

文章编号: 1000-5862(2017)01-0042-04

基于 RBF 和 TSVD 正则化求解泊松方程

李订芳, 谢 鹏

(武汉大学数学与统计学院, 湖北 武汉 430072)

摘要: 针对泊松方程的数值解, 提出了一种基于截断奇异值分解(TSVD)的正则化和径向基函数(RBF)的改进的无网格方法. 由于通过 RBF 拟合方程所产生的系数矩阵经常是病态的, TSVD 正则化方法可以改善 RBF 无网格方法而获得更精确的数值解. 与传统的 RBF 方法相比能够获得更好的数值结果, 而且通过选择恰当的径向基函数, 也能够提高数值解的精度.

关键词: TSVD 正则化; 径向基函数; 泊松方程

中图分类号: O 175.3 **文献标志码:** A **DOI:** 10.16357/j.cnki.issn1000-5862.2017.01.08

0 引言

泊松方程是广泛应用于静电学、机械工程和理论物理等领域重要的偏微分方程. 在许多科学工程领域中的方程都是基于泊松方程的模型来刻画的, 比如描述给定能量场的电荷或质量密度分布以及变电站噪声控制, 因而对泊松方程精确有效的数值解的研究是非常必要和有意义的. 利用 RBF^[1-4] 求解偏微分方程的开创性工作都起始于 E. J. Kansa, 因此这类方法通常被称为 Kansas 方法^[5]. 此后, 学者们提出了很多 RBF 和基于 RBF 的方法, 比如基于多元 2 次曲面(MQ)、基于逆多元 2 次曲面(Inverse MQ)的 RBF 方法. 在这类基于 RBF 的无网格方法中, RBF 径向基函数被直接当作基底, 使其线性组合在配点上满足控制方程或边界条件, 因为这个方法是无网格的且能够得到精确的数值解, 所以它被广泛采用. R. L. Hardy 等^[6-7]引入 MQ 作基函数且用多维插值解决地球重力场的拟合问题, 这时 MQ 作为基函数的优势还没有被发现, 直至 C. Franke 等^[8]提出了关于 Kansas 方法中使用各种基函数的数值算法, 其中讨论了各算法的精度、效率、空间存储率和插值实现的易用性, 得出以 MQ 作为基函数是最优的结论.

1 RBF 插值方法

径向基函数(RBFs)是一组多元函数多项式, 它

们的函数值只依赖于其距中心点的距离. 这种基函数组的优点在于它们是一组相似的函数, 并且能够适合任意高维曲面且无需网格, 所以 RBF 能够被便捷地运用于曲面的重建.

对于多元连续函数 $f(x)$ 的 RBF 插值 $x \in \Omega \subset \mathbf{R}^n$, 其中 Ω 为有界域. 设有 N 个配点 $\{x_i\}_{i=1}^N \in \Omega \subset \mathbf{R}^n$, Ω 上的函数值为 $\{y_i\}_{i=1}^N \in \mathbf{R}$, 则 $f(x)$ 可以近似地表达为 RBF 基函数组的线性组合:

$$f(x) \approx \sum_{j=1}^N \alpha_j \varphi(\|x - x_j\|_2), \quad x \in \Omega,$$

其中 $\{\alpha_j\}_{j=1}^N$ 是一组待定系数, 函数 φ 满足 $\varphi(x) = \varphi(\|x\|_2)$, 称之为径向函数. 由配点法^[9]可得

$$y_i = f(x_i) \approx \sum_{j=1}^N \alpha_j \varphi(\|x_i - x_j\|_2), \quad i = 1, 2, \dots, N.$$

上述的线性方程组可以表述成矩阵形式:

$$A\alpha = b, \quad (1)$$

其中 $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N)^T$ 是待定的向量系数, $b = (b_1, b_2, \dots, b_N)^T$ 是 (1) 式右端向量, RBF 插值矩阵 A 可以写成 $A = (\Phi_{ij}) = (\varphi(\|x_i - x_j\|_2))_{1 \leq i, j \leq N}$, 这里使用径向基函数 MQ:

$$\varphi(r_j) = \varphi(x, x_j) = \sqrt{(x - x_j)^2 + c^2} = \sqrt{r_j^2 + c^2} \quad (2)$$

其中 c 为形状半径.

2 TSVD 正则化

对于任意的矩阵 A , 其奇异值分解(SVD)^[10-12]

$$\text{的形式为 } A = U\Lambda V^T = \sum_{i=1}^n \lambda_i u_i v_i^T, \text{ 这里 } U = (u_1, u_2, \dots, u_n),$$

收稿日期: 2016-11-20

基金项目: 国家自然科学基金(61271337)资助项目.

作者简介: 李订芳(1966-), 男, 湖南平江人, 教授, 博士, 博士生导师, 主要从事计算数学最优化与正则化方面的研究.

E-mail: dfli@whu.edu.cn

$\cdots \mu_N) \in \mathbf{R}^{n \times n}, V = (v_1, v_2, \cdots, v_N) \in \mathbf{R}^{n \times n}$, 且有 $U^T U = E_n, V^T V = E_n$, E_n 是 n 级单位矩阵. 矩阵 $A = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$ 的对角元素是矩阵 A 的特征值, 它们是非负且单调递减的, 即 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n \geq 0$. 矩阵 A 关于欧几里得范数 $\|\cdot\|_2$ 的条件数^[13] 定义为 $\text{cond}(A) = \lambda_1/\lambda_n$, λ_1 和 λ_n 分别是矩阵 A 的最大奇异值和最小奇异值. Tikhonov 正则化^[14-17] 给出的 (1) 式的正则解转化为求解优化问题

$$\min \{ \|A\alpha - b\|_2^2 + \omega \|I\alpha\|_2^2 \}, \quad (3)$$

在正则化模型 (3) 中 ω 是非负的正则化参数, 控制着惩罚项 $\|I\alpha\|_2^2$ 的相对权重. TSVD 正则化^[18-19] 方法是基于 Tikhonov 正则化和 SVD 分解的.

TSVD 方法是用一个更小的秩 k 的矩阵 A_k 近似矩阵 A , 丢弃 A 和 b 中的对应部分. 矩阵 A_k 定义为 $A_k = UA_k V^T$, $A_k = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_k, 0, 0, \cdots, 0) \in \mathbf{R}^{n \times n}$, 其中 $k < r, r = \text{rank}(A)$. 将 A 的最小的 $n - k$ 奇异值替换为 0 得到 A_k . 使用矩阵 A_k 是因为当选择合适的 k 时, 矩阵 A_k 的条件数 λ_1/λ_k 会变得很理想. (3)

式的 TSVD 解为 $x_k = A_k^+ b = \sum_{i=1}^k u_i v_i b_i / \lambda_i$, 它对于 A 和 b 的扰动并不敏感. 矩阵 A_k^+ 是矩阵 A_k 的伪逆, 即

$$A_k^+ = UA_k^+ V^T, A_k^+ = \text{diag}(\lambda_1^{-1}, \lambda_2^{-1}, \cdots, \lambda_k^{-1}, 0, 0, \cdots, 0) \in \mathbf{R}^{n \times n},$$

通过选择合适正则化参数 $\omega > 0$, 可以得到

$$x_k^\omega = \sum_{\lambda_i > \omega} u_i v_i b_i / \lambda_i.$$

TSVD 正则化的核心思想是截断极小的奇异值, 从而得到良好的矩阵条件数, 获得稳定的精确解.

3 泊松方程的 RBF 方案

考虑带狄利克雷边界条件下的泊松方程:

$$\begin{cases} -\Delta u(x, y) = f(x, y) & (x, y) \text{ 在 } \Omega \text{ 内}, \\ u(x, y) = g(x, y), & (x, y) \text{ 在 } \partial\Omega \text{ 上}, \end{cases}$$

这里 Δ 是拉普拉斯算子, Ω 是 \mathbf{R}^2 上的单连通域, $f(x, y)$ 表示源项, $g(x, y)$ 表示边界 $\partial\Omega$ 上的狄利克雷条件. 使用 MQ 基函数, 由 (2) 式知 $\varphi(x, x_j) = \sqrt{(x - x_j)^2 + c^2} = \sqrt{r_j^2 + c^2}$. 泊松方程的近似解可以表示为 $u_n(x) = \sum_{j=1}^n \alpha_j \varphi(x, x_j)$, 其中 α_j 是待定系数, 假定 $\varphi(x, x_j)$ 在每个配点上满足边界条件, 用 $\{x_j\}_{j=1}^{n_0}$ 和 $\{x_j\}_{j=n_0+1}^n$ 分别表示区域内和边界上的配点, 可以得到关于 α_j 的线性方程组

$$\begin{cases} -\sum_{j=1}^n \alpha_j (\Delta \varphi(x_i, x_j)) = f(x_i), & i = 1, 2, \cdots, n_0, \\ \sum_{j=1}^n \alpha_j \varphi(x_i, x_j) = g(x_i), & i = n_0 + 1, \cdots, n, \end{cases}$$

上述方程组可以写成矩阵形式 $(A_{ij})(\alpha_j) = (b_j)$, 上

式即为 (1) 式, 且系数矩阵 (A_{ij}) 往往是病态的, 这就导致数值解 (α_j) 不稳定. 对于 (A_{ij}) 和 (b_j) 的扰动会很敏感. 在系数矩阵病态的条件下, TSVD 正则化方法用来提高数值解的精度和维持解的稳定性, 可以得到理想的结果.

4 数值算例

本部分将通过数值试验来展示所述方法的精度和效率. 在单点上的绝对误差 (A_b) 刻画为

$$A_b = |u(x, y) - u'(x, y)|,$$

其中 $u(x, y)$ 为泊松方程的精确解, $u'(x, y)$ 为方程的数值解. 用最大绝对误差 (M_a) 来衡量数值方法的精度, 其定义为 $M_a = \max |u(x, y) - u'(x, y)|$.

考虑泊松方程:

$$\begin{cases} -\Delta u(x, y) = 2 \sin x \sin y & (x, y) \text{ 在 } \Omega \text{ 内}, \\ u(x, y) = 0, & (x, y) \text{ 在 } \partial\Omega \text{ 上}, \end{cases}$$

其中 $\Omega = [0, \pi] \times [0, \pi]$, 该泊松方程有精确解 $u(x, y) = \sin x \sin y$.

在数值试验中, 对于奇异值 λ_i , 若 $\lambda_i > \omega$, 则令 $\lambda_i = \omega$. 数值试验的硬件环境: 英特尔 Xeon(至强) E3-1220 v3 3.3 GHz 8 GB 内存; 软件环境: Matlab 7.6.0(R2008a).

图 1 展示了在最优形状半径 c 和最优正则化参数 ω 的条件下, 随着径向基函数组维数的增加, 即随着配点数的增加, 最大绝对误差不断减少, 逐步趋向收敛, 并且可以看出, 传统 MQ 方法的收敛曲线对配点数目较为敏感, 而改进 MQ 方法的收敛曲线更稳定, 由此可见改进 MQ 方法的数值解的效果更理想.

图 2 展示了系数矩阵的条件数随着配点数的增加而增大. 要得到更精确的数值解, 往往会通过增加配点数来提高拟合精度, 但是从图 2 可以看出, 即使配点数增加, 改进的 RBF 也能快速有效地抑制矩阵条件数的增长, 避免了由 MQ 基函数引起的矩阵条件数过大的弊端. 从某种意义上讲, 在改进的 RBF 方法下的系数矩阵总是稳定的, 即使增加配点数来提高精度, 也不会导致系数矩阵极度病态.

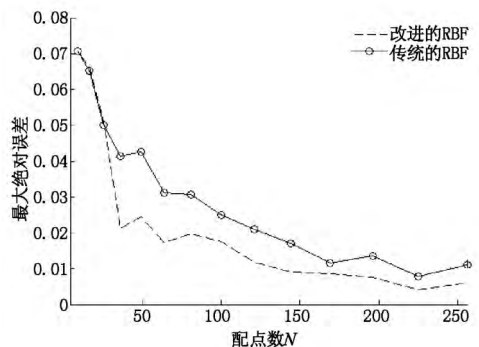


图1 最大绝对误差随配点数变化的曲线图

图3展示了最优形状半径 c 随着配点数变化而变化的规律.由图3可以看出2种RBF的最优形状半径 c 均随着配点数的增加而减小,由于没有正则

化参数的影响,传统RBF的最优形状半径变化曲线显得更平滑、更稳定.

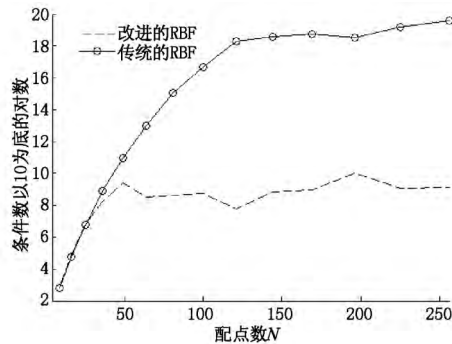


图2 矩阵条件数随配点数变化的曲线图

图4展示了当配点数 $N = 144$ 时,改进的RBF数值解与精确解的曲面模拟结果的对比情况,可见改进的RBF方法获得的数值解精度较高,能够很好地恢复方程精确解的数值曲面.

图5展示了当 $N = 36, 64, 144, 256$ 时,改进RBF

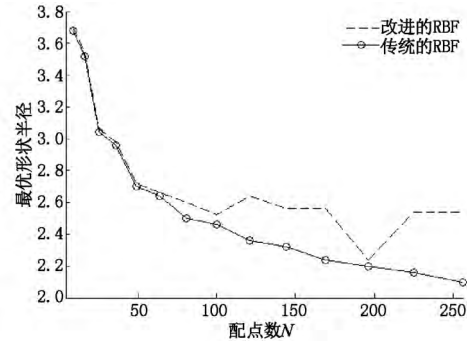
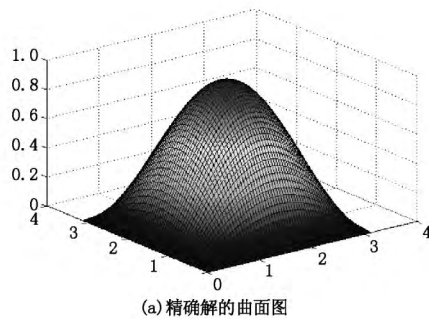
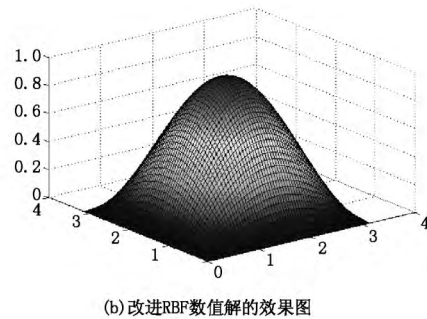


图3 最优形状半径 c 随配点数变化的曲线图

数值解与精确解的绝对误差的曲面图.可以发现当随着配点数增加时,在使用TSVD正则化处理系数矩阵的情况下,数值解的精度确实得到提高,且从曲面平滑度来看,数值解的稳定性也越来越好.

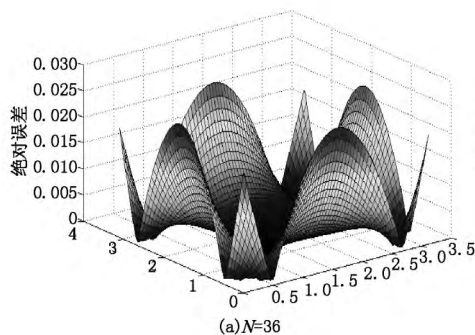


(a) 精确解的曲面图

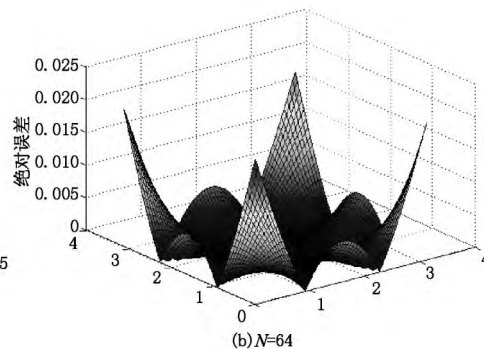


(b) 改进RBF数值解的效果图

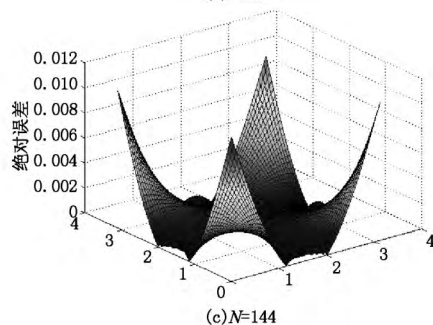
图4 配点数 $N = 144$ 的对比图



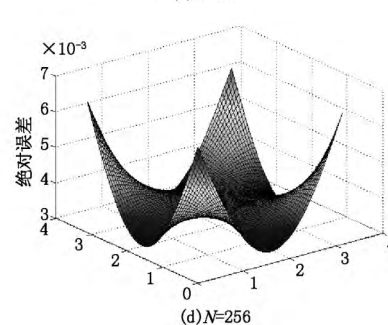
(a) $N=36$



(b) $N=64$



(c) $N=144$



(d) $N=256$

图5 在不同配点数 N 下,数值解与精确解的绝对误差构成的3维曲面图

5 结论

通过数值算例可以发现,基于改进的RBF基函数的无网格方法有很多优点,它相对于传统的方法有更高的精度和更好的数值稳定性;通过数值算例还可以发现,选择恰当的径向基函数,在结合TSVD正则化技术下可以得到理想的高精度数值解。

6 参考文献

- [1] Buhmann M D. Radial basis function: theory and implementations [M]. United Kingdom: Cambridge University Press 2003.
- [2] Schaback R. Multivariate interpolation by polynomials and radial basis functions [J]. Constructive Approximation, 2005, 21(3): 293-317.
- [3] Wu Zongmin. Radial basis functions: a survey [J]. Advances in Mathematics, 1998, 27(3): 202-208.
- [4] Mulgrew B. Applying radial basis functions [J]. IEEE Signal Processing Magazine, 1996, 13(2): 50-65.
- [5] Kansa E J. Multiquadrics a scattered data approximation scheme with applications to computational fluid-dynamics I surface approximations and partial derivative estimates [J]. Computers and Mathematics with applications, 1990, 19(8): 127-145.
- [6] Hardy R L. Theory and applications of the multiquadric-biharmonic method 20 years of discovery [J]. Computers and Mathematics with Applications, 1990, 19(8): 163-208.
- [7] Cheng H D, Golberg M A, Kansa E J, et al. Exponential convergence and H-c multiquadric collocation method for partial differential equations [J]. Numerical Methods for Partial Differential Equations, 2003, 19(5): 571-594.
- [8] Franke C, Schaback R. Solving partial differential equations by collocation using radial basis functions [J]. Applied Mathematics and Computation, 1998, 93(1): 73-82.
- [9] 黄奕勇, 张育林. 配点法研究 [J]. 弹道学报, 1998, 10(3): 66-69.
- [10] 马良荣, 张德澄. 矩阵SVD分解法在工程数值计算中的应用 [J]. 宁夏大学学报: 自然科学版, 1998, 19(2): 125-127.
- [11] 鲁铁定, 陶本藻, 周世健. 矩阵SVD分解性质及其在秩亏网平差中的应用 [J]. 大地测量与地球动力学, 2007, 27(5): 63-67.
- [12] Hansen P C. Regularization tools: A matlab package for analysis and solution of discrete ill-posed problems [J]. Numerical algorithms, 1994, 6(1): 1-35.
- [13] Cline A K, Wilkinson J H. An estimate for the condition number of a matrix [J]. Siam Journal on Numerical Analysis, 1979, 16(16): 368-375.
- [14] Kirsch A. An introduction to the mathematical theory of inverse problem [M]. 2nd ed. New York: Springer-Verlag, 2011.
- [15] Engl H W, Hanke M, Neubauer A. Regularization of inverse problem [M]. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1996.
- [16] 刘继军. 不适定问题的正则化方法及应用 [M]. 北京: 科学出版社, 2005.
- [17] Cheng Jin, Yamaoto M. One new strategy for a priori choice of regularizing parameters in Tikhonov's regularization [J]. Inverse Problems, 2000, 16(4): 31-38.
- [18] 黄小为, 吴传生, 李卓球. TSVD正则化方法的参数选取及数值计算 [J]. 华中师范大学学报: 自然科学版, 2006, 40(2): 154-157.
- [19] 黄小为, 吴传生, 朱华平. 求解不适定问题的TSVD正则化方法 [J]. 武汉理工大学学报, 2005, 27(2): 90-92.

The Gridless Method for Poisson's Equation Based on RBF and TSVD

LI Dingfang, XIE Peng

(1. School of Mathematics and Statistics, Wuhan University, Wuhan Hubei 430000, China)

Abstract: An improved gridless method based on radical basis function (RBF) for the numerical solution of Poisson's equation is proposed. Since the coefficient matrix generated by the RBF approximation is usually ill-conditioned, the truncated singular value decomposition (TSVD) regularization method is used to obtain a more accurate numerical solution. Compared to common RBF, better numerical results will be achieved. What's more, the accuracy of numerical solution can be improved by choosing proper radial basis functions.

Key words: TSVD regularization; radial basis function; Poisson's equation

(责任编辑: 曾剑锋)