

**Diskrete Quadratmittelapproximation
durch Splines
mit freien Knoten**

Verteidigung der Dissertation

von

Dipl.-Math. Torsten Schütze

16. Januar 1998

Aufbau der Arbeit

Quadratmittelapproximation fehlerbehafteter Daten durch

- ① Univariate Splines
- ② Univariate Splines mit Nebenbedingungen
Hauptbeitrag, bisher nicht behandelt
- ③ Bivariate Tensorprodukt-Splines

allgemeine Herangehensweise

- Einführung zweier Optimierungsprobleme:
vollständig \iff reduziert
- Lösbarkeit, Äquivalenz
- Effiziente Lösung des reduzierten Problems

Gegeben: Daten $\{(x_i, y_i) : i = 1, \dots, m\}$

streng monoton steigende Abszissen $x_i \in [a, b] \subset \mathbb{R}$

Modell: $y_i = g(x_i) + \epsilon_i$, $g \in \mathbb{C}^q$ unbekannt

Forderungen an Approximation $s \approx g$:

☞ leichte Auswertbarkeit

☞ Glattheit

☞ Datenreduktion

☞ Formerhaltung

Problemstellung: Approximiere g durch Spline $s \in \mathcal{S}_{k, \tau}$

$\mathcal{S}_{k, \tau}$ – Raum der polynomialen Splines der Ordnung $k \geq 1$ mit

Knoten $\tau := (\tau_1, \dots, \tau_{n+k})^T$

Wähle Parameter so, daß

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^m [y_i - s(x_i)]^2 + \mu \frac{1}{2} \int_a^b [s^{(r)}(x)]^2 dx \rightarrow \min$$

B-Splines als Basis von $\mathcal{S}_{k, \tau} \implies s = \sum_{j=1}^n B_{j, k, \tau} \alpha_j$

Schoenberg-Funktional:

$$f(\alpha, \tau) := \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{B}(\tau)\alpha\|^2 + \mu \frac{1}{2} \|\mathbf{S}_r(\tau)\alpha\|^2$$

Ziel: Optimierte über **Koeffizienten und Knoten**

\implies nichtlineares, hoch strukturiertes Quadratmittelproblem

Freie Knoten: $\mathbf{t} = (\tau_{p(1)}, \dots, \tau_{p(l)})^T \in \mathbb{R}^l$

Lagebedingungen: Verhindere Zusammenfallen von Knoten

$$\tau_{p(j)} \in [\tau_{p(j)-1} + \epsilon h_j, \tau_{p(j)+1} - \epsilon h_j]$$

mit $h_j := \tau_{p(j)+1} - \tau_{p(j)-1}$ ($j = 1, \dots, l$), $\epsilon > 0$

\implies

$$\mathbf{Ct} - \mathbf{h} \geq \mathbf{0}$$

Shape Constraints: $\forall x \in [\tau_i, \tau_{i+1})$

$$l_i \leq s^{(p)}(x) = \sum_{j=p+1}^n B_{j,k-p,\tau}(x) \alpha_j^{(p)} \leq u_i$$

\implies semi-infinites Optimierungsproblem

Spezialfall: $\mathbf{l} = 0$, $\mathbf{u} = +\infty \implies$ Positivität, Monotonie, ...

Vereinfachung: **Hinreichende Bedingungen**

$$\mathbf{L} \leq \boldsymbol{\alpha}^{(p)} = \mathbf{D}_p(\mathbf{t})\boldsymbol{\alpha} \leq \mathbf{U}$$

Beachte: $\mathbf{l} < \mathbf{u}$ ist nicht hinreichend für $\mathbf{L} \leq \mathbf{U}$

Nebenbedingungen heißen *strikt konsistent*, falls $\mathbf{L} < \mathbf{U}$

Vollständiges Problem

$$\underset{\alpha \in \mathbb{R}^n, \mathbf{t} \in \mathbb{R}^l}{\text{minimiere}} \quad f(\alpha, \mathbf{t}) := \frac{1}{2} \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{B}(\mathbf{t}) \\ \sqrt{\mu} \mathbf{S}_r(\mathbf{t}) \end{bmatrix} \alpha \right\|^2$$

$$\text{bei} \quad \mathbf{C}\mathbf{t} - \mathbf{h} \geq \mathbf{0} \quad \text{und} \quad \mathbf{L} \leq \mathbf{D}_p(\mathbf{t})\alpha \leq \mathbf{U}$$

Charakteristik

Für festes $\mathbf{t} \implies$ lineares QMP in $\alpha \implies$ Lösung $\alpha(\mathbf{t})$

Subproblem (A)

$$\underset{\alpha \in \mathbb{R}^n}{\text{minimiere}} \quad \frac{1}{2} \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{B}(\mathbf{t}) \\ \sqrt{\mu} \mathbf{S}_r(\mathbf{t}) \end{bmatrix} \alpha \right\|^2$$

$$\text{bei} \quad \mathbf{L} \leq \mathbf{D}_p(\mathbf{t})\alpha \leq \mathbf{U}$$

Idee

Ersetze α im vollständigen Problem durch optimalen Wert $\alpha(\mathbf{t})$

\implies **Reduziertes Problem**

unrestringiert: separable least squares, Golub/Pereyra [73]

restringiert: constrained semi-linear least squares, Parks [85]

Reduziertes Problem

$$\text{minimiere}_{\mathbf{t} \in \mathbb{R}^l} f(\mathbf{t}) := \frac{1}{2} \|\mathbf{F}(\mathbf{t})\|^2$$

$$\text{bei} \quad \mathbf{C}\mathbf{t} - \mathbf{h} \geq \mathbf{0}$$

$$\text{wobei} \quad \mathbf{F}(\mathbf{t}) := \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{B}(\mathbf{t}) \\ \sqrt{\mu} \mathbf{S}_r(\mathbf{t}) \end{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{t})$$

und $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{t})$ löst Subproblem (A)

Theorem 1 (Existenz einer Lösung des reduzierten Problems)

Sei $\{\mathbf{t} \in \mathbb{R}^l : \mathbf{C}\mathbf{t} - \mathbf{h} \geq \mathbf{0}\} \neq \emptyset$.

Für $p, r \in \{0, \dots, q\}$, $q < k$ gelte:

$$(V1) \quad \tau_j < \tau_{j+k-q} \quad (j = q + 1, \dots, n)$$

$$(V2) \quad \text{Regularitätsbedingung:} \quad m \geq r \text{ und } \mu > 0$$

$$(V4) \quad \text{strikte Konsistenz } \mathbf{L} < \mathbf{U}$$

Dann hat das reduzierte Problem eine Lösung \mathbf{t}^* .

Theorem 2 (Korrespondenz vollständiges \leftrightarrow reduziertes Problem)

Sei $\mathbf{t}^* \in \{\mathbf{t} \in \mathbb{R}^l : \mathbf{C}\mathbf{t} - \mathbf{h} \geq \mathbf{0}\}$.

Für $p, r \in \{0, \dots, q\}$, $q < k$ gelte:

$$(V1) \quad \tau_j^* < \tau_{j+k-q}^* \quad (j = q + 1, \dots, n)$$

$$(V2) \quad \text{Regularitätsbedingung: } m \geq r \text{ und } \mu > 0$$

$$(V3) \quad k \geq 3$$

$$(V4) \quad \text{strikte Konsistenz } \mathbf{L} < \mathbf{U}$$

(V5) strikte Komplementarität der Lagrange-Parameter \mathbf{u}^* von Subproblem (A) für $\alpha(\mathbf{t}^*)$

Dann gilt

(i) (α^*, \mathbf{t}^*) globale Minimalstelle des vollständigen Problems \implies

- α^* globale Minimalstelle von Subproblem (A)
- \mathbf{t}^* globale Minimalstelle des reduzierten Problems
- $f(\mathbf{t}^*) = f(\alpha^*, \mathbf{t}^*)$
 $\alpha^* = \alpha(\mathbf{t}^*)$

(ii) \mathbf{t}^* erfüllt notwendige Optimalitätsbedingungen erster Ordnung für reduziertes Problem $\implies (\alpha(\mathbf{t}^*), \mathbf{t}^*)$ erfüllt notwendige Optimalitätsbedingungen erster Ordnung für vollständiges Problem

Numerische Lösung des reduzierten Problems

Vorteile

- ☞ l statt $n + l$ Variable
- ☞ keine Startwerte für α
- ☞ lineare Nebenbedingungen
- ☞ volle Ausnutzung der Bandstruktur

Nachteile

- ☞ komplizierte Struktur der Ableitungen
- ☞ $\alpha(\mathbf{t})$ nur Lipschitz-stetig bei nichtstriker Komplementarität
 - benutze verallgemeinertes GN-Verfahren
lineare NB \implies nur zulässige Punkte
 - kritische Punkte:
Berechnung der Residuumsfunktion (Schwetlick/Kunert [93])
Berechnung der Jacobi-Matrix

Jacobi-Matrix des reduzierten Funktionals

$$\mathbf{J} = \partial \mathbf{F} = \mathbf{J}_K + \mathbf{J}_R, \quad \partial \text{ Frechét-Ableitung bez. } \mathbf{t}$$

Es gilt $\mathbf{J}^T \mathbf{F} = \mathbf{J}_K^T \mathbf{v}$

$$\mathbf{J}^T \mathbf{J} = \mathbf{J}_K^T \mathbf{J}_K + \mathbf{J}_R^T \mathbf{J}_R$$

- \mathbf{J}_R schwierig zu berechnen
- \mathbf{J}_R trägt nicht zum Gradienten bei
- $\mathbf{J}_R^T \mathbf{J}_R = \mathcal{O}(\|\mathbf{F}\|^2)$

\implies vernachlässige \mathbf{J}_R gemäß der GN-Philosophie

Kaufman [75], unrestringierte Probleme

\mathbf{J}_K Kaufman-Approximation

Neu: Verallgemeinerung auf restringierte Probleme

Man zeigt: Eigenschaften von \mathbf{J}_K übertragen sich unter Voraussetzungen von Theorem 2 \implies qualitativ gleiche Konvergenzeigenschaften, bestätigt durch numerische Tests

Notation

$$\bar{\mathbf{R}} := - \begin{bmatrix} \mathbf{D}_p(\mathbf{t}) \\ -\mathbf{D}_p(\mathbf{t}) \end{bmatrix}_{i \in \mathcal{I}} \in \mathbb{R}^{n_a, n}$$

$$\bar{\mathbf{\Gamma}} := -\partial \begin{bmatrix} \mathbf{D}_p(\mathbf{t}) \\ -\mathbf{D}_p(\mathbf{t}) \end{bmatrix}_{i \in \mathcal{I}} \quad \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{t}) \in \mathbb{R}^{n_a, l}$$

$$\mathbf{J}_t := -\partial \begin{bmatrix} \mathbf{B}(\mathbf{t}) \\ \sqrt{\mu} \mathbf{S}_r(\mathbf{t}) \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{t}) \in \mathbb{R}^{m+n-r, l}$$

$$\mathbf{N} \in \mathbb{R}^{n-n_a, n}$$

Nullraumbasis von $\bar{\mathbf{R}}$

$$\mathbf{P}^{\perp}_{\begin{bmatrix} \mathbf{B} \\ \sqrt{\mu} \mathbf{S} \end{bmatrix}_N} := \mathbf{I}_{m+n-r} - \left(\begin{bmatrix} \mathbf{B} \\ \sqrt{\mu} \mathbf{S}_r \end{bmatrix} \mathbf{N} \right) \left(\begin{bmatrix} \mathbf{B} \\ \sqrt{\mu} \mathbf{S}_r \end{bmatrix} \mathbf{N} \right)^+$$

$$\mathbf{J}_K := \mathbf{P}^{\perp}_{\begin{bmatrix} \mathbf{B} \\ \sqrt{\mu} \mathbf{S} \end{bmatrix}_N} \left(\mathbf{J}_t + \begin{bmatrix} \mathbf{B} \\ \sqrt{\mu} \mathbf{S}_r \end{bmatrix} \bar{\mathbf{R}} + \bar{\mathbf{\Gamma}} \right) \in \mathbb{R}^{m+n-r, l}$$

heißt **Kaufman-Approximation** für $\partial \mathbf{F}$

Strukturausnutzung durch spezielle orthogonale Faktorisierungen

technisch kompliziert \implies Arbeit

Numerische Tests

- Algorithmen wurden in Programmpaket implementiert
- volle Ausnutzung der Struktur für univariate Probleme
- strikte Abbruchkriterien (Testzwecke!)

Arctan-Daten

$g(x) = \arctan(10x)$, $m = 41$, äquidistant in $[-10, 10]$

$y_i \approx g(x_i)$

8 B-Splines der Ordnung 4, $l = 4$ freie Knoten

Monotonie

Tabelle 1: Arctan-Daten $\mu = 1.0 \text{ E-}03$, $r = 2$

	t^0	RCSP-Ka-ED	RCSP-GP-OD
τ_5	-6.0	-8.760175 E-01	-9.652265 E-01
τ_6	-2.0	-2.301281 E-01	-3.258263 E-01
τ_7	2.0	2.743868 E-01	3.454588 E-01
τ_8	6.0	8.822404 E-01	9.809856 E-01
Zeit [s]		0.116	3.259
$\ \mathbf{F}\ $	2.359790 E+00	5.230920 E-01	5.098921 E-01

Bivariate Tensorprodukt-Splines

- ☞ Verallgemeinerung auf bivariate Approximation/Glättung durch Tensorprodukt-Splines bei Rechteckgitterdaten
- ☞ Verwendung eines separablen Glättungsterms \implies Probleme zu festen Knoten zerfallen in univariate Probleme
- ☞ Methoden zur Strukturausnutzung (Kaufman-Approximation) übertragbar

Bivariate Titan-Daten

Tensorisieren der univariaten Daten (Standardbeispiel)

$49 \times 49 = 2401$ Datenpunkte

$n_1 = 11, n_2 = 9$ kubische B-Splines in x- bzw. y-Richtung

$l_1 = 7, l_2 = 5$ freie Knoten

äquidistante Startknoten

Tabelle 2: Bivariate Titan-Daten: CONSTR \leftrightarrow NPSOL

	Startknoten	CONSTR	NPSOL
Schritte		93	101
Zeit [s]		51.26	59.27
$\ F\ $	9.049841 E+00	1.580966 E+00	1.560459 E+00

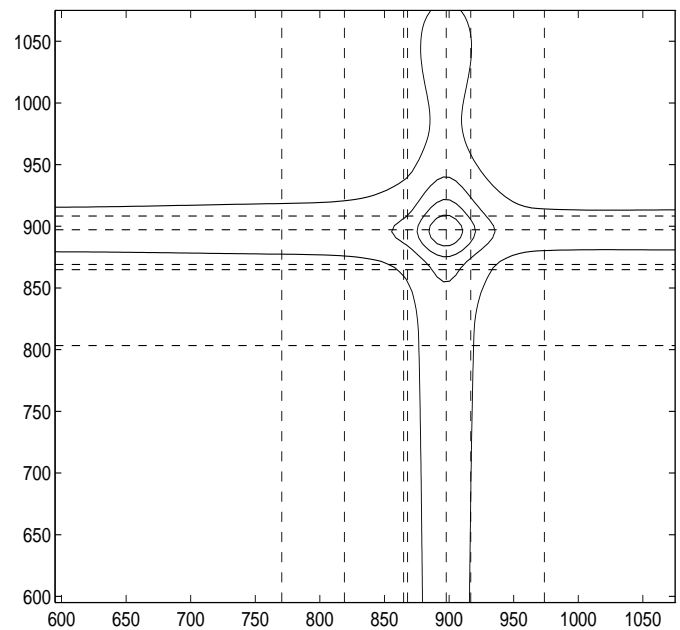
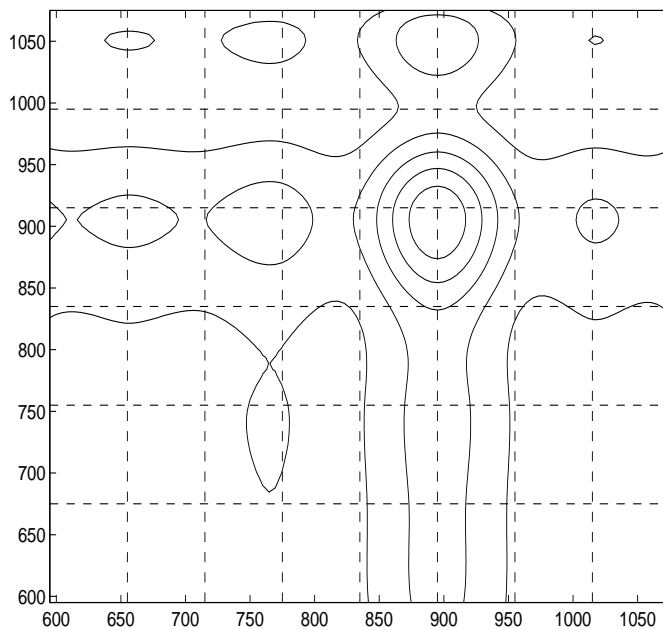


Abbildung 1: Bivariate Titan-Daten: Höhenlinien und Knoten

Zusammenfassung

- Algorithmen zur Approximation von fehlerbehafteten Daten durch Splines mit freien Knoten
- Anwendungsgebiete:
Spline = Ausgangspunkt komplizierterer Rechnungen
- Beiträge der Arbeit:
 - univariate Splines ohne NB
 - **univariate Splines mit NB**
 - bivariate Splines ohne NB

Ausblick

Tensorprodukt-Splines bei „Scattered Data“

Bivariate Tensorprodukt-Splines mit Nebenbedingungen