyla makine mühendisliği, elektrik-elektronik, nörobilimler, tıp, çevre mühendisliği, biyoloji ve finans dahil temel ve uygulamalı bilimler gibi alanlar başta olmak üzere MİY yüksek performanslı hesaplamada önemli bir rol oynamaktadır (Berkooz vd., 1993). Biyoloji, atmosferik dinamikler ve moleküler dinamik simülasyonları gibi çok ölçekli dinamik sistemlerde ortaya çıkan modeller için MİY, düşük kaliteli modelde yüksek kaliteli modelin özelliklerinin doğru istatistiksel tahminlerini elde etmenin mümkün olduğu ölçeklenebilir bir matematiksel çerçeve sağlar. MİY, yüksek kalitede karmaşık modelleri basitleştirir. Karmaşık bir sistemi optimize edip incelemek ve çözmek için gereken süreyi azaltmak amacıyla da kullanılır. Dahası, yapay zekâdan genetiğe, hava hareketlerinden borsa hareket değişimlerine, gök mekaniğine, akışkanlar mekaniğinden aerodinamiğe, yüz tanıma sistemlerinden tıpta elektromanyetik/lazer MR görüntüleme sistemlerine kadar pek çok yerde uygulama alanı vardır. MİY'nin en temel kullanım alanlarından biri verilen bir dinamik sistemin çözümünün, çok daha küçük boyutlu bir alt uzayda temsil edilebilmesidir. MİY, fazla zaman harcamamak için ayrıklaştırma sonrası elde edilen Tam Mertebeli Modelin (TMM), daha küçük boyutlu bir alt uzayda yaklaşık olarak karşılığını bulabilmektedir (Volkwein, 2010). Bu yöntemlerin merkezinde olan Temel Bileşenler Analizi (TBA), sonlu bir sayıda değişkenden oluşan bir veri setini, çok daha az sayıda ve değişkenlerin doğrusal bileşenleri olan yeni değişkenlerle ifade etme yöntemidir. Diğer bir deyişle, aralarında korelasyon bulunan sonlu bir sayıdaki değişkenlerin açıkladığı yapıyı, aralarında korelasyon bulunmayan ve sayıca orijinal değişken sayısından çok daha az sayıda doğrusal bileşenleri olan değişkenlerle ifade etme yöntemidir (Johnson ve Wichern, 2007). TBA yöntemi çok büyük boyutlu veriyi daha küçük boyutlu bir veriye dönüştürür. Bu doğrusal dönüşümü yaparken kovaryans matrisini kullanır. Kovaryans matrisinin özdeğer ve özvektörleri bulunarak temel bileşenler hesaplanabilir.

TBA, birçok farklı disiplinlerce sıklıkla kullanılmasına rağmen, elde edilen verilerin boyutlarının indirgenmesi ve modellenmesi gibi uygulama alanlarında Çekirdek Temel Bileşenler Analizinin (ÇTBA) kullanımı çok yenidir. ÇTBA, TBA'dan farklı olarak doğrusal olarak ayrıştırılamayan ya da bir başka ifadeyle doğrusal bir dağılım göstermeyen verilerin doğrusal bileşenler ile ifade edilmesidir. ÇTBA yöntemi, bilim, mühendislik ve tıpta yüksek sonuçlu uygulamalarda birçok farklı türde önemli fiziksel olayı modellemek için kullanılmaktadır. Doğrusal olmayan modellerin çözülmesi çok zaman alır, bu da onları tasarım, parametre araştırması, kontrol veya gerçek zamanlı karar verme için zorlu hale getirir. Doğrusal sistemler için izdüşüm tabanlı bir indirgenmiş model kompakt, hesaplanması kolay bir temsile sahiptir ve doğrusal bir modelin izdüşümü açık bir indirgenmiş biçim verir. Fakat doğrusal olmayan bir sistem için indirgenmiş operatörler orijinal gerçek boyutlu modele geri dönmeden açıkça hesaplanamaz (Salvador vd., 2021). Çekirdek yönteminin kullanılmasının temel nedeni, veriler iç çarpımsal olarak görüldüğünden, tüm hesaplamalar yüksek boyutlu özellik uzayında açıkça temsil edilmeden işlemlerin yapılabilmesinden kaynaklanmaktadır. Bunun nedeni, özellik uzayındaki iç çarpımların girdi uzayındaki çekirdek fonksiyonu cinsinden yazılabileceğini ifade eden çekirdek numarasıdır. Son yıllarda veri toplama, depolama ve hesaplama yöntemlerindeki gelişmeler, bu teknikler sayesinde hesaplamaların kolaylaşması nedeniyle, çekirdek yönteminin popülerliğini artırmıştır. Bu uygulamalar arasında nesne tanıma, metin sınıflandırma, zaman serisi tahmini ve DNA analizi de yer almaktadır. Birçok gerçek hayat problemi yalnızca doğrusal ilişkiler açısından tanımlanamaz ve bu nedenle doğrusal olmayan yöntemlere ihtiyaç duyulmaktadır. Literatürde difüzyon-reaksiyon sistemlerinde, örüntü oluşumunun indirgenmiş düzende modellenmesine ilişkin olarak, Ginzburg-Landau denklemi ve Fitz-Hugh Nagumo denklemi için çalışmalar bulunmaktadır. Çekirdek temelli araştırma ilk olarak Aizerman vd. (1964) tarafından tanıtılmıştır. Schölkopf ve Smola (1998), ÇTBA için özdeğer problemi ile daha genel sonuçlar elde etmişlerdir. İngiliz matematikçi olan Karl Pearson, çok değişkenli bir problemde değişken sayısının nasıl azaltılacağına dair ilk fikirleri ortaya atmıştır. Ayrıca, Mika (1999) tarafından görüntü işleme üzerine uygulanmış ve yeni beklenmeyen veri örneklerini belirlemek için ise Hoffmann (2007) tarafından çeşitli uygulamalar verilmiştir. ÇTBA yöntemi, Zhou (2019) tarafından doğrusal olmayan süreçlerin kontrolü için ve Bueso (2020) tarafından ise meydana gelen olayların konumsal-zamansal analizine uygulanmıştır. Gonzalez (2020), ÇTBA yönteminin çeşitli uygulamalarını incelemiştir. Bu çalışmada mevcut yöntem akışkanlar

dinamiği alanında uygulanmıştır. Akışkanlar dinamiği süreçlerini modelleyen KTD'nin çözümü ile elde edilen uzay-zamansal veri kümelerinin yeniden yapılandırılması için TBA ve ÇTBA arasındaki çözüm hataları ve çözüm süreleri ile ilgili karşılaştırmalar yapılmıştır.

Bu tez çalışmasının ana teması, girdi uzayını temsil eden bir veri matrisi üzerinden ÇTBA yöntemi uygulanarak boyutları indirgenmiş model elde edilip çözüldükten sonra, elde edilen yaklaşık verinin girdi uzayına geri getirilmesidir. Ancak, yüksek mertebeli modele geri dönüş zor olduğundan, Çok Boyutlu Ölçekleme (ÇBÖ) yönteminden yararlanılmıştır. Difüzyon-Reaksiyon KTD'nin çözümlerinden elde edilen veriler genel olarak doğrusal olmayan bir dağılım gösterebileceğinden, ÇTBA yönteminin merkezinde veri setlerinin boyutlarının indirgenerek modellenmesi yer almaktadır. Bu yöntem verimliliği korurken, daha düşük bir boyuta sahip anlık çözüm setinin daha doğru bir yaklaşım sunmasını sağlar. Bu nedenle, çözüm katsayılarını bulmak için bilinen yöntemlerin aksine, ÇTBA ile daha kolay ve daha az hesaplama ihtiyacı duyulur. İndirgenmiş sıralı bir uzayın üretilmesi için ÇTBA ve indirgenmiş sıralı yaklaşımın değerlendirilmesi için ÇBÖ'den yararlanılmıştır. Özellikle, indirgenmiş hızlı, güvenilir ve kesin çözümler elde etmek için modellerin yüksek kaliteli çözümünde klasik TBA yerine ÇTBA ve ÇBÖ kullanılmıştır.

Bu tez çalışması şu şekilde planlanmıştır: Birinci bölüm giriş bölümü olup, ikinci bölümde, temel bilgiler olarak Difüzyon-Reaksiyon KTD tanıtılacak ve bu denklemlerin tam ayırık sisteminin matematiksel modellenmesi, yani uzay ve zaman ayrıklaştırma yöntemleri kısaca işlenecektir. Ardından klasik TBA yöntemi hatırlatılacaktır. Üçüncü bölümde ise ayırık çözüm vektörleri ile elde edilen veri setine uygulanan ÇTBA süreci açıklanacaktır. İndirgenmiş çözümlerin doğruluğu, sistem enerjisi davranışlarının korunması ve hesaplama hızındaki artışlar dördüncü bölümde çeşitli difüzyon-reaksiyon KTD örnekleri üzerinden gösterilecektir.

2. GENEL BİLGİLER

Bu bölümde diğer bölümlerde kullanılacak olan temel bilgiler ve kavramlar açıklanmıştır.

2.1. Difüzyon-Reaksiyon Kısmi Türevli Denklemler

Difüzyon-Reaksiyon KTD, birçok fiziksel, kimyasal ve biyolojik süreçlerin matematiksel modellemesinde kullanılan önemli denklemlerin başında gelmektedir. Bu denklemler genellikle birçok bağımlı değişkenin zaman ve uzay konumlarında nasıl değiştiğini açıklamak için kullanılır. Difüzyon, maddenin rastgele hareketi sonucu bir ortam içinde yayılması sürecini tanımlarken, reaksiyon ise kimyasal veya biyolojik reaksiyonların meydana geldiği süreci ifade eder. Difüzyon-Reaksiyon denklemleri genellikle bilinmeyen bağımlı değişkenlerin kısmi türevlerini içeren diferansiyel denklemler şeklinde yazılır ve belirli koşullar altında çözümleri incelenir. Bu denklemler, matematiksel modelleme, fizik, kimya, biyoloji ve mühendislik gibi birçok alanda kullanılır. Difüzyon-Reaksiyon KTD, genellikle sayısal yöntemlerle çözülür. Bu çözümler, belirli koşullar altında sistemdeki bağımlı değişkenlerin nasıl davrandığını anlamak için kullanılır. Ayrıca, bu denklemlerin çözümleri, gerçek dünya problemlerine uygulanabilir ve bu sayede pratik uygulamalarda da kullanılır. Bu nedenle, Difüzyon-Reaksiyon KTD, bilimsel araştırmalarda ve endüstriyel uygulamalarda önemli bir rol oynamaktadır.

Bu bölümde, difüzyon-reaksiyon KTD üç ana başlık altında tanımlanacaktır. Örnek olarak bu sistemlere karşılık gelen en önemli problemler ve uygulama alanları tanıtılacaktır. Genel olarak bir $\Omega \in \mathbb{R}^d$ ($d \geq 1$) alanında ve bir $[0, T]$ zaman aralığında, bir difüzyon-reaksiyon KTD sistemi, $w_i(x, t): \Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ gerçel değerli fonksiyonlardan oluşan $\vec{w}(x, t) = (w_1(x, t), w_2(x, t), \dots, w_m(x, t))^T$ bilinmeyen fonksiyonların vektörü için

$$S \partial_t \vec{w} = D \Delta \vec{w} + f(\vec{w}), \quad f(\vec{w}) = Q \nabla_{\vec{w}} F(\vec{w}), \quad \vec{w} \in \Omega \times [0, T], \quad (2.1.1)$$

formunda yazılır (Yanagida, 2002). (2.1.1) denklemini beraberinde başlangıç ve sınır koşulları ile verilir. Burada, $f(\vec{w}): \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ doğrusal olmayan reaksiyon terimi, $F(\vec{w}): \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ gerçel değerli potansiyel fonksiyon, $D \in \mathbb{R}^{m \times m}$ difüzyon katsayılarını içeren köşegen matrisi, $S \in \mathbb{R}^{m \times m}$ negatif olmayan köşegen bir matris, $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ dejenere olmayan ve $Q^2 = I$ bağıntısını sağlayan simetrik bir matris olmak üzere,

$D^T Q = QD$ koşulu sağlanır ve buradan QD matrisinin dejenere olmaması gerçekleşir. Ayrıca doğrusal olmayan $f(\vec{w})$ reaksiyon vektörü için $f_{\vec{w}} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ Jakobiye matrisi, $f_{\vec{w}}(\vec{w})^T Q = Q f_{\vec{w}}(\vec{w})$ koşulunu sağlar. Sistem (2.1.1)'e karşılık gelen enerji fonksiyoneli,

$$E[\vec{w}] = \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2} \langle D \nabla \vec{w}, Q \nabla \vec{w} \rangle_{\mathbb{R}^m} - F(\vec{w}) \right\} dx, \quad (2.1.2)$$

olmak üzere enerji fonksiyonelinin türevi $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathbb{R}^m}$ standart m boyutlu Öklit iç çarpımı için

$$\frac{d}{dt} E[\vec{w}(x, t)] = - \int_{\Omega} \langle \vec{w}_t, Q S \vec{w}_t \rangle_{\mathbb{R}^m} dx, \quad (2.1.3)$$

olarak hesaplanır. (2.1.3) denkleminin sağlandığı kısmi integrasyon ile $Q^2 = I$, $D^T Q = QD$ ve $f_{\vec{w}}(\vec{w})^T Q = Q f_{\vec{w}}(\vec{w})$ bağıntıları kullanılarak aşağıdaki adımlarla görülebilir:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E[\vec{w}(x, t)] &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2} \langle D \nabla \vec{w}, Q \nabla \vec{w} \rangle_{\mathbb{R}^m} - F(\vec{w}) \right\} dx, \\ &= \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2} \langle D \nabla \vec{w}_t, Q \nabla \vec{w} \rangle_{\mathbb{R}^m} + \frac{1}{2} \langle D \nabla \vec{w}, Q \nabla \vec{w}_t \rangle_{\mathbb{R}^m} - \langle \nabla_{\vec{w}} F(\vec{w}), \vec{w}_t \rangle_{\mathbb{R}^m} \right\} dx, \\ &= \int_{\Omega} \left\{ -\frac{1}{2} \langle D \vec{w}_t, Q \Delta \vec{w} \rangle_{\mathbb{R}^m} - \frac{1}{2} \langle D \Delta \vec{w}, Q \vec{w}_t \rangle_{\mathbb{R}^m} - \underbrace{Q Q}_I \langle \nabla_{\vec{w}} F(\vec{w}), \vec{w}_t \rangle_{\mathbb{R}^m} \right\} dx, \\ &= \int_{\Omega} \left\{ -\frac{1}{2} \langle D \vec{w}_t, Q \Delta \vec{w} \rangle_{\mathbb{R}^m} - \left\langle \frac{1}{2} D \Delta \vec{w} + f(\vec{w}), Q \vec{w}_t \right\rangle_{\mathbb{R}^m} \right\} dx, \\ &= \int_{\Omega} \left\{ -\frac{1}{2} \langle D \vec{w}_t, Q \Delta \vec{w} \rangle_{\mathbb{R}^m} - \left\langle \frac{1}{2} D \Delta \vec{w} + S \vec{w}_t - D \Delta \vec{w}, Q \vec{w}_t \right\rangle_{\mathbb{R}^m} \right\} dx, \\ &= \int_{\Omega} \left\{ -\frac{1}{2} \langle D \vec{w}_t, Q \Delta \vec{w} \rangle_{\mathbb{R}^m} - \left\langle -\frac{1}{2} D \Delta \vec{w} + S \vec{w}_t, Q \vec{w}_t \right\rangle_{\mathbb{R}^m} \right\} dx, \\ &= \int_{\Omega} \left\{ -\frac{1}{2} \langle D \vec{w}_t, Q \Delta \vec{w} \rangle_{\mathbb{R}^m} + \frac{1}{2} \langle Q D \Delta \vec{w}, \vec{w}_t \rangle_{\mathbb{R}^m} - \langle Q S \vec{w}_t, \vec{w}_t \rangle_{\mathbb{R}^m} \right\} dx, \\ &= \int_{\Omega} \left\{ -\frac{1}{2} (\vec{w}_t)^T \underbrace{D^T Q}_{QD} \Delta \vec{w} + \frac{1}{2} (\vec{w}_t)^T Q D \Delta \vec{w} - \langle Q S \vec{w}_t, \vec{w}_t \rangle_{\mathbb{R}^m} \right\} dx, \\ &= - \int_{\Omega} \langle Q S \vec{w}_t, \vec{w}_t \rangle_{\mathbb{R}^m} dx. \end{aligned}$$

S, Q ve D matrislerinin durumuna göre (2.1.1) sisteminden Hamilton, gradyan ve anti-gradyan olmak üzere üç farklı temel denklem sınıfı elde edilebilir (Diez vd., 2021).

2.1.1. Hamilton sistemler

Hamilton KTD fizik, mühendislik ve matematik alanlarında yaygın olarak kullanılan önemli sistemlerdir. Özellikle klasik ve kuantum mekaniği, optik, kontrol teorisi gibi alanlarda önemli bir rol oynar. Hamilton sistemler, (2.1.2) ile verilen sistem enerjisinin korunduğu yani zaman içinde değişmediği, başka bir deyişle (2.1.3) ile verilen enerji fonksiyoneli türevinin sıfır olduğu duruma karşılık gelen sistemlerdir. Bu sistemlerde, doğru bir sayısal çözüm elde etmek için sistem enerjisinin sayısal olarak da korunması esastır (Afkham ve Hesthaven, 2019). En bilinen ve araştırılan Hamilton sistemlerin arasında Korteweg-De Vries (KdV) denklemi ve doğrusal olmayan Schrödinger (NLS) denklemi örnek olarak verilebilir. KdV denklemi, doğrusal olmayan hiperbolik bir denklem olup sığ su dalgaları, okyanustaki dalgalar, bir plazmadaki akustik dalgalar ve daha fazlası dahil olmak üzere tek boyutlu dalgaların yayılmasını açıklamak için kullanılan bir diferansiyel denklemdir. Genel olarak KdV denklemi

$$\partial_t u = -\alpha u \partial_x u - \mu \partial_{xxx} u, \quad [a, b] \times [0, T], \quad (2.1.1.1)$$

şeklinde olup, bir $u(x, 0) = u^0(x)$ başlangıç koşulu ve $u(a, t) = u(b, t)$ periyodik sınır koşulları altında $\alpha, \mu \in \mathbb{R}$ sistem parametreleri için yazılabilir. (2.1.1.1) ile verilen KdV denklemi

$$\partial_t u = \partial_x \left(-\frac{\alpha}{2} u^2 - \mu \partial_{xx} u \right), \quad [a, b] \times [0, T],$$

formunda da yazılabileceğinden,

$$S = \frac{1}{\partial_x}, \quad D = -\mu, \quad Q = -1,$$

için KdV denklemi, $m = 1$ bileşenli (2.1.1) ile verilen formda bir denklemdir. İlgili potansiyel fonksiyon $F(u) = \alpha u^3/6$ olup, KdV denklemine ait olan ve (2.1.2) ile verilen enerji fonksiyonu

$$E[u] = \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2} \langle -\mu u_x, (-1)u_x \rangle_{\mathbb{R}} - \frac{\alpha}{6} u^3 \right\} dx = \int_{\Omega} \left(\frac{\mu}{2} u_x^2 - \frac{\alpha}{6} u^3 \right) dx,$$

olarak bulunur. Bu bağıntılar için (2.1.3) ile verilen enerji fonksiyonunun türevi

$$\frac{d}{dt} E[u(x, t)] = - \int_{\Omega} \langle u_t, Q S u_t \rangle_{\mathbb{R}^m} dx = \int_{\Omega} u_t \frac{1}{\partial_x} u_t dx = 0,$$

olduğundan sistem enerjisi korunur. Son denklemde sonucun sıfır olarak gerçekleşmesinin sebebi, sayısal olarak bu tez çalışmasında kullanılacak olan birinci mertebe kısmi türev operatörünün anti-simetrik bir matrisle, (2.2.1.1.1) ile verilen D_1

matrisiyle ifade edilmesidir. Yani, anti-simetrik bir matrisin tersinin de anti-simetrik olmasından dolayı $u_t \frac{1}{\partial_x} u_t$ ifadesinin sıfır olmasıdır.

Enerji fonksiyonunun yanında, KdV denkleminin çözümleri başka önemli ölçüleri de korumaktadır. Bunların başında $I_1(u)$ momentum fonksiyonu ve $I_2(u)$ kütle fonksiyonu gelmekte olup

$$I_1[u] = \int_{\Omega} u dx, \quad I_2[u] = \int_{\Omega} u^2 dx,$$

formülleri ile tanımlanmaktadır.

NLS denklemini, fiber optikte, düzlemsel dalgalarda ışığın iletiminde ve Bose-Einstein yoğuşma teorisinde yavaş değişen dalga gruplarının hareketlerini tanımlayan model denklem olarak verilir (Karasözen v.d., 2014). Bir, $\psi(x, t)$ kompleks değerli bilinmeyen fonksiyon için, NLS denklemini

$$i\psi_t = -\mu\Delta\psi - \beta|\psi|^2\psi, \quad (2.1.1.2)$$

formunda olup bir $\psi(x, 0) = \psi_0(x)$ başlangıç koşulu ve $\psi(x, t) = \psi(x + L, t)$ periyodik sınır koşulu ile birlikte verilir. Burada $x \in \mathbb{R}$ konum noktası, $\mu > 0$ difüzyon parametresi olup, β pozitif değerleri için sistemi itici özellikte yaparken negatif değerleri için sistemi geri çekici bir özelliğe sahip kılan bir sistem parametresidir. $\psi(x, t)$ kompleks değerli bir fonksiyon olduğundan $\psi(x, t) = p(x, t) + iq(x, t)$ şeklinde reel değerli $p(x, t)$ ve $q(x, t)$ fonksiyonları cinsinden yazılabilir. Bu durumda (2.1.1.2) ile verilen denklem sistemi,

$$p_t = -\mu\Delta q - \beta(p^2 + q^2)q \quad (2.1.1.3)$$

$$q_t = \mu\Delta p + \beta(p^2 + q^2)p$$

olarak yazılabilir. Bu formuyla NLS denklemini, $\vec{w} = (p, q)^T$ vektörü ($m = 2$),

$$F(p, q) = \frac{\beta}{4}(p^2 + q^2)^2,$$

potansiyel fonksiyonu ve

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} 0 & -\mu \\ \mu & 0 \end{pmatrix}, \quad Q = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

matrisleri için (2.1.1) ile verilen formda bir sistemdir. Sistemin (2.1.2) ile verilen enerji fonksiyonu

$$\begin{aligned} E[p, q] &= \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2} \langle D \nabla \vec{w}, Q \nabla \vec{w} \rangle_{\mathbb{R}^2} - F(\vec{w}) \right\} dx, \\ &= \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2} \left\langle \begin{pmatrix} 0 & -\mu \\ \mu & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla p \\ \nabla q \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla p \\ \nabla q \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{R}^2} - \frac{\beta}{4}(p^2 + q^2)^2 \right\} dx, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2} \left\langle \begin{pmatrix} -\mu \nabla q \\ \mu \nabla p \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\nabla q \\ \nabla p \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{R}^2} - \frac{\beta}{4} (p^2 + q^2)^2 \right\} dx, \\
&= \int_{\Omega} \left(\frac{\mu}{2} |\nabla p|^2 + \frac{\mu}{2} |\nabla q|^2 - \frac{\beta}{4} (p^2 + q^2)^2 \right) dx,
\end{aligned}$$

olarak hesaplanır. Sistemin (2.1.3) ile verilen enerji fonksiyonunun türevi hesaplandığında

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} E[\vec{w}(x, t)] &= - \int_{\Omega} \langle \vec{w}_t, Q S \vec{w}_t \rangle_{\mathbb{R}^2} dx = - \int_{\Omega} \left\langle \begin{pmatrix} p_t \\ q_t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_t \\ q_t \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{R}^2} dx, \\
&= - \int_{\Omega} \left\langle \begin{pmatrix} p_t \\ q_t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -q_t \\ p_t \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{R}^2} dx, \\
&= - \int_{\Omega} (-p_t q_t + p_t q_t) dx, \\
&= 0,
\end{aligned}$$

olduğundan sistem enerjisi korunur (Karasözen ve Uzunca, 2018). KdV denklemi gibi NLS denkleminin çözümleri de enerji fonksiyonunun yanında başka önemli ölçüleri de korumaktadır. Bunların başında yine $I_1(p, q)$ momentum fonksiyonu ve $I_2(p, q)$ kütle fonksiyonu gelmekte olup

$$I_1[p, q] = \int_{\Omega} (p q_x - q p_x) dx, \quad I_2[p, q] = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (p^2 + q^2) dx,$$

formülleri ile tanımlanmaktadır.

2.1.2. Gradyan sistemler

Gradyan sistemlerde, sürtünme gibi enerjiyi azaltan kuvvetler sistemin enerjisini değiştirebilir. Bu tür sistemlerde enerji artık korunmadığından, mevcut yöntemler artık doğrudan uygulanamayabilir. Enerjinin azaldığı modeller, (2.1.3) ile verilen enerji fonksiyonunun türevinin negatif olduğu sınıftır. Bu denklemlere örnek olarak, Allen-Cahn (AC) ve Swift-Hohenberg (SH) denklemleri verilebilir.

AC denklemi, faz geçişi problemlerinde yaygın olarak kullanılan bir diferansiyel denklem modelidir. Bu denklem, faz dönüşümü ve ayrışma, kristal büyümesi, kimyasal reaksiyonlar, görüntü işleme gibi pek çok uygulama alanında kullanılır. Örneğin, malzeme biliminde AC denklemi; polimer, metal ve seramik malzemelerin faz

dönüşümlerini modellemek için kullanılır. Bir $\varepsilon > 0$ difüzyon parametresi için AC denklemi

$$\partial_t u = \varepsilon \Delta u + u - u^3, \quad (2.1.2.1)$$

olarak verilir. (2.1.2.1) denklemi beraberinde bir başlangıç koşulu ve periyodik sınır koşulu ile verilir. Bazı modellerde, homojen Neumann sınır koşulu ile birlikte de verilebilmektedir, yani sınır noktalarındaki dışa dönük yönsel türevinin sıfır olması koşulu. AC denklemi, $S = 1$, $D = \varepsilon$ ve $Q = 1$ için (2.1.1) ile verilen formda tek bileşenli bir sistemdir. Sistemin potansiyel fonksiyonu $F(u) = -(u^2 - 1)^2/4$ olup, (2.1.2) ile verilen enerji fonksiyonu

$$\begin{aligned} E[u] &= \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} \langle D \nabla u, Q \nabla u \rangle_{\mathbb{R}} - F(u) \right) dx, \\ &= \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} \langle \varepsilon \nabla u, \nabla u \rangle_{\mathbb{R}} + \frac{1}{4} (u^2 - 1)^2 \right) dx, \\ &= \int_{\Omega} \left(\frac{\varepsilon}{2} |\nabla u|^2 + \frac{1}{4} (u^2 - 1)^2 \right) dx, \end{aligned}$$

olarak hesaplanır. Bu durumda (2.1.3) ile verilen enerji fonksiyonunun türevi

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E[u(x, t)] &= - \int_{\Omega} \langle u_t, Q S u_t \rangle_{\mathbb{R}} dx = - \int_{\Omega} \langle u_t, u_t \rangle_{\mathbb{R}} dx, \\ &= - \int_{\Omega} (u_t)^2 dx < 0, \end{aligned}$$

olduğundan sistem enerjisi azalır (Mori ve Kuramoto, 1998).

Swift-Hohenberg denklemi örüntü görüntü oluşturma davranışıyla dikkat çeken bir kısmi diferansiyel denklemdir. Basit sıvılarda ve çeşitli karmaşık sıvılarda ve sinir dokuları gibi biyolojik materyallerde kalıpları modellemek için de kullanılmıştır (Kuwamura ve Yanagida, 2020). SH denklemi

$$\partial_t u = \mu u - (1 + \Delta)^2 u - u^3,$$

formunda bir başlangıç koşulu ve periyodik/homojen Neumann sınır koşulu ile verilir. Orjininde 4. mertebe bir diferansiyel denklem olan SH denklemi, $v = u + \Delta u$ dönüşümü altında

$$\begin{aligned} \partial_t u &= -\Delta v + \mu u - u^3 - v \\ 0 &= \Delta u + u - v \end{aligned} \quad (2.1.2.2)$$

denklem sistemi olarak 2. mertebe bir diferansiyel denklem sistemi olarak yazılabilir. Bu sistem, $\vec{w} = (u, v)^T$ vektörü ($m = 2$),

$$F(u, v) = \frac{\mu}{2}u^2 - \frac{1}{4}u^4 - uv + \frac{1}{2}v^2,$$

potansiyel fonksiyonu ve

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad Q = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

matrisleri için (2.1.1) ile verilen formda bir sistemdir. Sistemin (2.1.2) ile verilen enerji fonksiyonu

$$\begin{aligned} E[u, v] &= \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2} \langle D \nabla \vec{w}, Q \nabla \vec{w} \rangle_{\mathbb{R}^2} - F(\vec{w}) \right\} dx, \\ &= \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2} \left\langle \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla u \\ \nabla v \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla u \\ \nabla v \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{R}^2} - \frac{\mu}{2}u^2 + \frac{1}{4}u^4 + uv - \frac{1}{2}v^2 \right\} dx, \\ &= \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2} \left\langle \begin{pmatrix} -\nabla v \\ \nabla u \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \nabla u \\ -\nabla v \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{R}^2} - \frac{\mu}{2}u^2 + \frac{1}{4}u^4 + uv - \frac{1}{2}v^2 \right\} dx, \\ &= \int_{\Omega} \left(-\nabla u \cdot \nabla v - \frac{\mu}{2}u^2 + \frac{1}{4}u^4 + uv - \frac{1}{2}v^2 \right) dx, \end{aligned}$$

olarak hesaplanır. Bu durumda (2.1.3) ile verilen enerji fonksiyonunun türevi

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E[\vec{w}(x, t)] &= - \int_{\Omega} \langle \vec{w}_t, Q S \vec{w}_t \rangle_{\mathbb{R}^2} dx = - \int_{\Omega} \left\langle \begin{pmatrix} u_t \\ v_t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_t \\ v_t \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{R}^2} dx, \\ &= - \int_{\Omega} \left\langle \begin{pmatrix} u_t \\ v_t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_t \\ v_t \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{R}^2} dx = - \int_{\Omega} \left\langle \begin{pmatrix} u_t \\ v_t \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} u_t \\ 0 \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{R}^2} dx, \\ &= - \int_{\Omega} (u_t)^2 dx < 0, \end{aligned}$$

olduğundan sistem enerjisi azalır (Mori ve Kuramoto, 1998).

2.1.3. Anti-Gradyan sistemler

Anti-gradyan sistemler, sistem enerjisinin bazı zaman dilimlerinde azalıp bazı zaman dilimlerinde arttığı durumlara sahip sistemlerdir. Bu tip denklemlere örnek olarak FitzHugh-Nagumo (FHN) denklemi verilebilecek örneklerin başında gelmektedir. FHN denklem sistemi inhibitör değişkeninin yavaş ve aktivatör değişkeninin hızlı olduğu inhibitör-aktivatör sistemleridir. Başlangıçta nöronların aksiyon potansiyeli aktivitesini

tanımlamak için kullanılmasıyla birlikte, FHN denklemi, uyarma ve difüzyonun birleşmesi, spiral dalga dinamiğinde ortaya çıkabilecek uyarılabilir ortamlarda dalgaların yayılmasını ele almayı uygun hale getirir. Dolayısıyla bu denklem sistemi benzer fiziksel özelliklere sahip diğer modeller için bir başlangıç sağlamıştır. İlave olarak FHN denklem sistemi, su temini ve sulama içeren güç üretim sistemlerinde veya hastalık ve mikroorganizmaların yayılmasını içeren doğum-ölüm reaksiyonu modellerinde, merkezi sinir sistemleri ile akıllı sistemler arasında sinyal iletimini kullanan robotik protez modelleri de dahil olmak üzere kullanılabilir (Chen ve Choi, 2014). FHN denklemi,

$$\begin{aligned}\tau_1 u_t &= d_1 \Delta u + f_1(u) + f_2(v) \\ \tau_2 v_t &= d_2 \Delta v + g_1(u) + g_2(v)\end{aligned}\tag{2.1.3.1}$$

formunda verilir. Bu sistem,

$$S = \begin{pmatrix} \tau_1 & 0 \\ 0 & \tau_2 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} d_1 & 0 \\ 0 & d_2 \end{pmatrix}, \quad Q = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

matrisleri için (2.1.1) ile verilen formda bir sistemdir. Sistemin

$$F[u, v] = -\frac{u^4}{4} + \frac{(1 + \beta)u^3}{3} - \frac{\beta u^2}{2} - uv + \frac{\gamma v^2}{2} - \varepsilon v,$$

potansiyel fonksiyonu için (2.1.2) ile verilen enerji fonksiyoneli

$$\begin{aligned}E[u, v] &= \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2} \langle D \nabla \vec{w}, Q \nabla \vec{w} \rangle_{\mathbb{R}^2} - F(\vec{w}) \right\} dx, \\ &= \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2} \left\langle \begin{pmatrix} d_1 & 0 \\ 0 & d_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla u \\ \nabla v \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla u \\ \nabla v \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{R}^2} - F(u, v) \right\} dx, \\ &= \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{2} \left\langle \begin{pmatrix} d_1 \nabla u \\ d_2 \nabla v \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \nabla u \\ -\nabla v \end{pmatrix} \right\rangle_{\mathbb{R}^2} - F(u, v) \right\} dx, \\ &= \int_{\Omega} \left\{ \frac{d_1}{2} |\nabla u|^2 - \frac{d_2}{2} |\nabla v|^2 - F(u, v) \right\} dx,\end{aligned}$$

olarak bulunur. Bu durumda, (2.1.3) ile verilen bağıntıya karşılık gelen enerji fonksiyonelinin türevinin işareti değişkenlik gösterip, enerjinin bazı yerlerde azalıp bazı yerlerde arttığı görülebilir (Yanagida, 2002).

2.2. Ayırıklaştırılmış Model

Bu bölümde bir ve iki boyutlu model problemlerinin periyodik/homojen Neumann sınır koşulu altında uzay-zaman ayırıklaştırılması ifade edilecektir. Notasyon kolaylığı için, tam ayırık sistem formülasyonu, $u(x, 0) = u^0(x)$ başlangıç koşulu için bir $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d = 1, 2$) alanında

$$\partial_t u = \Delta u + f(u), \quad (2.2.1)$$

yarı-doğrusal model problemi için verilecektir. Ayırıklaştırma yöntemi olarak konumsal uzayda sonlu farklar kullanılıp, zaman boyutunda Kahan (Celledoni vd., 2012) yöntemi verilecektir.

2.2.1. Uzayda ayırıklaştırma

Bu tez çalışmasında, verilen denklemlerin ayırık çözümleri elde edilirken konumsal uzayda sonlu farklar kullanılacaktır. Sonlu farklar yöntemlerinin temelinde, denklemin geçerli olduğu konumsal uzaydaki sonlu sayıdaki ayırık noktalarda (ağ noktaları) bilinmeyen fonksiyonun yaklaşık değerlerinin bulunması yatmaktadır. Bağımlı değişkenlerin değerlerinin bilinmediği ağ noktası sayısı, oluşacak olan yarı ayırık (dinamik) sistemin boyutunu, N diyelim, vermektedir. Belirli bir t zamanındaki yarı ayırık bilinmeyen vektörü, $\mathbf{u}(t) : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^N$, ağdaki söz konusu N noktadaki yaklaşık değerlerden oluşmaktadır. Konumsal kısmi türev terimleri için ise ilgili sonlu farklar formülleri gözetilerek dinamik sistemde yer alacak sistem matrisleri kullanılır. Bu tanımlar sonucu (2.2.1) ile verilen modeline ait N boyutlu yarı ayırık sistem, $\mathbf{u}(t) : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^N$ zamanda sürekli yarı ayırık çözüm vektörü ve Δ Laplace operatörünü temsil edecek A doğrusal sistem matrisi için

$$\dot{\mathbf{u}} = A\mathbf{u} + \mathbf{f}(\mathbf{u}), \quad (2.2.1.1)$$

denklem sistemi ile verilir. Burada, $\dot{\mathbf{u}}$ terimi $\mathbf{u}$ vektörünün t zaman değişkenine göre adi türevini ifade ederken $\mathbf{f}(\mathbf{u}) : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ vektörü (2.2.1) denkleminde verilen doğrusal olmayan $f(u)$ fonksiyonunu temsil etmekte olup girdileri $\mathbf{f}_i = f(u_i)$ olarak tanımlanır, $i = 1, \dots, N$. Sonuç olarak, (2.2.1.1) ile verilen model dinamik sisteminin oluşturulması için, konumsal uzayın boyutuna bağlı olarak, konumsal ağdaki N ayırık noktanın ve Laplace operatörünü temsil edecek A doğrusal sistem matrisinin belirlenmesi gerekmektedir. Bunun için, öncelikle $d = 1$ boyutlu uzayda formülasyon verilecek olup,

bulunan formüller Kronecker çarpım yardımıyla $d = 2$ boyutlu uzaydaki formülasyonlara genişletilecektir.

2.2.1.1. Bir boyutlu uzayda ayırıklaştırma

Konumsal uzayda bir boyutlu ($d = 1$) kısmi türevli denklemin yarı ayırık formunun elde edilmesine, alınan $\Omega = [a, b]$ aralığının N eşit parçaya bölünmesiyle başlanır:

$$a = x_1 < x_2 < \dots < x_{N+1} = b, \quad \Delta x = (b - a)/(N).$$

Burada, aralıkların uzunluğu olan Δx değeri ile x_i ayırık konum noktaları birlikte ayırık bölüntüyü (ağ) oluşturur ve Δx değeri bölüntünün ölçüsü olarak adlandırılır. Oluşturulmuş olan bölüntü üzerindeki her ağ noktasında ayırık çözümlerden oluşan N boyutlu çözüm vektörü

$$\mathbf{u} := \mathbf{u}(t) = (u_1(t), u_2(t), \dots, u_N(t))^T, \quad u_i(t) = u(x_i, t), \quad i = 1, \dots, N,$$

şeklinde tanımlanır. Dikkat edilirse, periyodik sınır koşulundan dolayı, $u(x_i, t) = u(x_{N+i}, t)$, ayırık çözüm vektöründe bilinen $u_{N+1}(t) = u_1(t)$ değerine yer verilmemiştir. Homojen Neumann sınır koşulu söz konusu olduğunda, $u_{N+1}(t)$ bileşeni de çözüm vektöründe yer alır ve sistem boyutu $N := N + 1$ olur. Yarı ayırık formun elde edilmesinde sıradaki işlem, problemdeki diferansiyel operatörlere yaklaşık olarak karşılık gelecek matrislerin belirlenmesidir. Birinci mertebe türev operatörü, her ne kadar (2.2.1) ile verilen model denkleminde yer almasa da,

$$\partial_x u|_{x_i} \approx \frac{1}{2\Delta x} (u_{i+1} - u_{i-1}), \quad i = 1, \dots, N,$$

merkezi sonlu bölünmüş fark formülü kullanılacaktır. Periyodik sınır koşulları altında, yukarıdaki formül

$$i = 1 \Rightarrow \frac{1}{2\Delta x} (u_2 - u_N)$$

$$i = 2, \dots, N - 1 \Rightarrow \frac{1}{2\Delta x} (u_{i+1} - u_{i-1})$$

$$i = N \Rightarrow \frac{1}{2\Delta x} (u_1 - u_{N-1})$$

bağıntılarını sağlar. Söz konusu bağıntılar sonucu oluşan birinci mertebe türev için D_1 sonlu farklar matrisi

$$D_1 = \frac{1}{2\Delta x} \begin{bmatrix} 0 & 1 & & & & & -1 \\ -1 & 0 & 1 & \dots & & & \vdots \\ \vdots & -1 & 0 & 1 & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & -1 & 0 & 1 \\ \vdots & & & & -1 & 0 & 1 \\ 1 & \dots & & & \dots & -1 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times N}, \quad (2.2.1.1.1)$$

formunda yazılır. Homojen Neumann sınır koşulu altında, yukarıdaki matrisin boyutu $N = N + 1$ olup, -1 olan ilk satırın son girdisi ile 1 olan son satırın ilk girdisi 0 değerini alırlar. İkinci mertebe türev (Laplace) operatörü için ise

$$\partial_{xx}u|_{x_i} \approx \frac{1}{\Delta x^2} (u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}), \quad i = 1, \dots, N,$$

merkezi sonlu bölünmüş fark formülü kullanılacaktır. Periyodik sınır koşulları altında, yukarıdaki formül

$$i = 1 \Rightarrow \frac{1}{\Delta x^2} (u_N - 2u_1 + u_2)$$

$$i = 2, \dots, N-1 \Rightarrow \frac{1}{\Delta x^2} (u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1})$$

$$i = N \Rightarrow \frac{1}{\Delta x^2} (u_{N-1} - 2u_N + u_1)$$

bağıntılarını sağlar. Söz konusu bağıntılar sonucu oluşan ikinci mertebe türev için D_2 sonlu farklar matrisi

$$D_2 = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & & & & & 1 \\ 1 & -2 & 1 & \dots & & & \vdots \\ \vdots & 1 & -2 & 1 & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \ddots & 1 & -2 & 1 \\ \vdots & & & & 1 & -2 & 1 \\ 1 & \dots & & & \dots & 1 & -2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N \times N},$$

formunda yazılır. Homojen Neumann sınır koşulu altında, yukarıdaki matrisin boyutu $N = N + 1$ olup, 1 olan ilk satırın son girdisi ve son satırın ilk girdisi 0 değerini alırlar. Tanımı verilmiş $D_1 \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ve $D_2 \in \mathbb{R}^{N \times N}$ matrisleri kullanılarak, bir KTD’de yer alan birinci ve ikinci mertebe türev terimlerinin ağdaki x_i ayrık noktalarındaki değerleri yaklaşık olarak sırasıyla

$$D_1 \mathbf{u} \in \mathbb{R}^{N \times N}, \quad D_2 \mathbf{u} \in \mathbb{R}^{N \times N},$$

terimleri ile ifade edilirler. Bu tanımlar sonucu, konumsal uzayda bir boyutlu (2.2.1.1) model dinamik sistemindeki doğrusal sistem matrisi $A = D_2$ olarak alınır.

2.2.1.2. İki boyutlu uzayda ayrıklaştırma

Konumsal uzayda iki boyutlu ($d = 2$) kısmi türevli denklemin yarı ayrık formu için, $\Omega = [a, b] \times [c, d]$ alanı x ve y eksenleri yönünde sırasıyla N_x ve N_y sayıda eşit parçaya bölünerek iki boyutlu

$$a = x_1 < x_2 < \dots < x_{N_x+1} = b, \quad \Delta x = (b - a)/(N_x),$$

$$c = y_1 < y_2 < \dots < y_{N_y+1} = d, \quad \Delta y = (d - c)/(N_y),$$

ağı oluşturulur. Yarı ayrık $\mathbf{u}(\mathbf{t}) : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^{N \times N}$ çözüm vektörü ($N = N_x N_y$), $u_{i,j}(t) = u(x_i, y_j, t)$, $i = 1, \dots, N_x$, $j = 1, \dots, N_y$, için

$$\mathbf{u} := \mathbf{u}(t) = \left(u_{1,1}(t), \dots, u_{1,N_y}(t), u_{2,1}(t), \dots, u_{N_x,N_y}(t) \right)^T,$$

olarak tanımlanırsa, iki boyutlu uzaydaki birinci ve ikinci mertebe türev terimlerine karşılık gelen $D_x, D_y, D_{xx}, D_{yy} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ merkezi sonlu farklar matrisleri

$$D_x = D_1 \otimes I_y, \quad D_{xx} = D_2 \otimes I_y, \quad D_y = I_x \otimes D_1, \quad D_{yy} = I_x \otimes D_2,$$

formülleri ile hesaplanabilirler (Uzunca vd., 2021). Burada I_x ve I_y matrisleri sırasıyla N_x ve N_y boyutlu birim matrisler, $\otimes$ Kronecker çarpımı olup D_1 ve D_2 matrisleri Bölüm 2.2.1.1'de tanımlanmıştır. Verilen tanımlar sonucu, konumsal uzayda iki boyutlu (2.2.1.1) ile verilen model dinamik sistemindeki doğrusal sistem matrisi $A = D_{xx} + D_{yy}$ olarak alınır. Kronecker çarpım sınır koşullarını koruduğundan, homojen Neumann sınır koşulu altında, bir boyutlu uzayda tanımlanmış olan ilgili matrislerin kullanılması yeterli olmaktadır.

2.2.2. Zamanda ayrıklaştırma

Yarı ayrık formdaki (2.2.1.1) ile verilen model denklem sisteminin tam ayrık formu için, öncelikli olarak $[0, T]$ aralığı K eşit parçaya bölünerek

$$0 = t_0 < t_1 < \dots < t_K = T, \quad \Delta t = T/K,$$

zaman ağı oluşturulur. Sonrasında, $t = t_k$ anındaki yaklaşık çözüm vektörü $\mathbf{u}^k \approx \mathbf{u}(t_k)$ formunda tanımlansın. Tam ayrık çözümlerin elde edilebilmesi için, zamana göre türev terimi içeren yarı ayrık sistemin bir sayısal yöntem ile integre edilmesi gereklidir. Bu tez çalışmasında, verilen problemlerin zamanda ayrıklaştırılması için Kahan yöntemi kullanılmıştır (Kahan ve Li, 1997). Kahan yöntemi ikinci mertebe yakınsaklığa sahip bir yöntem olup en önemli özelliklerinin başında doğrusal-kapalı bir yöntem olması gelmektedir, başka bir deyişle ayrıklaştırma sonucu elde edilen sistem bilinmeyen seviyedeki çözüm vektörü için doğrusal olup doğrusal olmayan sistemlerin çözümünde kullanılan Newton tipi iteratif yöntemlere gerek olmamaktadır (Celledoni vd., 2012). (2.2.1) ile verilen model probleminin, (2.2.1.1) ile verilen yarı ayrık haline Kahan yöntemi uygulandığında

$$\left(I_N - \frac{\Delta t}{2} \mathbf{R}'(\mathbf{u}^k)\right) (\mathbf{u}^{k+1} - \mathbf{u}^k) = \Delta t \mathbf{R}(\mathbf{u}^k), \quad k = 0, 1, \dots, K-1,$$

tam ayrık sistem formülasyonu elde edilir. Burada, $\mathbf{R}(\mathbf{u}) = \mathbf{A}\mathbf{u} + \mathbf{f}(\mathbf{u})$ vektörü yarı ayrık sistemin sağ tarafını temsil ederken, $\mathbf{R}'(\mathbf{u}) \in \mathbb{R}^{N \times N}$ matrisi

$$(\mathbf{R}'(\mathbf{u}))_{ij} = \frac{\partial \mathbf{R}_i}{\partial \mathbf{u}_j}, \quad i, j = 1, \dots, N,$$

girdilerine sahip olup $\mathbf{R}(\mathbf{u})$ vektörünün jakobiyen matrisini ifade eder. Dikkat edilecek olunursa, oluşan tam ayrık sistem ile $\mathbf{u}^{k+1}$ bilinmeyen vektörü tek bir doğrusal denklem sisteminin çözümüyle hesaplanabilmektedir.

2.3. Temel Bileşenler Analizi

Temel Bileşenler Analizi (TBA) olarak bilinen yöntemin ilk tanımları, Karl Pearson (1901) tarafından yapıldığı literatürde genel olarak kabul edilmektedir. TBA'nın amacı doğrusal bağımlı çok sayıda veriden, birbirinden bağımsız daha az sayıda veri elde etmektir. Buradaki en önemli nokta, veri boyutunun düşürülebilmesi için doğrusal olarak bağımlı verilerin ayıklanmaya çalışılmasıdır. Bu sayede boyut azalırken, verilerin sistemdeki tanımlayıcı olma niteliği de korunur. Dolayısıyla, TBA yöntemi, veri sıkıştırma yöntemi olarak da kullanılabilir. TBA, sonlu bir sayıda değişkenden oluşan bir veri setini, çok daha az sayıda ve bu değişkenlerin doğrusal bileşenleri olan yeni değişkenlerle ifade etme yöntemidir. Yani, aralarında korelasyon bulunan sonlu bir sayıdaki değişkenlerin açıkladığı yapıyı, aralarında korelasyon bulunmayan ve orijinal

değişken sayısından çok daha az sayıda yani daha küçük boyutlu doğrusal bileşenleri olan değişkenlerle ifade etme yöntemine TBA denir (Johnson ve Wichern, 2007).

TBA, veri setiyle ifade edilmiş olan bilgiyi daha farklı formda ifade etmek amacıyla uygulanan bir yöntemdir. Veri setindeki tüm değişkenler bir teknik içerisinde, aynı doğrultuda hizmet ederler. İçlerinden herhangi bir tanesi diğerini açıklamak için seçilmez. TBA, veri setini yeniden ifade etmeye yarayan bir teknik olarak bilindiği kadar, boyut indirgeme yöntemi olarak da bilinir (Jackson, 2004).

TBA, veri setinin gerçek boyutunu belirlemek içinde kullanılır ve orijinal değişkenler en az bilgi kaybederek daha az sayıdaki değişkenlerle yer değiştirir. Bu oluşan yeni değişkenler farklı çok değişkenli analizlerde de kullanılır. Genel olarak TBA’nde veri setini özetlemek için, mümkün olabilecek en az bilgi kaybıyla doğrusal bileşen oluşturulmaya çalışılır (Johnson ve Wichern, 2007). TBA, veri indirmek, şekil sıkıştırıp özellik çıkarmak için esaslı ve önemli bir tekniktir. Bir veri setinin varyans-kovaryans yapısını, bu değişkenlerin doğrusal birleşimleri yardımıyla açıklayarak, boyut indirgenmesini ve yorumlanmasını sağlayan çok değişkenli bir istatistiksel yöntemdir (Yaycı, 2006).

TBA yöntemi çok büyük boyutlu veriyi daha küçük boyutlu bir veriye dönüştürür. Bu doğrusal yolu kurarken kovaryans matrisi kullanılır. Kovaryans matrisinin özdeğer ve özvektörleri bulunarak temel bileşenler hesaplanır.

Bu bölümde ele alacağımız veri seti

$$Y = [y^1 \quad \dots \quad y^n] \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad y^i \in \mathbb{R}^m, \quad (n \gg m), \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (2.3.1)$$

şeklinde verilsin. Veri setimizin dağılım ve yapısını incelemek için kullandığımız varyans ve kovaryans tanımları şu şekildedir.

2.3.1. Tanım: Y veri setinin varyansı, veri içerisindeki yayılımın ölçüsüdür. Genellikle değişimi ölçmek için kullanılır. Standart sapmanın da karesi olan varyans

$$\text{var}(Y) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y^i - \bar{y})^2,$$

ifadesiyle verilir. Yukarıdaki eşitlikte n : veri sayısını, y^i : y değişkenine ait i . gözlem değeri ve $\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y^i$ ise n adet verinin ortalamasını ifade etmektedir (Jackson, 1991).

2.3.2. Tanım: Kovaryans, iki değişkenin birlikte ne kadar değiştiklerinin ölçüsüdür. Varyans bir boyutlu veriler için kullanılmaktayken, kovaryans ise iki rastgele değişkenin

beraber değişimlerini inceleyen bir istatistiktir. Ancak çoğu durumda veri setleri birden fazla boyuta sahiptir. Kovaryans iki boyut arasında ölçüm yapabilmek için kullanılmaktadır.

$X = [x^1 \quad \dots \quad x^n] \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ve $Y = [y^1 \quad \dots \quad y^n] \in \mathbb{R}^{m \times n}$ gibi iki veri setinin kovaryansı

$$Cov(X, Y) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x^i - \bar{x})(y^i - \bar{y})^T,$$

ifadesiyle hesaplanır. Yukarıdaki eşitlikte n : veri sayısını, x^i, y^i : ilgili i . verileri ve $\bar{x}, \bar{y}$: ilgili n adet verinin ortalamalarını ifade etmektedir (Jackson, 1991).

2.3.2. Tanım: Kovaryans matrisi, her bir değişkenin diğer değişkenlerle olan ilişkisini gösteren kovaryans değerlerini içerir. Değişkenler arasındaki ilişkinin yönünü ve gücünü belirlemeye yardımcı olur. Kovaryans matrisinin izi olan köşegen elemanların toplamı varyansa eşit olup “Toplam Varyans” olarak anılır. Örnek olarak, x, y ve z değişkenlerine ait kovaryans matrisi

$$C^{3 \times 3} = \begin{bmatrix} Cov(x, x) & Cov(x, y) & Cov(x, z) \\ Cov(y, x) & Cov(y, y) & Cov(y, z) \\ Cov(z, x) & Cov(z, y) & Cov(z, z) \end{bmatrix},$$

şeklinde verilir (Jackson, 1991).

2.3.1. Temel bileşenler analizinin özellikleri

Geometrik olarak, birbirinden bağımsız değişkenler üreten TBA'nın önemli olan özelliklerinden bazıları şunlardır:

- Birimlerin her bir eksene göre koordinatları yeni değişkenlerin birim değerlerini vermektedir. Yeni aksenlere veya değişkenlere temel bileşenler adı verilmektedir.
- Yeni oluşan her bir değişken, orijinal değişkenlerin doğrusal bir birleşimidir.
- Birinci temel bileşen üretilirken, verilerdeki maksimum varyansı açıklayacak şekilde oluşmaktadır.
- İkinci temel bileşen ise geriye kalan toplam varyansa en fazla katkıyı sağlar. Yani birinci temel bileşen en çok, diğer bileşenler ise gittikçe azalan bir şekilde toplam varyansa maksimum katkıda bulunurlar. Dolayısıyla, çok az sayıda bileşenle toplam varyans büyük ölçüde açıklanabilmektedir.

- Maksimum olarak oluşturulabilecek temel bileşen sayısı orijinal değişken yani toplam değişken sayısından fazla değildir.
- Yeni bileşenler birbirinden doğrusal bağımsız olacak şekilde oluşturulmaktadır (Albayrak, 2006).

TBA’da, yeni temel bileşenler kendileri bir sonuç almaktan daha ziyade sonuç almayı sağlayan özelliğe sahiptirler. Çünkü temel bileşenler daha geniş incelemeler ve açıklamalar için bir geçiş adımı özelliği taşır. Temel bileşenler analizinin kullanımının faydalarından bir tanesi de temel bileşenlerin aralarında korelasyon bulunmamasıdır. Bu bir avantajdır ve temel bileşenlerin birbirine dik oluşundan kaynaklanır. Bu avantaj iki şekilde gerçekleşir. İlki, nesneler arasında temel bileşenler analizi değerlerinin alınması sonucu yapılacak karşılaştırmalarda farklı bileşenler birbirleriyle ilişkisiz olacaktır ve sonraki analizlerde temel bileşen değerleri uygun bir şekilde kullanılabilir. Temel bileşenler analizinin kullanım faydalarından ikincisi, temel bileşenler analizi sonucunda elde edilen doğrusal bileşenler, orijinal değişkenlerin diğer doğrusal bileşenlerden farklı olarak, mümkün olabilecek en az sayıda değişkenler arasındaki değişim yüzdesini, maksimum yapacak şekilde oluşturulmasıdır (Özdamar, 2004).

2.3.2. Temel bileşenler analizine geometrik yaklaşım

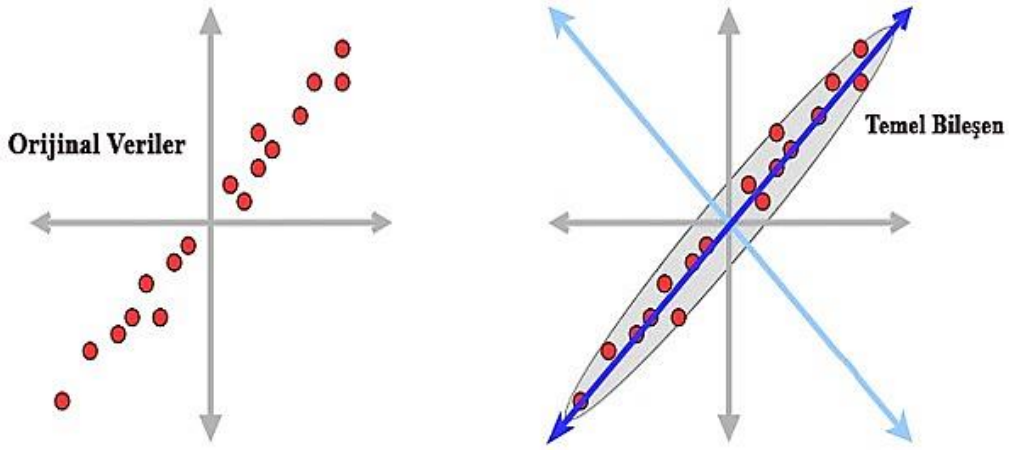
Geometrik olarak temel bileşenler analizi, değişken eksenlerinin varyans maksimizasyonu ölçütü göz önüne alınarak, bir dönüştürme matrisi yardımıyla döndürülmesinden meydana gelen bir yöntemdir.

Geometrik olarak $y^1, y^2, \dots, y^n$ koordinat eksenlerini oluşturan n tane değişkenin ana bileşenlerinin her biri, yeni eksenleri meydana getirmesi suretiyle döndürülmüş yeni bir koordinat sistemini göstermektedir. Dolayısıyla n adet değişken ve m adet gözlem, n boyutlu uzayda m adet noktayı belirlemektedir.

Dönüşüm matrisi $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ile verilirse, eksen döndürme işlemi,

$$Z = Q^T Y, \quad (2.3.2.1)$$

bağıntısıyla tanımlanır. Böylece, i . eksen için $x_i = (x_{i1}, \dots, x_{im})^T$ ve $y_i = (y_{i1}, \dots, y_{im})^T$ olarak alınırsa, birbirleriyle ilişkili olan x_{1j} değerlerinden, dönüştürme sonucu aralarında korelasyon bulunmayan y_{ij} değerleri bulunur. Bu dönüşüm Şekil 2.1’de gösterilmiştir (Sharma, 1995).



Şekil 2.1 Temel bileşenler dönüşümünün iki boyutlu uzayda gösterimi

2.3.3. Temel Bileşenler Analizinin Uygulanışı

(2.3.1) ifadesinde verildiği şekilde bir veri kümesini

$$Y = \begin{bmatrix} y^{11} & y^{12} & \dots & y^{1n} \\ y^{21} & y^{22} & \dots & y^{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ y^{m1} & y^{m2} & \dots & y^{mn} \end{bmatrix}, \quad (2.3.3.1)$$

şeklinde bir matris olarak ele alarak n tane m boyutlu gözlem vektöründen oluştuğunu kabul edelim. Verilerin aynı ölçü biriminde olması daha iyi sonuç vereceğinden, (2.3.3.1) ile verilen veri setinin merkezi olduğunu, diğer bir deyişle veri matrisinin sütun vektörlerinin sıfır ortalamaya sahip olduğunu varsayalım yani $\sum_{i=1}^n y^i = 0$ olsun.

Aksi bir durumda, bu standartlaştırma veri ortalaması 0 olacak bir veri matrisi oluşturularak yapılabilir. Bunun için $\bar{y} \in \mathbb{R}^m$ ortalama vektörü her bir $y^i \in \mathbb{R}^m$ gözlem vektöründen çıkartıldığında, $\tilde{Y}$ yeni veri matrisini oluşturan sütun vektörleri sıfır ortalamalı olur.

$$\tilde{Y} = [\tilde{y}_1 \dots \tilde{y}_n] = \begin{bmatrix} y^{11} - \bar{y}^1 & y^{12} - \bar{y}^1 & \dots & y^{1n} - \bar{y}^1 \\ y^{21} - \bar{y}^2 & y^{22} - \bar{y}^2 & \dots & y^{2n} - \bar{y}^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ y^{m1} - \bar{y}^m & y^{m2} - \bar{y}^m & \dots & y^{mn} - \bar{y}^m \end{bmatrix},$$

$$\tilde{y}^i = y^i - \bar{y}, \quad \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \tilde{y}^i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y^i - \bar{y}) = 0,$$

merkezi olacak şekilde kabul edilen Y veri matrisinin kovaryans matrisi

$$C = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y^i y^{iT} = \frac{1}{n} Y Y^T,$$

hesaplamalarıyla elde edilir.

TBA'da bulunması gereken temel bileşen vektörleri esasında (2.3.2.1) denkleminde verilen Q dönüşüm matrisinin sütun vektörleri olup aynı zamanda C kovaryans matrisinin özvektörleridir. Bu durum şu şekilde açıklanabilir, $Z = Q^T Y$ dönüşümü sonrası elde edilecek olan yeni veri değişkenlerinin sıfır korelasyonlu olması beklenmektedir. Böyle bir özellik için, Z veri matrisinin kovaryans matrisi köşegen olmalıdır, çünkü diğer durumda köşegende olmayan kovaryans matrisi elemanlarının sıfırdan farklı değerlere sahip olması farklı değişkenler arasında korelasyon olduğunu ifade eder. Z matrisinin, kovaryans matrisi C_Z ile ifade edilecek olursa,

$$C_Z = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n z^i z^{iT} = \frac{1}{n} Z Z^T,$$

matrisi yazılır. $Z = Q^T Y$ dönüşümü yerine yazılırsa

$$\begin{aligned} C_Z &= \frac{1}{n} Z Z^T \\ &= \frac{1}{n} (Q^T Y) (Q^T Y)^T \\ &= \frac{1}{n} Q^T Y Y^T Q \\ &= \frac{1}{n} Q^T B Q, \end{aligned}$$

ifadesi $B = Y Y^T$ için elde edilir. Burada B matrisi simetrik bir kare matris olduğundan, B matrisi $B = E D E^T$ özdeğer ayrışmasına sahiptir, öyle ki D matrisi özdeğerleri barındıran köşegen bir matris olup, E matrisi ise ilgili özvektörleri sütunlarında tutan ortogonal bir matristir. Bu aşamada, $B = Y Y^T$ olduğundan, dönüşümdeki Q matrisi, özvektörleri tutan E matrisi olarak alınıp yerine yazılarak ortogonalite özelliğinden $E^T E$ matrisinin birim matris olduğu kullanılırsa

$$\begin{aligned} C_Z &= \frac{1}{n} Q^T B Q \\ &= \frac{1}{n} Q^T E D E^T Q \\ &= \frac{1}{n} (Q^T Q) D (Q^T Q) \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{n}D,$$

ifadesi elde edilir ki bu da köşegen bir kovaryans matrisi elde ettiğimizi gösterir. Sonuç olarak, yeni eksen değişkenlerinin aralarında korelasyon olmaması için Q dönüşüm matrisini sütunları YY^T matrisinin (veya Y veri setinin kovaryans matrisi olan C matrisinin) özvektörleri olacak şekilde seçmek yeterlidir. Geldiğimiz noktada Q dönüşüm matrisinin bulunabilmesi için C kovaryans matrisinin özvektörlerinin hesaplanması gereklidir. Bunun için ise

$$Cv^i = \lambda^i v^i, \quad i = 1, \dots, m, \quad (2.3.3.2)$$

özdeğer problemi çözülmelidir. (2.3.3.2) ile verilen denklemde, C matrisi $m \times m$ boyutlu kovaryans matrisi, λ^i herhangi bir skaler ve $v^i \in \mathbb{R}^m$ sıfırdan farklı bir sütun vektörü olmak üzere, eşitliği sağlayan λ değeri C matrisinin özdeğeri, v^i vektörü ise λ^i ile ilişkili özvektördür.

(2.3.3.2) ile verilen eşitlikte özdeğerler büyükten küçüğe doğru sıralanacak şekilde yazıldığında, $\lambda^1 \geq \dots \geq \lambda^m \geq 0$, sıralı özdeğerlere karşılık gelen v^i özvektörleri kullanılarak dönüşüm matrisi $Q = [v^1 \dots v^m] \in \mathbb{R}^{m \times m}$ olarak alınabilir. Diğer yandan, boyut indirgeme anlamında, ilk $k \ll m$ tane özdeğere karşılık gelen v^i özvektörleri kullanılarak da

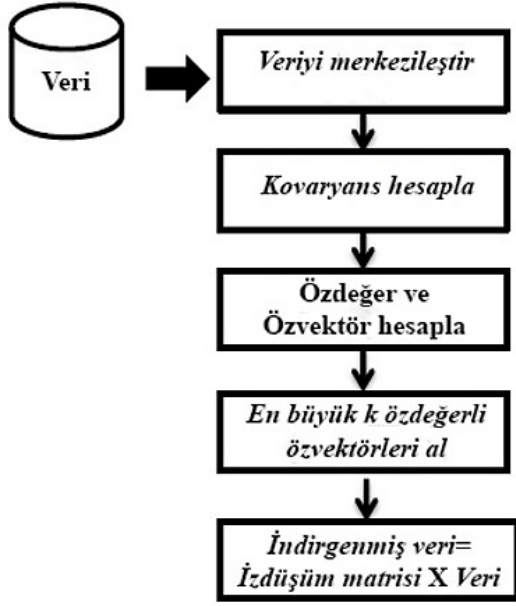
$$Q_k = [v^1 \dots v^k] \in \mathbb{R}^{m \times k},$$

matrisi en iyi izdüşümü gerçekleştiren izdüşüm matrisi olarak elde edilebilir. Boyutu indirgenmiş yeni eksen değişkenlerinin bulunması için veri matrisinin her bir değeri özvektörlerle belirlenen uzay üzerine izdüşümü alınmak suretiyle

$$z^i = Q_k^T y^i \in \mathbb{R}^k, \quad i = 1, \dots, n,$$

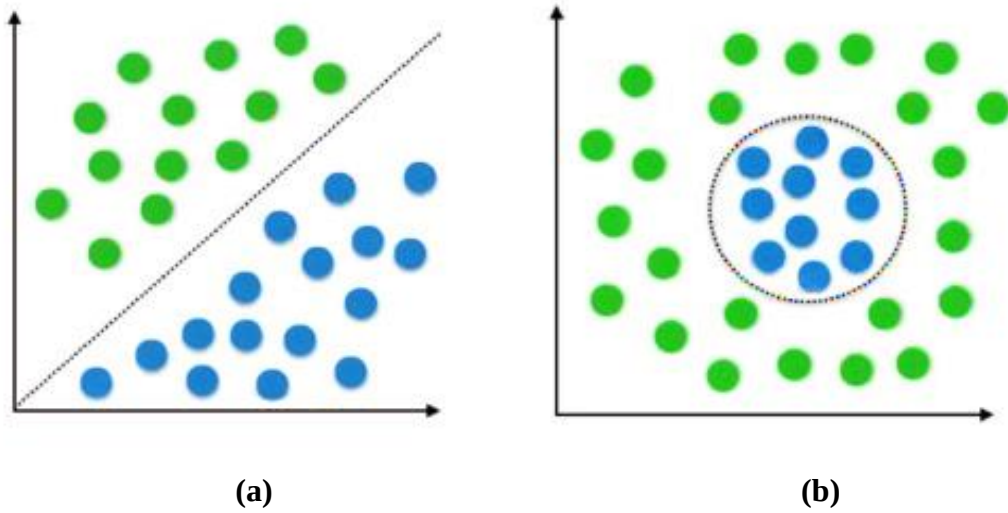
şeklinde hesaplanır.

Özet olarak, TBA'daki işlem akışı Şekil 2.2'de yer alan diyagramda gösterilmiştir.



Şekil 2.2 TBA işlem akışı

TBA, Şekil 2.3 (a)'daki gibi doğrusal olarak düzgün dağılmış veriler için etkin iken, doğrusal olmayan düzgün dağılım göstermeyen veriler için etkili değildir, Şekil 2.3 (b). Doğrusal olmayan yani düzgün dağılım göstermeyen veriler için Çekirdek Temel Bileşenler Analizi daha etkin bir yöntem olarak karşımıza çıkmaktadır. Bu yöntem Bölüm 3 de ayrıntılı olarak verilecektir.



Şekil 2.3 (a) Doğrusal olarak ayrılabilen; (b) Doğrusal olarak ayrılamayan veri dağılımları

2.4. Kovaryans Matrisinin Köşegenleştirilmesi

Bu bölümde ele alacağımız veri seti

$$Y = [y^1 \quad \dots \quad y^n] \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad y^i \in \mathbb{R}^m, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (n \gg m)$$

şeklinde verilsin. TBA, Y veri setimizi temsil eden ($k \ll m$) matris olmak üzere k boyutunda doğrusal bir model bulmayı amaçlamaktadır. Yani, TBA yöntemi çok boyutlu veriyi daha küçük boyutlu bir veriye dönüştürür. Bu doğrusal dönüşümü yaparken Kovaryans matrisi kullanılır. Kovaryans matrisinin özdeğer ve özvektörleri bulunarak temel bileşenler hesaplanır. Veri setimizin dağılım ve yapısını incelemek için kullandığımız ($m \times m$) boyutlu Kovaryans matrisi

$$C = YY^T = \sum_{i=1}^n y^i (y^i)^T, \quad (2.4.1)$$

Formundadır. Verilerin farklı ölçü biriminde olmaması daha iyi sonuç vereceğinden, (2.4.1) ifadesinde verilen veri setinin merkezi olduğunu, diğer bir deyişle veri matrisinin sütun vektörlerinin sıfır ortalamaya sahip olduğu varsayalım. C Kovaryans matrisinin köşegenleştirilmesi ile özdeğerleri $\lambda^1 \geq \dots \geq \lambda^m \geq 0$, olan köşegen bir Λ matrisi ve ortogonal U matrisinin bulunmasıyla

$$C = U\Lambda U^T \in \mathbb{R}^{m \times m}, \quad (2.4.2)$$

olarak yazılabilir. TBA'da bulunması gereken temel bileşen vektörleri esasında (2.4.2) denkleminde verilen $U = [u^1 \quad \dots \quad u^m] \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ortogonal dönüşüm matrisinin sütun vektörleri olup aynı zamanda C Kovaryans matrisinin özvektörleridir. Bu durumda, $Z = U^T Y \in \mathbb{R}^{m \times n}$ dönüşümü sonrası yeni veri değişkenleri elde edilir (Gonzalez vd., 2020).

2.5. Boyut İndirgenmesi

Λ matrisinin izi ve dolayısıyla λ^i özdeğerlerinin toplamına eşit olan C Kovaryans matrisinin izi, $i = 1, \dots, m$ için, Y veri matrisinin toplam varyansıdır. Özdeğerler azalan bir şekilde sıralandığında, indirgenmiş k boyut sayısı varyansın önemli bir kısmını içerdiğinden, U matrisi en iyi izdüşümü gerçekleştiren izdüşüm matrisi olarak elde edilebilir. Gerektiği durumlarda, yani k sayısının elle girilmeyip sisteme bağlı olarak otomatik bulunması gerektiğinde, bir ε toleransı için

$$\sum_{i=1}^k \lambda^i \geq (1 - \varepsilon) \sum_{i=1}^m \lambda^i,$$

olacak şekilde bir k belirlenebilir. Bu şekilde bulunan bir k sayısı kullanıldığında, örneğin $\varepsilon = 0.001$ alındığında, veri setinin davranış yapısının %99,9 oranında temsil edildiği kabul edilir.

Burada, $(k + 1)$ ile m sayısına kadar olan özdeğerler ihmal edilir ve sonuç olarak U matrisinin son $m - k$ tane sütunlarının (veya U^T matrisinin son satırlarının) y vektörünün varyansına katkıda bulunması beklenmez. Buna göre, z vektörünün son $m - k$ tane bileşenleri önemli bir bilgi kaybı olmaksızın ihmal edilebilir. Böylece indirgenmiş uzayda, boyutu indirgenmiş yeni eksen değişkenlerinin bulunması için veri matrisinin her bir değeri özvektörlerle belirlenen k boyutlu uzay üzerine $U^* = [u^1 \dots u^k] \in \mathbb{R}^{m \times k}$ matrisi ile izdüşümü alınmak suretiyle

$$Z^* = U^{*T} Y \in \mathbb{R}^{k \times n},$$

şeklinde hesaplanabilir. Geriye doğru dönüşüm ise, $(\mathbb{R}^k$ indirgenmiş boyut uzayından, $\mathbb{R}^m$ tam boyut uzayına) $y = Uz$ bağıntısının boyutunun azaltılmış hali olarak görülebilir, yani

$$y = \sum_{i=1}^m [z]^i u^i \approx \sum_{i=1}^k [z]^i u^i,$$

şeklinde yeniden yazılabilir. Matris formunda ise $Y = UZ \approx U^* Z^*$ olarak yazılabilir.

Boyut indirgeme işleminde (m boyutundan k boyutuna) ortaya çıkan hata, $Y - U^* Z^*$ arasındaki farkla ilişkilidir ve ε toleransı azaldıkça (ve k arttıkça) hata azalır (Gonzalez vd., 2020).

2.6. Tekil Değer Ayrıştırması (TDA): Köşegenleştirmeye Alternatif

Tekil Değer Ayrıştırması (TDA), $m \times n$ boyutlu Y matrisinin ($m < n$ varsayalım)

$$Y = U \Sigma V^T,$$

formunda bir ayrışmasını sağlar. Burada U ve V matrisleri sırasıyla $m \times m$ ve $n \times n$ boyutlarında ortogonal matrisler, Σ matrisi $m \times n$ boyutlu köşegen bir matris olmak üzere, Y matrisinin $\sigma^1 \geq \sigma^2 \geq \dots \sigma^m \geq 0$ tekil değerleri Σ matrisinin köşegen girdileridir:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma^1 & 0 & \dots & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \sigma^2 & \ddots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \sigma^m & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_m & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n},$$

$$\Sigma_m = \begin{bmatrix} \sigma^1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \sigma^m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times m}.$$

C Kovaryans matrisinin köşegenleştirilmesi TDA'nın doğrudan bir sonucudur:

$$C = YY^T = U\Sigma V^T V\Sigma^T U^T = U[\Sigma\Sigma^T]U^T = U\Lambda U^T.$$

$V^T V = I_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ve $\Lambda = \Sigma\Sigma^T$ olup dolayısıyla, C Kovaryans matrisinin özdeğerleri $\lambda^i = (\sigma^i)^2$, $i = 1, \dots, m$ olmak üzere tam olarak Y matrisinin tekil değerlerinin karesidir (Gonzalez vd., 2020).

2.7. Gram Matris

Y^T matrisini veri matrisi olarak alan (verileri sütunlar yerine satırlara göre düzenleyen) C Kovaryans matrisine alternatif $n \times n$ boyutlu matris $G = Y^T Y$ olup, $[G]_{ij} = (y^i)^T y^j$ şeklinde yazılır ve Gram matris olarak ifade edilir. TBA ile G matrisinin köşegenleştirme süreci, C Kovaryans matrisinin köşegenleştirme süreci ile aynıdır, ancak m boyutunun yerine n boyutunun azaltılması amaçlanmaktadır. TDA kullanıldığında Y matrisinin Y^T matrisi ile değiştirilmesi durumu önemli değildir. Yani, TDA ile $Y^T = V\Sigma^T U^T$ şeklinde ifade edilebilir. Bu durum G Gram matrisinin köşegenleştirilmesini sağlar;

$$G = Y^T Y = V\Sigma^T U^T U\Sigma V^T = V[\Sigma^T \Sigma]V^T = V\check{\Lambda}V^T. \quad (2.7.1)$$

Burada $U^T U = I_m \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ve $n \times n$ boyutlu $\check{\Lambda} = \Sigma^T \Sigma$ köşegen matrisi, Λ köşegen matrisi gibi sıfır olmayan λ^i girdilerinden oluşur ($i = 1, \dots, m$). Boyut azaltma işlemi, Bölüm 2.5'e anlatıldığı şekilde yapılır ve veri uzayının n boyutunu k boyuta indirgemeyi amaçlamaktadır. Yani, n boyutlu uzaydaki verilerden herhangi biri (veya aynı uzay ait herhangi bir vektör), V matrisinin ilk k sütunu olan k tane vektörün doğrusal bir kombinasyonu olarak yazılabilir (Gonzalez vd., 2020).

2.8. C ve G Matrislerinin Köşegenleştirilmesinin Eşdeğer Olması

C Kovaryans matrisi (2.4.2) ifadesinde belirtildiği gibi köşegenleştirildiğinde, U dönüşüm matrisinin sütunları tam olarak

$$Cu^i = \lambda^i u^i \quad i = 1, \dots, m,$$

olacak şekilde C Kovaryans matrisinin öz vektörleridir. Aynı durum (2.7.1) ifadesindeki G Gram matrisi ve V dönüşüm matrisi için de geçerlidir, yani

$$Gv^i = \lambda^i v^i \quad i = 1, \dots, m,$$

v^i , V matrisinin i . sütunu olmak üzere $i = m + 1, \dots, n$ için, V matrisinin v^i sütunları sıfır özdeğere karşılık gelmektedir. Bölüm 2.6'da anlatılan TDA'nın tek seferde hem U hem de V matrisini sağlaması, C Kovaryans matrisinin köşegenleştirilmesinde (ve dolayısıyla U matrisinin elde edilmesinde) yapılan hesaplama işlemlerinin G matrisinin köşegenleştirilmesine (ve V matrisinin elde edilmesine) eşdeğer olduğunu göstermektedir. Bu ilk bakışta anlaşılamayabilir, çünkü C Kovaryans matrisinin boyutu $m \times m$ ve G matrisinin boyutu $n \times n$ olmaktadır, dolayısıyla G matrisinin boyutu çok daha büyüktür. Bölüm 2.5'teki gibi boyut indirgeme işlemleri yapılırsa, özdeğerler azalan bir şekilde sıralandığında, indirgenmiş k boyut sayısı varyansın önemli bir kısmını içerdiğinden, V matrisi en iyi izdüşümü gerçekleştiren izdüşüm matrisi olarak elde edilebilir (Gonzalez vd., 2020). Bu noktada indirgenmiş verilerin bulunabilmesi için G Gram matrisinin özvektörlerinin hesaplanması gereklidir. Bunun için ise

$$Gv^i = \lambda^i v^i \quad i = 1, \dots, m, \tag{2.8.1}$$

özdeğer problemi çözülmelidir. (2.8.1) ile verilen eşitlikte $\lambda^1 \geq \dots \geq \lambda^m \geq 0$, özdeğerleri büyükten küçüğe doğru sıralanacak biçimde yazıldığında, sıralı özdeğerlere karşılık gelen v^i özvektörleri kullanılarak dönüşüm matrisi V^{*T} olarak alınabilir (Gonzalez vd., 2020). V^{*T} matrisi en iyi izdüşümü gerçekleştiren izdüşüm matrisi olarak elde edilebilir. Böylece, indirgenmiş uzayda boyutu indirgenmiş yeni eksen değişkenlerinin bulunması için veri matrisinin her bir değeri $v^i \in \mathbb{R}^k$ özvektörlerle belirlenen k boyutlu uzay üzerine $V^* = [v^1 \dots v^n] \in \mathbb{R}^{k \times n}$ matrisi ile izdüşümü alınır.

$Y = U\Sigma V^T$ ifadesinde her iki taraf sağdan V ile çarpıldığında $YV = U\Sigma$ olup

$$U = YV\Sigma^{-1}, \quad U^T = \Sigma^{-1}V^TY^T \tag{2.8.2}$$

ifadeleri elde edilir. Bu durumda $U^* = YV^*\Sigma^{-1}$ olup, (2.8.2) ile verilen ifade $Z = U^TY$ denkleminde yerine yazılıp

$$G = Y^TY = V\Sigma^TU^TU\Sigma V^T = V\Sigma\Sigma V^T,$$

bağıntısı kullanılırsa

$$Z = \Sigma^{-1}V^TY^TY = \Sigma^{-1}V^TG,$$

denklemini indirgenmiş olarak

$$Z^* = \Sigma^{-1}V^{*T}Y^TY = \Sigma^{-1}V^{*T}G,$$

şeklinde elde edilir. Boyutu indirgenmiş yeni eksen değişkenleri orijinal uzaya geri getirildiğinde

$$X = UZ \approx U^*Z^* = XV^*\Sigma^{-1}Z^*, \quad (2.8.3)$$

şeklinde hesaplanabilir.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

Bu bölümde, tez çalışmasının merkezinde yer alan Çekirdek Temel Bileşenler Analizi (ÇTBA) tanıtilip model bir veri setine uygulanışı gösterilecektir.

3.1. Çekirdek Temel Bileşenler Analizi

TBA, birçok farklı disiplinlerce sıklıkla kullanılmasına rağmen, elde edilen verilerin boyutlarının indirgenmesi ve modellenmesi gibi uygulama alanlarında ÇTBA'nın kullanımı çok yenidir. ÇTBA, TBA'dan farklı olarak doğrusal olarak ayrıklaştıramayan ya da bir başka ifadeyle doğrusal bir dağılım göstermeyen verilerin doğrusal bileşenler ile ifade edilmesini sağlamaktadır. ÇTBA ile veriler çok boyutlu bir doğrusal olmayan özellik uzayına izdüşürülür. Çok boyutlu uzayın boyutu sonsuz da olabilir.

TBA yönteminde farklı özelliklere ait veriler çok büyük bir varyans ile dağılmak zorundadır. Çok küçük varyanslı dağıldığı durumlar olduğunda ise TBA'nın başarısı azalmaktadır. Böyle durumlarda TBA, doğrusal geçiş ile alt uzayda ayrıklaştırmayı yapamamaktadır. Bu sebeple veriyi doğrusal olmayan bir geçiş ile alt uzaya iz düşüren ÇTBA yöntemi önem kazanmaktadır. ÇTBA ile, TBA yönteminden daha farklı olarak, çok büyük bir boyutta veriler temsil edilerek, temel bileşenlerine ayrışması sağlanır. ÇTBA hesaplamalarının daha etkin ve kolay hesaplanması için ise doğrusal olmayan çekirdek fonksiyonları kullanılmaktadır. Literatürde çokça kullanılan çekirdek fonksiyonları ise gauss, polinom ve hiperbolik tanjanttır. Doğrusal olmayan boyut indirgemesine olanak tanıyan çeşitli teknikler vardır. Bunlar arasında, ÇTBA basitliği ve kolay uygulanabilirliği nedeniyle tercih edilmektedir (Gonzalez vd., 2020).

3.2. Yapının Yüksek Boyutlu Hale (M Boyuta) Dönüştürülmesi

ÇTBA fikri, bazı çok büyük $M \gg m$ boyutları için $\mathbb{R}^m$ uzayından $\mathbb{R}^M$ uzayına keyfi bir $\Phi: \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^M$ dönüşümü getirilerek ortaya atılmıştır. Büyük boyutlu bir uzaya yapılan bu dönüşüm ile, y verisinin ait olduğu doğrusal olmayan manifoldu çözmesi (veya düzleştirmesi) beklenmektedir. Yani, Φ dönüşümü ve M boyutunun, $\mathbb{R}^M$ uzayına eşlenen $\tilde{y} = \Phi(y)$ şeklindeki değişkenlerin, TBA tarafından kolayca bulunabilecek doğrusal ve düşük boyutlu bir manifold içinde yer alacak şekilde olması beklenmektedir. Başka bir deyişle, klasik TBA

$$\tilde{Y} = [\Phi(y^1)\Phi(y^2) \dots \Phi(y^n)] = [\tilde{y}^1 \tilde{y}^2 \dots \tilde{y}^n] \in \mathbb{R}^{M \times n}, \quad (3.2.1)$$

şeklinde dönüştürülmüş verileri içeren $M \times n$ boyutlu $\tilde{Y}$ matrisine uygulanacaktır. Eğer M boyutunun bilindiği varsayılırsa, TBA uygulanır ve Bölüm 2'de açıklandığı gibi $M \times M$ boyutlu Kovaryans matrisi $\tilde{C} = \tilde{Y}\tilde{Y}^T$ olacak şekilde köşegenleştirilir. Fakat, bu durum iki önemli zorluğu beraberinde getirir: birincisi, Φ dönüşümü bilinmemektedir ve ikincisi, manifoldun düzgün bir şekilde çözülmesi için gereken M boyutu çok büyüktür (özellikle n boyutundan çok daha büyüktür) ve sonuç olarak $\tilde{C}$ kovaryans matrisini hesaplama zorluğu ortaya çıkacaktır. Ancak dönüştürülmüş $\tilde{G} = \tilde{Y}^T \tilde{Y}$ Gram matrisi boyutunun $n \times n$ (G matrisi ile aynı) olduğundan (Bölüm 2.4'te gösterildiği gibi) $\tilde{G}$ matrisinin köşegenleştirilmesi $\tilde{C}$ matrisinin köşegenleştirilmesi ile aynı şekilde boyutu azaltacaktır. Dolayısıyla, Φ dönüşümü esas olarak $\tilde{G}$ matrisini hesaplamak için gereklidir (Gonzalez vd., 2020).

3.3. Çekirdek Fonksiyonu

Φ dönüşümünün, doğrusal olmayan manifoldu, daha yüksek boyutlu bir uzayda doğrusal bir manifolda eşlemesi beklenir. Ancak verileri, $\mathbb{R}^M$ uzayının doğrusal bir alt uzayına eşleyen bir yöntem belirlemek kolay değildir. Çekirdek fonksiyonu, $\tilde{G}$ matrisinin boyutunun indirgenmesini amaçlamaktadır. $\tilde{G}$ matrisinin tüm terimlerinin $i, j = 1, \dots, n$ için

$$[\tilde{G}]_{ij} = \Phi(y^i)^T \Phi(y^j) = (\tilde{y}^i)^T \tilde{y}^j, \quad (3.3.1)$$

şeklinde olduğunu dikkate alındığında, çekirdek fonksiyonu, $\Phi(.)$ dönüşümü yerine,

$$[\tilde{G}]_{ij} = \kappa(y^i, y^j), \quad (3.3.2)$$

olacak şekilde $\kappa(.,.)$ çekirdek fonksiyonu seçilebilir (Gonzalez vd., 2020).

3.4. Merkezileştirme

Daha önce de belirtildiği gibi, TBA'nın uygun şekilde uygulanabilmesi için örneklerin merkezileştirilmesi gerekmektedir. Bununla beraber, keyfi bir $\Phi(.)$ dönüşümü seçip dönüştürülen verilerin merkezileştirilmiş durumda olduğu bilinmemektedir. Yani, $\Phi(.)$ dönüşümü biliniyor olduğunda, (3.2.1) ifadesindeki $\tilde{Y}$ matrisini merkezileştirme işlemi kolaydır. Fakat, $\kappa(.,.)$ olacak şekilde seçildiğinde, merkezileştirilmemiş bir $\tilde{G}$ matrisi oluşmaktadır. $\tilde{G}$ matrisinin merkezileştirilmesi için sırasıyla aşağıdaki işlemler

yapılabilir. Φ dönüşümü biliniyorsa, dönüşümü yapılan verilerin merkezileştirilmesi için $\tilde{y}^i$ girdilerinin

$$\tilde{y}^i = \Phi(y^i) - \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n \Phi(y^l), \quad (3.4.1)$$

olacak şekilde yeniden düzenlenmesi ($\tilde{y}^i$ verisinin $\tilde{y}^i$ verisine dönüştürülmesi) gerekmektedir. Merkezileştirilmiş veriler (3.4.1) ifadesindeki $\tilde{y}^i$ gibi üst çizgi ile gösterilmiştir. Sonuç olarak, merkezileştirilmiş Gram matrisi, (3.3.1) ifadesine göre

$$[\tilde{G}]_{ij} = (\tilde{y}^i)^T \tilde{y}^j,$$

şeklinde yazılır ve

$$\begin{aligned} [\tilde{G}]_{ij} &= \Phi(y^i)^T \Phi(y^j) - \frac{1}{n} \sum_{\bar{l}=1}^n \Phi(y^i)^T \Phi(y^{\bar{l}}) - \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n \Phi(y^l)^T \Phi(y^j) \\ &\quad + \frac{1}{n^2} \sum_{l=1}^n \sum_{\bar{l}=1}^n \Phi(y^l)^T \Phi(y^{\bar{l}}), \end{aligned}$$

olacak şekilde bulunur. (3.3.2) ifadesi kullanıldığında

$$[\tilde{G}]_{ij} = \kappa(y^i, y^j) - \frac{1}{n} \sum_{\bar{l}=1}^n \kappa(y^i, y^{\bar{l}}) - \frac{1}{n} \sum_{l=1}^n \kappa(y^l, y^j) + \frac{1}{n^2} \sum_{l=1}^n \sum_{\bar{l}=1}^n \kappa(y^l, y^{\bar{l}}),$$

bağıntısı elde edilir. Gerekli düzenlemeler yapıldığında

$$\tilde{G} = \tilde{G} - \frac{1}{n} \tilde{G} \mathbf{1}_{[n \times n]} - \frac{1}{n} \mathbf{1}_{[n \times n]} \tilde{G} + \frac{1}{n^2} \mathbf{1}_{[n \times n]} \tilde{G} \mathbf{1}_{[n \times n]},$$

Denkliği elde edilir. Burada $\mathbf{1}_{[n \times n]} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tüm girdileri bir olan $n \times n$ boyutlu matristir.

Buna göre, $\tilde{G}$ matrisinin j . sütun vektörü olan $\tilde{g}^j$ vektörü

$$\tilde{g}^j = \tilde{g}^j - \left(\frac{1}{n} \mathbf{1}_{[n]}^T \tilde{g}^j \right) \mathbf{1}_{[n]} - \frac{1}{n} \mathbf{1}_{[n \times n]} \tilde{g}^j + \frac{1}{n^2} (\mathbf{1}_{[n]}^T \tilde{G} \mathbf{1}_{[n]}) \mathbf{1}_{[n]},$$

şeklinde yazılabilir. Burada, $\tilde{G}$ matrisinin j . sütunu $\tilde{g}^j$ vektörü olup $\mathbf{1}_{[n]} = [1, \dots, 1]^T$ olarak verilir (Gonzalez vd., 2020).

3.5. ÇTBA ile İleriye Doğru Eşleme: $Y \rightarrow P_k \Phi(Y)$

ÇTBA ile, m boyutlu girdi uzayındaki vektörler önce keyfi doğrusal olmayan dönüşüm $\Phi(\cdot): \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^M$ aracılığıyla özellik uzayı adı verilen $M \gg m$ boyutlu (sonsuz boyutlu da olabilir) bir uzaya dönüştürülür ve ardından bu özellik uzayındaki vektörlere TBA uygulanır. Bu amaçla, aşağıdaki şekilde tanımlanan dönüştürülmüş veri matrisi $\tilde{Y}$ ile

tanımlansın. $Y = [y^1 y^2 \dots y^n] \in \mathbb{R}^{m \times n}$ giriş verisi olmak üzere, bu verinin merkezleştirilmiş ve Φ dönüşümü altındaki görüntüsü olan özellik uzayındaki veri

$$\tilde{Y} = [\Phi(y^1) \Phi(y^2) \dots \Phi(y^n)] = [\tilde{y}^1 \tilde{y}^2 \dots \tilde{y}^n] \in \mathbb{R}^{M \times n},$$

olmak üzere, keyfi $\Phi(\cdot)$ dönüşümü için, $\tilde{Y}$ matrisi genellikle TBA işlemi için ihtiyaç olan sıfır sütun toplamına yani merkezileştirmeye sahip değildir. Her bir sütundan, sütunların ortalaması

$$\bar{\Phi}(y) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \Phi(y^i)$$

çıkartılarak sıfır sütun toplamı bir veri matrisi

$$\tilde{\Phi}(y^l) = \Phi(y^l) - \bar{\Phi}(y)$$

elde edilebilir. Buradan da

$$\tilde{\tilde{Y}} = [\tilde{\Phi}(y^1) \tilde{\Phi}(y^2) \dots \tilde{\Phi}(y^n)] = \tilde{Y}H \in \mathbb{R}^{M \times n}$$

sıfır sütun toplamı veri matrisi elde edilebilir. Yukarıdaki formülde

$$H = I - \frac{1}{n} \mathbf{1}\mathbf{1}^T \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad (3.5.1)$$

merkezleştirme matrisi olarak adlandırılırken $I \in \mathbb{R}^n$ birim matris, $\mathbf{1} = [1 \ 1 \dots 1]^T \in \mathbb{R}^{n \times 1}$ n -boyutlu birler vektörüdür. Bu aşamada, sütunları özellik uzayını kapsayan $\tilde{\tilde{Y}}$ veri matrisi için önceki bölümde açıklanan TBA yöntemi uygulanır, yani

$$\tilde{C} = \sum_{l=1}^n \tilde{\Phi}(y^l) \tilde{\Phi}(y^l)^T = \tilde{\tilde{Y}} \tilde{\tilde{Y}}^T \in \mathbb{R}^{M \times M}, \quad (3.5.2)$$

kovaryans matrisinin özvektörlerinin bulunması gerekmektedir. Bu noktada, iki ciddi dezavantaj vardır. İlk olarak, M boyutu çok büyük bir sayı olabilir hatta sonsuz da olabilir. İkinci olarak, doğrusal olmayan $\Phi(\cdot)$ dönüşümü keyfidir ve çoğu zaman bulunamamaktadır. Bu da M boyutlu $\tilde{C}$ Kovaryans matrisinin özvektörlerinin hesaplanmasını neredeyse imkânsız hale getirebilir. Tüm bu sorunların ortadan kalkması için çekirdek yöntemi uygulanmaktadır. Bu yöntemi açıklamak için, $\{\tilde{\lambda}^i, v^i\}$ değerlerinin $\tilde{C}$ kovaryans matrisinin özdeğerleri olduğu

$$\tilde{C} v^i = \tilde{\lambda}^i v^i, \quad i = 1, \dots, M, \quad (3.5.3)$$

özdeğer problemi kullanılabilir. Bu noktada özvektörlerin, özellik uzayını, yani $\tilde{Y} = [\tilde{\Phi}(y^1)\tilde{\Phi}(y^2) \dots \tilde{\Phi}(y^n)]$ dönüştürülmüş veri matrisinin sütun uzayını oluşturduğu düşünülürse, her v^i özvektörü için

$$v^i = \sum_{j=1}^n a_{ij} \tilde{\Phi}(y^j), \quad i = 1, \dots, M, \quad (3.5.4)$$

doğrusal kombinasyonunu sağlayan a_{ij} katsayıları bulunmaktadır. Daha sonra, (3.5.4) ile verilen bağıntı (3.5.2) ile verilen özdeşlikle birlikte (3.5.3) ile verilen özdeğer probleminde yerine yazılırsa

$$\sum_{l=1}^n \tilde{\Phi}(y^l) \sum_{j=1}^n a_{ij} \tilde{\Phi}(y^l)^T \tilde{\Phi}(y^j) = \tilde{\lambda}_i \sum_{j=1}^n a_{ij} \tilde{\Phi}(y^j),$$

eşitliğinde tüm özvektörler $\{\tilde{\Phi}(y^s)\}_{s=1}^n$ vektörlerinin uzayında bulunduğundan, $s = 1, \dots, n$ için, eşitliğin her iki tarafı $\tilde{\Phi}(y^s)$ ile izdüşümü alınır

$$\sum_{l=1}^n \tilde{\Phi}(y^s)^T \tilde{\Phi}(y^l) \sum_{j=1}^n a_{ij} \tilde{\Phi}(y^l)^T \tilde{\Phi}(y^j) = \tilde{\lambda}_i \sum_{j=1}^n a_{ij} \tilde{\Phi}(y^s)^T \tilde{\Phi}(y^j), \quad (3.5.5)$$

eşitliği elde edilebilir. Bu noktada, özellik uzayındaki vektörlerin Öklid iç çarpımlarını $\Phi(\cdot)^T \Phi(\cdot)$ girdi uzayının vektörleri ile temsil eden bir $\kappa(\cdot, \cdot) : \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ çekirdek fonksiyonu

$$\kappa(y^s, y^l) = \langle \Phi(y^s), \Phi(y^l) \rangle = \Phi(y^s)^T \Phi(y^l), \quad s, l = 1, \dots, n,$$

şeklinde tanımlanır. Özellik uzayında merkezileştirilmiş ve dönüştürülmüş vektörleri $\tilde{\Phi}(\cdot)^T \tilde{\Phi}(\cdot)$ Öklid iç çarpımı şeklinde gösterebilmek için, $K \in \mathbb{R}^{n \times n}$ çekirdek matrisi ve $\mathbf{k}_y \in \mathbb{R}^n$ vektörü sırasıyla $K_{ij} = \kappa(y^i, y^j)$ ve $\mathbf{k}_y = (\kappa(y, y^1), \dots, \kappa(y, y^n))^T$ olmak üzere

$$\tilde{\kappa}(y^s, y^l) = \kappa(y^s, y^l) - \frac{1}{n} \mathbf{1}^T \mathbf{k}_{y^s} - \frac{1}{n} \mathbf{1}^T \mathbf{k}_{y^l} + \frac{1}{n^2} \mathbf{1}^T K \mathbf{1},$$

ifadesi kullanılmaktadır. Burada, $\mathbf{k}_{y^i}$ vektörlerinin hesaplanmaları gerekmemektedir, çünkü bunlar K simetrik çekirdek matrisinin i . sütunlarıdır. Bu durumda, (3.5.5) ile verilen ifade çekirdek fonksiyonu cinsinden

$$\sum_{l=1}^n \tilde{\kappa}(y^s, y^l) \sum_{j=1}^n a_{ij} \tilde{\kappa}(y^l, y^j) = \tilde{\lambda}_i \sum_{j=1}^n a_{ij} \tilde{\kappa}(y^s, y^j), \quad (3.5.6)$$

olacak şekilde elde edilir. Literatürde doğrusal, polinom ve Gauss çekirdeği gibi çeşitli çekirdek fonksiyonları bulunmaktadır. Burada, $\|\cdot\|$ standart Öklid normu ve σ pozitif bir parametre olmak üzere

$$\kappa(x, y) = \exp\left(-\frac{\|x-y\|^2}{2\sigma^2}\right),$$

Gauss çekirdek fonksiyonu kullanılmaktadır. $a^i = (a_{i1}, \dots, a_{in})^T \in \mathbb{R}^n$ katsayı vektörü için (3.5.6) ile verilen ifade

$$\tilde{K}^2 a^i = \tilde{\lambda}_i \tilde{K} a^i \quad \text{veya} \quad \tilde{K} a^i = \tilde{\lambda}_i a^i \quad i = 1, \dots, M, \quad (3.5.7)$$

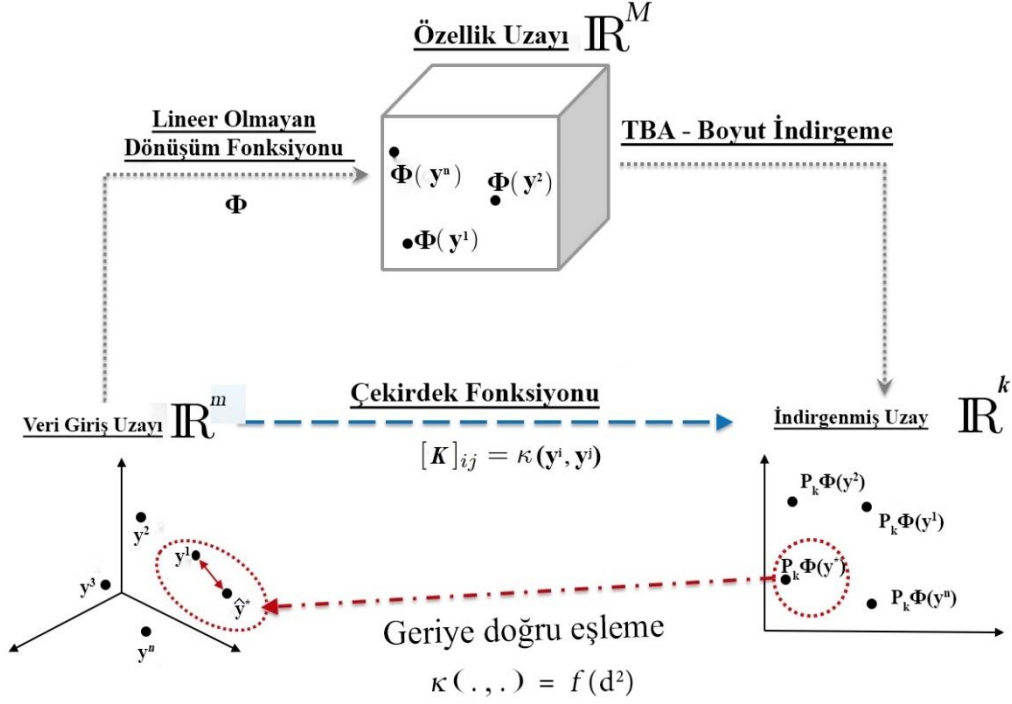
olacak şekilde matris-vektör formunda yazılabilir. Burada $\tilde{K} = HKH$ olmak üzere, (3.5.1) ile verilen H matrisi merkezileştirme matrisidir. Son olarak, giriş uzayından rastgele alınan bir $y^* \in \mathbb{R}^m$ vektörü için, özellik uzayında merkezleştirilmiş ve Φ dönüşümü altındaki görüntüsü $\tilde{\Phi}(y^*) \in \mathbb{R}^M$ olmak üzere, k boyutlu ($k \ll m \ll M$) indirgenmiş uzaya izdüşüm vektörü

$$z^* = [z_1^*, z_2^*, \dots, z_k^*] \in \mathbb{R}^k,$$

$\{v^1, \dots, v^k\}$ en büyük ilk k tane $\tilde{\lambda}_i$ ($i = 1, \dots, k$) özdeğerlerine karşılık gelir. (3.5.7) ile verilen eşitlikteki özdeğer probleminde a^i katsayıları hesaplandıktan sonra, v^i özvektörlerinin (3.5.4) ile verilen ifadesi kullanılarak, izdüşüm vektörünün z_i^* bileşenleri çekirdek fonksiyonu cinsinden

$$z_i^* = \tilde{\Phi}(y^*)^T v^i = \sum_{j=1}^n a_{ij} \tilde{\Phi}(y^*)^T \tilde{\Phi}(y^j) = \sum_{j=1}^n a_{ij} \tilde{\kappa}(y^*, y^j),$$

formülüyle bulunabilir.



Şekil 3.1 ÇTBA kullanılarak boyut azaltmanın gösterimi

Şekil 3.1, giriş uzayındaki $y^i \in \mathbb{R}^m$ verilerinin indirgenmiş uzayda $z^i \in \mathbb{R}^k$ verilerine nasıl eşlendiğini göstermektedir. Bu yöntem öncelikle özellik uzayından geçiş sağlayarak, $\Phi(y^i) \in \mathbb{R}^M$ verilerinin boyutunu azaltmak için TBA kullanarak ve daha sonra bunların indirgenmiş $\mathbb{R}^k$ uzayına izdüşümü alınarak gerçekleştirilir (Şekil 3.1'deki gri noktalı oklar) (Gonzalez vd., 2020).

Uygulamada, özellik uzayı hiçbir zaman kullanılmaz. ÇTBA ile çekirdek fonksiyonu, doğrudan $y^i \in \mathbb{R}^m$ verisinden $z^i \in \mathbb{R}^k$ verisine (Şekil 1'de mavi kesikli okla gösterilen) ileriye doğru geçiş sağlayan alternatif bir yöntem (Φ dönüşüm fonksiyonunun belirli bir şekilde tanımlanamadığı) olarak uygulanabilir.

3.6. ÇTBA ile Geriye Doğru Eşleme: $P_k \Phi(Y) \rightarrow Y$

Bölüm 3.5'te belirtildiği gibi, sadece v^i matrisinin biliniyor olması, bir $z^* \in \mathbb{R}^k$ verisinin ön görüntüsünün $y^* \in \mathbb{R}^m$ verisine (Şekil 3.1'deki kırmızı kesikli ok) geriye doğru olarak eşleştirmeye izin vermemektedir. Giriş uzayından herhangi bir keyfi vektörün $y^* \in \mathbb{R}^m$ için, ön görüntüsü $\hat{y}^* \in \mathbb{R}^m$, TBA ile (2.8.3)'de verilen eşitlikteki gibi yaklaşık olarak hesaplanabilir. Ancak bu durum ÇTBA için aynı değildir. $\Phi(y^*)$ özellik uzayı vektörünün

$\{v^1, \dots, v^k\}$ özvektörleri tarafından oluşturulan indirgenmiş uzaya izdüşümü $P_k \Phi(y^*) \in \mathbb{R}^k$ olmak üzere

$$P_k \Phi(y^*) = \sum_{i=1}^k z_i^* v^i + \bar{\Phi}(y),$$

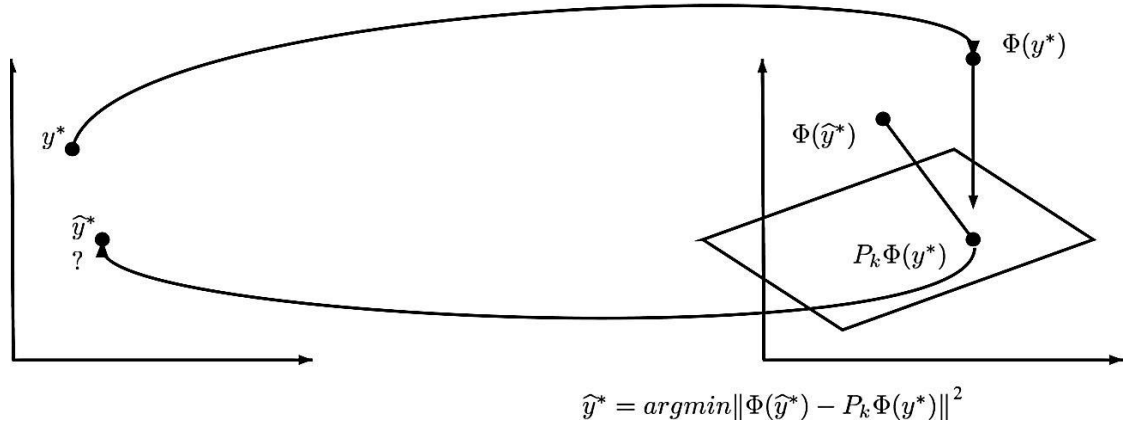
şeklinde yazılır. Daha sonra, $\Phi(\hat{y}^*)$ vektörünün $P_k \Phi(y^*)$ indirgenmiş vektörüne, en yakın vektör olması $\rho(\hat{y}^*) = \|\Phi(\hat{y}^*) - P_k \Phi(y^*)\|^2$ durumunda yaklaşık ön görüntü olan $\hat{y}^*$ elde edilebilir.

Optimizasyon yöntemi, özellikle zamana bağlı problemlerde, her zaman için problemde aynı işlemlerin yapılması zaman alıcı bir işlem olduğundan, alternatif olarak Çok Boyutlu Ölçekleme (ÇBÖ) yöntemi araştırılacaktır. ÇBÖ yöntemi; yüksek boyutlu nesnelerin, düşük boyutlu bir alana aralarındaki mesafenin korunarak izdüşümünün alınmasıdır.

Bu bölümde, $Y = [y^1 y^2 \dots y^n] \in \mathbb{R}^{m \times n}$ giriş verisi olmak üzere, bu verinin merkezileştirilmiş ve Φ dönüşümü altındaki görüntüsü olan özellik uzayındaki veri

$$\tilde{Y} = [\Phi(y^1) \Phi(y^2) \dots \Phi(y^n)] = [\tilde{y}^1 \tilde{y}^2 \dots \tilde{y}^n] \in \mathbb{R}^{M \times n},$$

olmak üzere, ön görüntüyü bulabilmek için özellik uzayı mesafesini en aza indirerek, özellik uzayındaki izdüşümüne mümkün olduğunca yakın eşleşen bir nokta olarak ön görüntü girdi uzayında aranır.



Şekil 3.2: Özellik uzayından girdi uzayına geri dönüş

Bu fikir Şekil 3.2'de gösterilmiştir. $\argmin \|\Phi(\hat{y}^*) - P_k \Phi(y^*)\|^2$ optimizasyon probleminin çözümünden ön görüntü elde edilmeye çalışırken, daha düşük boyutlu bir uzaya indirgenen verilerin ikili mesafelerini koruyan, ÇBÖ yönteminden yararlanılır. Özellik uzayında verilerin Öklid mesafelerini korumaya çalışarak ön görüntüyü bulmak için iterasyon süreci içeren ÇBÖ yöntemine alternatif olarak iterasyonsuz bir algoritma türetilerek ÇBÖ algoritması güncellenebilir. Girdi uzayındaki ön görüntü yeniden

bulunurken özellik uzayındaki ilgili verinin sabit sayıda komşuyla olan mesafesi dikkate alınır (Rathi vd., 2006).

ÇBÖ 19. ve 20. yy'da temel bilimlerin daha da gelişmesiyle ortaya çıkan bazı çalışmalar ve sonrasında çok gelişen bilgisayar teknolojisi sayesinde geniş kullanım alanı bulmuştur. ÇBÖ yönteminin geliştirilmesinde kullanılan hesaplamalar, temel bilimlerin ve mühendisliğin ana konularını oluşturmaktadır. Özvektör ve özdeğer kavramları kuantum fiziğinin daha çok gelişmesiyle birlikte bu yöntemlerde kullanılmaya başlanmıştır. İstatistiksel olarak ÇBÖ Yöntemi, Çok Değişkenli İstatistik Analiz Teknikleri'nin içinde yer almaktadır. Bu teknikler kullanılarak çok değişkene göre oluşturulan matrisler aracılığıyla araştırma konusu daha iyi analiz edilebilmektedir. ÇBÖ, TBA'ya benzer bir doğrusal izdüşüm yöntemidir. Ancak, bu yöntemde veri noktalarının özelliklerinin bilinmesine gerek yoktur. Bunun yerine yalnızca iki veri noktası arasındaki mesafe bilinmesi gerekir. Bu durum hangi özelliklerin kullanılacağına karar vermenin zor olduğu problemler için avantaj sağlar (Tapramaz, 2002). ÇBÖ'nün temel fikri, veri noktaları arasındaki $|y^i - y^j|$ mesafelerini koruyacak şekilde verilerin izdüşümünün alınmasıdır. Yani, $|\hat{y}^i - \hat{y}^j| \approx |y^i - y^j|$ olacak şekilde y verileri daha düşük boyutlu uzaydaki $\hat{y}$ verilerine izdüşürülür.

Çekirdek fonksiyonu $\kappa(y^i, y^j)$ seçimi için birçok fonksiyon bulunmaktadır. En çok kullanılan çekirdek fonksiyonu

$$\kappa(y^i, y^j) = e^{-\frac{d^2(y^i, y^j)}{2\sigma^2}},$$

Gauss çekirdeği olup, formüldeki $d^2(y^i, y^j)$ girdi uzayında bir mesafe ölçüsüdür. Dolayısıyla çekirdek fonksiyonu, girdi uzayı mesafesinin bir fonksiyonudur, yani $\kappa(.,.) = f(d^2)$. Benzer şekilde, özellik uzayındaki mesafe metriği $\tilde{d}^2(\Phi(y^i), \Phi(y^j))$ de hesaplanabilir. Bu bilgiler ışığında, özellik uzayındaki bir veri noktasının ilk k özvektör (özellik uzayında) üzerine izdüşümü olan $P_k \Phi(y^*)$ ile bir veri noktasının Φ dönüşümü altındaki görüntüsü arasındaki mesafe

$$\begin{aligned} \tilde{d}^2(\Phi(y^i), P_k \Phi(y^*)) &= \|\Phi(y^i) - P_k \Phi(y^*)\|^2 \\ &= \|P_k \Phi(y^*)\|^2 + \|\Phi(y^i)\|^2 - 2P_k \Phi(y^*)^T \Phi(y^i), \end{aligned}$$

şekilde yazılabilir. Matris-vektör işlemlerinden sonra, bu uzaklık çekirdek fonksiyonu cinsinden aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$\begin{aligned} \tilde{d}^2(\Phi(y^i), P_k \Phi(y^*)) &= \left(k_{y^*} + \frac{1}{n} K1 - 2k_{y^i} \right)^T H^T C_a H \left(k_{y^*} - \frac{1}{n} K1 \right) + \frac{1}{n^2} 1^T K1 + K_{ii} \\ &\quad - \frac{2}{n} 1^T k_{y^i}. \end{aligned}$$

Burada

$$C_a = \sum_{j=1}^k \frac{1}{\lambda_j} a_j (a_j)^T, \quad K_{ii} = \kappa(y^i, y^i),$$

olarak alınmıştır. Ayrıca, $d^2_{ij} = d^2(y^i, y^j)$ girdi uzayı uzaklığı ile

$\tilde{d}^2_{ij} = \tilde{d}^2(\Phi(y^i), \Phi(y^j))$ özellik uzayı uzaklığı arasında

$$\begin{aligned} \tilde{d}^2_{ij} &= \|\Phi(y^i), \Phi(y^j)\|^2 = \kappa(y^i, y^i) + \kappa(y^j, y^j) - 2\kappa(y^i, y^j) \\ &= K_{ii} + K_{jj} - 2f(d^2_{ij}), \end{aligned}$$

olacak şekilde bir ilişki olup, Gauss çekirdek fonksiyonu için

$$f(d^2_{ij}) = \frac{1}{2} (K_{ii} + K_{jj} - \tilde{d}^2_{ij}) \rightarrow d^2_{ij} = f^{-1}(K_{ii} + K_{jj} - \tilde{d}^2_{ij}),$$

bağıntısı gerçekleşir. $P_k \Phi(y^*)$ izdüşümünün girdi uzayında $\hat{y}^*$ ön görüntüsünün elde edilmesi hedeflenmektedir. Ancak çoğu zaman, ön görüntü mevcut olmayabilir. Bu nedenle, $P_k \Phi(y^*)$ izdüşümünün ön görüntüsü yaklaşık olarak bulunabilir. Bu ise, $\rho(\hat{y}^*) = \|\Phi(\hat{y}^*) - P_k \Phi(y^*)\|^2$ hatası en aza indirildiğinde elde edilebilir. Çekirdek fonksiyonu

$$\kappa(y^i, y^j) = e^{-\frac{d^2(y^i, y^j)}{2\sigma^2}},$$

olarak alındığında ve girdi uzayındaki uzaklığın $d^2(y^i, y^j) = \|y^i - y^j\|^2$ ile verildiği düşünülürse,

$$\psi_i(\hat{y}^*) = \tilde{\gamma}_i \exp\left(-\|\hat{y}^* - y^i\|^2 / (2\sigma^2)\right),$$

$$\gamma_i = \sum_{k=1}^n \beta_k a_{ki} \text{ ve } \tilde{\gamma}_i = \gamma_i + \frac{1}{n} (1 - \sum_{j=1}^n \gamma_j),$$

değişkenleri için

$$\nabla_{\hat{x}} \rho = \left(\sum_{i=1}^k \psi_i(\hat{y}^*) \right) \hat{y}^* - \left(\sum_{i=1}^k \psi_i(\hat{y}^*) \right) y^i = 0 ,$$

bağıntısının çözülmesi gerekir. Burada $\hat{y}^*$ yalnız bırakıldığında

$$\hat{y}^* = \frac{\left(\sum_{i=1}^k \psi_i(\hat{y}^*) \right) y^i}{\left(\sum_{i=1}^k \psi_i(\hat{y}^*) \right)} , \quad (3.6.1)$$

formülü elde edilir. (3.6.1) ile verilen formül, sabit nokta iterasyonu yönteminden gelen ifadedir. Bu durumda ön görüntü başlangıç noktasına bağlı olacaktır ve yerel minimum değerlerde takılma olasılığı yüksektir. Buna alternatif olarak, $P_k \Phi(y^*) \approx \Phi(\hat{y}^*)$ yaklaşımı kullanıldığında, ($\rho(\hat{y}^*) \approx 0$ olduğu varsayılarak)

$$\begin{aligned} \hat{y}^* &= \frac{\sum_{i=1}^k \tilde{\gamma}_i \exp\left(-\frac{\|\hat{y}^* - y^i\|^2}{(2\sigma^2)}\right) y^i}{\sum_{i=1}^k \tilde{\gamma}_i \exp\left(-\frac{\|\hat{y}^* - y^i\|^2}{(2\sigma^2)}\right)} = \frac{\sum_{i=1}^k \tilde{\gamma}_i \left(\frac{1}{2} (2 - \tilde{d}^2(\Phi(\hat{y}^*), \Phi(y^i))) \right) y^i}{\sum_{i=1}^k \tilde{\gamma}_i \left(\frac{1}{2} (2 - \tilde{d}^2(\Phi(\hat{y}^*), \Phi(y^i))) \right)} \\ &\approx \frac{\sum_{i=1}^k \tilde{\gamma}_i \left(\frac{1}{2} (2 - \tilde{d}^2(P_k \Phi(y^*), \Phi(y^i))) \right) y^i}{\sum_{i=1}^k \tilde{\gamma}_i \left(\frac{1}{2} (2 - \tilde{d}^2(P_k \Phi(y^*), \Phi(y^i))) \right)} , \end{aligned} \quad (3.6.2)$$

çözümü elde edilir. Böylece, tek bir adımda basit hesaplamalar kullanılarak (iterasyon gerekmeden) ön görüntü elde edilebilir. Dolayısıyla, bu yöntem sadece hesaplama süresini azaltmakla kalmaz, aynı zamanda ön görüntüyü hesaplamak için başka bir yaklaşım gerektirmediğinden (giriş koordinat sistemine geri döndürme) daha doğrudur.

4. BULGULAR

Bu bölümde, 3. Bölümde tanıtılan ÇTBA yöntemi, bir ve iki boyutlu Hamilton, gradyan ve anti-gradyan sistemler için verilecek olan örnekler üzerinde uygulanarak etkinliği ve kesinliği tartışılacaktır. Tüm örneklerde, bir girdi uzayı vektörü y^* ile TBA veya ÇTBA kullanılarak elde edilmiş indirgenmiş yaklaşık vektör $\hat{y}^*$ arasındaki hatayı hesaplamak için

$$\|y^* - \hat{y}^*\|_* = \frac{|y^* - \hat{y}^*|}{|y^*|},$$

mutlak bağıl hata kullanılmıştır. İlave olarak, $m = 2 > 1$ bileşenli NLS ve FHN modellerinde ayırıklaştırılmış veri matrisi olan Y matrisi oluşturulurken, her iki bağımlı değişkene ait ayırık zamanlardaki çözüm vektörleri alt alta koyularak Y matrisinin sütunları oluşturulmuştur. Literatürde, her bağımlı değişken için ayrı bir veri matrisi kullanımı da mevcut olmakla birlikte, böyle bir yol izlendiğinde her veri seti için ÇTBA yönteminin uygulanması gerekeceği ve dolayısıyla zaman yönünden etkinliğin kaybolacağı muhakkaktır.

4.1. Hamilton Sistemler

Hamilton sistemlerin incelenmesinde bir ve iki konumsal boyutlu KdV ve NLS denklemleri ele alınacaktır. KdV denklemi doğrusal olmayan hiperbolik bir denklemdir. Sığ su dalgaları, okyanustaki dalgalar, bir plazmadaki akustik dalgalar ve daha fazlası dahil olmak üzere tek boyutlu dalgaların yayılmasını açıklar. Dağılım ve doğrusal olmama, kalıcı ve yerelleştirilmiş dalga formları üretmek için etkileşime girebilir. NLS denklemi ise fiber optikte, düzlemsel dalgalarda ışığın iletiminde ve Bose-Einstein yoğunlaşma teorisinde yavaş değişen dalga gruplarının hareketlerini tanımlayan model denklem olarak verilir.

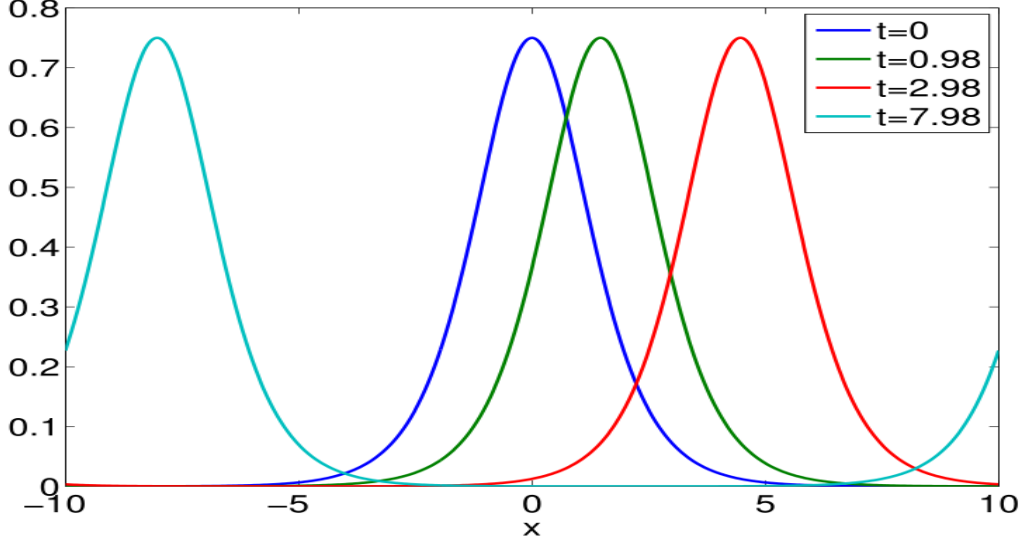
4.1.1. Bir boyutlu KdV denklemi

Bir boyutlu (2.1.1.1) KdV denklemi, $(x, t) \in [-10, 10] \times [0, 8]$ uzay-zaman alanı için

$$u^0(x) = \frac{\beta}{2} \text{sech}^2\left(\frac{\sqrt{1.5}x}{2}\right),$$

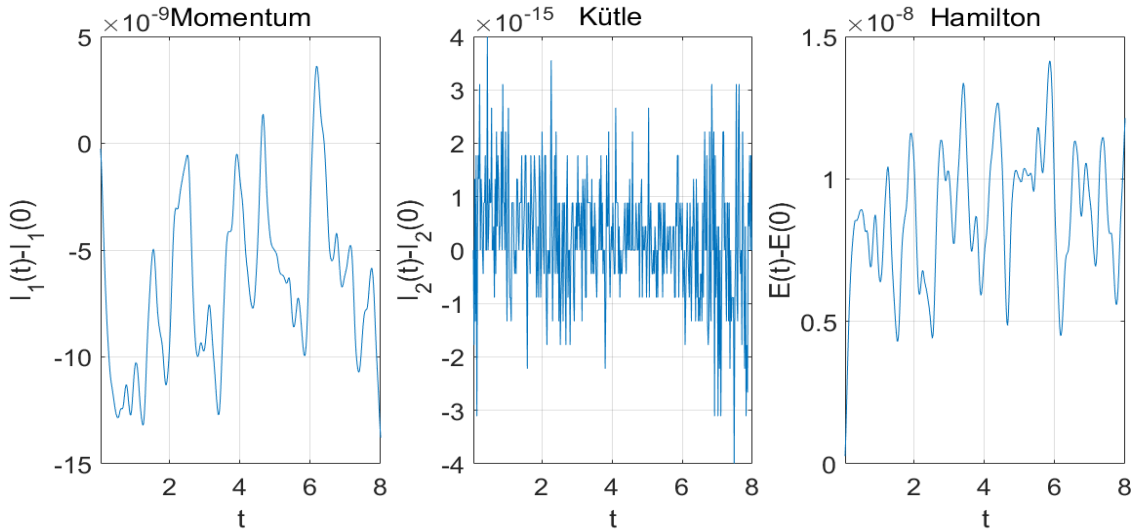
başlangıç dalgası ve $\alpha = 6$, $\mu = 1$, $\beta = 1.5$ parametre değerleri için ele alınacaktır. Ayırıklaştırma ölçüleri olarak $\Delta x = 0.04$ ve $\Delta t = 0.02$ değerleri için uzay-zaman

ayrıklaştırılması ile sistemin anlık bilgilerinden alınan her t_k anındaki ayrık çözümlerden Y veri matrisi oluşturulmaktadır. Uzay ve zaman koordinatları için ayrıklaştırılmış veri matrisi $Y = [\mathbf{u}^1 \dots \mathbf{u}^{400}] \in \mathbb{R}^{500 \times 400}$ şeklinde yazılır.



Şekil 4.1 $t = 0, 0.98, 2.98, 7.98$ zamanlarındaki dalga grafikleri

Dalga denkleminin $t = 0, 0.98, 2.98, 7.98$ zamanlarındaki grafik çizimleri Şekil 4.1 de verilmiştir. Burada başlangıç dalgası, zaman ilerledikçe aynı genlik ve dalga boyuyla sağa doğru hareket etmektedir ve bu da sistemin enerjisinin korunduğunu göstermektedir. Şekilden de görüleceği üzere, başlangıç zamanındaki dalga, dalga boyu değişmeden pozitif x-ekseni yönünde hareket edip, periyodik sınır koşulundan dolayı tekrar içeri yönlü hareket etmektedir.



Şekil 4.2 Büyüklüklerin tam çözüm halinde korunumu

Şekil 4.2, başlangıç değerlerinden itibaren zaman dilimlerinde momentum I_1 , kütle I_2 ve Hamilton (Enerji) E ölçülerinin başlangıçtaki değerlerinden farklarını göstermektedir. Gözlemlenen salınımlar, her değişmez için de iyi bir koruma sağlandığını ve hassasiyetin neredeyse makine hassasiyeti ile karşılaştırılabilir olduğunu göstermektedir.

Tablo 4.1 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar

k	TBA	ÇTBA
1	7.31e-01	1.41e-02
2	3.84e-01	6.79e-03
3	3.44e-01	1.34e-02
4	2.87e-01	1.16e-02
5	1.35e-01	9.87e-03
6	7.78e-02	2.05e-03

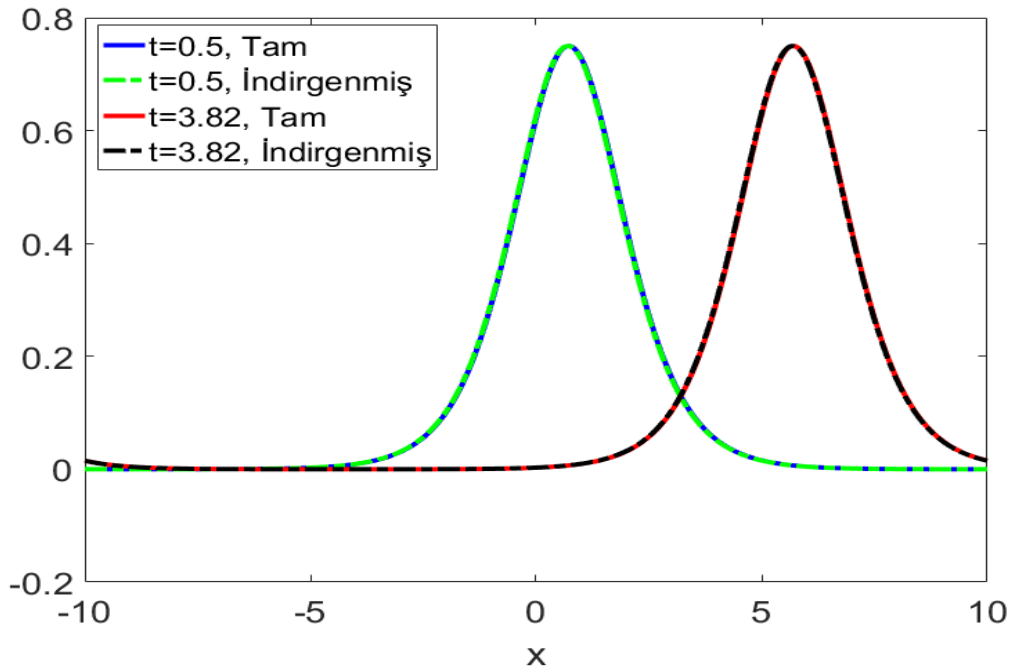
Daha sonra, Tablo 4.1’de, TBA ve ÇTBA yöntemleri hata ve hesaplama etkinliği açısından karşılaştırılmaktadır. Bu karşılaştırma için, $t = 2$ zamanındaki dalgaya karşılık gelen $\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{100}$ girdi uzayı çözüm vektörü kullanılmaktadır. Sonuçlar indirgenmiş boyutlar $k = 1, \dots, 6$ için sunulmaktadır. TBA ve ÇTBA kullanıldığında, yapılan işlemler sonucu tam çözüm $\mathbf{y}^*$ ile indirgenmiş yaklaşık çözüm $\hat{\mathbf{y}}^*$ arasındaki oluşan $\|\mathbf{u}^* - \hat{\mathbf{u}}^*\|_R$ bağıl mutlak hatalar gösterilmektedir. Tablo incelendiğinde, beklendiği gibi aynı sayıda baz kullanıldığında ÇTBA ile daha kesin sonuçlar elde edilmiştir.

Tablo 4.2 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar ve çözüm süreleri

k	Mutlak Bağıl Hata		İşlem Süresi	
	İterasyonlu (formül 3.6.1)	İterasyonsuz (formül 3.6.2)	İterasyonlu (formül 3.6.1)	İterasyonsuz (formül 3.6.2)
1	1.41e-02	1.41e-02	3.9634	0.1026
2	6.79e-03	6.83e-03	1.9047	0.1630
3	1.34e-02	1.35e-02	2.1734	0.1660
4	1.16e-02	1.17e-02	1.8595	0.1932
5	9.87e-03	1.01e-02	2.2519	0.1721
6	2.05e-03	2.51e-03	2.3998	0.1872

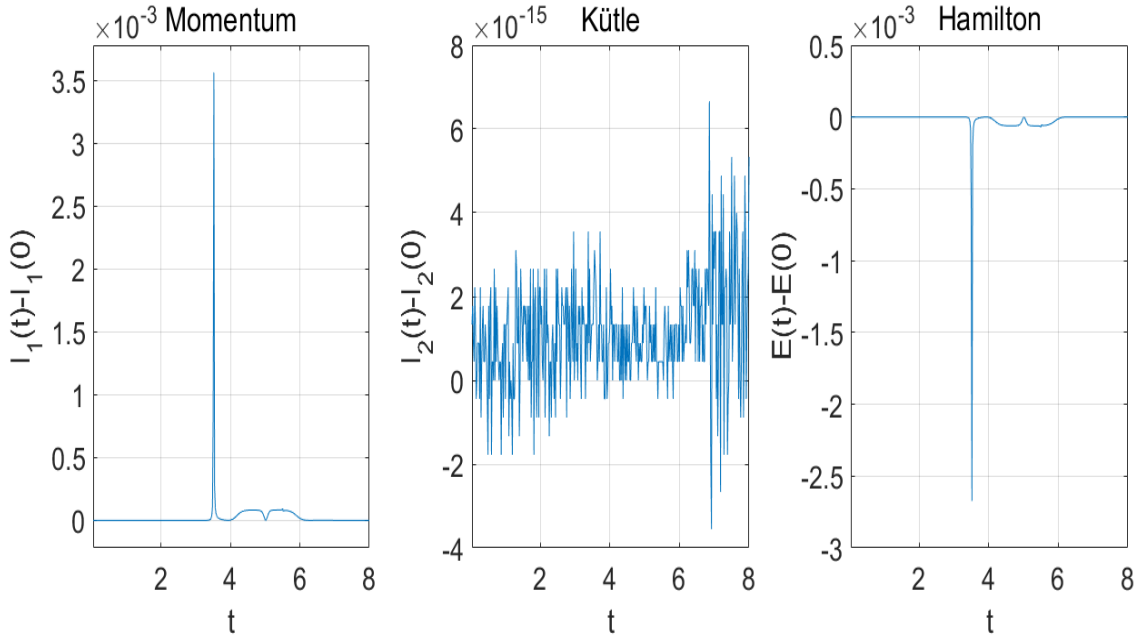
Diğer yandan, hesaplama etkinliği açısından sabit nokta iterasyonu ile çözülen (3.6.1) formülünü kullanan ÇTBA yöntemi ile cebirsel bir denklem olan (3.6.2) formülünü kullanan yöntemin ihtiyaç duyduğu çözüm süreleri Tablo 4.2’de verilmektedir. İlk iki sütun her iki formülle elde edilen tam ve indirgenmiş çözümler arasındaki hataları, son ikisi ise ön görüntülerin oluşturulması için gereken işlem sürelerini göstermektedir. (3.6.1) formülüyle iterasyonlu (2 iterasyon) çözülen doğrusal olmayan denklemin çözümleriyle, (3.6.2) formülüyle iterasyon olmadan çözülen denklemin çözümleri ile elde edilen hataların neredeyse aynı olduğu görülebilir, ki bu da iterasyon olmadan elde edilen çözümlerin hassasiyet açısından kabul edilebilir olduğunu göstermektedir. ÇTBA yönteminin, iterasyonsuz ihtiyaç duyduğu çözüm süresinin, iterasyonlu ihtiyaç duyduğu çözüm süresinden çok daha az olduğu, yani yöntemin oldukça hızlı olduğu son iki sütundan görülmektedir.

Şekil 4.3’de, $t = 0.5$ ve $t = 3.82$ zamanlarındaki tam çözümler ile birlikte indirgenmiş çözümler gösterilmektedir. İndirgenmiş boyut $k = 2$ için, her iki zamanda tam ve indirgenmiş dalgaların birbiriyle çakıştığını görülmektedir. Bu da indirgenmiş çözümlerin tam çözüm ile aynı dalga boyuna ve dalga genliğine sahip güvenilir bir dalga yayılımı sağladığı anlamına gelmektedir ki fiziksel olarak başarılı bir modelleme için çok önemlidir.



Şekil 4.3 $k = 2$ için $t = 0.5, 3.82$ zamanlarındaki tam/indirgenmiş çözümler

Ön görüntülerle elde edilen korunan değişmezler Şekil 4.4’de verilmektedir. Burada, Şekil 4.2’deki değişmezlerle benzer şekilde, her değişmezin farklı zamanlardaki değerleri ile başlangıç değerleri arasındaki fark gösterilmektedir. Kütlenin makine hassasiyetiyle korunduğu açıkken, momentum ve Hamilton değişmezlerindeki hatalar tam çözümlerle elde edilenler kadar küçük değildir. Model indirgeme yöntemlerinde, özellikle de değişmezlerin korunumu açısından bu beklenen bir durumdur. Bu değişmezlerin, salınımları küçük bir aralık içinde, herhangi bir kayma olmaksızın devam ettiğinden, belirtilen süre boyunca korunduğu söylenebilmektedir.



Şekil 4.4 $k = 2$ için indirgenmiş büyüklüklerin korunumu

4.1.2. İki boyutlu KdV denklemi

Bir $[a, b] \times [c, d]$ alanında iki boyutlu KdV denklemi olarak kabul edilen

$$\partial_t u = -\alpha u \partial_x u - \mu (\partial_{xxx} u - \partial_{xyy} u), \quad (4.1.2.1)$$

denklemini literatürde Zakharov-Kuznetsov denklemi olarak anılmaktadır. Simülasyon için (4.1.2.1) denklemi $(x, y, t) \in [0, 32] \times [0, 32] \times [0, 5]$ uzay-zaman alanı için

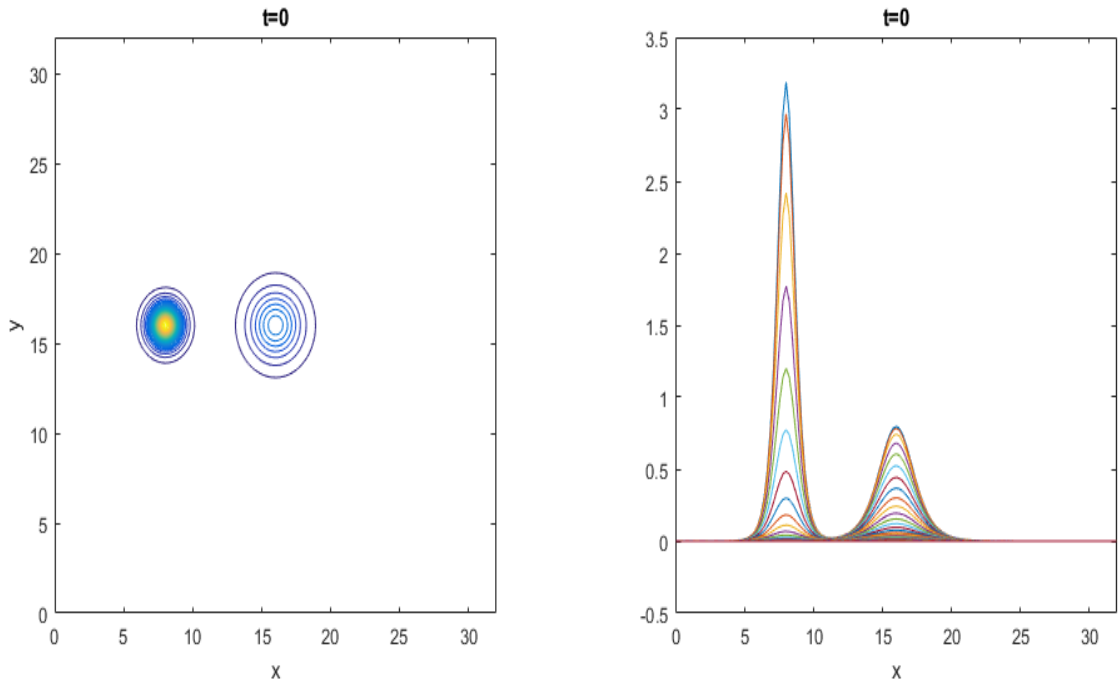
$$u^0(x, y) = \sum_{j=1}^2 \frac{c_j}{3} \sum_{m=1}^{10} a_{2m} \left(\cos \left(2m \left(\operatorname{arccot} \left(\frac{\sqrt{c_j}}{2} r_j \right) \right) \right) - 1 \right),$$

başlangıç koşulu ile ele alınacaktır. Burada c_1 ve c_2 soliton tipi dalga çözümlerinin hızları olup $j = 1, 2$ için

$$r_j^2 = (x - x^j)^2 + (y - y^j)^2,$$

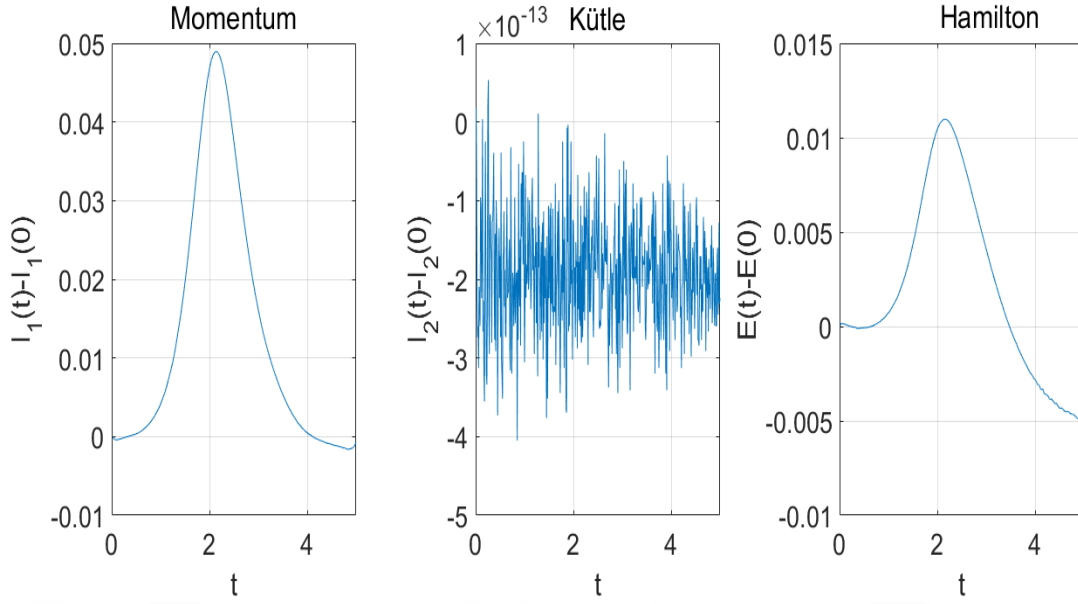
olarak tanımlıdır. x^j ve y^j noktaları ise başlangıçtaki iki dalganın en yüksek oldukları tepe noktalarının x ve y koordinatlarıdır. Simülasyonda $x^1 = 8$, $x^2 = y^1 = y^2 = 16$, sistem parametre değerleri ise $\alpha = 6$, $\mu = 1$ olarak alınmıştır. Ayırıştırma ölçüleri olarak $\Delta x = \Delta y = 0.2286$ ve $\Delta t = 0.01$ değerleri için uzay-zaman ayırıştırılması ile sistemin anlık bilgilerinden alınan her t_k anındaki ayırık çözümlerden Y veri matrisi oluşturulmaktadır. Uzay ve zaman koordinatları için ayırıştırılmış veri matrisi, $Y = [\mathbf{u}^1 \dots \mathbf{u}^{500}] \in \mathbb{R}^{19600 \times 500}$ şeklindedir.

Başlangıç dalgaları Şekil 4.5 de verilmiştir. Burada soldaki dalga, sağındaki dalgadan daha hızlı olup zaman ilerledikçe sağındaki dalgaya doğru ilerleyip içinden geçerek önüne geçmektedir.



Şekil 4.5 Başlangıç dalgaları

Şekil 4.6, başlangıç değerlerinden itibaren zaman dilimlerinde momentum I_1 , kütle I_2 ve Hamilton (Enerji) E değerlerinin değişkenliğini göstermektedir. Gözlemlenen salınımlar, her değişmez için de iyi bir koruma sağlandığını, kütle için ise hassasiyetin makine hassasiyeti ile karşılaştırılabilir olduğunu göstermektedir.



Şekil 4.6 Büyüklüklerin tam çözüm halinde korunumu

Daha sonra, Tablo 4.3’de, TBA ve ÇTBA yöntemleri hata ve hesaplama etkinliği açısından karşılaştırılmaktadır. Bu karşılaştırma için, $t = 1$ zamanındaki dalgaya karşılık gelen $\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{100}$ girdi uzayı çözüm vektörü kullanılmaktadır. Sonuçlar indirgenmiş boyutlar $k = 1, \dots, 6$ için sunulmaktadır. TBA ve ÇTBA kullanıldığında, yapılan işlemler sonucu tam çözüm $\mathbf{u}^*$ ile indirgenmiş yaklaşık çözüm $\hat{\mathbf{u}}^*$ arasındaki oluşan bağıl mutlak hatalar gösterilmektedir. Aynı sayıda baz kullanıldığında ÇTBA ile daha kesin sonuçlar elde edilmiştir.

Tablo 4.3 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar

k	TBA	ÇTBA
1	9.19e-01	3.60e-02
2	7.71e-01	1.80e-02
3	7.61e-01	3.58e-02
4	7.59e-01	1.79e-02
5	6.86e-01	3.56e-02
6	3.83e-01	1.84e-02

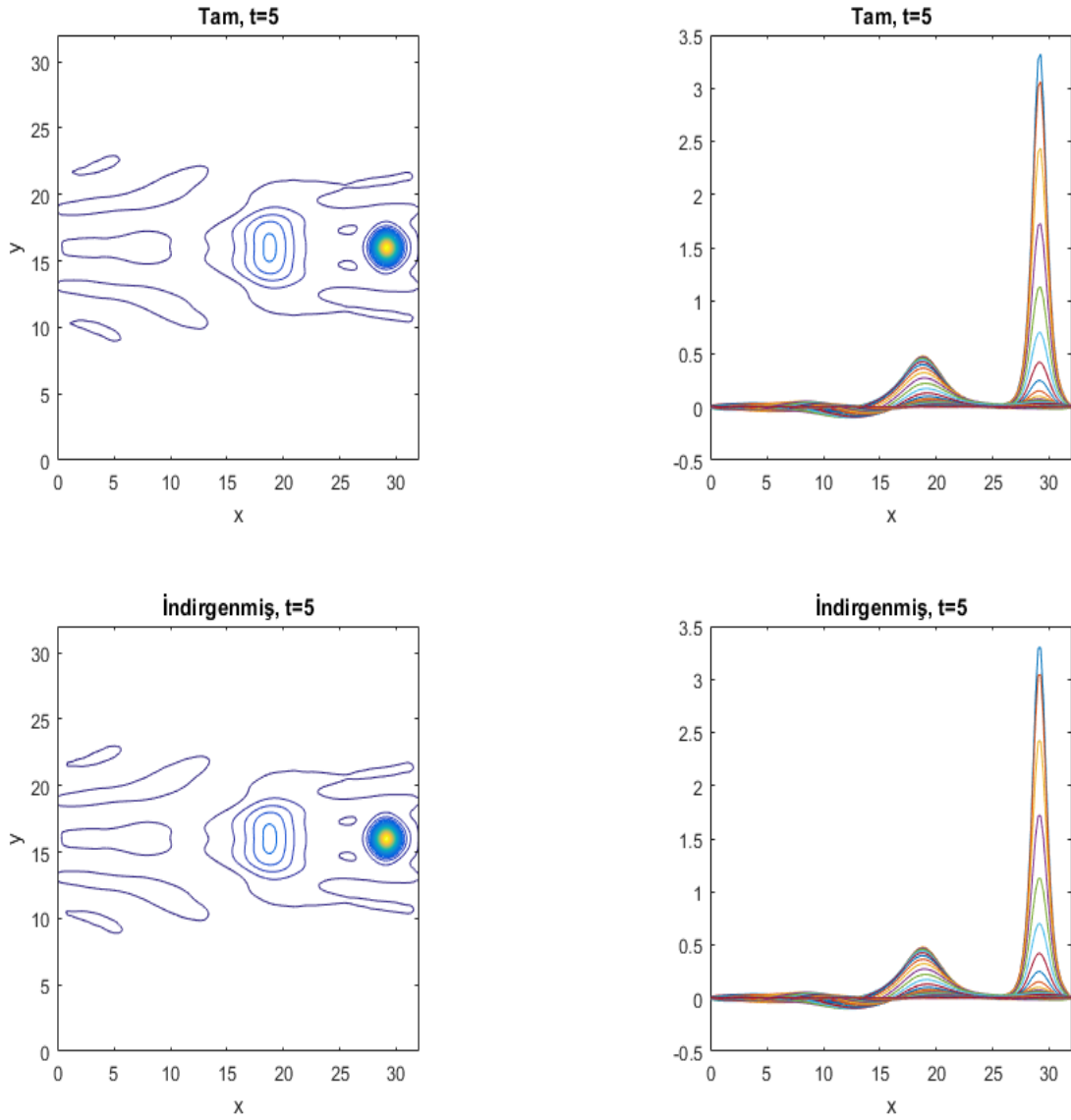
Diğer yandan, hesaplama etkinliği açısından, sabit nokta iterasyonu ile çözülen (3.6.1) formülünü kullanan ÇTBA yöntemi ile cebirsel bir denklem olan (3.6.2) formülünü kullanan yöntemin ihtiyaç duyduğu çözüm süreleri Tablo 4.4’de verilmektedir. İlk iki sütun her iki formülle elde edilen tam ve indirgenmiş çözümler arasındaki hataları, son ikisi ise ön görüntülerin oluşturulması için gereken işlem sürelerini göstermektedir.

(3.6.1) formülüyle iterasyonlu (2 iterasyon) çözölen doğrusal olmayan denklemin çözümleriyle, (3.6.2) formülüyle iterasyon olmadan çözölen denklemin çözümleri ile elde edilen hataların neredeyse aynı olduđu görölebilir, bu da iterasyon olmadan elde edilen çözümlerin hassasiyet açısından kabul edilebilir olduđunu göstermektedir. ÇTBA yönteminin, iterasyonsuz ihtiyaç duyduđu çözümler süresinin, iterasyonlu ihtiyaç duyduđu çözümler süresinden oldukça daha az olduđu, yani yöntemin oldukça hızlı olduđu son iki sütunda görölmektedir.

Tablo 4.4 Farklı k değeri için oluşın bağıl mutlak hatalar ve çözümler süreleri

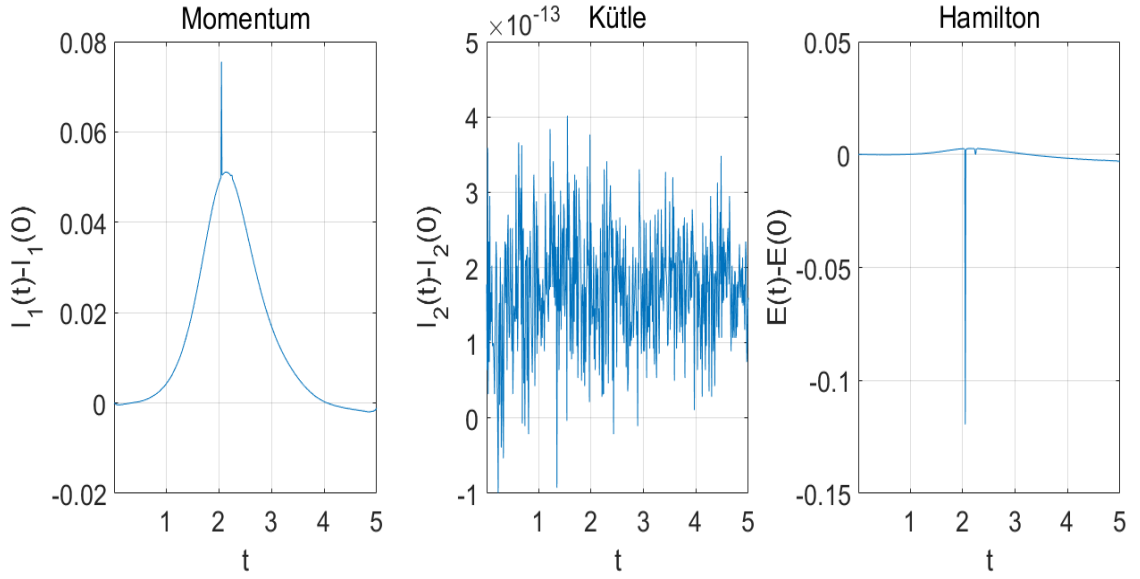
k	Mutlak Bağıl Hata		İşlem Süresi	
	İterasyonlu (formöl 3.6.1)	İterasyonsuz (formöl 3.6.2)	İterasyonlu (formöl 3.6.1)	İterasyonsuz (formöl 3.6.2)
1	3.60e-02	3.60e-02	72.9980	10.7240
2	1.80e-02	1.79e-02	35.6080	13.4720
3	3.58e-02	3.56e-02	11.2200	1.8450
4	1.79e-02	1.75e-02	12.0040	1.5960
5	3.56e-02	3.50e-02	15.6960	1.6130
6	1.84e-02	1.77e-02	16.0200	1.6970

Şekil 4.7’de, $t = 5$ zamanındaki tam çözümler ile birlikte indirgenmiş çözümlerin profilleri gösterilmektedir. İndirgenmiş boyut $k = 2$ için, tam ve indirgenmiş dalgaların birbiriyle çakıştığı görölmektedir. Bu da indirgenmiş çözümlerin tam çözümlerle aynı dalga davranışına sahip olup aynı dalga yayılımını sağladığı anlamına gelmektedir.



Şekil 4.7 $k = 2$ için $t = 5$ zamanındaki tam/indirgenmiş çözümler

Ön görüntülerle elde edilen korunan değişmezler Şekil 4.8’de verilmektedir. Burada, Şekil 4.6’daki değişmezlere benzer şekilde, her iki değişmezin farklı zamanlardaki değerleri ile başlangıç değerleri arasındaki fark gösterilmektedir. Kütlenin makine hassasiyetiyle korunduğu açıkken, momentum ve Hamilton değişmezlerindeki hatalar tam çözümlerle elde edilenler kadar küçük değildir. Model indirgeme yöntemlerinde, özellikle de değişmezlerin korunumu açısından bu beklenen bir durumdur. Bu değişmezlerin, salınımları küçük bir aralık içinde, herhangi bir kayma olmaksızın devam ettiğinden, belirtilen süre boyunca korunduğunu söylenebilmektedir.



Şekil 4.8 $k = 2$ için indirgenmiş büyüklüklerin korunumu

4.1.3. Bir boyutlu NLS denklemleri

Bir boyutlu NLS denklemleri (2.1.1.2) formunda, $(x, t) \in [-20, 60] \times [0, 7]$ uzay-zaman alanı için

$$\psi^0(\mathbf{x}) = \text{sech}(x)e^{ix},$$

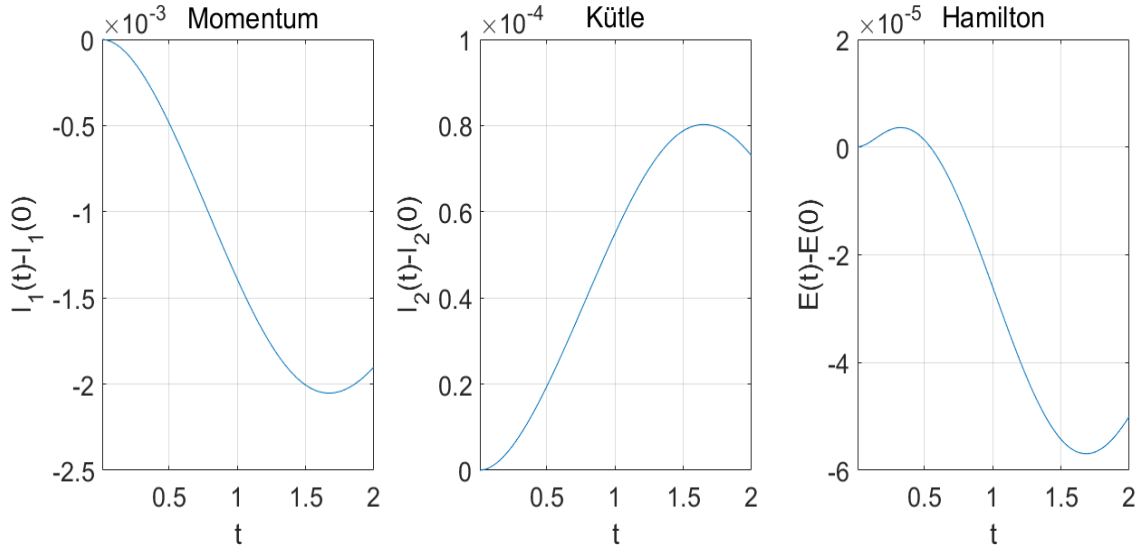
başlangıç koşulu ve $\mu = 1$, $\beta = 2.5$ parametre değerleri için simüle edilecektir. NLS denklemleri (2.1.1.3) formunda gerçel değerli bağımlı değişkenlerin sistemi olarak alındığında, ilgili başlangıç koşulları

$$p^0(\mathbf{x}) = \text{sech}(x) \cos(x),$$

$$q^0(\mathbf{x}) = \text{sech}(x) \sin(x),$$

olarak gerçekleşir. Ayırıklaştırma ölçüleri olarak $\Delta x = 0.08$ ve $\Delta t = 0.01$ değerleri için uzay-zaman ayırıklaştırılması ile sistemin anlık bilgilerinden alınan her t_k anındaki ayırık çözümlerden Y veri matrisi oluşturulmaktadır. Uzay ve zaman koordinatları için ayırıklaştırılmış veri matrisi, $\mathbf{w}^j = ((\mathbf{p}^j)^T, (\mathbf{q}^j)^T)^T \in \mathbb{R}^{2000}$ vektörleri için $Y = [\mathbf{w}^1 \dots \mathbf{w}^{700}] \in \mathbb{R}^{2000 \times 700}$ şeklinde yazılır.

Şekil 4.9, başlangıç değerlerinden itibaren zaman dilimlerinde momentum I_1 , kütle I_2 ve Hamilton (Enerji) E değerlerinin değişkenliğini göstermektedir. Gözlemlenen salınımlar, her değişmez için de iyi bir koruma sağlandığını göstermektedir.



Şekil 4.9 Büyüklüklerin tam çözüm halinde korunumu

Daha sonra, Tablo 4.5’te, TBA ve ÇTBA hata ve hesaplama etkinliği açısından karşılaştırılmaktadır. Bu karşılaştırma için, $t = 2$ zamanındaki dalgaya karşılık gelen $\mathbf{w}^* = \mathbf{w}^{200}$ girdi uzayı çözüm vektörü kullanılmaktadır. Sonuçlar indirgenmiş boyutlar $k = 1, \dots, 6$ için sunulmaktadır. TBA ve ÇTBA kullanıldığında, yapılan işlemler sonucu tam çözüm $\mathbf{w}^*$ ile indirgenmiş yaklaşık çözüm $\hat{\mathbf{w}}^*$ arasındaki oluşan $\|\mathbf{w}^* - \hat{\mathbf{w}}^*\|_*$ bağıl mutlak hatalar gösterilmektedir. Aynı sayıda baz kullanıldığında ÇTBA ile daha kesin sonuçlar elde edilmiştir.

Tablo 4.5 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar

k	TBA	ÇTBA
1	9.29e-01	1.41e-02
2	5.98e-01	6.64e-03
3	5.97e-01	1.33e-02
4	4.60e-01	7.44e-03
5	2.77e-01	1.42e-02
6	2.48e-01	8.65e-03

Diğer yandan, hesaplama verimliliği açısından, sabit nokta iterasyonu ile çözülen (3.6.1) formülünü kullanan ÇTBA yöntemi ile cebirsel bir denklem olan (3.6.2) formülünü kullanan yöntemin gerektirdiği çözüm süreleri Tablo 4.6’da sunulmaktadır. İlk iki sütun, her iki formülle elde edilen tam ve indirgenmiş çözümler arasındaki hataları gösterirken,

son iki sütun ön görüntülerin oluşturulması için gereken işlem sürelerini yansıtmaktadır. (3.6.1) formülüyle iterasyonlu (4-6 iterasyon) çözülen doğrusal olmayan denklemin çözümleriyle, (3.6.2) formülüyle iterasyon olmadan çözülen denklemin çözümleri ile elde edilen hataların neredeyse aynı olduğu gözlemlenmektedir; bu durum, iterasyonsuz çözümlerin hassasiyet açısından yeterli olduğunu göstermektedir. Ayrıca, ÇTBA yönteminin iterasyonsuz olarak ihtiyaç duyduğu çözüm süresinin, iterasyonlu çözüme kıyasla çok daha az olduğu, yani yöntemin oldukça hızlı olduğu son iki sütunda açıkça görülmektedir.

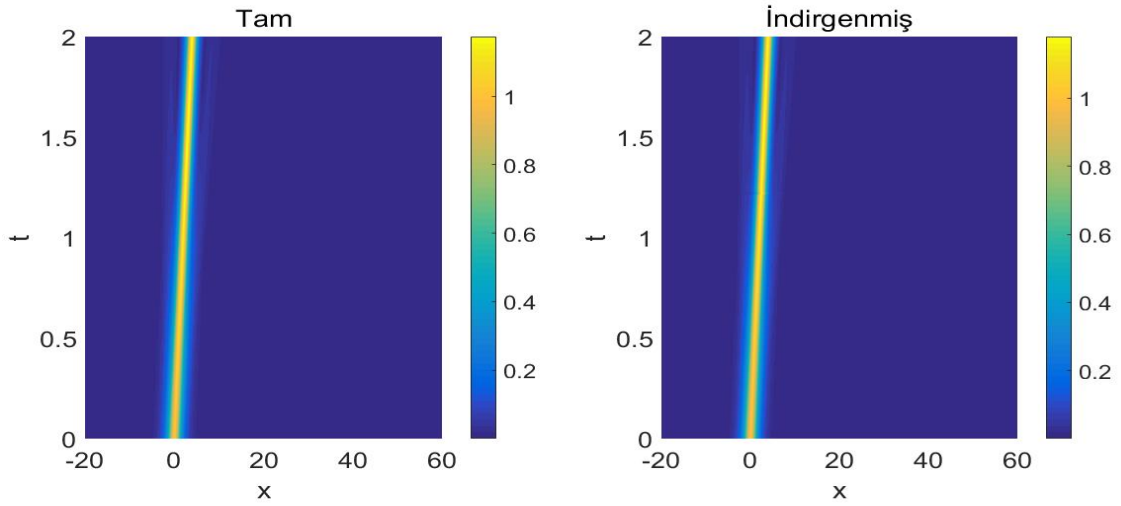
Tablo 4.6 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar ve çözüm süreleri

k	Mutlak Bağıl Hata		İşlem Süresi	
	İterasyonlu (formül 3.6.1)	İterasyonsuz (formül 3.6.2)	İterasyonlu (formül 3.6.1)	İterasyonsuz (formül 3.6.2)
1	1.41e-02	1.41e-02	1.8350	0.1210
2	6.64e-03	6.09e-03	1.8600	0.2910
3	1.33e-02	1.21e-02	1.8680	0.2320
4	7.44e-03	4.63e-03	2.1730	0.3280
5	1.42e-02	1.06e-02	2.5240	0.2730
6	8.65e-03	2.02e-03	3.5320	0.2890

Şekil 4.10’da, $t = 0$ ile $t = 2$ zaman aralığında tam çözümler ile oluşan dalga profili ile birlikte indirgenmiş çözümler ile oluşan dalga profili gösterilmektedir.

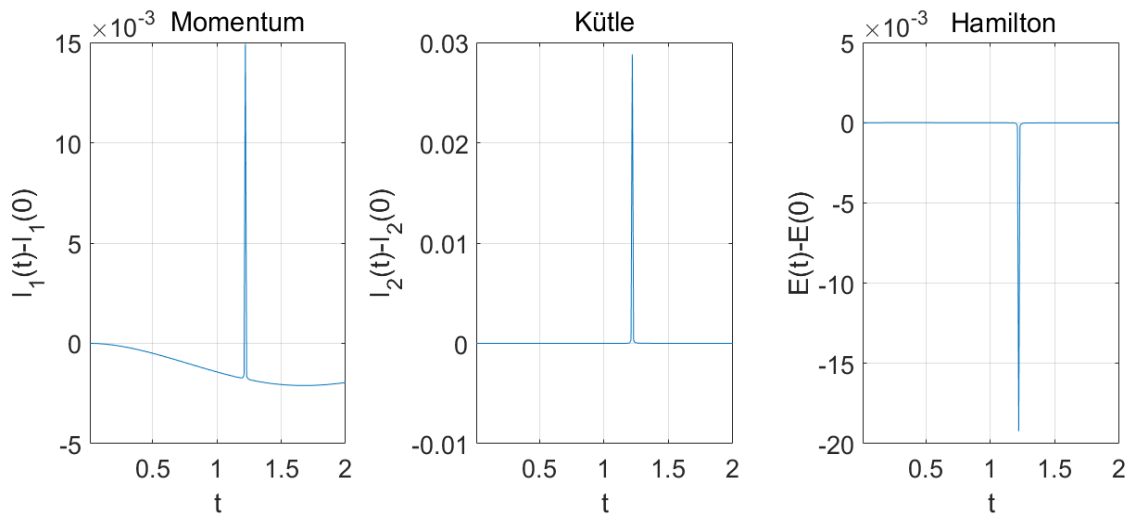
Not: NLS denklemini için bir t anındaki dalga $|\psi(t)| = \sqrt{p(t)^2 + q(t)^2}$ formülüyle hesaplanmaktadır.

İndirgenmiş boyut $k = 2$ için belirlenen zaman aralığında tam ve indirgenmiş dalgaların birbiriyle çakıştığı görülmektedir. Bu da indirgenmiş çözümlerin tam çözüm ile aynı dalga davranışına sahip güvenilir bir dalga yayılımı sağladığı anlamına gelmektedir ki fiziksel olarak başarılı bir modelleme için çok önemlidir.



Şekil 4.10 $k = 2$ için tam/indirgenmiş dalga profilleri

Ön görüntülerle elde edilen korunan değişmezler Şekil 4.11’de sunulmaktadır. Şekil 4.9’da gösterilen değişmezler benzer şekilde, her iki değişmezin farklı zamanlardaki değerleri ile başlangıç değerleri arasındaki fark burada da gösterilmektedir. Tüm değişmezlerin, tam çözümlerle elde edilenler kadar hassa olmasa da, benzer şekilde korunduğu görülmektedir. Model indirgeme yöntemlerinde, özellikle değişmezlerin korunumu söz konusu olduğunda, bu beklenen bir durumdur. Ancak, bu değişmezlerin küçük bir aralık içinde salındığı ve herhangi bir kayma olmaksızın sabit kaldığı, belirtilen süre boyunca korunduğu söylenebilir.



Şekil 4.11 $k = 2$ için indirgenmiş büyüklüklerin korunumu

4.1.4. İki boyutlu NLS denklemi

İki boyutlu NLS denklemi (2.1.1.2) formunda, $(x, y, t) \in [-8, 8] \times [-8, 8] \times [0, 3]$ uzay-zaman alanı için

$$\psi^0(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{(x^2+y^2)}{2}},$$

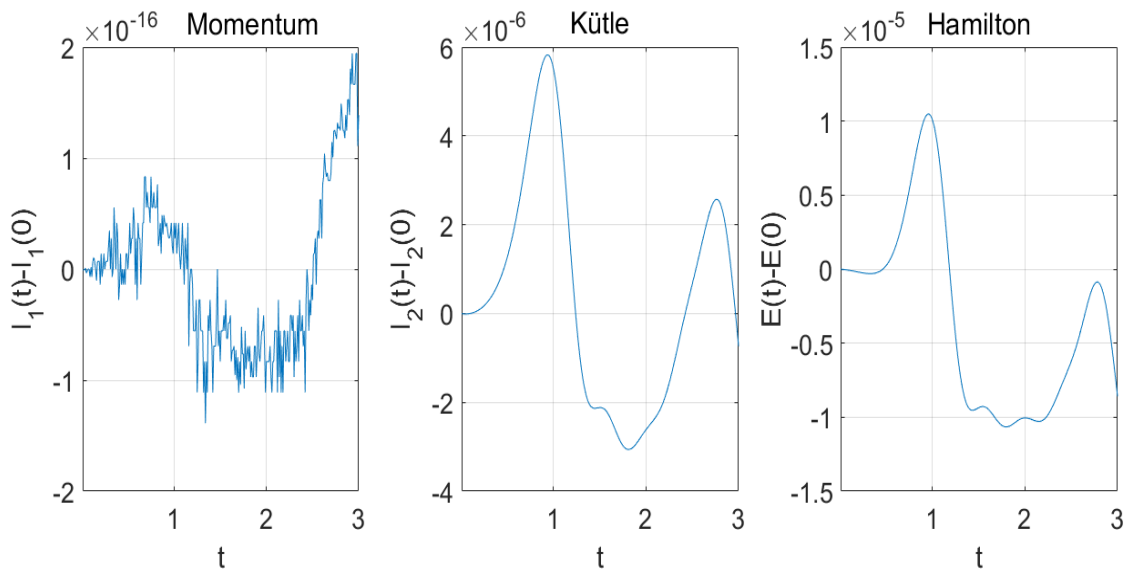
başlangıç koşulu ile ele alınacaktır. NLS denklemi (2.1.1.3) formunda gerçel değerli bağımlı değişkenlerin sistemi olarak alındığında, ilgili başlangıç koşulları

$$p^0(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{(x^2+y^2)}{2}},$$

$$q^0(\mathbf{x}) = 0,$$

olarak gerçekleşir. Simülasyonda sistem parametre değerleri $\mu = 0.5$, $\beta = -1$ olarak alınmıştır. Ayırıklaştırma ölçüleri olarak $\Delta x = \Delta y = 0.5$ ve $\Delta t = 0.01$ değerleri için uzay-zaman ayırıklaştırılması ile sistemin anlık bilgilerinden alınan her t_k anındaki ayırık çözümlerden Y veri matrisi oluşturulmaktadır. Uzay ve zaman koordinatları için ayırıklaştırılmış veri matrisi, $\mathbf{w}^j = ((\mathbf{p}^j)^T, (\mathbf{q}^j)^T)^T \in \mathbb{R}^{2048}$ vektörleri için $Y = [\mathbf{w}^1 \dots \mathbf{w}^{300}] \in \mathbb{R}^{2048 \times 300}$ şeklindedir.

Şekil 4.12, başlangıç değerlerinden itibaren zaman dilimlerinde momentum I_1 , kütle I_2 ve Hamilton E değerlerinin değişkenliğini göstermektedir. Gözlemlenen salınımlar, her değişmez için de iyi bir koruma sağlandığını, momentum için ise hassasiyetin makine hassasiyeti ile karşılaştırılabilir olduğunu göstermektedir.



Şekil 4.12 Büyüklüklerin tam çözüm halinde korunumu

Daha sonra, Tablo 4.7’de, TBA ve ÇTBA yöntemleri hata ve hesaplama etkinliği açısından karşılaştırılmaktadır. Bu karşılaştırma için, $t = 1$ zamanındaki dalgaya karşılık gelen $\mathbf{w}^* = \mathbf{w}^{100}$ girdi uzayı çözüm vektörü kullanılmaktadır. Sonuçlar indirgenmiş boyutlar $k = 1, \dots, 6$ için sunulmaktadır. TBA ve ÇTBA kullanıldığında, yapılan işlemler sonucu tam çözüm $\mathbf{w}^*$ ile indirgenmiş yaklaşık çözüm $\hat{\mathbf{w}}^*$ arasındaki oluşan $\|\mathbf{w}^* - \hat{\mathbf{w}}^*\|_*$ bağıl mutlak hatalar gösterilmektedir. Aynı sayıda baz kullanıldığında ÇTBA ile daha kesin sonuçlar elde edilmiştir.

Tablo 4.7 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar

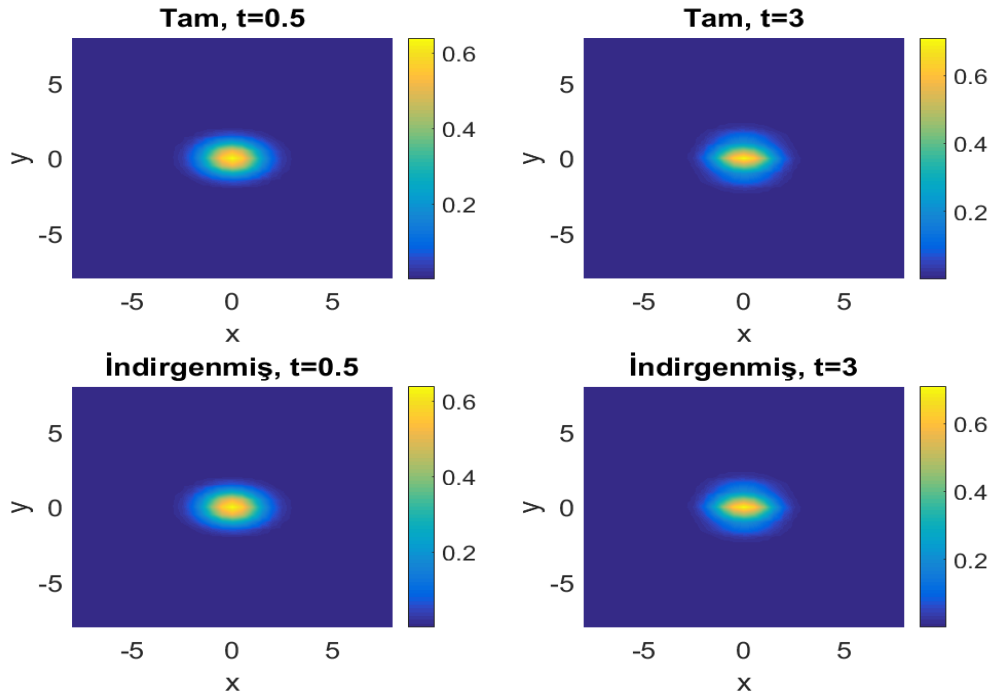
k	TBA	ÇTBA
1	5.68e-01	2.58e-02
2	1.43e-01	1.27e-02
3	1.41e-01	2.49e-02
4	5.29e-02	1.16e-02
5	6.03e-02	2.38e-02
6	3.48e-02	1.63e-03

Diğer yandan, hesaplama verimliliği açısından, sabit nokta iterasyonu ile çözülen (3.6.1) formülünü kullanan ÇTBA yöntemi ile cebirsel bir denklem olan (3.6.2) formülünü kullanan yöntemin ihtiyaç duyduğu çözüm süreleri Tablo 4.8’de sunulmaktadır. İlk iki sütun, her iki formülle elde edilen tam ve indirgenmiş çözümler arasındaki hataları gösterirken, son iki sütun ön görüntülerin oluşturulması için gereken işlem sürelerini göstermektedir. İterasyonla (2 iterasyon) çözülen doğrusal olmayan denklem (3.6.1) ile iterasyon gerektirmeyen denklem (3.6.2) arasındaki hataların neredeyse aynı olduğu görülmektedir. Bu, iterasyon olmadan elde edilen çözümlerin hassasiyet açısından kabul edilebilir olduğunu gösterir. ÇTBA yönteminin iterasyonsuz çözüm süresinin, iterasyonlu çözüm süresinden oldukça daha az olduğu, yani yöntemin oldukça hızlı olduğu, son iki sütunda açıkça görülmektedir.

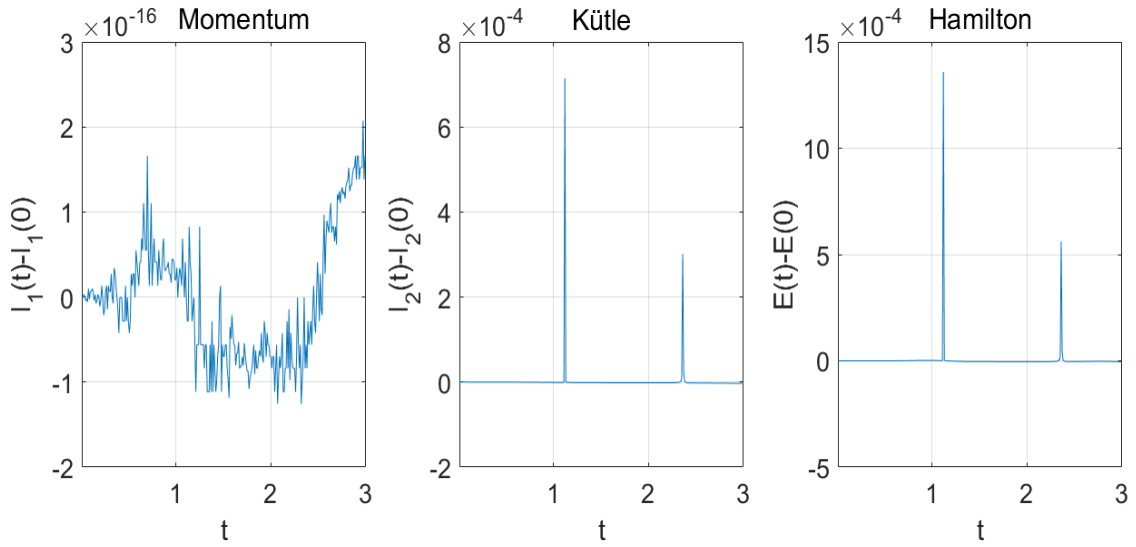
Tablo 4.8 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar ve çözüm süreleri

k	Mutlak Bağıl Hata		İşlem Süresi	
	İterasyonlu (formül 3.6.1)	İterasyonsuz (formül 3.6.2)	İterasyonlu (formül 3.6.1)	İterasyonsuz (formül 3.6.2)
1	2.58e-02	2.58e-02	2.7680	10.6040
2	1.27e-02	1.27e-02	0.8590	11.4970
3	2.49e-02	2.48e-02	1.1030	0.5840
4	1.16e-02	1.17e-02	1.3340	0.3420
5	2.38e-02	2.38e-02	1.5960	0.2200
6	1.63e-03	1.66e-03	1.7070	0.2340

Şekil 4.13'te, $t = 0.5$ ve $t = 3$ zamanlarındaki tam çözümler ile birlikte indirgenmiş çözümlerin profilleri gösterilmektedir. İndirgenmiş boyut $k = 2$ için, tam ve indirgenmiş dalgaların birbiriyle çakıştığı görülmektedir. Bu da indirgenmiş çözümlerin tam çözüm ile aynı dalga davranışına sahip olduğu anlamına gelmektedir ki fiziksel olarak başarılı bir modelleme için çok önemlidir.

**Şekil 4.13** $k = 2$ için $t = 0.5$ ve $t = 3$ zamanlarındaki tam/indirgenmiş dalga profilleri

Öte yandan, ön görüntülerle elde edilen korunan değişmezler Şekil 4.14'te verilmektedir. Burada, Şekil 4.12'deki değişmezlere benzer şekilde, değişmezin farklı zamanlardaki değerleri ile başlangıç değerleri arasındaki fark gösterilmektedir. Momentumun makine hassasiyetiyle korunduğu açıkken, kütle ve Hamilton değişmezlerindeki hatalar tam çözümlerle elde edilenler kadar küçük değildir. Model indirgeme yöntemlerinde, özellikle de değişmezlerin korunumu açısından bu beklenen bir durumdur. Bu değişmezlerin, salınımları küçük bir aralık içinde, herhangi bir kayma olmaksızın devam ettiğinden, belirtilen süre boyunca korunduğunu söylenebilmektedir.



Şekil 4.14 $k = 2$ için indirgenmiş büyüklüklerin korunumu

4.2. Gradyan Sistemler

Gradyan sistemlerin incelenmesinde bir ve iki boyutlu AC ile iki boyutlu SH denklemi ele alınacaktır.

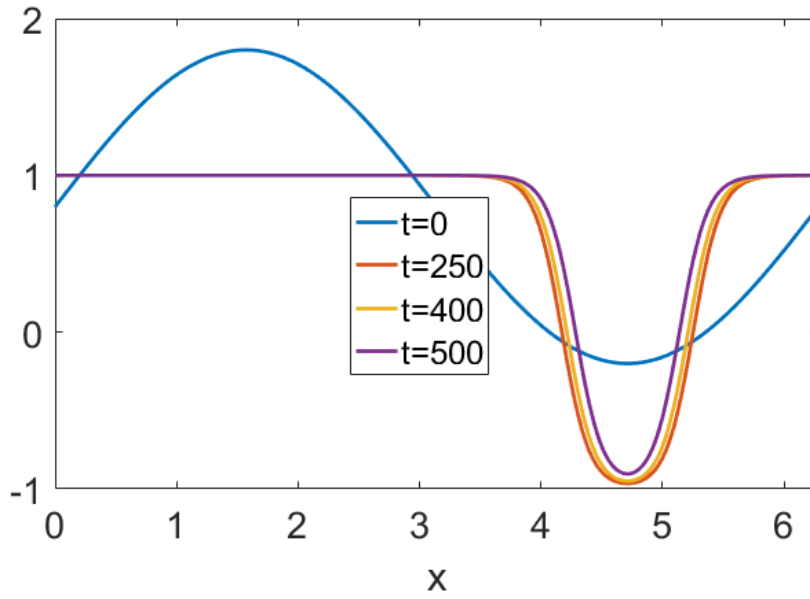
4.2.1. Bir boyutlu AC denklemi

Bir boyutlu (2.1.2.1) AC denklemi, $(x, t) \in [0, 2\pi] \times [0, 600]$ uzay-zaman alanı için

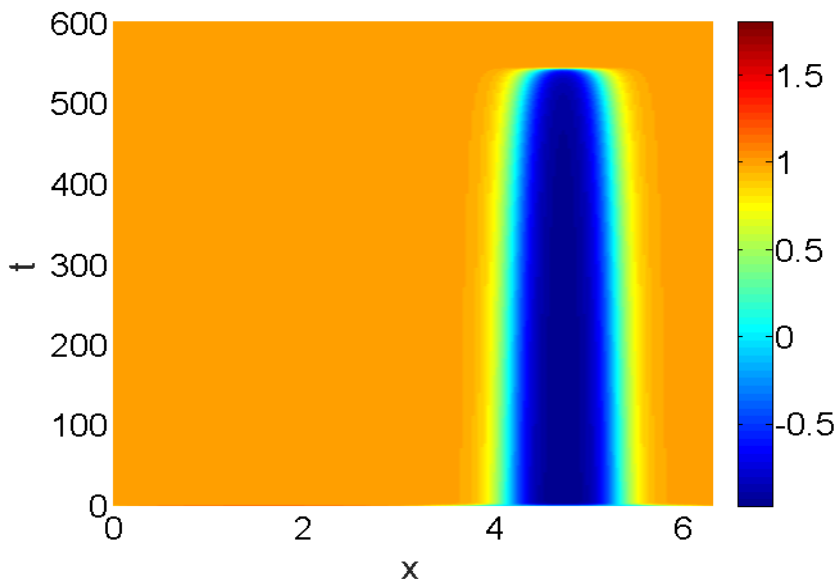
$$u^0(x) = 0.8 + \sin x,$$

başlangıç dalgası ve $\varepsilon = 0.0256$ parametre değeri için simule edilecektir. Ayırıklaştırma ölçüleri olarak $\Delta x = \pi/100$ ve $\Delta t = 0.5$ değerleri için uzay-zaman ayırıklaştırılması ile sistemin anlık bilgilerinden alınan her t_k anındaki ayırık çözümlerden Y veri matrisi oluşturulmaktadır. Uzay ve zaman koordinatları için ayırıklaştırılmış veri matrisi $Y = [\mathbf{u}^1 \dots \mathbf{u}^{1200}] \in \mathbb{R}^{200 \times 1200}$ şeklinde yazılır. Tam çözümlerin $t = 0, 250, 400, 500$

zamanlarındaki grafik çizimleri Şekil 4.15’de verilmiş olup, $[0, 600]$ zaman aralığındaki çözüm profili Şekil 4.16’da verilmiştir. AC denklemi, ele alınan potansiyel fonksiyonu $F(u) = (u^2 - 1)^2/4$ için, faz ayrımı adıyla anılan ve çözümlerinin bir denge alanından diğerine geçtiği bir kararlı ($u = 0$) ve iki kararsız ($u = \pm 1$) denge alanına sahiptir. İki kararsız denge alanı arasındaki ara yüzeyler uzun zaman aralığı boyunca bölgeler üzerinde hareket eder, ki bu duruma meta-kararlılık fenomeni denir (Karasözen vd., 2018). Söz konusu meta-kararlılık durumu Şekil 4.16’da gözlemlenebilmektedir.



Şekil 4.15 $t = 0, 250, 400, 500$ zamanlarındaki dalga grafikleri



Şekil 4.16 Tam çözüm profili

Tablo 4.9’da, TBA ve ÇTBA yöntemleri hata ve hesaplama etkinliği açısından karşılaştırılmaktadır. Bu karşılaştırma için, $t = 2$ zamanındaki çözüme karşılık gelen $\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{100}$ girdi uzayı çözüm vektörü kullanılmaktadır. Sonuçlar indirgenmiş boyutlar $k = 1, \dots, 6$ için sunulmaktadır. TBA ve ÇTBA kullanıldığında, yapılan işlemler sonucu tam çözüm $\mathbf{u}^*$ ile indirgenmiş yaklaşık çözüm $\hat{\mathbf{u}}^*$ arasındaki oluşan bağıl mutlak hatalar gösterilmektedir. Aynı sayıda baz kullanıldığında ÇTBA ile daha kesin sonuçlar elde edilmiştir.

Tablo 4.9 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar

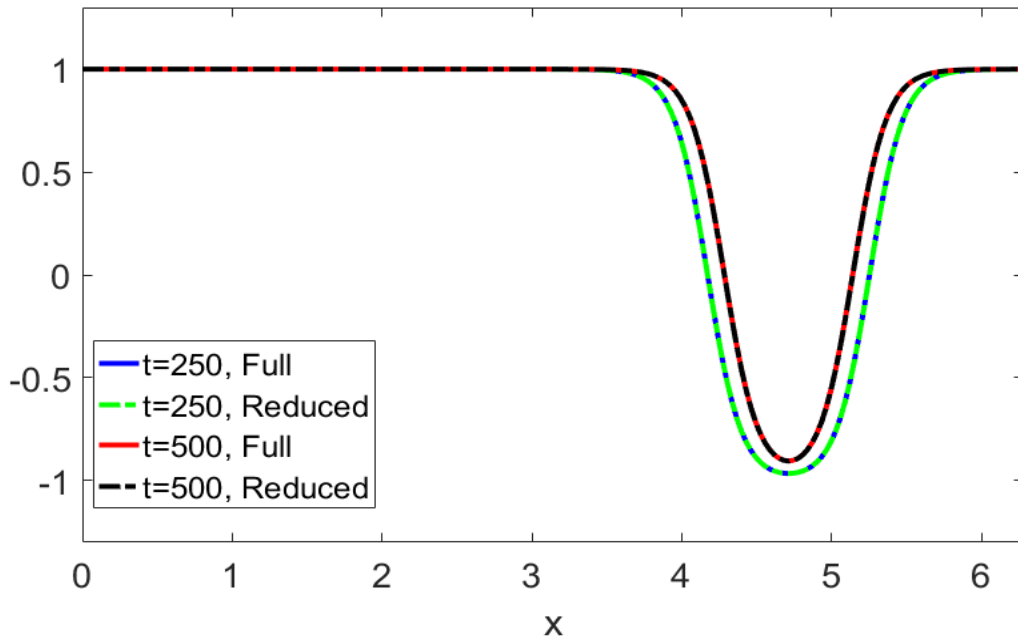
k	TBA	ÇTBA
1	7.31e-01	1.41e-02
2	3.84e-01	6.79e-03
3	3.44e-01	1.34e-02
4	2.87e-01	1.16e-02
5	1.35e-01	9.87e-03
6	7.78e-02	2.05e-03

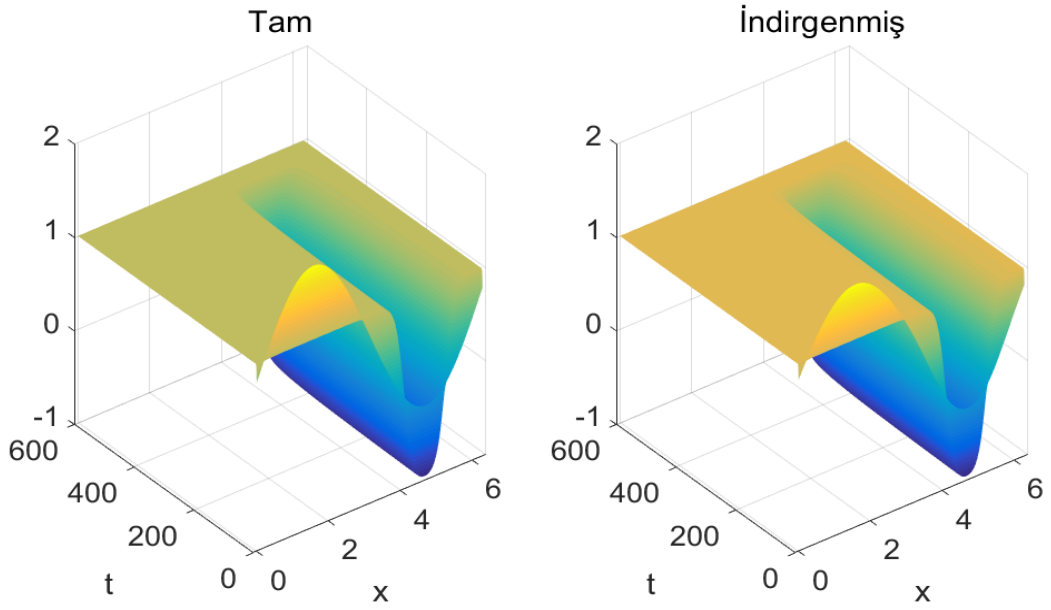
Öte yandan, hesaplama etkinliği açısından, sabit nokta iterasyonu ile çözülen (3.6.1) formülünü kullanan ÇTBA yöntemi ile cebirsel bir denklem olan (3.6.2) formülünü kullanan yöntemin ihtiyaç duyduğu çözüm süreleri Tablo 4.10’da verilmektedir. İlk iki sütun her iki formülle elde edilen tam ve indirgenmiş çözümler arasındaki hataları, son ikisi ise ön görüntülerin oluşturulması için gereken işlem sürelerini göstermektedir. (3.6.1) formülüyle iterasyonlu (2-3 iterasyon) çözülen doğrusal olmayan denklemin çözümleriyle, (3.6.2) formülüyle iterasyon olmadan çözülen denklemin çözümleri ile elde edilen hataların neredeyse aynı olduğu görülebilir, bu da iterasyon olmadan elde edilen çözümlerin hassasiyet açısından kabul edilebilir olduğunu göstermektedir. ÇTBA yönteminin, iterasyonsuz ihtiyaç duyduğu çözüm süresinin, iterasyonlu ihtiyaç duyduğu çözüm süresinden çok daha az olduğu, yani yöntemin oldukça hızlı olduğu son iki sütunda görülmektedir.

Tablo 4.10 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar ve çözüm süreleri

k	Mutlak Bağıl Hata		İşlem Süresi	
	İterasyonlu (formül 3.6.1)	İterasyonsuz (formül 3.6.2)	İterasyonlu (formül 3.6.1)	İterasyonsuz (formül 3.6.2)
1	1.41e-02	1.41e-02	3.9634	0.1026
2	6.79e-03	6.83e-03	1.9047	0.1630
3	1.34e-02	1.35e-02	2.1734	0.1660
4	1.16e-02	1.17e-02	1.8595	0.1932
5	9.87e-03	1.01e-02	2.2519	0.1721
6	2.05e-03	2.51e-03	2.3998	0.1872

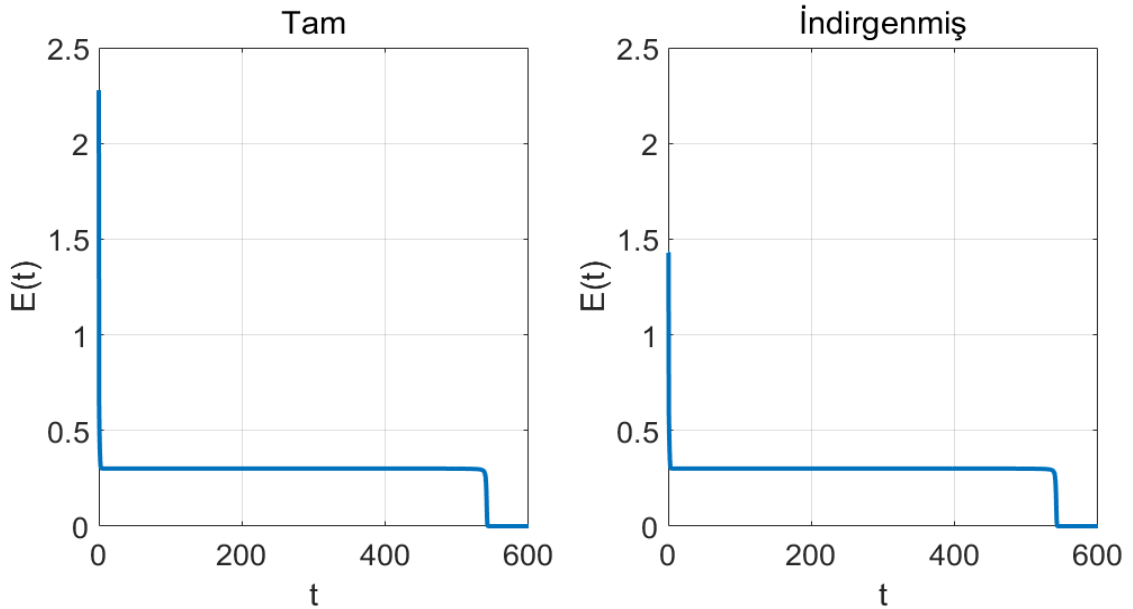
Şekil 4.17, $t = 250$ ve $t = 500$ zamanlarındaki tam çözümlerle birlikte indirgenmiş çözümleri göstermektedir. İndirgenmiş boyut $k = 2$ için, her iki zamanda tam ve indirgenmiş çözümlerin birbiriyle çakıştığı görülmektedir. Tam ve indirgenmiş çözüm profilleri Şekil 4.18’de verilmiştir. Şekillerden, tam ve indirgenmiş çözümlerin çakıştığı, ve dolayısıyla aynı faz geçişi davranışını gösterdiği gözlemlenmiştir.

**Şekil 4.17** $k = 2$ için $t = 250, 500$ zamanlarındaki tam/indirgenmiş çözümler



Şekil 4.18 $k = 2$ için tam/indirgenmiş çözüm profilleri

Öte yandan, tam çözümler ile ön görüntülerle elde edilen enerji grafikleri Şekil 4.19'da verilmektedir. Her iki grafikte de aynı enerji azalma davranışının gerçekleştiği görülmektedir.



Şekil 4.19 Tam enerji ile $k = 2$ için indirgenmiş enerji

4.2.2. İki boyutlu AC denklemi

İki boyutlu (2.1.2.1) AC denklemi $(x, y, t) \in [0, 2\pi] \times [0, 2\pi] \times [0, 5]$ uzay-zaman alanında

$$u^0(x) = 2e^{(\sin x + \sin y) - 2} + 2.2e^{-(\sin x + \sin y) - 2} + 1$$

Başlangıç koşulu ve $\varepsilon = 0.0025$ parametre değeri için simule edilecektir. Ayırıklaştırma ölçüleri olarak $\Delta x = \Delta y = \pi/32$ ve $\Delta t = 0.01$ değerleri için uzay-zaman ayırıklaştırılması ile sistemin anlık bilgilerinden alınan her t_k anındaki ayırık çözümlerden Y veri matrisi oluşturulmaktadır. Uzay ve zaman koordinatları için ayırıklaştırılmış veri matrisi, $Y = [\mathbf{u}^1 \dots \mathbf{u}^{500}] \in \mathbb{R}^{4096 \times 500}$ şeklindedir.

Tablo 4.11’de, TBA ve ÇTBA yöntemleri hata ve hesaplama etkinliği açısından karşılaştırılmaktadır. Bu karşılaştırma için, $t = 2$ zamanındaki çözüme karşılık gelen $\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{100}$ girdi uzayı çözüm vektörü kullanılmaktadır. Sonuçlar indirgenmiş boyutlar $k = 1, \dots, 6$ için sunulmaktadır. TBA ve ÇTBA kullanıldığında, yapılan işlemler sonucu tam çözüm $\mathbf{u}^*$ ile indirgenmiş yaklaşık çözüm $\hat{\mathbf{u}}^*$ arasındaki oluşan bağıl mutlak hatalar gösterilmektedir. Aynı sayıda baz kullanıldığında ÇTBA ile daha kesin sonuçlar elde edilmiştir.

Tablo 4.11 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar

k	TBA	ÇTBA
1	2.80e-01	2.50e-03
2	8.22e-02	1.49e-03
3	4.78e-02	3.28e-03
4	2.13e-02	1.92e-03
5	6.53e-03	2.45e-03
6	3.54e-03	1.37e-03

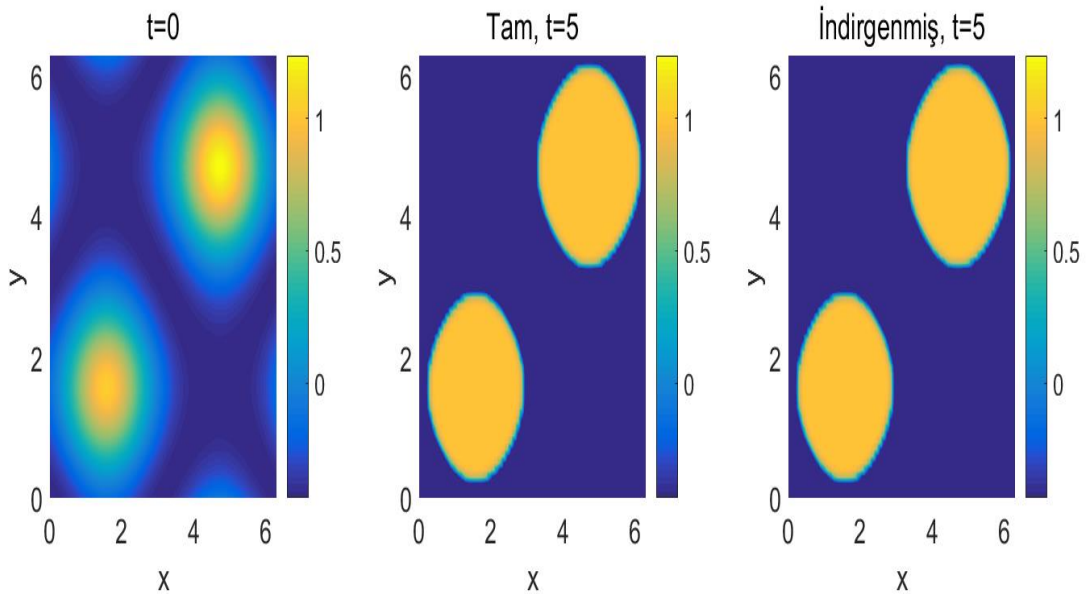
Hesaplama etkinliği açısından, sabit nokta iterasyonu ile çözülen (3.6.1) formülünü kullanan ÇTBA yöntemi ile cebirsel bir denklem olan (3.6.2) formülünü kullanan yöntemin ihtiyaç duyduğu çözüm süreleri Tablo 4.12’de verilmektedir. İlk iki sütun her iki formülle elde edilen tam ve indirgenmiş çözümler arasındaki hataları, son ikisi ise ön görüntülerin oluşturulması için gereken işlem sürelerini göstermektedir. (3.6.1) formülüyle iterasyonlu (2 iterasyon) çözülen doğrusal olmayan denklemin çözümleriyle, (3.6.2) formülüyle iterasyon olmadan çözülen denklemin çözümleri ile elde edilen

hataların neredeyse aynı olduğu görülebilir, bu da iterasyon olmadan elde edilen çözümlerin hassasiyet açısından kabul edilebilir olduğunu göstermektedir. ÇTBA yönteminin, iterasyonsuz ihtiyaç duyduğu çözüm süresinin, iterasyonlu ihtiyaç duyduğu çözüm süresinden oldukça daha az olduğu, yani yöntemin oldukça hızlı olduğu son iki sütunda görülmektedir.

Tablo 4.12 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar ve çözüm süreleri

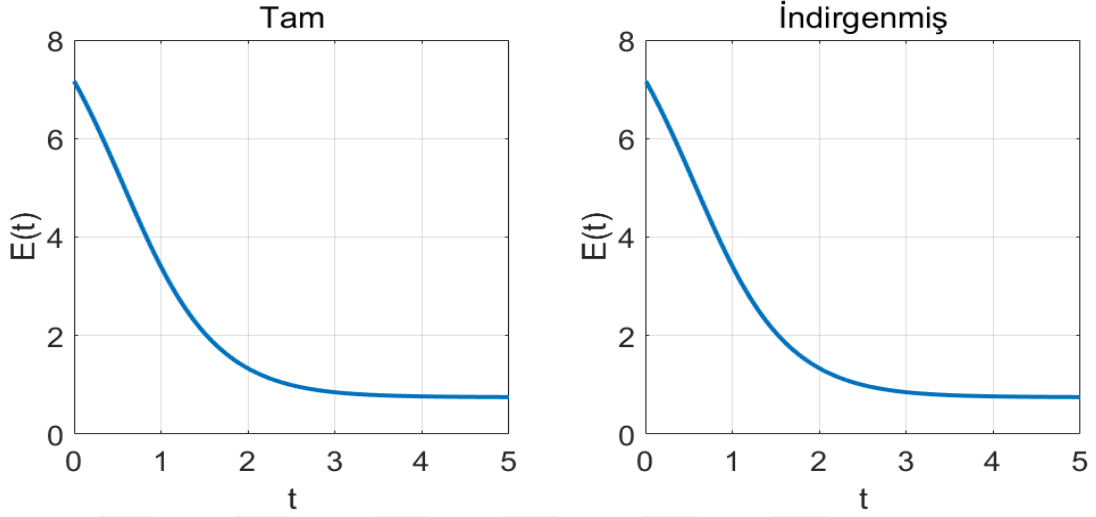
k	Mutlak Bağıl Hata		İşlem Süresi	
	İterasyonlu (formül 3.6.1)	İterasyonsuz (formül 3.6.2)	İterasyonlu (formül 3.6.1)	İterasyonsuz (formül 3.6.2)
1	2.50e-03	3.80e-03	2.2090	1.0310
2	1.49e-03	1.89e-03	1.7000	1.2470
3	3.28e-03	3.77e-03	2.2340	0.9070
4	1.92e-03	1.82e-03	2.6700	0.7160
5	2.45e-03	3.66e-03	3.2030	0.8110
6	1.37e-03	1.68e-03	3.5700	0.8230

Şekil 4.20’de, $t = 5$ zamanındaki tam çözümler ile birlikte indirgenmiş çözümlerin profilleri gösterilmektedir. İndirgenmiş boyut $k = 2$ için, tam ve indirgenmiş çözümlerin birbiriyle benzer olduğu görülmektedir. Bu da indirgenmiş çözümlerin tam çözüm ile aynı davranışa sahip olduğu anlamına gelmektedir.



Şekil 4.20 $k = 2$ için $t = 5$ zamanındaki tam/indirgenmiş çözüm profilleri

Öte yandan, tam çözümler ve ön görüntülerle elde edilen enerji grafikleri Şekil 4.21’de verilmektedir. Burada, bir boyutlu AC denklemindekine benzer şekilde her iki grafikte de aynı enerji azalma davranışının gerçekleştiği açıkça görülmektedir.



Şekil 4.21 Tam enerji ile $k = 2$ için indirgenmiş enerji

4.2.3. İki boyutlu SH denklemi

İki boyutlu (2.1.2.2) SH denklemi, $(x, y, t) \in [0, 100] \times [0, 100] \times [0, 10]$ uzay-zaman alanı için simule edilecektir. Başlangıç koşulu olarak, **rand()** fonksiyonu $[0,1]$ aralığında eşit dağılımlı rastgele sayı fonksiyonu olmak üzere

$$u^0(x, y) = 0.4 + 0.01\sqrt{\mu}(2\text{rand}() - 1),$$

fonksiyonu alınmıştır. Sistemdeki dönüşüm değişkeni olan ikinci değişken v için yarı ayrık formdaki başlangıç koşulu ise, ilgili dönüşüm gereği $\mathbf{v}^0 = \mathbf{u}^0 + A\mathbf{u}^0$ olarak alınmıştır. Ayrıca, $\mu = 0.3$ parametre değeri ve ayrıklaştırma ölçüleri olarak $\Delta x = \Delta y = 3.125$ ve $\Delta t = 0.01$ değerleri için uzay-zaman ayrıklaştırılması ile sistemin anlık bilgilerinden alınan her t_k anındaki ayrık çözümlerden Y veri matrisi oluşturulmaktadır. Uzay ve zaman koordinatları için ayrıklaştırılmış veri matrisi, $Y = [\mathbf{u}^1 \dots \mathbf{u}^{1000}] \in \mathbb{R}^{1024 \times 1000}$ şeklindedir.

Tablo 4.13’de, TBA ve ÇTBA yöntemleri hata ve hesaplama etkinliği açısından karşılaştırılmaktadır. Bu karşılaştırma için, $t = 2$ zamanındaki çözüme karşılık gelen $\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^{100}$ girdi uzayı çözüm vektörü kullanılmaktadır. Sonuçlar indirgenmiş boyutlar $k = 1, \dots, 6$ için sunulmaktadır. TBA ve ÇTBA kullanıldığında, yapılan işlemler sonucu tam çözüm $\mathbf{u}^*$ ile indirgenmiş yaklaşık çözüm $\hat{\mathbf{u}}^*$ arasındaki bağıl mutlak hatalar

gösterilmektedir. Aynı sayıda baz kullanıldığında ÇTBA ile daha kesin sonuçlar elde edilmiştir.

Tablo 4.13 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar

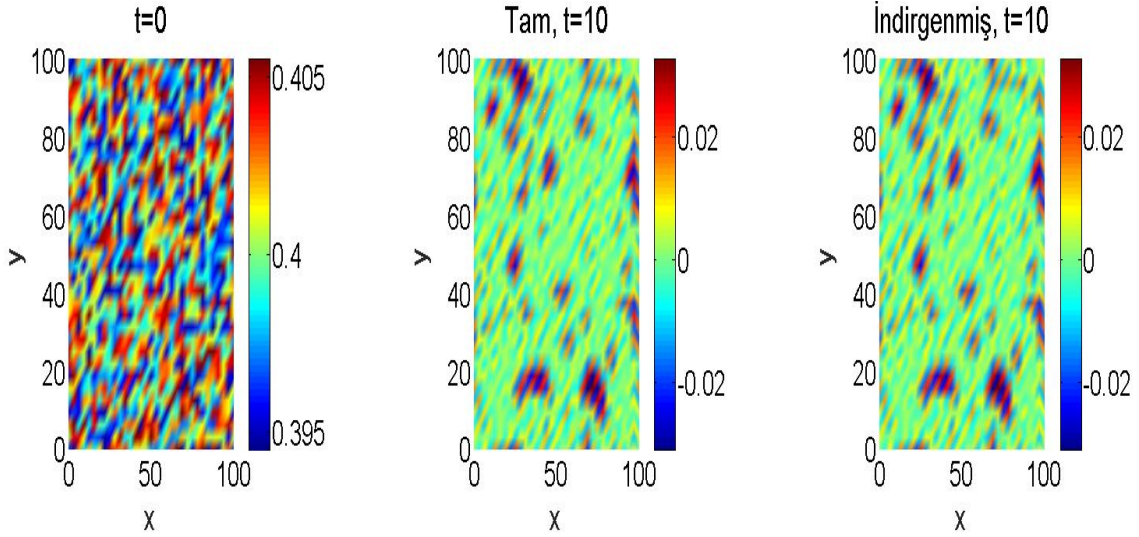
k	TBA	ÇTBA
1	2.80e-01	2.50e-03
2	8.22e-02	1.49e-03
3	4.78e-02	3.28e-03
4	2.13e-02	1.92e-03
5	6.53e-03	2.45e-03
6	3.54e-03	1.37e-03

Hesaplama etkinliği açısından, sabit nokta iterasyonu ile çözülen (3.6.1) formülünü kullanan ÇTBA yöntemi ile cebirsel bir denklem olan (3.6.2) formülünü kullanan yöntemin ihtiyaç duyduğu çözüm süreleri Tablo 4.14’de verilmektedir. İlk iki sütun her iki formülle elde edilen tam ve indirgenmiş çözümler arasındaki hataları, son ikisi ise ön görüntülerin oluşturulması için gereken işlem sürelerini göstermektedir. (3.6.1) formülüyle iterasyonlu (3 iterasyon) çözülen doğrusal olmayan denklemin çözümleriyle, (3.6.2) formülüyle iterasyon olmadan çözülen denklemin çözümleri ile elde edilen hataların neredeyse aynı olduğu görülebilir, bu da iterasyon olmadan elde edilen çözümlerin hassasiyet açısından kabul edilebilir olduğunu göstermektedir. ÇTBA yönteminin, iterasyonsuz ihtiyaç duyduğu çözüm süresinin, iterasyonlu ihtiyaç duyduğu çözüm süresinden oldukça daha az olduğu, yani yöntemin oldukça hızlı olduğu son iki sütunda görülmektedir.

Tablo 4.14 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar ve çözüm süreleri

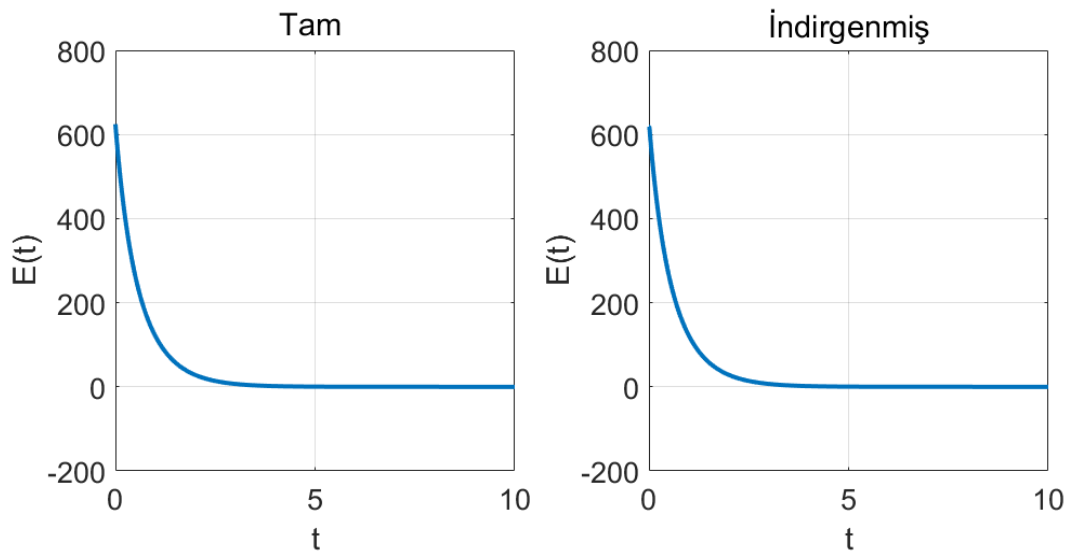
k	Mutlak Bağıl Hata		İşlem Süresi	
	İterasyonlu (formül 3.6.1)	İterasyonsuz (formül 3.6.2)	İterasyonlu (formül 3.6.1)	İterasyonsuz (formül 3.6.2)
1	2.50e-03	3.80e-03	2.2090	1.0310
2	1.49e-03	1.89e-03	1.7000	1.2470
3	3.28e-03	3.77e-03	2.2340	0.9070
4	1.92e-03	1.82e-03	2.6700	0.7160
5	2.45e-03	3.66e-03	3.2030	0.8110
6	1.37e-03	1.68e-03	3.5700	0.8230

Şekil 4.22’de, $t = 0$ anındaki rastgele başlangıç deseni ve $t = 10$ zamanındaki tam çözümleri ile birlikte indirgenmiş çözümlerin oluşturduğu desenler gösterilmektedir. İndirgenmiş boyut $k = 2$ için, tam ve indirgenmiş desenlerin birbiriyle benzer olduğu görülmektedir. Bu da indirgenmiş çözümlerin tam çözüm ile aynı davranışa sahip olduğu anlamına gelmektedir.



Şekil 4.22 Başlangıç profili ile $t = 10$ zamanındaki tam ve $k = 2$ için indirgenmiş çözüm profilleri

Son olarak, tam çözümlerle ve ön görüntülerle elde edilen enerji grafikleri Şekil 4.23’de sunulmaktadır. Şekilden, tam ve indirgenmiş çözümlerle elde edilen enerjilerin aynı şekilde azalarak devam ettiği görülmektedir.



Şekil 4.23 Tam enerji ile $k = 2$ için indirgenmiş enerji

4.3. Anti-Gradyan Sistemler

Anti-Gradyan sistemlerin incelenmesinde bir ve iki boyutlu FHN denklemleri, önceki örneklerin aksine homojen Neumann sınır koşulları altında ele alınacaktır.

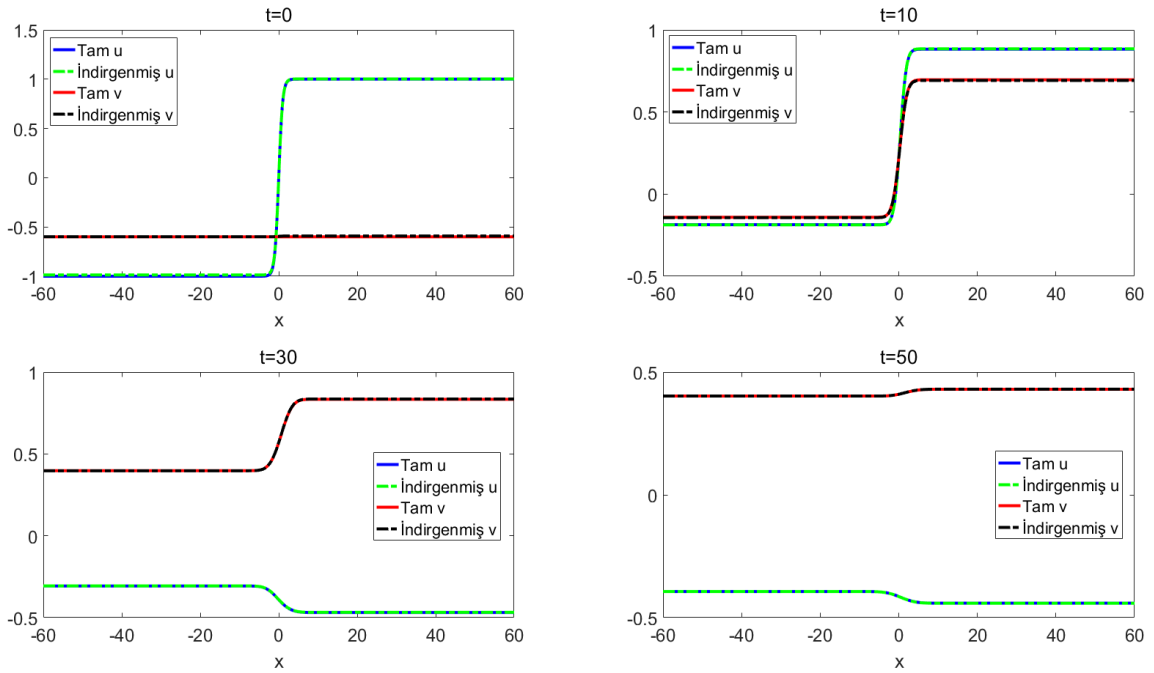
4.3.1. Bir boyutlu FHN denklemi

Bir boyutlu (2.1.3.1) FHN denklemi, $(x, t) \in [-60, 60] \times [0, 50]$ uzay-zaman alanı için

$$u^0(x) = \tanh(x), \quad v^0(x) = -0.6,$$

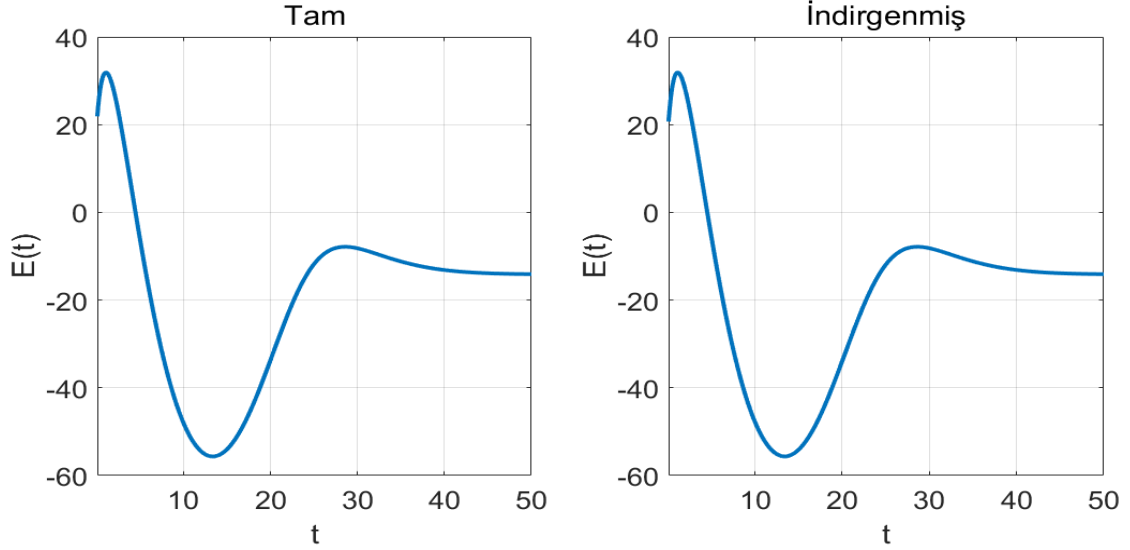
başlangıç koşulları ve $\tau_1 = \tau_2 = 12.5$, $\mu_1 = 1$, $\mu_2 = 1.25$, $\gamma = 0.8$, $\varepsilon = 0.7$, $\beta = 1/3$ parametre değerleri için simule edilecektir. Ayırıklaştırma ölçüleri olarak $\Delta x = 0.12$ ve $\Delta t = 0.1$ değerleri için uzay-zaman ayırıklaştırılması ile sistemin anlık bilgilerinden alınan her t_k anındaki ayırık çözümlerden Y veri matrisi oluşturulmaktadır. Uzay ve zaman koordinatları için ayırıklaştırılmış veri matrisi, $\mathbf{w}^j = ((\mathbf{u}^j)^T, (\mathbf{v}^j)^T)^T \in \mathbb{R}^{2000}$ vektörleri için $Y = [\mathbf{w}^1 \dots \mathbf{w}^{500}] \in \mathbb{R}^{2000 \times 500}$ şeklinde yazılır.

Şekil 4.24’de, $t = 0, 10, 30, 50$ zamanlarındaki tam çözümler ile birlikte indirgenmiş çözümler gösterilmektedir. İndirgenmiş boyut $k = 2$ için, verilen zamanlardaki tam ve indirgenmiş çözümlerin birbiriyle çakıştığı görülmektedir. Bu da indirgenmiş çözümlerin güvenilir olduğu anlamına gelmektedir.



Şekil 4.24 $k = 2$ için $t = 0, 10, 30, 50$ zamanlarındaki tam/indirgenmiş çözümler

Şekil 4.25, başlangıç değerlerinden itibaren tam ve indirgenmiş enerji değişimleri gösterilmektedir. Her iki grafikte de enerji değişimi aynı davranışı göstermekte olup beklendiği gibi monoton bir azalma veya korunma görülmemektedir.



Şekil 4.25 Tam enerji ile $k = 2$ için indirgenmiş enerji

Tablo 4.15'te, TBA ve ÇTBA yöntemleri hata ve hesaplama etkinliği açısından karşılaştırılmaktadır. Bu karşılaştırma için, $t = 2$ zamanındaki çözüme karşılık gelen $\mathbf{w}^* = \mathbf{w}^{100}$ girdi uzayı çözüm vektörü kullanılmaktadır. Sonuçlar indirgenmiş boyutlar $k = 1, \dots, 6$ için sunulmaktadır. TBA ve ÇTBA kullanıldığında, yapılan işlemler sonucu tam çözüm $\mathbf{w}^*$ ile indirgenmiş yaklaşık çözüm $\hat{\mathbf{w}}^*$ arasındaki bağıl mutlak hatalar gösterilmektedir. Aynı sayıda baz kullanıldığında ÇTBA ile daha kesin sonuçlar elde edilmiştir.

Tablo 4.15 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar

k	TBA	ÇTBA
1	4.13e-01	5.35e-03
2	1.63e-01	4.02e-03
3	1.43e-02	7.46e-03
4	1.32e-02	3.92e-03
5	1.07e-02	7.78e-03
6	8.49e-04	3.55e-03

Öte yandan, hesaplama etkinliği açısından, sabit nokta iterasyonu ile çözülen (3.6.1) formülünü kullanan ÇTBA yöntemi ile cebirsel bir denklem olan (3.6.2) formülünü kullanan yöntemin ihtiyaç duyduğu çözüm süreleri Tablo 4.16’da verilmektedir. İlk iki sütun her iki formülle elde edilen tam ve indirgenmiş çözümler arasındaki hataları, son ikisi ise ön görüntülerin oluşturulması için gereken işlem sürelerini göstermektedir. (3.6.1) formülüyle iterasyonlu (2 iterasyon) çözülen doğrusal olmayan denklemin çözümleriyle, (3.6.2) formülüyle iterasyon olmadan çözülen denklemin çözümleri ile elde edilen hataların neredeyse aynı olduğu görülebilir, bu da iterasyon olmadan elde edilen çözümlerin hassasiyet açısından kabul edilebilir olduğunu göstermektedir. ÇTBA yönteminin, iterasyonsuz ihtiyaç duyduğu çözüm süresinin, iterasyonlu ihtiyaç duyduğu çözüm süresinden çok daha az olduğu, yani yöntemin oldukça hızlı olduğu son iki sütunda görülmektedir.

Tablo 4.16 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar ve çözüm süreleri

k	Mutlak Bağıl Hata		İşlem Süresi	
	İterasyonlu (formül 3.6.1)	İterasyonsuz (formül 3.6.2)	İterasyonlu (formül 3.6.1)	İterasyonsuz (formül 3.6.2)
1	5.35e-03	8.17e-03	5.0550	1.2950
2	4.02e-03	4.07e-03	5.0380	1.4770
3	7.46e-03	8.13e-03	7.7830	0.6760
4	3.92e-03	4.01e-03	7.8140	0.3490
5	7.78e-03	8.06e-03	8.9820	0.2440
6	3.55e-03	3.94e-03	8.1190	0.2670

4.3.2. İki boyutlu FHN denklemi

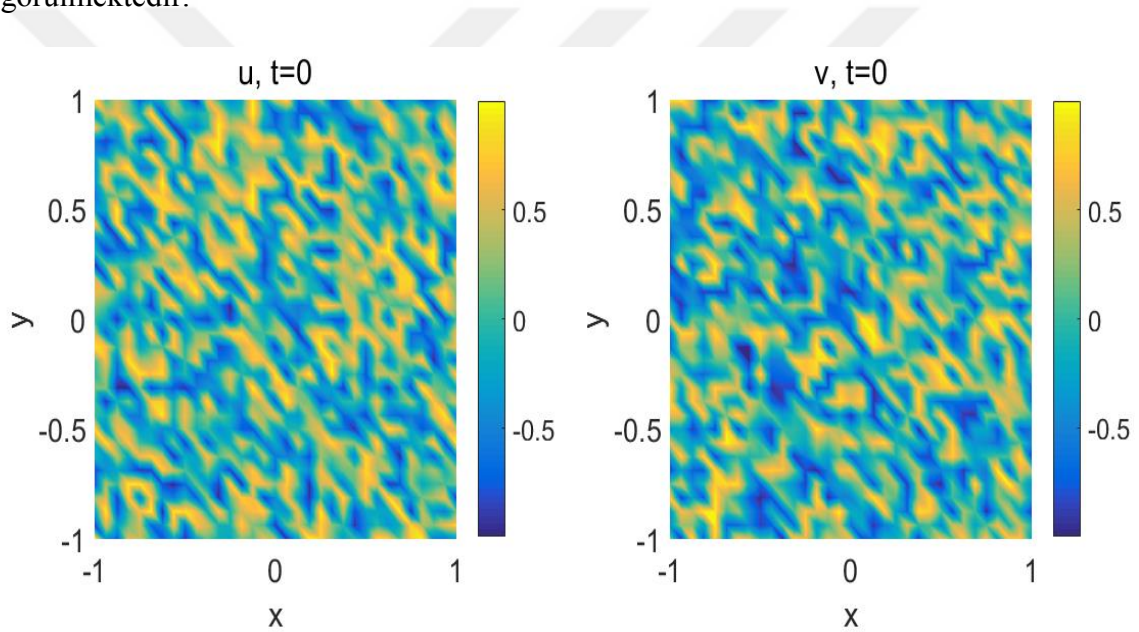
İki boyutlu (2.1.3.1) FHN denklemi, $(x, y, t) \in [-1, 1] \times [-1, 1] \times [0, 30]$ uzay-zaman alanında,

$$u^0(x, y) = 2\text{rand}() - 1, \quad v^0(x, y) = 2\text{rand}() - 1,$$

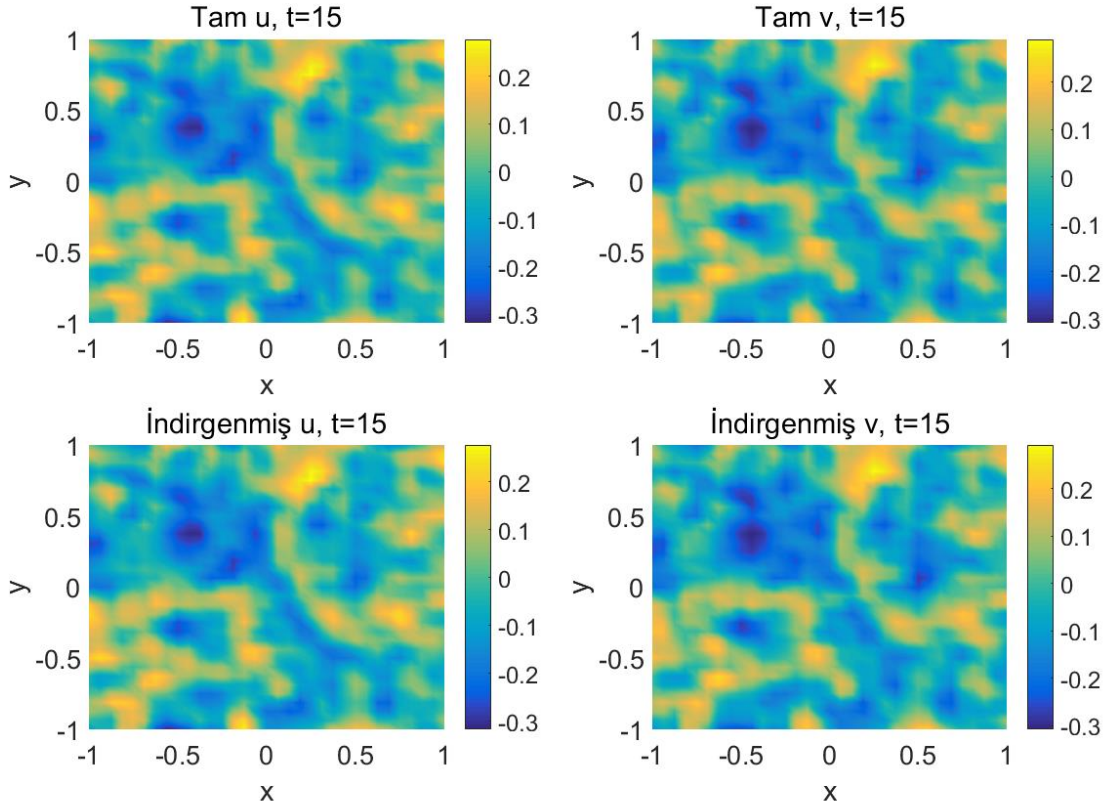
başlangıç koşulları, Şekil 4.26, ve $\tau_1 = \tau_2 = 1$, $\mu_1 = 0.00028$, $\mu_2 = 0.005$, $\gamma = 1$, $\varepsilon = 0$, $\beta = -1$ parametre değerleri için simule edilecektir. Ayırıklaştırma ölçüleri olarak $\Delta x = \Delta y = 0.0625$ ve $\Delta t = 0.05$ değerleri için uzay-zaman ayırıklaştırılması ile sistemin

anlık bilgilerinden alınan her t_k anındaki ayırık çözümlerden Y veri matrisi oluşturulmaktadır. Uzay ve zaman koordinatları için ayrıklaştırılmış veri matrisi, $\mathbf{w}^j = ((\mathbf{u}^j)^T, (\mathbf{v}^j)^T)^T \in \mathbb{R}^{2048}$ vektörleri için $Y = [\mathbf{w}^1 \dots \mathbf{w}^{600}] \in \mathbb{R}^{2048 \times 600}$ şeklinde yazılır.

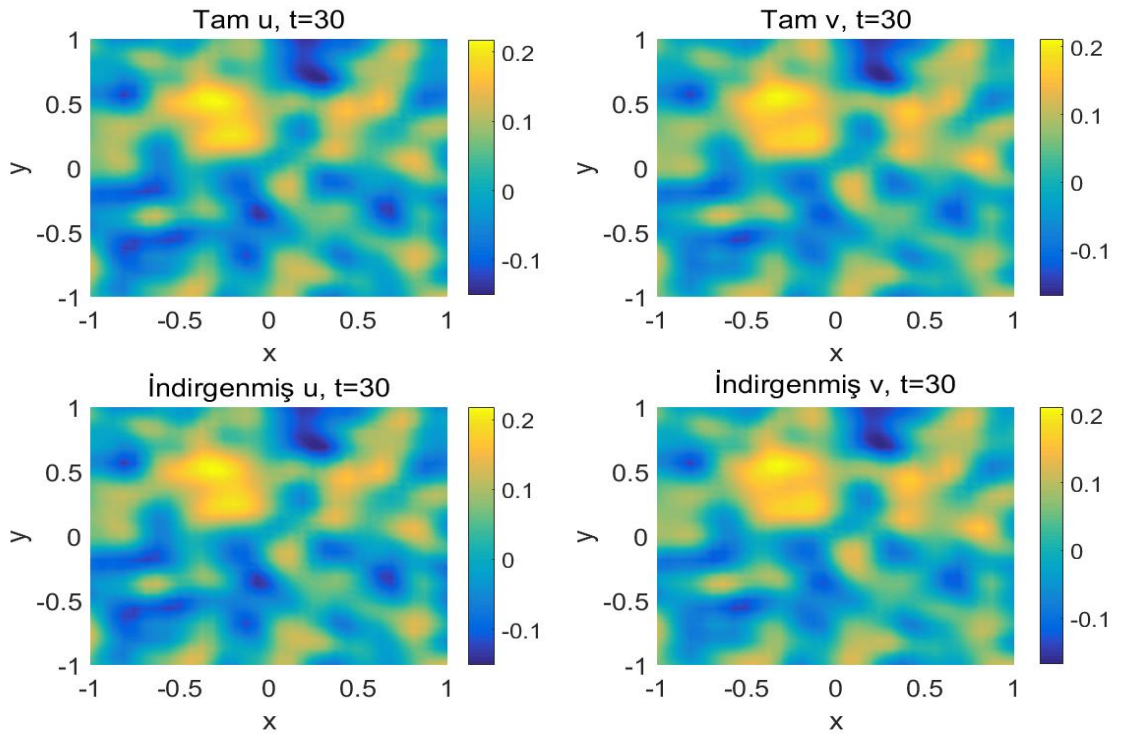
Rastgele başlangıç profili Şekil 4.26'da verilmiştir. Şekil 4.27'de, $t = 15$ zamanındaki tam çözümler ile birlikte indirgenmiş çözümlerden elde edilmiş desen profilleri gösterilmektedir. İndirgenmiş boyut $k = 2$ için, tam ve indirgenmiş desenlerin birbiriyle çakıştığı görülmektedir. Benzer şekilde $t = 30$ zamanındaki tam çözümler ile birlikte indirgenmiş çözümlerden elde edilmiş desen profilleri Şekil 4.28'de gösterilmektedir. İndirgenmiş boyut $k = 2$ için, yine tam ve indirgenmiş desenlerin birbiriyle çakıştığı görülmektedir.



Şekil 4.26 $t = 0$ zamanındaki başlangıç profilleri



Şekil 4.27 $k = 2$ için $t = 15$ zamanındaki tam ve indirgenmiş çözüm profilleri



Şekil 4.28 $k = 2$ için $t = 30$ zamanındaki tam ve indirgenmiş çözüm profilleri

Tablo 4.17’de, TBA ve ÇTBA yöntemleri hata ve hesaplama etkinliği açısından karşılaştırılmaktadır. Bu karşılaştırma için, $t = 2$ zamanındaki çözümlere karşılık gelen $\mathbf{w}^* = \mathbf{w}^{100}$ girdi uzayı çözüm vektörü kullanılmaktadır. Sonuçlar indirgenmiş boyutlar $k = 1, \dots, 6$ için sunulmaktadır. TBA ve ÇTBA kullanıldığında, yapılan işlemler sonucu tam çözüm $\mathbf{w}^*$ ile indirgenmiş yaklaşık çözüm $\hat{\mathbf{w}}^*$ arasındaki bağıl mutlak hatalar gösterilmektedir. Aynı sayıda baz kullanıldığında ÇTBA ile daha kesin sonuçlar elde edilmiştir.

Tablo 4.17 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar

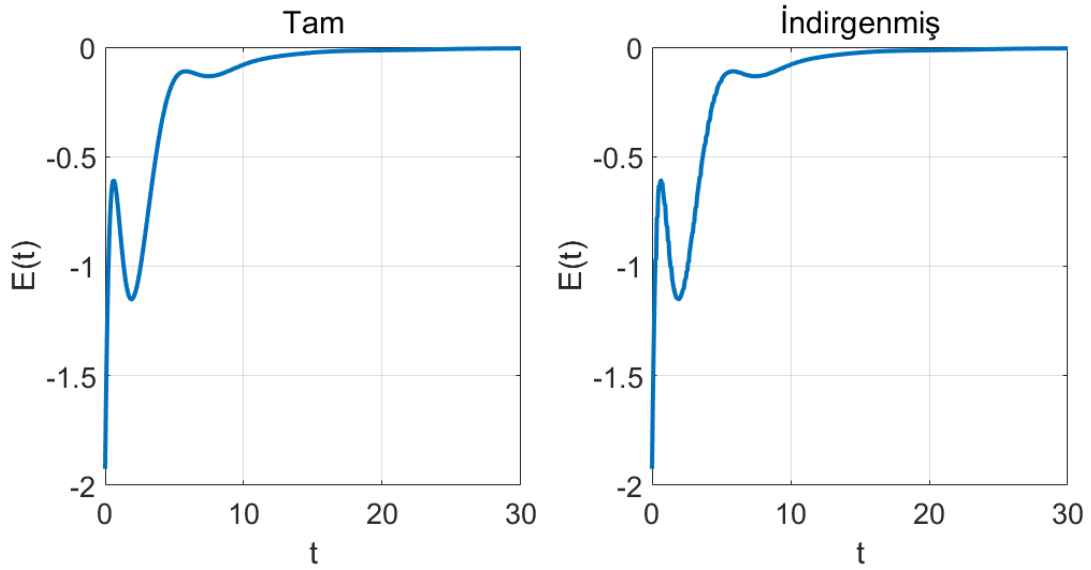
k	TBA	ÇTBA
1	1.00e+00	2.93e-02
2	4.95e-01	2.93e-02
3	3.91e-01	5.87e-02
4	3.71e-01	5.87e-02
5	2.22e-01	5.87e-02
6	2.29e-01	5.87e-02

Hesaplama etkinliği açısından, sabit nokta iterasyonu ile çözülen (3.6.1) formülünü kullanan ÇTBA yöntemi ile cebirsel bir denklem olan (3.6.2) formülünü kullanan yöntemin ihtiyaç duyduğu çözüm süreleri Tablo 4.18’de verilmektedir. İlk iki sütun her iki formülle elde edilen tam ve indirgenmiş çözümler arasındaki hataları, son ikisi ise ön görüntülerin oluşturulması için gereken işlem sürelerini göstermektedir. (3.6.1) formülüyle iterasyonlu (2 iterasyon) çözülen doğrusal olmayan denklemin çözümleriyle, (3.6.2) formülüyle iterasyon olmadan çözülen denklemin çözümleri ile elde edilen hataların neredeyse aynı olduğu görülebilir, bu da iterasyon olmadan elde edilen çözümlerin hassasiyet açısından kabul edilebilir olduğunu göstermektedir. ÇTBA yönteminin, iterasyonsuz ihtiyaç duyduğu çözüm süresinin, iterasyonlu ihtiyaç duyduğu çözüm süresinden oldukça daha az olduğu, yani yöntemin oldukça hızlı olduğu son iki sütunda görülmektedir.

Tablo 4.18 Farklı k değerleri için oluşan bağıl mutlak hatalar ve çözüm süreleri

k	Mutlak Bağıl Hata		İşlem Süresi	
	İterasyonlu (formül 3.6.1)	İterasyonsuz (formül 3.6.2)	İterasyonlu (formül 3.6.1)	İterasyonsuz (formül 3.6.2)
1	2.93e-02	2.93e-02	1.3520	0.5880
2	2.93e-02	1.47e-02	1.9060	0.2690
3	5.87e-02	2.93e-02	2.1780	0.2290
4	5.87e-02	1.47e-02	2.4030	0.2560
5	5.87e-02	2.93e-02	2.6060	0.2870
6	5.87e-02	1.51e-02	3.6770	0.2980

Şekil 4.29’da, başlangıç değerlerinden itibaren tam ve indirgenmiş enerji değişimleri gösterilmektedir. Bir boyutlu örnekte olduğu gibi, her iki grafikte de enerji değişimi aynı davranışı göstermekte olup beklendiği gibi monoton bir azalma veya korunma görülmemektedir.

**Şekil 4.29** $k = 2$ için tam/indirgenmiş çözümde enerji korunumu

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında Difüzyon-Reaksiyon KTD'nin mertebe indirgenmiş modellemesi incelenmiştir. Mertebe indirgenmiş modellemede TBA teknikleri baz alınarak formülasyonlar elde edilmiştir. Tezin konusu olan difüzyon-reaksiyon sistemlerinin çözümlerinin davranışları düşünüldüğünde, soliton dalga yapısı, desen yapısı vb. klasik TBA ile elde edilen yaklaşık çözümlerin veri setini temsil etmede, özellikle ele alınan denklem sistemlerinin fiziksel olarak çok önemli rol oynayan sistem enerji ölçülerinin, sürekli problemdeki enerji davranışlarını korumada zayıf kalması sebebi ile, TBA tekniklerini temel alan ama doğrusal olmayan varyantı olan ÇTBA mertebe indirgenmiş modelleme bu tez çalışmasının ana unsurunu oluşturmuştur.

Tezin Genel Bilgiler bölümünde Difüzyon-Reaksiyon KTD genel olarak ele alınıp, mertebe indirgenmiş modellemede gerekli olan veri setinin oluşturulmasında kullanılacak olan çözüm vektörlerinin elde edilmesi açıklanmıştır. Çözüm vektörleri için ele alınan denklem sistemleri konumsal uzayda merkezi fark türev formülleri, zaman boyutunda ise Kahan yöntemi ile ayrıklaştırılmış ve ayrık çözümler elde edilmiştir. Yine Genel Bilgiler bölümünde klasik TBA tekniğinin adımları hatırlatılıp elde edilen veri setine uygulanışı açıklanmıştır.

Tezin 3. Bölümü, bu tez çalışmasının literatüre katkısını sağlayacak ÇTBA yönteminin difüzyon-reaksiyon KTD'ye uygulanaşına ayrılmıştır. Klasik TBA'nın aksine ÇTBA, veri setindeki vektörleri girdi uzayından özellik uzayına doğrusal olmayan bir yapıyla eşleştirmektedir. Girdi uzayından özellik uzayına olan yönde TBA'da yapılanlara benzer işlemler yapılmaktadır. Ancak, özellik uzayında karşılık gelen veri vektörünün mertebesi indirgindikten sonra girdi uzayına geri dönüşü klasik TBA'da olduğu gibi açık değildir. Bu konuda literatürde bazı geri dönüş teknikleri ele alınmaktadır. Bu tez çalışmasında girdi uzayına geri dönüş için ÇBÖ tekniğinden yararlanılmıştır. ÇBÖ yöntemi iterasyon gerektiren bir yöntemdir. Mevcut iterasyonlu yöntem geliştirilerek iterasyon gerektirmeyen bir formülasyon oluşturulup iterasyon sebebi ile oluşan fazla zaman harcamadan tasarruf edilerek yöntemin etkinliği arttırılmıştır.

Tezin son bölümünde Hamilton, gradyan ve anti-gradyan difüzyon-reaksiyon KTD için ÇTBA uygulamaları bir ve iki konumsal boyutlu problemler için test edilmiştir. Hamilton sistemler için KdV denklemi ile NLS denklemi ele alınmış, yapılan simülasyonlar sonucunda Hamilton sistemlerde olması beklendiği gibi sistem enerjileri ile momentum

ve k t le  l   lerinin,  TBA ile elde edilen     mler i in de korundu u g sterilmi tir. Gradyan sistemler i in AC denklemi ile SH denklemi ele alınmı tır. Gradyan sistemlerde olması gerekti i gibi sistem enerjisinin bulunan indirgenmi  boyutlu yakla ımlar i in de azaldı ı g sterilmi tir. Son olarak anti-gradyan sistemlere  rnek olarak FHN denklemi i in sim lasyonlar yapılmı  ve tam boyutlu ayırık     mler ile olu an desenler ile sistem enerjisi davranı ının aynısı  TBA kullanılarak elde edilen sonu lar i in de elde edildi i g r lm  t r. T m sim lasyonlarda, klasik TBA ile kar ıla tırmalar yapılmı , aynı kesinlikte sonu lar elde edilmi  ve (zaman bakımından) daha etkin bir yol izlendi i sayısal olarak g sterilmi tir.

Gelecek  alı malarda, hen z a ık bir problem alanı olan ve  TBA tekniklerinde sorun olan girdi uzayına geri d n   yolları incelenmeye devam edilecektir. Farklı  ekirdek fonksiyonları ara tırılıp     mlerin kesinli i ve etkinli i arttırılmaya  alı ılacaktır.

KAYNAKLAR

- Aizerman, M. A., Braverman, E. M., & Rozonoer, L. I. (1964). Theoretical Foundations of the Potential Function Method in Pattern Recognition Learning. *Automation and Remote Control*, 25(6), 821-837.
- Afkham, B. M., & Hesthaven, J. S. (2019). Structure-Preserving Model-Reduction of Dissipative Hamiltonian Systems. *Journal of Scientific Computing*, 81, 3–21. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1705.00498>
- Albayrak, A. S. (2006). *Uygulamalı Çok Değişkenli İstatistik Teknikleri*, 1.Baskı, Ankara, Baran Ofset.
- Berkooz, G., Holmes, P., & Lumley, J. L. (1993). The Proper Orthogonal Decomposition In The Analysis Of Turbulent Flows. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 539-575.
- Bueso, D., Piles, M., & Camps-Valls, G. (2020). Nonlinear PCA for Spatio-Temporal Analysis of Earth Observation Data. *IEEE Transactions On Geoscience And Remote Sensing*, 58(8).
- Celledoni, E., McLachlan, R. I., Owren, B., & Quispel, G. R. W. (2012). Geometric properties of Kahan's method. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 46(2). <https://doi.org/10.1088/1751-8113/46/2/025201>
- Chen, C. N., & Choi, Y. (2014). Traveling pulse solutions to FitzHugh–Nagumo equations. *Calculus of Variations and Partial Differential Equations*, 54, 1–45. <https://doi.org/10.1007/s00526-014-0776-z>
- Diez, P., Muixi, A., Zlotnik, S., & Gonzalez, A. G. (2021). Nonlinear dimensionality reduction for parametric problems: A kernel proper orthogonal decomposition. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. <https://doi.org/10.1002/nme.6831>
- Ei, S. I., Kuwamura, M., & Morita, Y. (2005). A variational approach to singular perturbation problems in reaction-diffusion systems. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 207, 171-219.
- Gonzalez, A. G., Huerta, A., Zlotnik, S., & Diez, P. (2021). A kernel Principal Component Analysis (kPCA) digest with a new backward mapping (pre-image reconstruction) strategy. *Universitat Politècnica de Catalunya–Barcelona*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2001.01958>
- Hoffmann, H. (2007). Kernel PCA for Novelty Detection. *Pattern Recognition*, 40, 863-874. <https://doi.org/10.1016/j.patcog.2006.07.009>

- Jackson, B. B. (1983). *Multivariate Data Analysis An Introduction*. Richard, D. Irwin, Inc.
- Jackson, E. (1991). *A User Guide to Principle Component*. John Wily & Sons Inc. Wiley Series in Probability and Statistics, 43. <https://doi.org/10.1002/0471725331>
- Johnson, R. A., & Wichern, D. W. (2007). *Applied multivariate statistical analysis*. New Jersey: Prentice-Hall.
- Kahan, W. W., & Li, R. C. (1997). Unconventional schemes for a class of ordinary differential equations—with applications to the Korteweg–de Vries equation. *Journal of Computational Physics*, 134(2), 316–331.
- Karasözen B., & Uzunca, M. (2018). Energy preserving model order reduction of the nonlinear Schrödinger equation. *Advances in Computational Mathematics*, 44, 1769–1796. <https://doi.org/10.1007/s10444-018-9593-9>
- Karasözen B., Uzunca, M., Sariaydın-Filibelioglu, A., & Yücel, H. (2018). Energy Stable Discontinuous Galerkin Finite Element Method for the Allen–Cahn Equation. *International Journal of Computational Methods*, 15(3). <https://doi.org/10.1142/S0219876218500135>
- Karasözen, B., Akkoyunlu, C., & Uzunca, M. (2014). Model Order Reduction for Nonlinear Schrödinger Equation. *Applied Mathematics and Computation*, 258, 509-519. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2015.02.001>
- Kuwamura, M., & Yanagida, E. (2003). The Eckhaus and zigzag instability criteria in gradient/skew-gradient dissipative systems. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 185-195. [https://doi.org/10.1016/S0167-2789\(02\)00735-2](https://doi.org/10.1016/S0167-2789(02)00735-2)
- Kuwamura, M. (2007). The Hamiltonian formalism in reaction-diffusion systems. *Advanced Studies in Pure Mathematics*, 47(2), 635-646.
- Mika, S., Schölkopf, B., Smola, A., Müller, K. R., Scholz, M., & Ratsch, G. (1999). Kernel PCA and De-Noising in Feature Spaces. *In Proceedings of the 1998 Conference on Advances In Advances in Neural Information Processing Systems II*, 536-542.
- Mori, H., & Kuromoto, Y. (1998). *Disssipative Structures and Chaos*. Springer Verlag, Opening The Maslov Box For Traveling Waves In Skew-Gradient Systems.
- Özdamar, K. (2004). *Paket Programlar ile İstatistiksel Veri Analizi-2*. Çok Değişkenli Analizler, 5.Baskı, Eskişehir, Kaan Kitabevi.
- Rathi, Y., Dambreville, S., & Tannenbaum, A. (2006). Statistical Shape Analysis using Kernel PCA. *School of Electrical and Computer Engineering Georgia Institute of Technology, Atlanta, Georgia 30332-0250*.

- Salvador, M., Dedè, L., & Manzoni, A. (2021). Non intrusive reduced order modeling of parametrized PDEs by kernel POD and neural networks. *MOX -Dipartimento di Matematica*, 104, 1-13. <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2021.11.001>
- Schölkopf, B., Smola, A., & Müller, K. R. (1998). Nonlinear Component Analysis as a Kernel Eigenvalue Problem. *Massachusetts Institute of Technology Neural Computation* 10, 1299-1319.
- Schölkopf, B., Smola, A., & Müller, K. R. (1999). Kernel principal component analysis. *MIT Press, In Advances in Kernel Methods Support Vector Learning*, 327-352.
- Sharma, S. (1995). *Applied Multivariate Techniques*, New York, John & Wiley Sons Inc, 59-64.
- Tapramaz, R. (2002). *Sayısal Çözümleme*. İstanbul: Literatür Yayınları.
- Uzunca, M., Karasözen, B., & Yıldız, S. (2021). Structure-preserving reduced-order modeling of Korteweg–de Vries equation. *Mathematics and Computers in Simulation* 188, 193–211. <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2021.03.042>
- Volkwein, S. (2008). Model Reduction Using Proper Orthogonal Decomposition. *Skript Universität Konstanz*.
- Yanagida, E. (2002). Mini-maximizers for reaction-diffusion systems with skewgradient structure. *J. Differential Equations*, 311-335. <https://doi.org/10.1006/jdeq.2001.4028>
- Zhou, Z., Du, N., Xu, J., Li, Z., Wang, P., & Zhang, J. (2019). Randomized kernel principal component analysis for modeling and monitoring of nonlinear industrial processes with massive data. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 58(24), 10410-10417. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.9b00300>

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Yusuf ÇAKIR

Yabancı Dili : İngilizce

Eğitim Durumu

Lise : Samsun Milli Piyango Anadolu Lisesi, 2004

Lisans : Ondokuz Mayıs Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi
Matematik Bölümü, 2011

Yüksek Lisans : Sinop Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik
Anabilim Dalı, 2015

Doktora : Sinop Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Matematik
Anabilim Dalı, 2024

Mesleki Deneyim

İş Yeri : Sinop Üniversitesi, 2019

Yayın Listesi : Çakır, Y., & Uzunca, M. (2024). Nonlinear Reduced Order
Modelling for Korteweg-de Vries Equation. *International
Journal of Informatics and Applied Mathematics*, 7(1), 57-72.
<https://doi.org/10.53508/ijiam.1455321>