

Fredholm 积分方程的正则化 GMRES 算法

闵 涛, 赵苗苗, 谷明礼

(西安理工大学理学院, 西安 710054)

摘 要: 利用数值求积公式, 对二维第 1 类 Fredholm 积分方程进行离散处理, 引入正则化 GMRES 算法, 将离散后的积分方程转化为离散适定问题, 通过广义极小残余算法得到其数值解。数值模拟结果表明, 正则化 GMRES 算法求解二维第 1 类 Fredholm 积分方程计算速度快、精度高。

关键词: 数值求积; 正则化法; Fredholm 积分方程; 适定问题; GMRES 算法

Regularization GMRES Algorithm for Fredholm Integral Equation

MIN Tao, ZHAO Miao-miao, GU Ming-li

(School of Sciences, Xi'an University of Technology, Xi'an 710054, China)

【Abstract】 Using numerical integration formula, the two-dimensional Fredholm integral equation is discrete. By introducing the regularization method, the discretized integral equation is transformed into a posed problem of discrete and the numerical solution is obtained by Generalized Minimal Residual(GMRES) algorithm. In the numerical simulation, different methods are compared with regularization GMRES method. The results show that the regularization GMRES method have advantages for solving two-dimensional first kind Fredholm integral equation with high computing speed and high accuracy.

【Key words】 numerical integration; regularization method; Fredholm integral equation; posed problem; Generalized Minimal Residual(GMRES) algorithm

DOI: 10.3969/j.issn.1000-3428.2012.04.078

1 概述

第 1 类 Fredholm 积分方程在模式识别、信号(图像)处理、工业控制、地球物理勘探等方面有着广泛的应用。目前人们对第 1 类 Fredholm 积分方程求解的一维情况进行了较多研究, 并取得了一些成果。但是对于二维的求解一直没有得到较好的解决, 其原因是积分方程如何有效离散和离散后大型病态线性方程组如何求解这 2 个问题使得算法的时间复杂度与空间复杂度都比较大, 导致求解困难。

GMRES 算法由于所需计算量和内存量较少等方面的优势(GMRES 算法的时间复杂度与空间复杂度都为 $O(N^2)$, 其中, N 是线性方程组的阶数), 因此广泛应用于各类工程领域中。近年来, 正则化的 GMRES 法逐渐应用于各类问题。文献[1]提出了图像恢复的正则化混合 GMRES(m)算法, 文献[2]在这方面也有深入的研究。

为了充分利用 GMRES 算法在处理大规模线性方程组问题时的优势, 本文将其与正则化技术^[3]相结合, 应用于二维第 1 类 Fredholm 方程的求解。

2 方程的离散

二维第 1 类 Fredholm 积分方程^[4]可表示为:

$$T(f) = \int_a^b \int_c^d K(u, v, x, y) f(x, y) dx dy = g(u, v) \quad (1)$$

其中, $x, y \in \Omega_1 \subset \mathbf{R}^2$, $u, v \in \Omega_2 \subset \mathbf{R}^2$, 不妨取 $\Omega_1 = \Omega_2 = \Omega$, $\Omega \subset \mathbf{R}^2$ 是单连通有界区域, 其边界 $\partial\Omega$ 分段光滑。将积分区间 $\Omega = [a, b] \times [c, d]$ 分为 $m_1 \times n_1$ 等份, $\Omega_2 = [a, b] \times [c, d]$ 分为 $m_2 \times n_2$ 等份。用数值积分公式(本文用梯形公式, 也可以用

Simpson 或 Newton_cotes 公式)代替式(1)中的积分项, 得:

$$T(f)(u_p, v_q) = g(u_p, v_q) = \int_a^b \int_c^d K(u_p, v_q, x, y) f(x, y) dx dy \approx \sum_{j=1}^{n_1} \sum_{i=1}^{m_1} K(u_p, v_q, x_i, y_j) f(x_i, y_j) w_i w'_j$$

其中, $p = 1, 2, \dots, m_2$; $q = 1, 2, \dots, n_2$; w_i 、 w'_j 为积分系数; 函数 f 和 g 分别表示 $(m_1 \cdot n_1) \times 1$ 和 $(m_2 \cdot n_2) \times 1$ 的向量。在离散过程中, 离散点是按照横向从左到右进行, 分别由最下面的一行从左到右, 继而纵向从上向下接着第 2 行, 以此类推, 具体形式为:

$$K(u_p, v_q, x_1, y_1) f(x_1, y_1) w_1 w'_1 + K(u_p, v_q, x_2, y_1) f(x_2, y_1) w_2 w'_1 + \dots + K(u_p, v_q, x_{m_1}, y_1) f(x_{m_1}, y_1) w_{m_1} w'_1 + K(u_p, v_q, x_1, y_2) f(x_1, y_2) w_1 w'_2 + \dots + K(u_p, v_q, x_2, y_2) f(x_2, y_2) w_2 w'_2 + \dots + K(u_p, v_q, x_{m_1}, y_2) f(x_{m_1}, y_2) w_{m_1} w'_2 + \dots + K(u_p, v_q, x_{m_1}, y_{n_1}) f(x_{m_1}, y_{n_1}) w_{m_1} w'_{n_1} = g(u_p, v_q) \quad p = 1, 2, \dots, m_2, q = 1, 2, \dots, n_2$$

写成矩阵形式为:

$$Af = g \quad (2)$$

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(50979088)

作者简介: 闵涛(1963—), 男, 教授, 主研方向: 数值模拟, 科学与工程计算; 赵苗苗、谷明礼, 硕士研究生

收稿日期: 2011-07-13 **E-mail:** mintao2003@163.com

其中:

$$\begin{aligned}
A(m2 \cdot (q-1) + p, m1 \cdot (j-1) + i) &= K(u_p, v_q, x_i, y_j) w_i w_j' \\
f(m1 \cdot (j-1) + i) &= f(x_i, y_j) \\
g(m2 \cdot (q-1) + p) &= g(u_p, v_q) \\
i &= 1, 2, \dots, m1, j = 1, 2, \dots, n1, p = 1, 2, \dots, m2, q = 1, 2, \dots, n2 \quad (3)
\end{aligned}$$

3 正则化 GMRES 算法

在式(2)中, 设 A 是 n 阶方阵, $g, f \in \mathbf{R}^n$ 。对于给定的初始向量 f_0 , 令 $r_0 = g - Af_0$, 取 Krylov 子空间: $K_m = span\{r_0, Ar_0, \dots, A^{m-1}r_0\}$ 。GMRES 算法主要是解决每步迭代的一个最小二乘问题, 确切地说是第 n 步找精确解 $f_n \in K_n$ 的一个近似向量 $f^* = A^{-1}g$ (第 n 阶的 Krylov 空间), 使得残差:

$$\|r_n\|_2 = \|g - Af_n\|_2 \quad (4)$$

最小。将 $f_n = f_0 + z_n$ 作为式(2)的近似解。其中, f_n 的选取过程如下: 对于初始值 $f_0 \in \mathbf{R}^n$, 第 n 步是求:

$$\varphi(x) = \|u - Af\|_2 \quad (5)$$

在 n 维的超平面 $f_0 + K_n(A, r_0)$ 上的极小值点为 f_n , 并且 $r_0 = u - Af_0$, 则 $f_n = f_0 + z_n$ 可以作为式(2)的近似解。

一般而言, 由于第 1 类 Fredholm 积分方程的不适定性, 导致离散后的式(2)为一高度病态方程组, 直接求解误差很大, 因此首先利用正则化方法将式(2)转化为:

$$(A^T A + \alpha I)f = A^T g \quad (6)$$

简记为 $A_1 f = g_1$ ($A_1 = A^T A + \alpha I$, $g_1 = A^T g$), 其中, $\alpha > 0$ 为正则化参数。然后利用 GMRES 算法求解式(6)。

根据以上描述给出算法步骤如下:

步骤 1 初始化, 输入 A 和 g 与 M , 计算 A 的条件数 $cond(A)$, 如果 $cond(A) \geq M$ (可取 $M = 10^{10}$), 则转向步骤 2, 否则, $A_1 = A$, $g_1 = g$, 转向步骤 3。

步骤 2 正则化过程: 选取正则化参数 α (利用 L-曲线法或偏差原理选择), 正则化 $A_1 = A^T A + \alpha I$, $g_1 = A^T g$ 。

步骤 3 选择 $f_0 \in \mathbf{R}^n$, 还需要输入最大迭代次数 m 和误差精度 δ , 计算 $r_0 = g_1 - A_1 f_0$, $v_1 = r_0 / \|r_0\|$ 。

步骤 4 完成 Arnoldi 过程^[5]得到 $\{v_i\}_{i=1}^m$ 和 \bar{H}_m 。

(1)正交化

$$h_{ij} = v_i^T A v_j$$

$$\hat{v}_{j+1} = A v_j - \sum_{i=1}^j h_{ij} v_i, i = 1, 2, \dots, j, j = 1, 2, \dots, m$$

$$h_{j+1,j} = \|\hat{v}_{j+1}\|$$

如果 $h_{j+1,j} < \delta$, 则转到步骤 6; 否则, $v_{j+1} = \hat{v}_{j+1} / h_{j+1,j}$, $j = j + 1$, 转到步骤 4 中的正交化。

(2)求解新的 v_{j+1} 与 \bar{H}_j

$$V_{j+1} = (V_j, v_{j+1})$$

$$\bar{H}_j = \begin{bmatrix} \bar{H}_{j-1} & \bar{h}_j \\ 0 & h_{j+1,j} \end{bmatrix}_{(j+1) \times j}$$

$$\bar{h}_j = (h_{1j}, h_{2j}, \dots, h_{jj})^T$$

步骤 5 求解最小二乘问题^[6]: $\|r_m\| = \min_{y \in R_m} \|r_0\| e_1 - \bar{H}_m y_m$,

最终得到 y_m 和 $f_m = f_0 + V_m y_m$ 。

步骤 6 计算出 $\|r_m\| = \|g_1 - A_1 f_m\|$, 若 $\|r_m\| \leq \delta$, 则停止, 输出 f_m , 否则, $r_m = r_0$, $f_0 = f_m$, $v_1 = r_m / \|r_m\|$, 转向步骤 4。

4 数值模拟

考虑方程:

$$\int_a^b \int_c^d K(u, v, x, y) f(x, y) dx dy = g(u, v) \quad (7)$$

取 $a = c = 0, b = d = 1$, 即 $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ 。 $K(u, v, x, y) = (u + v)(x + y)$, 真解 $f(x, y) = (x + y)$, 精确右端项 g 由 $g = Af$ 产生。其中对 g 增加了随机扰动, 即模拟中 $g_\delta = g + \delta \cdot rand(g)$, $rand$ 为分布在区间 $[0, 1]$ 上的随机数, 扰动的大小取决于 δ 。数值模拟时取 $n = 30$ 。这时可求出 A 的条件数为 $cond(A) = +\infty$, 因此, A 为一高度病态矩阵。取 $\delta = 0.05$, 分别用 Tikhonov 正则化法、TSVD 法、GMRES 法及正则化 GMRES 法进行数值模拟, 结果见表 1, 其中第 1 列括号中的内容为选取正则参数的方法, 例如, 正则化 GMRES 算法(微分进化算法^[8])表示由微分进化算法选择正则参数。

表 1 $\delta=0.05$ 时各方法的计算结果对比

方法	$\ f\ $	$\ Af^* - g\ $	$\frac{\ f^* - f\ }{\ f\ }$	$\ f^* - f\ $	CPU 时间/s
Tikhonov 正则化法(L-曲线)	39.319 6	$7.950 1 \times 10^{-14}$	0.174 5	6.861 6	7.901 3
Tikhonov 正则化法(偏差原理)	50.280 4	$5.662 7 \times 10^{-14}$	0.159 8	8.036 6	6.928 7
TSVD(L-曲线)	23.660 2	$6.923 7 \times 10^{-14}$	0.369 5	8.742 4	7.901 3
TSVD(偏差原理)	50.293 6	$2.172 6 \times 10^{-14}$	0.156 8	7.886 0	6.928 7
文献[7]算法	18.155 7	16.428 2	0.340 6	6.183 8	519.426 8
GMRES 法	4.5×10^{-15}	1.519 7	1.000 0	4.5×10^{15}	6.892 1
正则化 GMRES 法(L-曲线)	39.353 4	$1.009 9 \times 10^{-13}$	0.149 8	5.895 6	7.231 9
正则化 GMRES 法(微分进化算法)	39.194 0	$6.963 6 \times 10^{-14}$	0.146 2	5.731 1	7.346 5
正则化 GMRES 法(偏差原理)	48.593 6	$1.534 6 \times 10^{-14}$	0.111 9	5.435 6	6.988 89

从表 1 的对比结果可以看出, 正则化 GMRES 算法(正则参数由偏差原理确定)计算的相对误差范数最小为 0.111 9, 正则化 GMRES 算法(L-曲线法确定正则化参数)计算的相对误差范数为 0.149 8, 其余算法中最好的结果相对误差范数为 0.159 8, 比起正则化 GMRES 算法的计算结果相对误差范数还是较大。因此, 正则化 GMRES 算法具有明显的优势。

从表 2 与表 3 的数值结果可以看出, 本文算法在数据没有扰动的情况下求解结果与真解的二范数很小, 说明了算法精度较高。当数据有误差时, 计算结果虽有偏差, 但相比 Tikhonov 正则化法、TSVD 法等有较大改进。表 2 的结果中右端项扰动 $\delta = 0$, 且与表 3 结果中正则化参数由 L-曲线法给出。

表 2 n 取不同值时本文算法的计算结果

n	正则参数 α	$\ Af^* - g\ $	$\ f^* - f\ $	CPU 时间/s
20	1.084 823 538 047 924	$2.325 5 \times 10^{-14}$	0.016 305 522 070 610	1.308 823
30	1.075 318 986 130 584	$5.609.4 \times 10^{-14}$	0.010 676 894 921 823	6.526 456
40	1.070 485 180 960 862	$1.278 0 \times 10^{-13}$	0.007 934 822 522 172	27.750 919

