Metody numeryczne II

Równania całkowe

Janusz Szwabiński

szwabin@ift.uni.wroc.pl

Równania całkowe

1. Równania Fredholma drugiego rodzaju
   - metoda Nystroma
   - równania jednorodne
2. Równania Volterry
3. Równania całkowe z jądrami osobliwymi
   - kilka porad praktycznych
   - kwadratury z dowolnymi wagami
4. Wstęp do zagadnień odwrotnych

Metoda Nystroma

Stosując kwadraturę

$$\int_a^b \mathrm{d}y \phi(y) = \sum_{j=1}^{N} w_j \phi(y_j)$$

do równania

$$f(x) = g(x) + \lambda \int_a^b K(x,y) f(y) \mathrm{d}y$$

otrzymujemy

$$f(x) = \lambda \sum_{j=1}^{N} w_j K(x, y_j) f(y_j) + g(x)$$

Dla węzłów kwadratury mamy

$$f(x_i) = \lambda \sum_{j=1}^{N} w_j K(x_i, y_j) f(y_j) + g(x_i)$$

Niech

$$\begin{aligned} f_i &= f(x_i) \\ g_i &= g(x_i) \\ K_{ij} &= K(x_i, y_j) \end{aligned}$$

oraz

$$\tilde{K}_{ij} = K_{ij} w_j$$

Wówczas

$$(\mathbf{I} - \lambda\tilde{\mathbf{K}})\vec{f} = \vec{g}$$

$\Rightarrow$ układ N równań liniowych dla N zmiennych

$\Rightarrow$ rozwiązanie wymaga $O(N^3)$ operacji

$\Rightarrow$ pożądane kwadratury z małą ilością węzłów

$\Rightarrow$ stosuj kwadratury Gaussa

Znamy wartości poszukiwanej funkcji w węzłach kwadratury

$\Rightarrow$ dla każdego innego punktu stosujemy metodę interpolacji

$$f(x) = \lambda \sum_{j=1}^{N} w_j K(x, y_j) f(y_j) + g(x)$$

Praktyczne szacowanie błędu:

- liczymy funkcję dla dwóch różnych N
- różnicę między rozwiązaniami traktujemy jako pesymistyczne oszacowanie błędu dla wyniku uzyskanego z większą liczbą węzłów

Jednorodne równania Fredholma drugiego rodzaju

$$\tilde{\mathbf{K}}\vec{f} = \sigma\vec{f}, \quad \sigma = \frac{1}{\lambda}$$

$\Rightarrow$ typowe zagadnienie własne

Zagadnienie wyjściowe ma jądro symetryczne

$\Rightarrow$ macierz $\mathbf{K}$ jest symetryczna

$\Rightarrow$ macierz $\tilde{\mathbf{K}}$ symetryczna raczej nie jest

$\Rightarrow$ symetrię należy przywrócić

Zakładamy, że wagi są dodatnie (spełnione dla kwadratur Gaussa) i wprowadzamy macierze

$$\mathbf{D} = \mathrm{diag}(w_j)$$

oraz

$$\mathbf{D}^{1/2} = \mathrm{diag}(\sqrt{w_j})$$

Wówczas

$$\mathbf{K}\mathbf{D}\vec{f} = \sigma\vec{f}$$

Mnożąc obustronnie przez $\mathbf{D}^{1/2}$, otrzymamy

$$\left(\mathbf{D}^{1/2}\mathbf{K}\mathbf{D}^{1/2}\right)\vec{h} = \sigma\vec{h}, \quad \vec{h} = \mathbf{D}^{1/2}\vec{f}$$

$K(x,y)$ całkowalne z kwadratem

⇒ rozwiązanie stanowi dobre przybliżenie najniższych N wartości własnych równania całkowego

$K(x,y)$ skończonego rzędu

⇒ skończona liczba wartości własnych

⇒ w rozwiązaniu numerycznym klastry liczb o wartościach odpowiadających dokładności maszynowej

⇒ dla odpowiednio dużych N liczba różnych od zera wartości własnych nie zwiększa się ze wzrostem N

⇒ równanie całkowe można zwykle rozwiązać analitycznie

Równania Volterry

$$f(x) = g(x) + \int_a^x \mathrm{d}y K(x,y) f(y)$$

Wprowadźmy siatkę równoodległych węzłów

$$\begin{aligned} x_i &= a + ih, \quad i = 0, 1, \ldots, N \\ h &= \frac{b-a}{N} \end{aligned}$$

Najprostszy sposób - złożony wzór trapezów:

$$\int_a^{x_i} \mathrm{d}y K(x_i,y) f(y) = h\left(\frac{1}{2}K_{i0} + \sum_{j=1}^{i-1} K_{ij} f_j + \frac{1}{2}K_{ii} f_i\right)$$

Stąd

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{1}{2}hK_{ii}\right) f_i &= h\left(\frac{1}{2}K_{i0} f_0 + \sum_{j=1}^{i-1} K_{ij} f_j\right) + g_i \\ f_0 &= g_0, \quad i = 1, \ldots, N \end{aligned}$$

Równanie Volterry pierwszego rodzaju

$$-\frac{1}{2}hK_{ii} f_i = h\left(\frac{1}{2}K_{i0} f_0 + \sum_{j=1}^{i-1} K_{ij} f_j\right) - g_i$$

⇒ $O(N^2)$ operacji

⇒ tutaj nie musimy rozwiązywać układu równań liniowych

Równania nieliniowe:

$$K_{ii} f_i \quad \rightarrow \quad K_{ii}(f_i)$$

Jeśli krok na siatce nie jest duży

$\Rightarrow$ metoda Newtona startująca z punktu f_{i-1}

Kwadratury wyższych rzędów:

1. potrzebujemy specjalnej metody, aby wystartować
2. stabilna kwadratura może prowadzić do niestabilności

Równania całkowe z osobliwymi jądrami

- osobliwości całkowalne można usunąć poprzez zamianę zmiennych, np.:

$$K(x,y) \stackrel{y \to 0}{\sim} y^{-1/2} \longrightarrow z = y^{1/2}$$

- jeśli jądro może być przedstawione w postaci

$$K(x,y) = w(y)\bar{K}(x,y)$$

gdzie $w(y)$ zawiera osobliwość, a $\bar{K}(x,y)$ jest gładkie, to kwadratura Gaussa z $w(y)$ jako funkcją wagową powinna dać dobre wyniki

- przy nieskończonym obszarze całkowania, jeśli jądro szybko dąży do zera, stosujemy kwadraturę Gaussa–Laguerre'a,

$$w(y) \sim \exp(-\alpha y)$$

lub Gaussa–Hermite'a,

$$w(y) \sim \exp(-y^2)$$

Jeśli jądro posiada „długi ogon”, wówczas

$$y = \frac{2\alpha}{z+1} + \alpha$$

i możemy zastosować kwadraturę Gaussa–Legendre'a

- jeśli jądro $K(x,y)$ jest osobliwe wzdłuż przekątnej $x=y$, osobliwość tą odejmujemy:

$$\begin{aligned}\int_a^b K(x,y)f(y)\mathrm{d}y &= \int_a^b K(x,y)[f(y)-f(x)]\mathrm{d}y + \int_a^b K(x,y)f(x)\mathrm{d}y \\ &= \int_a^b K(x,y)[f(y)-f(x)]\mathrm{d}y + r(x)f(x)\end{aligned}$$

$$r(x) = \int_a^b \mathrm{d}y K(x,y)$$

Wówczas

$$f_i = \lambda \sum_{j=1, j\neq i}^{N} w_j K_{ij}[f_j - f_i] + \lambda r_i f_i + g_i$$

Kwadratury z dowolnymi wagami

Chcemy znaleźć n–punktową kwadraturę, która przybliża całkę z iloczynu

$$w(x)f(x)$$

sumą iloczynów

$$w_i f_i$$

w n równoodległych punktach

$\Rightarrow$ możliwe do zrobienia analitycznie, o ile tylko momenty funkcji wagowych

$$W_n \equiv \frac{1}{h^n}\int_a^b x^n w(x)\mathrm{d}x$$

są znane

Przykład Kwadratura czteropunktowa w węzłach

$$x = kh, (k+1)h, (k+2)h, (k+3)h$$

Wiemy, że kwadratura musi być dokładna dla funkcji

$$f(x) = const,\ x,\ x^2,\ x^3$$

Stąd

$$\begin{aligned}W_0 = \int_{kh}^{(k+3)h} w(x)\mathrm{d}x &= \sum_{i=0}^{3} w([k+i]h) \\ W_1 = \frac{1}{h}\int_{kh}^{(k+3)h} w(x)x\mathrm{d}x &= \sum_{i=0}^{3} w([k+i]h)(k+i)h \\ W_2 = \frac{1}{h^2}\int_{kh}^{(k+3)h} w(x)x^2\mathrm{d}x &= \sum_{i=0}^{3} w([k+i]h)(k+i)^2h^2 \\ W_3 = \frac{1}{h^3}\int_{kh}^{(k+3)h} w(x)x^3\mathrm{d}x &= \sum_{i=0}^{3} w([k+i]h)(k+i)^3h^3\end{aligned}$$

czyli

$$\int_{kh}^{(k+3)h} w(x)f(x)\mathrm{d}x =$$

$$\frac{f(kh)}{6}\left[(k+1)(k+2)(k+3)W_0-(3k^2+12k+11)W_1+3(k+2)W_2-W_3\right]$$
$$+\frac{f([k+1]h)}{2}\left[-k(k+2)(k+3)W_0+(3k^2+10k+6)W_1-(3k+5)W_2+W_3\right]$$
$$+\frac{f([k+2]h)}{2}\left[k(k+1)(k+3)W_0-(3k^2+8k+3)W_1+(3k+4)W_2-W_3\right]$$
$$+\frac{f([k+3]h)}{6}\left[-k(k+1)(k+2)W_0+(3k^2+6k+2)W_1-(3k+1)W_2+W_3\right]$$

$\Rightarrow$ uogólnienie wzoru $3/8$ Simpsona

Rzeczywiście, kładąc $w(x) = 1$ otrzymamy

$$W_n = \frac{h}{n+1}\left[(k+3)^{n+1} - k^{n+1}\right]$$

oraz

$$\int_{kh}^{(k+3)h} f(x)\mathrm{d}x = \frac{3h}{8}f(kh) + \frac{9h}{8}f([k+1]h) + \frac{9h}{8}f([k+2]h) + \frac{3h}{8}f([k+3]h)$$

Wstęp do zagadnień odwrotnych

Rozważmy jednowymiarowe równanie dyfuzji

$$\frac{\partial}{\partial t}v(x,t) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}v(x,t), \quad 0 < x < \pi, \quad 0 < t < T$$

z warunkiem brzegowym

$$v(0,t) = v(\pi,t) = 0, \quad 0 \le t \le T$$

oraz warunkiem początkowym

$$v(x,0) = f(x)$$

Zagadnienie to ma rozwiązanie postaci

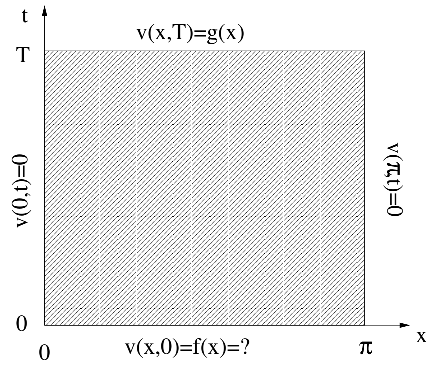
$$v(x,t) = \frac{2}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\left[e^{-nt^2}\sin(nx)\int_0^{\pi}\mathrm{d}y f(y)\sin(ny)\right]$$

Odpowiadający temu zagadnieniu problem odwrotny polegałby na rozwiązaniu równania dyfuzji wstecz w czasie, tzn. zadane byłoby rozwiązanie w chwili $t = T$,

$$v(x,T) = g(x)$$

i na jego podstawie mielibyśmy wyznaczyć rozwiązanie w chwili początkowej

$$v(x,0) = f(x)$$



Z rozwiązania zagadnienia dyfuzji wynika

$$\int_0^\pi \mathrm{d}y K(x,y) f(y) = g(x), \;\; 0 \le x \le \pi$$

przy czym

$$K(x,y) = \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \left[e^{-n^2 T} \sin(nx) \sin(ny) \right], \;\; 0 \le x, y \le \pi$$

$\Rightarrow$ zagadnienie odwrotne do zagadnienia dyfuzji zadane jest równaniem całkowym Fredholma pierwszego rodzaju

Niech

$$0 < \delta \ll 1$$

Rozważmy składową rozwiązania zagadnienia dyfuzji z n takim, że

$$n^2 T \ge \frac{2}{\delta}$$

Ponadto, niech

$$g^\delta(x) = g(x) + e^{-n^2 T/2} \sin(nx)$$

oraz

$$f^\delta(x) = f(x) + e^{n^2 T/2} \sin(nx)$$

Rozwiązanie zagadnienia dyfuzji z funkcjami zaburzonymi ma postać

$$v^\delta(x,t) = v(x,t) + e^{n^2(T/2-t)} \sin(nx), \;\; 0 \le x \le \pi, \;\; 0 \le t \le T$$

Ponieważ

$$v^\delta(x,T) = g^\delta(x), \;\; v^\delta(x,0) = f^\delta(x)$$

więc

$$\begin{aligned} |g^\delta(x) - g(x)| &= e^{-n^2 T/2} |\sin(nx)| \le e^{-1/\delta} \ll 1 \\ |f^\delta(x) - f(x)| &= e^{n^2 T/2} |\sin(nx)| \ge e^{1/\delta} |\sin(nx)| \end{aligned}$$

⇒ zaburzenie zagadnienia odwrotnego (tzn. $g(x)$) powoduje powstanie zaburzenia w rozwiązaniu, które jest ograniczone od dołu szybko oscylującą funkcją o bardzo dużej amplitudzie $e^{1/\delta}$

⇒ złe uwarunkowanie równania Fredholma pierwszego rodzaju

ciąg dalszy nastąpi…