ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ МНОГОМЕРНЫХ ИНТЕГРАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ С ЯДРАМИ, ЗАВИСЯЩИМИ ОТ РАЗНОСТИ АРГУМЕНТОВ

Самохин А.Б.

Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (ТУ)

Рассматриваются многомерные интегральные уравнения с ядрами, зависящими от разности аргументов. Обсуждаются численные методы, которые позволяют эффективно решать системы линейных алгебраических уравнений очень большой размерности, возникающие в результате дискретизации интегральных уравнений

Введение

В настоящее время интегральные уравнения играют все большую роль не только при исследовании волновых задач математической физики (существование, единственность, и т.д.), но и при их численном решении. При этом потребности практики диктуют необходимость в решении многомерных интегральных уравнений. В этой связи можно отметить работы отечественных ученых [1]-[3].

В данной работе, в которой используется ряд результатов изложенных в [4] - [5], будем рассматривать многомерные интегральные уравнения следующего вида

$$a(x)u(x) + \int_Q \frac{K(x-y)}{r^m} u(y)\,dy = f(x) \qquad (1)$$

Здесь $u(x)$, $f(x)$ это l–мерные вектора; $a(x)$ и $K(x)$ – $l\times l$ матрицы; $r = |x-y|$ - расстояние между точками x и y n–мерного эвклидова пространства E_n с декартовыми координатами $x=(x_1,...,x_n)$, $y=(y_1,...,y_n)$; $Q-n$-мерная конечная область E_n. Многие важные классы задач математической физики описываются уравнениями вида (1), например задачи электромагнитного и акустического рассеяния на прозрачных телах. При этом интегральный оператор для акустических задач является скалярным и компактным, а для трехмерных электромагнитных задач – матричным и сингулярным. В дальнейшем будем полагать, что уравнение (1) имеет единственное решение в некотором функциональном гильбертовом пространстве, а интегральный оператор в (1) может быть как компактным и тогда $m<n$, так и сингулярным и тогда $m=n$.

Для численного решения интегральное уравнение (1) должно быть сведено к системе линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), при этом получившаяся система должна аппроксимировать решение исходной задачи с заданной точностью. Пусть h – характерный линейный размер, на котором решение u мало меняется по сравнению с заданной точностью. Как правило, *apriory* известны значения h, в зависимости от требуемой точности решения. Тогда размерность СЛАУ оценивается формулой

$$N \approx l(mesQ/h^n) \qquad (2)$$

Во многих случаях, особенно для трехмерных векторных задач, размерность СЛАУ очень велика, N >>1000. Ясно, что в этих случаях использование прямых методов практически невозможно, поскольку необходимо выполнить $T \approx N^3$ арифметических операций, а также хранить в памяти компьютера матрицу СЛАУ, состоящую из N^2 чисел.

Ниже будем рассматривать численное решение интегрального уравнения (1), которое сводится к СЛАУ очень большой размерности. Ясно, что в этих случаях мы можем использовать только итерационные методы. Главными критериями эффективности любого численного алгоритма являются: число арифметических операций T, которое требуется

выполнить для получения решения исходной задачи с заданной точностью; объем требуемой памяти M для реализации алгоритма. Умножение матрицы СЛАУ на вектор является наиболее трудоемкой операцией в итерационных методах. Поэтому количество таких умножений в процессе реализации алгоритма будем называть числом итераций. Тогда величину T можно оценить формулой

$$T \approx L(T_A + T_0) \tag{3}$$

Здесь L – число итераций; T_A – число арифметических операций, которое необходимо для умножения матрицы на вектор, а T_0 – число арифметических операций для других вычислений. Как правило, $T_0 << T_A$. Наша цель состоит в минимизации величин T_A, L и M.

1. Дискретизация интегральных уравнений

Сначала рассмотрим методы дискретизации интегрального уравнения (1), т.е. процедуру его сведения к СЛАУ. Ясно, что в случае матрицы произвольного вида имеем $T_A = N^2$. Ниже, рассмотрим такие способы, которые позволяют построить эффективные алгоритмы умножения матрицы на вектор с числом арифметических операций $T_A << N^2$.

Обратим внимание на то, что ядро интегрального оператора зависит только от разности декартовых координат точек x и y. Поэтому при дискретизации целесообразно учитывать это обстоятельство с целью получения матрицы СЛАУ, которая будет обладать соответствующими свойствами симметрии. Для этого в прямоугольной декартовой системе координат введем конечное множество точек - сетку так, чтобы область Q целиком находилась в прямоугольном параллелепипеде П со сторонами $M_i h_i$, $i = \overline{1,n}$, где h_i - шаги сетки по декартовым координатам. При этом параллелепипед П разбивается данной сеткой на ячейки (элементарные параллелепипеды) П(р), $p = (p_1,..., p_n)$, $p_i = \overline{0, M_i - 1}$. Область Q будем задавать в виде объединения M ячеек, причем очевидно, что $M \le \prod_{i=1}^{n} M_i$. Для дискретизации интегрального уравнения можно использовать метод моментов, например метод Галеркина, или метод коллокации. Если в методе моментов использовать одинаковые базисные функции в пределах каждой ячейки, а в методе коллокации узловые точки брать в центре ячеек, то матрица СЛАУ в обоих случаях будет обладать близкими свойствами симметрии. Рассмотрим метод коллокации, который является более наглядным. Узловые точки, в которых будем рассматривать значения функций, зададим формулами

$$x_i(p) = p_i h_i + \frac{h_i}{2}, \quad i = \overline{1,n} \tag{4}$$

Тогда интегральное уравнение (2) аппроксимируется СЛАУ размерности $N=eM$ относительно значений функции u в узловых точках области Q

$$\sum_{x(q)\in Q} A(p-q)u(q) = f(p), \quad x(p) \in Q \tag{5}$$

Если интегральное уравнение (1) является векторным уравнением, то u и f будут l-мерными векторами в каждой узловой точке, а $A(p)$ – матрицей $l \times l$. Отметим, что в (5) используется многоиндексная нумерация для неизвестных и правой части, что позволяет в ясной и наглядной форме представить свойства симметрии матрицы СЛАУ. Очевидно, что количество различных элементов матрицы $\sim N$, что позволяет существенно сократить требуемый объем памяти при реализации алгоритмов решения. Отметим важное

обстоятельство. Поскольку узловые точки (4) находятся в центре ячеек, точность аппроксимации интегрального оператора $\sim h^2$, $h = (\sum_{i=1}^{n} h_i^2)^{1/2}$.

Из (5) ясно, что вычисление итераций связано с нахождением сумм вида

$$\omega(p) = \sum_{x(q)\in Q} A(p-q)v(q), \quad x(p) \in Q \tag{6}$$

Доопределим величины *v(q)* нулем в узловых точках П, не принадлежащих *Q*. Тогда (6) можно записать

$$\omega(p_1,...,p_n) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{q_i=0}^{M_i-1} A(p_1-q_1,...,p_n-q_n)v(q_1,...,q_n) \tag{7}$$

Здесь функция дискретного аргумента *A(p)* определена при значениях
$-(M_i-1) \le p_i \le (M_i-1), \quad i=\overline{1,n}$

С целью уменьшения количества арифметических операций при вычислении (7) применим прямое и обратное дискретное преобразование Фурье [6]. Можно показать, что тогда общее количество арифметических операций, требуемое для нахождения $\omega(p),\ p \in \Pi$, а значит для вычисления одной итерации при решении СЛАУ, оценивается формулой

$$T_A \sim l^2 (\prod_{i=1}^{n} M_i)(\sum_{i=1}^{n} 2^{i-1} M^{(i)}) \tag{8}$$

Здесь $M^{(1)},...,M^{(n)}$ - расположенные в порядке убывания числа $M_1,...,M_n$. Если $M_i,\ i=\overline{1,n}$ являются степенями двойки, то можно воспользоваться алгоритмами быстрого преобразования Фурье. Тогда

$$T_A \sim l^2 (\prod_{i=1}^{n} M_i)(\sum_{i=1}^{n} 2^{i-1} \log_2 M^{(i)}) \tag{9}$$

Из (8), (9) следуют грубые оценки для T_A. В первом случае $T_A \sim NN^{\frac{1}{n}}$, а во втором случае $T_A \sim N \log_2 N$, где *N* - размерность СЛАУ. При больших *N* эти величины значительно меньше N^2 - числа операций, которое требуется при вычислении итераций для матриц общего вида.

Выше предполагалось, что область *Q* может быть представлена в виде объединения ячеек прямоугольной сетки. Подобное представление действительно описывает многие важные классы задач. Однако, если поверхность *S* является, например криволинейной, то область *Q* не может быть представлена описанным выше способом. На первый взгляд здесь нет особых проблем, поскольку любая область с какой угодно точностью представляется в виде совокупности достаточно малых ячеек. Рассмотрим более подробно этот вопрос.

Точность решения интегрального уравнения зависит как от "локальной" аппроксимации, определяемой значением шага сетки *h*, так и от "геометрической" аппроксимации, которая заключается в том, что область *Q* описывается совокупностью ячеек с требуемой точностью. Определим характеристики "геометрической" аппроксимации. Пусть область *Q* аппроксимирует объединение Q_M из *M* ячеек. Введем параметр

$$\gamma(M) = mes\{(Q \cup Q_M) \setminus (Q \cap Q_M)\} / mesQ \tag{10}$$

Тогда требование "геометрической" аппроксимации заключается в выполнении следующего условия: ошибка представления области Q в виде области Q_M должна быть мала, т.е.

$$\gamma(M)\, mes\, Q \le Ch^n. \tag{11}$$

Здесь $C=const$, $C\ge 1$ определяется требуемой точностью решения конкретной задачи.

Численные исследования показали, что для криволинейных поверхностей S удовлетворительная "геометрическая" аппроксимация области Q с помощью введенной регулярной сетки для многих задач возможна только для очень больших, с точки зрения вычислительных ресурсов, значений M. Отметим, что в этих случаях $M_g >> M_l$, где M_l - число ячеек, обусловленное требованием "локальной" аппроксимации, а M_g - число ячеек, обусловленное требованием" геометрической" аппроксимации. Весьма интересен также следующий результат численных исследований. Величина $\gamma(M)$ немонотонно зависит от M, т.е. с увеличением M параметр $\gamma(M)$ может увеличиваться, хотя, конечно, в пределе, стремящемся к бесконечности, эта величина стремиться к нулю.

Для того, чтобы избежать вышеуказанных проблем откажемся от требования - все ячейки должны иметь одинаковую форму. Ячейки, которые находятся вблизи поверхности S, будем деформировать таким образом, чтобы они точно описывали приграничные участки области Q. При этом внутренние ячейки области по-прежнему будут иметь форму прямоугольных параллелепипедов. Тогда ошибка "геометрической" аппроксимации исчезает.

Далее можно поступать несколькими способами. Первый и наиболее простой заключается в том, что узловые точки области не изменяются и, по-прежнему, описываются формулой (4). Однако приграничные ячейки имеют неправильную форму и поэтому точность аппроксимации интегрального уравнения (1) будет пропорциональна h. Ясно, что для получения такой же точности аппроксимации интегрального оператора, как и в случае правильных ячеек, требуется значительное уменьшение шагов сетки, что, особенно в случае трехмерных задач, см. (2), приводит к существенному увеличению размерности СЛАУ.

Рассмотрим другой способ. Узловые точки в приграничных ячейках, т.е. в ячейках неправильной формы, будем задавать в их центрах

$$x_i(p) = (\int_{Q(p)} x_i\, dx)/(\int_{Q(p)} dx), \quad i=\overline{1,n} \tag{12}$$

Очевидно, что, когда ячейка имеет форму прямоугольного параллелепипеда, формулы совпадают с (4). Теперь, если для аппроксимации интегрального уравнения (1) использовать метод коллокации с узловыми точками (12), точность аппроксимации будет иметь второй порядок, т.е. $\sim h^2$.

После дискретизации интегрального уравнения (1) получим СЛАУ относительно значений функции u в узловых точках области Q

$$\sum_{x(q)\in Q} A(x(p)-x(q))u(q) = f(p),\ \ x(p)\in Q \tag{13}$$

Из (13) ясно, что вычисление итераций связано с нахождением сумм вида

$$\omega_1(p) = \sum_{x(q)\in Q} A(x(p)-x(q))v_1(q), \quad x(p)\in Q \tag{14}$$

Из (14) следует, что матрица СЛАУ потеряла свойства симметрии и поэтому нельзя непосредственно использовать вышеописанную технику быстрого умножения матрицы на вектор. Вместе с данной нерегулярной сеткой будем также рассматривать регулярную сетку (4) с целью установления связи между выражениями вида (14) и (6). Используя свойства гладкости ядра интегрального оператора (для задач электродинамики это функция Грина

свободного пространства), можно построить способ преобразования значений $v_1(q)$ определяемых в узлах нерегулярной сетки в значения $v(q)$, определяемых в узлах регулярной сетки. Далее, применяя алгоритмы дискретного преобразования Фурье, с помощью выражения (6) вычисляются значения $\omega(p)$, которые определены в узлах регулярной сетки. Затем, снова используя свойства гладкости ядра интегрального оператора, определяются значения $\omega_1(p)$ на нерегулярной сетке. Следует отметить, что для вычисления $\omega_1(p)$ можно достигнуть практически любой порядок точности по h, хотя достаточно иметь второй порядок, как и при аппроксимации интегрального оператора. Необходимо сделать важное замечание: количество арифметических операций требуемых для осуществления процедуры преобразования между двумя сетками пропорционально размерности СЛАУ. Значит, общее количество арифметических операций, требуемых для вычисления одной итерации, оценивается, как и в случае регулярной сетки, формулами (8) и (9). Естественно, коэффициент пропорциональности в этих формулах будет больше, чем при использовании только регулярной сетки, и зависит от конкретной реализации данного алгоритма.

Таким образом, предложенный способ максимально учитывает свойства интегрального оператора (1) (ядра зависят только от разности аргументов) и, как показывают численные исследования, оказывается весьма эффективным для решения уравнения (1) с криволинейной поверхностью S. Данный метод можно также применять для быстрого умножения матрицы на вектор, когда интегральное уравнение (1) дискретизируется с помощью метода Галеркина с базисными функциями Nedelec (например на конформной тетраэдальной сетке) Однако в этом случае соответствующие вычислительные формулы становятся значительно более запутанными, хотя основная схема остается той же.

2. Итерационные методы

Следующая важная проблема численного решения многомерных интегральных уравнений (1) – минимизация числа итераций L, требуемого для получения заданной точности, см. (3). Поскольку размерность рассматриваемых СЛАУ огромная, необходимо использовать такие итерационные методы, сходимость которых зависит только от физических характеристик задачи и не зависит (точнее очень слабо зависит) от способа дискретизации интегрального уравнения. Другими словами, при уменьшении шага сетки, например для повышения точности аппроксимации интегрального оператора, сходимость итераций не должна изменяться. К таким итерационным методам относятся: GMRES (многошаговый метод минимальных невязок) и его модификации; QMR (метод квази-минимальных невязок) и его модификации; метод простой итерации и ряд других [4]-[5]. Сходимость этих итерационных процедур зависит от спектра оператора и, поскольку он мало меняется от способа дискретизации, удовлетворяет указанному выше критерию.

Выбор конкретного итерационного алгоритма существенно зависит от конкретного класса задач. Например, для задач квазистатического электромагнитного рассеяния на неоднородном диэлектрическом теле можно практически точно указать спектр оператора на комплексной плоскости и поэтому может быть явно найден оптимальный итерационный параметр для метода простой итерации. Действительно, как показывают численные исследования, этот метод оказывается весьма эффективным для данного класса задач. Для задач рассеяния в резонансном и квазиоптическом диапазонах ситуация значительно более сложная. Один вывод можно сделать однозначно: при увеличении размеров объекта и/или его электрических характеристик сходимость итерационного процесса уменьшается. Многие практически важные классы задач указанного диапазона удается успешно решать с помощью итерационной процедуры GMRES. Тем не менее, во многих случаях (при больших значениях диэлектрической проницаемости или в квазиоптическом диапазоне) сходимость итераций оказывается чрезвычайно низкой. Увеличение размерности подпространства Крылова в GMRES - алгоритмах также зачастую не улучшает ситуации,

поскольку ведет к очень большим затратам памяти. Одним из возможных способов преодоления указанных проблем является использование предобуславливателей, которые, в принципе, могут значительно уменьшить требуемое число итераций L. Основная проблема заключается здесь в построении эффективных предобуславливателей.

Рассмотрим один метод построения подобного предобуславливателя. Пусть нам требуется решить СЛАУ, которая аппроксимирует интегральное уравнение на сетке с шагом h. Запишем соответствующее уравнение в символическом виде

$$A(h)=f(h) \tag{15}$$

Пусть мы умеем решать с некоторой точностью исходную задачу на "грубой" сетке с шагом $h_0<h$. Это вполне допустимое предположение. Например, h_0 в четыре раза меньше h. Тогда размерность матрицы $A(h_0)$ для трехмерных задач в 64 раза меньше размерности матрицы $A(h)$ и требуемый объем вычислений для нахождения $A^{-1}(h_0)$. может оказаться вполне допустимым. Умножим уравнение (15) на оператор $A^{-1}(h_0)$

$$A^{-1}(h_0)\,A(h)=A^{-1}(h_0)\,f(h) \tag{16}$$

Обозначим $G(h_0,h)=A^{-1}(h_0)\,A(h)$. Очевидно, что оператор $G(h,h)$ является единичным и его спектр состоит из одной точки. Поэтому понятно, что если в операторе $G(h_0,h)$ значение h_0 изменять от значения h до значения rh, где $r<1$, например 0.25, то спектр оператора относительно мало расплывется вокруг единичной точки. Значит можно предположить, что сходимость итерационных процедур для оператора $G(h_0,h)$ будет лучше, чем для оператора $A(h)$. Численные исследования показали правильность сделанного вывода. Поэтому оператор $A^{-1}(h_0)$ является предобуславливателем для уравнения (15) и для решения уравнения (16) требуется меньшее число итераций для получения заданной точности.

Заключение

В рассмотренной работе описаны основные проблемы, возникающие при численном решении многомерных интегральных уравнений. Из изложенного выше следует, что можно численно решать многомерные интегральные уравнения, в том числе в областях с криволинейными границами, которые сводятся к системам линейных алгебраических уравнений сверхбольшой размерности, N >>1000. Однако, по-прежнему, актуальными являются проблемы создания новых эффективных методов и алгоритмов (итерационные методы, алгоритмы дискретизации и т.д.), которые позволят расширить классы решаемых задач.

Литература

1. *Ильинский А.С., Кравцов В.В., Свешников А.Г.* Математические модели электродинамики. М.: Высшая школа, 1991.
2. *Ильинский А.С., Смирнов Ю.Г.* Дифракция электромагнитных волн на проводящих тонких экранах. М.: ИПРЖР, 1996.
3. *Дмитриев В.И., Захаров Е.В.* Интегральные уравнения в краевых задачах электродинамики. М.: Изд-во МГУ, 1987.
4. *Samokhin A.B.* Integral equations and iteration methods in electromagnetic scattering, Utrecht: VSP, The Netherlands, 2001.
5. *Самохин А.Б.* Интегральные уравнения и итерационные методы в электромагнитном рассеянии. М., Радио и связь, 1998.
6. *Воеводин В.В., Тыртышников Е.Е.* Вычислительные процессы с теплицевыми матрицами. М., Наука, 1987.